Εθνικο Μετσοβιο Πολυτεχνειο
Σχολη Ηλεκτρολογων Μηχανικων και Μηχανικων Υπολογιστων
Τομεας Ηλεκτρομαγνητικων Εφαρμογων Ηλεκτροοπτικης και Ηλεκτρονικων Υλικων


# Ενεργές Σχέσεις Διασποράς από τη Συνύπαρξη Πολλαπλών Κβαντικών Καταστάσεων Τάξεως

## Διπλωματικη Εργασια

του

**ΝΙΚΟΛΑΟΥ ΒΑΝΑ**


**Επιβλέπων:** Ξανθάκης Ιωάννης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.


Θεωρητικη Φυσικη Συμπυκνωμενης Υλης
Αθήνα, Ιανουάριος 2019

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
Τομέας Ηλεκτρομαγνητικών Εφαρμογών Ηλεκτροοπτικής και Ηλεκτρονικών Υλικών
Θεωρητική Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης

# Ενεργές Σχέσεις Διασποράς από τη Συνύπαρξη Πολλαπλών Κβαντικών Καταστάσεων Τάξεως

## Διπλωματική Εργασία

του

**ΝΙΚΟΛΑΟΥ ΒΑΝΑ**

**Επιβλέπων:** Ξανθάκης Ιωάννης
Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 24η Ιανουαρίου 2019.

| | | |
|---|---|---|
| *(Υπογραφή)* | *(Υπογραφή)* | *(Υπογραφή)* |
| ........................ | ........................ | ........................ |
| Ξανθάκης Ιωάννης | Βαρελογιάννης Γεώργιος | Χριστοφόρου Ευάγγελος |
| Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π. | Καθηγητής Ε.Μ.Π. | Καθηγητής Ε.Μ.Π |

Αθήνα, Ιανουάριος 2019

*(Υπογραφή)*

.........................................

**Νικολαοσ Βανα**

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
Τομέας Ηλεκτρομαγνητικών Εφαρμογών Ηλεκτροοπτικής και Ηλεκτρονικών Υλικών
Θεωρητική Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης

# Ευχαριστίες

Θα ήθελα να εκφράσω τις ειλικρινείς μου ευχαριστίες προς τον κ.Γεώργιο Βρελογιάννη, Αν.Καθηγητή του Ε.Μ.Π., για τον πολύτιμο χρόνο που μου διέθεσε, για το ενδιαφέρον του και την επιστημονική του καθοδήγηση χωρίς τα οποία η παρούσα διπλωματική δε θα είχε έλθει εις πέρας. Η βοήθεια και εμπιστοσύνη που μου έδειξε ήταν καθοριστική. Ακόμη θα ήθελα να ευχαριστήσω τον διδάκτορα κ.Μάριο Γεωργίου για τις χρήσιμες υποδείξεις του όσο αναφορά την διαδικασία της επαλήθευσης μέρους των αποτελεσμάτων.

Ευχαριστώ τους φίλους μου, και ιδιαίτερα τους συμφοιτητές μου εξ αυτών, που ήταν δίπλα μου σε αυτή τη δύσκολη, αλλά συνάμα και πολύ ενδιαφέρουσα Ακαδημαϊκή μου πορεία αλλά και γενικότερα εκτός αυτής.

Κλείνοντας, να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για τη διαρκή στήριξη και κατανόηση όλα αυτά τα χρόνια.

# Περίληψη

Πολλαπλοί παράμετροι τάξεως ή/και πεδία όταν συνυπάρχουν έχουν απρόβλεπτη συμπεριφορά και ποιοτικά νέα φαινόμενα μπορεί να εμφανισθούν λόγω της συνύπαρξής τους. Είναι δυνατό η ύπαρξη μιας τριάδας παραμέτρων τάξεως ή πεδίων να οδηγήσει στην εμφάνιση μιας τέταρτης, με εξαιρετικές συνέπειες οι οποίες έχουν ενδεχομένως τεχνολογικό ενδιαφέρον. Στην περίπτωση αυτή οι τέσσερις φάσεις αυτών αποτελούν ένα κουαρτέτο (quartet), ένα μοτίβο συνύπαρξης δηλαδή που είναι θεμελιώδες. Η εργασία επικεντρώνεται σε πρώτη φάση στο να ταυτοποιήσουμε δέκα τέτοια μοτίβα συνύπαρξης κβαντικών καταστάσεων τάξης. Αυτό γίνεται χρησιμοποιώντας τη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης, τις τεχνικές των συναρτήσεων Green και εφαρμόζοντας μια γενικευμένη ενεργό σπινοριακή θεωρία μέσου πεδίου. Καταλήγουμε τη μελέτη μας αυτή με τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας των παραμέτρων τάξης που μας επιβεβαιώνουν την ύπαρξη των μοτίβων που περιμέναμε. Στο δεύτερο μέρος, ασχοληθήκαμε με υπολογισμό διαγραμμάτων ενεργειακής διασποράς και επιφανειών Fermi για κάποια από τα μοτίβα συνύπαρξης που μελετήσαμε. Αυτό έγινε για ένα μεγάλο πλήθος τιμών διαφόρων παραμέτρων με στόχο να διερευνήσουμε περιοχές που εμφανίζονται ενδιαφέροντα φαινόμενα. Έτσι τελικά μπορούμε με βάση της ηλεκτρονιακές ιδιότητες που θέλουμε, να σχεδιάζουμε και να προτείνουμε κατάλληλα φυσικά συστήματα, τα οποία κάτω από συγκεκριμένες τιμές κάποιων βασικών παραμέτρων, να έχουν την επιθυμητή συμπεριφορά.

## Λέξεις Κλειδιά

Παράμετροι τάξης, Αλλαγές φάσεων, Αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας, Συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής, Κύμα πυκνότητας σπιν, Αστάθεια Pomeranchuk, Συναρτήσεις Green, προσέγγιση μέσου-πεδίου, Σπινοριακός φορμαλισμός, Επιφάνεια Fermi, Ενεργειακή διασπορά

# Abstract

Multiple order parameters or fields when coexist they have unpredictable behavior and qualitatively new phenomena can emerge because of their coextistance. It is possible that the existance of three order parameters or fields can drive to the emerge of the forth, with incredible results whitch may have technological interest. In this case this four cases make a quartet, a fundamental pattern of coexistance. This thesis is centered at first to identify ten such patterns of coexistance of quantum order states. That is done by using the language of the second quantization, the Green functions methods and by applying a generalized effective spinor mean field theory. We conclude this study with the self-consistent equations of the order parameters which confirm the existance of the patterns we anticipated. In the second part, we worked on the calculation of the energy dispersion diagrams and the Fermi surfaces for some of the coexistence patterns we studied. That process was made for a large number of values of various parameters aiming to investigate regions with interesting phenomena. Finally, based on the electrical properties we want we can engineer and suggest proper physical systems which, under the specific values of some basic parameters, have the desirable behavior.

## Keywords

Order parameters, Phase transitions, spontaneous symmetry break, particle-hole consentantes, Spin density wave, Pomeranchuk instability, Green functions, mean-field approximation, Spinor formalism, Fermi surface, Energy dispersion

# Περιεχόμενα

# Κεφάλαιο 1

# Εισαγωγικές έννοιες

## 1.1 Συστήματα πολλών σωμάτων

Η επιστήμη έχει προχωρήσει για πάρα πολλά χρόνια με τις αρχές της αναγωγής και προσπαθώντας να καταλάβουμε τη φύση και τα φαινόμενα σπάζοντας το πρόβλημα σε μικρότερο κομμάτια και βρίσκοντας εξισώσεις που να τα περιγράφουν όλα. Όπως για παράδειγμα οι ιδιότητες κάθε μεμονωμένου ατόμου χρησιμοποιούνται για να εξηγήσουν τις χημικές αντιδράσεις. Στη φυσική των στερεών, ξέρουμε ήδη μια ας πούμε θεωρία που περιγράφει τα πάντα, την εξίσωση Schrödinger, η οποία σε συστήματα με λίγα σωματίδια μας δίνει απαντήσεις που συμφωνούν απόλυτα με τα πειράματα. Εντούτοις όταν τα σωματίδια είναι λίγο περισσότερο από 10 φτάνουμε στα όρια της υπολογιστικής μας ισχύος. Σε κάποια σύγχρονα φαινόμενα όμως όπως η υπεραγωγιμότητα κάνουμε πρόοδο βασιζόμενοι στο γεγονός όχι ότι γνωρίζουμε την εξίσωση που ακολουθεί κάθε σωματίδιο του συστήματος αλλά επειδή υπάρχουν κάποιες υψηλότερες οργανωτικές αρχές που δεν επηρεάζονται τόσο από μικροσκοπικά φαινόμενα. Οι υπεραγωγοί ,ή τα στερεά, είναι συστήματα με σταθερή κατάσταση που προστατεύεται από κάποια συλλογική κβαντική συμπεριφορά από ατέλειες ή άτακτες θερμικές κινήσεις των ατόμων. Κάτι το οποίο είναι δύσκολο, αν όχι αδύνατο να καταλάβουμε κοιτώντας κάθε άτομο μεμονωμένα. Αυτή είναι ουσιαστικά η γενική εικόνα που έχουμε για τέτοια συστήματα πολλών σωμάτων, που συνοψίζεται και στο πασίγνωστο άρθρο του Philip Aderson, "More is Different" [1], ότι δηλαδή ένας μεγάλος αριθμός ατόμων σε ένα υλικό ενδέχεται να οδηγήσει σε φαινόμενα που δεν είναι απλός ιδιότητες των μεμονωμένων ατόμων πολλαπλασιασμένες με τον αριθμό των ατόμων. Αυτή η διαπίστωση μας οδηγεί στο να θεωρούμε ότι σε μερικά περίπλοκα φαινόμενα που παρουσιάζονται σε συστήματα πολλών σωμάτων κάποιοι μικροσκοπικοί νόμοι ενδεχομένως να μη μας δίνουν μια κατανοητή και χρήσιμη εξήγηση και να πρέπει να καταφύγουμε σε μια ποιο υψηλού-επιπέδου περιγραφή. Τέτοια φαινόμενα σε συστήματα πολλών σωμάτων μας ενδιαφέρουν και στη παρούσα εργασία, για το λόγο αυτό μελετάμε τη συμπεριφορά ενός συστήματος πολλών σωμάτων με κάποιους παραμέτρους τάξης, σε επίπεδο στατιστικής φυσικής, συνδυάζοντας γνώσεις για τις συμμετρίες του συστήματος και εφαρμόζοντας μια θεωρία μέσου πεδίου όπως θα δούμε στη συνέχεια.

Συνοψίζοντας, οι κυρίαρχοι λόγοι που καθιστούν μη πρακτική τη μικροσκοπική επίλυση ενός συστήματος πολλών σωμάτων είναι :

- Ο αριθμός σωματιδίων του συστήματος είναι τεράστιος, τάξης μεγέθους του αριθμού του Avogadro $\sim 10^{23}$. Συνεπώς η επίλυση θα απαιτούσε $\sim 10^{23}$ συζευγμένες διαφορικές εξισώσεις, κάτι το οποίο είναι αδύνατο από υπολογιστική σκοπιά.

- Ακόμα και αν τις λύναμε, οι λύσεις των Χαμιλτονιανών εξισώσεων δεν παρέχουν τόσο σημαντική πληροφορία για το σύστημα. Επι παραδείγματι είναι ποιο ενδιαφέρον να γνωρίζουμε τον μέσο αριθμό σωματιδίων που χτυπάνε ένα τοίχο ανά μονάδα χρόνο συγκριτικά με το να γνωρίζουμε ποιο ακριβώς σωματίδιο χτυπάει κάθε στιγμή. Επιπρόσθετα πολλά ενδιαφέροντα συστήματα παρουσιάζουν χαοτικές συμπεριφορές με μεγάλη εξάρτηση στις αρχικές συνθήκες κατά τη χρονική εξέλιξη του συστήματος.

Η εικόνα των οιονεί σωματίδια και συλλογικών διεγέρσεων που θα παρουσιάσουμε στη συνέχεια μας βοηθάει να περιγράψουμε τα συσχετισμένα σωματίδια των πολλών σωμάτων με προσεγγιστικά μη-αλληλεπιδρώντα ή ασθενώς αλληλεπιδρώντα[1] οιονεί σωματίδια ή συλλογικές διεγέρσεις. Η εικόνα αυτή μας έχει βοηθήσει να υπολογίσουμε για παράδειγμα ενεργειακά επίπεδα σε ελαφρά άτομα, επιφάνειες Fermi και την ενεργό μάζα ηλεκτρονίων σε πλήθος από υλικά. Κάποιες άλλες τεχνικές είναι ο φορμαλισμός της δεύτερης κβάντωσης και οι συναρτήσεις Green. Ο φορμαλισμός της δεύτερης κβάντωσης όπως θα δούμε και σε επόμενο υποκεφάλαιο, μας επιτρέπει να αλλάξουμε συμβολισμό κερδίζοντας σε απλότητα στη έκφραση και εσωκλείοντας τη στατιστική των σωματιδίων(Bose ή Fermi). Με την βοήθεια των τελεστών αυτών θα γράψουμε εύκολα τις διάφορες παραμέτρους τάξης. Οι συναρτήσεις Green από την άλλη παρόλο που δε παρέχουν πλήρη εικόνα του υπό εξέταση συστήματος, περιέχουν όμως τις πιο σημαντικές πληροφορίες του φυσικού συστήματος όπως για παράδειγμα την ενέργεια των διεγερμένων καταστάσεων και την ενέργεια της θεμελιώδους κατάστασης. Η μέθοδος των συναρτήσεων Green που θα χρησιμοποιήσουμε παρουσιάζεται ποιο αναλυτικά στο Κεφάλαιο 3.

Επίσης για την προσέγγιση από σκοπιάς στατιστικής μηχανικής του προβλήματος, μας βοηθάει η κατηγοριοποίηση σε σύνολα του υπό μελέτη συστήματος. Ανάλογα με τους περιορισμός και τις ιδιομορφίες κάθε συστήματος έχουμε συνήθως 3 πιθανές κατηγορίες:

- Μικροκανονικό σύνολο : όταν το σύστημα είναι εντελώς απομονωμένο και έχει καθορισμένες τιμές ενέργειας, όγκου και αριθμού σωματιδίων.

- Κανονικό σύνολο : Όταν το σύστημα ανταλλάσει ενέργεια με το περιβάλλον του.

- Μεγαλοκανονικό σύνολο : όταν το σύστημα ανταλλάσει ενέργεια και σωματίδια με το περιβάλλον του.

### 1.1.1 Στοιχειώδεις διεγέρσεις

Ακόμα και σε ένα στερεό όπως ο χαλκός για να βρούμε αν κρυσταλλώνεται όπως το γυαλί, όπως άλλα μέταλλα ή αν έχει ιδιότητες υπερρευστότητας όπως το υγρό ήλιον, πρέπει να

[1] Τη νέα ασθενής αλληλεπίδραση μεταξύ αυτών ονομάζουμε και ενεργό(effective) αλληλεπίδραση.

λάβουμε υπόψιν τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ενός μεγάλου αριθμού πανομοιότυπων(σε δείγμα με καθαρότητα προς ισότοπα) πυρήνων και έναν ακόμα μεγαλύτερο αριθμό ηλεκτρονίων. Αυτό είναι ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων[2] σε μια από της δυσκολότερες μορφές που δεν είμαστε εξοπλισμένοι να λύσουμε πέραν από ποιοτικές προσεγγίσεις. Δε θα μπορούσαμε να παραλείψουμε ούτε τα σπιν των ηλεκτρονίων ούτε και τις ηλεκτρικές τετραπολικές ροπές του πυρήνα. Αν ακολουθούσαμε μεθόδους της σχετικιστικής κβαντικής μηχανικής θα ελπίζαμε να βρίσκαμε μια λύση που θα έδινε μια καλή εικόνα της φυσικής πραγματικότητας και θα προέβλεπε όλες τις ιδιότητες του χαλκού. Αλλά προφανώς κάτι τέτοιο είναι αδύνατο, το καλύτερο που μπορούμε να κάνουμε σήμερα είναι να μαντέψουμε τη μορφή των καταστάσεων και να υπολογίσουμε τις ενέργειες τους. Εν προκειμένω να υποθέσουμε είτε κυβική εδροκεντρωμένη (face-centered cubic) είτε κυβική χωροκεντρομένη(body centrer cubic) κρυστάλλωση. Μετά υπολογίζουμε τις ενέργειες των δύο κρυσταλλώσεων λαμβάνοντας υπόψιν όσες αλληλεπιδράσεις μπορούμε για να υποθέσουμε ποια είναι η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος. Ακόμα και τότε βέβαια δεν υπάρχει καμία εγγύηση ότι βρήκαμε τη χαμηλότερη ενεργειακή κατάσταση. Ευτυχώς όμως έχουμε εργαλεία όπως την διάθλαση με ακτίνες X για να δούμε πως όντως ο χαλκός σχηματίζει κυβική εδροκεντρωμένη(face centered cubic). Στα προβλήματα που προσπαθούμε να βρούμε την ηλεκτρική δομή του κρυστάλλου έχουμε λιγότερες μεθόδους για να ερευνήσουμε την κυματοσυνάρτηση των ηλεκτρονίων από ότι να προσδιορίσουμε τις θέσεις των πυρήνων, εκεί πραγματικά πρέπει να σκεφτόμαστε συνεχώς εάν επιλέξαμε τη ποιο χρήσιμη εικόνα για τη κυματοσυνάρτηση. Για παράδειγμα πριν το 1957 περιγράφαμε ανεπιτυχώς τις ιδιότητες των υπεραγωγών επειδή η αρχική θεμελιώδης κατάσταση(ground state) που υποθέταμε ήταν ποιοτικά διαφορετική από αυτή που τώρα πιστεύουμε. Βέβαια το πειραματικό ενδιαφέρον δεν βρίσκεται μόνο στη θεμελιώδη κατάσταση αλλά και στο πως αποκρίνεται το σύστημα σε διάφορες διεγέρσεις όπως αύξηση θερμοκρασίας ή απορρόφηση μικροκυμάτων. Οπότε στόχος των θεωρητικών σε αυτά τα προβλήματα δεν είναι μόνο ο καθορισμός της θεμελιώδους κατάστασης αλλά και ο υπολογισμός των ενεργειών των διεγερμένων καταστάσεων. Οι στοιχειώδεις διεγέρσεις λοιπόν είναι μια έννοια που έχει στόχο να μας βοηθήσει να μελετήσουμε τις διεγερμένες καταστάσεις με απλό και εύχρηστο τρόπο. Στην θεμελιώδη κατάσταση το σύστημα έχει τέλεια τάξη. Σε μια πεπερασμένη θερμοκρασία η τάξη γίνεται ποιο αδύναμη από διεγέρσεις της παραμέτρου τάξης. Για παράδειγμα στους κρύσταλλους αυτές οι διεγέρσεις λέγονται φωνόνια, ενώ στους σιδηρομαγνήτες το ανάλογο είναι τα κύματα σπιν, δηλαδή τα μαγνόνια.

Σε αυτό το σημείο πρέπει να λάβουμε υπόψιν τη διάκριση σε στοιχειώδεις διεγέρσεις (quasiparticle excitations)και σε συλλογικές διεγέρσεις(collective excitations). Πρακτικά μιλάμε για οιονεί-σωματίδια όταν έχουμε να κάνουμε με φερμιόνια και για συλλογικές διεγέρσεις όταν έχουμε με μποζόνια. Η διάκριση των δύο γίνεται περισσότερο κατανοητοί μέσω παραδείγματος. Σε ένα αέριο με μη αλληλεπιδρώντα σωματίδια μπορούμε να αυξήσουμε την ενέργεια ενός από αυτά τα σωματίδια χωρίς να επηρεάσουμε τα υπόλοιπα. Αν το αέριο ήταν

[2]Όπως είπαμε σε μία πρώτη ματιά ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων μοίαζει τρομακτικό. Σε ένα τυπικό σύστημα υπάρχουν $10^2 - 10^3$ σωματίδια που αλληλεπιδρούν ισχυρά με τους γείτονές τους. Ελέγχοντας τη συλλογική δυναμική, εάν εστιάσουμε στις συντεταγμένες των συλλογικών βαθμών ελευθερίας μπορούμε ενδεχομένως να φτιάξουμε μια θεωρία που να περιλαμβάνει ένα περιορισμένο μόνο σύνολο διεγέρσεων.

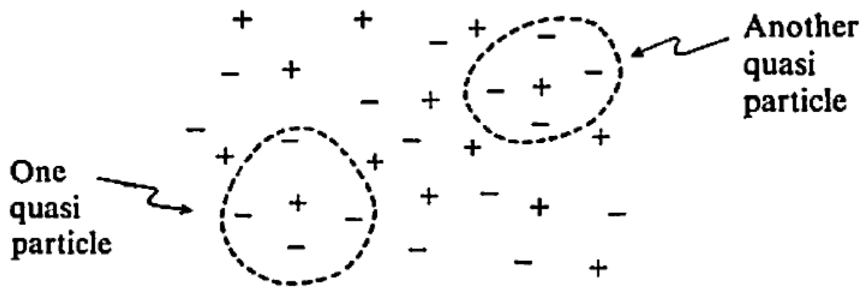
στη θεμελιώδη κατάσταση τότε μπορούμε να πούμε πως αυτό είναι η δημιουργία μιας στοιχειώδους διεγερμένης κατάστασης. Αν τώρα αυξήσουμε την ενέργεια και σε ένα δεύτερο σωματίδιο τότε οι ενέργειες θα προστεθούν δίνοντας τη διπλάσια ενέργεια στο διεγερμένο σύστημα πάνω από τη θεμελιώδη κατάσταση. Αυτές τις διεγέρσεις ονομάζουμε σωματιδιακές διεγέρσεις. Αν συμπεριλάβουμε όμως αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων θα περιμένουμε αυτές να φθείρονται καθώς η ενέργεια σταδιακά θα χαθεί λόγο σκεδάσεων. Αν όμως τα σωματίδια υπακούουν στην απαγορευτική αρχή του Pauli και η ενέργεια διέγερσης είναι χαμηλή θα υπάρχουν ελάχιστες άδειες καταστάσεις για να σκεδαστεί το σωματίδιο με αποτέλεσμα επαρκώς μεγάλου χρόνου ζωής της διέγερσης. Οι ενέργειες αυτών των διεγέρσεων θα διαφέρουν από τα μη αλληλεπιδρώντα σωματίδια λόγο αυτών των αλληλεπιδράσεων. Αυτές τις διεγέρσεις ονομάζουμε ψευδοσωματιδιακές(quasiparticle). Ένα απλό παράδειγμα της άλλης κατηγορίας διεγέρσεων είναι το ηχητικό κύμα σε ένα στερεό. Λόγο των ισχυρών ενδοατομικών δυνάμεων στο στερεό, υπάρχει μικρό κέρδος στη μελέτη της κίνησης ενός ατόμου στο κρύσταλλο με όρους σωματιδιακής κίνησης. Η ορμή που θα δώσουμε σε ένα άτομο μεταφέρεται τόσο γρήγορα που θα ήταν δύσκολο να ξέρουμε και άσκοπο να ξέρουμε ποιο άτομα αρχικά διεγέρθηκε. Γνωρίζουμε επίσης πως το ηχητικό κύμα μένει πολύ περισσότερο χρόνο στο στερεό πριν εξασθενίσει συγκριτικά με το πόσο κρατάει την ορμή ένα άτομο. Εφόσον το ηχητικό κύμα προσδιορίζεται δίνοντας τις συντεταγμένες όχι ενός ατόμου αλλά όλων των ατόμων του στερεού, ονομάζουμε το κύμα αυτό συλλογική κίνηση. Το πλάτος της κίνησης αυτής είναι κβαντισμένο, και το κβάντο ενός ηχητικού κύματος στο στερεό είναι γνωστό ως φωνόνιο. Το φωνόνιο(phonon) αποτελεί λοιπόν άλλο ένα παράδειγμα μίας συλλογικής διέγερσης σε ένα στερεό.

### 1.1.2 Οιονεί σωματίδια

Για τη παρούσα μελέτη μας ενδιαφέρουν κυρίως τα ηλεκτρονιακά οιονεί σωματίδια[3]. Μιλώντας για τα σωματίδια αυτά που υπακούν την απαγορευτηκή αρχή του Pauli και όχι για συλλογικά φαινόμενα πλέον πάμε σε ένα απλό αλλά χρήσιμο για αργότερα σύστημα το αέριο ηλεκτρονίων. Όσο τα ηλεκτρόνια δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους έχουμε μια απλοϊκή εικόνα για τα ενεργειακά επίπεδα. Κάθε ηλεκτρόνιο έχει ενέργεια $E = p^2/2m$ τα σπιν τους είναι είτε πάνω είτε κάτω και για οποιαδήποτε δύο επιλέξουμε δε πρέπει να έχουν ίδια ορμή[4] και σπιν. Αν υπάρχουν N ηλεκτρόνια, η θεμελιώδης κατάσταση είναι ηκατάσταση στην οποία οι N ανεξάρτητες ηλεκτρονιακές καταστάσεις με τη χαμηλότερη ενέργεια είναι κατειλημμένες και όλες οι άλλες είναι κενές. Αν το ποιο ενεργητικό ηλεκτρόνιο έχει ορμή $p_f$ τότε όλες οι καταστάσεις με μικρότερη ορμή θα είναι κατειλημμένες. Η σφαιρική επιφάνεια στον χώρο τον ορμών που

[3] Όποιος έχει ασχοληθεί με τη θεωρία των ημιαγώγιμων διατάξεων ενδεχομένως να έχει αναρωτηθεί για ποιο λόγο η ενεργός μάζα των ηλεκτρονίων σε ένα κρύσταλλο εξαρτάται από το υλικό, καθώς και την κρυσταλλογραφική διεύθυνση της κίνησης ή γιατί μιλάμε για οπές. Ο λόγος είναι ότι δε μιλάμε για συνηθισμένα ηλεκτρόνια αλλά οιονεί ηλεκτρόνια.

[4] Ο λόγος που οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων δεν είναι καθόλου αποτελεσματικές στο να αλλάξουν την ορμή είναι πως η απαγορευτική αρχή του Pauli περιορίζει πάρα πολύ τις διαθέσιμες καταστάσεις και, επομένως, και την πιθανότητα αμοιβαίων συγκρούσεων. Αυτό ισχύει για τα διεγερμένα οιονεί σωματίδια με ορμή $P$ πολύ κοντά στη $p_F$.




Σχήμα 1.1: Ψευδοσωματίδια σε ένα υγρό με θετικά και αρνητικά ιόντα. (Πηγή: [3])

ορίζετε για $|p| = |p_f|$ είναι γνωστή ως επιφάνεια Fermi(Fermi surface)[5]. Έτσι εξετάζουμε τη διεγερμένη κατάσταση σαν τη στοιχειώδη κατάσταση και μια διέγερση που αποτελείται από ένα σωματίδιο και μια οπή(hole), το ζευγάρι ηλεκτρονίου-οπής έχει καλώς καθορισμένη ενέργεια πάνω από τη στοιχειώδη κατάσταση. Αν εισάγουμε αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων και ειδικά τη αλληλεπίδραση Coulomb είναι δύσκολο να δούμε αν επιβιώνει η ιδέα της διέγερσης σωματιδίου-οπής. Αναφερόμαστε σαν ψευδοηλεκτρόνια(quasielectrons) και ψευδο-οπές(quasiholes). Το πιο απλό παράδειγμα ψευδοσωματιδίου είναι όταν σε ένα σύστημα δύο σωμάτων που μελετάμε ως προς τη μάζα τους, μπορούμε να επιλέξουμε να κάνουμε ισοδύναμη περιγραφή με ένα ψευδοσωματίδιο που είναι στο κέντρο μάζας του συστήματος και έχει μάζα ίση με την ανηγμένη μάζα του συστήματος. Έτσι με την ίδια λογική μπορώ και σε πιο περίπλοκα συστήμα[6] (όπως στο Σχ. 1.1) βρίσκουμε ένα συνδυασμό των πραγματικών σωματιδίων μαζί με ένα νέφος ή ντύσιμο(dressing) όπως λέγεται, και δημιουργούμε τα κατάλληλα ψευδοσωματίδια[7] που μας επιτρέπουν να απλοποιήσουμε το αρχικό πρόβλημα. Τα νέα αυτά σωματίδια έχουν άλλη μάζα(effective mass) και κάποιο χρόνο ζωής εν γένει διαφορετικά από τα αρχικά πραγματικά σωματίδια. Να σημειώσουμε τέλος ότι δεν είναι απαραίτητο όλα τα ψευδοσωματίδια να έχουν τη μορφή που είπαμε, για παράδειγμα τα bogolons(Bogoliubov quasi particles) που είναι στοιχειώδεις διεγέρσεις στους υπεραγωγούς δεν έχουν κάποιο ντύσιμο παρά είναι ένας γραμμικός συνδυασμός ενός ηλεκτρονίου στη κατάσταση $(+k,\uparrow)$ και μιας οπής $(-k,\downarrow)$ στην κατάσταση. Για περισσότερα στις στοιχειώδεις διεγέρσεις και τα οιονεί σωματίδια σε συστήματα πολλών σωμάτων παραπέμπουμε στα [2], [3].

[5] Η επιφάνεια Fermi είναι μια επιφάνεια με σταθερή ενέργεια $e_F$ στο χώρο k(Περισσότερα στο κεφάλαιο 2).

[6] Ένα άλλο παράδειγμα που έχει σχέση με τη υπεραγωγιμότητα είναι ένα ηλεκτρόνιο που ταξιδεύει μέσα σε έναν υπεραγωγό λόγο της πολύπλοκης διαταραχής της κίνησης του από της αλληλεπιδράσεις με τα άλλα ηλεκτρόνια και τους πυρήνες μπορούμε να πούμε ότι προσεγγιστικά συμπεριφέρεται σαν ένα ηλεκτρόνιο με διαφορετική μάζα(ενεργό μάζα) και ταξιδεύει μέσα σε ένα αδιατάρακτο ελεύθερο χώρο. Αυτό το ήλεκτρόνιο' με τη διαφορετική μάζα ονομάζεται ηλεκτρονιακό οιονεί-σωματίδιο.

[7] Κάποιες διαφορετικές ονομασίες είναι ντυμένα ή επανανικοποιημένα(renormalized) σωματίδια.

## 1.2 Ο φορμαλισμός της δεύτερης κβάντωσης

Η γλωσσά της δεύτερης κβάντωσης είναι ένας φορμαλισμός που βασίζεται σε κάποιους συγκεκριμένους τελεστές δημιουργίας(creation operator) και αφανισμού(annihilation operator), και αποτελεί ένα εργαλείο για την αντιμετώπιση προβλημάτων πολλών σωμάτων πιο αποδοτικό από τη παραδοσιακή γλώσσα των συμμετροποιημένων κυματοσυναρτήσεων πολλών σωμάτων. Υπάρχουν δύο βασικά πλεονεκτήματα σε αυτό το φορμαλισμό πρώτον μας παρέχει έναν συμπαγή τρόπο να αναπαραστήσουμε διεγέρσεις στον χώρο των πολλών σωμάτων και δεύτερον οι ιδιότητες των τελεστών ανάβασης κωδικοποιούνται σε ένα απλό σύστημα σχέσεων, αντί για μία αναπαράσταση στο χώρο Hilbert.[8] Η δεύτερη κβάντωση είναι πολύ διαδεδομένο θέμα και μπορεί να βρεθεί σε πλήθος βιβλίων, ενδεικτικά [5] και [6].

Ας ξεκινήσουμε με ένα σύστημα N αλληλεπιδρώντων σωματιδίων που περιγράφονται από την ακόλουθη χαμηλτονιανή

$$H = \sum_{i=1} NT(r_i, \dot{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1} NV(r_i, r_j) \tag{1.1}$$

Η κυματοσυνάρτηση πολλών σωμάτων $\psi(r_1, \dots r_N, t)$ ικανοποιεί την εξίσωση Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r_1, \dots, r_N, t) = H\psi(r_1, \dots r_N, t) \tag{1.2}$$

Τώρα αναπτύσσουμε τη κυματοσυνάρτηση σε όρους γινομένων μιας μονοσωματιδιακής κυματοσυνάρτησης που χαρακτηρίζεται από κβαντικούς αριθμούς $E_i$,

$$\psi(r_1, \dots r_N, t) = \sum_{E_1, \dots, E_N} c(E_1, \dots, E_N, t) \varphi_{E_1}(r_1) \varphi_{E_2}(r_2) \dots \varphi_{E_N}(r_N) \tag{1.3}$$

όπου το άθροισμα πάνω σε όλους τους πιθανούς συνδιασμούς των κβαντικών αριθμών. Η στατιστική φύση των σωματιδίων περιλαμβάνεται στους συντελεστές $c(E_1, \dots, E_N, t)$. Για παράδειγμα, εάν τα σωματίδια είναι φερμιόνια, έχουμε το ακόλουθο αντισυμμετρικό στην εναλλαγή διάνυσμα κατάστασης,

$$c(E_1, \cdots, E_k, \dots, E_i, \dots, E_N, t) = -c(E_1, \dots, E_i, \dots, E_k, \dots, E_N, t) \tag{1.4}$$

όπου διαβεβαιώνει πως δε γίνεται παραπάνω του ενός σωματιδίου να είναι σε μια συγκεκριμένη κατάσταση. Καθώς ενδιαφερόμαστε περισσότερο για ηλεκτρόνια, τα οποία είναι φερμιόνια, ενδιαφερόμαστε για τις αλλαγές προσήμου όταν δύο ηλεκτρόνια εναλλάσσονται. Σε αυτή την καταγραφή των αλλαγών προσήμου μας βοηθά και η δεύτερη κβάντωση. Οι συντελεστές στο ανάπτυγμα της $\psi$ χαρακτηρίζονται από ένα συνδυασμό N κβαντικών αριθμών. Μπορούμε, ωστόσο, να διαλέξουμε συντελεστές που να χαρακτηρίζονται από τον αριθμό ηλεκτρονίων σε κάθε πιθανή κατάσταση. Με αυτό το τρόπο αντί για ένα σύνολο από N αριθμούς $\{E_1, \dots, E_N\}$ μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε ένα άπειρο σύνολο αριθμών $\{n_1, \dots, n_\infty\}$,όπου για φερμιόνια

[8] Πρακτικά προσπαθούμε μέσο ενός κατάλληλου μετασχηματισμού να μετατρέψουμε μια χαμιλτονιανή ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων σε μια χαμιλτονιανή μη αλληλεπιδρώντων(ή ασθενώς αλληλεπιδρώντων) οιονεί-σωματιδίων.

έχω $n = 0$ είτε $n = 1$. Η καταγραφή κάθε εναλλαγής ηλεκτρονίων δίνεται αυτόματα αν γράψουμε τη μονοσωματιδιακή κυματοσυνάρτηση σαν μια ορίζουσα Slater. Εάν θεωρήσουμε $f(n_1, \ldots, n_\infty)$ να έχει το πρόσημο και το μέγεθος του πρώτου $c$. Προσθέτοντας πάνω σε όλα τα σύνολα $\{E_1, \ldots, E_N\}$ είναι ισοδύναμο με την πρόσθεση πάνω σε όλους τους συνδυασμούς κατειλημμένων καταστάσεων. Συνεπώς

$$\psi(r_1, \ldots, r_N, t) = \sum_{n_1,\ldots,n_\infty} f(n_1, \ldots, n_\infty) \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_{E_1}(r_1) & \ldots & \varphi_{E_N}(r_N) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_{E_N}(r_1) & \ldots & \varphi_{E_N}(r_N) \end{vmatrix} \tag{1.5}$$

Οι καταστάσεις που χρησιμοποιούνται στην κατασκευή της ορίζουσας είναι, βεβαίως, οι κατειλημμένες. Με τη χρήση αυτής της περιγραφής αριθμών κατάληψης μπορέσαμε να πάμε από τη στατιστική των τελεστών επέκτασης στη συνάρτηση βάσης, η οποία σχηματίζει ένα ορθοκανονικό αντισυμμετρικό σύνολο. Ας ορίσουμε τώρα ένα αφηρημένο διανυσματικό χώρο, η αλλιώς χώρο Hilbert, που κατασκευάζεται από τα διανύσματα βάσης $|n_1, n_2, \ldots, n_\infty\rangle$. Εισάγουμε τελεστές που ικανοποιούν τις σχέσης αντιμετάθεσης(για μποζόνια έχω σχέσης μετάθεσης) :

$$\{a_i, a_j^\dagger\} \equiv a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad , \quad \{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0 \tag{1.6}$$

Από αυτές τις σχέσεις φαίνεται πως το $a_i^\dagger$ δημιουργεί μια καταχώριση στη θέση i(εάν δεν υπάρχει ήδη εκεί) και ο $a_i$ καταστρέφει την καταχώρηση στη θέση i. Έτσι μπορούμε να αναπαραστήσουμε το διάνυσμα κατάστασης του δικού μας χώρου Hilbert σαν συνδυασμό των τελεστών αυτών,

$$|n_1, \ldots, n_\infty\rangle = (a_1^\dagger)^n \ldots a_k a_k^\dagger \ldots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle \tag{1.7}$$

Αναπαριστούμε ένα διάγραμμα βάση στο χώρο που ορίσαμε ως

$$a_k |n_1, \ldots, n_k, \ldots, n_\infty\rangle = (-1) \sum_k (a_1^\dagger)^n \ldots a_k a_k^\dagger \ldots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle \tag{1.8}$$

Πρακτικά οποιαδήποτε κατάσταση n σωματιδίων μπορεί να εκφραστεί μέσω της δράσης τελεστών δημιουργίας πάνω στη κατάσταση κενού.[9] Εάν σε αυτό τώρα δράσουμε με τον τελεστή $a_k$. Εάν $n_k = 0$, τότε το $a_k$ μας πάει στη κατάσταση κενού, όπου δίνει 0. Εάν $n_k = 1$, τότε το $a_k$ θα μετατίθεται μέχρι να έρθει το $a_k^\dagger$. Οι γενικές σχέσεις της επίδρασης των τελεστών φαίνονται παρακάτω,

$$a_k |n_1, \ldots, n_k, \ldots, n_\infty\rangle = \begin{cases} 0 & n_k = 0 \\ (-1) \sum_k |n_1, \ldots, n_k - 1, \ldots, n_\infty\rangle & n_k = 1 \end{cases}$$

Αντιστοίχως,

$$a_k^\dagger |n_1, \ldots, n_k, \ldots, n_\infty\rangle = \begin{cases} (-1) \sum_k |n_1, \ldots, n_k + 1, \ldots, n_\infty\rangle & n_k = 0 \\ 0 & n_k = 1 \end{cases}$$

[9] Η κατάσταση κενού $|0\rangle$, όπως δηλοί και το όνομά της, αντιστοιχεί στη περίπτωση που δεν υπάρχει κανένα σωματίδιο στο υπό εξέταση σύστημα.

Οι οποίες μπορούν να απλοποιηθούν περαιτέρω βέβαια αφού ο τελεστή $a_k^\dagger a_k$(number operator) έχει ιδιοτιμή $n_k$. Έχοντας τώρα αναπτύξει τις ιδιότητες του χώρου Hilbert, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους συντελεστές $f(n_1,\ldots,n_\infty,t)$ για να ορίσουμε το αφηρημένο διάνυσμα κατάστασης

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1,\ldots,n_\infty} f(n_1,\ldots,n_\infty,t)\,|n_1,\ldots,n_\infty\rangle \tag{1.9}$$

Με βάση τα παραπάνω και λίγες πράξεις ακόμα, καταλήγουμε για τους όρους αλληλεπίδρασης δύο σωματιδίων στη σχέση

$$i\hbar\frac{\partial\,|\psi(t)\rangle}{\partial t} = H\,|\psi(t)\rangle \tag{1.10}$$

όπου

$$H = \sum_{k,l}\langle k|\,T\,|l\rangle\, a_k^\dagger a_l + \frac{1}{2}\sum_{k,l,s,t}\langle kl|\,V\,|st\rangle\, a_k^\dagger a_l^\dagger a_s a_t \tag{1.11}$$

Έτσι βλέπουμε πως στο χώρο αριθμών κατάληψης το διάνυσμα κατάστασης $|\psi(t)\rangle$, όπως το ορίσαμε παραπάνω, επίσης ικανοποιεί μια εξίσωση μορφής Schrödinger, με τη Χαμιλτονιανή να εκφράζεται σε όρους δεύτερης κβάντωσης. Τώρα θα δείξουμε πως εκφράζουμε τελεστές στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης. Αν ορίσουμε τελεστή πεδίου στο χώρο Hilbert που χρησιμοποιούμε

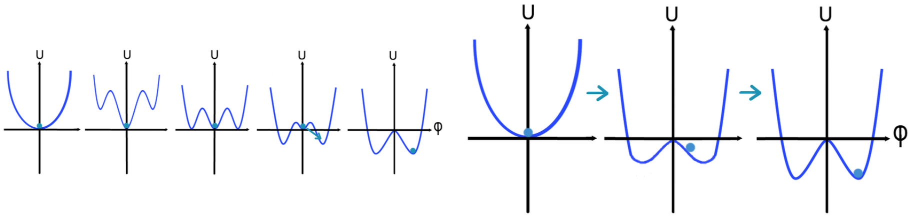
$$\psi(r) = \sum_k \varphi_k(r) a_k \tag{1.12}$$

Όπου το $\varphi_k(r)$ είναι ένα πλήρες σύνολο μονοσωματιδιακών καταστάσεων που χαρακτηρίζεται από τους κβαντικούς αριθμούς $k$,και $a_k$ να είναι ο φερμιονικός τελεστής που έχουμε εισάγει. Για να μεταφέρουμε στη δεύτερη κβάντωση ένα μονοσωματιδιακό τελεστή $T(\dot{r}_i)$ γράφουμε $r_i \to r$, και βάζουμε αυτό το τελεστή μεταξύ των $\psi(r)^\dagger$ και $\psi(r)$, μετά ολοκληρώνουμε σε όλο το χώρο. Για ένα τελεστή δύο σωματιδίων όπως ο $V(r_i, r_j)$ θέτουμε $r_i \to r$ και $r_j i \to r'$, και βάζουμε τον τελεστή μας μεταξύ των $\psi(r)^\dagger\psi(r')^\dagger$ και $\psi(r)\psi(r')$ και μετά ολοκληρώνουμε πάνω στα $dr$ και $dr'$.

## 1.3 Καταστάσεις τάξεως

Μεταβάσεις Φάσης: Η φάση είναι ένας όρος της θερμοδυναμικής και της στατιστικής μηχανικής, όπου είναι σε αυτήν ένα ομογενές σύστημα. Για παράδειγμα εάν ο καφές σε ένα ποτήρι οριστεί ως μια φάση επειδή έχει μια ομοιογένεια, εάν προσθέσω 10 κουταλιές ζάχαρη τότε δεν έχω ομοιογένεια, αλλά δύο διαφορετικές φάσεις μια στο πάτο και μια πιο πάνω. Συνήθως αλλαγές φάσεων(αλλαγή κατάστασης) ή δημιουργία νέων έχω ως αποτέλεσμα εξωτερικών συνθηκών όπως θερμοκρασία, πίεση ή εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Ένα διάγραμμα το οποίο περιγράφει στον χώρο των φυσικών παραμέτρων που επηρεάζουν το σύστημα(π.χ. Θερμοκρασία, Πίεση) την κατάσταση που αυτό βρίσκεται για κάθε τιμή των παραμέτρων ονομάζεται διάγραμμα φάσεων του εξεταζόμενου συστήματος. Περιοχή φάσης είναι μία περιοχή σημείων στο διάγραμμα φάσης του υλικού στην οποία το αντίστοιχο θερμοδυναμικό δυναμικό και όλες οι θερμοδυναμικές ποσότητες που εξαρτώνται από αυτό είναι αναλυτικές συναρτήσεις. Κοντά σε μια κρίσιμη καμπύλη εάν μια φυσική παράμετρος παρουσιάσει μικρή μεταβολή θα έχουμε μεγάλες ποιοτικές μεταβολές των φυσικών χαρακτηριστικών του συστήματος. Αυτό ονομάζουμε αλλαγή φάσης του συστήματος. Οι ασυνέχειες και οι απειρισμοί στο διάγραμμα φάσης οφείλονται στις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων, αυτές της αλληλεπιδράσεις μελετάμε λοιπόν για να καταγράψουμε τις αλλαγές φάσης. Σημαντικός στόχος της έρευνας σήμερα είναι η εξαγωγή του διαγράμματος φάσης κάτι που δεν είναι καθόλου εύκολο καθώς σε πολλές περιπτώσεις δεν μπορεί να γίνει πλήρης ταυτοποίηση των αντιστοίχων φάσεων.

Η κατηγοριοποίηση που χρησιμοποιείται συνήθως[10] για τις μεταβάσεις είναι αυτη που εισήγαγε ο Paul Ehrenfest το 1933. Οι μεταβάσεις κατηγοριοποιούνται σύμφωνα με το ποιες φυσικές ποσότητες εμφανίζουν ασυνέχεια κατά τη μετάβαση και τη τάξης ασυνέχεια. 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, τότε η μετάβαση θεωρείται τάξης n. Το γενικό παράδειγμα των συνηθισμένων μεταβάσεων αυτών φαίνεται στα Σχ. 1.2, 1.3 στα οποία βλέπουμε και αλλαγές σε θερμοδυναμικά μεγέθη που μπορούν να χρησιμοποιούνται σαν πειραματικές ενδείξεις όταν ψάχνουμε εάν έχουμε κάποια μετάβαση και τη τάξης.

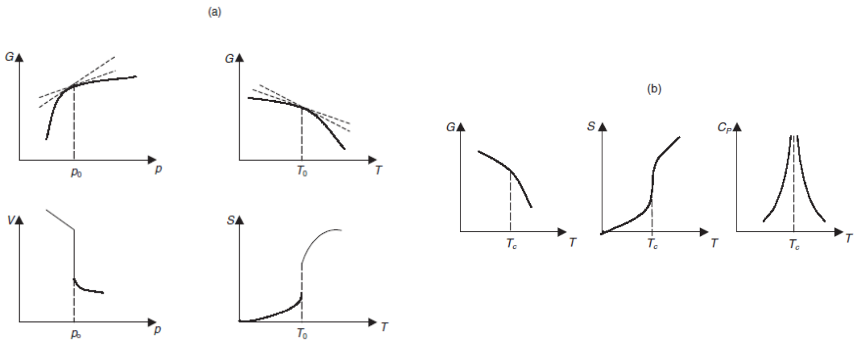



Σχήμα 1.2: Από αριστερά προς τα δεξιά μειώνουμε τη θερμοκρασία του συστήματος, με U συμβολίζουμε το δυναμικό του συστήματος(θα μπορούσε να είναι εναλλακτικά και η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs) και με Φ ένα απλό πεδίο. (Πηγή: Fikriye Kaya, "Breaking Symmetry: Phase Transitions, Massive Excitations, and Gravitational Domains", December 2017.)

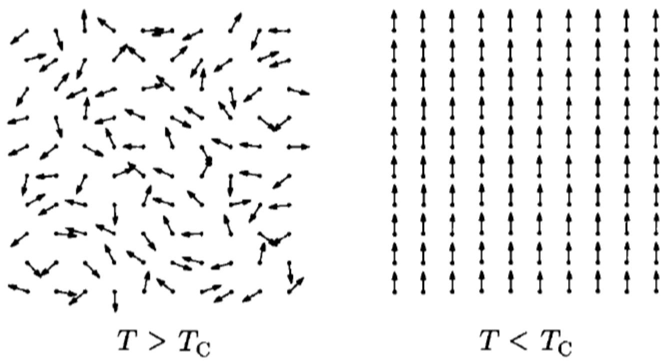
Ένα παράδειγμα αλλαγής φάσης είναι ο σιδηρομαγνητισμός[11], όπου το υλικό σε μπορεί να εκτεθεί σε ταυτόχρονο μαγνητισμό. Ένα καλό παράδειγμα σιδηρομαγνήτη είναι ο σίδηρος μπορεί να επιδείξει αυθόρμητο μαγνητισμό καθώς όλοι οι μικροσκοπικοί μαγνήτες σε ένα κομμάτι του υλικού δείχνουν στην ίδια κατεύθυνση κάνοντας το κομμάτι αυτό σιδηρομαγνητικό. Εντούτοις αν το θερμάνουμε σε υψηλή θερμοκρασία (770 $C^0$), χάνει το μαγνητισμό του όταν περνάει τη σιδηρομαγνητική θερμοκρασία μετάβασης(θερμοκρασία Curie) Σχ.1.4. Αυτή η αλλαγή μεταξύ μαγνητικής και μη μαγνητικής κατάστασης στο σημείο Curie είναι άλλο ένα παράδειγμα μιας αλλαγής φάσης. Η ιδέα του Landau ήταν να μη λάβει υπόψιν του τις μικροσκοπικές λεπτομέρειες αλλά να μελετήσει την αλλαγή φάσης συνολικά σε όρους συμμετριών.

[10]Εναλλακτικές κατηγοριοποιήσεις αναλόγως με το υπό μελέτη σύστημα είναι η θερμοδυναμική(ανάλογα εαν έχω εξώθερμη ή ενδόθερμη μετάβαση, είτε μια γενίκευση της Ehrenfest για περιπτώσεις που δεν έχω απλή ασυνέχεια αλλά έχω θερμοδυναμικές ποσότητες που αποκλίνουν.

[11]Γενικά για μαγνητικά φαινόμενα παραπέμπουμε εδώ [4].



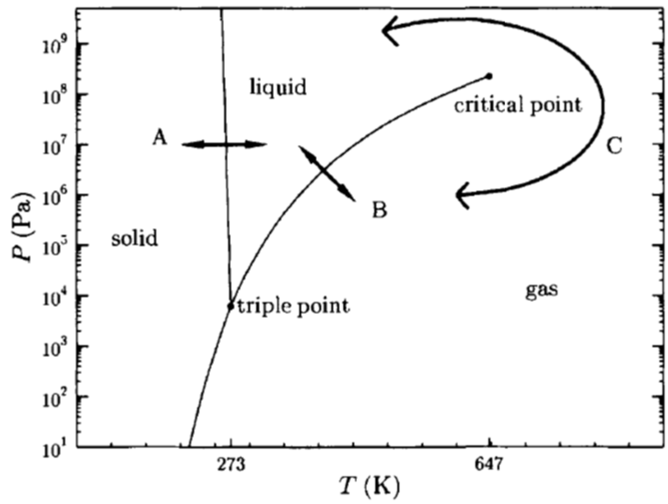

Σχήμα 1.3: Αλλαγές φάσεων. a)Μεταβάσεις πρώτης τάξης: Τα δυναμικά όπως το G είναι συνεχή κατά τη μετάβαση, αλλά οι πρώτες παράγωγοι και τα σχετικά μεγέθη (V και S) είναι ασυνεχή. b)Μεταβάσεις δεύτερης τάξης: η πρώτη παράγωγος του G είναι συνεχής, αλλά μερικές από τις δεύτερες παραγώγους αποκλίνουν (παράδειγμα η $C_p$ πάει στο άπειρο). (Πηγή: [9])




Σχήμα 1.4: Παραμαγνητική-Σιδηρομαγνητική μετάβαση φάσης. Αριστερά: Κατάσταση υψηλής θερμοκρασίας (στατιστική προσέγγιση) όπου διατηρείται η συμμετρία περιστροφής. Δεξιά : Η συμμετρία αυτή σπάει, καθώς το σύστημα γίνεται σιδηρομαγνητικό κάτω από τη θερμοκρασία Curie. (Πηγή: [8])

### 1.3.1 Διάγραμμα φάσεων

Ένα διάγραμμα φάσεων προσδιορίζει τη φυσική κατάσταση στην οποία βρίσκεται το σύστημα για συγκεκριμένες τιμές των φυσικών παραμέτρων των οποίων η μεταβολή ενδεχομένως να οδηγήσει σε αλλαγή φάσης. Ο προσδιορισμός του διαγράμματος φάσεων αποτελεί σημαντικό στόχο στα περισσότερα προβλήματα φυσικής συμπυκνωμένης ύλης. Σε συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων, που κυρίως θα ασχοληθούμε, πολλές φορές χρειάζεται ο συνδυασμός πολύπλοκων πειραματικών τεχνικών για το προσδιορισμό του διαγράμματος φάσης. Ακόμα και τότε δεν είναι εύκολη η πλήρης ταυτοποίηση των φάσεων αυτών. Γνωστότερο όλων είναι το διάγραμμα φάσεων του νερού Σχ.1.5 . Περισσότερο κοντινό με τα δικά μας και αρκετά περισσότερο δυσνόητο είναι το διάγραμμα φάσης ενός μη συμβατικού υπεραγωγού. Ένα τυπικό διάγραμμα φάσης(θερμοκρασία/πυκνότητα φορέων ή πίεση) ενός οξειδίου του χαλκού που είναι υπεραγώγιμο φαίνεται στο Σχ.1.6. Η υπεραγώγιμη φάση, όπου στη περισ-

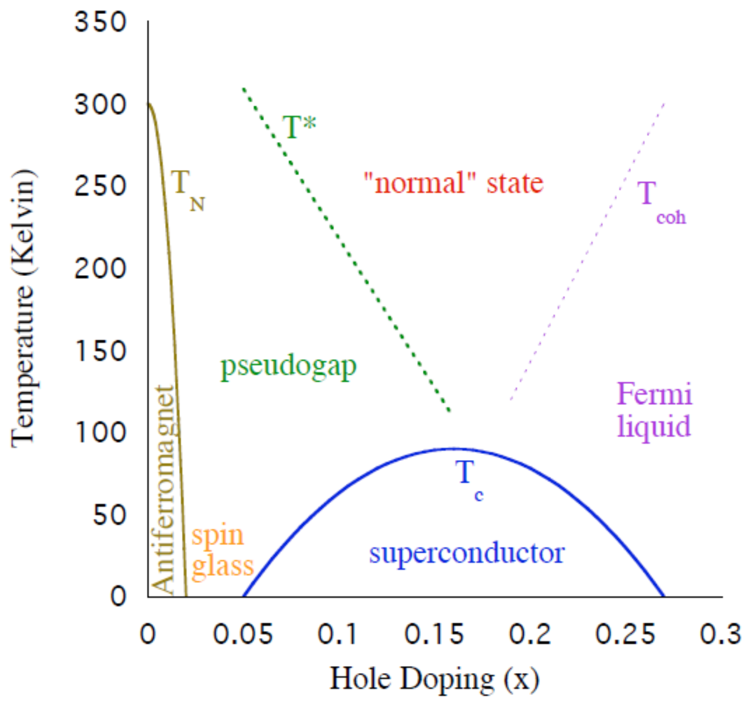



Σχήμα 1.5: Το διάγραμμα φάσεων του νερού. Οι διαδρομές A και B στο διάγραμμα περνάνε από ένα όριο μιας φάσης σε μια άλλη, ενώ το C όχι. Η διαδρομή A περιλαμβάνει αλλαγή σε κάποια συμμετρία του συστήματος, ενώ τα B και C όχι. (Πηγή: [8])

σότερες περιπτώσεις έχει κυματοσυνάρτηση $d_{x^2-y^2}$ συμμετρίας. Η αντισιδηρομαγνητική φάση μονωτή συνήθως εξαφανίζεται πριν φτάσουμε στην υπεραγωγιμότητα και δίνει τη θέση της στη μαγνητική γυαλιού σπιν,όπως λέγεται, φάση που μπορεί να συνυπάρχει με την υπεραγωγιμότητα. Ίσως η πιο περίεργη, η φάση του ψευδοκενού, που χαρακτηρίζεται από καταπίεση της πυκνότητας ηλεκτρονίων κοντά στο επίπεδο Fermi. Διάφορες πειραματικές υπογραφές της φάσης αυτής εμφανίζονται όταν η θερμοκρασία μειώνεται κάτω από την $T_c$. Μέσα στα όρια της φάσης αυτής εμφανίζεται και άλλες περίεργες φάσεις. Η πλήρη κατανόηση της φάσης ψευδοκενού θεωρείται σημαντική για τη κατανόηση του μηχανισμού της υπεραγωγιμότητας στα οξείδια του χαλκού. Δεν υπάρχει καμία βεβαιότητα για τη φάση αυτή, αλλά σε αναλογία με τα διαγράμματα φάσης των βαρέων φερμιονίων η σχέση φάσης ψευδοκενού και της υπεραγώγιμης φαίνεται να είναι ανταγωνιστική.

Καταστάσεις τάξεως: Μια μακροσκοπική κατάσταση του συστήματος στην οποία εμφανίζεται τάξη σε ένα φυσικό μέγεθος που δεν υπήρχε στην κανονική κατάσταση ονομάζεται κατάσταση τάξης. Τα δύο βασικά γνωρίσματα των καταστάσεων τάξης είναι πρώτων η τάξη μακράς εμβέλειας(long range order) που γίνεται παρατηρήσιμη σε μεγάλη κλίμακα και δεύτερων το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετριών που εμφανίζονται κατά την κατάσταση αταξίας. Στις καταστάσεις αυτές το σύστημα παύει να παραμένει αναλλοίωτο κάτω από κάποιους μετασχηματισμούς συμμετρίας. Οι βασικοί μετασχηματισμοί συμμετρίας είναι:

- συμμετρία μεταφοράς στον χώρο
- συμμετρία περιστροφής στον χώρο
- συμμετρίες που σχετίζονται με τη κρυσταλλική δομή του πλέγματος
- συμμετρία αντιστροφής του χρόνου




Σχήμα 1.6: Μια σχηματική αναπαράσταση θερμοκρασίας-πυκνότητας(doped) οπών σε ένα τυπικό διάγραμμα φάσης για έναν υπεραγωγό υψηλών θερμοκρασιών. Οι συνεχής γραμμές αναπαριστούν κανονικές θερμοδυναμικές μεταβάσεις, ενώ οι διακεκομμένες μίξη συμπεριφορών και μεταβάσεων. Μερικές από τις φάσεις που βλέπουμε είναι Antiferromagnet-αντισιδηρομαγνητικός μονωτής , d-SC $d_{x^2-y^2}$ συμμετρίας υπεραγωγιμότητα , normal state-΄κανονικό΄ μέταλλο , Fermi Liquid-υγρό Fermi , Pseudogap-ψευδοκενό , Spin glass-γυαλί σπιν και σε κάποιες περιοχές υπάρχουν ενδεχομένως και άλλες όπως εικάζεται στη φάση του ψευδοκενού να υπάρχουν κύματα πυκνότητας φορτίου ή ταλαντευόμενη υπεραγωγιμότητα κτλπ. $T_N$ =θερμοκρασία Neel. (Πηγή: M. R. Norman, "High Temperature Superconductivity – Magnetic Mechanisms". arXiv, October 2006)

- συμμετρία βαθμίδας, για γενικευμένα φορτία κυρίως

Παράμετρος τάξης: Οι παράμετροι τάξης 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. Είναι δηλαδή ένα μεγέθους που θα εμπεριέχει και θα κωδικοποιεί την πληροφορία της μετάβασης. Η ποσότητα αυτή μπορεί να είναι διάνυσμα ή ακόμα και μια κυματοσυνάρτηση και ονομάζεται παράμετρος τάξης. 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 αυτή φάση. Όταν δύο ή περισσότερες παράμετροι τάξης κάποιων φάσεων είναι μη μηδενικές για συγκεκριμένο σημείο του διαγράμματος φάσης, θα έχουμε συνύπαρξη των φάσεων αυτών στο υλικό. Σύμφωνα με την κατηγοριοποίηση του Ehrenfest αν η παράμετρος τάξης είναι ασυνεχής στο σημείο μετάβασης τότε πρόκειται για μετάβαση πρώτης τάξης. Σε πρώτης τάξης μπορούμε να έχουμε συνύπαρξη φάσεων στις κρίσιμες τιμές των παραμέτρων. Αν όμως η παράμετρος είναι συνεχής στο σημείο της μετάβασης με ασυνεχή πρώτη παράγωγο, τότε έχουμε μετάβαση δεύτερης τάξης κ.τ.λ. Στις περιπτώσεις αυτές δεν είναι δυνατή η συνύπαρξη φάσεων στις κρίσιμες τιμές των παραμέτρων. Επιπλέον κατά την μετάβαση πρώτης τάξης η παράμετρος τάξης είναι ασυνεχής στο σημείο μετάβασης ενώ κατά την μετάβαση δεύτερης τάξης κατευθύνεται με συνεχή τρόπο στο μηδέν χωρίς συνύπαρξη φάσεων, τυπικά διαγράμματα τέτοιων μεταβάσεων στο Σχ.1.7. Τελικά η παράμετρο τάξης είναι ένα είδος μέτρησης της τάξης του συστήματος καθώς κάτω από τη θερμοκρασία μετάβασης εμφανίζεται μια μεγαλύτερη οργάνωση του συστήματος που δεν ήταν παρούσα στις υψηλότερες θερμοκρασίες λόγο ισχυρών θερμικών ταλαντώσεων.

Η απλούστερη φαινομενολογική θεωρία μέσου πεδίου για περιγραφή μιας μετάβασης φάσης γίνεται εισάγοντας μια παράμετρο τάξης και υποθέτοντας πως κοντά στο κρίσιμο σημείο που η ελεύθερη ενέργεια κατά Gibbs μπορεί να αναπτυχθεί ως προς αυτή τη παράμετρο.[12] Η απαίτηση ότι η G(h) δίνει ελάχιστο μας επιτρέπει να βρούμε τους κρίσιμους δείκτες που ορίζουν τη συμπεριφορά των θερμοδυναμικών παραμέτρων κοντά στο κρίσιμο σημείο.

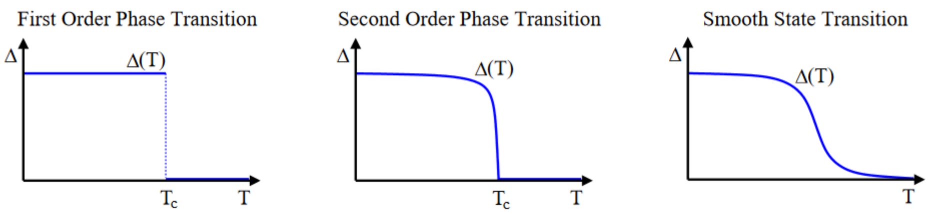
Με τη χρήση των παραμέτρων τάξης μπορούμε επίσης να χωρίσουμε τις μεταβάσεις σε δύο κατηγορίες :

- Μεταβάσεις χωρίς παράμετρο τάξης όπου οι ομάδες συμμετρίας κάθε μιας από της δύο καταστάσεις είναι τέτοιες που καμία δεν περιλαμβάνεται αποκλειστικά στην άλλη, είναι πάντα 1ης τάξης μετάβασης κατά Ehrenfest.

- Μεταβάσεις όπου μια παράμετρο τάξης είναι δυνατόν να οριστεί, και για την οποία η ομάδα συμμετρίας της λιγότερο συμμετρικής φάσης είναι υποομάδα της ομάδας συμμετρίας της ποιο συμμετρικής φάσης. Εάν η παράμετρο τάξης είναι ασυνεχής κατά την μετάβαση, τότε έχω 1ης τάξης μετάβαση. Διαφορετικά εάν είναι συνεχή κατά τη μετάβαση έχω 2ης τάξης μετάβαση.

Στην εργασία αυτή θα ασχοληθούμε αποκλειστικά με τη δεύτερη κατηγορία μεταβάσεων.

[12] Το να συμπεριλάβει τις ταλαντώσεις σε μια θεωρία μέσου πεδίου είναι καινοτομία της GL που επιτυγχάνεται προσθέτοντας στην ελεύθερη ενέργεια τους απλούστερους όρους κλίσης.




Σχήμα 1.7: Θερμοκρασιακή εξέλιξη της κατάστασης ενός συστήματος με παράμετρος τάξης Δ(T). Από αριστερά προς τα δεξιά έχω :1) Μετάβαση πρώτης τάξης: ασυνεχή αλλαγή της Δ στην θερμοκρασία μετάβασης($T_c$), έχω λανθάνουσα θερμότητα λόγο της διαφοράς στην εντροπία των δύο καταστάσεων.Παραδείγματα τέτοιων μεταβάσεων είναι στερεό $\longleftrightarrow$ υγρό, υγρό $\longleftrightarrow$ αέριο κάτω από το κρίσιμο σημείο. 2)Μετάβαση δεύτερης τάξης: συνεχής αλλαγή της Δ αλλά με ασυνέχεια στην παράγωγο στην θερμοκρασία μετάβασης($T_c$), δεν έχω λανθάνουσα θερμότητα. Παραδείγματα τέτοιων μεταβάσεων είναι υπερρευστότητα $\longleftrightarrow$ κανονικό υγρό, σιδηρομαγνητισμό $\longleftrightarrow$ παραμαγνητισμό. 3)Ομαλή μετάβαση κατάστασης: συνεχής αλλαγή της Δ χωρίς κρίσιμη θερμοκρασία. Παραδείγματα τέτοιων μεταβάσεων είναι υγρό $\longleftrightarrow$ αέριο πάνω από το κρίσιμο σημείο, ατομικό αέριο $\longleftrightarrow$ πλάσμα. (Πηγή: Superfluid Neutrons in the Core of the Neutron Star in Cassiopeia A, arXiv:1110.5116v1 [astro-ph.HE] 24 Oct 2011)

## 1.4 Συμμετρίες

Μια σημαντική υπόνοια της συμμετρίας στη φυσική είναι η ύπαρξη νόμων διατήρησης. Για κάθε καθολική συνεχής συμμετρία (μεταφορά φυσικού συστήματος που δρα με τον ίδιο τρόπο παντού και σε όλους τους χρόνους) υπάρχει μια σχετικά με το χρόνο ανεξάρτητη ποσότητα, ένα διατηρούμενο φορτίο(με την ευρεία έννοια). Αυτή η σύνδεση έγινε το 1918 από την Emmy Noether που απέδειξε το διάσημο θεώρημα που σχετίζει τη συμμετρία με τους νόμους διατήρησης[13]. Νωρίτερα στους μετασχηματισμούς συμμετρίας είδαμε κάποια παραδείγματα των βασικών συμμετριών που συναντάμε. Πιο αυστηρά τώρα, ένα σύστημα έχει μια συγκεκριμένη συμμετρία, εάν η Χαμιλτονιανή που το περιγράφει είναι αναλλοίωτη στους μετασχηματισμούς που σχετίζονται με τα στοιχεία μιας ομάδας συμμετρίας. Μία ομάδα συμμετρίας είναι μια συλλογή από στοιχεία και ένα τελεστή που τα συνδυάζει όλα και ακολουθεί ένα σύνολο κανόνων. Μια διακριτή συμμετρία αναφέρεται σε μια ομάδα συμμετρίας με μετρήσιμα στοιχεία όπως τη περιστροφική συμμετρία σε ένα κύβο. Μια συνεχής συμμετρία έχει ένα μη αριθμήσιμο συνεχές από στοιχεία, όπως η περιστροφική συμμετρία σε μια σφαίρα. Ένα σύστημα έχει καθολική συμμετρία εάν είναι αναλλοίωτο κάτω από στοιχεία συμμετρίας της ομάδας εάν εφαρμόζοντε σε όλα τα σημεία του σύστημα μας. Τέλος, μία τοπική συμμετρία εφαρμόζεται στη Χαμιλτονιανή εάν δεν αλλάζει μετά απο συμμετρικούς τελεστές που εφαρμόζονται σε διαφορετικά σημεία του χώρου. Παράδειγμα μιας τέτοιας συμμετρίας είναι η συμμετρία βαθμίδας της υπερα-

[13]Βέβαια μιλώντας εδώ για συνεχής συμμετρίες καθώς στις διακριτές δεν έχουμε διατηρούμενο μέγεθος

γωγιμότητας. Οι συμμετρίες βαθμίδας[14] πρωτοεμφανίστηκαν στις εξισώσεις Maxwell. Όπου τα παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη είναι το ηλεκτρικό και μαγνητικό πεδίο E και B. Σήμερα πιστεύουμε πως η καθολικές συμμετρίες είναι αφύσικες, και υπονοούν δυνάμεις από απόσταση. Πιστεύουμε δηλαδή, πως οι θεμελιώδης συμμετρίες είναι τοπικές συμμετρίες βαθμίδας. Οι καθολικές συμμετρίες είτε όλες σπάνε(ισοτιμία-parity, συμμετρία αντιστροφής χρόνου-time reversal invariance και συμμετρία φορτίου) είτε προσεγγίζονται (όπως π.χ. isotopic spin invariance) είτε είναι απομεινάρια αυθόρμητου σπάσιμου συμμετρίας τοπικών συμμετριών.

### 1.4.1 Σπάσιμο συμμετρίας

Για τη δική μας μελέτη μας ενδιαφέρει το Αυθόρμητο[15] Σπάσιμο Συμμετρίας [16]. Το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας αφορά συστήματα σε ισορροπία που στα πλαίσια μιας μετάβασης είναι δυνατό να σπάσει μια ή περισσότερες συμμετρίες του συστήματος. Σε συστήματα με άπειρο αριθμό βαθμών ελευθερίας ένας δεύτερος ρυθμός είναι πιθανός, όπου η θεμελιώδης κατάσταση είναι ασυμμετρική. Αυτό το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας είναι υπεύθυνο για την ύπαρξη κρυστάλλων(σπάει η μεταφορική αμεταβλητότητα-translational invariance), μαγνητισμού (σπάει η περιστροφική αμεταβλητότητα-rotational invariance), υπεραγωγιμότητας(όπου σπάει η αμεταβλητότητα φάσης-phase invariance των φορτισμένων σωματιδίων) η κατασκευή της ηλεκτρασθενής θεωρίας και πολλά άλλα. Στην πραγματικότητα το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας σε καθολικές ή τοπικές συμμετρίες βαθμίδας(gauge symmetries) είναι ένα επαναλαμβανόμενο θέμα στη σύγχρονη θεωρητική φυσική. Σε κάθε σπασμένη καθολική συμμετρία υπάρχουν ταλαντώσεις με πολύ χαμηλή ενέργεια, όπου εμφανίζονται ως άμαζα σωματίδια. Παράδειγμα είναι τα ηχητικά κύματα στα στερεά, τα κύμματα σπιν στους μαγνήτες και τα πιόνια στη πυρηνική φυσική. Σχετισμένο με το σπάσιμο συμμετρίας είναι και η επαναφορά της συμμετρίας αν αυξήσουμε τη θερμοκρασία ενός συστήματος με σπασμένη συμμετρία τείνει να επανέρχεται δηλαδή στη συμμετρία του σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες. Μια τέτοια αλλαγή αποτελεί αλλαγή φάσης. Πρακτικά στο σπάσιμο συμμετρίας καμία κατεύθυνση δε φαίνεται να ξεχωρίζει. Στην χαμηλή όμως θερμοκρασία το σημείο ισορροπίας είναι είτε αριστερά στο διάγραμμα είτε δεξιά. Αυτό σημαίνει πως για παράδειγμα στο σύστημα μαγνητικά άτομα μπορούν οι μαγνήτες να δείχνουν είτε προς τη μια είτε προς την άλλη κατεύθυνση. Η ελευθερία αυτή είναι αυτό που ονομάζουμε σπάσιμο συμμετρίας (symmetry breaking) που εν προκειμένω πρόκειται για περιστροφική συμμετρία. Σχηματικά το γενικό ενεργειακό διάγραμμα σε τέτοιες περιπτώσεις μοιάζει όπως το Σχ. 1.8.

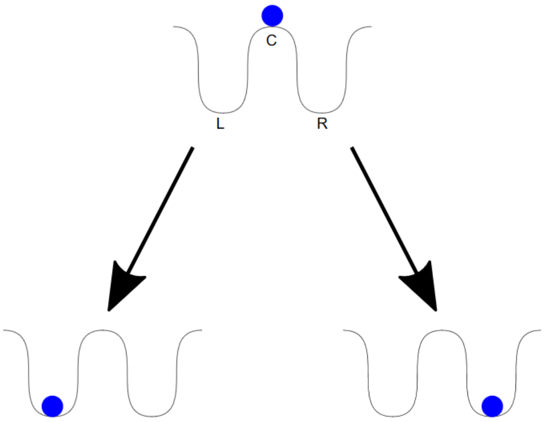
Κάποια συχνά παραδείγματα τέτοιων περιπτώσεων:

- Η ομοιογένεια και η ισοτροπία του χώρου σπάνε όταν περνάμε από υγρή σε στερεά φάση.

[14] Ένα απλό παράδειγμα μιας συμμετρίας βαθμίδας σε ένα ηλεκτρικό κύκλωμα ένα σημείο ορίζετε ως γή και θεωρείται να έχει μηδέν volts. Ωστόσο επειδή όλες οι μετρήσεις αφορούν συγκριτικές διαφορές είναι πιθανό η γη μας να είναι στα 40.000 Volts, και όλα τα άλλα να ορίζονται μέσο αυτού. Αυτή η χαλαρότητα στη περιγραφή του ηλεκτρισμού είναι ένα παράδειγμα βαθμωτής συμμετρίας(gauge symmetry).

[15] Το λέμε αυθόρμητο γιατί πραγματοποιείται απουσία εξωτερικών πεδίων.

[16] Σπάσιμο συμμετρίας μπορεί να προκύψει και διαφορετικά από ότι θα περιγράψουμε εδώ, όπως π.χ. με μέσω υδροδυναμικών ασταθειών




Σχήμα 1.8: Μια μπάλα αρχικά βρίσκεται στην κορυφή της κεντρικής κορυφής (σημείο C). Σε αυτή τη θέση είναι σε ασταθής ισορροπία: δηλαδή μια μικρή διαταραχή θα την κάνει να πέσει σε ένα από τα δύο σταθερά πηγάδια L ή R. Επιπλέον αν η κεντρική κορυφή είναι συμμετρική δεν υπάρχει λόγος για την μπάλα να προτιμήσει τη μια πλευρά έναντι της άλλης, οπότε η τελική που θα επιλεχθεί τυχαία(αυθόρμητα) θα οδηγήσει σε μη συμμετρική τελική κατάσταση. (Πηγή: wikipedia:Symmetry breaking)

- Η ομοιογένεια του χώρου σπάει κατά τη σιδηρομαγνητική μετάβαση, όπου όλες οι κατευθύνσεις δεν είναι ισοδύναμες εφόσον οι μαγνητικές ροπές επιλέγουν μια κατεύθυνση στο χώρο. Πάω δηλαδή από παραμαγνητική κατάσταση σε σιδηρομαγνητική.

- Η συμμετρία του χρόνο σπάει όταν οι εξισώσεις που περιγράφουν ένα σύστημα δεν παραμένουν αναλλοίωτες στο μετασχηματισμό $t = -t$ , με κλασικό παράδειγμα εδώ να αποτελούν οι σιδηρομαγνήτες.

- Πέραν από τις κλασικές συμμετρίες είναι δυνατόν να σπάσουν και οι συμμετρίες βαθμίδας που αντιστοιχούν σε γενικευμένα φορτία. Παράδειγμα συμμετρίας βαθμίδας αποτελεί η διατήρηση του ηλεκτρικού φορτίου στη κβαντομηχανική. Στις αλληλεπιδράσεις της Χαμιλτονιανής έχουμε μια κυματοσυνάρτηση επί τη συζυγή της $F^*F$ = πυκνότητα. Από εκεί πηγάζει η ελευθερία στην επιλογή φάσης, αφού η φάση δε μας ενδιαφέρει και απαλείφεται στο γινόμενο.

- Στην περίπτωση της υπεραγωγιμότητας ο Landau ταυτοποίησε μια παράμετρος τάξης σε μακροσκοπική κυματοσυνάρτηση με συγκεκριμένη φάση. Αυτή προκύπτει από την υπέρθεση όλων των κυματοσυναρτήσεων των φορέων και θα πρέπει να είναι σε φάση. Άρα πλέον δεν υπάρχει ελευθερία στην επιλογή φάσης σπάζοντας έτσι την συμμετρία βαθμίδος.

Συνέπειες Σπάσιμου συμμετρίας :

- Αλλαγή Φάσης(εξηγήθηκαν παραπάνω).

| Φαινόμενο | Φάση Υψηλού Τ | Φάση Χαμηλού Τ | Παράμετρος Τάξης | Διέγερση | Φαινόμενο | Ατέλειες |
|---|---|---|---|---|---|---|
| κρύσταλλος | υγρό | στερεό | $r_g$ | φωνόνια | ακαμψία | εξαθρώσεις, κρυσταλλικά όρια |
| σιδηρομαγνητι -σμός | παραμαγνητι -κή | σιδηρομαγνή -της | M | μαγνόνια | μόνημος μαγνητισμός | domain walls |
| αντισιδηρομα -γνητισμός | παραμαγνητι -κή | αντισιδηρο -μαγνήτης | M (υποπλέγμα) | μαγνόνια | 0 | domain walls |
| νηματική υγρός κρύσταλλος | υγρό | προσαρμοσμένο υγρό | S | κατευθυνόμενες ταλαντώσεις | διάφορα | 0 |
| σιδηροηλεκτρι -σμός | μη πολικός κρύσταλλος | πολικός κρύσταλλος | P | μαλακοί ρυθμοί | σιδηροηλεκτρική υστέρηση | domain walls |
| υπεραγωγιμό -τητα | κανονικό μέταλλο | υπεραγωγός | $\|\psi\|e^{i\phi}$ | - | υπεραγωγιμό -τητα | γραμμές ροής (flux lines) |

Πίνακας 1.1: Ιδιότητες των φάσεων σπασμένης συμμετρίας. Όπου $r_g$ είναι ο συντελεστής Fourier της πυκνότητας φορτίου που αντιστοιχεί σε μια χωρική συχνότητα ίση με το διάνυσμα πλέγματος G. Η μιγαδική συνάρτηση του υπεραγωγού $|\psi|e^{i\phi}$. Για την παράμετρο τάξης του νηματικού υγρού κρυστάλλου $S = \langle \frac{1}{2}(\cos^2(\theta) - 1) \rangle$. Η ηλεκτρική πόλωση P είναι η ορμή ενός ηλεκτρικού διπόλου ανά μονάδα όγκου.

- Ακαμψία: Έχοντας σπάσιμο συμμετρίας το σύστημα έχει ισχυρή ενεργειακή προτίμηση να μείνει στην κατάσταση σπασμένης συμμετρίας, και οι προσπάθειες να αλλάξει κατάσταση βρίσκουν αντίσταση. Αυτό εκφράζουμε με τον όρο ακαμψία για παράδειγμα οι κρύσταλλοι δεν λυγίζουν εύκολα και οι σιδηρομαγνήτες δείχνουν μόνιμο μαγνητισμό.

- Διεγέρσεις: Στο $T = 0$ το σύστημα έχει τέλεια τάξη. Σε πεπερασμένη θερμοκρασία αποδυναμώνεται από διεγέρσεις στη παράμετρο τάξης. Στους κρυστάλλους αυτές οι διεγέρσης λέγονται πλεγματικές ταλαντώσεις(φωνόνια). Ενώ στους σιδηρομαγνήτες το ανάλογο τα κύματα σπιν(μαγνόνια).

- Ατέλειες: Εάν η συμμετρία έχει σπάσει σε δύο διαφορετικά κομμάτια σε ένα μακροσκοπικό δείγμα, το σύνορο θα περιέχει ατέλειες όπως εξαθρώσεις σε ένα κρυσταλλικό πλέγμα ή μαγνητικές περιοχές(domain walls) σε ένα σιδηρομαγνήτη.

Μια σύνοψη όλων αυτών βλέπουμε στο Πίνακα 1.1. Να σημειώσουμε επίσης πως οι παράμετροι τάξης κατά αυτές τις αλλαγές φάσεων που περιλαμβάνουν κάποιο σπάσιμο συμμετρίας, αποτελούν μακράς επίδρασης(μη τοπικούς) παραμέτρους τάξης(Long Range Orders-LRO).

Το σπάσιμο συμμετρίας γενικά συνήθως καλύπτει τα παρακάτω σενάρια:

- Όταν η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος έχει λιγότερη συμμετρία από το ίδιο το σύστημα.

- Όταν η κατάσταση του συστήματος δεν δείχνει τις κρυμμένες δυναμικές των συμμετριών επειδή η συμμετρική κατάσταση είναι ασταθείς.(η ευστάθεια επιτυγχάνεται μέσω μιας τοπικής ασυμμετρίας)

- Καταστάσεις όπου οι θεωρητικές εξισώσεις έχουν συγκεκριμένες συμμετρίες, όμως οι λύσεις τους δεν έχουν(οι λεγόμενες κρυμμένες συμμετρίες).[17]

Να σημειώσουμε τέλος πως μια κανονική φάση και μια φάση σπασμένης συμμετρίας χωρίζονται από μια αλλαγή φάσης, με άλλα λόγια μοναδικότητες στην ελεύθερη ενέργεια. Λόγο αυτού φάση σπασμένης συμμετρίας δε μπορεί να βρεθεί μέσο διαταραχών(petrubation theory).

## 1.5 Η θεωρία μεσου πεδίου Ginzburg-Landau

Σαν παράδειγμα μια θεωρίας μέσου πεδίου θα δούμε σύντομα την προσέγγιση Ginzburg-Landau[18] της υπεραγωγιμότητας αναπτύχθηκε κάποια χρόνια πριν την μικροσκοπική BCS. Είναι ένα παράδειγμα της δύναμης της φαινομενολογίας ακόμα και με απουσία μικροσκοπικής περιγραφής, καθώς αν στη συγκεκριμένη θεώρία βάλουμε $e^* = 2e$ παίρνουμε ίδια αποτελέσματα με την BCS θεωρία. Στο πλαίσιο της συγκεκριμένης θεωρίας, η τοπική πυκνότητα των υπεραγώγιμων ηλεκτρονίων, που αποτελεί την παράμετρο τάξης του συστήματος, περιγράφεται από μία μιγαδική ψευδο-κυματοσυνάρτηση $\psi(r)$. Η συγκεκριμένη θεωρία αποτελεί στην πραγματικότητα ένα ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος ως προς την παράμετρο $\psi(r)$[19] και για τον λόγο αυτό η εγκυρότητα της περιορίζεται κοντά στη θερμοκρασία μετάβασης στην υπεραγώγιμη φάση. Το ανάπτυγμα έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$f_s = f_{n0} + a|\psi(r)|^2 + \frac{b}{2}|\psi(r)|^4 + \frac{1}{2m^*}|(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e^*}{c}A)\psi(r)|^2 + \frac{h^2}{8\pi} \tag{1.13}$$

όπου με $f_{n0}$ εννοούμε την πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας του συστήματος στην κανονική φάση, με $e^*$ και $m^*$ τις ενεργές τιμές φορτίου και μάζας, $A$ το διανυσματικό μαγνητικό δυναμικό και $h$ το μαγνητικό πεδίο. Χωρίς ηλεκτρομαγνητικό πεδίο έχουμε την απλοποιημένη μορφή :

$$f_s = f_{n0} + a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 \tag{1.14}$$

Η τιμή του $\psi$ αντιστοιχεί σε ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας κατά την ισορροπία. Αναλόγως με της τιμές των $a, b$(που είναι συναρτήσεις της θερμοκρασίας) καθορίζονται και οι τιμές του $\psi$ για ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας. Συνήθως για τη μελέτη μη ομογενών υπεραγώγιμων φάσεων σε ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο επιτελούμε χωρική ολοκλήρωση ως προς την παράμετρο τάξης $\psi$ και το διανυσματικό δυναμικό $A(r)$ στη εξίσωση (1.13), με στόχο την ελαχιστοποίηση του συναρτησιακού της ελεύθερης ενέργειας. Από αυτή τη διαδικασία

[17]Ένας τρόπος που κρύβεται μια συμμετρία είναι το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας. Εδώ οι νόμοι της φυσικής είναι συμμετρικοί αλλά η κατάσταση του συστήματος δεν είναι. Τέτοια παραδείγματα συμβαίνουν και στη κλασική φυσική όπως στη τροχιά της γης που είναι λύση των εξισώσεων Νεύτωνα που δεν είναι αμετάβλητες στη περιστροφή(rotationally invariant), παρότι οι εξισώσεις είναι. Σαν αποτέλεσμα, για έναν παρατηρητή του ηλιακού συστήματος, ο αμετάβλητος στη περιστροφή(rotational invariance) νόμος της βαρύτητας δε φαίνεται. Η συγκεκριμένη τροχιά επιλέχθηκε λόγο ασυμμετρικών αρχικών συνθηκών του πλανήτη.

[18]Που είναι μια ειδική περίπτωση της γενικότερης θεωρίας Landau-Lifshitz για μεταβάσεις δεύτερης τάξης.

[19]Την θεωρούμε αναλυτική συνάρτηση ως προς το $\psi(r)$ κοντά στη θερμοκρασία μετάβασης.

ορίζουμε και το αντίστοιχο μήκος διείσδυσης(peneteration depth λ) και το χαρακτηριστικό μήκος απόσβεσης μιας μικρής διαταραχής της υπεραγώγιμης πυκνότητας(ξ). Ο λόγος $\kappa = \frac{\lambda}{\xi}$ ονομάζεται παράμετρος GL. Ανάλογα με την τιμή της οι υπεραγωγοί χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες :

- $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Υπεραγωγοί τύπου I. Τα μαγνητικά πεδία απωθούνται τελείως από το εσωτερικό του υλικού. Υπάρχει ένα κρίσιμο πεδίο $H_c$, στο οποίο το σύστημα επιστρέφει στην κανονική κατάσταση μέσω μια μετάβασης 1ης τάξης. Βρίσκεται δε από τη σχέση $H_c = \sqrt{\frac{\mu_0 r^2}{u}}$ .
- $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Υπεραγωγοί τύπου II. Πάνω από ένα κρίσιμο πεδίο $H_{c1}$ τα μαγνητικά πεδία διεισδύουν στον υπεραγωγό χωρίς να τον καταστρέφουν δημιουργώντας τις λεγόμενες δίνες του Abrikosov. Πάνω από ένα δεύτερο πεδίο, $H_{c2}$, το σύστημα επιστρέφει στην κανονική κατάσταση μέσω μια μετάβασης 2ης τάξης. Το κρίσημο πεδίο στο οποίο τα τροχιακά φαινόμενα καταστρέφουν τον υπεραγωγό είναι : $H_{c2} = \sqrt{\frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2}}$ , όπου $\Phi_0$ είναι το κβάντο της μαγνητικής ροής $\Phi_0 = \pi\hbar c / \mid e \mid$.

Με την παραπάνω διαδικασία, καταλήγουμε δηλαδή σε ένα σύνολο κρίσιμων εκθετών που καθορίζουν τη συμπεριφορά του συστήματος σε άμεση συσχέτιση με τις έννοιες της μετάβασης φάσης και της συμμετρίας. Οι εκθέτες αυτοί εξαρτώνται από την διάσταση του συστήματος, τη συμμετρία της παραμέτρου τάξης και την θεώρηση μικρής ή μεγάλης εμβέλειας των αλληλεπιδράσεων. Τέτοιες θεωρίες τύπου μέσου πεδίου[20] αποτελούν βασικό εργαλείο στη μελέτη των αλλαγών φάσεων, εδώ μπορούμε να λάβουμε υπόψιν και θερμικές ταλαντώσεις κάτι που δεν κάνουν οι κλασικές θεωρίες πεδίου.

## 1.6 Θεωρία απόκρισης και πειράματα

Εδώ θα κάνουμε μια σύντομη αναφορά στις βασικές ιδέες και τεχνικές της πειραματικής φυσικής συμπυκνωμένης ύλης. Οι συναρτήσεις συσχέτισης[21] μας δίνουν μια γέφυρα μεταξύ του θεωρητικού φορμαλισμού και των συγκεκριμένων πειραμάτων. Συγκεκριμένα πως οι αναποκρίσεις ενός συστήματος πολλών σωμάτων σε διάφορες ηλεκτρομαγνητικές διαταραχές μπορεί να περιγραφή με συναρτήσεις συσχέτισης. Παρότι δεν περιγράφει όλες της μεθόδους για λόγους απλοποίησης, θα χωρίσουμε της πειραματικές μεθόδους σε 3 βασικές κατηγορίες όσο αναφορά τη τεχνική:

- πειράματα που εξάγουν τους θερμοδυναμικούς συντελεστές
- μεταφορικά πειράματα
- φασματοσκοπία

[20] Εφαρμογές τέτοιων θεωριών μπορούμε να βρούμε σε πλήθος βιβλιογραφίας, όπως ενδεικτικά στα [50],[37] και [28].

[21] Για περισσότερα μπορεί κάποιος να ανατρέξει στο [35].

Τα μεταφορικά και τα φασματοσκοπικοί μέθοδοι μας δίνουν εικόνα και για τα στατικά αλλά και τα δυναμικά χαρακτηριστικά του προβλήματος. Κάποια κοινά χαρακτηριστικά είναι:

- Η αλληλεπίδραση ενός συστήματος πολλών σωμάτων με το περιβάλλον γίνεται σχεδόν αποκλειστικά με ηλεκτρομαγνητικές δυνάμης(και με θερμοκρασιακές αλλαγές επίσης).

- Οπότε τα περισσότερα πειράματα θέτουν το σύστημα σε μια εξωτερική ηλεκτρομαγνητική διαταραχή[22] και μετά μετράνε την απόκριση με ένα κατάλληλο ανιχνευτή ή μετρητική συσκευή.

- Η συνάρτηση απόκρισης του συστήματος παίζει καθοριστικό ρόλο στο διάλογο μεταξύ πειράματος και θεωρίας. Πειραματικά μετράμε συσχετίζοντας την είσοδο Φ με την απόκριση Χ. Η θεωρία προσπαθεί να προβλέψει την συμπεριφορά απόκρισης, ιδανικά με τρόπου που να συνδέετε με της πειραματικές παρατηρήσεις.

Στη πραγματικότητα και οι συνηθισμένες συναρτήσεις Green αποτελούν συναρτήσεις γραμμικής απόκρισης ή συναρτήσεις συσχετισμού όπως επίσης λέγονται και συνδέουν μια προγενέστερη με μια μεταγενέστερη κατάσταση.

## 1.6.1 Πειραματικές μέθοδοι

### Θερμοδυναμικά πειράματα

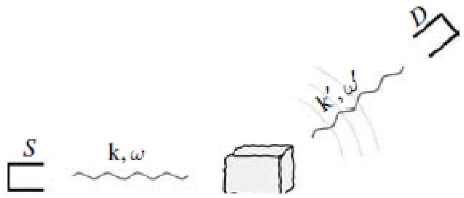
Οι θερμοδυναμικές ιδιότητες ενός συστήματος μπορούν να βρεθούν με ένα πείραμα όπου κυρίως ψάχνουμε την ειδική θερμότητα, το ρυθμό αλλαγής της εσωτερικής ενέργειας κάτω από αλλαγή θερμοκρασίας, τη μαγνητική επιδεκτικότητα, την αλλαγή της μαγνήτισης σε απόκριση με το στατικό μαγνητικό πεδίο κ.α. Αυστηρώς μιλώντας η μαγνητική διαπερατότητα είναι τανυστική ποσότητα. Οι συναρτήσεις θερμικής απόκρισης είναι αρκετά καθολικές. Ωστόσο η καθολικότητα των θερμοδυναμικών δεδομένων επίσης υπονοεί περιορισμούς καθώς ούτε έχουμε στοιχεία για χωρικές διακυμάνσεις ούτε και για τη δυναμική του συστήματος. Μερικά παραδείγματα αποτελούν η διαφορική θερμική ανάλυση (DTA), μεταφορικά πειράματα αλλά και μέτρηση μεταφοράς ηλεκτρισμού όπου βάζω κάποιες επαφές και θέτω υπό τάση το σύστημα μου και μετράω το ρεύμα η άλλα.

### Πειράματα φασματοσκοπίας

Η γενική διάταξη φαίνεται στο 1.9. Μία ακτίνα σωματιδίων είτε έχουν μάζα(ηλεκτρόνια, νετρόνια, μιόνια, άτομα κ.α.), είτε είναι κβάντα ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, δημιουργούνται από την πηγή μας και οδηγούνται στο δείγμα. Η κινητική πληροφορία της ακτίνας της πηγής δίνεται από τη σχέση $(k, \omega(k))$. Τα σωματίδια της πηγής αλληλεπιδρούν με συστατικά Χ του δείγματος και δημιουργούν μια δευτερεύουσα ακτίνα από σκεδασμένα σωματίδια σε σύμβολα

$$p(k, \omega(k)) + X(K, \omega(K)) \to p + X \tag{1.15}$$

[22] Ο όρος διαταραχή χρησιμοποιείται καθώς κατά κανόνα η κατάλληλες εξωτερικές δυνάμεις είναι πολύ ποιο ασθενής από τις εσωτερικές συσχετίσεις του συστήματος.




Σχήμα 1.9: Βασική διάταξη ενός πειράματος φασματοσκοπίας.

σημειώνουμε εδώ πως ενδέχεται η σκεδαζόμενη δέσμη να μην αποτελείται από τα ίδια με αυτά που προσέκρουσαν αρχικά. Αλλά συνήθως έχουμε σκεδάσεις ελαστικές(π.χ.ακτίνες ) ή ανελαστικές(σκέδαση νετρονίων σε φωτονικές διεγέρσεις). Σε κάθε περίπτωση η πληροφορία της διαδικασίας σκέδασης περιέχεται στην κατανομή ορμών των σκεδαζόμενων σωματιδίων και μετρώνται με έναν ανιχνευτή. Από αυτά προσπαθούμε να εξάγουμε ιδιότητες $\Omega(K)$, K των καταστάσεων στο υλικό μας, χρησιμοποιώντας τους γνωστούς νόμος διατήρησης στις διαφορές $\Delta K, \Delta\Omega$. Ωστόσο παρότι φαίνεται μια αρκετά άμεση και εύκολη συνταγή στη πράξη τα πράγματα ενδέχεται να είναι αρκετά πιό περίπλοκα. Αν η δέσμη περιέχει φορτισμένα σωματίδια ενδέχεται να έχουμε πολύ ισχυρές αλληλεπιδράσεις. Για παράδειγμα μπορεί μια δέσμη ηλεκτρονίων να αλληλεπιδράσει ισχυρά με την επιφανειακή κατάσταση του δείγματος και να μη περάσει στο εσωτερικό ή το πλάτος σκέδασης να είναι αποτέλεσμα μια σύνθετης διαδικασίας υψηλών όρων παραμέτρων αλληλεπίδρασης και λόγο αυτού δύσκολο να ερμηνευτεί. Παρά της δυσκολίες η φασματοσκοπία είναι μια από της πιο σημαντικές πηγές πειραματικών δεδομένων στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης. Κάποιες σημαντικές γενικές υποκατηγορίες είναι οι ακόλουθες:

- Φασματοσκοπία Raman: Ανελαστική κρούση ορατού φωτός για διερεύνηση οπτικών φωνονίων(η και μαγνονίων, πλασμονίων και άλλων ηλεκτρικών διεγέρσεων), χρησιμοποιώντας τη γνώση για την κορυφή Raman και τη κορυφή Rayleigh.

- Υπέρυθρη Φασματοσκοπία: Σκέδαση φωτός στο υπέρυθρο φάσμα χρησιμοποιήτε για ρυθμούς ταλάντωσης σε πολυκρυσταλλικά στερεά και για διάκενα σε ημιαγωγούς.

- Κρυσταλλογραφία ακτίνων X(XRD): Μετρώντας το μοτίβο ελαστικής σκέδασης ακτίνων X σε ένα ιοντικό πλέγμα για να καταλάβουμε την εσωτερική κρυσταλλική δομή. Αυτή η τεχνική υπάρχει απο το 1913.

- Ακτίνες X/Ηλεκτρονιακή Φασματοσκοπία: Ένας αριθμός τεχνικών ανήκουν σε αυτή τη κατηγορία και βασίζονται στις ενέργειες ιονισμού των ατομικών πυρήνων. Ένα παράδειγμα είναι η απορόφηση ακτίνων X.

- Φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων X: Μετράτε η ακτινοβολία που εκπέμπεται απο την επανασύνδεση ηλεκτρονίων σθένους με της οπές που δημιουργούνται απο τις ακτίνες X. Αυτή η τεχνική χρησιμοποιείται κυρίως σε χημική ανάλυση είτε για να παρατηρήσουμε ενδεχόμενες ατομικές ατέλειες, καθως μπορούμε να βρούμε το διαφορετικό φασματικό αποτύπομα αυτών των διαφορετικών ατόμων μέσα στο υλικό. Στη φασματοσκοπία φωτοεκπομπής(PES) εντοπίζονται τα ηλεκτρόνια σθένους. Μια πλήρη περιγραφή γνωστή ως Γωνιακή Φασματοσκοπία Φωτοεκπομπής (ARPES-Angle Resolved Photo-Emission Spectroscopy) είναι μια από της σημαντικότερες τεχνικές για ανάλυση των ενεργειακών ζωνών, όπου τόσο η κατεύθηνση όσο και η ενέργεια του εξερχόμενου ηλεκτρονίου μετρούνται.

- Σκέδαση Νετρονίων: Θερμικά νετρόνια σκεδάζονται ελαστικά ή ανελαστικά σε ένα στόχο. Όντας ηλεκτρικά ουδέτερα έχουμε μόνο ασθενής αλληλεπιδράσης(όπως μαγνητική λόγο του σπιν) με τα στερεό υπό εξέταση και γι αύτο μπορεί να διαπεράση πολύ βαθιά το υλικό μας. Μπορούμε να βρούμε και να αναλύσουμε χαμηλης ενέργειας διεγέρσης όπως συλλογικές(φωνόνια, μαγνόνια κ.α.) αλλά και κρυσταλλογραφικές πληροφορίες. Δυστηχώς η μέθοδος αυτή είναι αρκετά δαπανηρή γιατί η παραγωγή θερμικών νετρονίων δεν είναι εύκολη.

- Μαγνητική συντονισμός: Τοποθετούμε το δείγμα σε ένα σχεδόν στατικό μαγνητικό πεδίο ικανό να προκαλέσει μαγνητική πόλωση.(σε AC μαγνητικό πεδίο)

- Πυρηνικός μαγνητικός συντονισμός(NMR): Τα σπιν των πυρήνων του δείγματος πολώνονται. Προσπαθώ να πάρω πληροφορίες για τις μαγνητικές ιδιότητες των ηλεκτρονιακών καταστάσεων. Λόγο της αλληλεπίδρασης με το ηλεκτρονιακό σπιν το μαγνητικό πεδίο που βλέπουμε διαφέρει(Knight shift). Η ανάλυση της μετατόπισης αυτής μας δίνει πληροφορίες για της μαγνητικές ιδιότητες των ηλεκτρονίων σθένους.

- Υπάρχουν και άλλες φασματοσκοπικές τεχνικές που δε μας ενδιαφέρουν τόσο στο θέμα μας όπως φασματοσκοπία Mossbauer, σκέδαση μυονίων κτλπ.

### Άλλες πειραματικές τεχνικές

Κάποιες δε ταιριάζουν στις 3 κατηγορίες που ονομάσαμε. Κύριο παράδειγμα και χρήσιμο για την υπεραγωγιμότητα εδώ είναι το μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγος (STM) που αναπτύχθηκε τη δεκαετία του 1980 από τους Binnig και Rohrer και έδωσε μεγάλη ώθηση στη νανοτεχνολογία. Σε αυτή την τεχνική σαρώνουμε μια επιφάνεια και εκμεταλευόμενοι το φαινόμενο σύρραγγος μπορούμε να βγάλουμε συμπεράσματα για τη δομή του δείγματος. Η τεχνική IM STM (Spectroscopic Imaging-Scanning Tunneling Microscopy) είναι συμπληρωματική με την τεχνική APRES και βοηθάει στην απεικόνιση των ενεργειακών κβαντικών καταστάσεων στο πραγματικό χώρο(ενώ η APRES αφορά των χώρο ορμών(k-space) με ατομικής κλίμακας ανάλυση σε πολύ εκτεταμένες περιοχές του υλικού.

# Κεφάλαιο 2

# Κβαντικές καταστάσεις τάξης

## 2.1 Το πρόβλημα της συνύπαρξης

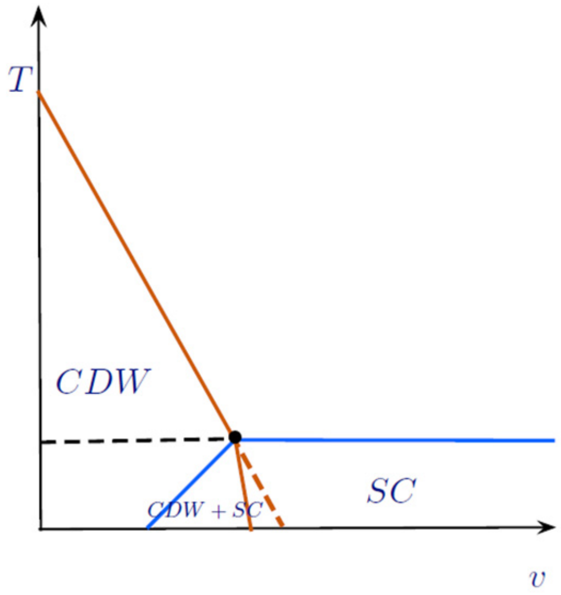
Τα συστήματα ισχυρά συσχετισμένων φορέων αποτελούν ένα ευρύ πεδίο μελέτης στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης, όπου η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των φορέων είναι συγκρίσιμη με την κινητική τους ενέργεια. Ο συνδυασμός ισχυρών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των φορέων σε ένα υλικό οδηγεί σε πλούσια φυσικά φαινόμενα. Στη φυσική και στις ιδιότητες των υλικών αυτών παίζουν ρόλο οι διάφορες κβαντικές καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας που συχνά συναντάμε στα διαγράμματα φάσεων. Κάποιες από αυτές που θα εξετάσουμε είναι διάφορες χωρικά διαμορφωμένες φάσης με σημαντικότερες σε αυτή την κατηγορία τα κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν.

Ένα βασικό ερώτημα είναι αν μπορούμε να απομονώσουμε κάποια κοινά βασικά χαρακτηριστικά τα οποία βρίσκονται πίσω από παρόμοια φαινομενολογία διαφορετικών υλικών και αν μπορούμε ποια είναι αυτά τα χαρακτηριστικά. Ποιοι είναι δηλαδή οι απαραίτητοι βαθμοί ελευθερίας που πρέπει να συμπεριληφθούν σε μια Χαμιλτονιανή περιγραφή. Εμείς προσεγγίζουμε αυτό το πρόβλημα μέσω του ανταγωνισμού και της συνύπαρξης διαφορετικών συμπυκνωμένων καταστάσεων που παρατηρούμε στα υλικά αυτά. Σε αυτή τη θεωρία του μοτίβου συνυπαρχόντων συμπυκνωμάτων, ένα μοτίβο αποτελείται από κβαντικές καταστάσεις τάξης που συνδέονται λόγο συμμετρίας. Με επίδραση εξωτερικών παραμέτρων όπως για παράδειγμα εφαρμογή μαγνητικού πεδίου το μοτίβο μπορεί να κάνει την εμφάνιση του ως μια νέα επαγόμενη ανομοιογενής φάση κατά την οποία οι παραπάνω καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας συνυπάρχουν και σχηματίζουν πολύπλοκες δομές. Για να περιγράψουμε θεωρητικά αυτές τις μεταβάσεις πρέπει να συμπεριληφθούν στην αρχική Χαμιλτονιανή του συστήματος όλες οι πιθανές συμπυκνωμένες φάσης(βαθμοί ελευθερίας) που ανήκουν στο μοτίβο. Τα μοτίβα συνύπαρξης που μελετήσαμε παρουσιάζονται αναλυτικά στο Κεφ.4 .

Μερικά σενάρια των ανταγωνιστικών παραμέτρων τάξης :

- Τη θεωρία του Landau για τις αλλαγές φάσεις όπου συνήθως ένας όρος είναι ο κυρίαρχος και οι άλλοι καταπιέζονται.

- Οι θερμοκρασίες μετάβασης των διαφορετικών φάσεων είναι εν γένει διαφορετικές.

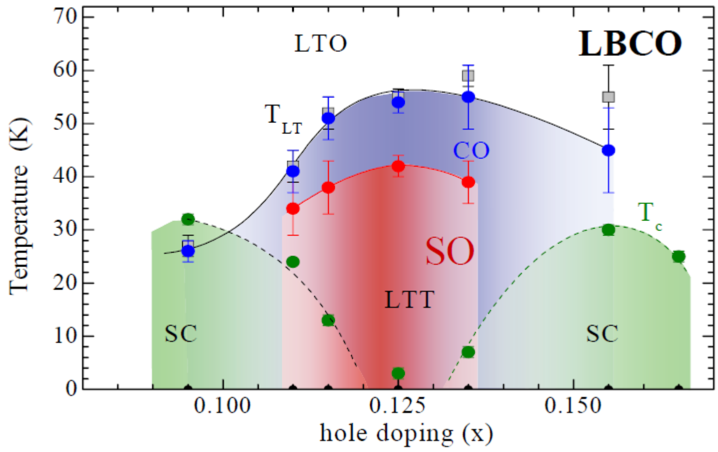



Σχήμα 2.1: Τυπικό Διάγραμμα Φάσης δύο ανταγωνιστικών όρων ενός υπεραγώγιμου(τύπου BCS)και ενός κύματος πυκνότητας φορτίου. Εδώ έχουμε αρκετά διαφορετικέ θερμοκρασίες μετάβασεις($T_c$), με μικρές περιοχές συνύπαρξης και θα μπορούσε να εμφανιστεί σε συστήματα τύπου $IT - TaS_2$ .(Πηγή: Eduardo Fradkin, "Intertwined Orders in High Temperature Superconductor", Lectures at the CIFAR Summer School 2015)

- Περιοχές όπου οι παράμετροι τάξης έχουν παρόμοια θερμοκρασία μετάβασης είναι ειδικές περιπτώσεις και απαιτούν ακριβή συναρμογή σε ένα πολλαπλό κρίσιμο σημείο.
- Περιπτώσεις όπου η ύπαρξη κάποιων φάσεων γεννά κάποιες άλλες δημιουργώντας ποιο σύνθετα συμπυκνώματα.
- Θέλουμε να δούμε ποιες συμμετρίες σπάνε τα μοτίβα που μελετάμε.

Σε ένα απλό σενάριο έχουμε έναν κυρίαρχο όρο, διαφορετικές θερμοκρασίες μετάβασης και μικρές περιοχές συνύπαρξης όπως βλέπουμε στο Σχ. 2.1. Βέβαια όπως είδαμε και στα διαγράμματα φάσης των υπεραγωγών τύπου 2(Σχ.1.6), στην πράξη έχουμε περισσότερους όρους και πολλές διαφορετικές περιοχές συνύπαρξης. Έτσι και εμείς θα μελετήσουμε περιπτώσεις με το λιγότερο τέσσερις παραμέτρους τάξης(Κεφ 4). Το γιατί συναντούμε πολλούς όρους παρόμοιας δυναμικότητας και μερικούς με κοντινές θερμοκρασίες μετάβασης, μας οδηγεί στην υπόθεση πως οι όροι αυτοί έχουν προέλευση από κοινό φυσικό φαινόμενο είτε είναι συνυφασμένοι(intertwined) όροι. Έτσι και η απλή υπόθεση πως ο αντισιδηρομαγνητισμός καταστρέφει την υπεραγωγιμότητα είναι μόνο η κορυφή του παγόβουνου καθώς έχουμε διάφορους όρους όπως κύματα πυκνότητας φορτίου, κύματα πυκνότητας σπιν, νηματικές παραμέτρους τάξης και άλλες πιθανές καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας που εμφανίζονται σε κοντινές θερμοκρασίες και για ένα μεγάλο φάσμα άλλων παραμέτρων του υλικού μας.

Ειδικά στην υπεραγωγιμότητα υψηλών θερμοκρασιών τα διαγράμματα φάσης μας δίνουν




Σχήμα 2.2: Διάγραμμα φάσης του $La_{2-x}Ba_xCuO_4$. Παρατηρούμε πως δεν υπάρχουν καλώς ορισμένες περιοχές μετάβασης φάσεων, αλλά φαίνεται να έχουμε διάφορες περιοχές συνύπαρξης φάσεων. M.Hucker et al (2009)

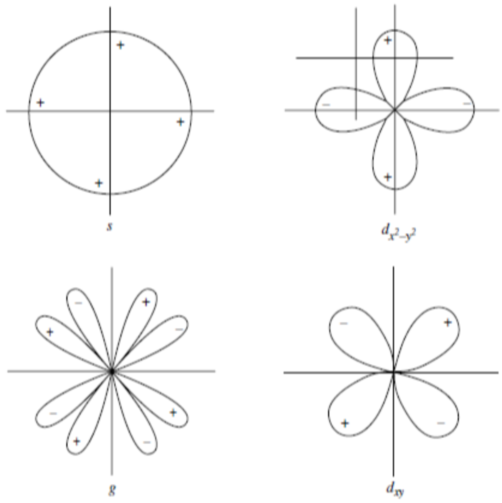
μια τέτοια εικόνα πολλών παραμέτρων Σχ. 2.2 Η γενικότερη πρόκληση θα ήταν να φτιάξουμε βέβαια μια γενική μικροσκοπική θεωρία ανταγωνισμού και συνύπαρξης των καταστάσεων τάξης, αλλά αυτό ξεφεύγει από τη παρούσα εργασία.

## 2.2 Παράγοντας δομής και Περιοδικότητα

Στην αναπαράσταση της χαμιλτονιανής μέσου-πεδίου, έχουν ληφθεί υπόψιν οι συμμετρίες που εμφανίζουν οι παράμετροι τάξης που μελετώνται. Για το λόγο αυτό, εισάγουμε τους παράγοντες δομής(form factors) στις εξισώσεις μας ώστε να κατευθύνουμε το σύστημα σε λύσεις με την συμμετρία που μας ενδιαφέρει. Συνήθως οι παράγοντες δομής για ηλεκτρόνια παίρνουν την ονομασία του τροχιακού που ανήκουν. Για παράδειγμα ένα ηλεκτρόνιο στο d τροχιακό ονομάζεται d-wave(2.3). Όπως αναφέραμε οι παράμετροι τάξης ακολουθούν κάποιας μορφής συμμετρία η οποία παρουσιάζεται στο σύστημα ενσωματωμένη στη δυναμική συνάρτηση που το περιγράφει. Η συμμετρία όμως έχει σημαντικό αντίκτυπο στις φυσικές ιδιότητες του συστήματος. Η εισαγωγή μίας συγκεκριμένης συμμετρίας στην παράμετρο τάξης, γίνεται μέσω του πολλαπλασιασμού της παραμέτρου τάξης με έναν παράγοντας δομής (Form Factor), ο οποίος θα μας πάει και σε σύστημα τετραγωνικής συμμετρίας. Οι παράγοντες δομής που χρησιμοποιούμε παρουσιάζονται ενδεικτικά τη μορφή $cos(k_x)+cos(k_y)$ δύο από τους βασικούς παράγοντες δομής παρουσιάζονται στα Σχ. 2.4, 2.5. Γενικά είναι τρισδιάστατες συναρτήσεις με παραμέτρους τα $k_x, k_y$

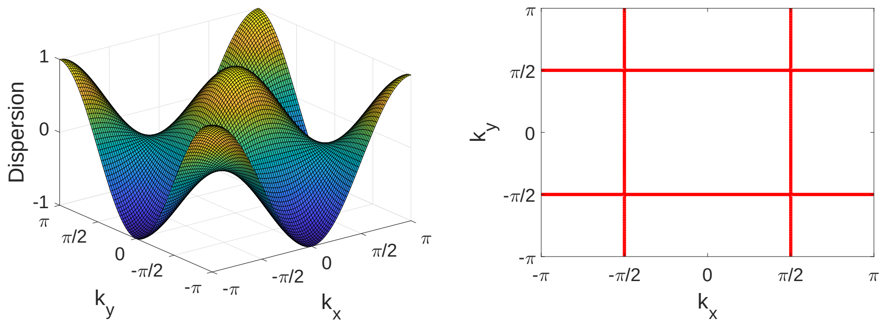
## 2.3 Επιφάνεια Fermi

Η επιφάνεια Fermi είναι μια επιφάνεια στο αντίστροφο χώρο(χώρος τον ορμών k-space) που οριοθετεί τις φερμιονικές κατειλημμένες καταστάσεις από τις μη κατειλημμένες σε μηδενι-




Σχήμα 2.3: Απεικόνιση συμμετριών που ακολουθούν τα διάφορα είδη τροχιακών που σχετίζονται με την συμμετρία του συστήματος για ένα τετραγωνικό πλέγμα. (ΠΗΓΗ : [26])

Σχήμα 2.4: Διαγράμματα για τον παράγοντα δομής anistotropic s-wave.



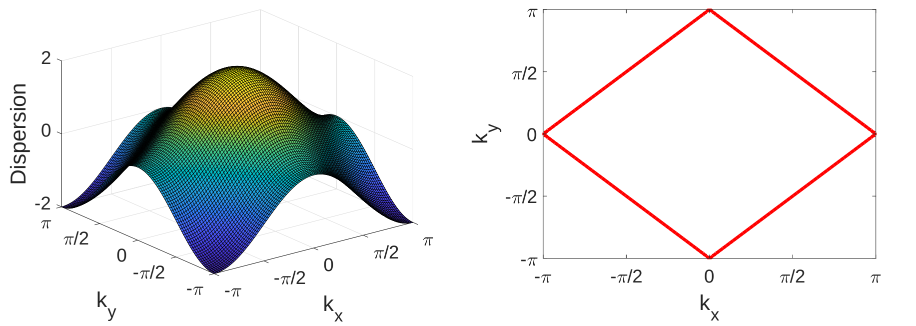

(α′) Παράγοντας δομής anisotropic s-wave στη πρώτη ζώνη Brillouin.

(β′) Με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο.

κές θερμοκρασίες. Η επιφάνεια Fermi είναι στο πυρήνα της κατανόησης μας για τη μεταλλική συμπεριφορά[1]. Στη πορεία όμως η σημαντικότητα της μεγάλωσε καθώς έγινε κατανοητή η επίδραση που το σχήμα της ενδέχεται να έχει στην ικανότητα τον ηλεκτρονίων να θωρακιστούν(screening) από κάποιες διαταραχές. Πλέον μας βοηθά στη κατανόηση φαινομένων όπως η γιγαντιαία μαγνητοαντίσταση(giant magnitoresistance) ή η υπεραγωγιμότητα. Πέραν από αυτό αποτελεί το πεδίο μάχης όπου διάφορες κβαντικές καταστάσεις ανταγωνίζονται να διαμορφώσουν το σχήμα της επιφάνειας αυτής, όπως για παράδειγμα ο ανταγωνισμός που φαίνεται να έχει ένα κύμα πυκνότητα φορτίου με μία υπεραγώγιμη φάση στη επιφάνεια του $YBa_2Cu_3O_{6,67}$ ([20]). Αυτή τη στιγμή διαθέτουμε αρκετά εργαλεία για να την υπολογίζουμε πειραματικά με κυρίαρχο τα τελευταία χρόνια τη μέθοδο APRES που αποκαλύπτει πέραν της επιφάνειας Fermi, τις διασπορές κάθε μπάντας(band dispertion) και πιθανές μετρήσεις

[1] [12]

Σχήμα 2.5: Διαγράμματα για τον παράγοντα δομής extended s-wave.




(α′) Παράγοντας δομής extended s-wave στη πρώτη ζώνη Brillouin.

(β′) Με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο.

πόλωσης του σπιν. Η σημαντικότητα του σχήματος της επιφάνειας Fermi συνοψίζεται στα παρακάτω

- Η αλληλεπίδραση της επιφάνειας Fermi στα όρια της ζώνης Brillouin.
- Η επίδραση στη θωράκιση των ηλεκτρονίων από διαταραχές.
- Η επίδραση στην αλληλεπίδραση φωνονίων-ηλεκτρονίων.
- Μελέτη κυμάτων πυκνότητας σπιν και άλλων διεγέρσεων του σπιν.
- Μελέτη των ταλαντώσεων Friedel.
- Μελέτη κυμάτων πυκνότητας φορτίου.
- Κατανόηση του φαινομένου της υπεραγωγιμότητας.
- Μελέτη ηλεκτρονιακών τοπολογικών μεταβάσεων.

Στην εργασία αυτή κάνουμε υπολογισμό της επιφάνειας Fermi στη πρώτη ζώνη Brillouin σε ένας πλήθος συμπυκνωμάτων από κβαντικές καταστάσεις τάξης(Κεφ 5,6,7,8).

## 2.4 Κινητικοί όροι και συμβατικός σιδηρομαγνητισμός

Πρόκειτα να χρησιμοποιήσουμε κάποιους κινητικούς όρους στη σπινορικά θεωρία μέσου πεδίου που εφαρμόζουμε(Κεφ 3), και στο μοντέλο μας φαίνονται μαθημάτικα σαν παράμετροι τάξης παρότι δεν είναι αντίστοιχοι με τα συμπυκνώματα που θα δούμε παρακάτω. Αυτοί είναι οι όροι Y, Q όπου ο Y εκφράζει την απαιτούμενη ενέργεια ώστε ένας φορέας να μεταπηδήσει στις ακριβώς γειτονικές του θέσης[2], ενώ ο Q για τις επόμενες γειτονικές θέσεις[3]. Η συνθήκη τέλειας συναρμογής ικανοποιείτε όταν ισχύει $Q = 0$, οπότε το σύστημα διαθέτει συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής. Επίσης σαν παραμέτρους τάξης έχουμε και του σιδηρομαγνητικούς όρου $S_{x,y,z}$, οι οποίοι μπορούν να περιγράψουν και ένα πεδίο Zeeman κατά τον αντίστοιχο άξονα.

[2] nearest neighbor hopping
[3] next-nearest neighbor hopping

## 2.5 Συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής

Ως κύμα πυκνότητας είναι ευρύτερα γνωστή η κατάσταση της συμπυκνωμένης ύλης όπου η διαμόρφωση της ηλεκτρονικής πυκνότητας μεταβάλλεται χωρίς να ακολουθεί τη συμμετρία του κρυστάλλου όπου δημιουργείται. Η ανομοιογενής αυτή κατάσταση μπορεί να σχετίζεται τόσο με το φορτίο όσο και το spin με αποτέλεσμα την αντίστοιχη διάκριση σε κύματα πυκνότητας φορτίου(ΚΠΦ)[4] και σπιν(ΚΠΣ) [5]. Τα κύματα πυκνότητας αυτά είναι καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας[6] που εμφανίζονται στα μεταλλικά συστήματα λόγω αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φωνονίου ή ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου αντίστοιχα. Η θεμελιώδης κατάσταση είναι μια σύμφωνη υπέρθεση ζευγών ηλεκτρονίου-οπής(παρόμοια με την υπεραγωγιμότητα δηλαδή) και δεν είναι ομοιόμορφη στο χώρο, αλλά παρουσιάζει περιοδική διαμόρφωση. Στην περίπτωση του ΚΠΦ η σπασμένη συμμετρία είναι η μεταφορική, ενώ στα ΚΠΣ σπάει επιπλέον και η συμμετρία περιστροφής του σπιν. Παρόλα αυτά, είναι δυνατόν σε ένα ΚΠΦ να σπάνε και άλλες συμμετρίες(π.χ. ομοτιμία ή αναστροφή χρόνου) κατά την μετάβαση, σε αυτή την περίπτωση μιλάμε για ένα μη συμβατικό[7] ΚΠΦ. Στην εμφάνισή των ΚΠΦ και ΚΠΣ, όπως θα δούμε, σημαντικό ρόλο παίζει η ανισοτροπική δομή των ενεργειακών ζωνών. Οι καταστάσεις αυτές είναι πολύ διαδεδομένες όταν έχουμε ισχυρή σύζευξη μεταξύ των φορέων.

### 2.5.1 Κύματα Πυκνότητας Φορτίου

Τα κύματα πυκνότητας φορτίου πρωτομελετήθηκαν ανεξάρτητα από τους Flohlich(1954) και Peierls(1955) και αποτελούν μια τάξη σε ένα κβαντικό υγρό από ηλέκτρόνια σε μια γραμμική αλυσίδα ή κρυσταλλικό επίπεδο που δημιουργούνται κάτω από τις επιδράσεις ηλεκτρονίου-φωνονίου. Τα ηλεκτρόνια αυτά σχηματίζουν ένα παραμένων κύμα και κάποιες φορές κουβαλούν συλλογικά ηλεκτρικό ρεύμα. Τα ηλεκτρόνια σε ένα ΚΠΦ, όπως και σε ένα υπεραγωγό, μπορούν να κινηθούν σε μια συμπαγή αλυσίδα μαζικά σε υψηλά συσχετισμένη κίνηση. Αλλά εν αντιθέσει με έναν υπεραγωγό, το ρεύμα ρέει σε μια σχετικά άτακτη κίνηση όπως το νερό που στάζει από μια βρύση λόγο ηλεκτροστατικών ιδιοτήτων. Οι συνδυασμένες επιδράσεις των ακιδώσεων(pinning) λόγο ατελιών και των ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων, παίζουν καθοριστικό ρόλο στη ροή του ρεύματος ενός ΚΠΦ. Σημαντικό ρόλο στο σχηματισμό κυμάτων πυκνότητας φορτίου παίζει η ύπαρξη συναρμογής(nesting)[8] της επιφάνειας Fermi. Τη διαμόρφωση αυτή βλέπουμε στο Σχ 2.6. Στην εικόνα αυτή φαίνεται η αλλαγή στη διαμόρφωση της ηλεκτρονικής πυκνότητας κατόπιν δημιουργίας χάσματος σε σχέση με την αδιατάρακτη κατάσταση του μετάλλου για θερμοκρασίες άνω και κάτω του κρίσιμου σημείου. Επίσης, τόσο το κυματάνυσμα Q όσο και το μήκος κύματος της διαμορφωμένης πυκνότητας φορτίου δεν σχετίζονται με την σταθερά του πλέγματος a παρά μόνο με το ποσοστό κατάληψης των ενερ-

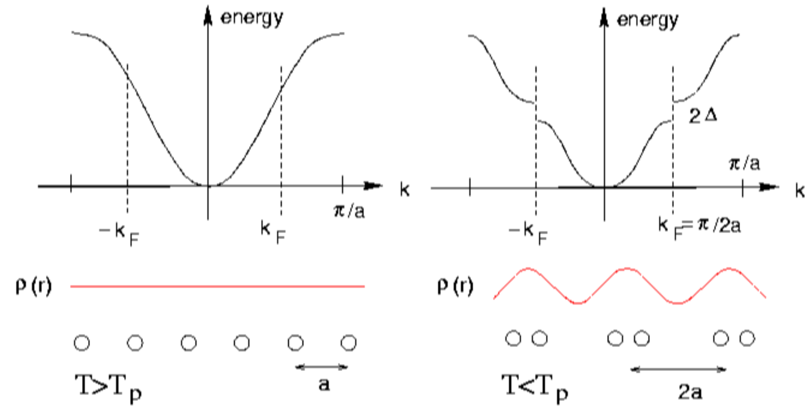
[4]CDW-carrier density wave

[5]SDW-spin density wave

[6]Οι μεταβάσεις εδώ είναι 2ης τάξης και συνεπώς διέπονται από την θεωρία Landau.

[7]Σε ένα μη συμβατικό ΚΠΦ πρακτικά έχουμε διαμορφωμένη στο διάνυσμα ορμής k στη παράμετρο τάξης που δεν είναι πλέον ισοτροπική.

[8]Σταθερής ενέργειας επιφάνειες συνδεδεμένες με ένα κανονικό κυματάνυσμα είναι ένα φαινόμενο γενικά εξαρτάται από την συγκεκριμένη τοπολογία της επιφάνειας Fermi.




Σχήμα 2.6: Τα πάνω σχήματα δείχνουν τη μονοσωματιδιακή ενεργειακή ζώνη α)Στην περίπτωση που το ηλεκτρονιακό και το φωνονικό δεν είναι συζευγμένα. Σε αυτή τη περίπτωση τα ιόντα είναι ισοδύναμα χωρικά κατανεμημένα και η πυκνότητα φορτίου-με τη κόκκινη γραμμή-είναι ομογενής. β)Όταν το ηλεκτρονιακό και το φωνονικό σύστημα αλληλεπιδρούν, ο ανταγωνισμός της ελαστικής και ηλεκτρονιακής ενέργειας οδηγεί σε στατική πλεγματική παραμόρφωση και η πυκνότητα φορτίου είναι περιοδικά ρυθμισμένη. Έτσι έχουμε χάσμα στην επιφάνεια Fermi από την εικόνα α στη β που συνοδεύεται από μια μετάβαση μετάλλου-μονωτή. Η αντίστοιχη διαταραχή στο πραγματικό χώρο ονομάζεται αστάθεια Peierls, και αναφέρεται σε μηδενική θερμοκρασία. Σε πραγματικά μονοδιάστατα συστήματα, η μετάβαση λαμβάνει χώρα σε πεπερασμένη θερμοκρασία $T_P$ (θερμοκρασία Peierls). (Πηγή: Biophysics & soft Matter Physics,London(ON))

γειακών ζωνών που καθορίζεται από το κυματάνυσμα Fermi. Τι θα γίνει δηλαδή, εάν σε ένα κρυσταλλικό πλέγμα μπορεί να διαταραχθεί τόσο ώστε το μέγεθος της μοναδιαίας κυψελίδας (unit cell) να διπλασιαστεί. Σε ένα περιοδικό δυναμικό σε πλέγμα δημιουργεί ένα κενό λόγο του διαχωρισμού που γίνετε στις άκρες της ζώνης Brillouin. Ο διπλασιασμός της μοναδιαίας κυψελίδας οδηγεί σε μείωση στο μισό της ζώνης Brillouin και ένα κενό π/2α ανοίγει όπως φαίνεται στο σχήμα. Εάν το μέταλλο έχει αρκετά ηλεκτρόνια ώστε η ενεργειακή ζώνη να γεμίσει στο μισό, το επίπεδο Fermi είναι επίσης π/2α. Το ζητούμενο είναι εάν μειώνουμε την ενέργεια με τη δημιουργία κενού στο επίπεδο Fermi περισσότερο από τη διαταραχή πλέγματος για να βρούμε ποια κατάσταση είναι ενεργειακά ποιο συμφέρουσα. Καθώς η διαταραχή πλέγματος προκαλεί την ηλεκτρονιακή πυκνότητα να διαταράσσεται με περιοδικό τρόπο.

Γενικότερα μπορεί να αναφερθεί ότι κάθε σύστημα κινείται προς την κατεύθυνση της ελαχιστοποίησης της ενέργειάς του, στη συγκεκριμένη περίπτωση αυτό γίνεται με την δημιουργία ενός ενεργειακού χάσματος. Η δημιουργία ενός χάσματος στα σημεία $k_F$ είναι εφικτή μέσω της συγκεκριμένης αλληλεπίδρασης που αναφέρθηκε ηλεκτρονίου-φωνονίου, δηλαδή μεταξύ κινούμενων φορτισμένων σωματιδίων και διεγέρσεων του κρυσταλλικού πλέγματος. Με αυτόν τον τρόπο δημιουργείται το χάσμα του κυματανύσματος στα σημεία Fermi και το φυσικό φαινόμενο της μετακίνησης φορτίων αντιμετωπίζεται ως Κύμα Πυκνότητας Φορτίου. Η ύπαρξη της αλληλεπίδρασης που οδηγεί σε ένα ΚΠΦ ισοδυναμεί με την ύπαρξη ενός ζεύγους ηλεκτρονίου-οπής. Για το λόγο αυτό, η κατάσταση ΚΠΦ(όπως και άλλες που έχουν τέτοια ισοδύναμη περιγραφή), χαρακτηρίζεται ως συμπύκνωμα ηλεκτρονίου-οπής(particle-hole condensate). Η ανάπτυξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου συνήθως ευνοείται όπως είδαμε από τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-φωνονίου, που αποσταθεροποιούν το κρυσταλλικό σύστημα με αποτέλεσμα τη μετατόπιση ιόντων σε νέες θέσεις ισορροπίας και την περιοδική διαμόρφωση της ηλεκτρονιακής πυκνότητας στο χώρο. Βέβαια και άλλοι μηχανισμοί είναι επίσης πιθανοί. Σε συστήματα που βρίσκονται στη κατάσταση ΚΠΦ είναι δυνατόν να υπάρχει ροή ηλεκτρικού ρεύματος χωρίς αντίσταση. Ωστόσο οι ατέλειες του πλέγματος καθηλώνουν το κύμα πυκνότητας σε μια θέση, γύρω από την οποία ταλαντώνεται χωρίς να μετατοπίζεται. Ο χαρακτηριστικός αυτός μηδενισμός λόγο καθήλωσης(pinning) του κύματος πυκνότητας σε ατέλειες, διαφοροποιεί αυτή την κατάσταση από την υπεραγώγιμη όπου η ροή δεν επηρεάζεται από ατέλειες. Όταν ένα υλικό σχηματίζει ΚΠΦ τείνει λοιπόν να γίνετε μονωτής, λόγο το καθορισμού της θέσης(localisation) των ηλεκτρονίων[9]. Τέτοια αλλαγές μετάλλου-μονωτή λόγο σχηματισμού ΚΠΦ έχουν παρατηρηθεί σε πολλά μέταλλα(υπάρχουν και εξαιρέσεις δηλαδή μερικά υλικά που γίνονται καλύτερη αγωγοί με ΚΠΦ αυτό έχει σχέση με κάποιες σημεία van Hove[10]).

Για περισσότερα πάνω στα στο θέμα παραπέμπουμε εδώ [14], ενώ μια εκτεταμένη μελέτη του ΚΠΦ(CDW) και της σχέσης του με την υπεραγωγιμότητα μπορεί να βρει ο αναγνώστης εδώ [13]. Για τον τροχιακό σιδηρομαγνητισμό[11] παραπέμπουμε εδώ [19].

### 2.5.2 Κύματα Πυκνότητας Σπιν

Τα κύματα πυκνότητας σπιν εισήχθησαν πρώτη φορά από τον Overhauser(1960, 1962) και είναι μια θεμελιώδη κατάσταση σπασμένης συμμετρίας που συνήθως εμφανίζεται σε χαμηλοδιάστατα μέταλλα εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Εάν τα ηλεκτρονιακά σπιν[12] είναι χωρικά διαμορφωμένα μπορεί να δημιουργηθεί ένα Κύμα Πυκνότητας Σπιν. Μπορεί να ιδωθεί και ως δύο κύματα πυκνότητας φορτίου ένα με σπιν πάνω και ένα με σπίν κάτω,των οποία είναι σε διαφορά φάσης 180 μοίρες. Έτσι η ολική πυκνότητα φορτίου μένει σταθερή χωρικά, αλλά η πόλωση των σπιν εναλλάσσεται περιοδικά. Την κατάσταση αυτή μπορούμε να δούμε στο αντίστοιχο του Σχ2.6 το Σχ2.7.

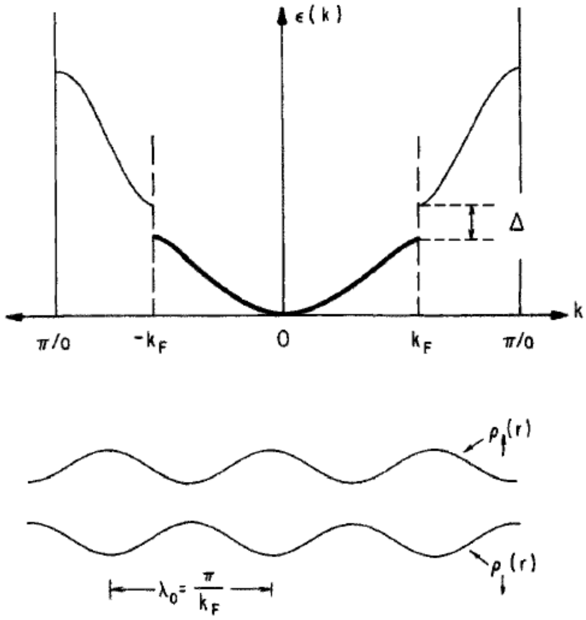
Σε ένα σύστημα διατεταγμένων σπιν, θα μπορούσε μια διαταραχή να αντιστρέψει τη φορά ενός σπιν. Τότε όμως τα διπλανά θα μεταπέσουν γύρο από το ανεστραμμένο σπιν και θα σταματήσουν να είναι αντιπαράλληλα. Αποδεικνύεται πως η ενέργεια που απαιτείται είναι μικρότερη εάν αντί για την αντιστροφή ενός σπιν όλα τα σπιν αποκλίνουν κατά λίγο από την κοινή παράλληλη κατεύθυνση. Η εν λόγο διαταραχή είναι δυνατόν να αναλυθεί σε οδεύοντα κύματα, όπως και στις ταλαντώσεις πλέγματος (φωνόνια). Τα κβάντα ταλάντωσης του πλέγμα-

[9] Για αυτό το λόγο έχουμε και χάσμα.

[10] Τα σημεία της επιφάνειας Fermi όπου απειρίζεται η πυκνότητα καταστάσεων γνωστά και ως σημεία Van Hove.

[11] Έχει φανταστική παράμετρο τάξης και όχι πραγματική όπως τα υπόλοιπα κύματα πυκνότητας που μελετάμε στη παρούσα εργασία.

[12] Το ηλεκτρονιακό σπιν, που δεν εμφανίζεται αποκλειστικά στη Χαμιλτονιανή N-σωματιδίων των στερεών(εκτός από spin orbit coupling και σε όρους Zeeman).

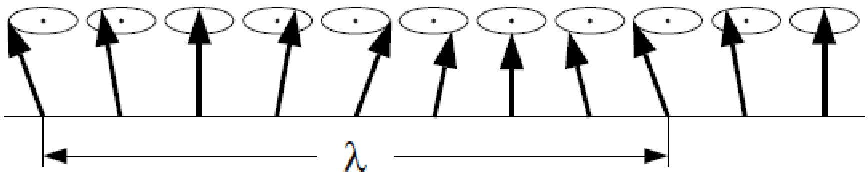



Σχήμα 2.7: Η σχέση διασποράς και η διαμορφώσεις των κυμάτων φορτίου και σπιν για δύο διαφορετικού σπιν υπομπάντες(subbands) κατά τη θεμελιώδη κατάσταση ενός κύματος πυκνότητας σπιν. Έχουμε χάσμα στην επιφάνεια Fermi που συνοδεύεται από μια μετάβαση μετάλλου-μονωτή. (Πηγή:[14])

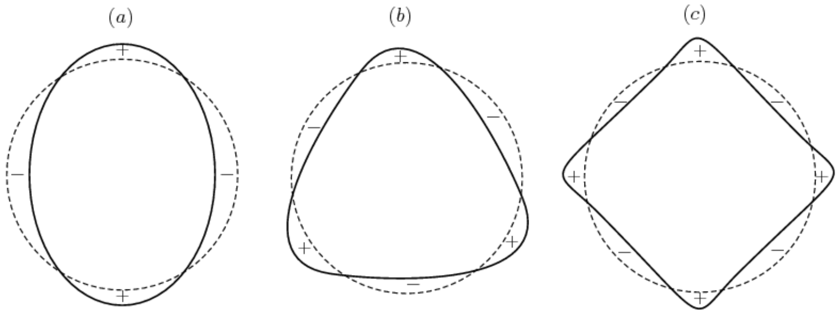
τος του σπιν ονομάζονται μαγνόνια[13]. Εξαρτώμενο από τη πολυπλοκότητα της κρυσταλλικής δομής στην οποία το σύστημα σπιν, η μαγνητική τάξη ή τάξη σπιν μπορεί να είναι σιδηρομαγνητική, αντισιδηρομαγνητική, φερριμαγνητική ή αντιφερριμαγνητική. Αντισιδηρομαγνητικά, για παράδειγμα, έχουμε στην περίπτωση που τα σπιν των γειτονικών πλεγματικών σημείων είναι αντιπαράλληλα(δηλαδή έχουμε αρνητικό ολοκλήρωμα ανταλλαγής).

Κάποιες εφαρμογές αυτής της μαγνητικής κατάστασης τάξης μπορεί να είναι και στο πεδίο της σπιντρονικής, στη συνύπαρξη με άλλες καταστάσεις τάξης όπως παραδείγματα με υπεραγώγιμες καταστάσεις αλλά και με αυτές που μελετάμε εδώ. Για περαιτέρω μελέτη παραπέμπουμε τον αναγνώστη [27], [14], ενώ για μη συμβατικά κύματα πυκνότητας σπιν [18], [15],[16] και [17]. Ενώ ένα παράδειγμα που έχουμε μελέτη της επιφάνειας Fermi σε έναν υπεραγωγό τύπου YBCO με ένα ΚΠΣ μπορούμε να δούμε και εδώ [21].

[13]Τα ΚΠΣ είναι μεταδιδόμενες διαταραχές στη διάταξη των μαγνητικών υλικών. Πρόκειται για χαμηλής σχετικά ενέργειας συλλογικές διαταραχές που εμφανίζονται σε μαγνητικά πλέγματα συνεχούς συμμετρίας. Από τη σκοπιά των οιονεί σωματιδίων τα κύματα σπίν είναι γνωστά ως μαγνόνια, που είναι μποζονικοί ρυθμοί στο πλέγμα των σπιν κάτι αντίστοιχο ας πούμε με τα φωνόνια στο πλέγμα των ιοντικών πυρήνων. Οι ενέργειες τους κυμαίνονται στα meV.




Σχήμα 2.8: Σχηματική αναπαράσταση σιδηρομαγνητικού κύματος σπιν σε ευθεία αλυσίδα. Οι μαγνήτες σπάνε την περιστροφική αμεταβλητότητα(rotational invariance) του χώρου. Επειδή αντιστέκονται να αλλάξουν την κατεύθυνση της μαγνήτισης τους τοπικά, αλλά όχι σε μια ομαδική ομοιόμορφη αλλαγή, αυτό δημιουργεί χαμηλής ενέργειας διεγέρσεις, δηλαδή τα κύματα σπιν. (Πηγή:[27])




Σχήμα 2.9: Παραδείγματα ασταθειών Pomeranchuck στα (a)$l = 2$, (b)$l = 3$ και(c)$l = 4$ κανάλια. Τα πρόσημα + και - στην ανισοτροπική επιφάνεια Fermi δείχνει την αύξηση και την μείωση αντίστοιχα ορμής σε σύγκριση με την ισοτροπική επιφάνεια(που φαίνεται με διακεκομμένες). (Πηγή: Edalati, Mohammad et al. Phys.Rev. D86 (2012) 086003 arXiv:1203.3205 )

## 2.6 Ηλεκτρονιακές νηματικές καταστάσεις ή καταστάσεις Pomeranchuk

Οι νηματικές καταστάσεις, ονομάζονται και καταστάσεις Pomeranchuk λόγω της αναλογίας που υπάρχει μεταξύ της μορφή της επιφάνειας Fermi και του προτύπου της σταγόνας που εισήχθη κατά την μελέτη των ισοτροπικών υγρών από τον I.J.Pomeranchuk το 1958. Στη μελέτη αυτή προσπάθησε να εξηγήσει τον τρόπο που ένα φερμιονικό σύστημα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων γνωστό και ως υγρό Fermi μπορεί να έχει παρόμοιες μερικές φαινομενολογικές ιδιότητες με το αντίστοιχο σύστημα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων του αερίου Fermi. Η παραμόρφωση της επιφάνειας Fermi προσομοιάζεται με το πρότυπο της σταγόνας που προέρχεται από τον χώρο των πραγματικών υγρών και για αυτό διασυνδέθηκε η ανισοτροπική μεταβολή της επιφάνειας Fermi με τον όρο της κατάστασης Pomeranchuck Σχ 2.9. Η κατάσταση αστάθειας Pomeranchuk που εικονίζεται στο παραπάνω διάγραμμα της επιφάνειας

Fermi δημιουργείται από αλληλεπίδραση με πολύ μικρή μεταφορά ορμής ηλεκτρονίων κοντά στα σημεία Van Hove[14]. Η φύση του φαινομένου είναι απολύτως ηλεκτρονιακή και δεν σχετίζεται με τη κρυσταλλική δομή. Η ύπαρξη των σημείων Van Hove είναι σημαντική για τη δημιουργία των καταστάσεων Pomeranchuk όπως και για άλλες μεταβάσεις. Το σύστημα ενδεχομένως να δημιουργήσει ένα χάσμα στην επιφάνεια Fermi για να ελαχιστοποιήσει την ενέργεια του. Ένα χάσμα τέτοιο ώστε να απομονώσει κατά το δυνατόν τα σημεία αυτά. Η μετάβαση του συστήματος σε μια κατάσταση Pomeranchuk παρόλο που δεν δημιουργεί κάποιο χάσμα απομονώνει τα σημεία Van Hove με το να μην τα συμπεριλαμβάνει στη νέα παραμορφωμένη επιφάνεια Fermi. Έτσι η ανιστοτροπική πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων ευνοεί τη δημιουργία νηματικών καταστάσεων διότι αυτές αναπροσαρμόζουν την επιφάνεια Fermi ελαχιστοποιώντας την ενέργεια, αυτό επιτυγχάνεται εάν αποφύγουμε την κατάληψη από ηλεκτρόνια ενεργειακών καταστάσεων με υψηλές ενέργειες. Τα σημεία van Hove παίζουν σημαντικό ρόλο στην εμφάνιση μη συμβατικής υπεραγωγιμότητας και κυμάτων πυκνότητας. Επομένως αναμένεται η αστάθεια Pomeranchuk να ανταγωνίζεται αυτές τις καταστάσεις σε συστήματα όπου εμφανίζονται από κοινού. Επίσης η αστάθεια Pomeranchuk λόγω της ανισοτροπίας της είναι υποψήφια κατάσταση τάξης για συστήματα τα οποία παρουσιάζουν ήδη κάποια παρεμφερή ανισοτροπία. Τα παραπάνω αποτελούν λόγο για τη μελέτη του ανταγωνισμού και τη συνύπαρξη της φάσης αυτής στα συστήματα μας. Για τις καταστάσεις αυτές παραπέμπουμε στα [22], [23], [24] και [25].

## 2.7 Υπεραγώγιμα συμπυκνώματα

### 2.7.1 Υπεραγωγιμότητα s-wave singlet

Πρόκειται για την ισοτροπική s-wave υπεραγωγιμότητα που περιγράφεται από την BCS και εμφανίζεται σε συμβατικούς υπεραγωγούς. Περιγράφεται από την καθιερωμένη BCS θεωρία που αναφέρουμε αναλυτικά στο Παράρτημα B. Η παράμετρο τάξης $\Delta$ σε αυτή την περίπτωση είναι το υπεραγώγιμο χάσμα.

### 2.7.2 Triplet υπεραγωγιμότητα

Μια διαμορφωμένη κατά το κυματάνυσμα συναρμογής Q υπεραγώγιμη κατάσταση που αναφέρεται συνήθως και ως διαμορφωμένη υπεραγωγιμότητα(staggered superconductivity) ή κύμα πυκνότητας ζεύγους(pair density wave), δεν σπάει κάποια περαιτέρω συμμετρία του συστήματος. Παρόλα αυτά οι υπεραγώγιμες αυτές καταστάσεις καλούνται καταχρηστικά μη συμβατικές ώστε να διαχωρίζονται από την ισοτροπική υπεραγωγιμότητα της κλασσικής θεωρίας BCS. Να θυμίσουμε εδώ πως οι δυνατές τιμές που μπορεί να πάρει το ολικό σπιν ενός ζεύγους ηλεκτρονίων (ή οπών) είναι $S = 1$ και $S = 0$. Για τις καταστάσεις αυτές έχουμε

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

[14] Ανάμεσα στα σημεία που αποτελούν την επιφάνεια Fermi, υπάρχουν σημεία όπου η ενεργειακή πυκνότητα καταστάσεων απειρίζεται και είναι ευρύτερα γνωστά ως σημεία Van Hove.

και

$$S = 1 \to S_z = \begin{cases} 1 & \to |\uparrow\uparrow\rangle \\ 0 & \to |\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle \\ -1 & \to |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}$$

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

# Κεφάλαιο 3

# Μαθηματικός φορμαλισμός

Ο στόχος μας σε αυτό το κεφάλαιο είναι να δείξουμε πως μπορεί να γίνει η ταυτόχρονη περιγραφή διαφόρων ειδών συμπυκνωμάτων(π.χ. υπεραγώγιμα, ηλεκτρονίου οπής κτλπ). Θα κατασκευάσουμε μια ενοποιημένη σπινοριακή θεωρία για να συμπεριλάβουμε τις βασικές συμμετρίες κάτω από τις οποίες μετασχηματίζονται τα εν λόγω συμπυκνώματα. Μια από αυτές για παράδειγμα, είναι η μεταφορική η οποία ουσιαστικά μας λέει πως μεταβάλλεται μια παράμετρο τάξης όταν έχω μια μετατόπιση κατά ένα κυματάνυσμα q της 1ης ζώνης Brillouin. Από τα πιθανά κυματανύσματα λαμβάνουμε υπόψιν αυτά που συμφέρει ενεργειακά το σύστημα και συνήθως αρκεί το βασικό κυματάνυσμα συναρμογής Q. Θα προσπαθήσουμε να κρατήσουμε αρκετά γενικό το πλαίσιο και όσο γίνεται ανεξάρτηρο από μικροσκοπικές παραμέτρους που χαρακτηρίζουν το κάθε υλικό. Πρακτικά ξεκινώντας από μια γενικευμένη ενεργό(effective) χαμιλτονιανή[1] κάνουμε τις συνηθισμένες παραδοχές μιας θεωρίας μέσου πεδίου(mean field), δηλαδή θεωρούμε τις διακυμάνσεις αμελητέες. Τελικός μας στόχος είναι να γράψουμε τη χαμιλτονιανή μας σε μια μορφή :

$$H = -\sum_k \Psi_k^\dagger \widehat{D}_k \Psi_k \tag{3.1}$$

με τον πίνακα $D_k$ να περιέχει όλη τη πληροφορία κωδικοποιημένη στη βάση των $\Psi_k^\dagger, \Psi_k$. Αλλά πριν προχωρήσουμε για να είμαστε κατανοητοί πρέπει να ορίσουμε τη βάση αυτή.

## 3.1 Σπινοριακός φορμαλισμός κατά Nambu

Σε αυτή την ενότητα θα θέσουμε κάποια βάση για να περιγράψουμε την ταυτόχρονη περιγραφή συμπυκνωμάτων και καταστάσεων που είδαμε στις προηγούμενες ενότητες[2]. Θα δείξουμε πως κατασκευάζουμε μια σπινοριακή θεωρία που να περιλαμβάνει τις βασικές συμμετρίες κάτω από τις οποίες μετασχηματίζονται τα εν λόγο συμπυκνώματα. Θα διακρίνουμε, όπως αναφέραμε, τα βασικά κυματανύσματα συναρμογής και θα επικεντρωθούμε σε αυτά. Οι συμμετρίες που μας ενδιαφέρουν είναι η μεταφορική, η συμμετρία χωρικής αναστροφής και

[1] Ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων δηλαδή, συνεπώς λύνεται με προσεγγιστικές μεθόδους.

[2] Να σημειώσουμε εδώ πως πάντα μιλάμε για συστήματα σε θερμική ισορροπία (thermal equilibrium).

περιστροφής του σπιν. Όπου θεωρούμε ένα κυματάνυσμα συναρμογής, Q, ο αντίστοιχος ισοσπίν χώρος είναι δισδιάστατος. Κάθε ένας από αυτούς τους μετασχηματισμούς συμμετρίας, μπορεί να περιγραφεί ξεχωριστά σε $2 \times 2$ υποχώρους Hilbert : $\{|k\rangle,\ |k+Q\rangle\}$, $\{|k\rangle,\ |-k\rangle\}$ και $\{|k\uparrow\rangle, |k\downarrow\rangle\}$ όπου οι δισδιάστατοι σπίνορες που δρουν σε κάθε υπόχωρο είναι οι: $\psi_t^\dagger = (c_k^\dagger, c_{k+Q}^\dagger)$ ,$\psi_I^\dagger = (c_k^\dagger, c_{-k}^\dagger)$ και $\psi_s^\dagger = (c_{k,\uparrow}^\dagger, c_{k,\downarrow}^\dagger)$ αντιστοίχως. Μια βολική βάση για τον κάθε έναν υπόχωρο που θα χρησιμοποιήσουμε ορίζεται μέσω τον πινάκων Pauli τους οποίους συμβολίζουμε ως : $\widehat{\tau}_i$, $\widehat{\rho}_i$ και $\widehat{\sigma}_i$ για κάθε υπόχωρο αντίστοιχα. Μπορούμε να ενώσουμε τους τρεις χώρους αυτούς με τη χρήση του εξωτερικού γινομένου μεταξύ τους, καταλήγοντας έτσι σε έναν οκταδιάστατο χώρο [3]:

$$C = \{|k,\uparrow\rangle, |k,\downarrow\rangle, |-k,\uparrow\rangle, |-k,\downarrow\rangle, |k+Q,\uparrow\rangle, |k+Q,\downarrow\rangle, |-(k+Q),\uparrow\rangle, |-(k+Q),\downarrow\rangle\} \tag{3.2}$$

όπου ο αντίστοιχος 8-διάστατος σπίνορας έχει την μορφή:

$$\Psi_k^\dagger = (c_{k,\uparrow}^\dagger, c_{k,\downarrow}^\dagger, c_{-k,\uparrow}, c_{-k,\downarrow}, c_{k+Q,\uparrow}^\dagger, c_{k+Q,\downarrow}^\dagger, c_{-(k+Q),\uparrow}, c_{-(k+Q),\downarrow}) \tag{3.3}$$

με βάση που δίνεται από τα γινόμενα: $\widehat{\alpha}_i = \widehat{\tau}_i \otimes \widehat{\rho}_i \otimes \widehat{\sigma}_i$ [4] . Για παράδειγμα έστω η παράμετρο τάξης $S_z\widehat{\rho}_3\widehat{\sigma}_3$ σαν πίνακας σε αυτό το χώρο έχει τη μορφή :

$$\widehat{\tau}_0\widehat{\rho}_3\widehat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} \widehat{\rho}_3\widehat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & \widehat{\rho}_3\widehat{\sigma}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\sigma}_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\widehat{\sigma}_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \widehat{\sigma}_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\widehat{\sigma}_3 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Στη συνέχεια του πίνακες Pauli με δείκτη μηδέν θα τους παραλείπουμε στο συμβολισμό για απλότητα. Ο πρώτος που εισήγαγε τον έναν τέτοιου τύπου φορμαλισμό ήταν ο Nambu[33] μελετώντας ηλεκτροδυναμικές ιδιότητες της συμβατικής υπεραγωγιμότητας. Ο παραπάνω 8-διάστατος σπίνορας εισήχθη για έρευνα πάνω στους σιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς από τους Nass-Levin και Psaltakis-Fenton [34]. Μια εκτεταμένη εφαρμογή παρόμοιου φορμαλισμού

[3] Ο χώρος αυτός είναι ο SU(8) της θεωρίας των Solomon και Birman για συμπυκνώματα σωματιδίου-οπής και υπεραγωγιμότητα. Από αυτή τη θεωρία παράγονται 63 παράμετροι τάξης γεννήτορες του SU(8) φάσματος [29], [30]. Μερικούς από αυτούς τους παραμέτρους θα χρησιμοποιήσουμε όπως θα δούμε στη συνέχεια.

[4] Πρακτικά ο τ για μεταφορική συμμετρία, ο ρ για συμμετρία χωρικής αναστροφής και ο σ για συμμετρία περιστροφής σπιν.

μπορεί να βρεθεί επίσης και στα ελληνικά στα διδακτορικά [37], [38] και [39]. Εκφράζουμε λοιπόν όλες τις καταστάσεις τάξεως που χρησιμοποιήθηκαν στη παρούσα μελέτη μαζί με τους αντίστοιχους σπίνορες της κάθε μιας στο φορμαλισμό που ορίσαμε παραπάνω.

## 3.2 Συναρτήσεις Green

Η συνάρτηση Green για ένα ελεύθερο σωματίδιο είναι :

$$G_o = \frac{1}{i\omega_n I - E_k} \tag{3.4}$$

όπου φυσικά πρόκειται για εξίσωση πινάκων και $I(=\widehat{\tau}_0\widehat{\rho}_0\widehat{\sigma}_0)$ ,ο μοναδιαίος πίνακας τον οποίο συνήθως παραλείπουμε αλλά πάντα τον εννοούμε στους υπολογισμούς μας. Προκειμένου να εξάγουμε χρήσιμες πληροφορίες χρησιμοποιώντας τη $G_o$, πρέπει πρώτα να απαλείφουμε από τον παρονομαστή κάθε πίνακα με μιγαδικό όρο. Εξάλλου, απαλείφοντας τους μιγαδικούς όρους στον παρανομαστή καταλήγουμε στους πραγματικούς πόλους της σηνάρτησης Green οι οποίοι ισούνται με τις ενέργειες των ψευδο-σωματιδίων που εμφανίζονται στο σύστημα. Να επισημάνουμε εδώ πως όλοι οι πολλαπλασιασμοί που αναφέρονται είναι γινόμενα Kronecker και επειδή σε αυτά τα γινόμενα δεν ισχύει η μεταθετική ιδιότητα είναι απαραίτητο να διατηρούμε τη μεριά από όπου πολλαπλασιάζουμε(από δεξιά ή από αριστερά).

Με την εισαγωγή κατάλληλου σπίνορα η Χαμιλτονιανή [5] μπορεί να γραφεί ως:

$$H = \sum_k \Psi_k^\dagger \widehat{E}_k \Psi_k \tag{3.5}$$

όπου ο πίνακας $E_k$ περιέχει όλη τη πληροφορία του αλληλεπιδρώντος συστήματος και είναι ένα άθροισμα την αναπαράστασης όλων των πιθανών παραμέτρων τάξεως στη βάση που ορίζεται από γινόμενα πινάκων Pauli. Μπορούμε να γράψουμε τη συνάρτηση Green στο χώρο των ορμών και των συχνοτήτων Matsubara, η οποία είναι ένας $h \times h$ πίνακας, για εμάς $h = 8$ :

$$G(k, i\omega_n) = [i\omega_n - E_k]^{-1} \tag{3.6}$$

όπου $\omega_n = pk_BT(2n+1)$ οι φερμιονικές συχνότητες Matsubara[6]. Τα σημεία που έχω μηδενισμό παρανομαστή ονομάζονται πόλοι και δίνουν την ενεργειακή διασπορά των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων(οιονεί-σωματίδια) του συστήματος. Οι πόλοι δίνονται από τις ιδιοτιμές του ενεργειακού πίνακα $E_k$.

Για τη σύνδεση των γενικευμένων παραμέτρων της εξίσωσης αυτοσυνέπειας και της συνάρτησης Green. Στο φορμαλισμό του Gor'kov η γνωστή εξίσωση BCS της συμβατικής υπεραγωγιμότητας δίνεται από τη σχέση αυτοσυνέπειας :

$$\Delta_s = VT \sum_{k,n} G(k, i\omega_n) \tag{3.7}$$

[5] Η σπινοριακή Χαμιλτονιανή είναι ένας ισοδύναμος τρόπος να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου.

[6] Οι συναρτήσεις Green αυτές δεν αποτελούν την πυκνότητα πιθανότητας μετάβασης όπως συνήθως κάποιες συναρτήσεις Green σε μια κβαντική θεωρία πεδίου.

με

$$G(k, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \xi_k - \Delta_s} \tag{3.8}$$

Στον πολυδιάστατο φορμαλισμό Nambu, δίνεται ως:

$$\Delta_s = \frac{1}{8} VT \sum_{k',n} Tr\{\widehat{\tau}_i \widehat{\rho}_i \widehat{\sigma}_i G(k', i\omega_n)\} \tag{3.9}$$

Η διαφορά σε σχέση με τη συμβατική θεωρία είναι ότι ο πίνακας Green μπορεί να περιέχει και άλλες παραμέτρους τάξης, πέραν της $\Delta$ , για τις οποίες μπορούμε να γράψουμε τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας τύπου BCS που υπακούν τον γενικό τύπο :

$$\Delta_k^a = -\frac{1}{h} V_{k.k'} Tr\{\widehat{a} G(k', i\omega_n)\} \tag{3.10}$$

όπου h είναι η διάσταση του χώρου Nambu και $\widehat{a}$ η αναπαράσταση μιας παραμέτρου τάξης στη σπινοριακή βάση[7].

Για περισσότερη μελέτη των συναρτήσεων Green υπάρχει μεγάλο πλήθος βιβλιογραφίας, ενδεικτικά [28].

## 3.3 Φορμαλισμος Bogoliubov-de Gennes

Η Εξ.(3.6) μας οδηγεί στο συμπέρασμα πως για να βρούμε την συνάρτηση Green πρέπει να αντιστρέψουμε τον πίνακα στο δεξί μέρος της έκφρασης. Αυτό γίνεται αν διαγωνιοποιήσουμε τον πίνακα $E_k$ κάτι το οποίο γίνεται και αλγεβρικά αν και για πληρότητα θα αναφέρουμε την συνήθης διαδικασία που είναι μέσω ενός μετασχηματισμού Bogoliubν. Ξεκινώντας από την Χαμιλτονιανή της Εξ.(3.5) πρέπει να βρούμε κατάλληλο μετασχηματισμό ομοιότητας με τη χρήση ενός κατάλληλου πίνακα $\hat{U}$ ώστε να έχω

$$H = \sum_k \Psi_k^\dagger \widehat{E}_k \Psi_k = \sum_k \Psi_k^\dagger \hat{U}_k^{-1} \hat{D}_k \hat{U}_k \Psi_k = \sum_k \Phi_k^\dagger \hat{D}_k \Phi_k \tag{3.11}$$

όπου ο $\hat{D}_k$ να είναι διαγώνιος πίνακας, με στοιχεία τις ιδιοτιμές του $E_k$(τους πόλους της συνάρτησης Green). Για τους νέους σπίνορες ισχύει η σχέση :

$$\Phi_k^\dagger = \Psi_k^\dagger \hat{U}_k^\dagger \Rightarrow \Psi_k^\dagger = \Phi_k^\dagger \hat{U}_k \tag{3.12}$$

$$\Phi_k = \hat{U}_k \Psi_k \Rightarrow \Psi_k = \hat{U}_k^\dagger \Phi_k \tag{3.13}$$

είναι δηλαδή σπινοριακά πεδία ,και κατά κάποιο τρόπο πιο περίπλοκοι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής των διεγέρσεων του συστήματος. Αν δούμε τις ιδιότητες του $\hat{U}$(πχ ερμιτιανός αφού τέτοια είναι και η χαμιλτονιανή) μπορούμε να δείξουμε πως οι νέοι αυτοί σπίνορες[8] είναι φερμιονικοί ,δηλαδή ικανοποιούν σχέσης αντιμετάθεσης :

$$\{\Phi_k, \Phi_{k'}^\dagger\} = \{\hat{U}_k \Phi_k, \Phi_{k'}^\dagger \hat{U}_{k'}^\dagger\} = \{\Psi_k, \Psi_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \hat{I} \tag{3.14}$$

[7] Τα στοιχεία του πίνακα $\widehat{a} G(k', i\omega_n)$ δεν είναι ανεξάρτητα, αλλά συνδέονται λόγο μετασχηματισμών συμμετρίας. Για να είναι λοιπόν κανονικοποιημένο το αποτέλεσμα του ίχνους πέρνουμε το $\frac{1}{h}$.

[8] Στον χώρο των οιονεί-σωματιδίων.

Πλέον με τη χρήση αυτού του (μοναδιαίου) μετασχηματισμού μπορούμε να γράψουμε τη συνάρτηση Green ως:

$$G(k, i\omega_n) = [i\omega_n - \hat{U}_k^\dagger \hat{D}_k \hat{U}_k]^{-1} = \hat{U}_k^\dagger (i\omega_n - \hat{D}_k)^{-1} \hat{U}_k \tag{3.15}$$

## 3.4 Μέθοδος για επίλυση συζευγμένων εξισώσεων αυτοσυνέπειας

Εδώ μας ενδιαφέρει για κάθε παράμετρο τάξης να βρούμε την εξίσωση αυτοσυνέπειας προβάλουμε μέσω του ίχνους στο κατάλληλο κανάλι. Η διαδικασία αναλυτικά μια από τις υπό μελέτη περιπτώσεις βρίσκεται στο Παράρτημα Β. Πρακτικά ξαναγράφουμε τη μορφή της Εξ.(3.10) ως:

$$\Delta_k^a = \frac{1}{h} T \sum_{k',n} V_{k,k'} Tr\{\hat{a} \hat{U}_{k'}^\dagger (i\omega_n - \hat{D}_{k'})^{-1} \hat{U}_{k'}\} \tag{3.16}$$

$$= \frac{1}{h} T \sum_{k',n} V_{k,k'} Tr\{\hat{A}_{k'} (i\omega_n - \hat{D}_{k'})^{-1}\} \tag{3.17}$$

$$= \frac{1}{h} T \sum_{k',n} V_{k,k'} \sum_i \hat{A}(k') \frac{1}{i\omega_n - E_i(k')} \tag{3.18}$$

με $\hat{A}(k') = \hat{U}_{k'} \hat{a} \hat{U}_{k'}^\dagger$ , $E_i(k')$ τον i-οστό πόλο και βέβαια με χρήση των ιδιοτήτων του ίχνους. Πλέον μπορούμε με τη χρήση της ταυτότητας :

$$T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \epsilon} = n_F(\epsilon) \tag{3.19}$$

όπου $n_F = \frac{1}{1+\epsilon^{\beta\tau}}$, δηλαδή η κατανομή Dirac, πλέον καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\Delta_k^a = \frac{1}{h} \sum_{k'} V_{k,k'} \sum_i \hat{A}(k) n_F[E_i(k)] \tag{3.20}$$

το οποίο είναι η εξίσωση αυτοσυνέπειας της $\Delta$ έχοντας αθροίσει στις συχνότητες Matsubara. Κάποια παραπάνω στοιχεία για την άθροιση στις συχνότητες Matsubara παρατίθενται στο Παράρτημα Α ,και για την όλη διαδικασία που ακολουθείτε επίσης στο παράρτημα Β και στη σχετική βιβλιογραφία [28]. Η εύρεση αναλυτικής μορφής συνήθως περιορίζεται σε σχετικά απλά συστήματα συνυπαρχόντων παραμέτρων τάξης και εξαρτάται από την δομή του πίνακα $E_k$ και την σχέση μεταξύ των στοιχείων του. Πάντος ακόμα και στις περιπτώσεις που δεν έχουμε δυνατότητα αναλυτικής λύσεις μπορούμε να καταφύγουμε σε αριθμητικές μεθόδους. Έτσι η μέθοδο που εξετάσαμε μας δίνει μια μεθοδολογία (ενδεχομένως αριθμητικής) αυτοσυνεπούς επίλυσης πολλών συζευγμένων εξισώσεων, ανεξαρτήτως την πολυπλοκότητα των αναλυτικών εκφράσεων των ίδιων των εξισώσεων.

# Κεφάλαιο 4

# Ενεργειακή διασπορά και επιφάνειες Fermi

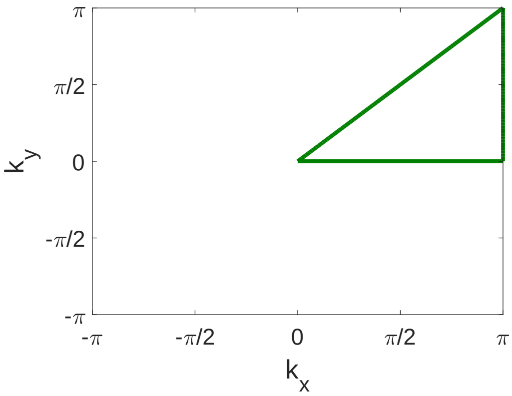
## 4.1 Εισαγωγή

Παρακάτω ακολουθούν τα διαγράμματα ενεργειακής διασποράς μαζί με άλλα βοηθητικά διαγράμματα. Αναλυτικά για τις περιπτώσεις 1, 2, 3, 4, 7, 8 , 9, 10, 11 και για διάφορους συνδυασμούς παραγόντων δομής. Για λόγους καλύτερης οργάνωσης,εξοικονόμησης χώρου και πλήθους των διαγραμμάτων τα υπόλοιπα(όχι λιγότερο σημαντικά) βρίσκονται στο cd που συνοδεύει τη παρούσα εργασία και για δεν φαίνονται αναλυτικά εδώ. Οι συντελεστές που έχω στους παράγοντες δομής κάθε παραμέτρου τάξης είναι 0,5(αντιμετωπίζονται με ισότητα) εκτός και αν αναγράφεται διαφορετικά, με εξαίρεση τον όρο που αντιπροσωπεύει την αλληλεπίδραση κοντινότερου γείτονα(hopping term) και έχει συντελεστή 1 και τους υπεραγώγιμους όρους $\Delta, \Pi$ που έχουν συντελεστή 0,2.

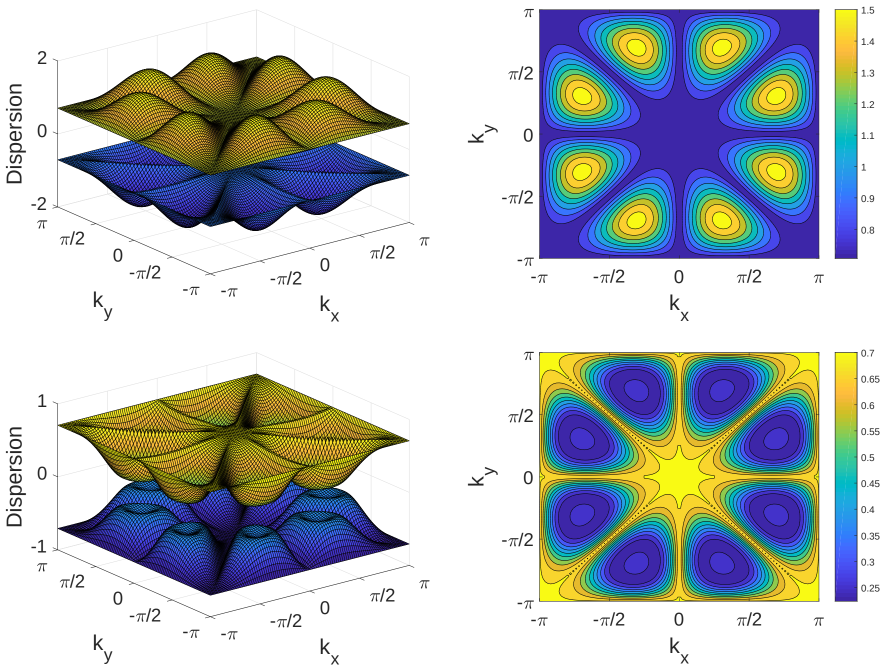
## 4.2 Διαγράμματα ΓΧΜΓ

Είναι η διασπορά σε διάφορες κατευθύνσεις υψηλής συμμετρίας, όπως φαίνεται στο Σχ.4.1. Ουσιαστικά είναι ίδιες τιμές με τα αντίστοιχα τρισδιάστατα διαγράμματα διασποράς, απλά έχουν στόχο να μας δώσουν καλύτερη εποπτεία και να φαίνεται πιο ξεκάθαρα η συμπεριφορά των διαφόρων κλάδων πάνω σε αυτές τις κατευθύνσεις. Σε κάποιες περιπτώσεις τα συγκεκριμένα σημεία δε μας βοηθάνε λόγο της μορφής της ενεργειακής διασποράς, οπότε χρησιμοποιούνται όπου κρίνεται κατάλληλο.

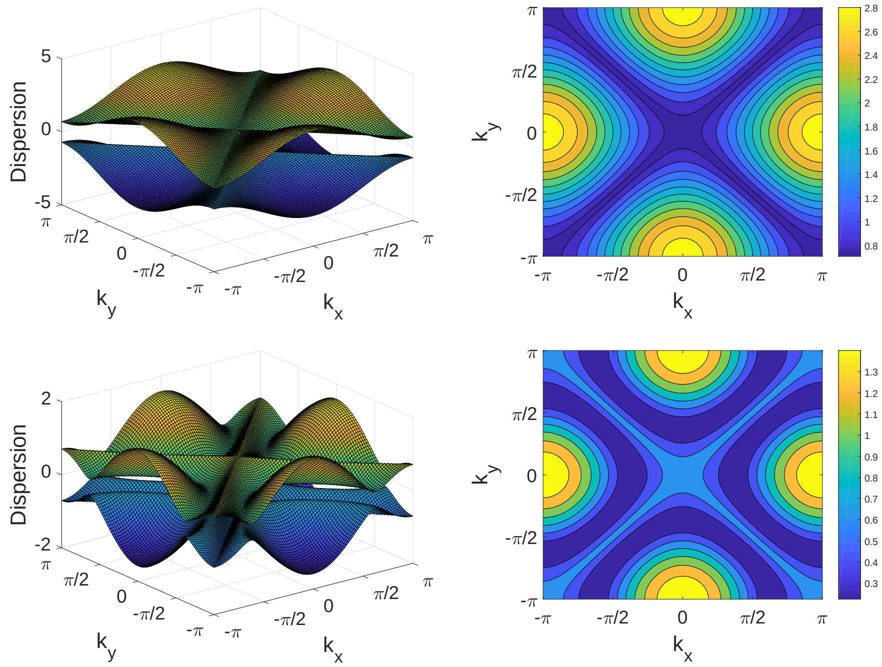
## 4.3 Διαγράμματα ενεργειακής διασποράς για περιπτώσεις με δύο πόλους



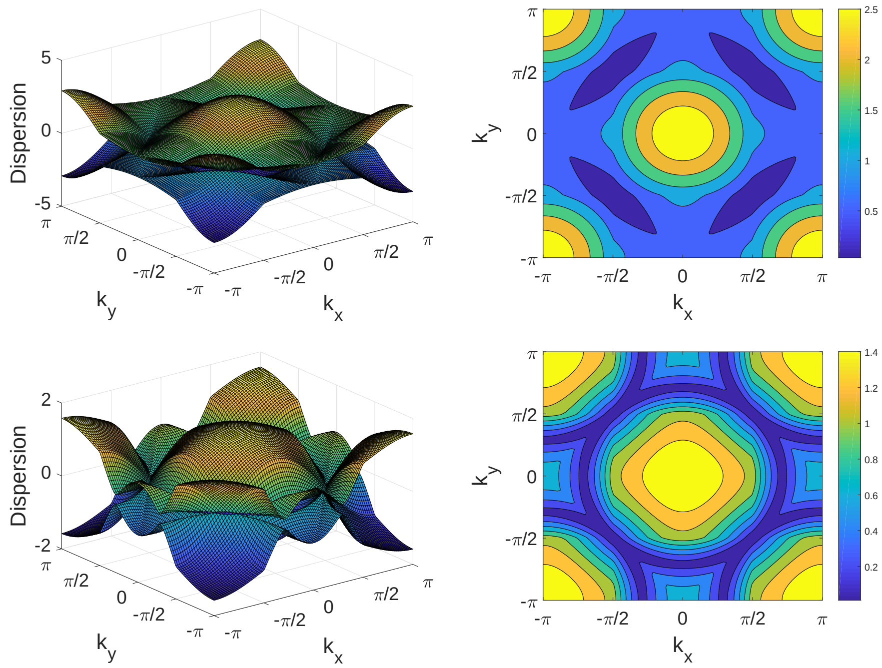

Σχήμα 4.1: Περιοχή που προβάλουμε στο ΓΧΜΓ διάγραμμα, όπου Γ(0,0),Χ(π,0) και Μ(π,π).



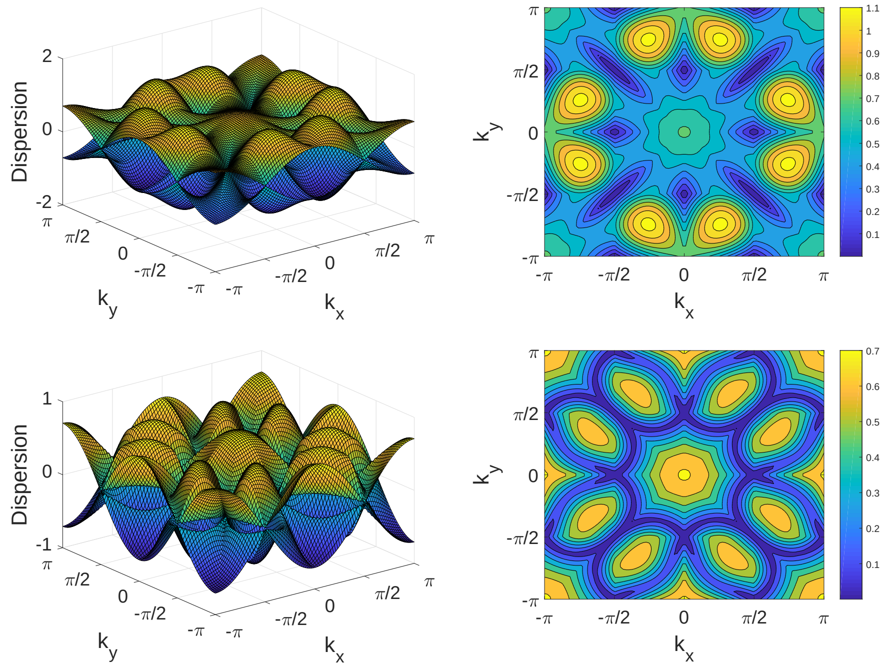

Σχήμα 4.2: Περίπτωση 1 με $t_+$ = s-wave , $t_-$ =g-wave. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



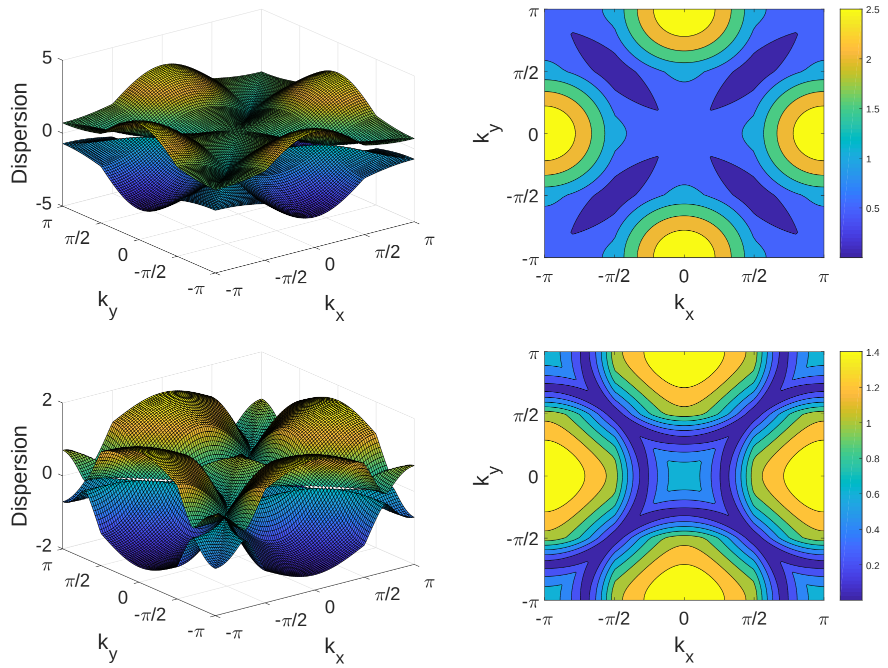
Σχήμα 4.3: Περίπτωση 1 με $t_+$ = s-wave , $t_-$ = $d_{x^2-y^2}$. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



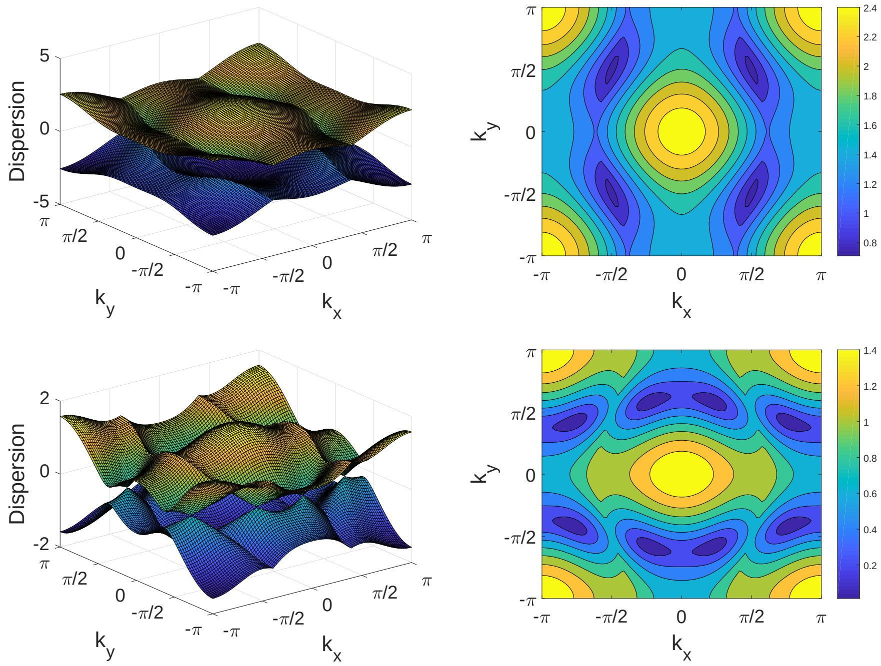
Σχήμα 4.4: Περίπτωση 1 με $t_+$ = anisotropic s-wave , $t_-$ =extended s-wave. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



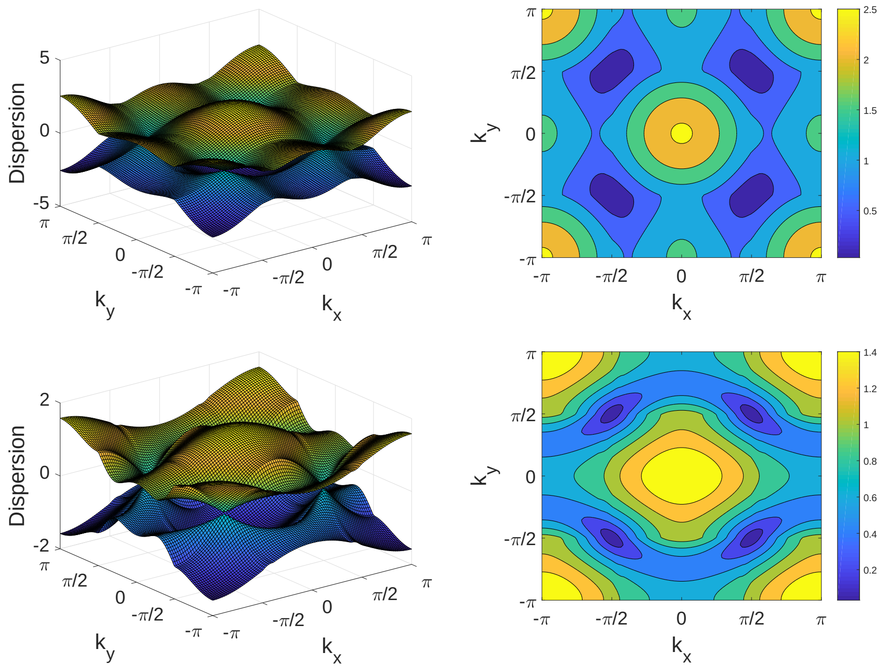

Σχήμα 4.5: Περίπτωση 1 με $t_+$ = anisotropic s-wave , $t_-$ =g-wave. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



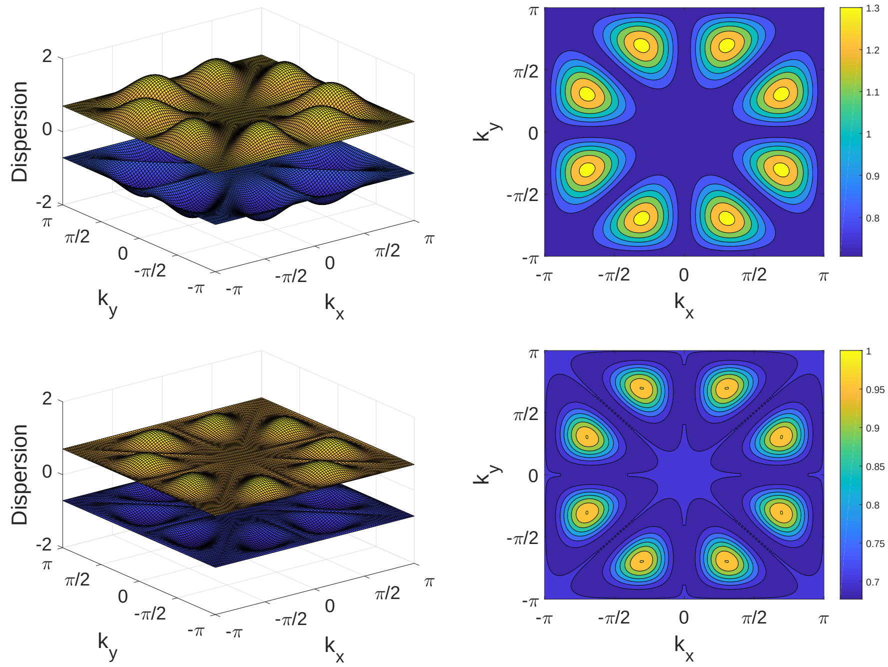

Σχήμα 4.6: Περίπτωση 1 με $t_+$ = anisotropic s-wave , $t_- = d_{x^2-y^2}$. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



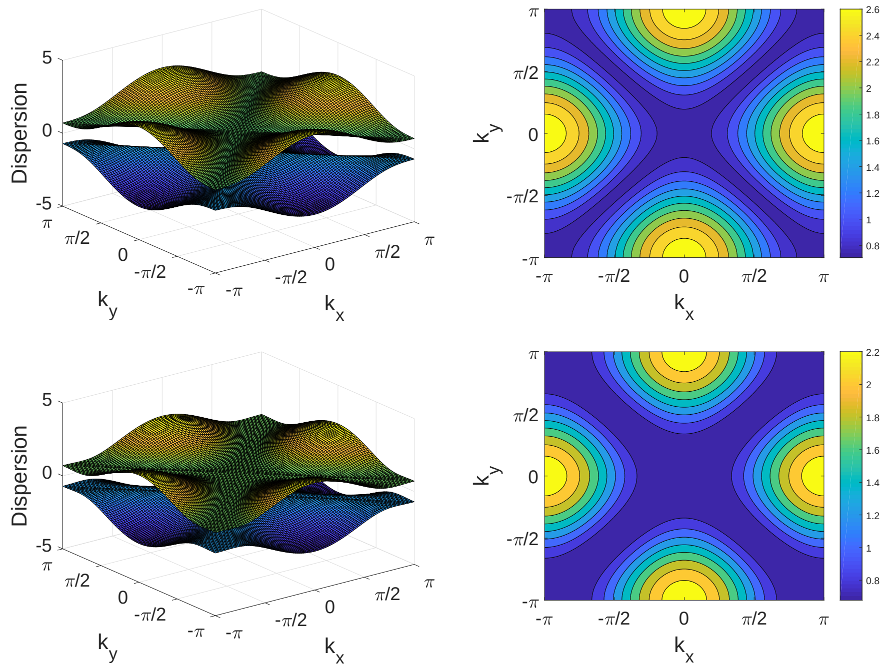

Σχήμα 4.7: Περίπτωση 1 με $t_+$ = s-wave , $t_-$ =extended s-wave, $J_z = d_{x^2-y^2}$. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



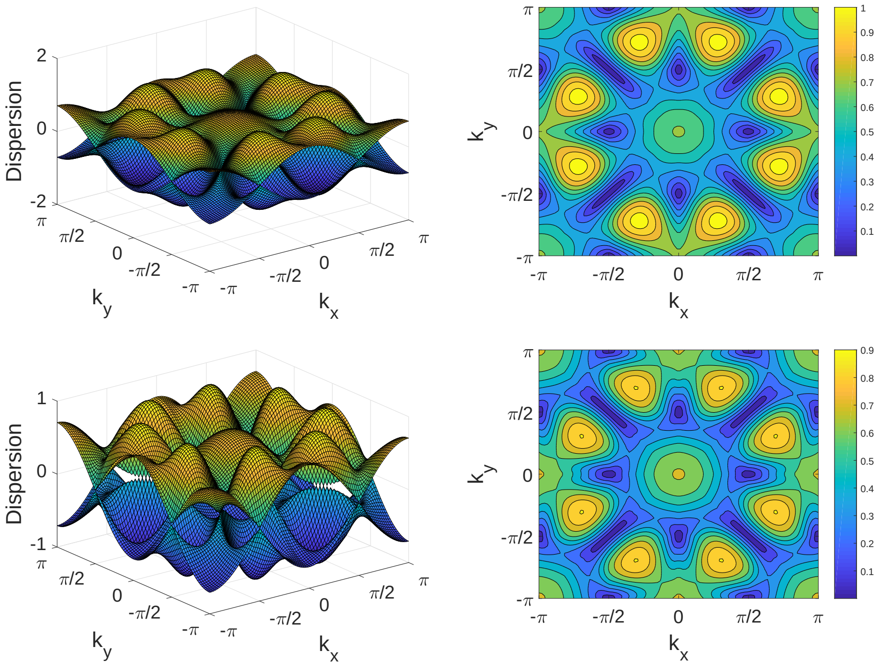

Σχήμα 4.8: Περίπτωση 1 με $t_+$ = anisotropic s-wave , $t_-$ =extended s-wave, $J_z = d_{x^2-y^2}$. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



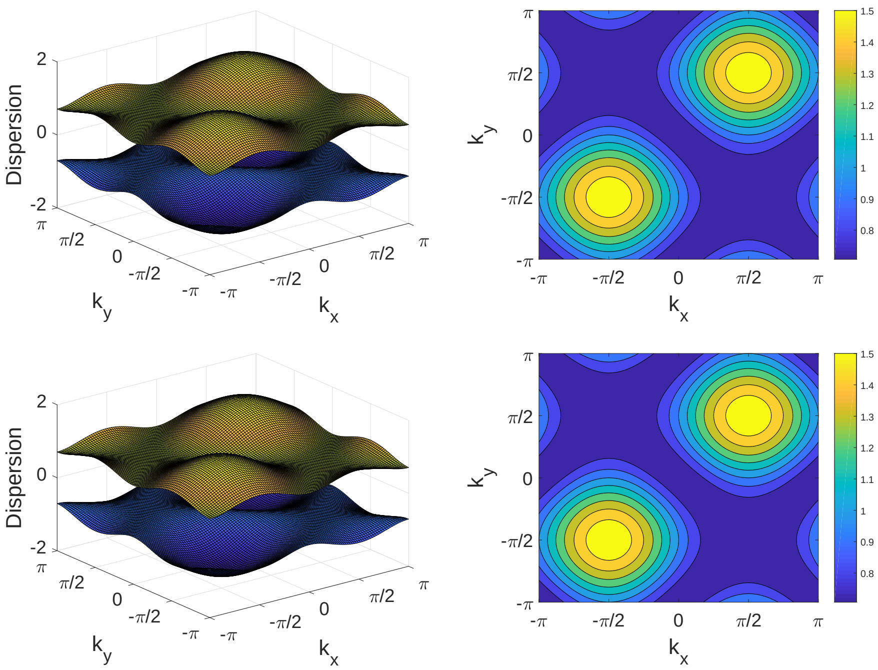

Σχήμα 4.9: Περίπτωση 3 με $t_+$ = s-wave , $t_-$ =g-wave Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



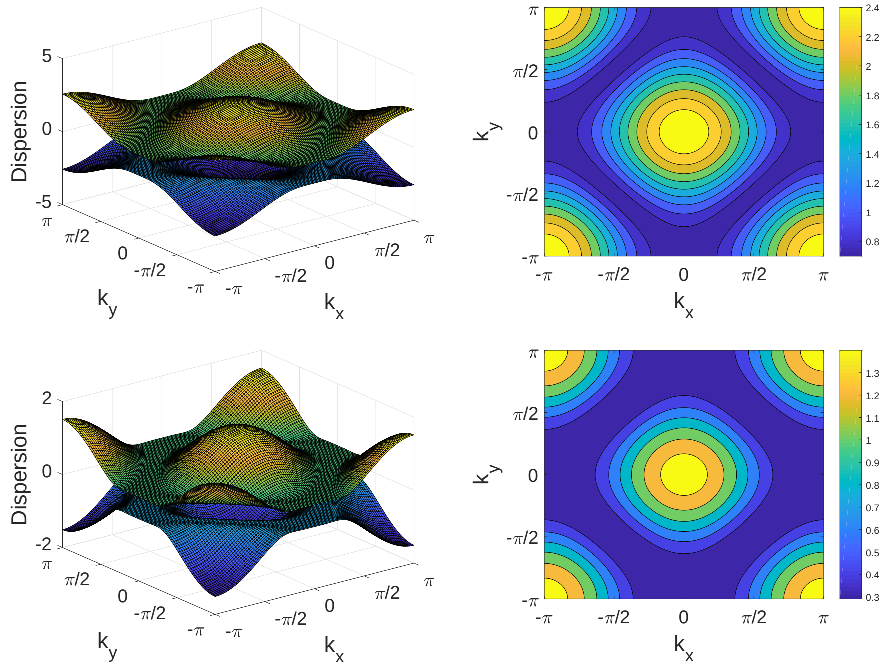

Σχήμα 4.10: Περίπτωση 3 με $t_+$ = s-wave , $t_- = d_{x^2-y^2}$ Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



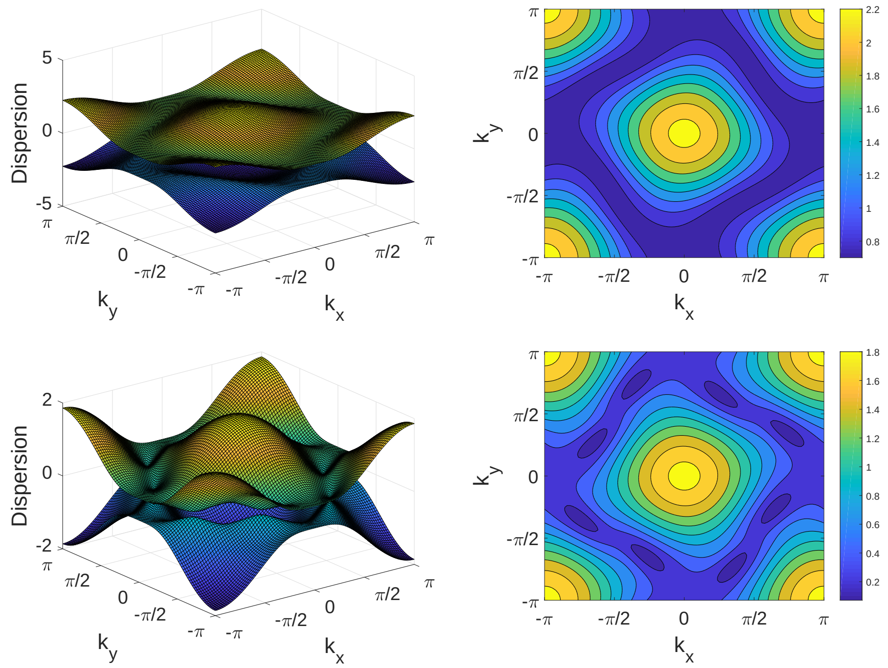

Σχήμα 4.11: Περίπτωση 3 με $t_+ =$ anisotropic s-wave , $t_- =$g-wave Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.



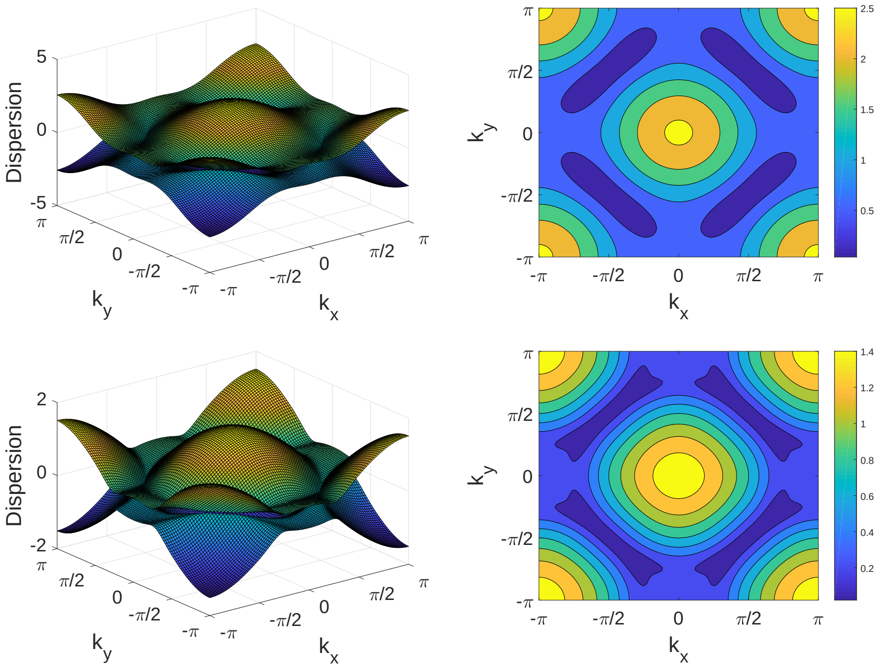

Σχήμα 4.12: Περίπτωση 4 με $t_+ =$ s-wave , $t_- = s_{--}$ Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$, στο συγκεκριμένο παράδειγμα για τις συγκεκριμένες τιμές τυχαίνει να έχω $E_+ = E =_-$ ) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.




Σχήμα 4.13: Περίπτωση 11 s-wave , extended s-wave. Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_{+}(k)$(κάτω για $\pm E_{-}(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.




Σχήμα 4.14: Περίπτωση 11 s-wave, extended s-wave, $d_{x^2-y^2}$ . Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_{+}(k)$(κάτω για $\pm E_{-}(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.




Σχήμα 4.15: Περίπτωση 11 με anisotropic s-wave, extended s-wave . Αριστερά : Σχέση διασποράς $\pm E_+(k)$(κάτω για $\pm E_-(k)$) στη πρώτη ζώνη Brillouin. Δεξιά : Αντίστοιχα ισοδυναμικά διάγραμμα, με κόκκινο η τομή με το μηδενικό επίπεδο-επιφάνεια Fermi.

# Κεφάλαιο 5

# Συμπεράσματα

## 5.1 Συμπεράσματα αναφορικά με τα μοτίβα συνύπαρξης

Στο πλαίσιο της μελέτης μας, αναπτύχθηκε περαιτέρω το θεωρητικό πλαίσιο για τη μελέτη και του ανταγωνισμού και της συνύπαρξης ενός, εν γένει, αυθαίρετου αριθμού κβαντικών καταστάσεων συμπυκνωμένης ύλης. Με αφετηρία μια ενεργό Χαμιλτονιανή θεωρία και εφαρμόζοντας μια προσέγγιση μέσου-πεδίου, δείξαμε πως μπορούμε να κατηγοριοποιήσουμε όλα τα πιθανά συμπυκνώματα και να τα μελετήσουμε, επί ίσοις όροις, μέσω ενός σπινοριακού φορμαλισμού.
Όπως είδαμε, όταν υπάρχουν δύο από τις παραμέτρους των παραπάνω συνδυασμών, η εμφάνιση της τρίτης συνεπάγεται αυτόματα και την εμφάνιση της τέταρτης. Η σπουδαιότητα αυτού του μηχανισμού της συνύπαρξης φάσεων έγκειται στο ότι δίνει ένα νέο τρόπο αναζήτησης υλικών που εμφανίζουν κάποιο επιθυμητό φαινόμενο. Επίσης προβλέπει την ύπαρξη συνδυασμών φάσεων οι οποίοι ανταποκρίνονται στις σύνθετες καταστάσεις που αναμένεται ότι εμφανίζονται σε τέτοια συμπυκνώματα.
Ποιο συγκεκριμένα η θεωρία εφαρμόστηκε στις εξής περιπτώσεις συνύπαρξης :

- Περιπτώσεις 1 και 3 που αποτελούν αδερφές περιπτώσεις.

- Περιπτώσεις 2 και 4 όπου εξετάζουμε έναν όρο μια κατάστασεις νηματικής Pomeranchuk.

- Περιπτώσεις 5 και 6 που είχαμε τη μελέτη συμπεριφοράς ενός μη συμβατικού κύματος πυκνότητας σπιν.

- Περιπτώσεις 7 και 8 όπου είδαμε σπιν Pomeranchuk όρους.

- Περιπτώσεις 9 και 10 όπου είχαμε παρόμοιες γενικές συμπεριφορές και μορφολογίες.

- Τέλος η περίπτωση 11 όπου έχουμε μοτίβο με όρους υπεραγωγιμότητας και έναν όρος triplet διαμορφωμένης υπεραγωγιμότητας(staggered superconductivity).

Τέλος η πειραματική επαλήθευση των αποτελεσμάτων που προκύπτουν με τη χρήση της μεθόδου που είδαμε, θα μπορούσε να οδηγήσει προς τη σωστή κατεύθυνση την έρευνα για μια πιο αυστηρά θεμελιωμένη μακροσκοπική θεωρία.

## 5.2 Συμπεράσματα αναφορικά με τα διαγράμματα

Με τη χρήση κατάλληλων εργαλείων κατασκευάσαμε τα διαγράμματα διασποράς μαζί με συνοδευτικά διαγράμματα που δείχνουν τις επιφάνειες Fermi και άλλα που μας δίνουν σε καλύτερη λεπτομέρεια κάποια από τα σημαντικά αποτελέσματα. Αυτό έγινε για τις περιπτώσεις 1, 2, 3, 4, 7, 8, 9, 10 και 11 για διάφορους παράγοντες δομής και τιμές των παραμέτρων. Η στόχευση ήταν να εντοπίσουμε ενδιαφέρουσες ηλεκτρικές ιδιότητες του εκάστοτε συμπυκνώματος τις μεταβολές της επιφάνειας Fermi συναρτήσει των παραμέτρων του προβλήματος, διάφορα σημεία ενδιαφέροντος που υπάρχουν στις ενεργειακές μπάντες. Μερικές ενδιαφέρουσες παρατηρήσεις αποτελούν :

- Τα δύο εφαπτόμενα σημεία στην περίπτωση 1 και 3.
- Εφαπτόμενα σημεία στα οποία σε μερικά παρουσιάζονται και σημεία καμπής στην περίπτωση 3.
- Πολλαπλά σημεία τομής, όπως στην περίπτωση 4.
- Πολλαπλά σημεία τομής σε διάφορα σημεία στην επίσης περίπτωση 9.
- Τα διαγράμματα της περίπτωσης 10 είναι επίσης σημαντικά.

Αποτελεί μέρος επέκτασης της παρούσας εργασίας η αναλυτική καταγραφή και παρατήρηση όλων των τεχνολογικά εκμεταλλεύσιμων ή ερευνητικά καινοτόμων συμπερασμάτων.

## 5.3 Μελλοντικές επεκτάσεις

### 5.3.1 Κινητικοί όροι και πλήρης υπολογισμός διαγραμμάτων φάσεων

Σε πολλά συμπυκνώματα που είδαμε είναι αναγκαίο να κάνουμε υπολογισμό και με κάποιους κινητικούς όρους, αλλά ακόμα και σε αυτές που έχουμε συμπεριλάβει τους κατάλληλους όρους πρέπει να γίνει αριθμητική επίλυση των εξισώσεων αυτοσυνέπειας για να βγάλουμε τα διαγράμματα φάσεων που προκύπτουν από την θεωρία μέσου πεδίου που παρουσιάσαμε και θα μας δώσουν επιπλέον πληροφορίες για τη φαινομενολογία των υπό εξέταση συμπυκνωμάτων.

### 5.3.2 Υπολογισμοί θερμοδυναμικών ποσοτήτων και χαρακτηριστικών

Θα πρέπει βέβαια να βρούμε και τις εκφράσεις της ελεύθερης ενέργειας αλλά πλέον με γνωστές τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας είναι στη συνέχεια δυνατός ο υπολογισμών διάφορων ποσοτήτων και χαρακτηριστικών όπως για παράδειγμα η μαγνητική επιδεκτικότητα, η μαγνητοαντίσταση και άλλα μεγέθη που μπορούν στη συνέχεια εύκολα να συνδεθούν με πειραματικά μετρήσιμα μεγέθη. Αντίστοιχα μπορούν να γίνουν και υπολογισμοί για την πυκνότητα καταστάσεων των οιονεί-σωματιδίων.

### 5.3.3 Αναγωγή των αποτελεσμάτων σε μια κβαντική θεωρία πεδίου

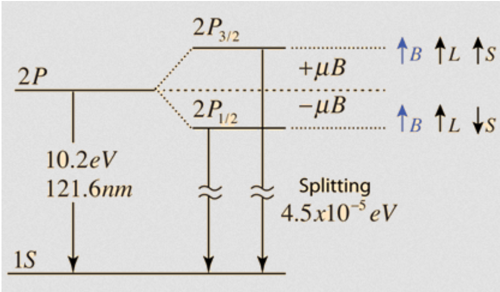
Καθώς το μέρος των αποτελεσμάτων που αφορά την ύπαρξη μοτίβων συνύπαρξης είναι αρκετά γενικό και χωρίς να λάβουμε μέχρι εκείνο το σημείο υπόψιν ιδιομορφίες του υπό μελέτη συστήματος πιστεύουμε πως τα αποτελέσματα μπορούν να ληφθούν υπόψιν και σε άλλα πεδία της φυσικής όπου υπάρχει ανάγκη για χρήση ενός αντίστοιχου σπινοριακού φορμαλισμού. Οπότε μελλοντικά θα μπορούσαμε να ψάξουμε τι σημαίνουν τα αποτελέσματά μας αν εφαρμοστούν σε μια κβαντική θεωρία πεδίου όπου πλέον οι παράμετροι τάξης εκφράζουν κάποιες θεμελιώδης ασυμμετρίες ή κάποια πεδία.

### 5.3.4 Σύζευξη Σπιν Τροχιάς(Spin Orbit Coupling)

Η σύζευξη σπιν τροχιάς είναι ένα φαινόμενο που προσπαθούμε να εισαγάγουμε γενικά σε τέτοιας φύσης προβλήματα, διάφορες ενδιαφέρουσες αναφορές σε αυτό βλέπουμε εδώ [45],[46],[47] και σίγουρα αποτελεί έναν τομέα για να επεκταθούν και να γίνουν πιο ακριβής οι θεωρητικές μας έρευνες ή και να βρούμε κάποια άλλα φαινόμενα που κανονικά δε προβλέπονταν. Για το φαινόμενο αυτό έχουμε πολύ καλή κατανόηση και οδηγεί μερικές φορές σε εκφυλισμό των ενεργειακών επιπέδων σε άτομα, μόρια και στερεά. Για να το εισάγουμε στο πρόβλημα παίρνουμε την εξίσωση Dirac, που είναι η βασική για να περιγράψει ηλεκτρονιακά συστήματα που να περιλαμβάνει τόσο το σπιν όσο και τη σχετικιστική συμπεριφορά.

Αφορά δηλαδή σχετικιστικές διορθώσεις της εξίσωσης Schrödinger. Στη πραγματικότητα κάνουμε μια διόρθωση στις ενεργειακές ζώνες λαμβάνοντας υπόψιν και το σπιν. Με τις διορθώσεις αυτές ενδέχεται σε κάποια προβλήματα να δημιουργούνται πιο εύκολα ισχυρές συσχετίσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων. Και λαμβάνοντας υπόψιν και τη μαγνήτιση του υλικού ή τις μαγνητικές ατέλειες μπορούμε να εισάγουμε τον όρο της σύζευξης σπιν τροχιάς στην εξίσωση ελεύθερης ενέργειας του συστήματος.

Εν συντομία είναι μια αλληλεπίδραση πιο ασθενής από την αλληλεπίδραση Coulmb που είναι υπεύθυνη για την ακριβή δομή των ατομικών γραμμών. Το ηλεκτρόνιο έχει σπιν s και τροχιακή στροφορμή l. Για κάθε μια από αυτές έχω κατά αντιστοιχία της μαγνητικές ορμές $\mu_l$ και $\mu_s$. Η σύζευξη ή αλλιώς αλληλεπίδραση σπιν τροχιάς είναι η αλληλεπίδραση των δύο αυτών ορμών $\mu_l$,$\mu_s$. Όταν για παράδειγμα, ατομικές φασματικές χωρίζονται λόγο της εφαρμογής στο σύστημα ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου ,είναι αυτό που ονομάζουμε φαινόμενο Zeeman. Η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς είναι μια επίσης μαγνητική αλληλεπίδραση, αλλά το πεδίο δεν είναι εξωτερικό αλλά δημιουργείται από την ίδια την κίνηση του ηλεκτρονίου σε ένα άτομο(πολλές φορές το ονομάζουμε και εσωτερικό φαινόμενο Zeeman). Στο Σχ 5.1 βλέπουμε ένα παράδειγμα πως διορθώνουμε της ενεργειακές ζώνες αφού λάβουμε υπόψιν την σύζευξη σπιν τροχιάς.




Σχήμα 5.1: Η διόρθωση στη περίπτωση του Υδρογόνου στο p τροχιακό. Το συγκεκριμένο παράδειγμα ήταν μια από της πρώτες ενδείξεις ύπαρξης του σπιν.(Πηγή: C.R. Nave, Hyperphysics, 2016)

Στην παρούσα μελέτη το αναφέρουμε περισσότερο σαν πεδίο πιθανής επέκτασης ή και προσοχής σε άλλες παρεμφερείς περιπτώσεις όπου έχουμε μελέτη φαινομένων που σχετίζονται με το σπιν, για το εάν πρέπει ή όχι να το λάβουμε υπόψιν κυρίως επειδή μπορούμε να το εισαγάγουμε με παρόμοιο φορμαλισμό όπως παρουσιάστηκε σε αυτή τη διπλωματική σαν μια ανεξάρτητη παράμετρο τάξης(ειδικά όσο αναφορά το φαινόμενο Rasha). Είναι πάντως αδιαμφισβήτητα ένα πεδίο μελέτης στη προσπάθεια μας να φτιάξουμε υλικά με συγκεκριμένες ενεργειακές διασπορές, ιδιότητες και αλληλεπιδράσεις και πρέπει να το λαμβάνουμε υπόψιν σε φαινόμενα όπως κβαντικό φαινόμενο Hall, τοπολογικοί μονωτές, φερμιόνια Majorana κτλπ.

# Παράρτημα Α′

# Άθροιση στις συχνότητες **Matsubara**

Στις θεωρίες πεδίου πεπερασμένης θερμοκρασίας γίνεται συχνά η χρήση των ελεύθερων συναρτήσεων Green στον φανταστικό χρόνο. Ο μετασχηματισμός Fourier των συναρτήσεων αυτών έχει ως αποτέλεσμα τις λεγόμενες συναρτήσεις Green του Matsubara στις οποίες ο μιγαδικός χρόνος έχει αντικατασταθεί με τις μιγαδικές συχνότητες. Στους υπολογισμούς για να εξάγουμε πραγματικές συναρτήσεις πρέπει πρώτα να αθροίσουμε στις συχνότητες αυτές(συχνότητες Matsubara). Στο παράρτημα αυτό εξηγούμε τη κεντρική ιδέα αυτής της μαθηματικής διαδικασίας.

### Α′.0.1 Η μαθηματική μέθοδος

Έστω συνάρτηση f:

$$S = \frac{1}{\beta}\sum_{n\in Z} f(k_o) \tag{Α′.1}$$

με $k_o = i\omega_n$ και $\beta = 1/T$. Το άθροισμα που θέλουμε να υπολογίσουμε είναι πάνω σε όλες τις περιττές συχνότητες Matsubara $\omega_n = (2n+1)\pi/\beta$ . Για παράδειγμα μια ακριβής έκφραση για την συνάρτηση Green του ελεύθερου φερμιονίου με δύο πόλους είναι της μορφής:

$$S = \frac{1}{\beta}\sum_{n\in Z} \frac{1}{(i\omega)^2 - \epsilon^2} \tag{Α′.2}$$

Για να κάνουμε την άθροιση, μετατρέπουμε το άθροισμα σε ένα ισοδύναμο επικαμπύλιο ολοκλήρωμα στο μιγαδικό επίπεδο κάνοντας χρήση του θεωρήματος των ολοκληρωτικών υπολοίπων της μιγαδικής ανάλυσης. Παίρνουμε το ολοκλήρωμα της μορφής

$$I = \lim_{R\to\infty}\oint \frac{dz}{2\pi i} f(z) n_f(z) \tag{Α′.3}$$

Επιλέγουμε η καμπύλη να είναι κύκλος με ακτίνα $R \to \infty$ και απαιτούμε η συνάρτηση $n_f(z)$ να έχει πόλους στα σημεία $z_n = k_o = (2n+1)i\pi/\beta$. Μια βολική επιλογή της $n_f(z)$ είναι η κατανομή Fermi-Dirac για μηδενικό χημικό δυναμικό:

$$n_f(z) = \frac{1}{e^{\beta z}+1} = \frac{1}{2}\tanh(\frac{\beta z}{2}) \tag{Α′.4}$$

της οποίας το ολοκληρωτικό υπόλοιπο σε κάθε πόλο $z_n$ ισούται με $-1/\beta$. Σύμφωνα με το θεώρημα του Cauchy η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί σαν άθροισμα των ολοκληρωτικών υπολοίπων των πόλων της:

$$I = \frac{1}{\beta}\sum_{n\in Z} f(k_o = i\omega_n) + \sum_{a} Res_{z=z_o}\{f(z)n_f(z)\} \tag{A'.5}$$

Παίρνοντας την περιοχή ολοκλήρωσης στο όριο $R \to \infty$ το παραπάνω ολοκλήρωμα λόγω της μορφής του μηδενίζεται ($I \to 0$). Έτσι καταλήγουμε στον τύπο για υπολογισμό αθροισμάτων:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{n\in Z} f(k_o = i\omega_n) = -\sum_{a} Res_{z=z_o}\{f(z)n_f(z)\} \tag{A'.6}$$

Για παράδειγμα,ακολουθώντας τα παραπάνω βρίσκουμε:

$$\frac{1}{\beta}\sum_{n\in Z}\frac{1}{(i\omega)^2-\epsilon^2} = -\frac{\beta}{2\epsilon}\tanh(\frac{\beta\epsilon}{2}) \tag{A'.7}$$

Που τον χρησιμοποιούμε στον υπολογισμό των εξισώσεων αυτοσυνέπειας. Η μέθοδος αυτή μπορεί να επεκταθεί και στην περίπτωση περισσότερων ή πολλαπλών πόλων, για περισσότερα μπορούμε να δούμε κάποιο εισαγωγικό βιβλίο μιγαδικής ανάλυσης.

# Παράρτημα Β΄

# Υπεραγωγιμότητα

## Β΄.1 Ιστορική αναδρομή

Η υπεραγωγιμότητα ήταν ένα φαινόμενο που ανακαλύφθηκε για πρώτη φορά από τον Heike Kamerlingh Onnes [48] το 1911, η ανακάλυψη έγινε κατά λάθος στον αγώνα υγροποίσης του Ηλίου. Οι θεωρητικοί δούλευαν για πάνω απο 40 χρόνια προσπαθώντας να εξηγήσουν το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας. Το 1933 οι Meissner και Ochenfeld βρήκαν πως εκτός της μηδενικής αντίστασης, τα υπεραγώγιμα μέταλλα απωθούν το μαγνητικό πεδίο από το εσωτερικό τους [49]. Η απώθηση της μαγνητικής ροής είναι θεμελιωδώς διαφορετική συμπεριφορά από έναν ¨τέλειο αγωγό' και το φαινόμενο Meissner όπως ονομάστηκε έγινε καθοριστικό χαρακτηριστικό των υπεραγωγών. Οι εξισώσεις London εξήγησαν επιτυχώς το φαινόμενο Meissner-Ochsenfeld, αλλά όχι την υπεραγωγιμότητα αφού τα ηλεκτρόνια δεν υπακούουν στην στατιστική Bose. Το 1946 ο Ginzburg και ο Landau πρότειναν μια φαινομενολογική θεωρία[1] της υπεραγώγιμης μετάβασης φάσης δίνοντας μια περιεκτική εικόνα των ηλεκτρομαγνητικών ιδιοτήτων κάτω από τη κρίσιμη θερμοκρασία [50]. Ο Cooper απέδειξε το 1956 πως στη παρουσία της θάλασσας Fermi μια αυθαιρέτως ασθενής έλξη μπορεί να οδηγήσει σε δημιουργία ζευγών. Τελικά το 1957 οι Bardeen,Cooper και Schrieffer (BCS) κατάφεραν επιτυχώς να εφαρμόσουν τη (σχετικά καινούργια) κβαντικη θεωρία για να περιγράψουν την υπεραγωγιμότητα [51]. Στη θεωρία τους τα ηλεκτρόνια στα μέταλλα φτιάχνουν ζευγάρια[2] (γνωστά ως ζεύγη Cooper) μέσω της αλληλεπίδρασης με το κρυσταλλικό πλέγμα. Η θεμελιώδης κατάσταση είναι μια συναφής κατάσταση (coherent state) αυτών των ζευγών Cooper,και η μακράς επίδρασης συσχέτιση(long-range correlation) μεταξύ τους δημιουργεί τις ασυνήθιστες ιδιότη-

[1] Η προσέγγιση Ginzburg-Landau της υπεραγωγιμότητας, που αναπτύχθηκε κάποια χρόνια πριν την μικροσκοπική BCS,είναι ένα παράδειγμα της δύναμης της φαινομενολογίας ακόμα και με απουσία μικροσκοπικής περιγραφής.

[2] Στη πραγματικότητα 2 φερμιόνια με δεσμό μεταξύ τους αν είναι μόνο δυο μπορεί όντως να συμπεριφέρονται ως μποζόνιο, αλλά σε σύστημα πυκνό με πολλά τέτοια ζεύγη οι απαγορεύσεις της κατανομής Fermi είναι αισθητές, το πως θα συμπεριφέρεται ένα τέτοιο πύκνωμα από ζεύγη εξαρτάται από την απόσταση της αλληλεπίδρασης συγκριτικά με τα μόρια και τη πυκνότητα αυτών. Βέβαια παρότι σε πρώτη σκέψη φαίνεται περίεργο ο εκφυλισμός αυτός που γίνεται αισθητός σε μεγάλες πυκνότητες τελικά βοηθάει σε σχηματισμό ζευγών ακόμα και με πολύ ασθενής αλληλεπίδραση.

τες των υπεραγωγών. Μια από της επιτυχίες της Ginzburg-Landau(G-L) θεωρίας ήταν η πρόβλεψη το 1957 από τον Abrikosov της υπεραγωγιμότητας τύπου II. Το 1959 ο Gor'kov απέδειξε πως η G-L θεωρία μπορεί να αποδειχθεί από την BCS. Η ανάπτυξη της BCS οδήγησε στη κατανόηση γιατί ο μαγνητισμός είναι συνήθως καταστροφικό για την υπεραγωγιμότητα. Το 1960,οι Abrikosov και Gor'kov έδειξαν, χρησιμοποιώντας ισχυρές τεχνικές Matsubara για πεπερασμένης θερμοκρασίας κβαντική θεωρία πεδίου, πως οι μαγνητικές ατέλειες σπάνε τα ζευγάρια. Η εναλλαγή σπιν επίσης μάλλον καταστρέφει μονομελή ζευγάρια(singlet). Το 1968 οι Fay και Layzer έδειξαν πως οι σιδηρομαγνητικές σπινοριακές ταλαντώσεις μπορούν να προωθήσουν σπιν triplet ζευγαρώματα, που είναι π-κύματα λόγο της φερμιονικής αντισυμμετρίας. Για κάποια χρόνια φαινόταν πως η υπεραγωγιμότητα είναι αρκετά κατανοητή με τους όρους της μικροσκοπικής θεωρίας[3] BCS. Μια από της βασικές προβλέψεις της BCS ήταν πως η υπεραγωγιμότητα δε μπορεί να προκύψει σε οποιαδήποτε θερμοκρασία μεγαλύτερα από περίπου 40K. Ωστόσο, το 1986 προς έκπληξη της ακαδημαϊκής κοινότητας οι Bednorz και Muller ανακάλυψαν την υπεραγωγιμότητα στο κεραμικό σύστημα Ba-La-Cu-O κοντα στους 30K και αμέσως αργότερα βρέθηκαν υλικά με θερμοκρασία μετάβασης $T_c$ [4] μεγαλύτερη απο 77K [52]. Για πρώτη φορά υπεραγώγιμα υλικά μπορούσαν να μελετηθούν με χρήση υγρού υδρογόνου που σε αντίθεση με το υγρό ήλιο είναι ποιο εύχρηστο και φτηνό. Οι επονομαζόμενοι υπεραγωγοι υψηλών θερμοκρασιών(high-Tc) όχι μόνο ξεπερνούν κατά πολύ την υψηλότερη προβλεπόμενη από τη BCS θερμοκρασία μετάβασης, αλλά παραβλέπουν και την υπόθεση πως η υπεραγωγιμότητα δε μπορεί να εμφανιστεί σε μαγνητικά υλικά. Σήμερα οι υπεραγωγοί πάνω από 77K είναι αρκετά συνηθισμένοι και μπορούν να βρεθούν σε πολλά εργαστήρια. Επιπλέον η κούρσα για ανακάλυψη νέων υπεραγωγών μεγαλύτερων θερμοκρασιών και με καταλληλότερες για εφαρμογές ιδιότητες ακόμα συνεχίζεται, και μπορούμε να δούμε στο Σχ. B΄.1 την εξέλιξη στα υπεραγώγιμα υλικά που χρησιμοποιούνται.

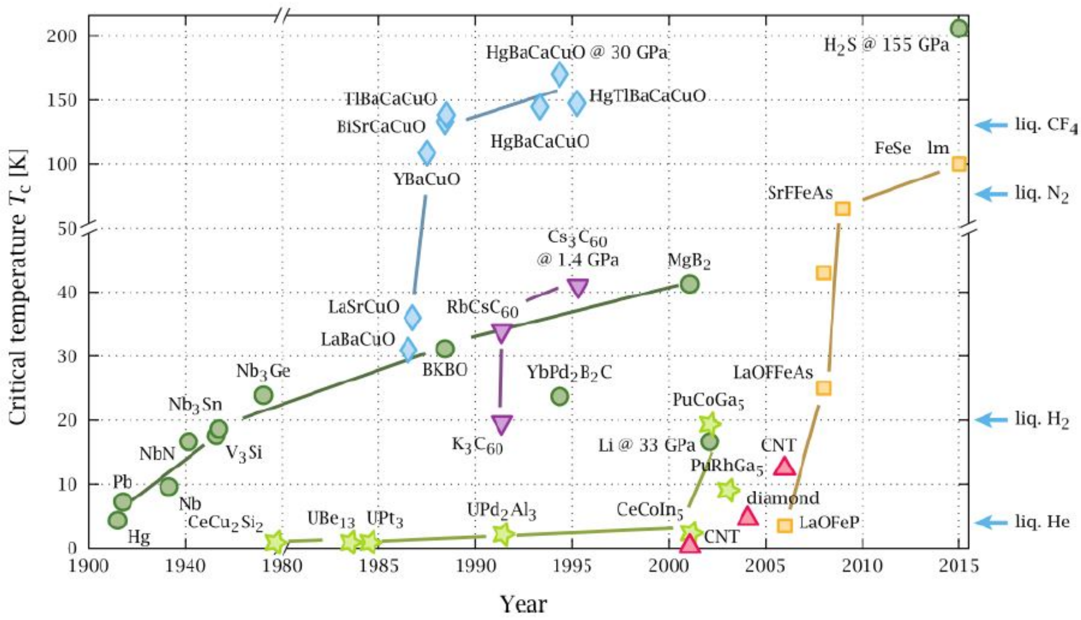
Σύντομο χρονοδιάγραμμα σημαντικότερων βημάτων στη εξέλιξη της θεωρίας αλλά και των πειραματικών ανακαλύψεων της υπεραγωγιμότητας στο πίνακα B΄.1 και για μια εκλαϊκευτική εισαγωγή επίσης και εδώ [53], [56].

## B΄.2 Η μικροσκοπική θεωρία μέσου πεδίου BCS

Εδώ θα παρουσιάσουμε μια σύντομη εκλαϊκευμένη εξήγηση του γιατι συμβαίνει η υπεραγωγιμότητα σύμφωνα με την BCS. Το πρώτο πράγμα που πρέπει να αντιληφθούμε είναι πως δε αποκτούν ξαφνικά τα ηλεκτρόνια ανοσία στις σκεδάσεις από τις ατέλειες ή μεταξύ τους, αλλά ότι απλά η σκέδαση δεν επηρεάζει την αγωγιμότητα. Τα δύο ηλεκτρόνια στο υπεραγώγιμο ζεύγος έχουν ίσες και αντίθετες ορμές μεταξύ τους, αντίθετα σπιν και βρίσκονται στην επιφάνεια Fermi. Όλα τα ζευγάρια είναι ενωμένα μεταξύ τους και έχουν την ίδια ταχύτητα. Εάν ένα ζευγάρι σκεδάσει με ένα φωνόνιο τότε τα δύο ηλεκτρόνια ίσως αλλάξουν τις μεμονωμένες ορμές τους αλλά η ταχύτητα του ζευγαριού κατά την ίδια κατεύθυνση θα μείνει εντελώς

[3] Το μικροσκοπικό εδώ υπονοεί τη χρήση κβαντικής μηχανικής για ακριβή περιγραφή του συστήματος.

[4] Μια ποιό εξειδικευμένη ονομασία για την $T_c$ είναι θερμοκρασία υπεραγώγιμης μετάβασης(superconducting transition temperature).




Σχήμα Β′.1: Χρονοδιάγραμμα ανακάλυψης υπεραγώγιμων υλικών ($T_c$ vs Time) (Πηγή: Pia Jensen Ray Master's thesis, "Structural investigation of La(2-x)Sr(x)CuO(4+y) - Following staging as a function of temperature".November 2015)

ανεπηρέαστη. Στην πράξη μια κατάσταση του ζευγαριού αλλάζει σε μια άλλη κατάσταση του ζευγαριού χωρίς το ίδιο το ζευγάρι να διαλύεται. Αυτό συμβαίνει γιατί υπάρχει μεγάλο ενεργειακό κέρδος στο να διατηρούν όλα τα ζευγάρια την ίδια ταχύτητα. Ενώ κοστίζει ενέργεια ένα ζευγάρι να φεύγει από τη συμμόρφωση με τα υπόλοιπα. Το ηλεκτρικό ρεύμα αντιπροσωπεύει αυτό το ομοιόμορφο τρόπο που κινούνται τα ηλεκτρόνια και όταν ξεκινήσει μπορεί υπάρχει για πάντα. Επιπλέον δεν είναι πραγματικά σωστό να σκεφτόμαστε ένα ζευγάρι απομονωμένο. Η κατάσταση BCS είναι γνωστή ως μια πολλών σωμάτων(many body) κατάσταση στην οποία δεν μπορούμε να ερευνούμε το σύστημα σαν ένα αριθμό από ανεξάρτητες καταστάσεις. Στην πραγματικότητα η δύναμη αυτής της κατάστασης προέρχεται λόγο της αλληλεπίδρασης αυτής μεταξύ των ζευγαριών. Τα γεγονότα σκέδασης που αλλάζουν ένα ζευγάρι σε ένα άλλο είναι η αλληλεπιδράσεις που προστατεύουν τη BCS κατάσταση. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα ένα υπεραγώγιμο ενεργειακό χάσμα, το μέγεθος του οποίου εξαρτάται από τον αριθμό των ζευγαριών της κατάστασης και όσο θερμαίνεται ο υπεραγωγός τόσο αυξάνεται η πιθανότητα κάποια ζευγάρια να σπάσουν. Όσο περισσότερα σπάνε τόσο περισσότερο ασθενής γίνεται η υπεραγώγιμη κατάσταση και μειώνεται το μεγέθους του ενεργειακού χάσματος. Το τελευταίο ζευγάρι σπάει στην υπεραγώγιμη θερμοκρασία μετάβασης.

Η θεωρία BCS δεν είναι βασισμένη στο ποια είναι η ελκτική δύναμη μεταξύ των ηλεκτρονίων, απλά υποθέτει πως υπάρχει μια τέτοια. Γι′ αυτό και αποτελεί μια πιο γενική θεωρία από όσο πιστεύονταν αρχικά και μπορεί να εφαρμοστεί και σε ποιό γενικές περιπτώσεις όπου τα ηλεκτρόνια δε ζευγαρώνουν μόνο λόγο των ταλαντώσεων του πλέγματος. Διάφορες θεωρίες τύπου-BCS έχουν χρησιμοποιηθεί σε πεδία όπως η υπερρευστότητα, η πυρηνική φυσική και η

Πίνακας Β΄.1: Χρονοδιάγραμμα Σημαντικών Εξελίξεων στη υπεραγωγιμότητα

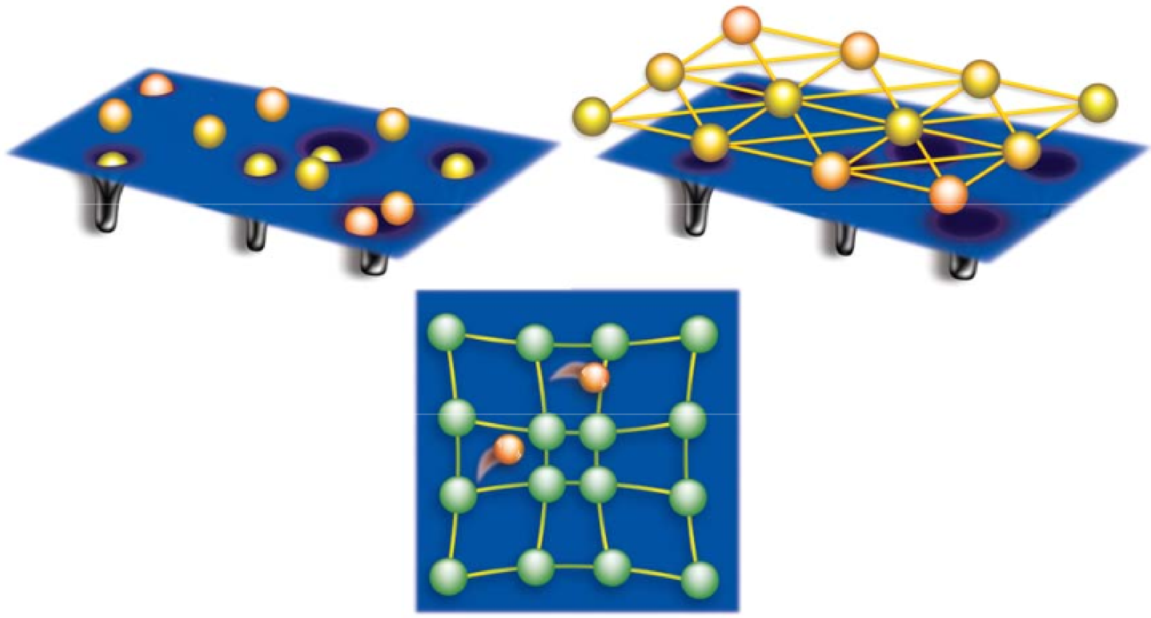
| | |
|---|---|
| 1908 | Υγροποιηση του $^4He$ στους 4.2 K |
| 1911 | Ανακάλυψη Υπεραγωγιμοτητας |
| 1925 | Προβλεψη BEC |
| 1927 | Σημείο λ στο διάγραμμα φάσης του $^4He$ στους 2.2 K |
| 1933 | Φαινόμενο Meissner-Ochsenfeld |
| 1937 | Υπερευστότητα στο $^4He$ |
| 1950 | GL θεωρια υπεραγωγιμοτητας |
| 1957 | Θεωρια BCS |
| 1957 | Θεωρητική πρόβλεψη των δινών Abrikosov |
| 1962 | Φαινομενο Josepshon |
| 1963 | Μηχανισμος Aderson-Higgs |
| 1971 | Υπερρευστοτητα στο $^3He$ στους 2.8 mK |
| 1986 | Υπεραγωγιμοτητα Υψηλων Θερμοκρασιών |
| 1995 | BEC επιτευχθει πρωτη φορά σε ατομικά αέρια στους 0.5 K |
| 2000 | Συνύπαρξη Υπεραγωγιμότητας και φερρομαγνητισμού στο $UGe_2$ |
| 2001 | Υπεραγωγιμότητα στο $MgB_2$ στους 39 K |
| 2008 | Υπεραγωγιμότητα στο $LaFeAsO_{1-x}F_x$,πλεόν έχουμε σίδηρο και όχι χαλκό |
| 2015 | Υπεραγωγιμότητα στο $H^2S$ στους 203,5 K και ακραία πίεση 155 GPa |

φυσική υψηλών ενεργειών. Κάποια κλασικά βιβλία για περαιτέρω μελέτη αποτελούν τα [55], [56] και [57].

### Β΄.2.1 Ζεύγος Cooper

Στη συμβατική BCS, η ελκτική αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων συμβαίνει λόγο της ανταλλαγής πλεγματικών ταλαντώσεων(φωνόνια)[5]. Η κίνηση ενός ηλεκτρονίου στο μέταλλο προκαλεί μια δυναμική τοπική διαταραχή στον κρύσταλλο. Αυτή η διαδικασία διαδραματίζετε σε δύο διαφορετικές χρονικές κλίμακες.Και όπως απεικονίζεται και στο Σχ. Β΄.3, ένα ηλεκτρόνιο θέλει χρόνο περίπου $E_F^{-1}$ για να διασχίσει τους άμεσους γείτονες στο κρυσταλλικό πλέγμα και να προκαλέσει διαταραχή από τη θέση ισορροπίας σε μια διαμόρφωση που και τα δύο σωματίδια βρίσκουν ενεργειακά επωφελή(δύο πάνω πάνελ). Όταν το ιόν του πλέγματος διεγερθεί χρειάζεται χρόνο $\omega_D^-1 >> E_F^{-1}$ για να ηρεμίσει πίσω στην θέση ισορροπίας. Εδώ το $\omega_D$ αντιπροσωπεύει την συχνότητα Debye συνήθως. Αυτό σημαίνει πως σε πολύ μετά το πέρασμα του πρώτου ηλεκτρονίου, ένα δεύτερο ηλεκτρόνιο ίσως επωφεληθεί από το διαταραγμένο δυναμικό. Η πλεγματική επίδραση του μηχανισμού καθυστέρησης είναι το αποτέλεσμα της

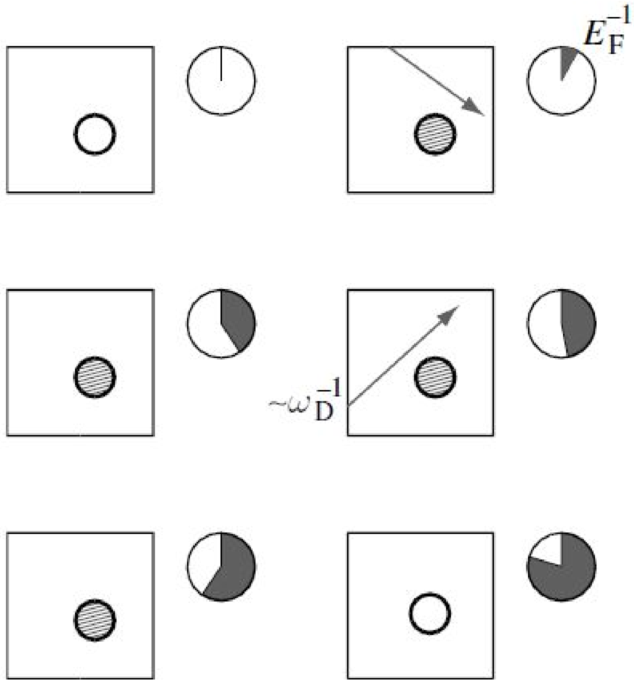
[5]Παρατηρήθηκε πως στα ισότοπα οι θερμοκρασίες υπεραγώγιμης μετάβασης του ίδιου στοιχείου ήταν διαφορετικές, η διαφορά στη μάζα του πυρήνα των ισοτόπων που επηρεάζει τις πλεγματικές ταλαντώσεις παίζει ρόλο στον καθορισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας Tc, έτσι καταλαβαίνουμε πως ένας φωνονικός μηχανισμός ευθύνεται για την δημιουργία των ζευγών.



Σχήμα Β′.2: Η θεωρία BSC εισήγαγε δύο ισχυρές ιδέες στη θεωρητική φυσική το ζευγάρωμα και τη συνοχή(coherence), που βλέπουμε στα δύο πάνω σχήματα. Υποθέτοντας πως έχουμε ένα ανώμαλο έδαφος και ένα μεγάλο αριθμό από μικρές μπάλες απλωμένες. Αν εφαρμόσουμε μια δύναμη σε όλες τις μπάλες θα μετακινήσουμε κάποιες από αυτές, ενώ άλλες θα κολλήσουν στη λακκούβες. Εάν ωστόσο ενώναμε όλες τις μπάλες σε ένα μεγάλο στερεό αντικείμενο αυτό με την εφαρμοζόμενη δύναμη σε κάθε μπάλα θα κινούνταν σαν το έδαφος από κάτω να ήταν λείο. Φαίνεται πως η μακροσκοπική συνοχή των ηλεκτρονίων είναι δυνατή εάν τα ηλεκτρόνια είναι δεσμευμένα σε ζευγάρια που μεταξύ τους έχουν χωρική επικάλυψη. (Πηγή: [59])

ελκτικής δύναμης μεταξύ δύο ηλεκτρονίων. Καθώς η μέγιστη ενέργεια της διέγερσης καθορίζεται από τη συχνότητα Debye, η εμβέλεια της αλληλεπίδρασης επίσης είναι περιορισμένη σε αυτές τις ενέργειες κοντά στη επιφάνεια Fermi. Στους υψηλών θερμοκρασιών υπεραγωγούς ο μηχανισμός ζευγαρώματος παραμένει αμφιλεγόμενος, αν και υπάρχουν σκέψης πως οφείλεται στις ταλαντώσεις του σπίν.

Ακολουθώντας παράλληλους δρόμους με το φαινόμενο της υπερρευστότητας του Ηλίου 4. Το $^4He$ με δύο πρωτόνια, δύο νετρόνια και δύο ηλεκτρόνια είναι μποζόνιο, ενώ το ισότοπο $^3He$ με δύο πρωτόνια αλλά μόνο ένα νετρόνιο αποτελεί φερμιόνιο. Όπως είναι γνωστό τα μποζόνια ακολουθούν την κατανομή Bose-Einstein που τους επιτρέπει να καταλαμβάνουν μια μοναδική κβαντική κατάσταση, ενώ τα φερμιόνια υπακούν την απαγορευτική αρχή του Pauli και την κατανομή Fermi-Dirac όπου δύο ταυτόσημα σωματίδια απαγορεύεται να καταλαμβάνουν την ίδια κβαντική κατάσταση. Με αυτά τα δεδομένα ο Ogg Jr υπέθεσε πως τα ηλεκτρόνια διαμορφώνουν ζεύγος και το ζεύγος αυτό είναι μποζόνιο, και αναπτύχθηκε μια εικόνα που δε μπορούσε ούτε να εξηγήσει πως υπερνικάτε η απώθηση Coulomb ούτε όμως και να κάνει σωστές προβλέψεις. Η αποτυχία αυτή της μποζονικής εικόνας έγινε πλήρως αντιληπτή με



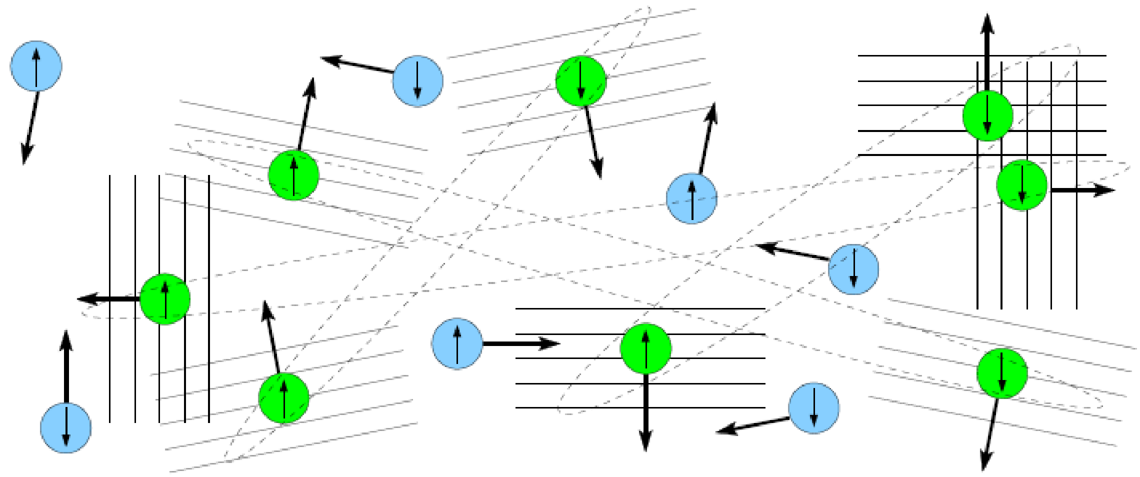

Σχήμα Β΄.3: Παράδειγμα με τα χρονικά παράθυρα του μηχανισμού ζευγαρώματος.(ΠΗΓΗ :[35])

την πρόταση της BCS πως το ζεύγος ηλεκτρονίων έφτιαχνε ένα ζεύγος με $10^4$ μεγαλύτερες διαστάσεις από τη μέσης απόστασης μεταξύ δύο ηλεκτρονίων. Η θεωρία αυτή έδειξε πως τα ζεύγη μπορεί να είναι ευσταθή μέσο κβαντικής αλληλεπίδρασης με τα άλλα ζευγάρια. Τα ζεύγη Cooper λοιπόν έχουν τεράστια επικάλυψη μεταξύ τους στον πραγματικό χώρο(ΣχΒ΄.4).

## Β΄.3 Υπεραγωγοί υψηλών θερμοκρασιών

Τα σημαντικότερα γενικά χαρακτηριστικά των υπεραγωγών είναι η μηδενική ηλεκτρική αντισταση, ο τέλειος διαμαγνητισμός και η μακράς εμβέλιας κβαντομηχανική τάξη(phase coherence). Συνήθως τους χωρίζουμε τους υπεραγωγούς σε δύο κατηγορίες τους κλασικούς(ή συμβατικούς) και τους μη συμβατικούς και οι διαφορές τους συνοψίζονται στον πίνακα Β΄.2. Με τον όρο κλασική εννοούμε όλους τους υπεραγωγούς που είχαν ανακαλυφθεί πριν το 1975 και η συμπεριφορά τους θεωρείται γενικός πως περιγράφεται καλά από την BCS θεωρία. Σε αντίθεση με τους κλασικούς υπεραγωγούς, τα οξείδια του χαλκού είναι περίπλοκα υλικά με μοναδικές ιδιότητες που καθορίζονται από ισχυρές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των φορέων τους.

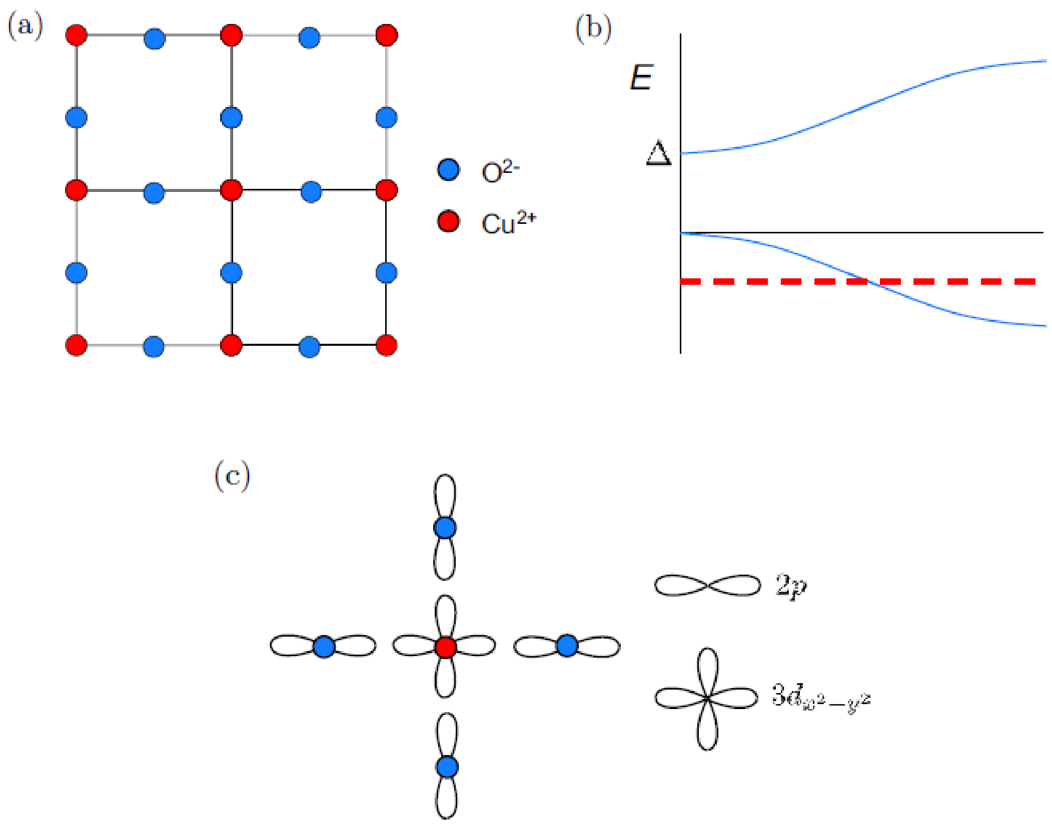
Οι περισσότεροι μη συμβατικοί υπεραγωγοί έχουν με οξείδιο του χαλκού είναι συστήματα που περιέχουν επίπεδα με CuO. Σε αυτά τα επίπεδα το οξυγόνο $O^{--}$ με διαμόρφωση σθένους $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$ ενώ ο χαλκός $Cu^{++}$ έχει διαμόρφωση $(3d)^2$. Τα 9 ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τα πέντε d τροχιακά $(d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}, d_{z^2}, d_{x^2-y^2})$ αποτελούν τέσσερα διπλά κατειλημμένα



Σχήμα Β′.4: Ένα σκίτσο στο πραγματικό χώρο για τα μηδενικής ορμής και spin singlet ζεύγη Cooper που σχηματίζουν τη συγκέντρωση ζευγών στη BCS. (Πηγή: [28])

| Συμβατική | Μη Συμβατική |
|---|---|
| Μεταβατικά Μέταλλα | Cu |
| Κυβικα(κυρίως) | Επίπεδα(χαμηλότερη χωρική συμμετρία) |
| Όχι Μονωτές,Μαγνήτες | Οξείδια,Μαγνήτες,Μονωτές |
| Φωνονικός Μηχανισμός Ζευγαρώματος | Άγνωστος Μηχανισμός Ζευγαρώματος |
| Μάλλον απλό s-wave τύπου | Ποικιλία πιθανών τύπων |
| Δεν έχω και άλλες αλλαγές φάσης | Φαίνεται να έχω ταυτόχρονες αλλαγές φάσης |

Πίνακας Β′.2: Σύγκριση Κλασικής και μη Συμβατικής Υπεραγωγιμότητας




Σχήμα Β΄.5: Ηλεκτρονιακή δομή: a)Δομή των $CuO_2$ στρωμάτων. b)Χαρακτηριστική δομή για οπές. Το χημικό δυναμικό μ είναι για περίπτωση ημικατειλημένης ζώνης. c)Cu και O τροχιακά που δημιουργούν τη μπάντα του b σχήματος. (Πηγή: [58], στο κομμάτι που έγραψε ο Elihu Abrahams, καθώς πρόκειται για συλλογή κειμένων.)

τροχιακά και ένα μόνο κατειλημμένο. Με αποτέλεσμα το σύστημα να έχει ολικό σπιν $S = 1/2$ και τα ηλεκτρόνια στη μερία του Cu να είναι μαγνητικά.(μια εικόνα της δομής τους βλέπουμε στο Σχ. Β΄.5)

Δεν είχαμε φανταστεί πως ο χαλκός ένα μαγνητικό άτομο ,μπορούσε να παίξει ρόλο στην υπεραγωγιμότητα αφού θα περιμέναμε ο μαγνητισμός να έρχεται σε αντίθεση με τα μονομελή(spin-singlet) ζεύγη Cooper. Οι κυματοσυναρτήσεις για τα τροχιακά $d_{x^2-y^2}$ έχουν μια μικρή επικάλυψη με τις γειτονικές πλευρές, κάτι το οποίο σημαίνει πως τα δύο ηλεκτρόνια μπορούν να ζευγαρώσουν είτε σε μονομελή (singlet) είτε σαν τριμελή(triplet) καταστάσεις. Επιπροσθέτως στην ασυνήθιστα υψηλή $T_c$, τα οξείδια του χαλκού(cuprates) επιδεικνύουν ένα σύνθετο διάγραμμα φάσης που αποτελείται από μαγνητική φάση μονωτή, υπεραγωγιμότητα, την λεγόμενη φάση ψευδοκενού(pseudogap phase), και non-Fermi-liquid συμπεριφορά λόγο της ισχυρής αλληλεπίδρασης(strong interaction) των d ηλεκτρονίων. Υπάρχει επίσης και συζήτηση για πιθανή ύπαρξη κβαντικού κρίσιμου σημείου μέσα στην υπεραγώγιμη περιοχή. Η θεωρία BCS, που βασίζεται σε ασθενώς αλληλεπιδρών(weak interactioning) υγρό Fermi, δεν μπορεί να περιγράψει τις ιδιότητες τέτοιων συστημάτων. Η ανακάλυψη των υψηλής θερμοκρασίας οξειδίων του χαλκού(cuprates) άρχισε μια επανάσταση στην έρευνα συμπυκνωμένης ύλης και σήμερα δεν υπάρχει μοναδική θεωρία ικανή να περιγράψει και εξηγήσει όλες τις πειραματικές παρατηρήσεις, κάνοντας τους υπεραγωγούς υψηλών θερμοκρασιών ένα από τα μεγαλύτερα θεωρητικά προβλήματα αυτού του αιώνα. Η ισχυρά συσχετιζόμενη φύση των d ηλεκτρονίων στα οξείδια του χαλκού είναι αυτό που κάνει την έρευνα που χρησιμοποιεί συνήθης μεθόδους αρκετά δύσκολη. Το πλέον κοινά χρησιμοποιούμενο στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης και τη θεωρητική χημεία είναι η (DFT) που χρησιμοποιείτε για υπολογισμό ενεργειακών ζωνών(band structure). Στη DFT τα ηλεκτρόνια λαμβάνονται ως ανεξάρτητα σωματίδια, και οι ηλεκτροστατικές απώσεις μεταξύ τους αντικαθίστανται με μια αλληλεπίδραση με μια μέση ηλεκτρονιακή πυκνότητα. Αυτή η προσέγγιση είναι γνωστή ως LDA, όπου μειώνει το πρόβλημα πολλών σωμάτων σε ένα πρόβλημα ενός σωματιδίου και δουλεύει καλά όταν η συσχέτιση μεταξύ των ηλεκτρονίων είναι σχετικά ασθενής, η διαφορετικά όταν τα ηλεκτρόνια έχουν σχετικά υψηλή κινητική ενέργεια. Στις ισχυρές συσχετίσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων στους μη συμβατικούς υπεραγωγούς η DFT προσέγγιση πλέον δεν είναι βάσιμη και εναλλακτικές της συνήθης DFT δε μπορούν να βρεθούν.

## Β'.4 Τοποθέτηση του προβλήματος

Γιατί είναι τόσο δύσκολο το πρόβλημα των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας. Η απάντηση είναι μάλλον λόγο της ισχυρής αλληλεπίδρασης, της χαμηλής σε διάστασης, των σπιν καταστάσεων ή λόγο των πολλών ανταγωνιστικών καταστάσεων με πολύ κοντινές ενέργειες που εξαρτώνται από τα επίπεδα νόθευσης, όλες οι κλασικές προσεγγίσεις όπως η θεωρία διαταραχών και κάποιες τεχνικές μέσου πεδίου δε μπορούν να χρησιμοποιηθούν. Μετά από αρκετά χρόνια πειραματικής και θεωρητικής έρευνας κάποια συμπεράσματα που προκύπτουν χωρίς να λάβουμε υπόψιν ένα συγκεκριμένο θεωρητικό μοντέλο είναι ([54]) :

- Η υπεραγωγιμότητα στα οξείδια του χαλκού είναι αποτέλεσμα του σχηματισμού ζευγών Cooper.
- Η κυρίαρχη περιοχή σχηματισμού είναι τα επίπεδα οξειδίου του χαλκού.
- Προσεγγιστικά τα ζεύγη αυτά σχηματίζονται ανεξάρτητα σε διαφορετικά επίπεδα, εάν έχουμε οξείδιο του χαλκού με πολλά επίπεδα.
- Ο κυρίαρχος μηχανισμός σχηματισμού ζευγών Cooper στα οξείδια του χαλκού δεν είναι μέσω φωνονικών αλληλεπιδράσεων πλέγματος όπως στη BCS θεωρία.
- Στις περισσότερες περιπτώσεις έχω μονομελής(singlet) ζεύγη.
- Στα οξείδια του χαλκού έχω τετραγωνική συμμετρία με κυρίαρχη τροχιακή κατάσταση την $d_{x^2-y^2}$.
- Το μέγεθος των ζευγών είναι κάπου μεταξύ 10-30 Å.
- Τα ζεύγη σχηματίζονται, όπως στην BCS θεωρία, από ηλεκτρόνια σε καταστάσεις ανεστραμμένου χρόνου(time-reversed).

### B'.4.1 Τα μεγάλα ερωτήματα

- Τι γεννά την υπεραγώγιμη δομή;
- Πως μπορούμε να καταλάβουμε τη κανονική φάση στα μέταλλα(bad metal states) σε υλικά με ισχυρή συσχέτιση όπου η θεωρία του υγρού-Φερμι δεν ισχύει;
- Ποιος είναι ο μηχανισμός δημιουργίας ζευγών Cooper, γιατί σχετίζεται με το μαγνητισμό;
- Γιατί υπάρχουν τόσες πολλές φάσεις που ανταγωνίζονται τόσο πολύ στην ίδια ενέργεια;
- Ποιες φάσεις είναι θεμελιώδης και ποιες γεννιούνται από τις άλλες υπάρχει καποια κυρίαρχη φάση;
- Οι εξωτικές φάσεις της ύλης παίζουν τι ρόλο στην υπεραγώγιμη φάση;
- Κατανόηση και εξήγηση διαγραμμάτων φάσης(επικρατούσα φάση, περιοχές κτλπ).
- Πως να κατασκευάζουμε νέα υλικά με ισχυρούς συσχετισμένους φορείς ή υπεραγωγούς;
- Πως να κατασκευάζουμε υπεραγωγούς όχι μόνο μεγαλύτερης θερμοκρασίας, αλλά και αντοχής σε μεγαλύτερα ρεύματα;
- Πως θα ελέγξουμε και καταλάβουμε τις δίνες στους υπεραγωγούς και γενικά τη δινοκατάσταση (flux state);

Διάφορες θεωρίες ή θεωρητικές ιδέες πάνω στην υψηλών θερμοκρασιών υπεραγωγιμότητα, που προσπαθούν να απαντήσουν κάποια από αυτά τα ερωτήματα, περιλαμβάνουν : ταλαντώσεις σπιν, ανισοτροπικά φωνόνια, εξιτόνια, ταλαντώσεις φορτίου, πλασμόνα, διπολαρόνια, υγρά σπιν, μοναδικότητες Van Hove, παραβίαση αντιστροφής χρόνου, δυναμική θεωρία μέσου πεδίου, μποζόνια σκλάβους, θεωρίες βαθμίδας, SO(5),...
Εμείς προσεγγίσουμε το πρόβλημα ως ένα μοτίβο συνυπαρχόντων συμπυκνωμάτων αντίστοιχα με τα προβλήματα που μελετήσαμε(Κεφ.4).

## B'.5 Εφαρμογές υπεραγωγών

Εδώ έχουμε εάν πλήθος διατάξεων και φαινομένων που έχουν βρεθεί χρήσιμες εφαρμογές όπως διάφορα ήδη διατάξεων squid, διατάξεις που εκμεταλλεύονται το φαινόμενο Josephson[6], πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό (NMR) κ.τ.λ. Όπου έχουμε ανιχνευτές, καθώς με χρήσιμες ενισχυτικές διατάξεις έχουν μετρηθεί πεδία τάξης μεγέθους $10^{11}$ Gauss που είναι πολλές τάξης μεγέθους ακριβέστερο από οποιαδήποτε άλλου τύπου μαγνητόμετρα και δουλεύουν σε ευρύ φάσμα συχνοτήτων από $10^{-4}$ για γεωλογικές μετρήσεις μέχρι $10^{9}$ για ανιχνευτές αξιονίων.

[6] Όπου ένα ζευγος Cooper με φαινόμενο σήραγγος(tunneling) περνάει από λεπτό στρώμα μονωτή

Με σημαίνουσες εφαρμογές πάνω στο ενεργειακό δίκτυο(energy grid) για μακράς μετάδοσης αποδοτική μεταφορά ηλεκτρισμού ή γενικά στην αποδοτικότερη παραγωγή και χρήση ενέργειας. [60]

Μια επιγραμματική λίστα με διάφορες χρήσιμες εφαρμογές ανά πεδίο χρήσης:

1. Ενεργειακές εφαρμογές

   - Maglev τρένα(φαινόμενο μαγνητικής αιώρησης). Τρένα μεγάλης ταχύτητας ($> 300$ km/h) δεν ακουμπάνε στις ράγες αλλά θα συγκρατούνται με μαγνητικές απωστικές δυνάμεις στον αέρα.
   - Αποθήκευση ενέργειας στο δίκτυο με υπεραγώγιμα συστήματα SMES (Superconducting magnetic energy storage systems).
   - Μπαταρίες (flywheel storage).
   - Μεταφορά Ηλεκτρικής ενέργειας με υπεραγώγιμα καλώδια ώστε να μειωθούν οι απώλειες Joule(σε μεγάλα δίκτυα είναι τάξη μεγέθους 7%), με κύριο πρόβλημα εδώ την ανάγκη να πάμε σε τεχνολογίες υγρού αζώτου. Ήδη τα υλικά με βάση το Βισμούθιο έχουν βρει εφαρμογή στην κατασκευή υπεραγώγημων συρμάτων και καλωδίων.
   - Κινητήρες και γεννήτριες με αντικατάσταση του ηλεκτρομαγνήτη χωρίς σιδερένιο κορμό και με υπεραγώγιμα καλώδια. Γενικότερα οι υπεραγωγοί, παράλληλα με τη βελτίωση της αποτελεσματικότητας του συστήματος, συμβάλλουν και στη μείωση του μεγέθους και του βάρους των ενεργειακών διατάξεων. Συμπαγείς και ελαφρύτεροι κινητήρες και γεννήτριες χρειάζονται ολοένα και περισσότερο σε εφαρμογές πλοίων και αεροσκαφών.
   - Πυρηνική Σύντηξη. Με χρήση υδρογόνου και ισότοπων(χωρίς απόβλητα όπως στη σχάση), είναι η μέθοδος που χρησιμοποιείται στις βόμβες Υδρογόνο. Το να γίνει όμως με ελεγχόμενο τρόπο για ενεργειακούς σκοπούς είναι ένα δύσκολο επιστημονικά και τεχνολογικά πρόβλημα που αναμένεται να λυθεί τις επόμενες δεκαετίες. Χρειαζόμαστε ισχυρά μαγνητικά πεδία να παραχθούν από υπεραγώγιμους μαγνήτες γιατί διαφορετικά η απώλεια ενέργειας θα ξεπερνά την ολική παραγωγή.

2. Εφαρμογές στην υγεία

   - Αξονικοί τομογράφοι μαγνητικού συντονισμού.
   - MRI-Magnetic Resonance Imaging μαγνητική τομογραφία για μη επεμβατική ιατρική. Βασίζεται στο πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό(Nuclear magnetic resonance) MSI Απεικόνιση μαγνητικών πηγών για σάρωση του εγκεφάλου.
   - Φάρμακα που κατευθύνονται με μαγνήτες (Localized drugs).
   - Μαγνητοκαρδιογράφημα και Μαγνητοεγκεφαλογράφημα.

3. Πειράματα άλλων τομέων φυσικής

- Επιταχυντές. Μία από τις κυριότερες χρήσεις σήμερα για τη μελέτη των στοιχειωδών συστατικών της ύλης, στους μεγάλους μαγνήτες του Large Hardon Collider (LHC).
- Squid για μέτρηση σεισμικότητας.
- (TES) Bolometer μαζί με SQUID για μεγάλης ακρίβειας μετρήσεις σε φάσμα απώτερης υπέρυθρης ακτινοβολίας για κοσμολογικές μετρήσεις.([58])

4. Θεωρητική επιστήμη

- Στοιχειώδη Σωματίδια και Κοσμολογία. Το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας(spontaneous symmetry breaking) που προέρχεται απο την Ginzburg-Landau θεωρία, μας βοηθά να εξηγήσουμε κάποιες πλευρές του φαινομένου Meissner, αυτό συμβαίνει από τον τρόπο που η φάση την μακροσκοπικής κυματοσυνάρτησης πηγαίνει σε μια τιμή (σπάζοντας τη συμμετρία) προκαλώντας έτσι ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις που επηρεάζουν συνήθως μακράς απόστασης να γίνουν μικρής απόστασης μέσα στον υπεραγωγό. Στη πραγματικότητα οι εξισώσεις που περιγράφουν το μαγνητικό πεδίο μέσα στον υπεραγωγό μοιάζουν σαν να έχουν γραφεί με τέτοιο τρόπο σαν να έχουν μάζα τα φωτόνια. Δεν έχουν μάζα παρόλαυτα στο εσωτερικό του υπεραγωγού η στενή σύζευξη ρεύματος και μαγνητικού πεδίου σημαίνει πως τα φωτόνια όντως συμπεριφέρονται σαν να έχουν μάζα. Αυτό δημιουργεί κοντινής απόστασης ηλεκτρομαγνητικές δυνάμεις και την εμφάνιση επιφανειακών ρευμάτων στους υπεραγωγούς τα οποία θωρακίζουν το εσωτερικό από μαγνητικά πεδία εξού και το φαινόμενο Meissner. Αυτή η εμφάνιση μάζας στη συμπεριφορά των φωτονίων προέρχεται από το σπάσιμο συμμετρίας. O Philip Aderson αναρωτήθηκε αν η φυσική των υπεραγωγών έχει πιο γενικές εφαρμογές και σε άλλα πεδία της φυσικής, κάτι που οδήγησε στη πρόβλεψη του μποζονίου Higgs. Η ιδέα (απλοποιώντας) ήταν πως η μάζα στο σύμπαν φαίνεται ως τέτοια με παρόμιο τρόπο όπως το φωτόνιο φαίνεται να έχει μάζα στον υπεραγωγό, και το σύμπαν είναι διαπερατό από μποζόνια Higgs όπως ο υπεραγωγός είναι διαπερατός από υπεραγώγιμα ζεύγη.
- Επεκτάσεις της BCS και άλλων θεωριών της υπεραγωγιμότητας σε ατομικό πυρήνα, αστέρα νετρονίων, υψηλής πυκνότητας ύλη κουάρκ και σύνδεση του ζευγαρώματος με ψυχρά νέφη ατομικών φερμιονίων. Με εφαρμογές ακόμα και λίγο μετά την ανακάλυψη της BCS σε πυρήνες ατόμων και ύλη σε αστέρες νετρονίων.
- Με εφαρμογές στα στοιχειώδη σωματίδια και στο σπάσιμο συμμετρίας στις υψηλές ενέργειες.
- Υγρό πρωτονίων αναμένεται να συμπεριφέρεται σα Τύπου II υπεραγωγός μαζί με άλλες καταστάσεις.([58])
- Η έλξη ζευγαρώματος και η χειρομορφική συμμετρία(Chiral Symmetry). Η βασική συμμετρία των ισχυρών αλληλεπιδράσεων είναι η χειρόμορφη, η διατήρηση της χειρομορφίας (το σπιν ενός σωματιδίου μαζί με την κατεύθυνση της ορμής) των άμαζων κουάρκς. Η χειρόμορφη συμμετρία σπάει αυθόρμητα στο κανονικό κενό,

γεννώντας κουάρκ-αντικουάρκ με συγκεντρώσεις ανάλογες με τη μαγνήτιση στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης. Ανάλογη προσέγγιση δηλαδή με τους όρους της θεωρίας Ginzburg-Landau για την υπεραγωγιμότητα.

- Πρόβλεψη της υπερευστης κατάστασης του $^3He$ και $^4He$.

5. Άλλες εφαρμογές

    - Φαινόμενο Josephson για κατασκευή ηλεκτρονικών υπολογιστών μεγάλη ταχύτητα, μικρές απώλειες - υποψήφιες για υπολογιστές του μέλλοντος μαζί με κβαντικούς και μοριακούς υπολογιστές.

# Βιβλιογραφία


[1] P. W. Anderson, *More is Different* Volume 177, August 1972 Science .

[2] P. L. Taylor and O. Heinonen, *A Quantum Approach to Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, 2002 .

[3] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in Many Body Problem*, 2nd Edition, 1974 .

[4] David Jiles, *Introduction to Magnetism and Magnetic Materials*,3rd Edition.2015.

[5] Robert M. White, *Quantum Theory of Magnetism ,Magnetic Properties of Materials*,3rd edition,Springer Series in Solid-State Sciences,2007.

[6] Gerald D. Mahan, Many-Particle Physics (Physics of Solids and Liquids) *3rd ed. Springer* (2000).

[7] David J. Gross, *The role of symmetry in fundamental physics* Vol. 93, pp. 14256–14259, December 1996 Colloquium Paper .

[8] Stephen Blundell, *Magnetism in Condensed Matter*, Oxford University Press 2001.

[9] P.Papon, J. Leblond and P. Meijer, The Physics of phase transitions, *2nd Edition Springer*, 2006.

[10] S.Tsonis, P.Kotetes, G.Varelogiannis and P.B.Littlewood, *Patterns of coexisting superconducting and particle-hole condensates* ,arXiv:0804.2450v2 (2008).

[11] E. Fradkin,S. A. Kivelson and J. M. Tranquada, *Theory of Interwined Orders in High Temperature Superconductors* ,arXiv:1407.4480v3 (April 2015).

[12] S.B. Dugdale, *Life on the edge: a beginner's guide to the Fermi surface*, Physica Scripta (April 2016).

[13] J. Sadowski, *'Interplay of Charge Density Modulations and Superconductivity* ,University of Saskatchewan, April 2011.

[14] G. Gruner, *Density waves in solids*, Perseus Publishing, (1994).

[15] C. Nayak, *Phys. Rev. B 62*, 4880 - 4889 (2000) .

[16] P. Thalmeier, *Phys. Rev. B 62*, 4880 - 4889 (2000).

[17] P. Thalmeier, arxiv:0409363v1, 2004 .

[18] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, *J. Phys.: Conf. Ser. 150, 042007* (2009).

[19] P. Kotetes and G. Varelogiannis, *Chirality Induced Tilted-Hill Giant Nernst Signal, PRL 104, 106404* , (2010) .

[20] S. Gerber, H. Jang, H. Nojiri and others, *Three-dimensional charge density wave order in* $YBa_2Cu_3O_{6.67}$ *at high magnetic fields.*, Science, Vol. 350 (20 Nov 2015) .

[21] N. Harrison, *Physical Review Letters 102*206405 (2009).

[22] H.Yamase, *et al,*, 155117, (2007).

[23] J. Quintanilla, *Pomeranchuk instability: symmetry breaking and experimental signatures*, (2008).

[24] M. Kitatani, N. Tsuji and H. Aoki, *Interplay of Pomeranchuk instability and superconductivity in the two-dimensional repulsive Hubbard model*, PHYSICAL REVIEW B 95, 075109 (2017).

[25] R. Fernandes,A.Chubukov and J. Schmalian, *What drives nematic order in iron-based superconductors?* , DOI: 10.1038/NPHYS2877 (2014).

[26] Anthony J. Leggett, *Quantum Liquids : Bose condensation and Cooper pairing in condensed-matter systems* , Oxford University Press, 2006 .

[27] Ulrich Rossler, *Solid State Theory, An Introduction*, 2rd Edition, Springer,2009.

[28] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction,* Oxford University Press, Oxford 2004. H. Βρυυς ανδ K. Φλενσβεργ, Μανψ-Βοδψ Χυαντυμ Τηεορψ ιν ὂνδενσεδ Ματτερ Πηψσιςς: Αν Ιντροδυςτιον, Οξφορδ Υνιερσιτψ Πρεσς, Οξφορδ 2004

[29] A.I. Solomon and J. Birman, J. Math. *Phys. 28, 1526*, (1987).

[30] Markiewicz R S and Vaughn M T, J. Math. *Phys. Rev. B 57 R14052*, (1998).

[31] A.Abrikosov ,L.P. Gorkov and I.E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* ,(Prentice-Hall Inc.,New Jersey,1963.

[32] L.P. Gor'kov, *Sov. Phys. JETP* 34, 505 (1958).

[33] Y.Nambu, Phys. Rev. 117 ,648 (1960).

[34] G. C. Psaltakis and E. W. Fenton, Physics of Solids and Liquids *J. Phys. C: Solid State Phys. 16, 3913* (1983).

[35] A.Altland and B.D.Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press (2006).

[36] M.P. Marder, Condensed Matter Physics, *Wiley and Sons 2nd. Ed.* 2010.

[37] A.Απέρης, Διδακτορική Διατριβή ΕΜΠ (2012).

[38] M.Γεωργίου, Διδακτορική Διατριβή ΕΜΠ (2010).

[39] Π.Κοττετές, Διδακτορική Διατριβή ΕΜΠ (2011).

[40] Cohen Tannoudji, *Quantum Mechanics*,Vol2.

[41] J.J.Sakurai, Jim Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley.

[42] Ramamurti Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*.

[43] Georgios Varelogiannis, *General Rule Predicting the Hidden Induced Order Parameters and the Formation of Quartets and Patterns of Condensates*, (2013).

[44] Georgios Varelogiannis, *Ferromagnetism and Colossal Magnetoresistance from Phase Competition*, (2000).

[45] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics* ,Sec. 8-4, Wiley & Sons, New York (1974) .

[46] John B. Goodenough, *Spin-Orbit-Coupling Effects in Transition-Metal Coumpounds* ,physical review,vol 171,number 2 (1968).

[47] G. Spavieri and M. Mansuripur, *Origin of the Spin-Orbit Interaction* ,Physica Scripta 90,085501 (2015).

[48] H. Kamerlingh Onnes, *Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden Nos.* .119,120,121 1911.

[49] W. Meissner and R.Ochsenfeld, *Nturwiss* 21,787 (1933).

[50] V.L. Ginzburg and L.D. Landau, *J.Exptl. Theoret. Phys. (USSR)* 20 1064(1950).

[51] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer. Phys. Rev. B 108, 1175(1957).

[52] JJ.G. Bednorz and K.A. Muller, Possible high-Tc superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter* 64:189–193, 1986. 10.1007/BF01303701 .

[53] Stephen Blundell, *Superconductivity ,A Very Short Introduction*,Oxford University Press 2009.

[54] Anthony J. Leggett, *What DO we know about high $T_c$?* NATURE PHYSICS, Vol2, MARCH 2006 .

[55] P.G. de Gennes, Superconductivity of metals and alloys, *Westview Press*,1966.

[56] J.F. Annet, *Superconductivity, Superfluids, and Condensates* , Oxford Master Series in Physics (2004).

[57] E.N. Οικονόμου, *Φυσική Στερεάς Κατάστασης* , Τόμος II ΠΕΚ (2003).

[58] Edited by Leon N. Cooper and Dmitri Feldman, *BCS:50 Years* , World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.(2011).

[59] Basic research needs for Superconductivity, *Report of the Basic Energy Sciences Workshop on Superconductivity* , (May 2006). Βασις ρεσεαρςη νεεδς φορ Συπερςονδυςτιιτψ, Ρεπορτ οφ τηε Βασις Ενεργψ Σςιενςες Ωορκσηοπ ον Συπερςονδυςτιιτψ, Μαψ 2006

[60] New Science for a Secure and Sustainable Energy Future, *A Report from the Basic Energy Sciences Advisory Committee,U.S. Department of Energy* (December 2008).