

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ

Διδακτορική Διατριβή

ΘΕΩΡΗΤΙΚΗ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ
ΤΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΙΣΧΥΡΑ ΣΥΣΧΕΤΙΣΜΕΝΩΝ
ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΠΑΡΟΥΣΙΑ
ΚΒΑΝΤΙΚΩΝ ΚΑΤΑΣΤΑΣΕΩΝ ΤΑΞΕΩΣ

Παναγιώτης Κοτετές

Επιβλέπων Καθηγητής

Αναπλ. Καθ. Γεώργιος Βαρελογιάννης

Αθήνα, Μάιος 2011

Πρόλογος

Έναν αιώνα μετά την ανακάλυψή του, το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας συνεχίζει να αποτελεί μία ανεξάντλητη πηγή επαναστατικών ιδεών, μία αφορμή για την ανάπτυξη προηγμένων πειραματικών μεθόδων καθώς και ένα μοναδικό μέσο για την υλοποίηση καινοτόμων τεχνολογικών εφαρμογών. Πρόσφατα πειράματα και ανεξήγητα φαινόμενα σε κατηγορίες πολύπλοκων υλικών, που αποκαλούμε μη-συμβατικούς υπεραγωγούς, προσφέρουν και πάλι το ερέθισμα για την αναθεώρηση, βελτίωση και εμπάθυνση στους μηχανισμούς που κρύβονται πίσω από το ίδιο το φαινόμενο. Αυτή τη φορά, δεν είναι οι ίδιες οι υπεραγωγίμες καταστάσεις που ζητούν μία αναθεωρημένη αντιμετώπιση, αλλά το συνολικό διάγραμμα φάσης που χαρακτηρίζει αυτά τα υλικά, και συγκεκριμένα, οι μη-υπεραγωγίμες φάσεις που εμφανίζονται σε αυτό. Σε μία μεγάλη μερίδα αυτών των υλικών, οι συγκεκριμένες φάσεις παρουσιάζουν εξωτικά φαινόμενα και ένα πλήθος ασυνήθιστων ιδιοτήτων. Μάλιστα, πέρα από το έντονο επιστημονικό ενδιαφέρον που προσελκύουν ως μεμονωμένες αινιγματικές καταστάσεις της ύλης, αποτελούν ταυτόχρονα και το κλειδί για την κατανόηση του σχηματισμού της μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας. Κι αυτό, διότι είναι αυτές που μετασχηματίζονται στην υπεραγωγίμη φάση κατά τη μεταβολή κάποιων συνθηκών όπως είναι η θερμοκρασία, η πίεση, η νόθευση και το μαγνητικό πεδίο.

Χαρακτηριστικά παραδείγματα μη-συμβατικών υπεραγωγών που επιδεικνύουν μία ασυνήθιστη μη-υπεραγωγίμη φάση, αποτελούν οι υπεραγωγοί υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού καθώς και ο υπεραγωγός βαρέων φερμιονίων URu_2Si_2 . Οι δύο κατηγορίες υλικών χαρακτηρίζονται από ένα ποιοτικά όμοιο διάγραμμα φάσης, σε διαφορετικές όμως ενεργειακές κλίμακες. Η μη-συμβατική υπεραγωγίμη κατάσταση, εμφανίζεται στο διάγραμμα φάσης των δύο υλικών καλά εγκλωβισμένη κάτω από μία εξωτική κατάσταση με μη καλά καθορισμένη προέλευση, όπως και με μία πληθώρα αμφιλεγόμενων ιδιοτήτων. Στην περίπτωση των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας η μη-ταυτοποιημένη κατάσταση αποκαλείται ως ψευδοχάσμα (pseudogap), ενώ στην περίπτωση του URu_2Si_2 η αντίστοιχη φάση αποκαλείται 'κρυμμένη κατάσταση' τάξης (hidden order). Οι συγκεκριμένες μη-υπεραγωγίμες καταστάσεις, αποτελούν μη-συμβατικά συμπυκνώματα στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής, τα οποία ευνοούνται από τις ίδιες αλληλεπιδράσεις που οδηγούν στον σχηματισμό της μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας.

Στην παρούσα διατριβή θα επικεντρωθούμε στα κοινά χαρακτηριστικά που διέπουν την συμπεριφορά των προαναφερθέντων αινιγματικών μη-υπεραγωγίμων φάσεων και θα αναζητήσουμε μια κοινή προέλευση για έως τώρα ανεξήγητα φαινόμενα που παρουσιάζουν, όπως είναι η γιγαντιαία θερμοηλεκτρική απόκριση Nernst. Η περιοχή του ψευδοχάσματος καθώς και η 'κρυμμένη κατάσταση', εμφανίζουν ένα ασυνήθιστα υψηλό σήμα Nernst, το οποίο παρουσιάζει ένα ιδιαίτερο και ταυτόχρονα χαρακτηριστικό θερμοκρασιακό προφίλ. Εώς τώρα, το εν λόγω φαινόμενο Nernst είχε γίνει αποδέκτης διάφορων ερμηνειών, με δύο βασικούς άξονες. Είτε ερμηνεύτηκε ως αποτέλεσμα παρουσίας υπεραγωγίμων δινών, είτε λόγω της απόκρισης μονοσωματιδιακών διεγέρσεων. Βασιζόμενοι στην ύπαρξη αλληλεπιδράσεων που ευνοούν τον σχηματισμό μη-συμβατικών καταστάσεων, θα προσπαθήσουμε να αναδείξουμε ότι η ύπαρξη Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν μπορεί να ερμηνεύσει τα συγκεκριμένα φαινόμενα.

Οι Τοπολογικές καταστάσεις που θα μελετήσουμε, χωρίζονται στις Χειρικές (Chiral) που παραβιάζουν σε μακροσκοπικό επίπεδο την συμμετρία αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} και στις Ελικοειδείς (Helical)

που την διατηρούν. Οι καταστάσεις αυτές αποτελούν συνύπαρξη δύο μαγνητικών ή μη, μη-συμβατικών συμπυκνωμάτων στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής με μη-αναγωγίσιμες κρυσταλλικές αναπαραστάσεις d_{xy} και $d_{x^2-y^2}$, και πεπερασμένο κυματόνισμα Q . Η δυνατότητα εμφάνισης μη-συμβατικών κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν σε αυτές τις περιοχές του διαγράμματος φάσης αυτών των υλικών, έχει υποστηριχθεί σθεναρά στο παρελθόν, τόσο θεωρητικά όσο και πειραματικά. Για παράδειγμα, η υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας είναι τύπου $d_{x^2-y^2}$ και έχει προταθεί ότι η κατάσταση του τροχιακού αντισιδηρομαγνήτη $id_{x^2-y^2}$, μπορεί να ελοχεύει στην περιοχή του ψευδοχάσματος. Αντίστοιχες προτάσεις έχουν κατατεθεί και στην περίπτωση του υπεραγωγού βαρέων φερμονίων URu₂Si₂.

Η δική μας καινοτόμα συνεισφορά, αφορά στην πρόταση μίας πιο ολοκληρωμένης εικόνας για τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα μεταφοράς σε αυτά τα υλικά. Όπως θα δείξουμε σε αυτήν τη διατριβή, οι τροχιακές καταστάσεις του τύπου $d_{x^2-y^2}$ ή d_{xy} , είναι επιδεικτικές στη μετάβαση σε Τοπολογικές καταστάσεις κατά την εφαρμογή ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Κατ' αυτόν τον τρόπο, εάν πράγματι προϋπάρχει μία τροχιακή κατάσταση $id_{x^2-y^2}$, κάθε φορά που εκτελούμε μία θερμοηλεκτρική μέτρηση Nernst, επάγουμε μία Τοπολογική κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ η οποία με τη σειρά της επηρεάζει σημαντικά την απόκριση του συστήματος. Συνεπώς, για τη μελέτη των θερμοηλεκτρικών ιδιοτήτων μεταφοράς οφείλουμε να συμπεριλάβουμε τις επαγόμενες Τοπολογικές καταστάσεις. Χρησιμοποιώντας, τόσο θεωρητικές αλλά και υπολογιστικές μεθόδους, θα αναδείξουμε ότι τέτοια συστήματα είναι περισσότερο επιδεικτικά στην μετάβαση σε Χειρικές καταστάσεις παρά σε Ελικοειδείς, τουλάχιστον για μικρά μαγνητικά πεδία. Το συγκεκριμένο συμπέρασμα είναι συμβατό με τις συμμετρίες που παραβιάζουν οι συγκεκριμένες καταστάσεις. Σύμφωνα με το κεντρικό αποτέλεσμα αυτής της διατριβής, οι Χειρικές καταστάσεις, οι οποίες αποτελούν και τις κυρίαρχες επαγόμενες Τοπολογικές καταστάσεις, παρουσιάζουν ένα Γιγαντιαίο Φαινόμενο Nernst με μία ιδιαίτερη θερμοκρασιακή εξάρτηση η οποία συνάδει με την παρατηρούμενη πειραματική.

Η τοπολογική προέλευση της Χειρικής θερμοηλεκτρικής απόκρισης που προτείνουμε, εγγυάται τον γενικό χαρακτήρα των αποτελεσμάτων μας και παρουσιάζεται ως μία δυνατή διέξοδος να κατανοηθεί το συγκεκριμένο φαινόμενο που διέπει την απόκριση ενός μεγάλου αριθμού υλικών, με ριζικά διαφορετική μικροδομή. Πέρα όμως από την Γιγαντιαία θερμοηλεκτρική απόκριση Nernst που προαναφέραμε, οι Τοπολογικές καταστάσεις παρουσιάζουν μία πλειάδα επιπρόσθετων χαρακτηριστικών, τα οποία θα μελετήσουμε στον κύριο όγκο αυτής της διατριβής. Με αφετηρία ένα μικροσκοπικό εκτεταμένο μοντέλο Hubbard και χρησιμοποιώντας μεθόδους της Θεωρίας Μέσου Πεδίου, της Κβαντικής Θεωρίας Πεδίου, των Ολοκληρωμάτων διαδρομής και των μαγνητικών πεδίων Berry, θα μελετήσουμε άκρως σημαντικές ιδιότητες των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, όπως είναι το διάγραμμα φάσης, η δυνατότητα Τοπολογικών Κβαντικών μεταβάσεων Φάσης, η ύπαρξη Χειρικών και Ελικοειδών συνοριακών φερμονικών βαθμών ελευθερίας (chiral and helical edge modes), τα Αυθόρμητα Κβαντικά Ηλεκτρικά, Μαγνητικά και Μαγνητοηλεκτρικά Φαινόμενα Hall, η προκύπτουσα εγγενής τροχιακή μαγνήτιση, η μαγνητική επαγωγή των Τοπολογικών καταστάσεων, η Αυθόρμητη Μαγνητοθερμοηλεκτρική απόκριση Hall και τέλος θα έχουμε την ευκαιρία να εφαρμόσουμε όλες αυτές τις ιδιότητες για την κατανόηση της φαινομενολογίας των εξωτικών καταστάσεων που εμφανίζονται στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας και τον υπεραγωγό βαρέων φερμιονίων URu₂Si₂.

Preface

A century after its discovery, the phenomenon of superconductivity continues to constitute an endless source of revolutionary ideas, a reason for the development of state-of-the-art experimental methods, as also a unique path for the realization of novel technological applications. Recent experiments and unexplained phenomena in classes of complex materials, dubbed unconventional superconductors, resuscitate the stimulus for revision, improvement and introspection of the mechanisms that underly the nature of the phenomenon of superconductivity itself. This time, the required revised perspective does not concern the superconducting states themselves, but the entire phase diagram that dictates these materials, and specifically its non-superconducting regions. In the majority of these materials, the specific phases exhibit exotic phenomena and a number of unusual properties. As a matter of fact, apart from the intense scientific interest which they attract as individual enigmatic states of matter, they constitute in the same time the key for revealing the motives leading to the formation of unconventional superconductivity. This belief stems from the fact, that these states are the ones that give rise to superconductivity upon the variation of certain quantities such as temperature, pressure, doping and magnetic field.

Representative examples of unconventional superconductors that exhibit an unusual non - superconducting phase, comprise of the cuprate high- T_c superconductors as well as the heavy fermion superconductor URu_2Si_2 . These two classes of materials, are characterized by a qualitatively similar phase diagram, but in different energy scales. The unconventional superconducting state, arises in the phase diagram of both materials well confined below an exotic order of not-well defined origin, accompanied by a plethora of controversial properties. In the case of high- T_c superconductors, the undefined state is termed pseudogap, while in the case of URu_2Si_2 , the counterpart phase is dubbed hidden order. The aforementioned non-superconducting states, constitute unconventional condensates in the electron-hole channel, driven by the same interactions that lead to the formation of unconventional superconductivity.

In the present dissertation we shall focus on the common characteristics that dictate the behaviour of the aforementioned enigmatic non-superconducting phases and we shall also quest for a common origin for the still unexplained phenomena they exhibit, such as the giant thermoelectric Nernst response. The pseudogap regime and the hidden order, exhibit an unusually large Nernst signal, that presents an intricate and simultaneously characteristic temperature profile. Up to now, this phenomenon has received several explanations, along two basic directions. Either it has been explained as the consequence of superconducting vortices, or as the response of quasiparticles. Based on the existence of interactions that promote the formation of unconventional orders, we shall demonstrate that the emergence of Topological Density waves in both spin singlet and triplet channels may account for the specific phenomena.

The Topological states under study, are divided into the Chiral states that violate macroscopically time reversal symmetry \mathcal{T} and the Helical states which preserve it. These states comprise of two spin singlet or triplet unconventional particle-hole condensates carrying the irreducible representations d_{xy}

and $d_{x^2-y^2}$, and having a finite wave-vector \mathbf{Q} . The possible involvement of unconventional charge and spin density waves in the specific regions of the phase diagram of these materials, has been strongly supported in the past, both theoretically and experimentally. For example, the superconducting order in the high- T_c cuprates belongs to the $d_{x^2-y^2}$ representation and it has been suggested that the orbital antiferromagnetic state $id_{x^2-y^2}$, could lurk in the pseudogap regime. Similar proposals have been put forward also in the case of the heavy fermion superconductor URu₂Si₂.

Our novel contribution, resides to proposing a more complete picture for the thermoelectric transport phenomena of these materials. As we shall demonstrate throughout this dissertation, the orbital orders $d_{x^2-y^2}$ or d_{xy} , are susceptible to transiting to a Topological state under the application of an external magnetic field. In this manner, if indeed an orbital order of the type $id_{x^2-y^2}$ preexists, each time that we execute a thermoelectric measurement, we induce a Topological state $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ which in its turn influences severely the response of the system. As a matter of fact, we are obliged to incorporate the induced Topological states for the proper study of the thermoelectric transport properties. By employing both theoretical and computational techniques, we shall demonstrate that such systems are more susceptible to a Chiral rather than a Helical transition, at least for low magnetic fields. The specific conclusion is also compatible with the symmetries violated by these states. According to the central result of this dissertation, the Chiral states, which constitute the dominating induced Topological orders, exhibit a Giant Nernst Phenomenon with a special temperature dependence that agrees well with the one experimentally observed.

The topological origin of the Chirality induced thermoelectric response that we argue in favour of, guarantees the general validity of our results and emerges as a possible escapeway for understanding the particular phenomenon that dictates the response of a vast number of materials, owing a radically different microstructure. Apart from the Giant thermoelectric Nernst response that we have already mentioned, the Topological states exhibit a plethora of additional features, which we are going to study in the rest of this dissertation. Using as a starting point an extended Hubbard model and by employing methods of Mean Field Theory, Quantum Field Theory, Path Integral formalism and the concept of the Berry curvature, we shall study highly significant properties of the Topological Charge and Spin Density Waves, such as their Phase Diagram, the possibility of Topological Quantum Phase transitions, the existence of Chiral and Helical Edge modes, the Spontaneous Charge, Spin and Magnetoelectric Quantum Hall effects, the arising intrinsic Orbital Magnetization, the magnetic induction of Topological states, the Spontaneous Magnetothermoelectric Hall response and finally we shall have the chance to apply all these results in order to provide understanding for the phenomenology of the exotic states that arise in the high- T_c cuprate superconductors and the heavy fermion superconductor URu₂Si₂.

Περιεχόμενα

1	Μη συμβατικοί υπεραγωγοί	1
1.1	Εισαγωγή στην υπεραγωγιμότητα	1
1.1.1	Συμβατική Υπεραγωγιμότητα	3
1.1.2	Μη συμβατική Υπεραγωγιμότητα	4
1.2	Μη συμβατικοί υπεραγωγοί οξειδίων του χαλκού	5
1.2.1	Διάγραμμα φάσης	7
1.2.2	Ενεργειακό χάσμα	9
1.2.3	Σκέδαση νετρονίων	9
1.3	Μη-συμβατικός υπεραγωγός βαρέων φερμιονίων URu_2Si_2	11
1.3.1	Διάγραμμα φάσης	12
1.3.2	Ανελαστική σκέδαση νετρονίων	16
1.4	Γιγαντιαίο φαινόμενο <i>Nernst</i> σε μη-συμβατικούς υπεραγωγούς	17
1.4.1	Θερμική ισχύς και σήμα <i>Nernst</i>	18
1.4.2	Γιγαντιαίο σήμα <i>Nernst</i> στο οξείδια του χαλκού	18
1.4.3	Γιγαντιαίο σήμα <i>Nernst</i> στον υπεραγωγό URu_2Si_2	22
1.5	Τοπολογικό σήμα <i>Nernst</i> στους μη-συμβατικούς υπεραγωγούς	24
2	Μη Συμβατικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν	29
2.1	Μικροσκοπικό μοντέλο	29
2.2	Συναρμογή και γενικευμένες επιδεικτικότητες	30
2.3	Θεωρία Μέσου Πεδίου	32
2.4	Διαμορφωμένες καταστάσεις τάξεως κατά $Q = (\pi, \pi)$	35
2.5	Καταστάσεις τάξης $ \hat{z}$	37
2.6	Μονοσωματιδιακές διεγέρσεις	37
2.7	Εξισώσεις αυτοσυνέπειας	39
2.7.1	Σενάριο <i>van Hove</i>	40
2.7.2	Περίπτωση πεπερασμένου χημικού δυναμικού	41
2.7.3	Περίπτωση πεπερασμένου μαγνητικού πεδίου <i>Zeeman</i>	42
2.7.4	Δημιουργία ενεργειακού χάσματος σε όλη τη ζώνη <i>Brillouin</i>	43
2.7.5	Διάγραμμα φάσης Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν	44
2.8	Κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης	45
3	Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν	49
3.1	Τοπολογικό αναλλοίωτο	49
3.2	Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν	51
3.3	Τοπολογικές Κβαντικές Μεταβάσεις Φάσης	53

3.4	Φερμιονικές καταστάσεις στο σύνορο (<i>edge modes</i>)	55
4	Αλληλεπίδραση με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο	61
4.1	Υπολογισμός του ηλεκτρικού τετραρεύματος	61
4.2	Πεδίο Βαθμίδας $U(1)$ του Σπιν	62
4.3	Ενεργός δράση των πεδίων βαθμίδας	63
4.3.1	Τανυστής Πόλωσης	65
4.3.2	Γενική έκφραση της ενεργού δράσης	68
4.4	Εξισώσεις κίνησης της γενικής δράσης	68
4.4.1	Εξισώσεις κίνησης για το πεδίο βαθμίδας ηλεκτρικού φορτίου	69
4.4.2	Εξισώσεις κίνησης για το πεδίο βαθμίδας σπιν	70
4.5	Τοπολογική μεταφορά φορτίου και σπιν	70
4.5.1	Χειρικές Τοπολογικές Καταστάσεις	72
4.5.2	Ελικοειδείς Τοπολογικές Καταστάσεις	72
4.6	Δυναμική απόκριση και διάδοση των φωτονίων	72
4.6.1	Χειρικές Τοπολογικές Καταστάσεις	72
4.6.2	Ελικοειδείς Τοπολογικές Καταστάσεις	74
5	Αδιαβατική μεταφορά φορτίου και Γεωμετρική Φάση <i>Berry</i>	77
5.1	Γεωμετρική Φάση <i>Berry</i>	77
5.2	Μαγνητικό πεδίο <i>Berry</i>	80
5.3	Αδιαβατική Μεταφορά Ρεύματων <i>Hall</i> Φορτίου και Σπιν	81
6	Τοπολογ. Κύματα Πυκνότητας παρουσία Μαγνητικού Πεδίου	87
6.1	Τροχιακή Μαγνήτιση	87
6.2	Ελεύθερη ενέργεια και μαγνήτιση παρουσία μαγνητικού πεδίου	89
6.3	Επαγωγή Τοπολογικών καταστάσεων από το μαγνητικό πεδίο	90
6.4	Επαγωγή των Χειρικών Τοπολογικών Καταστάσεων	91
7	Μαγνητοθερμοηλεκτρικά φαινόμενα μεταφοράς	95
7.1	Ρεύμα θερμότητας	95
7.2	Αντιστοιχία μεταξύ βαρυτικού πεδίου και θερμοβαθμίδας	96
7.3	Ενεργός δράση των πεδίων του φορτίου, του σπιν και της ενέργειας	97
7.4	Τανυστής πόλωσης Τοπολογικής θερμοηλεκτρικής αγωγιμότητας	98
7.5	Ρεύμα μεταφοράς θερμότητας και ο ρόλος της τροχιακής μαγνήτισης	98
8	Τοπολογικές Χειρικές καταστάσεις σε πραγματικά Υλικά	101
8.1	Γιγαντιαίο Φαινόμενο <i>Nernst</i> στους οξειδία του χαλκού	101
8.2	Τοπολογικό Φαινόμενο <i>Meissner</i> στα οξειδία του χαλκού	106
8.3	Μη συμβατικός υπεραγωγός URu_2Si_2	107
8.4	Πρόβλεψη πολωμένου φαινομένου <i>Kerr</i>	112
9	Επίλογος	115
	Βιβλιογραφία	119
	Λίστα Δημοσιεύσεων	130

1 Μη συμβατικοί υπεραγωγοί

1.1 Εισαγωγή στην υπεραγωγιμότητα

Τα ισχυρά αλληλεπιδρώντα συστήματα παρουσιάζουν έναν πλούτο από χβαντικές καταστάσεις τάξεως, οι οποίες αποτελούν τον κύριο λόγο για την πολυπλοκότητα που συναντούμε στη φύση. Κάτω από κατάλληλες συνθήκες θερμοκρασίας, πίεσης κ.α., ένα υλικό μπορεί να αναδιοργανωθεί ριζικά, δημιουργώντας με αυτόν τον τρόπο μία πραγματικά νέα κατάσταση της ύλης. Πέρα από τα θεμελιώδη ερωτήματα που μπορούν να απαντηθούν μελετώντας αυτά τα υλικά, οι νέες ιδιότητες που αυτά παρουσιάζουν, τα καθιστούν λειτουργικά (functional materials), ανοίγοντας έτσι το δρόμο σε νέες τεχνολογικές εφαρμογές.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα τέτοιων υλικών, αποτελούν οι συμβατικοί υπεραγωγοί, που είναι υλικά τα οποία παρουσιάζουν μηδενική ηλεκτρική αντίσταση κάτω από μία κρίσιμη θερμοκρασία T_c . Η κατηγορία αυτών των υλικών ήταν για πολύ καιρό καλά κρυμμένη, λόγω του ότι η κρίσιμη θερμοκρασία για τη μετάβαση στην συμβατική υπεραγώγιμη φάση βρίσκεται σε εξαιρετικά χαμηλές θερμοκρασίες, της τάξης των λίγων κέλβιν. Μόνο μετά την υγροποίηση του Ηλίου από τον Kamerlingh Onnes [1] έγινε δυνατή η μελέτη αυτής της άγνωστης επιστημονικά περιοχής και των εξωτικών φυσικών φαινομένων που αυτή μας επιφύλασσε.

Η παρατήρηση του φαινομένου της συμβατικής υπεραγωγιμότητας από τον Onnes το 1911, δεν ήταν παρά ένας πολύ δύσκολος γρίφος που απασχόλησε από την πρώτη στιγμή την επιστημονική κοινότητα. Ιστορικά η επόμενη ιδιότητα που ήρθε στην επιφάνεια μετά τη μηδενική ηλεκτρική αντίσταση ήταν η παρατήρηση του τέλει διαμαγνητισμού ή αλλιώς του φαινομένου Meissner, το οποίο παρατηρήθηκε το 1933 από τους Meissner και Oschenfeld [2]. Ο συνδυασμός των δύο αυτών φαινομένων, οδήγησε τους Gorter και Casimir να προτείνουν το μοντέλο των δύο ρευστών. Στα πλαίσια αυτού του μοντέλου, τα υλικά αυτά αποτελούνταν από το κανονικό ρευστό ηλεκτρονίων με τις συνήθεις ιδιότητες, καθώς και από ένα υπεραγώγιμο ρευστό ηλεκτρονίων, στο οποίο αποδίδονταν όλες οι νέες ιδιότητες. Τον επόμενο χρόνο, οι αδελφοί F. και H. London με την ομώνυμη εξίσωση London, κατάφεραν να ερμηνεύσουν φαινομενολογικά το αίτιο πίσω από το φαινόμενο Meissner. Η εξήγηση είναι πολύ απλή. Στην γενικότερη περίπτωση, η ηλεκτρομαγνητική απόκριση ενός συστήματος που υπακούει στην εξίσωση Schrödinger, αποτελείται από μία παραμαγνητική συνιστώσα ρεύματος καθώς και από μία διαμαγνητική. Στα υπεραγώγιμα υλικά λοιπόν, η αναδιοργάνωση των βαθμών ελευθερίας καταφέρει να 'παγώσει' τους φορείς του ηλεκτρικού φορτίου μηδενίζοντας την παραμαγνητική συνεισφορά. Παραμένει λοιπόν μόνο η διαμαγνητική συνιστώσα, η οποία οδηγεί στην θωράκιση του υλικού από εξωτερικά μαγνητικά πεδία, ενώ ταυτόχρονα αποτελεί και το αίτιο της δίχως απόσβεσης μεταφοράς του ηλεκτρικού φορτίου.

Η μέχρι εκείνη την περίοδο πρόοδος στο πεδίο της υπεραγωγιμότητας, περιγράφηκε το 1950 με έναν συμπτυκνωμένο και κομψό τρόπο από τους Ginzburg και Landau [3], στα πλαίσια της ομώνυμης φαινομενολογικής θεωρίας της υπεραγωγιμότητας. Παρ'ολ' αυτά, εκείνη την εποχή η συγκεκριμένη θεωρητική πρόταση δεν έτυχε της ευρείας αποδοχής της επιστημονικής κοινότητας. Κεντρικό ρόλο αυτής της θεωρίας κατέχει μία μακροσκοπική μεταβλητή $\Psi(\mathbf{r})$, που όταν είναι πεπερασμένη, σηματοδοτεί τη μετάβαση στην υπεραγώγιμη κατάσταση. Η θεωρία αυτή εντάσσεται στο γενικότερο πλαίσιο της φαινομενολογικής περιγραφής Landau των συνεχών μεταβάσεων φάσης. Λόγω του ότι η υπεραγώγιμη μετάβαση συναρτίζει της θερμοκρασίας είναι συνεχής, το ίδιο ισχύει και για τη μεταβολή του μεγέθους

$\Psi(\mathbf{r})$ το οποίο ονομάζεται παράμετρος τάξης της υπεραγωγίμης μετάβασης. Σύμφωνα με τη θεωρία Ginzburg-Landau, το μέτρο της μιγαδικής παραμέτρου τάξης $|\Psi(\mathbf{r})|^2$ αντιστοιχεί στην πυκνότητα των υπεραγωγίμων ηλεκτρονίων ενώ παράλληλα η παράμετρος αυτή περιγράφεται από την πυκνότητα της ελεύθερης ενέργειας

$$\mathcal{F} = \frac{1}{2m} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla + e^* \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) \right|^2 + \alpha(T - T_c) \frac{|\Psi(\mathbf{r})|^2}{2} + v \frac{|\Psi(\mathbf{r})|^4}{4} + \frac{[\mathbf{B}(\mathbf{r})]^2}{2\mu}, \quad (1.1)$$

όπου α , v , m θετικές σταθερές, μ η μαγνητική διαπερατότητα του υλικού, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ το μαγνητικό πεδίο και e^* το φορτίο υπεραγωγίμων φορέων, το οποίο δεν είναι άλλο από $e^* = 2e$, δύο φορές δηλαδή το φορτίο των ηλεκτρονίων. Ο διπλασιασμός του φορτίου καταμαρτυρά τον σχηματισμό δέσμιων καταστάσεων μεταξύ ζευγών ηλεκτρονίων κατά την υπεραγωγίμη μετάβαση, τα οποία αργότερα ονομάστηκαν ζεύγη Cooper. Η ελαχιστοποίηση του παραπάνω συναρτησιακού ως προς την παράμετρο τάξης, μας δίνει τις αντίστοιχες εξισώσεις κίνησης που περιγράφουν τη θεμελιώδη κατάσταση του υπεραγωγού.

Η θεωρία των Ginzburg και Landau δεν αποτελεί παρά μία θεωρία ενός μη-σχετικιστικού φορτισμένου σωματιδίου με ηλεκτρικό φορτίο $e^* = 2e$. Η σύζευξη με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο επιτυγχάνεται μέσω της ελάχιστης σύζευξης (minimal coupling). Η προκύπτουσα συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ παραβιάζεται αυθόρμητα κατά τη μετάβαση στην υπεραγωγίμη κατάσταση, κάτι που αποτελεί το σημαντικότερο χαρακτηριστικό του φαινομένου. Το γεγονός αυτό έγινε αντιληπτό αρκετά αργότερα από τον P. Anderson το 1963 [4]. Ο νέος αυτός μηχανισμός δεν άργησε να χρησιμοποιηθεί από τον Higgs [5] ως ένας μοναδικός τρόπος για να δημιουργηθούν οι μάζες των θεμελιωδών πεδίων στη Φυσική των Υψηλών Ενεργειών. Παρατηρούμε ότι ο μετασχηματισμός βαθμίδας $U(1)$ εκφράζεται ως $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla\varphi(\mathbf{r})$ και $\Psi(\mathbf{r}) \rightarrow \Psi(\mathbf{r})e^{ie^*\varphi(\mathbf{r})/\hbar}$.

Παράλληλα με τους Ginzburg και Landau άλλοι ερευνητές προσπαθούσαν να κατανοήσουν σε μικροσκοπικό επίπεδο τον μηχανισμό της υπεραγωγιμότητας. Προς αυτήν την προσπάθεια κινήθηκε ο Fröhlich [6] ο οποίος τόνισε για πρώτη φορά τον καταλυτικό ρόλο που μπορούν να παίξουν τα φωνόνια και η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-φωνονίων στο σχηματισμό νέων ηλεκτρονικών καταστάσεων τάξης. Η ζύμωση όλων αυτών των νέων ιδεών έδωσε ώθηση στους Bardeen-Cooper-Schrieffer το 1957, να προτείνουν τη μικροσκοπική θεωρία BCS της συμβατικής υπεραγωγιμότητας [7]. Ξεκινώντας από μία ενεργή αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων που πηγάζει από την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-φωνονίων, κατέληξαν σε μία μικροσκοπική θεωρία που κατάφερε να δώσει απάντηση στο φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας. Η Χαμιλτονιανή της συγκεκριμένης θεωρίας στο πλαίσιο της Δεύτερης Κβάντωσης γράφεται ως εξής

$$\mathcal{H} = \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \varepsilon \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) c_{\sigma}(\mathbf{r}) - g \int d\mathbf{r} c_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) c_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) c_{\downarrow}(\mathbf{r}) c_{\uparrow}(\mathbf{r}), \quad (1.2)$$

όπου $c_{\sigma}(\mathbf{r})/c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r})$ ο τελεστής καταστροφής/δημιουργίας ενός ηλεκτρονίου στη θέση \mathbf{r} με προβολή σπιν σ . Με $\varepsilon(\hat{\mathbf{p}})$ παριστάνουμε την κινητική ενέργεια του κάθε ηλεκτρονίου, $\hat{\mathbf{p}}$ τον τελεστή της ορμής και με g την ενεργή σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Λόγω του ότι η θεωρία BCS πρόκειται για μία θεωρία Μέσου Πεδίου που βασίζεται στην εισαγωγή μίας μιγαδικής παραμέτρου τάξης $\Delta(\mathbf{r}) = -g \langle c_{\downarrow}(\mathbf{r}) c_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle$, η αποδοχή της άνοιξε ταυτόχρονα και το δρόμο αποδοχής της προϋπάρχουσας φαινομενολογικής θεωρίας Ginzburg-Landau. Η παράμετρος τάξης $\Psi(\mathbf{r})$ των Ginzburg και Landau, ταυτίζεται με τη μιγαδική παράμετρο τάξης $\Delta(\mathbf{r})$ η οποία παριστάνει την αναμενόμενη τιμή της δημιουργίας ενός ζεύγους ηλεκτρονίων με μηδενικό συνολικό σπιν $S = 0$. Από την μικροσκοπική Χαμιλτονιανή BCS μπορούμε εύκολα να εξάγουμε πως μετασχηματίζεται η παράμετρος τάξης κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας. Εάν $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla\varphi(\mathbf{r})$, τότε βλέπουμε πως ο μετασχηματισμός αυτός μπορεί να εξαλειφθεί μέσω του μετασχηματισμού $c_{\sigma}(\mathbf{r}) \rightarrow c_{\sigma}(\mathbf{r})e^{ie^*\varphi(\mathbf{r})/\hbar}$. Η παράμετρος τάξης

μετασχηματίζεται ως εξής $\Delta(\mathbf{r}) \rightarrow \Delta(\mathbf{r})e^{i2e\varphi(\mathbf{r})/\hbar}$. Βλέπουμε λοιπόν πως η θεωρία Ginzburg-Landau υποστηρίζεται από τη μικροσκοπική θεωρία BCS εφόσον θέσουμε $e^* = 2e$.

Η αρμονία μεταξύ μικροσκοπικών και φαινομενολογικών θεωριών σε σχέση με τα πειράματα δεν θα αργήσει να διαταραχθεί και πάλι, με τον ερχομό των μη-συμβατικών υπεραγωγών και ιδιαίτερα με την ανακάλυψη των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας. Επιπλέον, νέες κατηγορίες υλικών και νέες υπεραγωγίμες καταστάσεις ανέδειξαν την ανεπάρκεια της συμβατικής θεωρίας BCS περιορίζοντας την εφαρμογή της στα υλικά τα οποία σήμερα αποκαλούμε συμβατικούς υπεραγωγούς.

1.1.1 Συμβατική Υπεραγωγιμότητα

Μέχρι τώρα έχουμε χρησιμοποιήσει τους όρους συμβατική και μη συμβατική υπεραγωγιμότητα [8], αλλά δεν έχουμε δώσει ακριβή ορισμό. Στα παρακάτω επιχειρούμε να διαχωρίσουμε τους υπεραγωγούς σε αυτές τις δύο μεγάλες κατηγορίες. Για το λόγο αυτό θα χρησιμοποιήσουμε ως αφετηρία τη φαινομενολογική θεωρία Ginzburg-Landau. Θεωρώντας ότι η παράμετρος τάξης μπορεί να γραφτεί ως $\Psi(\mathbf{r}) = |\Psi(\mathbf{r})|e^{i\varphi(\mathbf{r})}$, προκύπτει η ισοδύναμη εξίσωση

$$\mathcal{F} = \frac{\hbar^2}{2m} [\nabla|\Psi(\mathbf{r})|]^2 + \alpha(T - T_c) \frac{|\Psi(\mathbf{r})|^2}{2} + v \frac{|\Psi(\mathbf{r})|^4}{4} + \frac{\hbar^2}{2m} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \left[\nabla\varphi(\mathbf{r}) + \frac{e^*}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + \frac{[\mathbf{B}(\mathbf{r})]^2}{2\mu}, \quad (1.3)$$

Παρατηρούμε ότι η μετάβαση ελέγχεται από το μέτρο της παραμέτρου τάξης, λόγω των όρων δυναμικού που εμφανίζονται, ενώ η ηλεκτρομαγνητική απόκριση καθορίζεται ταυτόχρονα από το μέτρο και τη φάση. Ελαχιστοποιώντας τη δράση ως προς την παράμετρο τάξης και το διανυσματικό δυναμικό, λαμβάνουμε τις εξισώσεις κίνησης που καθορίζουν τη θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος. Έχουμε λοιπόν

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 |\Psi(\mathbf{r})| + \frac{\hbar^2}{m} \left[\nabla\varphi(\mathbf{r}) + \frac{e^*}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 |\Psi(\mathbf{r})| - \alpha(T_c - T) |\Psi(\mathbf{r})| + v |\Psi(\mathbf{r})|^3 = 0, \quad (1.4)$$

$$-\frac{1}{\mu} \nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{J}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar e^*}{m} |\Psi(\mathbf{r})|^2 \left[\nabla\varphi(\mathbf{r}) + \frac{e^*}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]. \quad (1.6)$$

Η γενική λύση των παραπάνω εξισώσεων (όπου έχουμε αγνοήσει επιφανειακές συνεισφορές) αποτελείται από ανομοιογενείς λύσεις για το μέτρο και τη φάση της παραμέτρου τάξης όπως και μη μηδενικά ρεύματα και μαγνητικά πεδία. Όταν η φάση είναι μη μηδενική έχουμε σπάσιμο της συμμετρίας της αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} και αναμένουμε να έχουμε στη θεμελιώδη κατάσταση είτε μη μηδενική μαγνητική ροπή ή κάποιο μη μηδενικό ρεύμα. Από όλες τις δυνατές λύσεις, η υπεραγωγίμη κατάσταση που κατανοήθηκε στα πλαίσια της θεωρίας BCS, και την οποία ονομάζουμε **Συμβατική Υπεραγωγιμότητα** είναι η λύση των παραπάνω εξισώσεων με $|\Psi(\mathbf{r})| \equiv |\Psi|$, $\varphi(\mathbf{r}) = 0$ και $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$.

Στη θεμελιώδη κατάσταση της Συμβατικής Υπεραγωγίμης φάσης, ισχύουν οι σχέσεις

$$|\Psi| \left[|\Psi|^2 - \frac{\alpha}{v} (T_c - T) \right] = 0, \quad (1.7)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{(e^*)^2}{m} |\Psi|^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega), \quad (1.8)$$

$$\nabla^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\mu (e^*)^2}{m} |\Psi|^2 \mathbf{A}(\mathbf{r}, \omega). \quad (1.9)$$

όπου θεωρήσαμε ότι το διανυσματικό πεδίο είναι μία ασθενής, χωροχρονικά αργά μεταβαλλόμενη εξωτερική διαταραχή, η οποία δεν μεταβάλλει την παράμετρο τάξης. Για ευκολία έχουμε ήδη μεταφερθεί

στο χώρο της συχνότητας ω . Σύμφωνα με την πρώτη εξίσωση, πάνω από την κρίσιμη θερμοκρασία βρισκόμαστε στην κανονική, ‘μεταλλική’ κατάσταση όπου ισχύει $|\Psi| = 0$. Κάτω από αυτήν είμαστε στην υπεραγώγιμη με $|\Psi|^2 = |\Psi_0|^2 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$ όπου $|\Psi_0|^2 = \alpha T_c/v$. Η παραπάνω θερμοκρασιακή εξάρτηση περιγράφει με πολύ μεγάλη ακρίβεια την πραγματική εξάρτηση της παραμέτρου τάξης κοντά στην υπεραγώγιμη μετάβαση όπου ισχύει και η παραπάνω θεωρία. Αυτό φυσικά δεν είναι τυχαίο. Η παραπάνω θεωρία είναι κατασκευασμένη με τέτοιο τρόπο ώστε να δίνει κρίσιμο εκθέτη β [9], $|\Psi| \sim \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^\beta$, ίσο με $\beta = \frac{1}{2}$, ο οποίος έχει πειραματικά παρατηρηθεί στην περίπτωση της υπεραγώγιμης μετάβασης.

Με βάση τις παραπάνω εξισώσεις και συγκεκριμένα τις δύο τελευταίες, είναι δυνατό να παρατηρήσουμε τα δύο χαρακτηριστικά φαινόμενα των υπεραγωγών, τη μηδενική ηλεκτρική αντίσταση και τον τέλειο διαμαγνητισμό. Το συγκεκριμένο διανυσματικό δυναμικό είτε δημιουργεί ένα χρονομεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο $\mathcal{E}(t) = -\partial_t \mathbf{A}(t) \rightarrow \mathcal{E}(\omega) = i\omega \mathbf{A}(\omega)$, ή ένα μαγνητικό πεδίο $\mathcal{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r})$. **Λόγω του ότι η υπεραγώγιμη πυκνότητα είναι ομογενής, επιβιώνει μόνο το διαμαγνητικό κομμάτι του ρεύματος, το οποίο ευθύνεται τόσο για το φαινόμενο Meissner όσο και για το μηδενισμό της ηλεκτρικής αντίστασης.** Συγκεκριμένα, η πρώτη από αυτές τις δύο γεννά τον τέλειο διαμαγνητισμό. Μπορούμε να δούμε ότι οι λύσεις του διανυσματικού πεδίου καθώς και κατά συνέπεια του μαγνητικού πεδίου είναι της μορφής $\mathcal{B} = \mathcal{B}_0 e^{-x/\lambda}$ όπου λ το μήκος διείσδυσης $\frac{1}{\lambda} = e^* |\Psi| \sqrt{\mu/m}$. Εξαιτίας αυτής της εξάρτησης, η μαγνητική ροή θωρακίζεται και περιορίζεται μόνο σε ένα μικρό συνήθως πάχος κοντά στην επιφάνεια του υλικού.

Για να αναδείξουμε το μηδενισμό της ηλεκτρικής αντίστασης, μπορούμε ισοδύναμα να μελετήσουμε την αγωγιμότητα. Η αγωγιμότητα στο δυναμικό όριο [10] ορίζεται με τον ακόλουθο τρόπο

$$\sigma(\omega) = \frac{\mathbf{J}(\omega)}{\mathcal{E}(\omega)} = \frac{\mathbf{J}(\omega)}{i\omega \mathbf{A}(\omega)} = \frac{i(e^*)^2}{m\omega} |\Psi|^2. \quad (1.10)$$

Παρατηρούμε ότι η αγωγιμότητα στην ομογενή συμβατική υπεραγώγιμη κατάσταση έχει μόνο φανταστικό μέρος, ενώ παράλληλα παρουσιάζει πόλο πρώτης τάξης για $\omega = 0$. Η αιτιότητα επιβάλλει την ικανοποίηση των σχέσεων Kramers-Kronig σύμφωνα με τις οποίες η ύπαρξη πόλου πρώτης τάξης για το φανταστικό μέρος συνεπάγεται την ύπαρξη μιας συνάρτησης $\delta(\omega)$ για το πραγματικό μέρος της αγωγιμότητας. Καταλήγουμε λοιπόν ότι το πραγματικό μέρος της αγωγιμότητας, $\sigma_{\Re}(\omega)$, είναι της μορφής $\sigma_{\Re}(\omega) = \frac{(e^*)^2}{m} |\Psi|^2 \delta(\omega)$, παρουσιάζοντας ‘άπειρη’ αυθόρμητη αγωγιμότητα και κατά συνέπεια μηδενική αντίσταση, ακόμη και για ιδιαίτερα ασθενή εφαρμοζόμενα ηλεκτρικά πεδία.

1.1.2 Μη συμβατική Υπεραγωγιμότητα

Έχοντας ορίσει την συμβατική υπεραγωγιμότητα είναι πολύ απλό να ορίσουμε τη μη συμβατική υπεραγωγιμότητα. Οι **Μη Συμβατικές Υπεραγώγιμες** καταστάσεις ορίζονται ως αυτές που σπάνε επιπρόσθετες συμμετρίες σε σχέση με την συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ που παραβιάζει αυθόρμητα η συμβατική. Έτσι λοιπόν, οποιαδήποτε άλλου είδους υπεραγώγιμη κατάσταση πέρα από αυτήν που εξετάσαμε παραπάνω θεωρείται μη συμβατική. Μπορούμε να διακρίνουμε διάφορες περιπτώσεις μη συμβατικής υπεραγωγιμότητας. Έχουμε λοιπόν

- $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi$, $\nabla\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{e^*}{\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r})$. Σε αυτήν την περίπτωση, η λύση χαρακτηρίζεται από το ίδιο ενεργειακό κόστος με αυτό της δημιουργίας της συμβατικής, αλλά παρουσιάζει νέες ιδιότητες. Η παρουσία της μη μηδενικής φάσης συνεπάγεται το σπάσιμο της συμμετρίας της αντιστροφής του χρόνου, που εν γένει συνδέεται με μη μηδενική εγγενή μαγνητική ροπή ή εγγενή ρεύματα. Έτσι λοιπόν, εάν για κάποιο λόγο η κατάσταση αυτή αναπτυχθεί, δίχως αρχικά να εφαρμόσουμε

ένα διανυσματικό δυναμικό, το συνολικό ρεύμα δεν θα μηδενίζεται. Αυτή η κατάσταση ονομάζεται κατάσταση Fulde-Ferrell [11] και προτάθηκε από τους προαναφερθέντες ερευνητές ως μία υπεραγωγίμη κατάσταση που ευνοείται όταν εφαρμόζεται ένα πεδίο Zeeman.

- $\Psi(\mathbf{r})$, $\varphi(\mathbf{r}) = 0$ και $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$. Σε αυτήν την περίπτωση μόνο το μέτρο της παραμέτρου τάξης είναι χωρικά μεταβαλλόμενο και φυσικά η ανάπτυξη μίας τέτοιας κατάστασης οφείλεται σε κάποια ανομοιογένεια του υλικού, στην οποία συγκαταλέγεται και η ύπαρξη της κρυσταλλικής δομής. Σε αυτήν την περίπτωση, το μέτρο της παραμέτρου τάξης μπορεί να αναπτυχθεί σε μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις της κρυσταλλικής ομάδας συμμετρίας του υλικού. Υπάρχει μία ειδική περίπτωση σε αυτήν την κατηγορία καταστάσεων όπου το μέτρο είναι περιοδικά διαμορφωμένο, δηλαδή $|\Psi(\mathbf{r})| = |\Psi| \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$. Η κατάσταση αυτή προτάθηκε από τους Larkin-Ovchinnikov [12] ως εναλλακτική της Fulde-Ferrell. Μάλιστα, λόγω του ότι ευνοούνται και οι δύο κάτω από τις ίδιες συνθήκες, συνήθως αναφέρονται ως μία κατάσταση με την ονομασία FFLO [13].
- Στην γενικότερη περίπτωση έχουμε υπέρθεση των προηγούμενων καταστάσεων δημιουργώντας πολύπλοκες υπεραγωγίμες καταστάσεις μηδενικού συνολικού σπιν για τα ζεύγη Cooper.
- Πέρα από τις υπεραγωγίμες καταστάσεις με $S = 0$ υπάρχουν φυσικά και οι καταστάσεις με $S = 1$. Αυτές δεν μπορούν να περιγραφούν από την παραπάνω θεωρία Ginzburg-Landau, διότι αυτή περιγράφει τη δημιουργία ζευγών Cooper με μηδενικό συνολικό σπιν και κατά συνέπεια η παράμετρος τάξης είναι βαθμωτό μέγεθος. Στην περίπτωση των ζευγών Cooper με συνολικό σπιν $S = 1$, η βαθμωτή μιγαδική παράμετρος τάξης μετατρέπεται σε ένα διανυσματικό μιγαδικό μέγεθος $\Psi(\mathbf{r})$. Χαρακτηριστικό παράδειγμα τέτοιων καταστάσεων αποτελεί η υπεραγωγιμότητα τύπου p -wave, όπου το μέτρο της παραμέτρου τάξης ανήκει υποχρεωτικά σε μία κρυσταλλική αναπαράσταση που είναι περιττή στην χωρική αντιστροφή $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$.
- Πέρα από τις παραπάνω καταστάσεις, είναι δυνατόν τα ηλεκτρόνια που συμμετέχουν στο σχηματισμό του υπεραγωγίμου συμπυκνώματος να φέρουν και περαιτέρω κβαντικούς αριθμούς εκτός από το σπιν. Σε αυτές τις περιπτώσεις, μπορούμε να έχουμε ζεύγη Cooper που να ανήκουν σε μη-τετριμμένες αναπαραστάσεις των τελεστών που σχετίζονται με αυτούς τους κβαντικούς αριθμούς. Στις αναφορές που παραθέτουμε αναλύονται διάφορες περιπτώσεις μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49, 50, 51].

Σε κάθε περίπτωση όπου έχουμε σχηματισμό ζευγών Cooper υπάρχει μία και μόνο απαίτηση. Λόγω του ότι η υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης αποτελεί ουσιαστικά την κυματοσυνάρτηση δύο φερμιονίων, θα πρέπει να είναι περιττή κατά την εναλλαγή τους.

1.2 Μη συμβατικοί υπεραγωγοί υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού

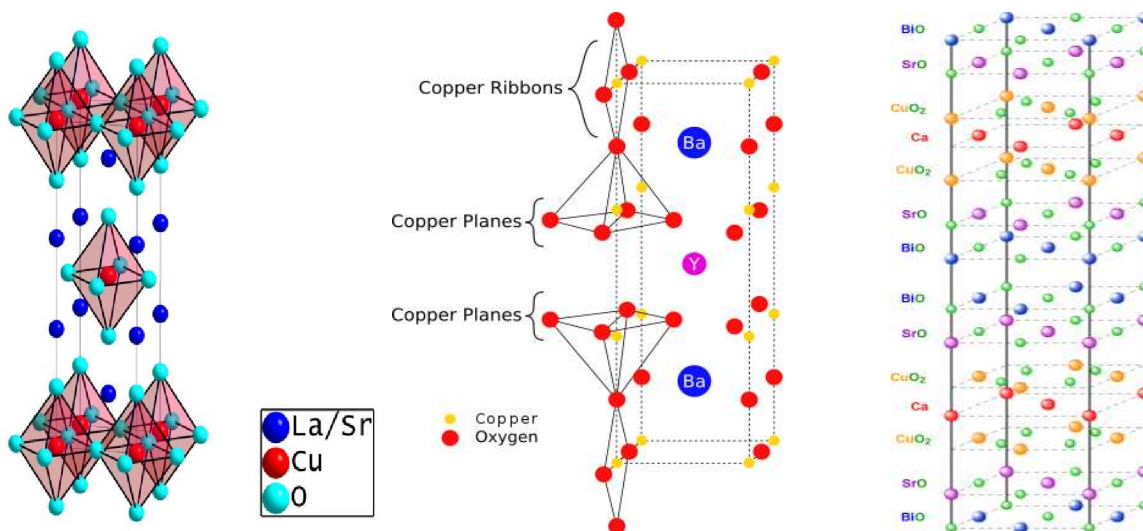
Το 1986 οι Bednorz και Müller [52] κατάφεραν να δώσουν μια νέα πνοή στο πεδίο της υπεραγωγιμότητας. Συγκεκριμένα ανακάλυψαν ένα νέο υπεραγωγίμο υλικό με κρίσιμη θερμοκρασία περίπου στα 30K ξεπερνώντας την προηγούμενη μεγαλύτερη που ήταν 23K. Παρόλο που η αύξηση της κρίσιμης θερμοκρασίας αποτέλεσε αδιαμφισβήτητα ένα πολύ σημαντικό γεγονός, η συλλογιστική που οδήγησε σε αυτήν

την ανακάλυψη είναι ακόμα πιο αξιοθαύμαστη, διότι οδήγησε σαν μία αλυσιδωτή αντίδραση στην ‘οικοδόμηση’ της οικογένειας των υλικών που χαρακτηρίζουμε σήμερα ως υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας (High- T_c Superconductors).

Οι δύο νομπελίστες (1987) δικαιώθηκαν για το τόλμημά τους να αναζητήσουν το νέο υπεραγωγό υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας, όχι ως συνήθως σε ένα κράμα (π.χ. νιοβίου), αλλά στο οξειδίο του χαλκού LaBaCuO. Σύμφωνα με την εικόνα που είχε εδραιωθεί εκείνη την εποχή, η χαμηλή αγωγιμότητα ενός οξειδίου καταδείκνυε το εν λόγω υλικό ως έναν κακό υποψήφιο για να εμφανίσει υπεραγωγίμη μετάβαση. Παρ’ολ’ αυτά, η συγκεκριμένη σειρά οξειδίων, όπως και άλλες που ακολούθησαν στη συνέχεια δεν επιβεβαίωσαν αυτόν τον κανόνα, διότι οι ιδιότητες τους τόσο στην κανονική όσο και στην υπεραγωγίμη κατάσταση, απλούστατα δεν παρουσιάζαν κανένα γνώριμο στοιχείο των συμβατικών ‘υπεραγωγών’. Μάλιστα, λίγους μήνες αργότερα ο Wu και η ομάδα του [53], βασιζόμενοι στο πρότυπο ενώσεων του χαλκοξειδίου, ανακάλυψαν τον υπεραγωγό $Y_{1.2}Ba_{0.8}CuO_4$ με κρίσιμη θερμοκρασία $\sim 93K$. Ήταν ο πρώτος υπεραγωγός πάνω από το σημείο βρασμού του υγρού αζώτου (77K), αποτελώντας με αυτόν τον τρόπο την αφετηρία μιας νέας εποχής τόσο στις πειραματικές δυνατότητες που ανοίγονταν, όσο και στην εκμετάλλευση των υπεραγωγών σε ρεαλιστικές τεχνολογικές εφαρμογές.

Η σημασία όμως της εύρεσης των νέων υπεραγωγών ήταν ακόμα βαθύτερη. Η κλίμακα πλέον των υψηλότερων κρίσιμων θερμοκρασιών είχε αλλάξει τάξη μεγέθους σηματοδοτώντας την πιθανή εμπλοκή ενός νέου μηχανισμού. Η θεωρία Bardeen-Cooper-Schrieffer [7] που είχε καταφέρει μέχρι τότε να ερμηνεύσει με ένα απλό μοντέλο το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας φαινόταν ανεπαρκής στην προκειμένη περίπτωση. Η νέα υπεραγωγίμη κατάσταση δεν ήταν δυνατό να κατανοηθεί στα πλαίσια του συμβατικού φωνονικού μηχανισμού ελκτικής αλληλεπίδρασης δύο ηλεκτρονίων, τόσο στο ασθενές είτε στο ισχυρό όριο. Η επίτευξη μίας κρίσιμης θερμοκρασίας των 100K ήταν σίγουρα έξω από τα όρια αυτής της θεωρίας. Για αυτούς τους λόγους, νέοι μηχανισμοί αλληλεπίδρασης επιστρατεύτηκαν, βασιζόμενοι κυρίως στην ανταλλαγή μποζονίων διαφορετικών από αυτά των συμβατικών φωνονίων. Στα πλαίσια αυτών των θεωριών μπορούμε να διακρίνουμε θεωρίες που βασίζονται στην ανταλλαγή μαγνωνίων καθώς και την ανταλλαγή μη-συμβατικών φωνονίων. Όπως έχει δείχθει στα άρθρα [54, 55, 56], η θεώρηση μη-συμβατικών μηχανισμών φωνονικών αλληλεπιδράσεων πράγματι μπορεί να οδηγήσει σε μη-συμβατικές υπεραγωγίμες καταστάσεις.

Μέχρι σήμερα, το αίτιο της υπεραγωγιμότητας σε αυτά τα υλικά δεν έχει πλήρως κατανοηθεί. Έχουν γίνει πραγματικά πολλές προσπάθειες για την κατανόηση του φαινομένου με αποτέλεσμα τα χαλκοξειδία είναι ένα από τα πλέον μελετημένα συστήματα της Φυσικής της Συμπυκνωμένης ύλης, τόσο πειραματικά όσο και θεωρητικά [57, 58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68]. Είναι άξιο λόγου το γεγονός πως η έντονη ερευνητική μελέτη αυτών των υλικών καθώς και η απαίτηση πολύ καλής ποιότητας δειγμάτων, αποτέλεσε εφαλτήριο της εξέλιξης πειραματικών τεχνικών όπως είναι η Ηλεκτρονική Φασματοσκοπία Σάρωσης STM (Scanning Tunneling Microscopy) και η Γωνιακή Φασματοσκοπία Φωτοεκπομπής ARPES (Angle Resolved Photo-Emission Spectroscopy). Από τη θεωρητική σκοπιά, έχουν αναπτυχθεί πάρα πολλά μοντέλα τα οποία και πάλι δεν είναι δυνατόν να ερμηνεύσουν ικανοποιητικά την πολυπλοκότητα των νέων φαινομένων που συνεχώς ανακαλύπτονται σε αυτά τα υλικά. Τα οξειδία του χαλκού αποτελούν ένα πεδίο πληθώρας αντιμαχόμενων κβαντικών καταστάσεων της ύλης, αποτελώντας μια ανεξάντλητη πηγή ιδεών τις οποίες δεν δανείζονται μόνο άλλες περιοχές της Φυσικής Συμπυκνωμένης Ύλης, αλλά και πεδία όπως η Φυσική Υψηλών ενεργειών και η Κοσμολογία. Συγκεκριμένα, διάφορες θεωρητικές προτάσεις των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας έχουν βρει εκτεταμένη εφαρμογή στη Κβαντική Χρωμοδυναμική και στις διάφορες υπεραγωγίμες φάσεις που εμφανίζονται σε ένα πλάσμα κουάρκ και γλουονίων (quark-gluon plasma) [69, 70, 71, 72], καθώς και πιο πρόσφατα σε Βαρυτικές θεωρίες στα πλαίσια της αντιστοιχίας AdS/CFT (Anti-de Sitter/Conformal Field Theory) [73, 74, 75, 76, 77, 78].



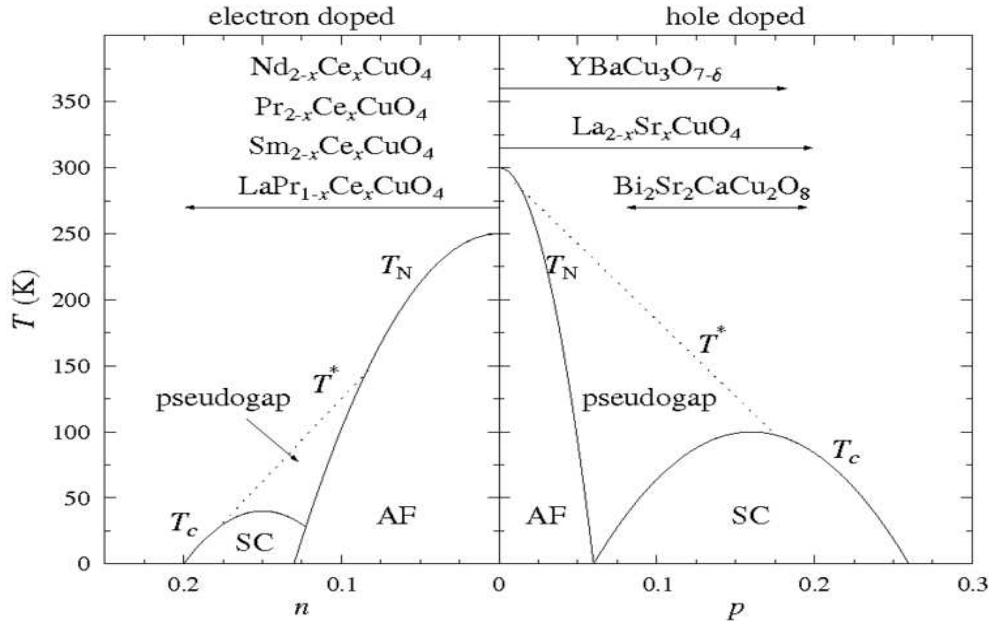
Σχήμα 1.1: Ηλεκτρονική δομή των βασικότερων υπεραγωγικών ενώσεων υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού. Πηγή wikipedia.

1.2.1 Διάγραμμα φάσης

Παρόλο που υπάρχει πληθώρα υπεραγωγικών χαλκοξειδίων υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας, όλα χαρακτηρίζονται από μία έντονη ανισοτροπικότητα, αποτελούμενα από ένα μικρό αριθμό επιπέδων χαλκού-οξυγόνου (CuO_2). Στη μητρική χημική ένωση La_2CuO_4 , το τυπικό σθένος του χαλκού είναι 2+, το οποίο σημαίνει ότι η ηλεκτρονική κατάσταση είναι η d^9 . Ο χαλκός είναι περιτριγυρισμένος από 6 οξυγόνα, σε ένα οκταεδρικό σχηματισμό με δύο οξυγόνα (apical oxygen) να βρίσκονται πάνω και κάτω από τον χαλκό (έξω από το επίπεδο) Σχ.1.1. Η απομάκρυνση από την τέλεια οκταεδρική δομή οδηγεί στο διαχωρισμό των e_g τροχιακών με συνέπεια να υπάρχει ένα μόνο τροχιακό $d_{x^2-y^2}$ του χαλκού στη θεμελιώδη κυψελίδα, στο οποίο μπορούμε να περιοριστούμε για να κατασκευάσουμε ένα απλό μικροσκοπικό μοντέλο [79, 80].

Παρά το γεγονός ότι υπάρχουν κάποιες διαφορές στην ηλεκτρονική δομή των διάφορων υπεραγωγικών ενώσεων των χαλκοξειδίων (Σχ.1.1), δεν φαίνεται να είναι καθόλου τυχαίο το γεγονός ότι μοιράζονται και ένα σε γενικές γραμμές παγκόσμιο διάγραμμα φάσης (Σχ.1.2). Η μητρική χημική ένωση La_2CuO_4 , οργανώνεται σε μία αντισιδηρομαγνητική κατάσταση, όπου τα σπιν γειτονικών πλεγματικών σημείων είναι αντιπαράλληλα. Η θερμοκρασία μετάβασης στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση των χαλκοξειδίων είναι περίπου $T_N \sim 300 - 500\text{K}$, η οποία είναι αρκετά μικρή λόγω της χαλαρής σύζευξης μεταξύ των επιπέδων χαλκού-οξυγόνου. Μάλιστα, σύμφωνα με το θεώρημα Mermin-Wagner, δεν θα ήταν δυνατή η αυθόρμητη μετάβαση στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση εάν δεν υπήρχε αυτή η ασθενής τριδιάστατη δομή. Η ισχυρή τάση προς τον σχηματισμό της μαγνητικής κατάστασης εκδηλώνεται πολύ πιο πάνω από την θερμοκρασία Néel, με τη μορφή ισχυρών αντισιδηρομαγνητικών διακυμάνσεων.

Η μητρική χημική ένωση μπορεί να νοθευτεί από τρισθενές La ή δισθενές Sr. Το αποτέλεσμα είναι να εμφανίζονται x οπές στο επίπεδο Cu-O, σχηματίζοντας την δομή $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Αυτή η διαδικασία ονομάζεται νόθευση με οπές. Αντίθετα στο κράμα $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ έχουμε νόθευση με ηλεκτρόνια. Στα χαλκοξειδία που έχουν νοθευτεί με οπές, η αντισιδηρομαγνητική κατάσταση καταστρέφεται όταν τα επίπεδα της νόθευσης είναι μεταξύ 3-5% (Σχ.1.2). Σχεδόν, αμέσως μετά την εξαφάνιση της μαγνητικής τάξης, εμφανίζεται υπεραγωγιμότητα σε ένα παράθυρο νόθευσης 5-25%. Το όριο μέσα στα οποία εμφανίζεται η υπεραγωγιμότητα σχηματίζουν έναν χαρακτηριστικό θόλο (superconducting dome), τυπικό για όλα τα κράματα που είναι νοθευμένα με οπές. Παρ'ολ' αυτά η μέγιστη κρίσιμη θερμοκρασία, που



Σχήμα 1.2: Τυπικό διάγραμμα φάσης των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού. Στη δεξιά πλευρά του διαγράμματος έχουμε τα οξείδια που είναι νοθευμένα με οπές, ενώ στην αριστερή αυτά που είναι νοθευμένα με ηλεκτρόνια. Παρόλο που το διάγραμμα παρουσιάζεται αρκετά συμμετρικό, η δεξιά περιοχή είναι αυτή που παρουσιάζει και το μεγαλύτερο ενδιαφέρον. Αυτό οφείλεται στο ότι η υπεραγωγιμότητα στην δεξιά πλευρά του διαγράμματος είναι μη-συμβατική και ένας μεγάλος αριθμός πειραματικών μετρήσεων δείχνουν ότι ανήκει στην αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$. Αντίθετα στην αριστερή πλευρά η υπεραγωγίμη κατάσταση εικάζεται ότι είναι συμβατική και χαρακτηρίζεται από μικρότερη κρίσιμη θερμοκρασία T_c . Και στις δύο πλευρές παρατηρούμε ότι για μικρό επίπεδο νόθευσης τα υλικά αυτά βρίσκονται στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση η οποία αναλόγως το είδος νόθευσης επιζεί λιγότερο ή περισσότερο στο διάγραμμα φάσης. Πέρα από τα δύο αυτά είδη καταστάσεων, υπάρχει και μία περιοχή η οποία ονομάζεται ψευδοχάσμα. Η περιοχή αυτή δεν είναι έχει τα συνήθη χαρακτηριστικά μίας καλά ορισμένης θερμοδυναμικής μετάβασης και αποτελεί την 'κανονική' κατάσταση για τα ηλεκτρόνια τα οποία με τη μείωση της θερμοκρασίας θα γίνουν υπεραγώγιμα. Για αυτό το λόγο αποτελεί μία κρίσιμη περιοχή για την κατανόηση του συνολικού διαγράμματος φάσης. (Το διάγραμμα δανειστήκαμε από το άρθρο επισκόπησης των P. A. Lee, N. Nagaosa και X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).

αντιστοιχεί στην κορυφή του υπεραγωγίμου θόλου, ποικίλει ξεκινώντας από τα 40K για τα κράματα $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO), γύρω στα 93K για την οικογένεια $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ (YBCO), μέχρι και πάνω από τα 100K για τα κράματα του τύπου $\text{Ba}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$ (Bi2212). Στην περίπτωση νόθευσης με ηλεκτρόνια, η αντισιδηρομαγνητική κατάσταση εκτείνεται σε ένα μεγάλο μέρος του διαγράμματος φάσης μέχρι $x \sim 14\%$, ενώ αμέσως μετά εμφανίζεται υπεραγωγιμότητα.

Η περιοχή του διαγράμματος φάσης με νόθευση μικρότερη από αυτή που παρατηρείται η μέγιστη υπεραγωγίμη κρίσιμη θερμοκρασία, ονομάζεται υπονοθευμένη (underdoped) και σε αυτήν παρουσιάζονται διάφορα φαινόμενα που ακόμη αναζητούν κάποια στέρεη εξήγηση. Αυτή η περιοχή του διαγράμματος φάσης ονομάζεται και ψευδοχάσμα (pseudogap), διότι σύμφωνα με τις πειραματικές ενδείξεις δεν φαίνεται να αποτελεί μία καλά ορισμένη κατάσταση τάξεως λόγω του ότι δεν έχει βρεθεί κάποιο σαφώς καθορισμένο σύνορο θερμοδυναμικής μετάβασης. Η γραμμή που συνήθως χαράσσεται στο διάγραμμα φάσης (T^*) αποτελεί μία μεταβατική περιοχή. Θεωρείται πως η κατανόηση της αιγισματικής συμπεριφο-

ράς αυτού του τμήματος του διαγράμματος φάσης, αποτελεί κλειδί για την κατανόηση του μηχανισμού που οδηγεί σε υπεραγωγιμότητα υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας. Συγκεκριμένα σε αυτήν την περιοχή του διαγράμματος φάσης θα επικεντρωθούμε κι εμείς στη συνέχεια, προτείνοντας ότι το Τοπολογικό Κύμα Πυκνότητας Φορτίου $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ ως πιθανότατο υποψήφιο για την κατάσταση που ελλοχεύει σε αυτήν την αβέβαιη περιοχή του διαγράμματος.

Η περιοχή ακριβώς πάνω από την κορυφή του υπεραγωγίου θόλου παρουσιάζει και αυτή αρκετά ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Η αγωγιμότητα είναι γραμμική με την θερμοκρασία και ο συντελεστής της αγωγιμότητας Hall είναι και αυτός ισχυρά εξαρτώμενος από την θερμοκρασία [81, 82]. Οι παρατηρήσεις αυτές θεωρούνται ως ξεκάθαρες ενδείξεις ενός μη-ρευστού Fermi (non-Fermi liquid behaviour). Το κομμάτι αυτό χαρακτηρίζεται ως ένα περίεργο μέταλλο (strange metal). Δεξιότερα στο διάγραμμα φάσης, στην αποκαλούμενη υπερνοθευμένη (overdoped) περιοχή η συνήθης μεταλλική συμπεριφορά φαίνεται να επιστρέφει.

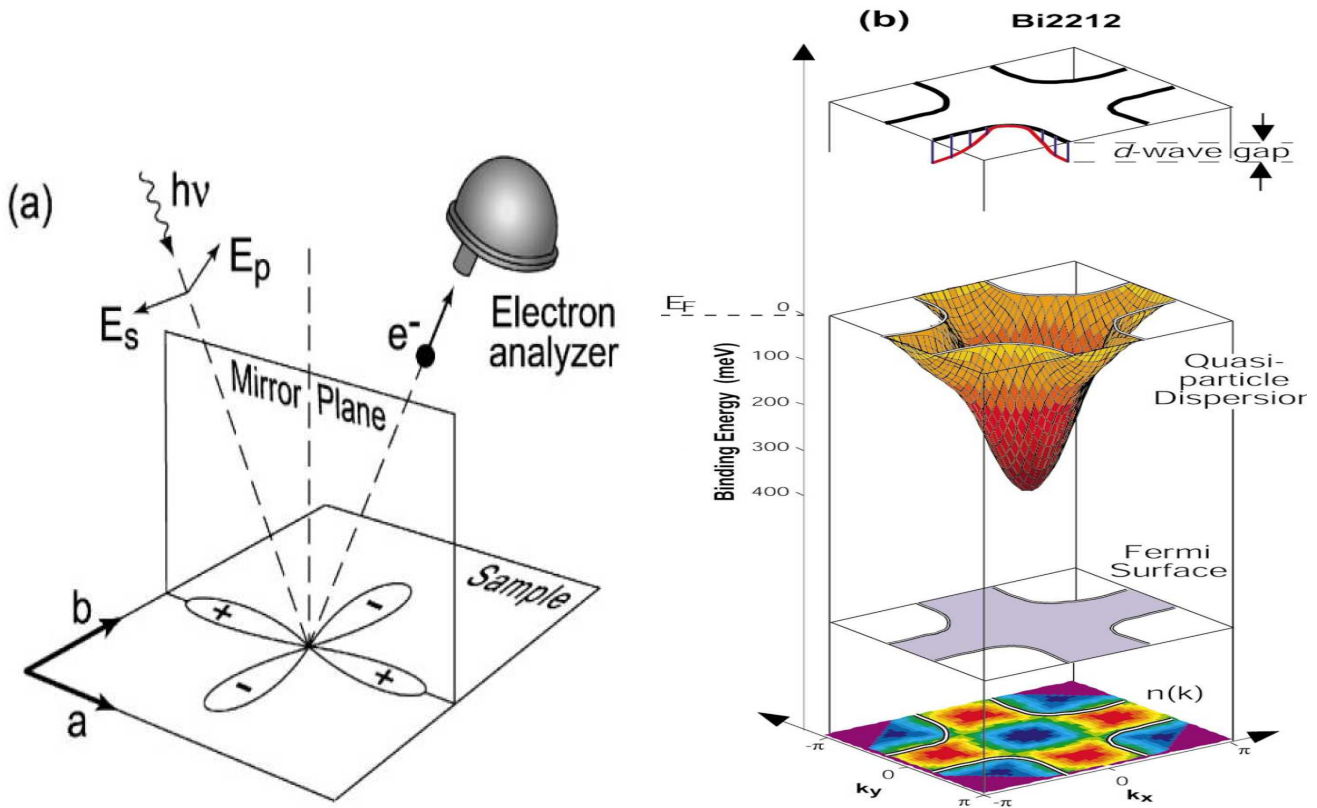
1.2.2 Ενεργειακό χάσμα

Μελέτες Γωνιακής Φασματοσκοπίας Φωτοεκπομπής (ARPES) [62] έχουν δείξει ότι στην υπεραγωγιμη φάση, η παράμετρος τάξης ή ισοδύναμα το ενεργειακό χάσμα, ανήκει στην αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$ (Σχ.1.3). Αντίθετα, πάνω από την υπεραγωγιμη κρίσιμη θερμοκρασία υπάρχει σύμφωνα με τα πειραματικά ευρήματα μία αψίδα Fermi (Fermi-arc), η οποία προσθέτει ένα ακόμη ιδιαίτερο στοιχείο στην ήδη ανεξήγητη φαινομενολογία του ψευδοχάσματος. Πρόσφατα, παρατηρήθηκε πως σε κάποια υλικά εμφανίζονται κλειστές γραμμές Fermi (Fermi pockets) που μπορεί να υποδηλώνουν το σχηματισμό διαμορφωμένων καταστάσεων στο υλικό. Τα νέα πειραματικά δεδομένα προκύπτουν σύμφωνα με τις μετρήσεις χβαντικών ταλαντώσεων της αγωγιμότητας (Quantum Oscillations) [83, 84, 85], οι οποίες συνοδεύονται με μετρήσεις αγωγιμότητας Hall [86]. Και οι δύο κατηγορίες παρατηρήσεων, οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η εμπλοκή ανταγωνιζόμενων καταστάσεων της υπεραγωγιμότητας στην περιοχή του ψευδοχάσματος είναι πολύ πιθανή, περιπλέκοντας ακόμη περισσότερο τη θεμελιωμένη εικόνα που θεωρούσαμε ότι είχαμε.

Επιπροσθέτως, η περιοχή του ψευδοχάσματος χαρακτηρίζεται από ένα πεπερασμένο, αλλά μη καλά οριοθετημένο, χάσμα στα σημεία του αντιστρόφου χώρου $(\pm\pi, 0)$ και $(0, \pm\pi)$. Πράγματι, η δημιουργία αυτού του χάσματος είναι αρκετά εκτεταμένη και ασύμφωνη, διότι υπάρχει μεγάλο εύρος στην φασματική πυκνότητα. Σε πλήρη αντίθεση μονοσωματιδιακές διεγέρσεις στη διεύθυνση των κύριων διαγωνίων της πρώτης ζώνης Brillouin παρουσιάζουν πολύ μικρό φασματικό εύρος, και χαρακτηρίζονται από μηδενική ενέργεια. Από αυτά συμπεραίνουμε ότι και η κατάσταση του ψευδοχάσματος, φαίνεται να ανήκει κατά κύριο λόγο στην αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$.

1.2.3 Σκέδαση νετρονίων

Ένα μεγάλο μέρος της πληροφορίας που έχουμε για τους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας προέρχεται από πειράματα σκέδασης νετρονίων. Σχετικές μετρήσεις έχουν δείξει ότι η μεγάλης εμβέλειας (long-range order) αντισιδηρομαγνητική κατάσταση δίνει τη θέση της σε μία κατάσταση βραχείας εμβέλειας (ρευστό-σπιν) (spin liquid), της οποίας το μήκος συσχετισμού μειώνεται με την αύξηση της νόθευσης [87]. Μια μεγάλη μερίδα των πειραματικών μετρήσεων, έχει επικεντρωθεί στην οικογένεια LSCO διότι σε αυτά τα υλικά υπάρχουν αρκετά μεγάλα δείγματα. Σε αυτήν τη σειρά υπεραγωγών, παρατηρήθηκε ισχυρή σκέδαση στα κυματανύσματα $(\pm\frac{\pi}{2}, \pm\delta)$ [88], ενώ παρατηρήθηκε πως η νόθευση οδηγεί σε αύξηση του δ [89] (ουσιαστικά μία διακυμαινόμενη κατάσταση). Μάλιστα σε αυτήν την οικογένεια παρατηρήθηκε για $x = \frac{1}{8}$ στατική δομή κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν [90] που ξεκινά κάτω από τα 50K.



Σχήμα 1.3: a. Η μη-αναγωγίσιμη αναπράσταση $d_{x^2-y^2} \equiv k_x^2 - k_y^2 \equiv \cos k_x - \cos k_y$ που χαρακτηρίζει τους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας, όπως παρατηρήθηκε σε πειράματα φασματοσκοπίας. Λόγω της εναλλαγής του προσήμου, το ενεργειακό χάσμα μηδενίζεται στις κύριες διαγωνίους της 1ης ζώνης Brillouin. b. Πάνω παρουσιάζουμε την κατανομή του $d_{x^2-y^2}$ στην χώρο των κυματανυσμάτων. Στη μέση παρουσιάζεται η ενεργειακή διασπορά των απεντοπισμένων ηλεκτρονίων d του χαλκού που παίζουν τον κύριο ρόλο στο σχηματισμό του υπεραγωγίου συμπυκνώματος. Κάτω παρουσιάζεται η επιφάνεια (γραμμή) Fermi του μη-αλληλεπιδρώντος συστήματος. Οι συγκεκριμένες εικόνες πάρθηκαν από το άρθρο επισκόπησης των A. Damascelli, Z. Hussain και Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).

Πέρα από την οικογένεια LSCO η απόκριση σπιν χαρακτηρίζεται από έναν στενό συντονισμό στο (π, π) . Ο συντονισμός αυτός πρώτα παρατηρήθηκε στα 41meV για το βέλτιστα νοθευμένο YBCO [91, 92], και έχει παρατηρηθεί μόνο κάτω από την υπεραγωγίμη κρίσιμη θερμοκρασία. Επιπλέον, η κορυφή αυτή μειώνεται σε ενέργεια με τη μείωση της νόθευσης. Κατά την προσέγγιση της αντισιδηρομαγνητικής φάσης, ο συντονισμός αποκτά μηδενική ενέργεια. Ο συντονισμός αυτός ερμηνεύτηκε ως μια σπιν-1 (triplet) εξιτονική κατάσταση μέσα στο υπεραγωγίμο χάσμα [93]. Αυτή η εικόνα είχε καλλιεργηθεί από διάφορα θεωρητικά γκρουπ [94, 95, 96, 97, 98, 99, 100]. Μία άλλη ερμηνεία δόθηκε από τους Demler και Zhang [67, 101, 102, 103, 104] προτείνοντας ότι αυτή η διέγερση προκύπτει από διέγερση στο κανάλι ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, η οποία παρ'όλ' αυτά φαίνεται να μην είναι συμβατή με άλλα χαρακτηριστικά της ανελαστικής απόκρισης [105]. Πρόσφατα φάνηκε σε μετρήσεις ότι η κορυφή αυτή παρουσιάζεται και σε δείγματα του LSCO [106]. Βέβαια σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει στενή κορυφή αλλά πιο εκτεταμένη απόκριση. Αυτό δείχνει παγκοσμιότητα του συντονισμού στο (π, π) στα χαλκοξειδία και υποδεικνύει ότι πιθανότατα η μονοκατευθυντική κατάσταση (stripe order) που παρατηρείται μονάχα στην οικογένεια LSCO, είναι απλά μία αντιμαχόμενη φάση. Παρ'όλ' αυτά κάποιες θεωρητικές ομάδες, θεωρούν

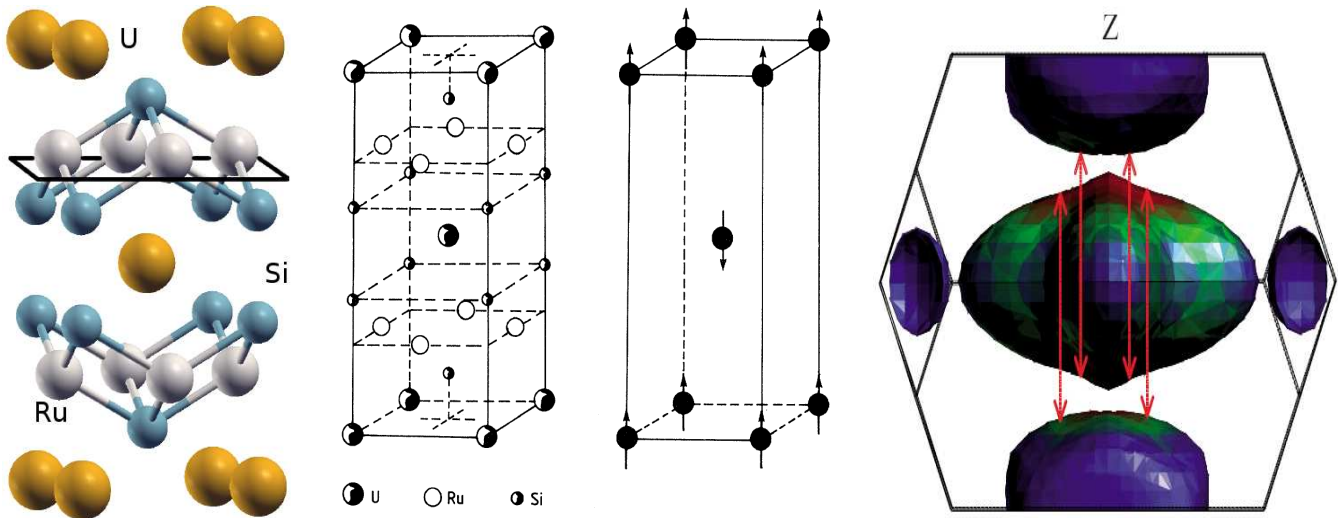
το αντίθετο, υποστηρίζοντας την άποψη ότι το ψευδοχάσμα αποτελεί μία διακυμαινόμενη κατάσταση αυτής της κατηγορίας [63, 66].

1.3 Μη-συμβατικός υπεραγωγός URu₂Si₂

Ένα χρόνο πριν την ανακάλυψη των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας, έκανε την εμφάνισή του ο νέος μη-συμβατικός υπεραγωγός URu₂Si₂ της οικογένειας των βαρέων φερμιονίων [107, 108]. Τα συγκεκριμένα υλικά δανείζονται το όνομά τους από τη χαρακτηριστική επανακανονικοποίηση της μάζας που υφίστανται τα εμπλεκόμενα ηλεκτρόνια, οδηγώντας σε μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος που παρουσιάζουν μία ενεργό μάζα 2-3 τάξεις μεγέθους μεγαλύτερης της συνήθους. Η ιστορία των βαρέων φερμιονίων ξεκινά περίπου στα μέσα της δεκαετίας του '70, όταν οι K. Andres, J. Graebner και H. R. Ott παρατήρησαν για πρώτη φορά την νέα αυτή ηλεκτρονική συμπεριφορά στο υλικό CeAl₃ [109]. Με μικρή διαφορά, το 1976, ο Frank Steglich και οι συνεργάτες του ανακάλυψαν τον δεύτερο κατά σειρά υπεραγωγό αυτής της κατηγορίας, CeCu₂Si₂ [110], ονομάζοντας μάλιστα πρώτοι αυτά τα υλικά ως βαρέα φερμιόνια. Η συγκεκριμένη ομάδα υλικών, προσέλκυσε μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον διότι πολλά από αυτά τα υλικά χαρακτηρίζονταν από μη-συμβατικές υπεραγωγόμενες καταστάσεις, που παρ'όλ' αυτά εμφανίζονταν σε μικρές θερμοκρασιακές κλίμακες, συνήθως κάτω των 10K. Επιπλέον, τα συγκεκριμένα υλικά έχουν αποτελέσει ένα εργαστήριο μελέτης φαινομένων της Κβαντικής Κρισιμότητας (Quantum Criticality) [111, 112, 113], λόγω της μεγάλης πειραματικής ευκολίας να οδηγούνται σε μεταβάσεις μεταξύ διαφορετικών καταστάσεων χρησιμοποιώντας πίεση, μαγνητικά πεδία ή χημική αντικατάσταση [114, 115, 116].

Το URu₂Si₂ αποτελεί έναν από τους σημαντικότερους εκπροσώπους των υπεραγωγών βαρέων φερμιονίων. Από την πρώτη στιγμή της ανακάλυψής του [107, 108], το συγκεκριμένο υλικό χαρακτηρίστηκε από ένα πέπλο μυστηρίου. Ο λόγος, είναι η ύπαρξη μίας θερμοδυναμικής μετάβασης δεύτερης τάξης, κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία T₀ = 17.5K, για την οποία ακόμη μετά από τα 25 χρόνια έντονης πειραματικής και θεωρητικής δραστηριότητας που έχουν μεσολαβήσει, παραμένει ένας γρίφος δίχως απάντηση. Πέρα από τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά αυτής της μετάβασης, τα οποία αναφέρουμε παρακάτω, είναι ιδιαίτερης σημασίας να επισημάνουμε πως η βιβλιογραφία χαρακτηρίζεται από ένα πλήθος αντικρουόμενων πειραματικών αποτελεσμάτων τα οποία αποτέλεσαν αδιαμφισβήτητα έναν αποτρεπτικό χαρακτήρα στην εξήγηση των φαινομένων. Ένα μέρος της ευθύνης για αυτήν τη σύγχυση, έχουν οι μέθοδοι παρασκευής των δειγμάτων, οι οποίες βελτιώθηκαν με το πέρασμα των χρόνων και στις μέρες μας έγινε δυνατή η παραγωγή κρυστάλλων υψηλής καθαρότητας. Αν λάβουμε υπόψη ότι και αυτό το υλικό όπως και άλλα της οικογένειας των βαρέων φερμιονίων είναι στα πρόθυρα της κβαντικής κρισιμότητας, είναι κατανοητό ότι η οποιαδήποτε παρέκκλιση από τη ζητούμενη στοιχειομετρία οδηγεί στη μελέτη διαφορετικών καταστάσεων και φαινομένων. Τυπικό παράδειγμα αποτελεί το γεγονός ότι πολλές πειραματικές μετρήσεις σε αυτά το υλικό έχουν αναδείξει ακόμη και τη μετάβαση στη σιδηρομαγνητική κατάσταση, κάτι όμως που είναι αποτέλεσμα προσμίξεων.

Μάλιστα, το μεγάλο ενδιαφέρον το οποίο συγκέντρωσε αυτό το υλικό, πιθανότατα οφείλεται σε μία παρόμοια παρερμηνεία, που προέκυψε από τις δυσκολίες εκτέλεσης των πειραμάτων, την κακή κατάσταση των δειγμάτων ή απλά λόγω εγγενών προσμίξεων και ανομοιογενειών. Το εντυπωσιακό χαρακτηριστικό του υλικού, που αποτέλεσε και το πρώτο αίτιο, ήταν το γεγονός ότι η παρατηρούμενη θερμοδυναμική μετάβαση συνδέεται με μία ασυνέχεια στην ειδική θερμότητα η οποία συνοδεύεται από μία δυσανάλογα μικρή αντισιδηρομαγνητική ροπή της τάξης των 0.03μ_B ανά άτομο U. Η αντισιδηρομαγνητική ροπή έχει πόλωση κατά τον άξονα \hat{z} και κυματόνισμα $\mathbf{Q}_0 = (0, 0, 1)$ με αναφορά τη μαγνητική ζώνη Brillouin. Το συγκεκριμένο φαινόμενο προκύπτει από την εναλλασσόμενη διάταξη των ροπών του U, όπως φαίνεται στο Σχ.1.4(b.). Από την πρώτη στιγμή η συγκεκριμένη ποσοτική ασυμβατότητα είχε εγείρει ερωτημα-

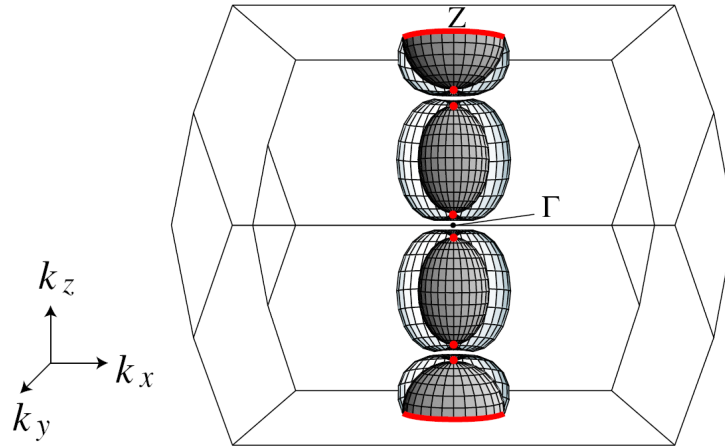


Σχήμα 1.4: a. Ηλεκτρονική δομή του URu₂Si₂. Το κρυσταλλικό σύστημα είναι το τετραγωνικό χωροκεντρωμένο bcc. b. Κάτω από τα 17.5 κέλβιν, το σύστημα μεταβαίνει σε μία νέα άγνωστη κατάσταση τάξης, η οποία συνοδεύεται από τη δημιουργία μίας πολύ μικρής αντισιδηρομαγνητικής ροπής λόγω αντιπαράλληλης διάταξης των μαγνητικών ροπών του U. Παρ'ολ' αυτά ο αντισιδηρομαγνητισμός δεν είναι παρά ένα παρασιτικό, δευτερεύων ή μικρής κλίμακας φαινόμενο. c. Η αντισιδηρομαγνητική κατάσταση μπορεί να ερμηνευτεί ως αποτέλεσμα της συναρμογής τμημάτων της επιφάνειας Fermi. Τα βέλη υποδεικνύουν τα σημεία που συνδέονται με το κυματόνισμα της αντισιδηρομαγνητικής κατάστασης $Q = (0, 0, 1)$. Οι πηγές των διαγραμμάτων είναι K. Haule and G. Kotliar, *Nature Physics* **5**, 796 (2009), C. Broholm *et al*, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1467 (1987), P. M. Oppeneer *et al*, *Phys. Rev. B* **82**, 205103 (2010).

τικά για το εάν είναι δυνατόν η αντισιδηρομαγνητική ροπή που προέρχεται ξεκάθαρα από δίπολα σπιν, όπως έχει επιβεβαιωθεί από μετρήσεις ανάκλασης Bragg στο κυματόνισμα Q_0 [117], μπορεί πράγματι να αποτελεί την κύρια παράμετρο τάξης της μετάβασης. Σε μετρήσεις NMR (Nuclear magnetic resonance) [118, 119] και διάθλασης Larmor [120], έχει αποκαλυφθεί ότι ο αντισιδηρομαγνητισμός είναι ανομοιογενής και παρασιτικός στην κανονική κατάσταση. Επιπλέον, ένας αριθμός πειραματικών δεδομένων [121], υποδεικνύει ότι η συγκεκριμένη θερμοδυναμική φάση αυτή δεν μπορεί εν γένει να συνδεθεί με μαγνητικές καταστάσεις που προκύπτουν από ροπές σπιν υψηλότερης τάξης. **Το συμπέρασμα που προκύπτει είναι ότι η συγκεκριμένη αντισιδηρομαγνητική ροπή δεν αποτελεί το κύριο χαρακτηριστικό αυτής της θερμοδυναμικής φάσης, ενώ η πραγματική παράμετρος τάξης η οποία ευθύνεται για τη συγκεκριμένη κατάσταση είναι ακόμη καλά 'κρυμμένη'.**

1.3.1 Διάγραμμα φάσης

Η εν λόγω 'κρυμμένη κατάσταση' τάξης (HO) (hidden order) παρουσιάζει ένα ιδιαίτερο διάγραμμα φάσης κατά τη μεταβολή της θερμοκρασίας, της πίεσης και του μαγνητικού πεδίου Σχ.1.6. Πρώτα από όλα, κάτω από τα 1.5 κέλβιν, η κρυμμένη κατάσταση μεταβαίνει σε μία υπεραγώγιμη φάση, η οποία θεωρείται ότι είναι μη-συμβατική. Σύμφωνα με θεωρητικές προτάσεις [122], η υπεραγώγιμη κατάσταση παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και αποτελεί μία χειρική κατάσταση τάξεως με παράμετρο τάξης, η οποία έχει αναπαράσταση στο χώρο των κυματανυσμάτων $\sin \frac{k_z}{2} \left(\sin \frac{k_x + k_y}{2} + i \sin \frac{k_x - k_y}{2} \right)$ (Σχ.1.5). Η

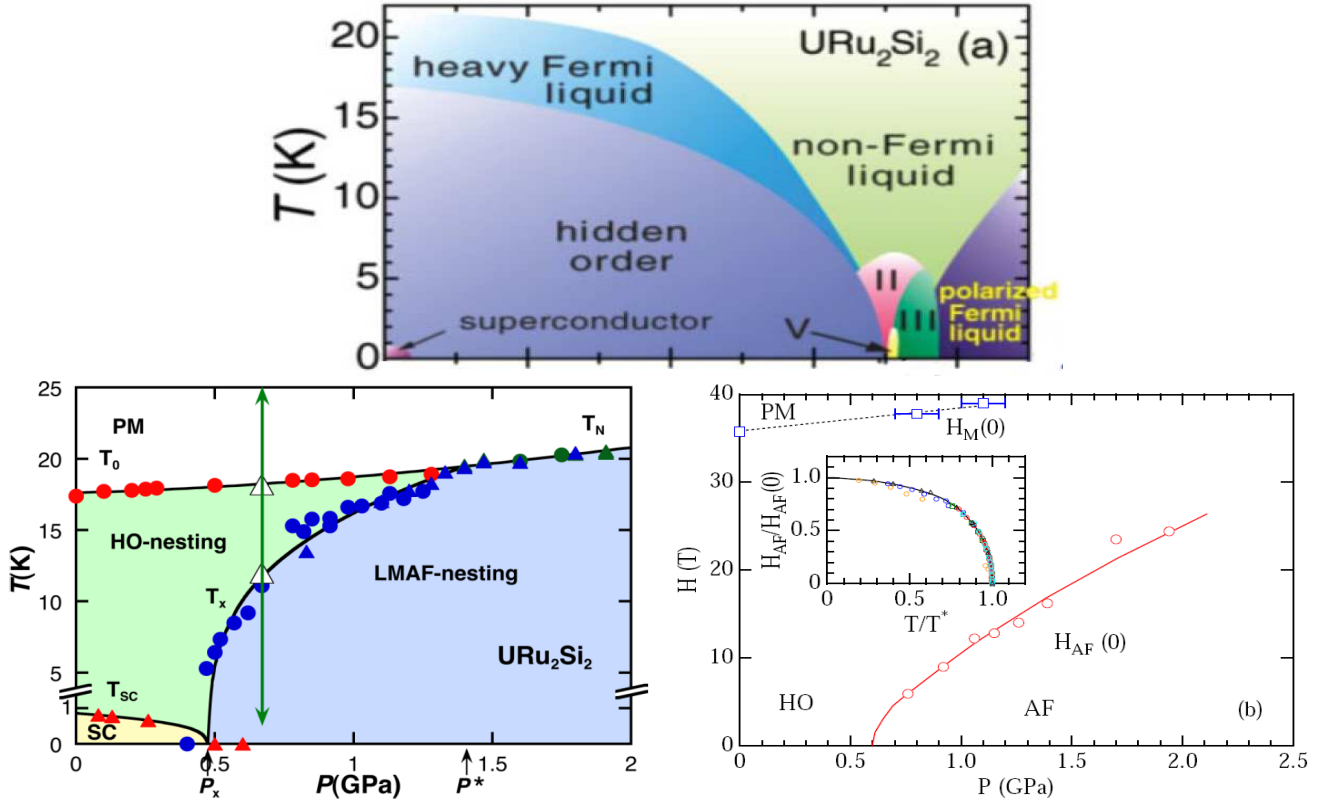


Σχήμα 1.5: Προτεινόμενη μη-συμβατική υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης για το URu_2Si_2 . Το διαφανές γράφημα αντιστοιχεί στο υπεραγωγίμο χάσμα, το σκούρο στην προτεινόμενη επιφάνεια Fermi (δεν έχει προκύψει από υπολογισμούς), ενώ με κόκκινο παρουσιάζονται τα σημεία και οι γραμμές μηδενισμού της προτεινόμενης παραμέτρου τάξης. Γράφημα από το άρθρο Y. Kasahara *et al*, Phys. Rev. Lett. **99**, 116402 (2007).

συγκεκριμένη υπεραγωγίμη κατάσταση, είναι της γενικής μορφής $k_x + ik_y$, η οποία φαίνεται να διέπει και το υλικό Sr_2RuO_4 [123] στο οποίο έχει παρατηρηθεί η παραβίαση της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου [124].

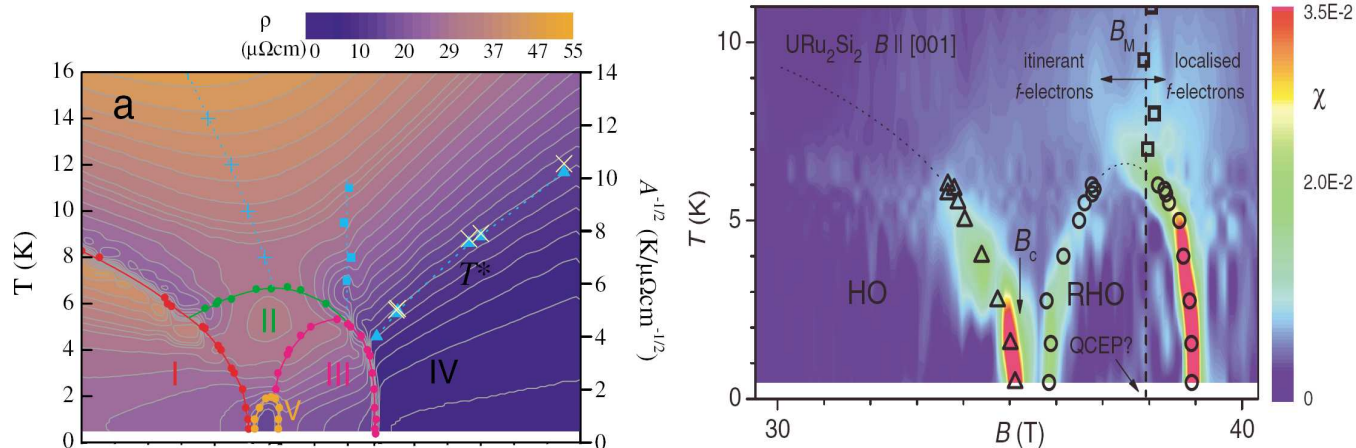
Το URu_2Si_2 παρουσιάζει μία ιδιαίτερη συμπεριφορά και κατά την εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου. Αυξάνοντας το πεδίο, παρατηρούμε την ύπαρξη δύο διαδοχικών μεταμαγνητικών μεταβάσεων (Metamagnetic Steps) για μαγνητικά πεδία $B_{c1} \simeq 35T$ και $B_{c2} \simeq 40T$, στα οποία η μαγνήτιση αυξάνεται [125]. Συγκεκριμένα, για μικρές θερμοκρασίες, κάτω των 3K, η μεταβολή της μαγνήτισης είναι απότομη ενώ γίνεται πιο ήπια καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται Σχ.1.7(b.). Τα χαρακτηριστικά αυτά φαίνονται πολύ καθαρά στο διάγραμμα Σχ.1.7(b.), όπου παρουσιάζεται η μαγνητική επιδεικτικότητα. Μάλιστα, το συγκεκριμένο διάγραμμα φάσης το οποίο βασίζεται στις τιμές της μαγνητικής απόκρισης, ήταν για πολύ καιρό η θεμελιωμένη εικόνα για την συμπεριφορά σε υψηλές τιμές πεδίου, της οποίας η προέλευση είχε απασχολήσει εντονότατα πολλά ερευνητικά γκρουπ ανά τον κόσμο. Μάλιστα, το πρώτο κρίσιμο μαγνητικό πεδίο, αποτελούσε το σύνορο όπου η κρυμμένη κατάσταση εξαφανίζεται, και επανεμφανίζεται αμέσως μετά για μεγαλύτερα πεδία (Reentrant hidden order). Παρ'ολ' αυτά, μετρήσεις της μαγνητοαντίστασης κατάφεραν να αυξήσουν την πειραματική διακριτική ικανότητα, αναδεικνύοντας την ύπαρξη μιας ομάδας μαγνητικώς επαγόμενων καταστάσεων [126] οι οποίες εντοπίζονται ανάμεσα στα δύο κρίσιμα μαγνητικά πεδία Σχ.1.6(a.),1.7(a.). Κατ' αυτόν τον τρόπο, υπάρχει μία περιοχή συνύπαρξης φάσεων χωρίς να αποκλείεται σε αυτές να συμπεριλαμβάνεται και η κρυμμένη κατάσταση. Για πεδία μεγαλύτερα από το δεύτερο κρίσιμο, το υλικό συμπεριφέρεται σαν ένα πολωμένο παραμαγνητικό μέταλλο χωρίς να παρουσιάζει κάποια ιδιαίτερη συμπεριφορά.

Ο συγκεκριμένος μη-συμβατικός υπεραγωγός, επιδεικνύει επιπρόσθετα μία μη τετριμμένη συμπεριφορά κατά την εφαρμογή υδροστατικής πίεσης. Συγκεκριμένα για θερμοκρασίες υψηλότερες από την υπεραγωγίμη κρίσιμη θερμοκρασία, η κρυμμένη κατάσταση περνά μέσω μιας μετάβασης πρώτης τάξης σε μία αντισιδηρομαγνητική κατάσταση μεγάλης ροπής (LMAF) [127]. Το κυματόνισμα αυτής της σιδηρομαγνητικής κατάστασης είναι το $Q_0 = (1,0,0)$ και η πόλωση κατά τον άξονα \hat{z} . Το σημαντικό στοιχείο που χαρακτηρίζει την κατάσταση μεγάλης αντισιδηρομαγνητικής ροπής, είναι ότι φαίνεται να



Σχήμα 1.6: α. Διάγραμμα φάσης πεδίου-θερμοκρασίας $B_z - T$. Παρατηρούμε ότι για μικρά πεδία και χαμηλές θερμοκρασίες το σύστημα μεταβαίνει σε μία μη-συμβατική υπεραγωγίμη κατάσταση. Καθώς αυξάνουμε τη θερμοκρασία, έχουμε μετάβαση σε μία μη-ταυτοποιημένη φάση η οποία ονομάζεται ‘κρυμμένη κατάσταση’ (hidden order). Καθώς αυξάνουμε το μαγνητικό πεδίο, εμφανίζονται δύο κρίσιμα πεδία όπου έχουμε μεταβάσεις φάσης. Αρχικά για $B_{c1} \simeq 35\text{T}$ το σύστημα μεταβαίνει σε μία ομάδα διαφορετικών καταστάσεων ανάμεσα στις οποίες μπορεί να συνεχίσει να υπάρχει η ‘κρυμμένη κατάσταση’. Και αυτές οι καταστάσεις παραμένουν ακόμη άγνωστες. Στο επόμενο κρίσιμο πεδίο $B_{c2} \simeq 40\text{T}$, το σύστημα μεταβαίνει σε μία κατάσταση πολωμένου παραμαγνητικού μετάλλου. β. Διάγραμμα φάσης θερμοκρασίας-πίεσης $T - p$. Βλέπουμε ότι το σύστημα για μεγάλες θερμοκρασίες και μικρές πιέσεις, μεταβαίνει σε μία αντισιδηρομαγνητική κατάσταση μέσω μίας μετάβασης πρώτης τάξης. Κατά τη μετάβαση αυτή, οι θερμοδυναμικές ιδιότητες δεν μεταβάλλονται σημαντικά, αναδεικνύοντας ότι ανάμεσα στις δύο καταστάσεις υπάρχει μία μη προφανής σύνδεση. Σε χαμηλές θερμοκρασίες, η υπεραγωγιμότητα δεν συνυπάρχει ποτέ με τον αντισιδηρομαγνητισμό, και είναι περιορισμένη πάντοτε κάτω από την περιοχή όπου εμφανίζεται η κρυμμένη κατάσταση. γ. Διάγραμμα φάσης πεδίου-πίεσης $B_z - p$. Παρατηρούμε ότι για υψηλές πιέσεις υπάρχει επανείσοδος της κρυμμένης κατάστασης όπου διαδέχεται τον αντισιδηρομαγνητισμό. Το μαγνητικό πεδίο λειτουργεί σαν ένας ισοσταθμιστής της πίεσης. Τα γραφήματα τα δανειστήκαμε από τα άρθρα Y. S. Oh *et al*, Phys. Rev. Lett. **98**, 016401 (2007), A. Villaume *et al*, Phys. Rev. B **78**, 012504 (2008), D. Aoki *et al*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 053701 (2009), αντίστοιχα.

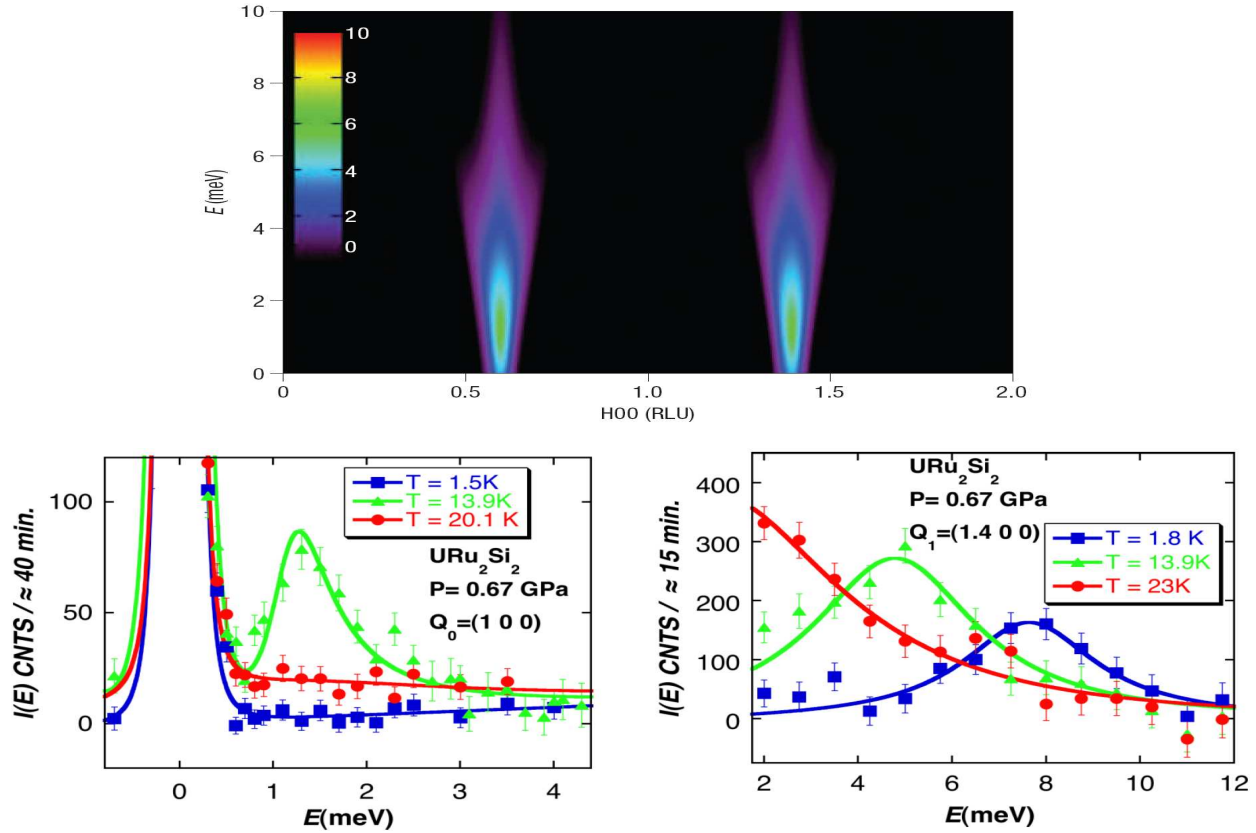
παρουσιάζει θερμοδυναμικές ιδιότητες και επιφάνεια Fermi παραπλήσιες της κρυμμένης κατάστασης. Οι δύο καταστάσεις χαρακτηρίζονται από την ιδιότητα της αδιαβατικής συνέχειας (adiabatic continuity) [128]. Μάλιστα, βασιζόμενοι σε αυτήν την ιδιότητα οι Haule και Kotliar πρότειναν πολύ πρόσφατα ότι υπάρχει μία συνεχής συμμετρία $U(1) \equiv SO(2)$ μεταξύ των δύο καταστάσεων η οποία έχει σπάσει,



Σχήμα 1.7: a. Χαρακτηρισμός του διαγράμματος φάσης από μετρήσεις το μαγνητοαντίστασης. b. Παλαιότερο διάγραμμα φάσης όπου ο χαρακτηρισμός έγινε με βάση τη μαγνητική επιδεκτικότητα. Οι μετρήσεις αγωγιμότητας προσέφεραν μεγαλύτερη διακριτική ικανότητα, οδηγώντας στην ανίχνευση νέων καταστάσεων ανάμεσα στα δύο Μεταμαγνητικά Κρίσιμα Σημεία. Πηγές διαγραμμάτων K. H. Kim *et al*, Phys. Rev. Lett. **91**, 256401 (2003), N. Harrison *et al*, Phys. Rev. Lett. **90**, 096402 (2003).

οδηγώντας στα παραπάνω διαγράμματα φάσης [129, 130]. Όπως, σε κάθε περίπτωση αυθόρμητης παραβίασης, αναμένουμε την εμφάνιση άμαζων σωματιδίων Goldstone που θα φροντίσουν για τη δυναμική επαναφορά της. Λόγω του ότι η συμμετρία δεν είναι ακριβής, οι παραπάνω διεγέρσεις μπορούν να έχουν μία μικρή μάζα. Σύμφωνα με τα παραπάνω, εάν θεωρήσουμε ότι η κρυμμένη κατάσταση δεν είναι διαμορφωμένη (δηλαδή φέρει μηδενικό κυματόνισμα) και ούτε μαγνητική, τότε για να μπορεί να στραφεί στον εσωτερικό χώρο των παραμέτρων τάξης και να καταλήξει στην προαναφερθείσα αντισιδηρομαγνητική κατάσταση, θα πρέπει ο γεννήτορας των στροφών (Goldstone-mode) να έχει πεπερασμένο κυματόνισμα $\mathbf{Q}_0 = (1, 0, 0)$ και σπιν-1. Κατά συνέπεια η διεγέρση Goldstone μπορεί να δώσει πεπερασμένη απόκριση στην ανελαστική σκέδαση νετρονίων για κυματόνισμα \mathbf{Q}_0 , και σε πεπερασμένες ενέργειες. Η παραπάνω συλλογιστική, μπορεί να ερμηνεύσει έναν από τους δύο χαρακτηριστικούς συντονισμούς, που όπως θα δούμε εμφανίζονται στην ανελαστική σκέδαση νετρονίων. Πέρα από την περιοχή των υψηλών θερμοκρασιών, για χαμηλές θερμοκρασίες όπου η εφαρμογή της πίεσης εκτελείται ενώ βρισκόμαστε στην υπεραγώγιμη φάση, η κατάσταση είναι ακόμα πιο ενδιαφέρουσα. Σε αυτήν την περίπτωση, βλέπουμε ότι η υπεραγωγιμότητα παρουσιάζεται μόνο μέσα στην μη-ταυτοποιημένη κατάσταση και ποτέ στην αντισιδηρομαγνητική Σχ.1.6(b). Αυτό σημαίνει ότι η αιγισματική κατάσταση αποτελεί αναγκαία προϋπόθεση για τον σχηματισμό της μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας. Πριν προχωρήσουμε, μπορούμε να δούμε ότι υπάρχει μία άμεση αντιστοιχία αυτού του διαγράμματος φάσης και αυτού που ισχύει στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού. Και στα δύο υλικά υπάρχει ανταγωνισμός αντισιδηρομαγνητισμού και μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας στην περιοχή των χαμηλών θερμοκρασιών. Στην πρώτη περίπτωση συναρτήσε της νόθευσης και στη δεύτερη συναρτήσε της πίεσης. Αντίθετα, στο όριο των υψηλών θερμοκρασιών ο αντισιδηρομαγνητισμός ανταγωνίζεται και στα δύο υλικά μία εξωτική κατάσταση. Αυτό είναι ένδειξη μίας κοινής συμπεριφοράς, απλά σε διαφορετική ενεργειακή κλίμακα.

Προχωρούμε με το διάγραμμα φάσης πεδίου-πίεσης Σχ.1.6(c), το οποίο και αυτό χαρακτηρίζεται από σημαντικά φαινόμενα [131]. Ξεκινώντας από μηδενική πίεση, το σύστημα βρίσκεται στην HO. Σε χαμηλές τιμές του μαγνητικού πεδίου, καθώς αυξάνουμε την πίεση μεταβαίνουμε στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση. Καθώς βρισκόμαστε μέσα στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση, η περαιτέρω αύξηση του πεδίου μας οδηγεί ξανά στην κατάσταση HO, αντί στην κανονική. Έχουμε λοιπόν επανέισοδο της HO.

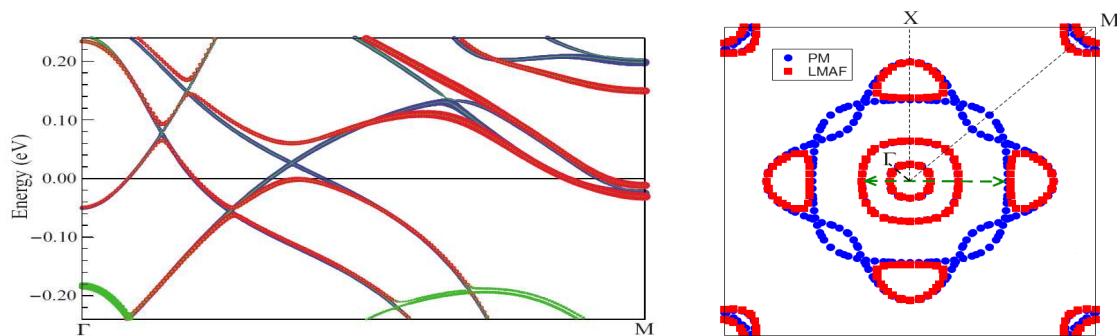


Σχήμα 1.8: a. Μαγνητικός συντονισμός στα μη-σύμμετρα ισοδύναμα κυματανύσματα $Q_1 = (1 \pm 0.4, 0, 0)$. Η συγκεκριμένη διέγερση έχει ενέργεια περίπου στα 4-5 meV. b. Συμπεριφορά του μαγνητικού συντονισμού με κυματάνυσμα $Q = (1, 0, 0)$, στην κανονική κατάσταση (κόκκινο), στην ‘κρυμμένη’ φάση (πράσινο) και στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση (μπλε). Παρατηρούμε ότι ο συντονισμός παρουσιάζεται μόνο στην μη-ταυτοποιημένη περιοχή και αποτελεί χαρακτηριστική ιδιότητά της. c. Το αντίστοιχο διάγραμμα με το b. για τον συντονισμό Q_1 . Παρατηρούμε ότι ο συγκεκριμένος συντονισμός παρατηρείται τόσο στην ‘κρυμμένη’ κατάσταση, όσο και στην αντισιδηρομαγνητική, με τη διαφορά ότι στη δεύτερη περίπτωση μετατοπίζεται σε υψηλότερες ενέργειες. Πηγές των γραφημάτων C. R. Wiebe *et al*, Nature Physics **3**, 1 (2007), A. Villaume *et al*, Phys. Rev. B **78**, 012504 (2008).

Όταν αυτή καταστραφεί, θα δώσει τη θέση της σε μία κατάσταση πολωμένου παραμαγνητικού μετάλλου.

1.3.2 Ανελαστική σκέδαση νετρονίων

Μετρήσεις ανελαστικής σκέδασης νετρονίων (INS) [127, 131, 132, 133, 134], έχουν αποκαλύψει δύο διεγέρσεις σε πεπερασμένες ενέργειες, με κυματάνυσμα $Q = (1, 0, 0)$ (το οποίο είναι ισοδύναμο με το Q_0) και $Q_1 = (1 \pm 0.4, 0, 0)$ Σχ.1.8. Συγκεκριμένα, ο πρώτος συντονισμός συνοδεύει πάντοτε την ‘κρυμμένη’ κατάσταση ενώ απουσιάζει από την κατάσταση της μεγάλης αντισιδηρομαγνητικής μαγνητικής ροπής [127, 131] Σχ.1.8(b). Αντίθετα ο δεύτερος συντονισμός, Σχ.1.8(a,c), διατηρείται και στις δύο φάσεις αλλά στην δεύτερη μετατοπίζεται σε υψηλότερες ενέργειες Σχ.1.8(c). Το γεγονός ότι ο δεύτερος συντονισμός παρατηρείται σε μη-σύμμετρα με το κρυσταλλικό πλέγμα κυματανύσματα, είναι ολοφάνερη απόδειξη ότι απεντοπισμένα ηλεκτρόνια ευθύνονται για τον συγκεκριμένο συντονισμό [134], κλονίζοντας με αυτό τον τρόπο θεωρίες οι οποίες βασίζονται μόνο σε ιδιότητες των εντοπισμένων ηλεκτρονίων



Σχήμα 1.9: a. Ενεργειακές ζώνες κοντά στο επίπεδο Fermi υπολογισμένες στα πλαίσια της θεωρίας LDA. Με μπλε παρουσιάζεται η παραμαγνητική κατάσταση ενώ με κόκκινο η αντισιδηρομαγνητική. Το σημείο διασταύρωσης δύο ενεργειακών ζωνών στην παραμαγνητική φάση, αποτελεί σημαντικό σημείο διότι σε αυτό ανοίγει ενεργειακό χάσμα στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση. b. Επιφάνειες Fermi και διανύσματα συναρμογής στις δύο φάσεις. Παρατηρούμε ότι υπάρχει συναρμογή των επιφανειών Fermi στο κυματόνισμα Q_1 (πράσινο) όπου παρατηρείται ο αντίστοιχος συντονισμός. Τα δύο τελευταία διαγράμματα μπορούν να μας δώσουν πληροφορία και για την ‘χρυμμένη’ κατάσταση λόγω της αδιαβατικής συνέχειας που τη συνδέει με την αντισιδηρομαγνητική κατάσταση. Πηγές των γραφημάτων S. Elgazzar *et al*, Nature Materials **8**, 337 (2009).

του ουρανίου που ανήκουν στο τροχιακό $5f$ [135, 136, 137]. Η εικόνα ότι απεντοπισμένα ηλεκτρόνια ευθύνονται για τις εξωτικές ιδιότητες αυτού του υλικού έχει υποστηριχθεί από διάφορες θεωρητικές ομάδες στο παρελθόν [138, 139, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146], ενώ υποστηρίζεται σθεναρά από την ύπαρξη συναρμογής (nesting) της επιφάνειας Fermi στο κυματόνισμα Q_1 [142, 143] Σχ.1.9(a,b), καθώς και από την πρόσφατη παρατήρηση στη Γωνιακή Φασματοσκοπία Φωτοεκπομπής (ARPES) πως υπάρχει πράγματι άνοιγμα ενεργειακού χάσματος στην επιφάνεια Fermi [147]. Στο παρελθόν οι διεγέρσεις στο κυματόνισμα Q_1 είχαν ερμηνευτεί είτε ως διαμήκεις διακυμάνσεις μίας ελικοειδούς αστάθειας Fermi [144], ή ως τη δημιουργία μιας εξιτονικής διέγερσης που φέρει σπιν-1 λόγω του σχηματισμού ενός κύματος πυκνότητας φορτίου σε αυτό το κυματόνισμα [145]. Πιο πρόσφατα, όπως ήδη αναφέραμε, η διέγερση σε κυματόνισμα Q_0 , προτάθηκε ότι μπορεί να αποτελεί τη διέγερση Goldstone της συμμετρίας μεταξύ της ‘χρυμμένης’ κατάστασης και της αντισιδηρομαγνητικής.

1.4 Γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst σε μη-συμβατικούς υπεραγωγούς

Στις παραπάνω παραγράφους παρουσιάσαμε έναν αριθμό από τα βασικά χαρακτηριστικά των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας και του URu_2Si_2 . Παρ’ολ’ αυτά αφήσαμε προς συζήτηση για αυτήν την παράγραφο, το Γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst, το οποίο θα αποτελέσει και έναν από τους κύριους πόλους της παρούσας διατριβής. Οι δύο διαφορετικοί τύποι μη-συμβατικών υπεραγωγών που μελετούμε, παρουσιάζουν μία υψηλή τιμή σήματος Nernst στις μη υπεραγώγιμες περιοχές τους, η οποία ακολουθεί μία έντονα μη-γραμμική θερμοκρασιακή εξάρτηση. Προτού παρουσιάσουμε περισσότερες πληροφορίες για τα αντίστοιχα πειράματα, θα δώσουμε μία σύντομη περιγραφή του φαινομένου Nernst.

1.4.1 Θερμική ισχύς και σήμα Nernst

Σε αυτήν την παράγραφο θα εισάγουμε τις έννοιες της θερμικής ισχύος και του σήματος Nernst, τα οποία είναι θερμοηλεκτρικά μεγέθη που περιγράφουν διαφορές δυναμικού που προκύπτουν κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες πειραματικών μετρήσεων. Και τα δύο μεγέθη σχετίζονται με την εμφάνιση ρευμάτων θερμότητας και φορτίου. Συγκεκριμένα, όταν σε ένα υλικό εφαρμόσουμε ένα σταθερό ηλεκτρικό πεδίο \mathcal{E} και μία θερμοβαθμίδα $-\nabla T$, έχουμε την ακόλουθη απόκριση ρευμάτων

$$\mathbf{J}_c = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{E} + \boldsymbol{\alpha} \cdot (-\nabla T) \quad (1.11)$$

$$\mathbf{J}_h = \tilde{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathcal{E} + \boldsymbol{\kappa} \cdot (-\nabla T) , \quad (1.12)$$

όπου με $\boldsymbol{\sigma}$ παριστάνουμε τον ταυστή της ηλεκτρικής αγωγιμότητας, με $\boldsymbol{\alpha} = \tilde{\boldsymbol{\alpha}}/T$ τους ταυστές της θερμοηλεκτρικής αγωγιμότητας και με $\boldsymbol{\kappa}$ τον ταυστή θερμικής αγωγιμότητας. Στην περίπτωση όπου η θεμελιώδης κατάσταση ενός συστήματος χαρακτηρίζεται από συμμετρία αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} , τα μη-διαγώνια στοιχεία των ταυστών είναι μη-μηδενικά, μόνο όταν εφαρμόσουμε μία εξωτερική διαταραχή που να την παραβιάζει. Στην συνηθισμένη περίπτωση, αυτό γίνεται μέσω της εφαρμογής ενός μαγνητικού πεδίου κάθετα στο επίπεδο του υλικού. Τα μη διαγώνια στοιχεία είναι ευθέως ανάλογα του μαγνητικού πεδίου και ευθύνονται για την ηλεκτρική, θερμοηλεκτρική και θερμική απόκριση Hall, αντίστοιχα. Αντίθετα στην περίπτωση των Χειρικών (chiral) υλικών, τα οποία παραβιάζουν αυθόρμητα και εγγενώς τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, τα παραπάνω φαινόμενα Hall γίνονται έμδηλα ακόμη και για μηδενικά μαγνητικά πεδία. Σε αυτήν την περίπτωση η απόκριση Hall ονομάζεται **αυθόρμητη**.

Θα θεωρήσουμε τώρα την περίπτωση όπου εφαρμόζουμε μία πεπερασμένη θερμοβαθμίδα κατά τη διεύθυνση \hat{x} , ενώ παράλληλα, η θερμοκρασία του υλικού κατά τη διάρκεια του πειράματος παραμένει με καλή προσέγγιση ανεξάρτητη της συντεταγμένης y . Σε αυτήν την περίπτωση, τα ρεύματα φορτίου δίνονται από τις σχέσεις

$$J_c^x = \sigma_{xx}\mathcal{E}_x + \sigma_{xy}\mathcal{E}_y + \alpha_{xx}(-\partial_x T) , \quad (1.13)$$

$$J_c^y = \sigma_{yx}\mathcal{E}_x + \sigma_{yy}\mathcal{E}_y + \alpha_{yx}(-\partial_x T) . \quad (1.14)$$

Η θερμική ισχύς S και το σήμα Nernst N ορίζονται ως οι διαφορές δυναμικού παράλληλα και κάθετα στη διεύθυνση της θερμοβαθμίδας, που εμφανίζονται όταν αποκατασταθεί η ισορροπία και δεν υπάρχει ροή ηλεκτρικού φορτίου. Κατά συνέπεια, οι εκφράσεις των δύο θερμοηλεκτρικών μεγεθών προκύπτουν από τη σχέση $\mathbf{J}_c = \mathbf{0}$. Λύνοντας το προκύπτον σύστημα, καταλήγουμε στις σχέσεις

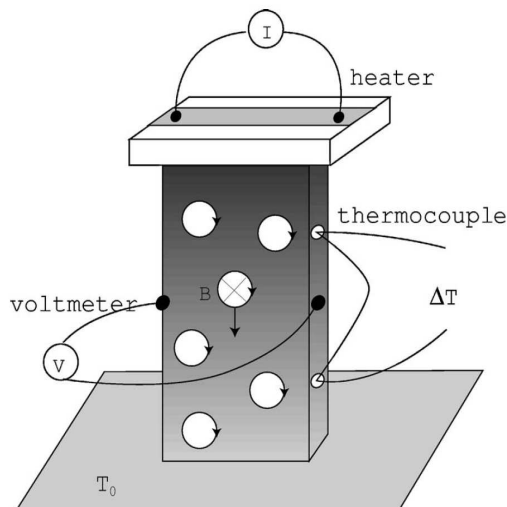
$$S \equiv \frac{\mathcal{E}_x}{\partial_x T} = \frac{\alpha_{xx}\sigma_{yy} + \alpha_{xy}\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2} , \quad (1.15)$$

$$N \equiv \frac{\mathcal{E}_y}{-\partial_x T} = \frac{\sigma_{xx}\alpha_{xy} - \alpha_{xx}\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2} , \quad (1.16)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$. Στο Σχ.1.10 παρουσιάζουμε μια απλή διάταξη με την οποία μπορούμε να κάνουμε θερμοηλεκτρικές μετρήσεις.

1.4.2 Γιγαντιαίο σήμα Nernst στο οξειδία του χαλκού

Στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας παρατηρείται ένα γιγαντιαίο σήμα Nernst τόσο στην υπεραγώγιμη κατάσταση όσο και στην περιοχή του ψευδοχάσματος Σχ.1.11 [148, 149, 150]. Η κυρίαρχη ερμηνεία αυτών των φαινομένων εως τώρα, έχει σαν βάση ότι το παρατηρούμενο σήμα Nernst προέρχεται



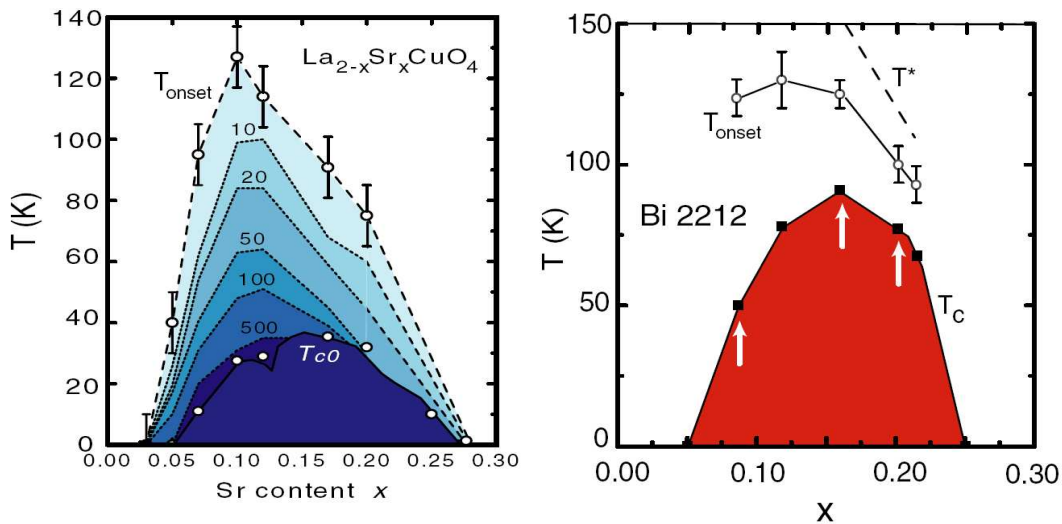
Σχήμα 1.10: Μία διάταξη κατάλληλη για τη μέτρηση του σήματος Nernst. Το σήμα Nernst είναι η διαφορά δυναμικού V που εμφανίζεται στο υλικό όταν έχουμε εφαρμόσει μία θερμοβαθμίδα $-\nabla T$ υπό την ταυτόχρονη παρουσία ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου \mathbf{B} . Η τάση Nernst ορίζεται όταν το συνολικό ηλεκτρικό ρεύμα έχει μηδενιστεί. Το γράφημα προέρχεται από το άρθρο επισκόπησης Y. Wang, Lu Li, and N. P. Ong, Phys. Rev. B **73**, 024510 (2006).

από υπεραγώγιμες δίνες [151, 152, 153, 154, 155]. Οι υπεραγώγιμες δίνες αποτελούν καλά εντοπισμένες (ιδανικά σημειακές) περιοχές του υλικού όπου η παράμετρος τάξης μηδενίζεται λόγω της εμφάνισης ενός κάθετου μαγνητικού πεδίου. Οι υπεραγωγοί που παρουσιάζουν αυτή τη συμπεριφορά, ονομάζονται υπεραγωγοί δεύτερου τύπου. Τα οξείδια του χαλκού ανήκουν σε αυτήν την κατηγορία. Ο βασικός λόγος γέννησης σήματος Nernst από υπεραγώγιμες δίνες, οφείλεται στην εντροπία που φέρει η κάθε δίνη στο μη υπεραγώγιμο πυρήνα της. Οι υπεραγώγιμες δίνες κινούνται προς την κατεύθυνση των ψυχρότερων περιοχών του δείγματος, λόγω της διαφοράς εντροπίας. Από την άλλη, ο Josephson το 1965 [156], έδειξε ότι η μετατόπιση μίας υπεραγώγιμης δίνης δημιουργεί ένα ηλεκτρικό πεδίο το οποίο είναι εγκάρσιο στη φορά της κίνησης και του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου. Στην περίπτωση που εξετάζουμε, οι δίνες κινούνται κατά τη διεύθυνση \hat{x} , το πεδίο είναι κατά τον άξονα \hat{z} και κατά συνέπεια θα αναπτυχθεί ένα ηλεκτρικό πεδίο $\mathcal{E}_y = -v_x^{vortex} B_z$.

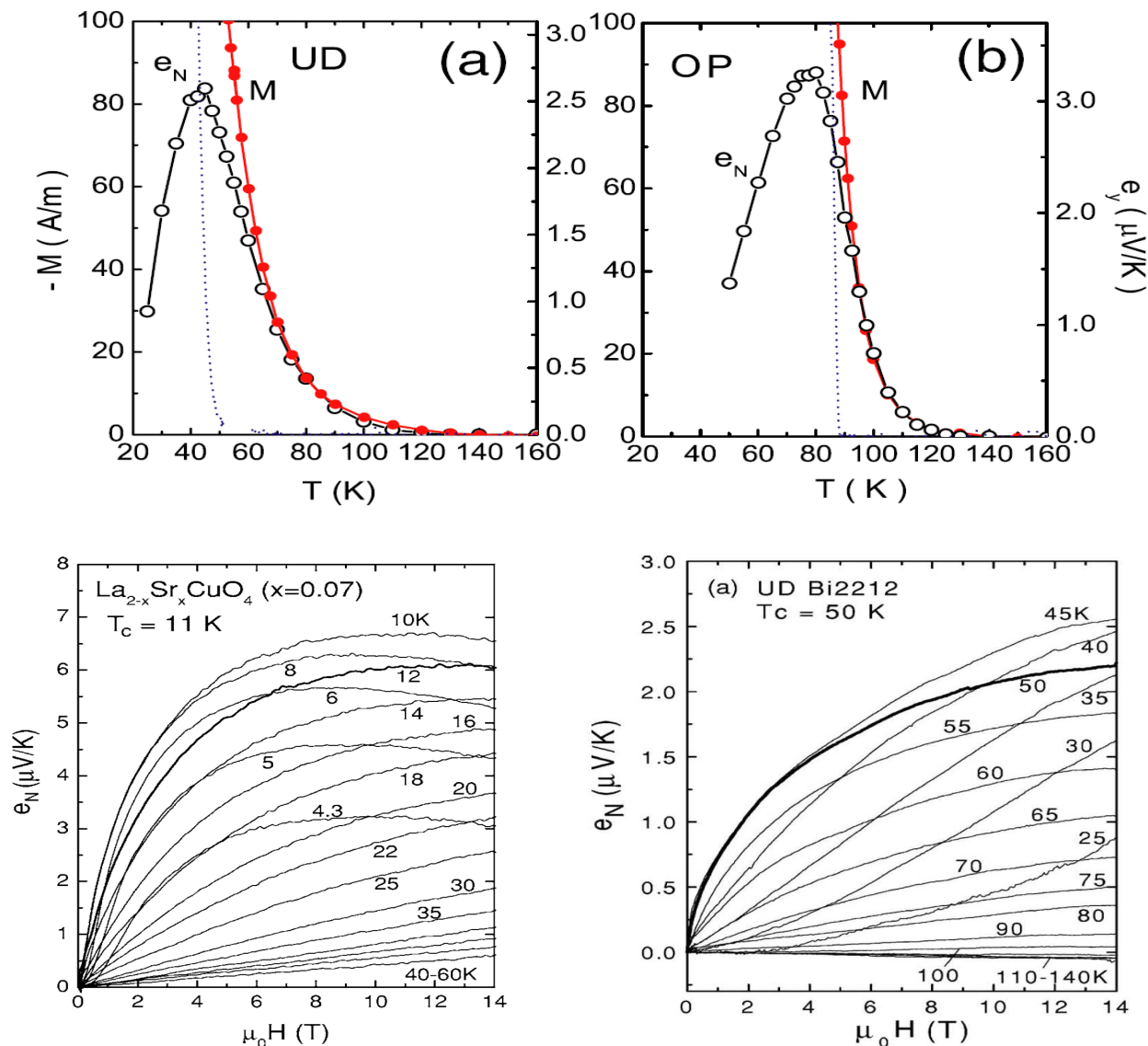
Οι υπεραγώγιμες δίνες είναι πράγματι δυνατόν να οδηγήσουν σε ένα σήμα Nernst, της παρατηρούμενης τάξης. Παρ'ολ' αυτά, στην περίπτωση του ψευδοχάσματος, το σύστημα δεν βρίσκεται στην υπεραγώγιμη φάση και κατά συνέπεια είναι αδύνατον ένα συμβατικό σήμα Nernst από υπεραγώγιμες δίνες να ευθύνεται για το ιδιαίτερα υψηλά θερμοηλεκτρικά σήματα αυτής της περιοχής. Σύμφωνα με θεωρητικές προτάσεις, αυτό μπορεί να γίνει δυνατό εάν υπάρχουν στο ψευδοχάσμα διακυμάνσεις όπου εμφανίζονται ανθόρμητα ζεύγη δινών και αντιδινών (vortex-antivortex pairs) [157, 158, 159]. Σε αυτήν την περίπτωση, η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου σπάει τη συμμετρία δίνης - αντιδίνης, οδηγώντας σε ένα πεπερασμένο σήμα Nernst. Οι συγκεκριμένες θεωρίες στηρίζονται σε μία σημαντική διαφορά των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας συγκριτικά με τους συμβατικούς υπεραγωγούς. Παρόλο που η παράμετρος τάξης και η κρίσιμη θερμοκρασία είναι πολύ μεγαλύτερες στα οξείδια του χαλκού σε σύγκριση με τους συμβατικούς υπεραγωγούς, ο λόγος $n_s = \hbar^2 |\Psi|^2 / m$ θεωρείται πολύ μικρότερος. Στους συμβατικούς υπεραγωγούς, όταν το μέτρο της παραμέτρου τάξης γίνεται πεπερασμένο, η υψηλή τιμή του μεγέθους n_s γίνεται απαγορευτική για ανομοιογένειες της φάσης και αυτό έχει ως αποτέλεσμα η υπεραγώγιμη φάση να είναι σύμφωνη, χαρακτηριζόμενη μόνο από μία συγκεκριμένη ομογενή φάση. Αν-

τίθεται, στους υπεραγωγούς όπου το μέγεθος n_s λαμβάνει σχετικά μικρές τιμές, οι διακυμάνσεις της φάσης δεν έχουν μεγάλο ενεργειακό κόστος $\int d\mathbf{r} \frac{n_s}{2} [\nabla\varphi(\mathbf{r})]^2$ και είναι δυνατόν να εμφανιστούν. Σε αυτήν την περίπτωση, το μέτρο της παραμέτρου τάξης μπορεί να είναι δυνατόν να είναι πεπερασμένο για θερμοκρασίες μεγαλύτερες της κρίσιμης, η οποία τώρα αποτελεί την κρίσιμη θερμοκρασία συμφωνίας της φάσης. Πάνω από αυτή τη θερμοκρασία οι τυχαίες μεταβολές της φάσης, δίνουν μία μηδενική τιμή της παραμέτρου τάξης $\langle |\Psi| e^{i\varphi(\mathbf{r})} \rangle = 0$, παρόλο που όπως αναφέραμε το μέτρο είναι πεπερασμένο.

Μέχρι τώρα, η εναλλακτική οδός για το ενισχυμένο σήμα Nernst που παρατηρείται σε αυτά τα υλικά, αποτελεί η συνεισφορά των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων καταστάσεων τάξης που αντιμάχονται την υπεραγωγιμότητα [160, 161, 162, 163, 164]. Σε αυτήν την κατηγορία, μπορούμε να διακρίνουμε την πρόταση του μη-συμβατικού κύματος πυκνότητας φορτίου (εννοούμε μη-μαγνητικό) τύπου $d_{x^2-y^2}$ [165]. Κάτω από κάποιες συγκεκριμένες και ειδικές συνθήκες είναι δυνατόν να προκύψει ένα σήμα Nernst υψηλών τιμών αλλά δύσκολα μπορεί να προκύψει το ιδιαίτερο θερμοκρασιακό προφίλ που χαρακτηρίζει το σήμα Nernst [163]. Μία άλλη πιθανή εξήγηση είναι η ύπαρξη μίας κατάστασης τάξης με διάφορες ενεργειακές ζώνες και αντίστοιχα διάφορους τύπους μονοσωματιδιακών διεγέρσεων. Αυτό συμβαίνει για παράδειγμα στην κατάσταση κύματος πυκνότητας φορτίου του υλικού NbSe_2 [166, 167]. Αναλόγως την ενεργειακή δομή και την θερμοκρασιακή εξάρτηση των χρόνων σκέδασης των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων κάθε ζώνης με τις προσμίξεις, είναι δυνατόν να προκύψει ένα γιγαντιαίο σήμα Nernst [164]. Φυσικά, για να αναπαραχθεί το θερμοκρασιακό προφίλ που θα παρουσιάσουμε αμέσως παρακάτω, απαιτείται και σε αυτήν την περίπτωση η ύπαρξη κατάλληλων και ειδικών θερμοκρασιακών εξαρτήσεων των εμπλεκόμενων μεγεθών. Η απαίτηση περισσότερων ενεργειακών ζωνών και τουλάχιστον διαφορετικών ειδών μονοσωματιδιακών διεγέρσεων, προκύπτει από την αναγκαιότητα αντιστάθμισης της ακύρωσης Sondheimer (Sondheimer cancellation) που λαμβάνει χώρα σε υλικά όπου υπάρχει μόνο μία διαθέσιμη ενεργειακή ζώνη για τη μεταφορά ηλεκτρικού φορτίου [168]. Ο Sondheimer έδειξε ότι εάν υπάρχει



Σχήμα 1.11: Το γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας εμφανίζεται αρκετά πάνω από την κρίσιμη υπεραγωγίμη θερμοκρασία και αγκαλιάζει τον ‘υπεραγωγίμο’ θόλο. Παρατηρούμε ότι το συγκεκριμένο φαινόμενο παρουσιάζεται και στην περιοχή του ψευδοχάσματος. Τα αίτια που κρύβονται πίσω από αυτήν ανώμαλη θερμοηλεκτρική απόκριση έχουν αποδοθεί ως τώρα είτε στην ύπαρξη υπεραγωγίμων δινών ή στην απόκριση των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων μίας κατάστασης τάξης, αντιμαχόμενης της υπεραγωγιμότητας. Το διάγραμμα δανειστήκαμε από το άρθρο Yayu Wang, Lu Li, and N. P. Ong, Phys. Rev. B 73, 024510 (2006).



Σχήμα 1.12: a,b. Σήμα Nernst και μαγνήτιση για υπονοθευμένο ($T_c = 50\text{K}$) και υπερνοθευμένο ($T_c = 87.5\text{K}$) Bi2212. Παρατηρούμε ότι το σήμα Nernst παρουσιάζει μία έντονα μη-γραμμική θερμοκρασιακή εξάρτηση η οποία θυμίζει έναν λόφο (tilted hill), με κορυφή κοντά στην κρίσιμη υπεραγώγιμη θερμοκρασία. Για $T > T_c$ το σύστημα βρίσκεται στην περιοχή του ψευδοχάσματος, η οποία όπως βλέπουμε χαρακτηρίζεται τόσο από υψηλές τιμές σήματος Nernst καθώς και από ισχυρά σήματα διαμαγνητισμού. c,d. Εξάρτηση του σήματος Nernst από το μαγνητικό πεδίο. Παρατηρούμε ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες το σήμα είναι γραμμικό, για υψηλότερες γίνεται μη-γραμμικό, και για αρκετά μεγαλύτερες αποκτά ξεκάθαρα μία γραμμική συμπεριφορά Yayu Wang, Lu Li, and N. P. Ong, Phys. Rev. B 73, 024510 (2006).

μία μόνο ενεργειακή ζώνη, τότε το σήμα είναι πραγματικά αμελητέο εξηγώντας με αυτόν τον τρόπο τα πειράματα σε διάφορα μέταλλα, όπως ο χρυσός.

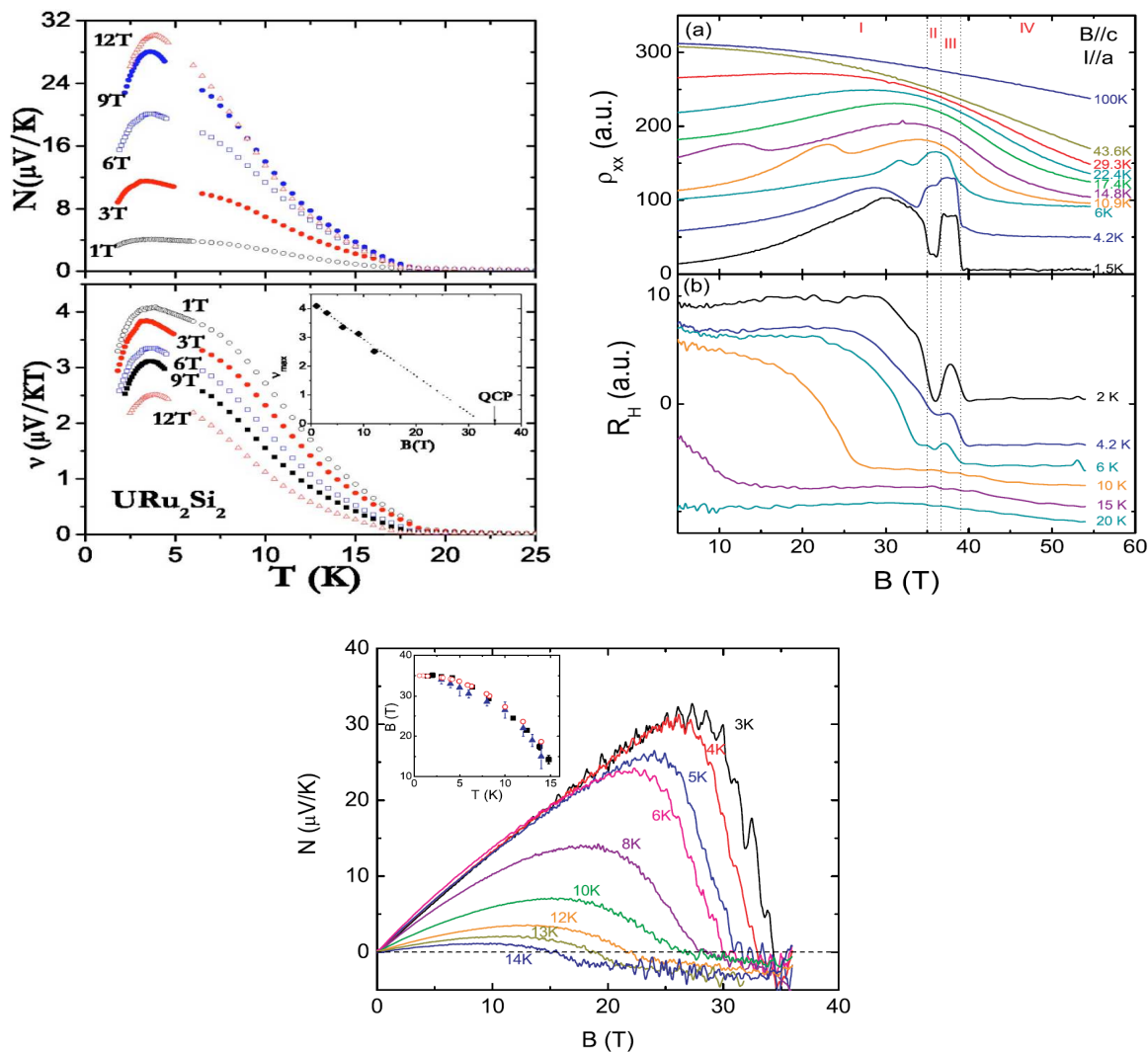
Προχωρούμε τώρα στην εξέταση κάποιων ιδιοτήτων του γιγαντιαίου σήματος Nernst, όπως αυτό έχει παρατηρηθεί σε μεγάλο εύρος τιμών νόθευσης με σπές [148]. Όπως μπορούμε να παρατηρήσουμε και στο Σχ.1.12, το σήμα είναι της τάξης των μερικών $\mu\text{V/K}$, αρκετά υψηλότερο από την τυπική κλίμακα που

συναντούμε στα συνήθη μέταλλα του επιπέδου των nV/K . Στο Σχ.1.12(a) παρατηρούμε την ιδιαίτερη θερμοκρασιακή εξάρτηση που έχουμε ήδη προαναγγείλει. Το σήμα Nernst, έχει τη μορφή ενός ‘λόφου’ (tilted hill) που παρουσιάζει μία κορυφή γύρω σχεδόν από την υπεραγώγιμη κρίσιμη θερμοκρασία. Η καλή συμμετρία του σήματος γύρω από την κρίσιμη θερμοκρασία, είναι δείγμα των συμβατικών υπεραγώγιμων δινών που εμφανίζονται σε αυτήν την περιοχή. Το αίνιγμα της θερμοηλεκτρικής συμπεριφοράς συνδέεται με την παρατήρηση μίας εκτεταμένης θερμοκρασιακής περιοχής, όπου το σύστημα βρίσκεται στη μη υπεραγώγιμη φάση του ψευδοχάσματος. Σε αυτήν την περιοχή, 70 – 120K για τα υπονοθευμένα ($T_c = 50K$) και 90 – 130K για τα υπερνοθευμένα ($T_c = 87.5K$) δείγματα του Bi2212, το σήμα Nernst διατηρείται θετικό και υψηλό, ενώ φθίνει εκθετικά σε αρνητικές τιμές. Το συγκεκριμένο θετικό πρόσημο αποτελεί ένα επιχείρημα υπέρ της θεωρίας των υπεραγώγιμων δινών. Παρατηρούμε ακόμη ότι στην ίδια περιοχή όπου έχουμε το ισχυρό και ταυτόχρονα ανεξήγητο σήμα Nernst, το σύστημα παρουσιάζει ισχυρά σήματα διαμαγνητισμού [150]. Το ισχυρό φαινόμενο Nernst στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας και ο ισχυρός διαμαγνητισμός αποτελούν χαρακτηριστικά της κατάστασης του ψευδοχάσματος και απαιτούν κοινή εξήγηση. Η ερμηνεία των υπεραγώγιμων δινών είναι και πάλι δύνατο να εξηγήσει τον ισχυρό διαμαγνητισμό, με βάση το φαινόμενο Meissner, κάτι που τουλάχιστον μέχρι πρότινος φαινόταν αδύνατον να εξηγηθεί από μία συμβατική κατάσταση τάξης. Παρόλ’ αυτά, η συγκεκριμένη λανθασμένη αντίληψη θα καταρριφθεί στα πλαίσια αυτής της διατριβής. Το σήμα Nernst παρουσιάζει μία επίσης ιδιαίτερη και μη γραμμική εξάρτηση με το μαγνητικό πεδίο. Στα Σχ.1.12(c,d) παρουσιάζουμε την εν λόγω εξάρτηση για δύο συγκεκριμένα υλικά τα οποία θα μας απασχολήσουν και στη συνέχεια. Παρατηρούμε ότι για μικρά πεδία και χαμηλές θερμοκρασίες το σήμα είναι γραμμικό, στη συνέχεια για ενδιάμεσες θερμοκρασίες το σήμα μετατρέπεται σε έντονα μη-γραμμικό, ενώ καθώς μεταβαίνουμε σε υψηλές θερμοκρασίες το σήμα αποκτά μία γνήσια γραμμική εξάρτηση.

1.4.3 Γιγαντιαίο σήμα Nernst στον υπεραγωγό URu₂Si₂

Το γιγαντιαίο φαινόμενο που παρουσιάσαμε στην προηγούμενη παράγραφο, χαρακτηρίζει με κάποιες διαφορές φυσικά, και το μη-συμβατικό υπεραγωγό βαρέων φερμιονίων URu₂Si₂ [169, 170]. Μάλιστα, η τιμή του σήματος Nernst είναι ακόμη υψηλότερη από το αντίστοιχο σήμα των οξειδίων του χαλκού, κατά περίπου μία τάξη μεγέθους. Όσον αφορά το σήμα Nernst, είναι και αυτό θετικό, κάτι που θα μπορούσε να αποτελέσει και σε αυτό το υλικό μία ένδειξη της παρουσίας υπεραγώγιμων δινών. Αυτό όμως δεν συμβαίνει σε αυτήν την περίπτωση. Το σήμα Nernst λαμβάνει μεγάλες τιμές αρκετά μακριά από την υπεραγώγιμη κατάσταση που τερματίζεται στα 1.5K και χαρακτηρίζει μονάχα την ‘κρυμμένη κατάσταση’. Μάλιστα, το σήμα Nernst στον συγκεκριμένο υπεραγωγό έχει θεωρηθεί ως αποτέλεσμα του ημι-μεταλλικού χαρακτήρα της συγκεκριμένης κατάστασης, όπου υπάρχει ένας ίσος αριθμός ηλεκτρονίων και οπών [169, 171]. Με αυτόν τον τρόπο η ακύρωση Sondheimer δεν παρουσιάζεται και το σήμα Nernst μπορεί να πάρει εν γένει υψηλές τιμές. Και σε αυτήν την περίπτωση, δεν είναι προφανές γιατί η εξάρτηση του σήματος Nernst οφείλει να έχει το χαρακτηριστικό θερμοκρασιακό προφίλ που παρατηρήσαμε και στην προηγούμενη παράγραφο και εμφανίζεται και στον συγκεκριμένο υπεραγωγό.

Όπως παρουσιάζουμε στο Σχ.1.13(a), το σήμα Nernst λαμβάνει τιμές μερικών δεκάδων $\mu V/K$, και η θερμοκρασιακή εξάρτηση ακολουθεί κι εδώ τη μορφή ενός λόφου που παρουσιάζει μία κορυφή περίπου στα 4K. Η κορυφή του σήματος Nernst ολισθαίνει αργά προς μεγαλύτερες θερμοκρασίες καθώς αυξάνεται το εφαρμοζόμενο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Αντίθετα, ο συντελεστής Nernst που ορίζεται ως το πηλίκο $\nu = N/B_z$, μειώνεται ελαφρά με την αύξηση του μαγνητικού πεδίου Σχ.1.13(c). Στα Σχ.1.13(b,d) παρουσιάζουμε την εξάρτηση της διαμήκου αντίστασης και του συντελεστή Hall συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου. Η πρώτη μας παρατήρηση αφορά τη ‘λεπτή υφή’ του διαγράμματος φάσης αυτού του υλικού, μεταξύ των κρίσιμων μαγνητικών πεδίων, η οποία είναι ευδιάκριτη στις ανωμαλίες της



Σχήμα 1.13: a. Θερμοκρασιακό προφίλ του σήματος Nernst για διάφορα μαγνητικά πεδία. Παρατηρούμε ότι η συγκεκριμένη εξάρτηση θυμίζει αρκετά αυτήν που συναντήσαμε στα οξείδια του χαλκού. Το σήμα παρουσιάζει μία κορυφή σε θερμοκρασίες μεταξύ 3-5K, που μετατοπίζεται αργά με την αύξηση του μαγνητικού πεδίου. b. Αντίσταση συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου. Ανάμεσα στα δύο κρίσιμα πεδία 35T και 40T, παρουσιάζονται διαφορετικές συμπεριφορές οι οποίες αναδεικνύουν το σχηματισμό νέων καταστάσεων σε αυτές τις περιοχές. Κάτω από το πρώτο κρίσιμο πεδίο, παρουσιάζεται μία ανωμαλία (kink) η οποία μετατοπίζεται σε χαμηλότερες τιμές του πεδίου καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται. c. Σε αυτό το διάγραμμα παρουσιάζεται ο συντελεστής Nernst, ο οποίος αντίθετα με το σήμα Nernst, μειώνεται με την αύξηση του μαγνητικού πεδίου. d. Γωνία Hall συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου. Το σύστημα ξεκινά από μία μεγάλη τιμή για αυτόν τον συντελεστή, η οποία μειώνεται στη γειτονιά των κρίσιμων πεδίων. Μεταξύ των κρίσιμων μαγνητικών πεδίων παρουσιάζονται και πάλι στοιχεία ταυτοποίησης νέων φάσεων. Για αύξηση των θερμοκρασιών παρατηρούμε ελάττωση της γωνίας Hall. e. Εξάρτηση του σήματος Nernst από το μαγνητικό πεδίο. Παρατηρούμε ότι το σήμα Nernst ξεκινά από μία έντονα γραμμική εξάρτηση, που μετατρέπεται σε μη-γραμμική καθώς προχωρούμε στην κρίσιμη περιοχή. Έπειτα, μειώνεται δραματικά καθώς φτάνουμε στο δεύτερο κρίσιμο πεδίο. Τα διαγράμματα πάρθηκαν από τα άρθρα R. Bel *et al*, Phys. Rev. B **70**, 220501(R) (2004), J. Levallois *et al*, EPL **85**, 27003 (2009).

αγωγιμότητας μεταξύ 35-40T. Παρατηρούμε επίσης μία ανωμαλία (kink) που χαρακτηρίζει την ‘κρυμμένη κατάσταση’ και μεταφέρεται σε χαμηλότερα μαγνητικά πεδία καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία. Στο Σχ.1.13(e), παρουσιάζουμε την εξάρτηση του σήματος Nernst από το μαγνητικό πεδίο. Βλέπουμε ότι για χαμηλές θερμοκρασίες το σήμα Nernst έχει μία έντονη γραμμική εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο, η οποία μετατρέπεται σε μία μη-γραμμική καθώς προσεγγίζουμε το πρώτο κρίσιμο μαγνητικό πεδίο. Στη συνέχεια το σήμα Nernst μειώνεται απότομα και αλλάζει πρόσημο, λαμβάνοντας πλέον αρκετά μικρότερες τιμές. Σε υψηλότερες θερμοκρασίες βλέπουμε ότι το σήμα έχει παρόμοια συμπεριφορά αλλά είναι μειωμένο και σβήνει σε μικρότερα μαγνητικά πεδία. Αυτό συνδέεται άρρηκτα με την επίδραση της θερμοκρασίας στην τιμή της παραμέτρου τάξης που χαρακτηρίζει τη συγκεκριμένη κατάσταση.

1.5 Τοπολογικό σήμα Nernst στους μη-συμβατικούς υπεραγωγούς

Στις προηγούμενες παραγράφους, παρουσιάσαμε κάποια βασικά χαρακτηριστικά δύο αρκετά διαφορετικών κατηγοριών μη-συμβατικών υπεραγωγών, που παρ’ολ’ αυτά καταφέρνουν και παρουσιάζουν κάποια ποιοτική συστηματικότητα φαινομένων. Όπως τονίσαμε παραπάνω, ένα σημαντικό παράδειγμα τέτοιας συμπεριφοράς, είναι το Γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst που παρατηρείται πέρα από τα υλικά που ήδη αναφέραμε [148, 149, 150, 169, 170] και σε άλλες κατηγορίες υλικών, όπως είναι ο υπεραγωγός βαρέων φερμιονίων CeCoIn_5 [172, 173, 174] καθώς και η πιο πρόσφατη γενιά υπεραγωγών, τα οξυπνικτίδια του σιδήρου [175]. Σε όλες αυτές τις περιπτώσεις, η απόκριση Nernst είναι της τάξης των μερικών $\mu\text{V}/\text{K}$, ενώ παράλληλα παρουσιάζει έντονη μη γραμμική εξάρτηση με τη θερμοκρασία η οποία χαρακτηρίζεται από ένα μέγιστο. Πολλές φορές η παράξενη θερμοκρασιακή εξάρτηση συνοδεύεται και από μη γραμμική εξάρτηση από το εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο. Στα περισσότερα από αυτά τα υλικά τα αίτια που οδηγούν σε αυτά τα εντυπωσιακά θερμοηλεκτρικά φαινόμενα δεν έχουν διαλευκανθεί, ιδιαίτερα λόγω της δυσκολίας να εξηγηθεί ταυτόχρονα η υψηλή τιμή, το πρόσημο και τέλος η θερμοκρασιακή εξάρτηση του σήματος Nernst.

Όπως προαναφέραμε έως τώρα, το εν λόγω έντονο φαινόμενο Nernst έχει αποδοθεί είτε σε μονοσωματιδιακές διεγέρσεις [160, 161, 162, 163, 164, 166] είτε σε υπεραγωγίμες δίνες (superconducting vortices) [151, 152, 153, 154, 155]. Εάν θεωρήσουμε ως αίτιο τις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις, τότε είναι πολύ δύσκολο να προκύψει ισχυρό φαινόμενο Nernst λόγω της ανίρεσης Sondheimer. Παρ’ολ’ αυτά, αυτό δεν ισχύει σε μέταλλα με πολλές ενεργειακές ζώνες [166, 171], χωρίς όμως αυτό να σημαίνει ότι μπορούμε να εκτιμήσουμε την τιμή του θερμοηλεκτρικού σήματος σε αυτήν την περίπτωση. Επιπλέον, είναι δύσκολο να γίνει αποδεκτό ότι το αίτιο ενός φαινομένου που απαντάται σε έναν αριθμό τόσο διαφορετικών μεταξύ τους υλικών, μπορεί να οφείλεται στην ενεργειακή δομή αυτών των υλικών. Κι αυτό γιατί η ενεργειακή δομή αυτών των υλικών δεν παρουσιάζει κάποια προφανής τουλάχιστον συστηματικότητα. Από την άλλη, το σήμα Nernst που δημιουργείται από υπεραγωγίμες δίνες μπορεί να λάβει μεγάλες τιμές και να είναι μη μηδενικό ακόμα και σε περιοχές όπου η υπεραγωγιμότητα είναι μηδενική [157, 158, 159]. Παρ’ολ’ αυτά το σήμα Nernst που προέρχεται από τις υπεραγωγίμες δίνες έχει έναν περιορισμό. Το πρόσημό του είναι πάντοτε θετικό (με τη σύμβαση που χρησιμοποιούμε) και κατά συνέπεια μειώνεται ο αριθμός των υλικών στον οποίο μπορεί η συγκεκριμένη θεωρία να βρει εφαρμογή.

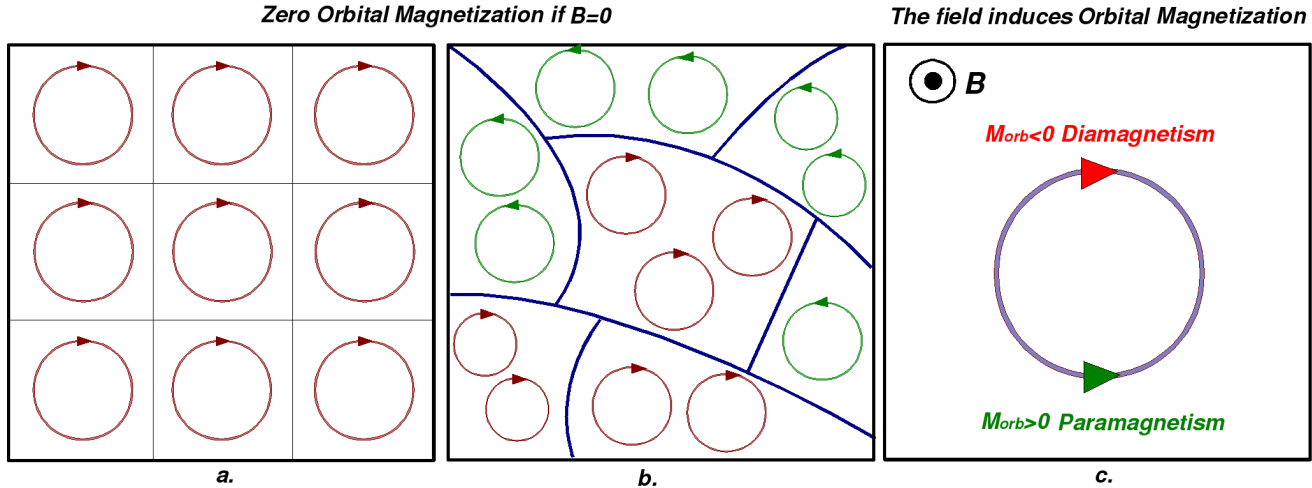
Η πεμπτουσία όμως της Φυσικής της Συμπυκνωμένης Ύλης, είναι η προσπάθεια εύρεσης ενός κομψού μηχανισμού που να περιγράφει την αναδυόμενη κοινή συμπεριφορά ανάμεσα σε ριζικά διαφορετικές χβαντικές καταστάσεις της ύλης. Παρά τις διαφορές τους, υπάρχει ένα κοινό σημείο που συνδέει τα προαναφερθέντα υλικά που παρουσιάζουν το μυστηριώδες φαινόμενο Nernst. Αυτό είναι ο μη-συμβατικός χαρκτήρας της υπεραγωγίμης κατάστασης και κατά συνέπεια των ηλεκτρονικών αλληλεπιδράσεων. Αυτό

συνεπάγεται ότι είναι δυνατό και ευνοήσιμο να αναπτυχθούν παράλληλα και μη-συμβατικές καταστάσεις στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί το μη-συμβατικό κύμα πυκνότητας φορτίου $id_{x^2-y^2}$ (τροχιακός σιδηρομαγνήτης) [176, 177, 178, 179, 180, 181, 182] κυματανύσματος $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, που θεωρείται ως μία υποψήφια κατάσταση για την κατανομή της περιοχής του ψευδοχάσματος στα νοθευμένα με οπές χαλκοξειδία [165]. Η συγκεκριμένη κατάσταση παραβιάζει την συμμετρία αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} , τοπικά και όχι σε μακροσκοπικό επίπεδο. Οι βρόχοι ρεύματος που δημιουργούνται σε μικροσκοπικό επίπεδο, αλληλοεξουδετερώνονται στο σύνολο του όγκου του υλικού διότι είναι πλήρως συμμετρικοί Σχ.1.14a.. Ανάλογες καταστάσεις του τροχιακού αντισιδηρομαγνήτη $id_{x^2-y^2}$, μαγνητικές ή μη, έχουν προταθεί και για άλλα υλικά όπως το CeCoIn_5 [183], το URu_2Si_2 [139, 140, 146], ενώ και η αντισιδηρομαγνητική κατάσταση στα οξυπνικτίδια του σιδήρου [184] είναι μη-συμβατική. Παρ'όλ' αυτά, μη-συμβατικές καταστάσεις όπως αυτή του τροχιακού αντισιδηρομαγνήτη, παρόλο που είναι δυνατόν να εκδηλώνουν ένα ισχυρό σήμα Nernst κάτω από ειδικές προϋποθέσεις, δεν έχει δειχθεί ότι κατά κανόνα μπορούν να ερμηνεύσουν το ιδιαίτερο θερμοκρασιακό προφίλ που παρουσιάζει η ομάδα όλων αυτών των υλικών.

Εάν ο μη-συμβατικός χαρακτήρας των ηλεκτρονικών αλληλεπιδράσεων, είναι το σημαντικό στοιχείο που τελικά κρύβεται πίσω από τα εξωτικά θερμοηλεκτρικά φαινόμενα που έχουμε παρουσιάσει, αυτό υποδηλώνει ότι η εικόνα των τροχιακών καταστάσεων του τύπου $d_{x^2-y^2}$ δεν είναι ολοκληρωμένη. Πράγματι όπως θα αναδείξουμε σε αυτήν τη διατριβή, υπάρχει μία συνιστώσα που δεν λαμβάνεται υπόψη. **Η δυνατότητα μετάβασης σε μη-τετριμμένες τοπολογικά καταστάσεις με την εφαρμογή του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.** Υπάρχουν δύο δυνατές κατηγορίες καταστάσεων που μπορούν να σχηματιστούν με την εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου. Οι Χειρικές (chiral) και οι Ελικοειδείς (helical). Και οι δύο εντάσσονται, όπως θα εξηγήσουμε σε επόμενα κεφάλαια, στις **Τοπολογικές καταστάσεις**. Ο πρώτος τύπος καταστάσεων παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} σε μακροσκοπικό επίπεδο ενώ ο δεύτερος όχι. Σύμφωνα με την θεωρία που παραθέσαμε για τη θερμοηλεκτρική απόκριση, αναμένουμε ότι οι Χειρικές καταστάσεις θα έχουν επιπρόσθετες συνεισφορές στους ταυστές ηλεκτρικής, θερμικής και θερμοηλεκτρικής αγωγιμότητας. Κατά συνέπεια είναι αυτές που θα μπορούσαν να οδηγήσουν σε νέα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα μεταφοράς.

Όπως παρουσιάζουμε και αναλύουμε στο Κεφ.6, όταν ήδη προϋπάρχει μία κατάσταση κύματος πυκνότητας φορτίου ή σπιν τύπου $id_{x^2-y^2}$, επάγεται στο υλικό και η κατάσταση κύματος πυκνότητας φορτίου ή σπιν d_{xy} της ίδιας περιодικότητας [185, 186]. Μάλιστα, αυτές οι καταστάσεις μπορούν ήδη να προϋπάρχουν στο υλικό αλλά να μην είναι ανιχνεύσιμες. Στην περίπτωση των Χειρικών καταστάσεων, είναι δυνατόν να υπάρχουν μακροσκοπικές περιοχές διαφορετικής χειρικότητας (chirality domains) Σχ.1.14(a.), αντίστοιχα με την περίπτωση ενός σιδηρομαγνήτη. Η εφαρμογή του μαγνητικού πεδίου πολώνει και κατευθύνει αυτές τις περιοχές, οδηγώντας σε μία μακροσκοπική χειρική κατάσταση που μπορεί τώρα να έχει αντίκτυπο στις ιδιότητες του υλικού. Λόγω του ότι η χειρικότητα ισοδυναμεί με μία εγγενούς τροχιακής φύσης μαγνητική ροπή, μπορεί να οδηγήσει σε πεπερασμένη τροχιακή συνεισφορά στη μαγνήτιση. Με αυτόν τον τρόπο, οι Χειρικές καταστάσεις, αναλόγως την συνθήκες είναι δυνατόν να επιδείξουν παραμαγνητική ή διαμαγνητική συμπεριφορά.

Πέρα από την εγγενή μαγνητική ροπή, η παρουσία μίας Χειρικής κατάστασης έχει σημαντική επίδραση στη θερμοηλεκτρική απόκριση. **Όπως παρουσιάζουμε για πρώτη φορά στα καινοτόμα αποτελέσματα του Κεφ.9, όταν οι Χειρικές καταστάσεις βρίσκονται κοντά στο όριο ενός μονωτή, μπορούν να εκδηλώσουν ένα γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst, με θερμοκρασιακό προφίλ που συνάδει με το πειραματικά παρατηρούμενο σε αυτά τα υλικά [187, 188].** Πέρα από την απαίτηση του ισχυρού μονωτικού χαρακτήρα, δεν υπάρχει κάποιος άλλος περιορισμός για να λάβουμε αυτήν την έντονη θερμοηλεκτρική απόκριση. Επιπλέον, ο τοπολογικός χαρακτήρας αυτών των καταστάσεων, εγγυάται της γενικότητας των αποτελεσμάτων μας και για αυτό



Σχήμα 1.14: a. Συμμετρικοί βρόχοι ρεύματος ηλεκτρικού φορτίου που γεννώνται από ένα μη-συμβατικό κύμα πυκνότητας φορτίου τύπου $id_{x^2-y^2}$. b. Περιοχές διαφορετικής χειρικότητας που οδηγούν σε μία λανθάνουσα χειρική κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$. c. Στις προηγούμενες δύο περιπτώσεις η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου παραβιάζεται μόνο τοπικά. Αντίθετα, η παρουσία ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου οδηγεί σε πεπερασμένη μακροσκοπική χειρικότητα που μπορεί να συνοδεύεται από παραμαγνητική ή διαμαγνητική μαγνητική απόκριση. Το γράφημα προέρχεται από το άρθρο P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **104**, 106404 (2010).

το λόγο θεωρούμε ότι μπορούν να έχουν εφαρμογή σε ένα πλήθος υλικών παρά τις όποιες διαφορές που αυτά μπορεί να παρουσιάζουν. Επιπλέον, εάν πράγματι σε ένα υλικό υπάρχει μία μη-συμβατική ή μία μη πολωμένη χειρική κατάσταση στη μη-υπεραγώγιμη φάση του, τότε σε ένα πείραμα Nernst η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου αναγκαστικά θα οδηγήσει στο σχηματισμό μίας γνήσιας χειρικής κατάστασης η οποία θα επηρεάσει τη θερμοηλεκτρική απόκριση, οδηγώντας στο γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst. Φυσικά, δεν υποστηρίζουμε ότι μόνο αυτή η συνεισφορά μπορεί να υπάρχει σε κάποια από αυτά τα υλικά. Για παράδειγμα, στους υπεραγωγούς των οξειδίων του χαλκού δεν αποκλείουμε να υπάρχει ταυτόχρονη συνεισφορά τόσο από υπεραγώγιμες δίνες, όσο και από το τοπολογικό σήμα Nernst το οποίο συζητούμε. Παρ'όλ' αυτά θεωρούμε, ότι η Τοπολογική απόκριση Nernst που προτείνουμε στα πλαίσια αυτής της διατριβής είναι η κυρίαρχη στις μη-υπεραγώγιμες φάσεις των εν λόγω μη-συμβατικών υπεραγωγών.

Πρέπει να σημειώσουμε ότι οι Χειρικές καταστάσεις, χαρακτηρίζονται και από μία πληθώρα άλλων φαινομένων πέρα από τη γιγαντιαία θερμοηλεκτρική απόκριση Nernst, όπως είναι το Τοπολογικό φαινόμενο Meissner [189], το Αυθόρμητο Κβαντικό φαινόμενο Hall [190], την τοπολογική μεταφορά σπιν [191] και το Πολωμένο φαινόμενο Kerr [192, 193]. Μάλιστα, τα περισσότερα από αυτά τα φαινόμενα που αφορούν στις συγκεκριμένες καταστάσεις των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, αναδείχθηκαν μέσα από τα αποτελέσματα αυτής της διατριβής. Ειδικότερα, το Τοπολογικό φαινόμενο Meissner αποτελεί μία πηγή τέλει διαμαγνητισμού δίχως να παραβιάζεται αυθόρμητα η συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ του ηλεκτρομαγνητισμού, όπως συμβαίνει σε έναν υπεραγωγό. Αυτό το φαινόμενο μας επιτρέπει να συσχετίσουμε τις Χειρικές καταστάσεις με φαινόμενα ισχυρού διαμαγνητισμού σε μη-υπεραγώγιμες φάσεις όπως συμβαίνει με την περίπτωση του ψευδοχάσματος στην περίπτωση των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας. Πρέπει να αναφέρουμε ότι οι Χειρικές καταστάσεις που προτείνουμε και πρόκειται να αναλύσουμε, σχετίζονται όσον αφορά το τοπολογικό τους περιεχόμενο, με τις χειρικές καταστάσεις (chiral spin states) [194] που είχαν συζητηθεί παλαιότερα στα πλαίσια του μοντέλου RVB [195] και των θεωριών βαθμίδας

[68] που είχαν προταθεί για την περιοχή του ψευδοχάσματος. Επιπλέον, Χειρικές καταστάσεις παρόμοιες με αυτές που προτείνουμε έχουν συζητηθεί πολύ πρόσφατα στο πεδίο των Τοπολογικών Μονωτών [196, 197, 198, 199, 200]. Σε αυτήν τη νέα κατηγορία υλικών, η τοπολογική δομή προκύπτει από ιδιαιτερότητες των ενεργειακών ζωνών λόγω της παρουσίας σύζευξης σπιν-τροχιάς (spin-orbit coupling) και όχι από ισχυρές αλληλεπιδράσεις και αντίστοιχες μεταβάσεις φάσης στις οποίες επικεντρωνόμαστε στην παρούσα διατριβή. Παρ'ολ' αυτά τα συμπεράσματά μας ισχύουν και για τα υλικά αυτά όταν η τοπολογική δομή τους συμπίπτει με αυτήν των καταστάσεων που θα εξετάσουμε στην προκειμένη περίπτωση.

Πέρα από τις χειρικές τοπολογικές καταστάσεις θα εξετάσουμε και τις ελικοειδείς. Αυτές έχουν διαφορετικό τοπολογικό περιεχόμενο, γι' αυτό οδηγούν σε διαφορετικά φαινόμενα όπως το Αυθόρμητο Κβαντικό φαινόμενο Hall του Σπιν και την Αυθόρμητη θερμομαγνητική απόκριση, συμπεριλαμβανοντας το φαινόμενο Nernst του σπιν. Και σε αυτήν την περίπτωση, τα αποτελέσματά μας ισχύουν και για τους Τοπολογικούς Μονωτές λόγω σύζευξης σπιν-τροχιάς, για τους οποίους το Αυθόρμητο φαινόμενο Hall του σπιν έχει παρατηρηθεί και πειραματικά [199].

Στα επόμενα κεφάλαια παρουσιάζουμε διάφορες ιδιότητες των συγκεκριμένων τοπολογικών καταστάσεων σε διδιάστατα συστήματα, οι οποίες θα μας βοηθήσουν να αναδείξουμε και να υποστηρίξουμε την θεωρητική μας πρόταση. Στο Κεφ. 2, παρουσιάζουμε τη γενική Θεωρία Μέσου Πεδίου για τα μη-συμβατικά κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν στα πλαίσια ενός εκτεταμένου μοντέλο τύπου Hubbard. Επιπλέον, μελετούμε στοιχεία του διαγράμματος φάσης των τοπολογικών κυμάτων πυκνότητας και αναλύουμε διάφορα θερμοδυναμικά χαρακτηριστικά. Στο Κεφ. 3, επικεντρωνόμαστε στα Τοπολογικά κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν. Παρουσιάζουμε τα βασικά τοπολογικά χαρακτηριστικά και μελετούμε την συμπεριφορά στις συνοριακές επιφάνειες αυτών των υλικών. Βρίσκουμε ότι στο σύνορο αυτών των υλικών υπάρχουν εντοπισμένες φερμιονικές χειρικές (chiral edge modes) ή ελικοειδείς καταστάσεις (helical edge modes). Στο Κεφ. 4, εξάγουμε τις ενεργές τοπολογικές θεωρίες πεδίου που διέπουν την μαγνητοηλεκτρική απόκριση των υλικών αυτών. Σύμφωνα με τα αποτελέσματά μας, στην περίπτωση των χειρικών καταστάσεων έχουμε τοπολογικές θεωρίες Chern-Simons, ενώ για τις ελικοειδείς καταστάσεις προκύπτουν όροι τύπου BF. Στο Κεφ. 5, χρησιμοποιούμε τις μεθόδους της αδιαβατικής μεταφοράς φορτίου και σπιν αναδεικνύοντας μία διαφορετική πλευρά της τοπολογικής δομής αυτών των καταστάσεων μέσω της εισαγωγής των μαγνητικών μονόπολων και πεδίων Berry. Στο Κεφ. 6 υπολογίζουμε την εγγενή τροχιακή μαγνήτιση των τοπολογικών καταστάσεων και μέσω υπολογιστικών μεθόδων παρουσιάζουμε πως προκύπτει η επαγωγή τοπολογικών καταστάσεων με την εφαρμογή ενός στατικού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Στο Κεφ. 7 συμπληρώνουμε τη θεωρία των φαινομένων μεταφοράς σε αυτές τις τοπολογικές καταστάσεις, μέσω του υπολογισμού του μαγνητοθερμοηλεκτρικού τανυστή των Αυθόρμητων φαινομένων Hall. Τέλος, στο Κεφ. 8 επικεντρωνόμαστε στην πρόταση θεωρητικών μοντέλων βασιζόμενων στις χειρικές καταστάσεις για την ερμηνεία του γιγαντιαίου φαινομένου Nernst στους μη-συμβατικούς υπεραγωγούς των χαλκοξειδίων και του URu₂Si₂, προτείνοντας περαιτέρω πειράματα για την επιβεβαίωση ή όχι των αποτελεσμάτων μας.

2 Μη Συμβατικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

Στα πλαίσια της Θεωρίας Μέσου Πεδίου, θα μελετήσουμε κάποια βασικά θερμοδυναμικά χαρακτηριστικά των μεταβάσεων στις καταστάσεις των μη Συμβατικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν [178, 180]. Βασιζόμενοι σε ένα εκτεταμένο μοντέλο τύπου Hubbard, θα παρουσιάσουμε τις γενικότερες εξισώσεις αυτοσυνέπειας και τα θα αναλύσουμε το διάγραμμα φάσης που διέπει τον σχηματισμό αυτών των καταστάσεων τάξης.

2.1 Μικροσκοπικό μοντέλο

Ως αφετηρία για τη μελέτη των μη Συμβατικών Κυμάτων Πυκνότητας, θα θεωρήσουμε ένα εκτεταμένο μοντέλο τύπου Hubbard. Το συγκεκριμένο μοντέλο μπορεί να περιγράψει μη συμβατικούς υπεραγωγούς σε ένα διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα, όπως για παράδειγμα οι μη συμβατικοί υπεραγωγοί τύπου $d_{x^2-y^2}$ στα οξείδια του χαλκού. Σε Χαμιλτονιανό επίπεδο, το εν λόγω μοντέλο περιγράφεται ως ακολούθως

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\mu \sum_{i,\alpha} c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} - t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha} c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha} - \mu_B \sum_i \sum_{\alpha,\beta} c_{i,\alpha}^\dagger \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{i,\beta} \\ & + \sum_{i \neq j} \left(V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j \right) + \sum_{i \neq j} \mathcal{V}_{ij} c_{i,\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{j,\beta} c_{i,\gamma}^\dagger \sigma_0^{\gamma\delta} c_{j,\delta} + \sum_{i \neq j} \mathcal{J}_{ij} c_{i,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{j,\beta} \cdot c_{i,\gamma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\gamma\delta} c_{j,\delta}, \quad (2.1) \end{aligned}$$

όπου οι τελεστές $c_{i,\alpha}^\dagger$ και $c_{i,\alpha}$ δημιουργούν και καταστρέφουν ένα ηλεκτρόνιο στην πλεγματική θέση \mathbf{R}_i με προβολή σπιν $\alpha = \uparrow, \downarrow$, ενώ με $\boldsymbol{\sigma}$ συμβολίζουμε τους πίνακες Pauli του αντιστοιχούν στο ηλεκτρονικό σπιν. Με σ_0 παριστάνουμε τον πίνακα μονάδα στον χώρο του σπιν. Παρατηρούμε ότι στην πρώτη σειρά εμφανίζονται όροι ενός ηλεκτρονίου ενώ στις άλλες δύο ενσωματώνονται οι αλληλεπιδράσεις. Με μ συμβολίζουμε το χημικό δυναμικό ενώ με $t > 0$ την ενέργεια που κερδίζει το ηλεκτρόνιο μεταπηδώντας από ένα πλεγματικό σημείο i σε ένα άλλο j . Με $\langle i, j \rangle$ εννοούμε ότι λαμβάνουμε υπόψη μόνο τους πλησιέστερους γείτονες. Στη συνέχεια συμπεριλαμβάνουμε τη μαγνητική αλληλεπίδραση τύπου Zeeman, όπου με μ_B συμβολίζουμε την μαγνητόνη του Bohr και με \mathbf{B} το μαγνητικό πεδίο.

Όσον αφορά τις αλληλεπιδράσεις, θα περιοριστούμε σε αλληλεπιδράσεις βραχείας εμβέλειας που συσχετίζουν πάντοτε διαφορετικές πλεγματικές θέσεις ($i \neq j$) και συγκεκριμένα περιορίζονται στους πρώτους $\langle i, j \rangle$ και δεύτερους $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ κοντινότερους γείτονες. Οι τελεστές $\hat{n}_i = \sum_{\alpha} c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha}$ και $\hat{\mathbf{S}}_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} c_{i,\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{i,\beta}$ αντιστοιχούν στους τελεστές φορτίου και σπιν της i -οστής πλεγματικής θέσης. Η αλληλεπίδραση στην οποία εμπλέκεται το V_{ij} είναι ηλεκτροστατικής φύσης και όταν αυτό είναι θετικό αντιστοιχεί σε μικρής εμβέλειας αλληλεπίδραση Coulomb, ενώ στην αντίθετη περίπτωση έχει ελκτικό χαρακτήρα. Η συνηθισμένη περίπτωση βέβαια, είναι το δυναμικό αλληλεπίδρασης να είναι θετικό αφού στις πλεγματικές θέσεις έχουμε ηλεκτρόνια τα οποία απωθούνται έντονα. Ομοίως, αναλόγως το πρόσημο του δυναμικού αλληλεπίδρασης J_{ij} , οδηγούμαστε σε αντισιδηρομαγνητικές ($J_{ij} > 0$) ή σιδηρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις ($J_{ij} < 0$). Ο ρόλος των δύο τελευταίων αλληλεπιδράσεων, γίνεται φανερός εάν ξαναγράψουμε τον όρο $c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} c_{i,\gamma}^\dagger c_{j,\delta}$ ως $(c_{i,\alpha} c_{i,\gamma})^\dagger c_{j,\beta} c_{j,\delta}$. Ο τελεστής $(c_{i,\alpha} c_{i,\gamma})^\dagger$ δημιουργεί ένα ζεύγος

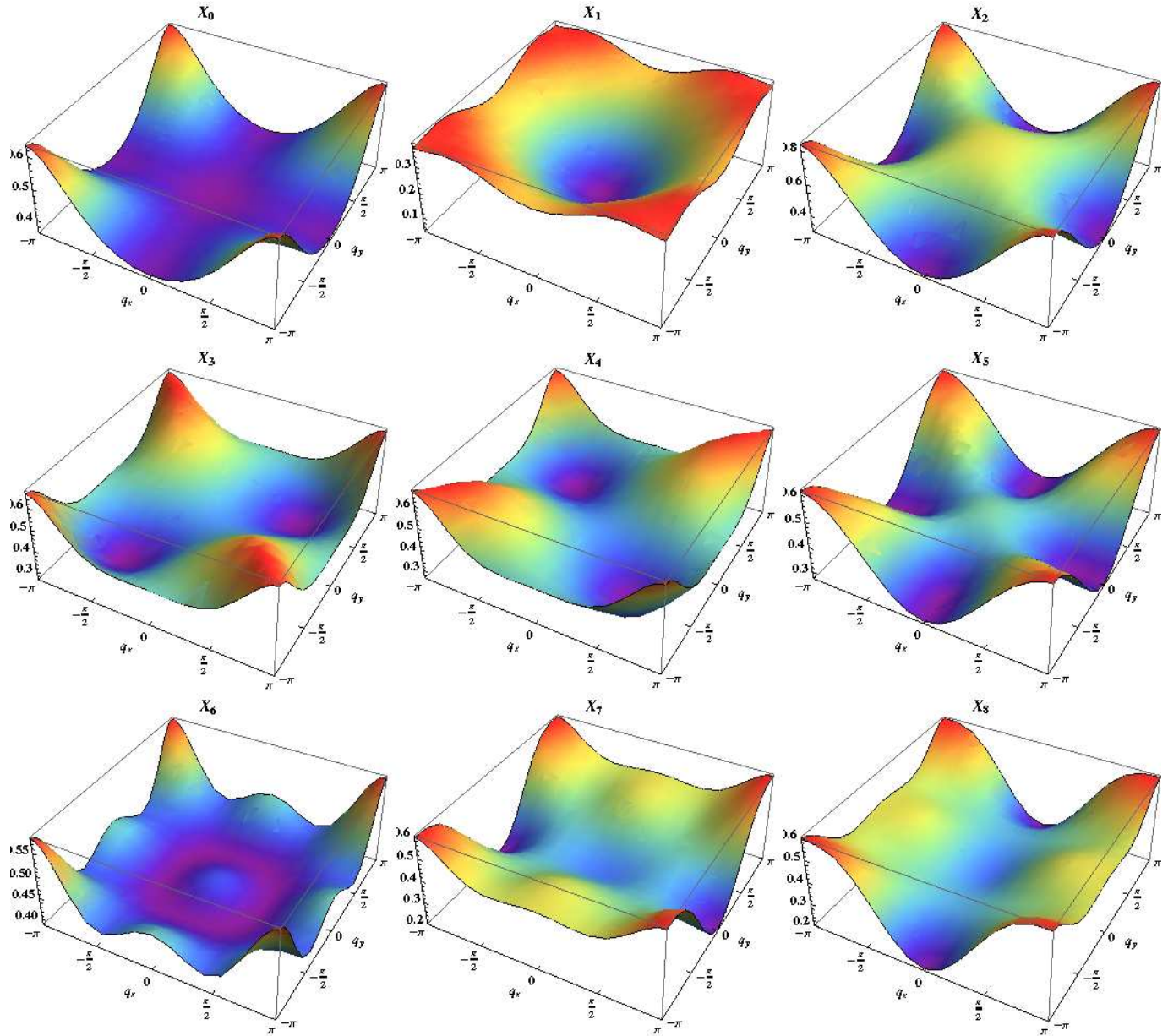
Cooper στην πλεγματοική θέση i με δείκτες σπιν α και γ , ενώ ο τελεστής $c_{j,\beta}c_{j,\delta}$ καταστρέφει ένα ζεύγος Cooper στην πλεγματοική θέση $j \neq i$ με δείκτες β και δ . Κατά συνέπεια, αυτοί οι όροι αλληλεπίδρασης περιγράφουν διαδικασίες που περιλαμβάνουν την μεταπήδηση ζευγών Cooper μεταξύ διαφορετικών πλεγματοικών θέσεων. Κατάλληλος συνδυασμός των δυναμικών \mathcal{V}_{ij} και \mathcal{J}_{ij} , οδηγεί σε μαγνητικές ή μη καταστάσεις.

2.2 Συναρμογή και γενικευμένες επιδεκτικότητες

Για την ανάπτυξη ενός συνόλου κβαντικών καταστάσεων τάξης σε ένα σύστημα που διέπεται από ισχυρές αλληλεπιδράσεις όπως οι παραπάνω, τρεις παράγοντες παίζουν καθοριστικό ρόλο. Ο πρώτος, σχετίζεται με τα χαρακτηριστικά του μη-αλληλεπιδρώντος συστήματος και την εγγενή τάση του να ευνοήσει το σχηματισμό συγκεκριμένων καταστάσεων τάξης ανάμεσα στις δυνατές. Ο δεύτερος αφορά τις μικροσκοπικές αλληλεπιδράσεις που εμφανίζονται μεταξύ των σωματιδίων του συστήματος. Οι αλληλεπιδράσεις καθορίζουν ποιές καταστάσεις είναι δυνατόν να εμφανιστούν στο σύστημα, ενώ φυσικά προσδιορίζουν το ενεργό δυναμικό της κάθε δυνατής κβαντικής κατάστασης. Ο τρίτος παράγοντας σχετίζεται με τη συμμετρία. Ειδικότερα, σε πολλές περιπτώσεις είναι δυνατόν να επάγονται αναπόφευκτα καταστάσεις σε ένα σύστημα λόγω της συνύπαρξης ενός αριθμού παραμέτρων τάξης [201]. Στη συγκεκριμένη παράγραφο θα μελετήσουμε τον πρώτο παράγοντα, την επιδεκτικότητα του ελεύθερου συστήματος να σχηματίσει καταστάσεις στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής.

Οι όροι της Χαμιλτονιανής που περιγράφουν το μη-αλληλεπιδρών σύστημα, απουσία μαγνητικού πεδίου, είναι ο όρος του χημικού δυναμικού καθώς και ο κινητικός όρος $-\mu \sum_{i,\alpha} c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} - t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha} c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha}$. Μέσω μετασχηματισμού Fourier μπορούμε να δούμε ότι οι δύο όροι μεταφράζονται στην ακόλουθη έκφραση $\sum_{\mathbf{k},\sigma} [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}$, όπου θέσαμε $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$. Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση μηδενικού χημικού δυναμικού, $\mu = 0$, η ενεργειακή διασπορά καθορίζεται μονάχα από τον όρο $\varepsilon(\mathbf{k})$, ο οποίος ικανοποιεί την σχέση συναρμογής (nesting) $\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon(\mathbf{k})$, όπου $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Σύμφωνα με την ιδιότητα αυτή, για κάθε σημείο του αντιστρόφου χώρου που χαρακτηρίζεται με ενέργεια $\varepsilon(\mathbf{k})$ υπάρχει ακριβώς ένα άλλο με ενέργεια $-\varepsilon(\mathbf{k})$. Έχουμε λοιπόν ζεύγη ηλεκτρονίων και οπών για όλα τα σημεία του αντιστρόφου χώρου, χωρίς να εξαιρούνται βέβαια και τα σημεία της επιφάνειας Fermi όπου ικανοποιείται επιπρόσθετα $\varepsilon(\mathbf{k}) = 0$. Η επιφάνεια Fermi είναι ο γεωμετρικός τόπος που περιγράφεται από την εξίσωση $|k_x \pm k_y| = \pi$, δηλαδή ένα τετράγωνο. Ανά δύο, οι πλευρές του τετραγώνου συνδέονται με τα διανύσματα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ και $\mathbf{Q}_\perp = (\pi, -\pi)$. Τα δύο αυτά διανύσματα συναρμογής είναι ισοδύναμα μεταξύ τους γιατί διαφέρουν κατά ένα διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος. Κατά συνέπεια, η σχέση συναρμογής εκφράζει ότι τα σημεία της επιφάνειας Fermi συνδέονται με ένα κυματόνισμα \mathbf{Q} . Εάν λοιπόν υπάρχει μία αλληλεπίδραση που να οδηγεί σε σχεδάσεις με ανταλλαγή κυματόνισματος ίσο με το κυματόνισμα συναρμογής, τότε το σύστημα είναι δυνατόν να σχηματίσει μία ή περισσότερες κβαντικές καταστάσεις τάξεως με αυτό το κυματόνισμα, οδηγώντας ταυτόχρονα σε ενεργειακό χάσμα σε ένα πλήθος εάν όχι σε όλα τα σημεία της επιφάνειας Fermi.

Το σημαντικό στοιχείο είναι ότι ο σχηματισμός καταστάσεων διαμορφωμένες σε αυτό το κυματόνισμα, είναι η πλέον ευνοούμενη κατάσταση του συστήματος. Για να το δούμε αυτό, μπορούμε να υπολογίσουμε την επιδεκτικότητα να σχηματιστεί μία μαγνητική ή μη κατάσταση συγκεκριμένης κρυσταλλικής αναπαράστασης $f_s(\mathbf{k})$ για διάφορα κυματόνισμα. Οι κρυσταλλικές αναπαραστάσεις που επιβάλλονται από το μικροσκοπικό μας μοντέλο είναι οι ακόλουθες $f_0(\mathbf{k}) = 1$, $f_1(\mathbf{k}) = \cos k_x + \cos k_y$, $f_2(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y$, $f_3(\mathbf{k}) = \sin k_x + \sin k_y$, $f_4(\mathbf{k}) = \sin k_x - \sin k_y$, $f_5(\mathbf{k}) = 2 \cos k_x \cos k_y$, $f_6(\mathbf{k}) = 2 \sin k_x \sin k_y$, $f_7(\mathbf{k}) = 2 \sin k_x \cos k_y$ και $f_8(\mathbf{k}) = 2 \cos k_x \sin k_y$ [202]. Η επιδεκτικότητα για να σχηματιστεί η καθεμία από αυτές τις καταστάσεις στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής, μαγνητική ή μη, δίνεται



Σχήμα 2.1: Επιδεικτικότητες $X_s(\mathbf{q})$ για το σχηματισμό καταστάσεων κυματανύσματος \mathbf{q} και μη-αναγωγίσιμης αναπαράστασης $f_s(\mathbf{k})$. Παρατηρούμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις ευνοούνται οι καταστάσεις με $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Επιπλέον παρατηρούμε ότι η αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$ είναι η κυρίαρχη.

από τη σχέση

$$\mathcal{X}_s(\mathbf{q}) = -\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} f_s^2(\mathbf{k}) \frac{n_F[\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})] - n_F[\varepsilon(\mathbf{k})]}{\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k})}, \quad (2.2)$$

όπου εισαγάγαμε την κατανομή Fermi-Dirac n_F . Οι συνήθεις επιδεικτικότητες φορτίου και σπιν, προκύπτουν για την αναπαράσταση $s = 0$. Οι υπόλοιπες καταστάσεις οδηγούν σε κατανομές φορτίου και σπιν υψηλότερων ροπών, και ο όρος $f_s^2(\mathbf{k})$ εισάγεται για αυτόν ακριβώς τον λόγο. Έτσι λοιπόν, ο όρος μη-συμβατικά κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν, είναι περισσότερο καταχρηστικός παρά ακριβής. Με αυτόν την ονομασία εννοούμε καταστάσεις με σπιν-0

και σπιν-1 αντίστοιχα. Παρουσία αλληλεπιδράσεων, η κρίσιμη θερμοκρασία για μετάβαση σε μία από αυτές τις καταστάσεις προσδιορίζεται από την εξίσωση αυτοσυνέπειας $1/V_s(\mathbf{q}) = \mathcal{X}_s(\mathbf{q})$, όπου κάναμε την παραδοχή ότι οι καταστάσεις τάξεως με διαφορετική μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση και κυματόνυμα είναι αποπλεγμένες και η κάθε μία από αυτές έχει το δικό της ενεργό δυναμικό $V_s(\mathbf{q})$. Εάν θέσουμε για ευκολία $t = 1, k_B T = 0.6, \mu = 0$, προκύπτουν τα γραφήματα για τις επιδεικτικότητες του Σχ.2.1. Παρατηρούμε ότι για όλες τις μη-αναγωγίσιμες αναπαράστασεις το κυρίαρχο κυματόνυμα είναι το $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Επιπλέον, η κυρίαρχη μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση είναι η $d_{x^2-y^2}$. Λόγω αυτής της τάξης του συστήματος θα περιοριστούμε σε επόμενες παραγράφους μόνο στη μελέτη μη-συμβατικών κυμάτων με κυματόνυμα \mathbf{Q} .

2.3 Θεωρία Μέσου Πεδίου

Το γεγονός ότι το εκτεταμένο μοντέλο Hubbard που εξετάζουμε, περιλαμβάνει αλληλεπιδράσεις 2 ηλεκτρονίων, καθιστά αδύνατη την ακριβή 'επίλυση' της Χαμιλτονιανής. Λόγω του ότι επιθυμούμε να μελετήσουμε καταστάσεις που περιγράφουν των σχηματισμό δέσμιων καταστάσεων ζευγών ηλεκτρονίων $\langle c^\dagger c \rangle$, η πιο εύκολη οδός είναι να χρησιμοποιήσουμε τη Θεωρία Μέσου Πεδίου. Με αυτόν τον τρόπο οι αλληλεπιδράσεις μετατρέπονται σε όρους ενός σωματιδίου, δίνοντας της δυνατότητα αναλυτικής ή εύκολης υπολογιστικής μελέτης των μεταβάσεων φάσης, που αυτές περιγράφουν. Επιπλέον, η συγκεκριμένη μέθοδος παρέχει άμεσα πληροφορίες σε σχέση με τις συμμετρίες που διατηρούνται ή υποβαθμίζονται κατά τις μεταβάσεις αυτές. Αυτό γίνεται απευθείας μέσω της μελέτης των παραμέτρων τάξης αυτών των καταστάσεων, οι οποίες εισαγάγονται κατά την 'απλοποίηση' των αλληλεπιδράσεων της παραπάνω Χαμιλτονιανής στα πλαίσια αυτής της μεθόδου.

Η εφαρμογή της Θεωρίας Μέσου Πεδίου βασίζεται στην ακόλουθη διαδικασία [203, 204]. Πρώτα από όλα, φέρνουμε τις αλληλεπιδράσεις στην ακόλουθη βολική μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{int} = & \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{\alpha,\beta} \left[\left(V_{ij} - \frac{J_{ij}}{4} \right) c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} c_{j,\beta}^\dagger c_{j,\beta} + \frac{J_{ij}}{2} c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\beta} c_{j,\beta}^\dagger c_{j,\alpha} \right] \\ & + \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \sum_{\alpha,\beta} \left[\left(\mathcal{V}_{ij} - \frac{\mathcal{J}_{ij}}{4} \right) c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\alpha} c_{i,\beta}^\dagger c_{j,\beta} + \frac{\mathcal{J}_{ij}}{2} c_{i,\alpha}^\dagger c_{j,\beta} c_{i,\beta}^\dagger c_{j,\alpha} \right], \end{aligned} \quad (2.3)$$

όπου κάναμε χρήση της σχέσης $\sigma^{\alpha\beta} \cdot \sigma^{\gamma\delta} = 2\sigma_0^{\alpha\delta} \sigma_0^{\beta\gamma} - \sigma_0^{\alpha\beta} \sigma_0^{\gamma\delta}$ και θεωρήσαμε ότι οι αλληλεπιδράσεις εκτείνονται έως τους δεύτερους γείτονες. Σε αυτό το σημείο θα επιλέξουμε μία πολύ συγκεκριμένη μορφή για τα δυναμικά. Ειδικότερα θα θεωρήσουμε ότι η ισχύς των αλληλεπιδράσεων εξαρτάται μόνο από την απόσταση των εμπλεκόμενων πλεγματικών θέσεων. Η συγκεκριμένη εύλογη παραδοχή, μας οδηγεί στα δυναμικά $V', J', \mathcal{V}', \mathcal{J}'$ για αλληλεπιδράσεις μεταξύ πρώτων γειτόνων και στα δυναμικά $V'', J'', \mathcal{V}'', \mathcal{J}''$ για αλληλεπιδράσεις μεταξύ δεύτερων γειτόνων. Μέσω του μετασχηματισμού Fourier $c_{i,\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{B.Z.}} c_{\mathbf{k},\alpha} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}$, όπου με $\mathcal{B.Z.}$ συμβολίζουμε την 1η ζώνη Brillouin και N τον αριθμό των θεμελιωδών κυψελίδων του κρυσταλλικού πλέγματος, καταλήγουμε στην ακόλουθη ισοδύναμη μορφή στον χώρο των κυματανυσμάτων \mathbf{k}

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{int} = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_{1,2,3,4}} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ \left[\left(V' - \frac{J'}{4} \right) 2f_1(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) + \left(V'' - \frac{J''}{4} \right) 2f_5(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) + \left(\mathcal{V}' - \frac{\mathcal{J}'}{4} \right) 2f_1(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \right. \right. \\ & + \left. \left(\mathcal{V}'' - \frac{\mathcal{J}''}{4} \right) 2f_5(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \right] c_{\mathbf{k}_1,\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2,\alpha} c_{\mathbf{k}_3,\beta}^\dagger c_{\mathbf{k}_4,\beta} + \left[\frac{J'}{2} 2f_1(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) + \frac{J''}{2} 2f_5(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \right. \\ & \left. \left. + \frac{\mathcal{J}'}{2} 2f_1(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) + \frac{\mathcal{J}''}{2} 2f_5(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4) \right] c_{\mathbf{k}_1,\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2,\beta} c_{\mathbf{k}_3,\beta}^\dagger c_{\mathbf{k}_4,\alpha} \right\}, \end{aligned} \quad (2.4)$$

με την προϋπόθεση ότι $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4$, ενώ εισαγάγαμε παράλληλα τις μη-αναγωγίσιμες αναπαράστασεις της κρυσταλλικής ομάδας συμμετρίας $f_s(\mathbf{k})$.

Στη συνέχεια εφαρμόζουμε τη Θεωρία Μέσου Πεδίου, όπου θεωρούμε ότι όλα τα δυνατά ζεύγη τελεστών που προκύπτουν από την αλληλεπίδραση των τεσσάρων φερμιονικών τελεστών, μεταβάλλονται αργά γύρω από τις αναμενόμενες τιμές τους. Κατά αυτόν τον τρόπο γράφουμε κάθε δυνατό ζεύγος τελεστών της μορφής $c^\dagger d$ με τον ακόλουθο τρόπο $c^\dagger d = \langle c^\dagger d \rangle + (c^\dagger d - \langle c^\dagger d \rangle)$. Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί στην αναμενόμενη τιμή του τελεστή ενώ ο δεύτερος στις διακυμάνσεις γύρω από την αναμενόμενη τιμή. Το επόμενο βήμα είναι να εκφράσουμε τα ζεύγη τελεστών που εμφανίζονται στην έκφραση των αλληλεπιδράσεων με τον προηγούμενο τρόπο, και έπειτα να αγνοήσουμε οποιοδήποτε όρο είναι τετραγωνικός ως προς τις διακυμάνσεις θεωρώντας τον ως αμελητέο. Σύμφωνα με την προαναφερθείσα μέθοδο, η αλληλεπίδραση των τεσσάρων φερμιονικών τελεστών στον χώρο των κυματανυσμάτων που προέκυψε από το παραπάνω μοντέλο επιδέχεται τριών διαφορετικών τρόπων διαχωρισμού ('κανάλια') στα πλαίσια της Θεωρίας Μέσου Πεδίου.

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} &\simeq \langle c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} \rangle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} + \langle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} - \langle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle \langle c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} \rangle \\ &- \langle c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} - \langle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} \rangle c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} + \langle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_4, \delta} \rangle \langle c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger c_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle \\ &+ \langle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger \rangle c_{\mathbf{k}_4, \delta} c_{\mathbf{k}_2, \beta} + \langle c_{\mathbf{k}_4, \delta} c_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger - \langle c_{\mathbf{k}_1, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}_3, \gamma}^\dagger \rangle \langle c_{\mathbf{k}_4, \delta} c_{\mathbf{k}_2, \beta} \rangle. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Το τελευταίο κανάλι αντιστοιχεί στο σχηματισμό υπεραγωγίων καταστάσεων, το οποίο δεν θα μας απασχολήσει στο υπόλοιπο της διατριβής και για αυτό το λόγο θα το αγνοήσουμε. Αντιθέτως, ενδιαφερόμαστε για καταστάσεις στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής ($\langle c^\dagger c \rangle$) οι οποίες είναι διαμορφωμένες κατά ένα κυματόνισμα \mathbf{q} . Παρατηρούμε ότι και τα δύο πρώτα κανάλια συνεισφέρουν σε αυτές τις καταστάσεις. Συγκεκριμένα, στην πρώτη περίπτωση θέτουμε $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$, $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}' + \mathbf{q}$ και $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k}'$ ενώ στην δεύτερη $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}$, $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}'$, $\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}' + \mathbf{q}$ και $\mathbf{k}_4 = \mathbf{k} + \mathbf{q}$. Και στις δύο περιπτώσεις ικανοποιείται η απαίτηση της διατήρησης της ορμής $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_4$. Το κομμάτι των αλληλεπιδράσεων παίρνει τώρα τη μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{int} &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{\alpha, \beta} \left\{ \right. \\ &V^d(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \left[\langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \beta}^\dagger c_{\mathbf{k}', \beta} \rangle c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha} + \langle c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha} \rangle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \beta}^\dagger c_{\mathbf{k}', \beta} - \langle c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \alpha} \rangle \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \beta}^\dagger c_{\mathbf{k}', \beta} \rangle \right] + \\ &V^e(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) \left[\langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \beta}^\dagger c_{\mathbf{k}', \alpha} \rangle c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \beta} + \langle c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \beta} \rangle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \beta}^\dagger c_{\mathbf{k}', \alpha} - \langle c_{\mathbf{k}, \alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \beta} \rangle \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \beta}^\dagger c_{\mathbf{k}', \alpha} \rangle \right] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

όπου έχουμε θέσει

$$\begin{aligned} V^d(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= -\left(V' - \frac{J'}{4}\right) 2f_1(\mathbf{q}) - \left(V'' - \frac{J''}{4}\right) 2f_5(\mathbf{q}) + \frac{J'}{2} 2f_1(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \frac{J''}{2} 2f_5(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &- \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}\right) 2f_1(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{q}) - \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4}\right) 2f_5(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\begin{aligned} V^e(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}) &= -\frac{J'}{2} 2f_1(\mathbf{q}) - \frac{J''}{2} 2f_5(\mathbf{q}) + \left(V' - \frac{J'}{4}\right) 2f_1(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) + \left(V'' - \frac{J''}{4}\right) 2f_5(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \\ &+ \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}\right) 2f_1(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{q}) + \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4}\right) 2f_5(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{q}). \end{aligned} \quad (2.8)$$

Οι δείκτες των δυναμικών δηλώνουν το είδος της μαγνητικής διαδικασίας, ευθείας 'd' (direct) ή ανταλλαγής 'e' (exchange). Σε αυτό το σημείο εισάγουμε τα βοηθητικά πεδία $\Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha\beta} = \Phi_{\mathbf{k}\mathbf{k}+\mathbf{q}} \sigma_0^{\alpha\beta} + \Phi_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}$.

$\sigma^{\alpha\beta} = \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\beta}^\dagger c_{\mathbf{k},\alpha} \rangle$ και $(\Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\alpha\beta})^* = \langle c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\beta} \rangle$, τα οποία όταν είναι μη μηδενικά σηματοδοτούν τη μετάβαση φάσης στο αντίστοιχο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής με κυματόνισμα \mathbf{q} . Κατά συνέπεια, αυτά τα πεδία κατέχουν τον ίδιο ρόλο με τις παραμέτρους τάξης ενός συστήματος. Μάλιστα, στις συνήθεις περιπτώσεις, τα πεδία αυτά είναι ανάλογα των παραμέτρων τάξης που χαρακτηρίζουν την ίδια μετάβαση. Στη γενικότερη περίπτωση, οι παράμετροι τάξης είναι γραμμικοί συνδυασμοί των βοηθητικών πεδίων. Στη συγκεκριμένη περίπτωση έχουμε χωρίσει τις μαγνητικές από τις μη μαγνητικές καταστάσεις, εισάγοντας τα πεδία $\Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ και $\bar{\Phi}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, που φέρουν spin 0 και 1 αντίστοιχα. Η εισαγωγή των πεδίων αυτών απλοποιεί σημαντικά την αλληλεπίδραση ως εξής

$$\begin{aligned} \mathcal{V}_{int} = & -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ [2V^d(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) + V^e(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q})] \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \sigma_0^{\alpha\beta} + V^e(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right\} c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\beta} \\ & -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ [2V^d(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}) + V^e(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q})] \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^* \sigma_0^{\alpha\beta} + V^e(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^* \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right\} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k},\beta} \\ & + \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \left\{ [2V^d(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) + V^e(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q})] \Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} + V^e(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \cdot \bar{\Phi}_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \right\}. \quad (2.9) \end{aligned}$$

Όπως προαναφέραμε, τα βοηθητικά πεδία είναι προπομποί των παραμέτρων τάξης. Έτσι λοιπόν, είμαστε έτοιμοι σε αυτό το σημείο να ορίσουμε τις παραμέτρους τάξης των διαμορφωμένων καταστάσεων τάξης στο κανάλι ηλεκτρονίου οπής ως

$$M_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V^s(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^* = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha,\beta} V^s(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}) \langle c_{\mathbf{k}',\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\beta} \rangle, \quad (2.10)$$

$$\bar{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V^s(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha,\beta} V^s(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}',\beta} \rangle, \quad (2.11)$$

$$M_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V^t(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}}^* = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha,\beta} V^t(\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}) \langle c_{\mathbf{k}',\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\beta} \rangle, \quad (2.12)$$

$$\bar{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V^t(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) \Phi_{\mathbf{k}',\mathbf{k}'+\mathbf{q}} = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha,\beta} V^t(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}',\beta} \rangle, \quad (2.13)$$

όπου εισαγάγαμε τα δυναμικά στο μη-μαγνητικό (singlet) και μαγνητικό (triplet) κανάλι αντίστοιχα $V^s(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) = 2V^d(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) + V^e(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q})$ και $V^t(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}) = V^e(\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q})$. Η τελική μορφή της Χαμιλτονιανής Μέσου Πεδίου είναι

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -2 \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \left[\Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \bar{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) + \Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^* \cdot \bar{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) \right] + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha,\beta} c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \left\{ [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \sigma_0^{\alpha\beta} - \mu_B \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right\} c_{\mathbf{k},\beta} \\ & + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \left[\bar{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) \sigma_0^{\alpha\beta} + \bar{M}_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right] c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\beta} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\alpha}^\dagger \left[M_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) \sigma_0^{\alpha\beta} + M_{\mathbf{q}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right] c_{\mathbf{k},\beta} \right\} \quad (2.14) \end{aligned}$$

Ο πρώτος όρος δεν είναι παρά μία σταθερά που σχετίζεται με το ενεργειακό κόστος για να αναπτυχθούν οι παράμετροι τάξης, ενώ ο δεύτερος σχετίζεται με τις διεγέρσεις του συστήματος. Συγκεκριμένα, ο πρώτος όρος αποτελεί ένα είδος πολλαπλασιαστή Lagrange που καθορίζει είτε την τιμή του βοηθητικού πεδίου ή την τιμή της παραμέτρου τάξης. Αυτό εξαρτάται από το εάν ελαχιστοποιήσουμε την ελεύθερη ενέργεια ως προς την παράμετρο τάξης ή το βοηθητικό πεδίο, αντίστοιχα.

2.4 Διαμορφωμένες καταστάσεις τάξεως κατά $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$

Όπως έχουμε ήδη αναφέρει θα επικεντρωθούμε σε καταστάσεις με κυματόνισμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, οι οποίες είναι οι κυρίαρχες για το συγκεκριμένο μη αλληλεπιδρών σύστημα με ενεργειακή διασπορά $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$. Σε αυτήν την περίπτωση, τα δυναμικά μπορούν να γραφούν στην ακόλουθη μορφή

$$\begin{aligned} V^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{Q}) &= 8(V' - V'')f_0(\mathbf{k})f_0(\mathbf{k}') + \sum_{s=1,2,3,4} \left[\left(V' + \frac{3J'}{4} \right) - \left(\nu' - \frac{3J'}{4} \right) \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}} \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} \right] f_s(\mathbf{k})f_s(\mathbf{k}') \\ &+ \sum_{s=5,6,7,8} \left[\left(V'' + \frac{3J''}{4} \right) - \left(\nu'' - \frac{3J''}{4} \right) \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}} \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} \right] f_s(\mathbf{k})f_s(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} V^t(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{Q}) &= 2(J' - J'')f_0(\mathbf{k})f_0(\mathbf{k}') + \sum_{s=1,2,3,4} \left[\left(V' - \frac{J'}{4} \right) + \left(\nu' - \frac{3J'}{4} \right) \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}} \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} \right] f_s(\mathbf{k})f_s(\mathbf{k}') \\ &+ \sum_{s=5,6,7,8} \left[\left(V'' - \frac{J''}{4} \right) + \left(\nu'' - \frac{3J''}{4} \right) \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}} \lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} \right] f_s(\mathbf{k})f_s(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (2.16)$$

όπου $\lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}}$ και $\lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}}$ είναι οι ιδιοτιμές της s -οστής μη αναγωγίσιμης αναπαράστασης κάτω από την δράση των μετασχηματισμών συμμετρίας της χωρικής αντιστροφής $\hat{\mathcal{I}}$ και μετατόπισης κατά \mathbf{Q} , $\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}$. Οι προηγούμενες ιδιοτιμές λαμβάνουν τις τιμές ± 1 στη βάση των συγκεκριμένων μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων. Παρατηρούμε ακόμη ότι τα δυναμικά είναι διαχωρίσιμα (separable), διότι μπορούν να γραφούν ως ένα άθροισμα γινομένων της μορφής $f_s(\mathbf{k})f_s(\mathbf{k}')$. Η συγκεκριμένη ιδιότητα έχει άμεσες επιπτώσεις στη συμπεριφορά των παραμέτρων τάξης. Συγκεκριμένα από τις σχέσεις (2.10-2.13) προκύπτουν οι σχέσεις $\widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) = M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k})$ και $\overline{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) = M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k})$. Επιπλέον, λόγω του ότι το κυματόνισμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ είναι σύμμετρο (commensurate), ικανοποιώντας τη σχέση $\mathbf{k} + 2\mathbf{Q} \equiv \mathbf{k}$, προκύπτουν οι επιπρόσθετες σχέσεις

$$M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} V^s(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \mathbf{Q}) \sum_{\alpha, \beta} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}, \alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}', \beta} \rangle = M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}), \quad (2.17)$$

$$M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}'} V^t(\mathbf{k}' + \mathbf{Q}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}, \mathbf{Q}) \sum_{\alpha, \beta} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q}, \alpha}^\dagger \sigma^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}', \beta} \rangle = M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}), \quad (2.18)$$

οι οποίες οδηγούν στο ακόλουθο αποτέλεσμα $\lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k}) = M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})$ και $\lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k}) = M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})$. Οι εκφράσεις αυτές θέτουν περιορισμό στις δυνατές μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις που μπορούν να φέρουν οι παράμετροι τάξης $M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k})$ και $M_{\mathbf{Q}}^*(\mathbf{k})$. Συγκεκριμένα, παρατηρούμε ότι εάν μία παράμετρος τάξης είναι πραγματική τότε είναι αναγκαστικά και περιοδική, ενώ το αντίθετο ισχύει για τις φανταστικές παραμέτρους τάξης. Συνεπώς, επειδή για τις μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις $s = 0, 5, 6, 7, 8$ ισχύει $\lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} = +1$, αυτές συνδέονται αναγκαστικά μόνο με πραγματικές παραμέτρους τάξης, ενώ αντίθετα οι αναπαραστάσεις $s = 1, 2, 3, 4$ συνδέονται μόνο με φανταστικές παραμέτρους τάξης διότι $\lambda_s^{\hat{\mathcal{I}}\mathbf{Q}} = -1$. Συνεπώς, ο διαχωρισμός σε πραγματικές και φανταστικές παραμέτρους τάξης, ισοδυναμεί με διαχωρισμό σε περιοδικές και αντιπεριοδικές μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις.

Η ύπαρξη της περιοδικότητας μας επιτρέπει, και παράλληλα μας υποδεικνύει, τη μετάβαση στη μαγνητική ή ανηγμένη ζώνη Brillouin ($\mathcal{R.B.Z.}$), όπου τα κυματόνισμα \mathbf{k} και $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ είναι ανεξάρτητα. Χωρίζοντας το κάθε άθροισμα στα $\mathbf{k} \in \mathcal{B.Z.}$ σε δύο επιμέρους άθροισμα $\sum_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$, μεταβαίνουμε στην ανηγμένη ζώνη Brillouin, δηλαδή $\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}$. Εφόσον ο αντίστροφος χώρος υποδιπλασιάζεται, στον ευθύ χώρο έχουμε την δημιουργία ενός υπερπλέγματος (superlattice) που χαρακτηρίζεται από μία

θεμελιώδη κυψελίδα με διπλάσιες πλεγματικές σταθερές κατά την κατεύθυνση που ορίζει το κυματόνυσμα \mathbf{Q} . Η μετάβαση στην νέα ζώνη, οδηγεί σε διπλασιασμό των συνεισφορών από όλους τους όρους, δίνοντας

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -2 \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[\Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* \widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \Phi_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* \cdot \widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) \right] + \left[\Phi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}}^* \widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) + \Phi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\mathbf{k}}^* \cdot \widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \right] \right\} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \left\{ [\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu] \sigma_0^{\alpha\beta} - \mu_B \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right\} c_{\mathbf{k},\beta} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\alpha}^\dagger \left\{ [\varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) - \mu] \sigma_0^{\alpha\beta} - \mu_B \mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right\} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\beta} \right\} \\ & + 2 \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha,\beta} \left\{ c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \left[\widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) \sigma_0^{\alpha\beta} + \widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right] c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\beta} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\alpha}^\dagger \left[M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) \sigma_0^{\alpha\beta} + M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} \right] c_{\mathbf{k},\beta} \right\}, \quad (2.19) \end{aligned}$$

όπου κάναμε χρήση των ειδικών σχέσεων που συνδέουν τις παραμέτρους τάξης M και \widetilde{M} για $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$. Η διπλάσια συνεισφορά μπροστά από τις παραμέτρους τάξης, μπορεί να απορροφηθεί διπλασιάζοντας το αντίστοιχο ενεργό δυναμικό που τις γεννά. Επιπλέον, η διαχωρίσιμη μορφή που λαμβάνουν τα δυναμικά για το συγκεκριμένο κυματόνυσμα, δεν οδηγεί σε αναγκαστική μίξη των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων και για αυτό το λόγο είναι εύλογο να αναπτύξουμε την κάθε παράμετρο τάξης σαν άθροισμα των $f_s(\mathbf{k})$ με $s = 0, \dots, 8$. Θέτοντας λοιπόν $M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) = \sum_s M_{\mathbf{Q},s} f_s(\mathbf{k})$ και $\widetilde{M}_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) = \sum_s \widetilde{M}_{\mathbf{Q},s} f_s(\mathbf{k})$, και διαχωρίζοντας σε πραγματικά και φανταστικά μέρη $M_{\mathbf{Q}} = M_{\mathbf{Q}}^{\Re} + iM_{\mathbf{Q}}^{\Im}$ και $\widetilde{M}_{\mathbf{Q}} = \widetilde{M}_{\mathbf{Q}}^{\Re} + i\widetilde{M}_{\mathbf{Q}}^{\Im}$, λαμβάνουμε τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Re} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} \sum_{\alpha,\beta} (2V_{\mathbf{Q},s}^s) f_s(\mathbf{k}) \frac{\langle c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\beta} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k},\beta} \rangle}{4} : s = 0, 5, 6, 7, 8, \quad (2.20)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Im} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} \sum_{\alpha,\beta} (2V_{\mathbf{Q},s}^s) f_s(\mathbf{k}) \frac{\langle -ic_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\beta} + ic_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\alpha}^\dagger \sigma_0^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k},\beta} \rangle}{4} : s = 1, 2, 3, 4, \quad (2.21)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Re} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} \sum_{\alpha,\beta} (2V_{\mathbf{Q},s}^t) f_s(\mathbf{k}) \frac{\langle c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\beta} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k},\beta} \rangle}{4} : s = 0, 5, 6, 7, 8, \quad (2.22)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Im} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} \sum_{\alpha,\beta} (2V_{\mathbf{Q},s}^t) f_s(\mathbf{k}) \frac{\langle -ic_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\beta} + ic_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}^{\alpha\beta} c_{\mathbf{k},\beta} \rangle}{4} : s = 1, 2, 3, 4, \quad (2.23)$$

ενώ παράλληλα εισαγάγαμε τα ενεργά δυναμικά για την κάθε μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση s ,

$$V_{\mathbf{Q},0}^s = 8(V' - V'') \quad , \quad V_{\mathbf{Q},0}^t = 2(J' - J''), \quad (2.24)$$

$$V_{\mathbf{Q},1,2}^s = \left(\frac{3J'}{4} + V' \right) - \left(\frac{3\mathcal{J}'}{4} - \mathcal{V}' \right) \quad , \quad V_{\mathbf{Q},1,2}^t = \left(V' - \frac{J'}{4} \right) - \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4} \right), \quad (2.25)$$

$$V_{\mathbf{Q},3,4}^s = \left(\frac{3J'}{4} + V' \right) + \left(\frac{3\mathcal{J}'}{4} - \mathcal{V}' \right) \quad , \quad V_{\mathbf{Q},3,4}^t = \left(V' - \frac{J'}{4} \right) + \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4} \right), \quad (2.26)$$

$$V_{\mathbf{Q},5,6}^s = \left(\frac{3J''}{4} + V'' \right) + \left(\frac{3\mathcal{J}''}{4} - \mathcal{V}'' \right) \quad , \quad V_{\mathbf{Q},5,6}^t = \left(V'' - \frac{J''}{4} \right) + \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4} \right), \quad (2.27)$$

$$V_{\mathbf{Q},7,8}^s = \left(\frac{3J''}{4} + V'' \right) - \left(\frac{3\mathcal{J}''}{4} - \mathcal{V}'' \right) \quad , \quad V_{\mathbf{Q},7,8}^t = \left(V'' - \frac{J''}{4} \right) - \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4} \right). \quad (2.28)$$

2.5 Καταστάσεις τάξης $\|\hat{z}$

Παραπάνω καταλήξαμε στην γενική μορφή της Χαμιλτονιανής Μέσου Πεδίου. Στο υπόλοιπο της διατριβής θα επικεντρωθούμε σε καταστάσεις τάξεως οι οποίες είναι είτε μη-μαγνητικές, ή μαγνητικές που όμως είναι πολωμένες μόνο κατά την \hat{z} διεύθυνση, την οποία από εδώ και στο εξής θα θεωρήσουμε ως την κατεύθυνση που καθορίζει ο προσανατολισμός του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου ($\mathbf{B} = B_z \hat{z}$). Μπορούμε εύκολα να δείξουμε ότι σε αυτήν την περίπτωση ο κάθε υπόχωρος σπιν αποτελεί ένα ανεξάρτητο υποσύστημα. Ξεκινώντας και πάλι από τη Χαμιλτονιανή Μέσου Πεδίου, επικεντρωνόμαστε στο κομμάτι που περιγράφει τις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις, \mathcal{H}_{qp} , και έχουμε

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{qp} = & \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \left[+\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu - \sigma \mu_B B_z \right] c_{\mathbf{k},\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \left[-\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu - \sigma \mu_B B_z \right] c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \\ & + \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left\{ c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \left[M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) \right]^* c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \left[M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) \right] c_{\mathbf{k},\sigma} \right\}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

όπου ο δείκτης $\sigma = \pm$ αντιστοιχεί στις δύο δυνατές πολώσεις του ηλεκτρονικού σπιν \uparrow, \downarrow , ενώ οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας απλουστεύονται ως εξής

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Re} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} (2V_{\mathbf{Q},s}^s) f_s(\mathbf{k}) \sum_{\sigma} \frac{\langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{4} : s = 0, 5, 6, 7, 8, \quad (2.30)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Im} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} (2V_{\mathbf{Q},s}^s) f_s(\mathbf{k}) \sum_{\sigma} \frac{\langle -i c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + i c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{4} : s = 1, 2, 3, 4, \quad (2.31)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{z,\Re} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} (2V_{\mathbf{Q},s}^t) f_s(\mathbf{k}) \sum_{\sigma} \sigma \frac{\langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{4} : s = 0, 5, 6, 7, 8, \quad (2.32)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{z,\Im} = -\frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} (2V_{\mathbf{Q},s}^t) f_s(\mathbf{k}) \sum_{\sigma} \sigma \frac{\langle -i c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + i c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle}{4} : s = 1, 2, 3, 4. \quad (2.33)$$

2.6 Μετασχηματισμός Bogoliubov – de Gennes και μονοσωματιδιακές διεγέρσεις

Εφόσον έχουμε καταλήξει στη μορφή της Χαμιλτονιανής που θα μας απασχολήσει στο υπόλοιπο της διατριβής αυτής, είναι εύλογο σε αυτό το σημείο να μελετήσουμε περισσότερο της ιδιότητες της εκάστοτε κατάστασης τάξης. Ασφαλώς αυτό μπορεί να γίνει αναλύοντας περαιτέρω τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας καθώς και μέσω της μελέτης των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων της θεμελιώδους κατάστασης. Για να είμαστε σε θέση να εξετάσουμε αυτές τις ιδιότητες, θα πρέπει να διαγωνοποιήσουμε τη Χαμιλτονιανή Μέσου Πεδίου. Αυτό θα γίνει μέσω του μετασχηματισμού Bogoliubov [203, 205], σύμφωνα με τον οποίο θα εισάγουμε ένα νέο ζευγάρι φερμιονικών τελεστών δημιουργίας και καταστροφής $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}$ και $\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$, οι οποίοι δημιουργούν και καταστρέφουν μονοσωματιδιακές διεγέρσεις. Εκτελούμε λοιπόν το μετασχηματισμό

$$\begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\sigma}(\mathbf{k}) & -v_{\sigma}^*(\mathbf{k}) \\ v_{\sigma}(\mathbf{k}) & u_{\sigma}^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k},\sigma} \\ \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

με αποτέλεσμα η Χαμιλτονιανή Μέσου Πεδίου να λαμβάνει τη μορφή

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{qp} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \varepsilon(\mathbf{k}) & [M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^* \\ M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) & -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z - \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \end{pmatrix} \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma^*(\mathbf{k}) & v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ -v_\sigma(\mathbf{k}) & u_\sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \varepsilon(\mathbf{k}) & [M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^* \\ M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) & -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z - \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma(\mathbf{k}) & -v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ v_\sigma(\mathbf{k}) & u_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} \\ \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \end{pmatrix} \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma^*(\mathbf{k}) & v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ -v_\sigma(\mathbf{k}) & u_\sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{+, \sigma}(\mathbf{k})u_\sigma(\mathbf{k}) & -E_{-, \sigma}(\mathbf{k})v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ E_{+, \sigma}(\mathbf{k})v_\sigma(\mathbf{k}) & E_{-, \sigma}(\mathbf{k})u_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} \\ \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \end{pmatrix} \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \left\{ E_{+, \sigma}(\mathbf{k}) \left[|u_\sigma(\mathbf{k})|^2 + |v_\sigma(\mathbf{k})|^2 \right] \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} + E_{-, \sigma}(\mathbf{k}) \left[|u_\sigma(\mathbf{k})|^2 + |v_\sigma(\mathbf{k})|^2 \right] \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \right\} \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \left[E_{+, \sigma}(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} + E_{-, \sigma}(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \right]. \tag{2.35}
\end{aligned}$$

Τα στοιχεία πίνακα του μετασχηματισμού οφείλουν να ικανοποιούν τις εξισώσεις Bogoliubov-de Gennes [203, 206]

$$\begin{pmatrix} -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \varepsilon(\mathbf{k}) & [M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^* \\ M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) & -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z - \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma(\mathbf{k}) \\ v_\sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E_{+, \sigma}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} u_\sigma(\mathbf{k}) \\ v_\sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \tag{2.36}$$

$$\begin{pmatrix} -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \varepsilon(\mathbf{k}) & [M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^* \\ M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) & -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z - \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ u_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E_{-, \sigma}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} -v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ u_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \tag{2.37}$$

υπό την επιπρόσθετη συνθήκη κανονικοποίησης $|u_\sigma(\mathbf{k})|^2 + |v_\sigma(\mathbf{k})|^2 = 1$. Οι παραπάνω εξισώσεις υπαγορεύουν ότι η κάθε στήλη του πίνακα του μετασχηματισμού, αποτελεί ένα ιδιοδιάνυσμα της Χαμιλτονιανής Μέσου Πεδίου. Μάλιστα, συγκεκριμένη μορφή που χρησιμοποιήσαμε για τα ιδιοδιανύσματα απορρέει από την συγκεκριμένη μορφή και τις συμμετρίες της παραπάνω Χαμιλτονιανής. Κάτω από αυτές τις συνθήκες βρίσκουμε ότι

$$u_\sigma(\mathbf{k}) = e^{i\phi_\sigma(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{E_\sigma(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})}}, \quad v_\sigma(\mathbf{k}) = e^{i\theta_\sigma(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{E_\sigma(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})}}, \tag{2.38}$$

με $E_\sigma(\mathbf{k}) = \sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k})]^2 + |M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})|^2}$ και $E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) = -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \nu E_\sigma(\mathbf{k})$, όπου $\nu = \pm$. Οι ενεργειακές διασπορές, $E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})$, αντιστοιχούν στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος. Πρέπει να σημειώσουμε ότι οι παράμετροι $u_\sigma(\mathbf{k})$ και $v_\sigma(\mathbf{k})$ έχουν συγκεκριμένες φάσεις, τις οποίες πρέπει να προσδιορίσουμε. Για να το κάνουμε αυτό, ξεκινάμε από την πρώτη εξίσωση Bogoliubov-de Gennes και γράφουμε την παράμετρο τάξης ως $M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) = |M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})| e^{i\varphi_\sigma(\mathbf{k})}$. Στη συνέχεια παίρνουμε το μιγαδικό συζυγή αυτής της εξίσωσης που μας δίνει

$$\begin{pmatrix} -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \varepsilon(\mathbf{k}) & |M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})| e^{+i\varphi_\sigma(\mathbf{k})} \\ |M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})| e^{-i\varphi_\sigma(\mathbf{k})} & -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z - \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ v_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = E_{+, \sigma}(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} u_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ v_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \tag{2.39}$$

Η παραπάνω σχέση μας επιτρέπει να συσχετίσουμε το πραγματικό μέρος και το φανταστικό των $u_\sigma(\mathbf{k})$ και $v_\sigma(\mathbf{k})$ για την συγκεκριμένη ενεργειακή διασπορά. Βρίσκουμε συγκεκριμένα ότι $\theta_\sigma(\mathbf{k}) = \phi_\sigma(\mathbf{k}) + \varphi_\sigma(\mathbf{k})$. Θα επιλέξουμε $\phi_\sigma(\mathbf{k}) = 0$ και $\theta_\sigma(\mathbf{k}) = \varphi_\sigma(\mathbf{k})$. Άρα καταλήγουμε στις σχέσεις

$$u_\sigma(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{E_\sigma(\mathbf{k}) + \varepsilon(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})}}, \quad v_\sigma(\mathbf{k}) = e^{i\varphi_\sigma(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{E_\sigma(\mathbf{k}) - \varepsilon(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})}}, \quad (2.40)$$

όπου ισχύουν οι παρακάτω σχέσεις

$$|M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})| \cos[\varphi(\mathbf{k})] = M_{\mathbf{Q}}^{\Re}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^{z,\Re}(\mathbf{k}), \quad (2.41)$$

$$|M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})| \sin[\varphi(\mathbf{k})] = M_{\mathbf{Q}}^{\Im}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^{z,\Im}(\mathbf{k}). \quad (2.42)$$

2.7 Εξισώσεις αυτοσυνέπειας

Έχοντας υπολογίσει τα ιδιοδιανύσματα, μπορούμε ευθύς αμέσως να προσδιορίσουμε την ακριβή μορφή των εξισώσεων αυτοσυνέπειας που θα μας δώσουν τη δυνατότητα να εμβαθύνουμε στον ανταγωνισμό, συνύπαρξη και την επαγωγή των μη Συμβατικών Κυμάτων Πυκνότητας. Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας περιλαμβάνουν τις αναμενόμενες τιμές των τελεστών $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$ και $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}$. Αυτές οι τιμές μπορούν να προσδιοριστούν πολύ εύκολα, μετασχηματίζοντας τους τελεστές c σε γ . Έχουμε λοιπόν

$$\begin{aligned} \langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \rangle &= \langle [u_\sigma^*(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger - v_\sigma(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger] [v_\sigma(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k},\sigma} + u_\sigma^*(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}] \rangle \\ &= u_\sigma^*(\mathbf{k})v_\sigma(\mathbf{k}) \{n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]\}, \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\begin{aligned} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle &= \langle [v_\sigma^*(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + u_\sigma(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger] [u_\sigma(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k},\sigma} - v_\sigma^*(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}] \rangle \\ &= u_\sigma(\mathbf{k})v_\sigma^*(\mathbf{k}) \{n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]\}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Κατά συνέπεια, αντικαθιστώντας τα $u_\sigma(\mathbf{k})$ και $v_\sigma(\mathbf{k})$ προκύπτουντα ακόλουθα αποτελέσματα

$$\begin{aligned} \langle c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle &= [u_\sigma^*(\mathbf{k})v_\sigma(\mathbf{k}) + u_\sigma(\mathbf{k})v_\sigma^*(\mathbf{k})] \{n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]\} \\ &= \frac{M_{\mathbf{Q}}^{\Re}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^{z,\Re}(\mathbf{k})}{E_\sigma(\mathbf{k})} \{n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]\}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$\begin{aligned} \langle -ic_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + ic_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle &= [-iu_\sigma^*(\mathbf{k})v_\sigma(\mathbf{k}) + iu_\sigma(\mathbf{k})v_\sigma^*(\mathbf{k})] \{n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]\} \\ &= \frac{M_{\mathbf{Q}}^{\Im}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^{z,\Im}(\mathbf{k})}{E_\sigma(\mathbf{k})} \{n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]\}. \end{aligned} \quad (2.46)$$

Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας παίρνουν την γενική μορφή

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Re} = \frac{V_{\mathbf{Q},s}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_s(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} (M_{\mathbf{Q},b}^{\Re} + \sigma M_{\mathbf{Q},b}^{z,\Re}) : s, b = 0, 5, 6, 7, 8, \quad (2.47)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{\Im} = \frac{V_{\mathbf{Q},s}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_s(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} (M_{\mathbf{Q},b}^{\Im} + \sigma M_{\mathbf{Q},b}^{z,\Im}) : s, b = 1, 2, 3, 4, \quad (2.48)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{z,\Re} = \frac{V_{\mathbf{Q},s}^t}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_s(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} (M_{\mathbf{Q},b}^{z,\Re} + \sigma M_{\mathbf{Q},b}^{\Re}) : s, b = 0, 5, 6, 7, 8, \quad (2.49)$$

$$M_{\mathbf{Q},s}^{z,\Im} = \frac{V_{\mathbf{Q},s}^t}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_s(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} (M_{\mathbf{Q},b}^{z,\Im} + \sigma M_{\mathbf{Q},b}^{\Im}) : s, b = 1, 2, 3, 4. \quad (2.50)$$

όπου $\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}$. Παρατηρούμε ότι η κάθε παράμετρος τάξης επηρεάζεται και επηρεάζει ένα σύνολο άλλων μαγνητικών και μη, καταστάσεων τάξης.

2.7.1 Περίπτωση μηδενικού χημικού δυναμικού και μαγνητικού πεδίου Zeeman - Σενάριο van Hove

Η πιο απλή περίπτωση αλλά πολύ σημαντική ταυτόχρονα, είναι αυτή όπου το μη αλληλεπιδρών σύστημα παρουσιάζει τέλεια συναρμογή με κυματόνισμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Για κάθε \mathbf{k} υπάρχει ένα $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ με αντίθετη ενέργεια. Ο κινητικός όρος $\varepsilon(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$ οδηγεί σε απειρισμό της πυκνότητας των ενεργειακών καταστάσεων σε ένα πλήθος σημείων, στα οποία περιλαμβάνονται τα $(\pm\pi, 0)$ και $(0, \pm\pi)$. Τα σημεία στα οποία αποκλίνει η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων ονομάζονται σημεία van Hove [207]. Τα σημεία αυτά διαδραματίζουν σημαντικό ρόλο στη συμπεριφορά του συστήματος όταν αποτελούν σημεία της επιφάνειας Fermi. Συγκεκριμένα, είναι αυτά και μόνο αυτά που καθορίζουν όλες τις ιδιότητες του συστήματος. Στην περίπτωση λοιπόν που εξετάζουμε ισχύουν ακριβώς οι προϋποθέσεις του σεναρίου van Hove [33].

Το σύστημα λοιπόν αντιπροσωπεύεται μόνο από τα τέσσερα προαναφερθέντα σημεία. Είναι εύκολο να δούμε ότι τα σημεία $(\pi, 0)$ και $(-\pi, 0)$, όπως αντίστοιχα τα σημεία $(0, \pi)$ και $(0, -\pi)$, συνδέονται μεταξύ τους με διανύσματα του αντιστρόφου πλέγματος, αποτελώντας ουσιαστικά ένα μοναδικό σημείο. Λόγω του ότι αυτά τα σημεία συνδέονται παράλληλα με το μετασχηματισμό ανακλάσης κατά τους άξονες, καταλήγουμε στο ότι οι δυνατές παράμετροι τάξης οφείλουν να είναι άρτιες κάτω από αυτόν τον μετασχηματισμό. Αυτός ο περιορισμός, αποκλείει αμέσως την δυνατότητα εμφάνισης καταστάσεων τάξης με μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις $f_s(\mathbf{k})$, όπου $s = 3, 4, 6, 7, 8$, ως τις κυρίαρχες καταστάσεις τάξης. Από τα τέσσερα σημεία, δύο είναι ανεξάρτητα, έστω τα $(0, -\pi)$ και $(\pi, 0)$. Αυτά συνδέονται με το μετασχηματισμό $\hat{t}_{\mathbf{Q}}$ και δεν υπάρχει απαίτηση να είναι ισοδύναμα.

Παραμένουν πέντε μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις. Αυτές είναι οι $f_0(\mathbf{k}) = 1$, $f_1(\mathbf{k}) = \cos k_x + \cos k_y$, $f_2(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y$, και $f_5(\mathbf{k}) = \cos k_x \cos k_y$. Από τις παραπάνω, μπορούμε να δούμε ότι η αναπαράσταση $s = 1$ μηδενίζεται ακριβώς στα σημεία van Hove και άρα αποκλείεται. Το ποιά αναπαράσταση θα επικρατήσει από τις τρεις εναπομείνουσες δεν είναι τόσο προφανές. Το τελικό κριτήριο θα βασιστεί στο ποιά είναι πιο οικονομική. Πάνω στα σημεία van Hove και οι τρεις είναι ισοδύναμες, αλλά δεν ορίζονται μόνο σε αυτά τα σημεία. Ο σχηματισμός μιας παραμέτρου τάξης κοστίζει ενέργεια, η οποία καθορίζει την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης σε αυτής, και αυτή προέρχεται από τη συνεισφορά όλων των σημείων της ζώνης Brillouin. Έτσι λοιπόν, τα υπόλοιπα σημεία του αντιστρόφου χώρου θα καθορίσουν την επικρατούσα αναπαράσταση, με βάση του πόσο ενεργειακό χόσμα δαπανάται άσκοπα για αυτά. Για να γίνει περισσότερο κατανοητή η παραπάνω διατύπωση, μπορούμε να δούμε ότι η αναπαράσταση $f_0(\mathbf{k}) = 1$ είναι ισοτροπική και δημιουργεί το ίδιο χόσμα σε όλα τα σημεία του αντιστρόφου χώρου. Έτσι λοιπόν, πέρα από τα σημεία van Hove, δαπανάται ενέργεια για να σχηματιστεί ενεργειακό χόσμα σε σημεία με αμελητέο αριθμό ενεργειακών καταστάσεων. Αυτό φυσικά δεν συμφέρει καθόλου το σύστημα. Η ανισοτροπική κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων ευνοεί ανισοτροπικές μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις. Σίγουρα λοιπόν μπορούμε να απορρίψουμε την ισοτροπική με βάση αυτό το κριτήριο.

Απομένουν λοιπόν δύο δυνατές αναπαραστάσεις. Από αυτές, μία θα είναι η κυρίαρχη ενώ βέβαια, δεν θα έπρεπε να αποκλείσει κανείς και την συνύπαρξη αυτών των δύο. Είναι εύλογο να αναρωτηθεί κανείς εάν η κατάσταση συνύπαρξης μπορεί να αποτελέσει ένα Τοπολογικό Κύμα Πυκνότητας, αλλά η απάντηση είναι αρνητική, όπως θα μπορέσουμε να διαπιστώσουμε σε επόμενο κεφάλαιο. Η αναπαράσταση $f_2(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y$ είναι φανταστική ενώ η $f_5(\mathbf{k}) = \cos k_x \cos k_y$ πραγματική λόγω περιοδικότητας. Από τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας, παρατηρούμε ότι δεν μπορεί να γίνει μίξη των δύο αυτών αναπαραστάσεων και ο ανταγωνισμός τους κρίνεται πράγματι στο επίπεδο του ενεργειακού οφέλους. Παρόλο που

και οι δύο μη-αναγωγίσιμες αναπαράστασεις είναι ανισοτροπικές, η $\cos k_x \cos k_y$ είναι η πιο ισοτροπική, αφού ανήκει ούτως ή άλλως στην αναπαράσταση A_{1g} της κρυσταλλικής ομάδας συμμετρίας D_{4h} που χαρακτηρίζει το σύστημα. Καταλήγουμε λοιπόν ότι ακόμα και σε αυτήν την περίπτωση, η $d_{x^2-y^2}$ είναι η πιο συμφέρουσα. Βέβαια, δεν έχουμε κάνει κανέναν λόγο σχετικά με τα δυναμικά που και αυτά καθορίζουν την έκβαση του αποτελέσματος. Από τη σκοπιά των ενεργών δυναμικών που ευνοούν τις δύο αυτές αναπαράστασεις, τα $V_{\mathbf{Q},5}^{s,t}$ προέρχονται από αλληλεπιδράσεις δεύτερων πλησιέστερων γειτόνων οι οποίες αναμένονται ασθενέστερες, σε σχέση με τις αντίστοιχες που συνεισφέρουν στα δυναμικά $V_{\mathbf{Q},2}^{s,t}$. Έτσι λοιπόν, και από την άποψη της σχετικής ισχύος των αλληλεπιδράσεων, από τις δύο μη-ανισοτροπικές αναπαράστασεις επικρατεί η $d_{x^2-y^2}$. Το γεγονός, βέβαια ότι η συγκεκριμένη αναπαράσταση είναι επικρατούσα, επιβεβαιώνεται και υπολογιστικά.

Το γεγονός ότι η συγκεκριμένη αναπαράσταση είναι επικρατούσα, δεν καθορίζει εάν η κατάσταση θα είναι μαγνητική ή όχι. Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας σε αυτήν την περίπτωση γράφονται ως εξής

$$M_{\mathbf{Q},2} = \frac{V_{\mathbf{Q},2}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma} [f_2(\mathbf{k})]^2 \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} M_{\mathbf{Q},2}, \quad (2.51)$$

$$M_{\mathbf{Q},2}^z = \frac{V_{\mathbf{Q},2}^t}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma} [f_2(\mathbf{k})]^2 \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} M_{\mathbf{Q},2}^z. \quad (2.52)$$

Εάν θέσουμε τον ύπο άθροιση όρο ως $I_2(M_{\mathbf{Q},2}, M_{\mathbf{Q},2}^z)$, λαμβάνουμε την απλή μορφή

$$\left[1 - I_2(M_{\mathbf{Q},2}, M_{\mathbf{Q},2}^z) V_{\mathbf{Q},2}^s\right] M_{\mathbf{Q},2} = 0, \quad (2.53)$$

$$\left[1 - I_2(M_{\mathbf{Q},2}, M_{\mathbf{Q},2}^z) V_{\mathbf{Q},2}^t\right] M_{\mathbf{Q},2}^z = 0. \quad (2.54)$$

Παρατηρούμε ότι για $V_{\mathbf{Q},2}^s = V_{\mathbf{Q},2}^t$ έχουμε μία ειδική περίπτωση όπου εάν μηδενίζεται η αγκύλη, μπορούν να συνυπάρχουν ταυτόχρονα και οι δύο παράμετροι τάξης. Μάλιστα, λόγω της αναλλοιοτήτας των ενεργειακών διασπορών $E_\sigma(\mathbf{k}) = \sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k})]^2 + f_2^2(\mathbf{k}) (M_{\mathbf{Q},2} + \sigma M_{\mathbf{Q},2}^z)^2}$, κατά την ανταλλαγή $M_{\mathbf{Q},2} \leftrightarrow M_{\mathbf{Q},2}^z$, προκύπτει ότι αναγκαστικά $M_{\mathbf{Q},2} = M_{\mathbf{Q},2}^z$. Συνεπώς, το σημείο αυτό αποτελεί ένα σημείο εκφυλισμού. Εάν διαφοροποιηθούν όμως τα ενεργά δυναμικά αλληλεπίδρασης, τότε εάν ικανοποιείται μία από τις δύο αγκύλες, αναγκαστικά δεν θα ικανοποιείται η άλλη. Αυτό σημαίνει ότι η παράμετρος τάξης για την οποία μηδενίζεται η αγκύλη είναι πεπερασμένη, ενώ αυτή για την οποία δεν ικανοποιείται η αγκύλη αναγκαστικά θα είναι μηδενική. Παρατηρούμε λοιπόν, ότι συναρτήσει της διαφοράς των δυναμικών λαμβάνει χώρα μία ασυνεχής μετάβαση από τη μία φάση στην άλλη, δίχως να επιτρέπεται η συνύπαρξη των δύο καταστάσεων, πέραν της ειδικής περίπτωσης του εκφυλισμού των δυναμικών. **Καταλήγουμε λοιπόν, ότι η κυρίαρχη μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση είναι η $d_{x^2-y^2}$ και μπορεί να είναι είτε μονάχα μαγνητική ή μονάχα μη-μαγνητική.**

2.7.2 Περίπτωση πεπερασμένου χημικού δυναμικού

Εάν θεωρήσουμε την ύπαρξη πεπερασμένου χημικού δυναμικού, δεν περιμένουμε να αλλάξουν ριζικά τα παραπάνω αποτελέσματα, εφόσον η πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων είναι εντοπισμένη στα σημεία van Hove. Θα ξεκινήσουμε από την εξίσωση αυτοσυνέπειας για τη μη-μαγνητική κατάσταση με μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$

$$M_{\mathbf{Q},2} = \frac{V_{\mathbf{Q},2}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_2(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} M_{\mathbf{Q},b}, \quad (2.55)$$

$$\simeq \frac{V_{\mathbf{Q},2}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_2(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \left\{ \frac{n_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} - \mu \frac{n'_F[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})] - n'_F[E_{+,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} \right\} M_{\mathbf{Q},b}, \quad (2.56)$$

όπου οι παράγωγοι της συνάρτησης Fermi-Dirac και οι συναρτήσεις Fermi-Dirac υπολογίζονται για μηδενικό χημικό δυναμικό. Στην ουσία γραμμικοποιούμε ως προς το χημικό δυναμικό. Όπως είδαμε προηγουμένως, η συγκεκριμένη αναπαράσταση είναι η κυρίαρχη για μηδενικό χημικό δυναμικό και γι' αυτό μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οποιαδήποτε επιπρόσθετη συνεισφορά από το χημικό δυναμικό οδηγεί σε μίξη με άλλες μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις. Θεωρώντας επίσης το όριο των χαμηλών θερμοκρασιών, προκύπτει

$$M_{\mathbf{Q},2} \simeq \frac{V_{\mathbf{Q},2}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma,b} f_2(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k}) \frac{\delta_{b,2} + \mu \delta[-E_\sigma(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})} M_{\mathbf{Q},b}. \quad (2.57)$$

Παρατηρούμε ότι λόγω της συνάρτησης $\delta[-E_\sigma(\mathbf{k})]$ το άθροισμα περιορίζεται στα σημεία $(\pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{\pi}{2})$. Κατά συνέπεια, εάν γίνεται μίξη με κάποια από τις δυνατές αναπαραστάσεις $b = 1, 3, 4$, θα καθοριστεί από τα γινόμενα $f_2(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k})$ σε αυτά τα σημεία. Λόγω του ότι αναπαράσταση μηδενίζεται σε αυτά τα σημεία, δεν υπάρχει μίξη με άλλες αναπαραστάσεις για 'μικρές' τιμές του χημικού δυναμικού.

2.7.3 Περίπτωση πεπερασμένου μαγνητικού πεδίου Zeeman

Ακολουθώντας παρόμοια βήματα με τα παραπάνω, θα μελετήσουμε την επίδραση ενός πεδίου Zeeman στην εξίσωση αυτοσυνέπιας των μαγνητικών και μη καταστάσεων $d_{x^2-y^2}$, όπου θα αγνοήσουμε την οποιαδήποτε ανάμιξη άλλων αναπαραστάσεων και θα χρησιμοποιήσουμε το όριο των χαμηλών θερμοκρασιών. Έχουμε λοιπόν,

$$M_{\mathbf{Q},2} = \frac{V_{\mathbf{Q},2}^s}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma} [f_s(\mathbf{k})]^2 \frac{M_{\mathbf{Q},2} + \mu_B \mathcal{B}_z M_{\mathbf{Q},2}^z \delta[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})}, \quad (2.58)$$

$$M_{\mathbf{Q},2}^z = \frac{V_{\mathbf{Q},2}^t}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k},\sigma} [f_s(\mathbf{k})]^2 \frac{M_{\mathbf{Q},2}^z + \mu_B \mathcal{B}_z M_{\mathbf{Q},2} \delta[E_{-,\sigma}(\mathbf{k})]}{2E_\sigma(\mathbf{k})}. \quad (2.59)$$

Αντίστοιχα με προηγούμενη παράγραφο, μπορούμε να απλοποιήσουμε το παραπάνω σύστημα, εισάγοντας τα αθροίσματα I_2 και I_2^z που εξαρτώνται φυσικά από τις παραμέτρους τάξης. Το σύστημα παίρνει τη μορφή

$$\left(\frac{1}{V_{\mathbf{Q},2}^s} - I_2 \right) M_{\mathbf{Q},2} - \mu_B \mathcal{B}_z I_2^z M_{\mathbf{Q},2}^z = 0, \quad (2.60)$$

$$-\mu_B \mathcal{B}_z I_2^z M_{\mathbf{Q},2} + \left(\frac{1}{V_{\mathbf{Q},2}^t} - I_2 \right) M_{\mathbf{Q},2}^z = 0. \quad (2.61)$$

Εάν, απουσία πεδίου, θεωρήσουμε ότι είχε σχηματιστεί η μη-μαγνητική κατάσταση $M_{\mathbf{Q},2}$, τότε μπορούμε να αγνοήσουμε τη σύζευξη με τη μαγνητική παράμετρο τάξης στην πρώτη εξίσωση, και κατά συνέπεια θα πρέπει να ισχύει $I_2 = \frac{1}{V_{\mathbf{Q},2}^s}$. Από την δεύτερη εξίσωση προκύπτει ότι η μαγνητική κατάσταση, αναγκαστικά επάγεται από τη μη-μαγνητική [208, 209, 210, 211] και έχει την ακόλουθη τιμή

$$M_{\mathbf{Q},2}^z = \frac{V_{\mathbf{Q},2}^s V_{\mathbf{Q},2}^t I_2^z}{V_{\mathbf{Q},2}^s - V_{\mathbf{Q},2}^t} \mu_B \mathcal{B}_z M_{\mathbf{Q},2}. \quad (2.62)$$

Εάν θεωρήσουμε ότι $V_{\mathbf{Q},2}^s \gg V_{\mathbf{Q},2}^t$, τότε $M_{\mathbf{Q},2}^z = V_{\mathbf{Q},2}^t I_2^z \mu_B \mathcal{B}_z M_{\mathbf{Q},2}$ και το μέγεθος της παραμέτρου τάξης προσδιορίζεται κατά κύριο λόγο από το άθροισμα I_2^z . Όπως και στην περίπτωση του χημικού δυναμικού, έτσι και εδώ το I_2^z υπολογίζεται στα σημεία Fermi, όπου γνωρίζουμε ότι η $d_{x^2-y^2}$ αναπαράσταση μηδενίζεται. Κατά συνέπεια και σε αυτήν την περίπτωση δεν υπάρχει επαγωγή κάποιας κατάστασης για μικρά μαγνητικά πεδία.

2.7.4 Δημιουργία ενεργειακού χάσματος σε όλη τη ζώνη Brillouin

Έχοντας δημιουργήσει ένα μη Συμβατικό Κύμα Πυκνότητας τύπου $d_{x^2-y^2}$, έχουμε καταφέρει να δημιουργήσουμε χάσμα σε όλα τα σημεία της ζώνης Brillouin, εκτός από τα σημεία Fermi. Είναι λοιπόν το σύστημα να θέλει να δημιουργήσει ένα χάσμα και σε αυτά τα σημεία, φυσικά όμως χωρίς να σπαταλήσει πολλή ενέργεια, μιας και αυτά τα σημεία χαρακτηρίζονται από πολύ μικρή πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων. Οι αναπαραστάσεις που δεν μηδενίζονται σε αυτά τα σημεία, είναι οι $f_0(\mathbf{k}) = 1$, $f_3(\mathbf{k}) = \sin k_x + \sin k_y$, $f_4(\mathbf{k}) = \sin k_x - \sin k_y$ και $f_6(\mathbf{k}) = 2 \sin k_x \sin k_y$. Παρόλο που υπάρχουν τέσσερεις δυνατές περιπτώσεις, οι μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις $f_{3,4}(\mathbf{k})$ είναι περιττές κάτω από το μετασχηματισμό $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$, με αποτέλεσμα να μετατοπίζουν τα σημεία Fermi και όχι να τα εξαλείφουν. Καταλήγουμε λοιπόν στην ιστροπική και την d_{xy} . Όπως ήδη αναφέραμε, το σύστημα θα προτιμήσει να αναπτύξει την παράμετρο τάξης η οποία θα είναι πιο οικονομική. Παρ'ολ' αυτά, λόγω του ότι τα ιδιάζοντα σημεία van Hove έχουν ενεργειακό χάσμα που δημιουργείται από την $d_{x^2-y^2}$, είναι πιο εύκολο να βρούμε λύσεις που να ικανοποιούν τα κριτήρια σε σχέση με τις προηγούμενες περιπτώσεις που εξετάσαμε. Συνεπώς οι δύο καταστάσεις $s + id_{x^2-y^2}$ και $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$, αποτελούν πιθανές θεμελιώδεις καταστάσεις του συγκεκριμένου μοντέλου. **Παρ'ολ' αυτά, μόνο η δεύτερη περίπτωση αντιστοιχεί σε μία τοπολογική κατάσταση.** Φυσικά δεν πρέπει να ξεχνάμε ότι έχουμε ήδη περιοριστεί μόνο σε κύματα πυκνότητας, αγνοώντας άλλες πιθανές καταστάσεις τάξεως. Είναι λοιπόν σκόπιμο μελλοντικά να αναλυθεί το διάγραμμα φάσης συμπεριλαμβάνοντας και άλλες καταστάσεις τάξεως.

Πρέπει να σημειώσουμε ότι στα πλαίσια του σεναρίου van Hove, η d_{xy} ήταν λόγω συμμετρίας αδύνατο να εμφανιστεί. Αυτό όμως αφορούσε την περίπτωση όπου θα ήταν η μοναδική κυρίαρχη κατάσταση τάξης. Αυτό αναιρείται παρουσία της $d_{x^2-y^2}$. Έτσι η 'μηδενική' κρίσιμη θερμοκρασία που θα είχε η παράμετρος τάξης d_{xy} , εάν εμφανιζόταν μόνη της, γίνεται πεπερασμένη όταν σχηματίζεται η $d_{x^2-y^2}$. Φυσικά, η κρίσιμη θερμοκρασία της d_{xy} παραμένει σαφώς μικρότερη της κρίσιμης θερμοκρασίας της επικρατούσας παραμέτρου τάξης $d_{x^2-y^2}$. Συγκεκριμένα η εξίσωση αυτοσυνέπεια γίνεται,

$$\frac{1}{V_{\mathbf{Q},6}^{s,t}} = \frac{1}{(N/2)} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}} \sum_{\sigma} [f_6(\mathbf{k})]^2 \frac{n_F[E_{-, \sigma}(\mathbf{k})] - n_F[E_{+, \sigma}(\mathbf{k})]}{2E_{\sigma}(\mathbf{k})}, \quad (2.63)$$

όπου έχουμε θέσει την d_{xy} παράμετρο τάξης ίση με μηδέν και έχουμε κρατήσει την $id_{x^2-y^2}$ πεπερασμένη. Φυσικά, εννοείται πως η δεύτερη παράμετρος τάξης έχει αρχικά υπολογισθεί αυτοσυνεπώς χωρίς να συμπεριλαμβανουμε την επίδραση της d_{xy} σε αυτήν. Στην περίπτωσή μας, αυτή είναι μία καλή προσέγγιση. Η παράμετρος τάξης $d_{x^2-y^2}$ εξαρτάται από την θερμοκρασία και βέβαια το ενεργό δυναμικό από το οποίο προήλθε. Επειδή αναμένουμε όμως να είναι πολύ μεγαλύτερη της d_{xy} και η δεύτερη να εμφανίζεται σε κρίσιμη θερμοκρασία κατά πολύ μικρότερης της πρώτης, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι η παράμετρος τάξης είναι ανεξάρτητη της θερμοκρασίας, γιατί περιοχή όπου υπάρχει η d_{xy} . Με αυτές τις προσεγγίσεις μπορούμε να δούμε πώς μεταβάλλεται η επιδεικτικότητα (το δεξί μέλος της εξίσωσης) και κατά συνέπεια η κρίσιμη θερμοκρασία της d_{xy} καθώς μεταβάλλεται η παράμετρος τάξης της $id_{x^2-y^2}$. Σε χαμηλές θερμοκρασίες μπορούμε να θεωρήσουμε $n_F[E_{-, \sigma}(\mathbf{k})] = 1$ και $n_F[E_{+, \sigma}(\mathbf{k})] = 0$. Επιπλέον γνωρίζουμε ότι υπάρχουν 4 σημεία Fermi που λόγω του ότι είμαστε στην ανηγμένη ζώνη Brillouin, είναι ανά δύο ανεξάρτητα. Μπορούμε να περιοριστούμε σε ένα σημείο Fermi όπου η ενεργειακή διασπορά είναι γραμμική

γύρω από αυτήν. Έτσι λοιπόν $E_\sigma(\mathbf{k}) = c\kappa$, με κ το μέτρο του κυματανύσματος γύρω από το σημείο Fermi. Η παραπάνω εξίσωση, ξαναγράφεται υπό αυτές τις προσεγγίσεις ως

$$\frac{1}{V_{\mathbf{Q},6}^{s,t}} = \frac{2K}{c}, \quad (2.64)$$

όπου εισαγάγαμε το κατώφλι κυματανύσματος K . Η ταχύτητα c είναι αυτή που περιέχει το μέτρο της παραμέτρου τάξης $d_{x^2-y^2}$ και συγκεκριμένα ισχύει $c = \frac{\sqrt{2}d_{x^2-y^2}}{t} + \frac{t}{\sqrt{2}d_{x^2-y^2}}$.

2.7.5 Διάγραμμα φάσης Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

Από την παραπάνω μελέτη, έχουμε ήδη επισημάνει, ότι οι καταστάσεις όπου συνυπάρχουν οι αναπαράστασεις d_{xy} και $d_{x^2-y^2}$ είναι τοπολογικές, μία έννοια την οποία σκοπεύουμε να διασαφηνίσουμε στο επόμενο κεφάλαιο. Έτσι λοιπόν υπάρχουν τέσσερις δυνατές τοπολογικές καταστάσεις μη Συμβατικών μαγνητικών ή μη Κυμάτων Πυκνότητας, που θα παριστάνουμε ως εξής

- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$: $V_{\mathbf{Q},6}^s = \left(\frac{3J''}{4} + V''\right) + \left(\frac{3\mathcal{J}''}{4} - \mathcal{V}''\right)$, $V_{\mathbf{Q},2}^s = \left(\frac{3J'}{4} + V'\right) - \left(\frac{3\mathcal{J}'}{4} - \mathcal{V}'\right)$,
- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}^z$: $V_{\mathbf{Q},6}^s = \left(\frac{3J''}{4} + V''\right) + \left(\frac{3\mathcal{J}''}{4} - \mathcal{V}''\right)$, $V_{\mathbf{Q},2}^t = \left(V' - \frac{J'}{4}\right) - \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}\right)$,
- $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}$: $V_{\mathbf{Q},6}^t = \left(V'' - \frac{J''}{4}\right) + \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4}\right)$, $V_{\mathbf{Q},2}^s = \left(\frac{3J'}{4} + V'\right) - \left(\frac{3\mathcal{J}'}{4} - \mathcal{V}'\right)$,
- $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$: $V_{\mathbf{Q},6}^t = \left(V'' - \frac{J''}{4}\right) + \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4}\right)$, $V_{\mathbf{Q},2}^t = \left(V' - \frac{J'}{4}\right) - \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}\right)$.

Με τον πάνω δείκτη z , διακρίνουμε τις μαγνητικές καταστάσεις. Σύμφωνα με τις προηγούμενες παραγράφους, αναμένουμε τις παράμετρος τάξης με αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$ να είναι κυρίαρχες και οι παράμετροι τάξης με αναπαράσταση d_{xy} να υπολείπονται σημαντικά. Παρ'ολ' αυτά οι τοπολογικές ιδιότητες δεν εξαρτώνται από τα μεγέθη κι έτσι το σημαντικό είναι ο σχηματισμός της συνυπάρχουσας κατάστασης με οποιοδήποτε συνδυασμό τιμών. Και σε αυτήν την περίπτωση, ισχύει ότι οι μαγνητικές και οι μη μαγνητικές καταστάσεις της ίδιας αναπαράστασης δεν μπορούν να συνυπάρχουν. Έτσι λοιπόν, με βάση τα παραπάνω δυναμικά, είναι εύκολο να εξάγουμε το διάγραμμα φάσης συναρτήσει των δυναμικών για τα Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας. Θα μελετήσουμε ξεχωριστά τις αναπαράστασεις $d_{x^2-y^2}$ και d_{xy} αφού τα δυναμικά τους είναι διαφορετικά και αυτές ανεξάρτητες.

Ξεκινώντας από τις μαγνητικές και μη καταστάσεις με μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$, παρατηρούμε ότι το δυναμικά μπορούν να γραφούν πιο βολικά

$$V_{\mathbf{Q},2}^s = \left(V' - \frac{J'}{4}\right) + \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}\right) + J', \quad (2.65)$$

$$V_{\mathbf{Q},2}^t = \left(V' - \frac{J'}{4}\right) - \left(\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}\right). \quad (2.66)$$

Σύμφωνα με τη σύμβαση του δυναμικού που έχουμε ορίσει, το θετικό δυναμικό ευνοεί τον σχηματισμό της κατάστασης. Παρατηρούμε ότι ο ανταγωνισμός των δύο αυτών καταστάσεων καθορίζεται μονάχα από τους όρους J' και $\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{4}$. Μάλιστα παρατηρούμε ότι οι όροι που προκύπτουν από τη μεταπήδηση ζευγών Cooper σε κοντινότερους γείτονες είναι πάντοτε κύριοι ρυθμιστές του ποια κατάσταση θα επιβληθεί, διότι έχουν αντίθετο πρόσημο. Ο ανταγωνισμός των δύο καταστάσεων καθορίζεται από τη σχετική

διαφορά τους $V_{\mathbf{Q},2}^s - V_{\mathbf{Q},2}^t = (2\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{2}) + J'$. Θεωρώντας ότι τα δυναμικά $V' - \frac{J'}{4}$ είναι τέτοια ώστε να επιτρέπουν την εμφάνιση και των δύο καταστάσεων, θα υπερτερήσει αυτή με το μεγαλύτερο δυναμικό. Έτσι λοιπόν, υπάρχει μία γραμμή εκφυλισμού ή συμμετρίας στο διάγραμμα φάσης των δυναμικών με εξίσωση $(2\mathcal{V}' - \frac{3\mathcal{J}'}{2}) + J' = 0$, η οποία αποτελεί οριακή περίπτωση και στην οποία συνυπάρχουν και οι δύο με ίσο μέγεθος. Πάνω από αυτήν τη γραμμή σχηματίζεται η μη μαγνητική κατάσταση και κάτω από αυτήν, η μαγνητική.

Προχωρούμε τώρα στην αναπαράσταση d_{xy} . Κι εδώ τα δυναμικά μπορούν γραφούν με τον ακόλουθο διαφωτιστικό τρόπο

$$V_{\mathbf{Q},6}^s = \left(V'' - \frac{J''}{4} \right) - \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4} \right) + J'', \quad (2.67)$$

$$V_{\mathbf{Q},6}^t = \left(V'' - \frac{J''}{4} \right) + \left(\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{4} \right). \quad (2.68)$$

όπου η μόνη αλλαγή που παρατηρούμε είναι στον αντίθετο ρόλο που παίζουν τα δυναμικά \mathcal{V}'' , \mathcal{J}'' . Τα ίδια ακριβώς επιχειρήματα ισχύουν και σε αυτήν την περίπτωση. Η γραμμή εκφυλισμού παρουσιάζεται για $-(2\mathcal{V}'' - \frac{3\mathcal{J}''}{2}) + J'' = 0$. Λόγω των σαφώς καθορισμένων περιοχών σχηματισμών των μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων μπορούμε εύκολα να επιλέξουμε τα δυναμικά για τον σχηματισμό της επιθυμητής κατάστασης.

2.8 Κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους κατάστασης

Στο προηγούμενο υποκεφάλαιο, προσδιορίσαμε τα δυνατά Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, που μπορούν να προκύψουν με σημείο εκκίνησης το συγκεκριμένο εκτεταμένο μοντέλο Hubbard. Σε αυτό το μέρος θα εξετάσουμε τα χαρακτηριστικά της κυματοσυνάρτησης των πολλών σωματιδίων που προκύπτει κατά το σχηματισμό αυτών των τοπολογικών καταστάσεων. Προηγουμένως βρήκαμε ότι για κάθε προβολή του σπιν, σ , η Χαμιλτονιανή έχει δύο ιδιοκαταστάσεις με ενεργειακές διασπορές $E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})$ όπου $\nu = \pm$. Οι τελεστές καταστροφής αυτών των καταστάσεων, μπορούν να εκφραστούν ως συνάρτηση των αρχικών ηλεκτρονικών τελεστών δημιουργίας και καταστροφής με τον ακόλουθο τρόπο

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k},\sigma} \\ \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\sigma}^*(\mathbf{k}) & v_{\sigma}^*(\mathbf{k}) \\ -v_{\sigma}(\mathbf{k}) & u_{\sigma}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \end{pmatrix}. \quad (2.69)$$

Για τα \mathbf{k} τα οποία $E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) > 0$ οι τελεστές $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}$ και $\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$ θα πρέπει να δίνουν το μηδενικό στοιχείο του χώρου Hilbert όταν δρουν στη θεμελιώδη κατάσταση $|gs\rangle$. Δηλαδή $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}|gs\rangle = 0$ και $\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}|gs\rangle = 0$, επειδή αυτές οι θέσεις δεν είναι κατειλημμένες. Αντίθετα, αν $E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) < 0$ τότε αυτές οι θέσεις είναι κατειλημμένες και θα πρέπει να ισχύει $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}|gs\rangle = 0$ και $\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^{\dagger}|gs\rangle = 0$. Εάν $E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) = 0$ τότε μπορούμε να δημιουργήσουμε ή να καταστρέψουμε κάποιο σωματίδιο χωρίς κόστος, οπότε είτε ο τελεστής δημιουργίας ή ο τελεστής καταστροφής, δίνει μηδέν όταν δρα στη θεμελιώδη κατάσταση.

Λόγω του ότι οι παράμετροι τάξης των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας που εξετάζουμε δεν περιλαμβάνουν την ισοτροπική $f_0(\mathbf{k}) = 1$ αναπαράσταση, εμφανίζουν πάντοτε δύο σημεία μηδενισμού για κάθε προβολή του σπιν. Αυτά είναι τα $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ και $\mathbf{k} = (2\pi, 2\pi)$, διότι σε αυτά οι αναπαραστάσεις $f_2(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y$ και $f_6(\mathbf{k}) = 2 \sin k_x \sin k_y$ μηδενίζονται ταυτόχρονα. Παρ' όλ' αυτά, επειδή τα δύο αυτά σημεία διαφέρουν κατά ένα διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος, δεν είναι ανεξάρτητα, με αποτέλεσμα να μπορούμε να κρατήσουμε το ένα από αυτά. Έστω λοιπόν ότι κρατάμε το $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Εφόσον σε αυτό το σημείο η παράμετρος τάξης είναι μηδέν, το ηλεκτρόνιο που ορίζεται σε αυτό το σημείο δεν

συμμετέχει στον σχηματισμό της κατάστασης τάξης. Εάν αυτή η κατάσταση θα είναι κατειλημμένη ή όχι καθορίζεται απλά από την ενέργειά της, που ισούται με $\varepsilon(\mathbf{0}) - \mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z = -(2t + \mu + \sigma\mu_B\mathcal{B}_z)$. Στις περιπτώσεις που εξετάζουμε, η ενέργεια μεταπήδησης στους κοντινότερους γείτονες t , θα είναι πάντα μεγαλύτερη από την απόλυτη τιμή $|\mu + \sigma\mu_B\mathcal{B}_z|$, ώστε η κατάσταση $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ και για τις δύο προβολές του σπιν να είναι κατειλημμένη.

Για τη θεμελιώδη κατάσταση [7, 203], θα υποθέσουμε την μορφή

$$|gs\rangle = \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \prod_{\sigma=\pm} \left[A_\sigma(\mathbf{k}) + B_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + \Gamma_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right] |FS\rangle, \quad (2.70)$$

όπου $\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}$ και $|FS\rangle$ η θεμελιώδης κατάσταση του ελεύθερου (μη συμπυκνωμένου) συστήματος. Η συγκεκριμένη κατάσταση προκύπτει από τις κατειλημμένες ηλεκτρονικές καταστάσεις του συστήματος μέχρι την ενέργεια Fermi. Με αντίστοιχο τρόπο λοιπόν $c_{\mathbf{k},\sigma}|FS\rangle = 0$ ($c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}|FS\rangle = 0$) εάν $\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z > 0$ ($-\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z > 0$) ή $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger|FS\rangle = 0$ ($c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger|FS\rangle = 0$) στις αντίθετες περιπτώσεις. Εάν λοιπόν θεωρήσουμε την περίπτωση όπου η μονοσωματιδιακή κατάσταση $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ του ελεύθερου συστήματος είναι κατειλημμένη τότε $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger|FS\rangle = 0$ και ταυτόχρονα η $|\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma\rangle$ είναι μη κατειλημμένη, τότε $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}|FS\rangle = 0$, η $|FS\rangle$ παίρνει την ακόλουθη απλή μορφή

$$|FS\rangle = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}, \sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger |0\rangle, \quad (2.71)$$

όπου στα \mathbf{k} συμπεριλάβαμε και το $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ που θεωρείται πάντα μία κατειλημμένη κατάσταση στις περιπτώσεις που εξετάζουμε, ενώ η κατάσταση $|0\rangle$ είναι η κατάσταση του κενού που δεν έχει καμία μονοσωματιδιακή κατάσταση κατειλημμένη και ισχύει $c_{\mathbf{k},\sigma}|0\rangle = 0$ για κάθε $\mathbf{k} \in \mathcal{B.Z.}$. Μάλιστα, θεωρώντας ότι η $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ είναι κατειλημμένη, είναι λογικό ότι θα έχουμε περισσότερες κατειλημμένες καταστάσεις \mathbf{k} παρά $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$, λόγω της συνέχειας της ενεργειακής διασποράς.

Επιστρέφουμε πάλι στην θεμελιώδη κατάσταση των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας. Παρακάτω παραθέτουμε το αποτέλεσμα της δράσης των τελεστών $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}$ και $\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger$ στην δοκιμαστική γενική μορφή της $|gs\rangle$

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k},\sigma} |gs\rangle &= \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \prod_{\sigma=\pm} \left[A_\sigma(\mathbf{k}') + B_\sigma(\mathbf{k}')c_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q},\sigma} + \Gamma_\sigma(\mathbf{k}')c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} \right] \\ &\times \left\{ \left[u_\sigma^*(\mathbf{k})A_\sigma(\mathbf{k}) + v_\sigma^*(\mathbf{k})\Gamma_\sigma(\mathbf{k}) - v_\sigma^*(\mathbf{k})\Gamma_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \right] c_{\mathbf{k},\sigma} \right. \\ &\left. + \left[v_\sigma^*(\mathbf{k})A_\sigma(\mathbf{k}) + u_\sigma^*(\mathbf{k})B_\sigma(\mathbf{k}) - u_\sigma^*(\mathbf{k})B_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right] c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \right\} |FS\rangle, \quad (2.72) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger |gs\rangle &= \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \prod_{\sigma=\pm} \left[A_\sigma(\mathbf{k}') + B_\sigma(\mathbf{k}')c_{\mathbf{k}',\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q},\sigma} + \Gamma_\sigma(\mathbf{k}')c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma} \right] \\ &\times \left\{ \left[-v_\sigma^*(\mathbf{k})A_\sigma(\mathbf{k}) - u_\sigma^*(\mathbf{k})B_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \right] c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right. \\ &\left. + \left[u_\sigma^*(\mathbf{k})A_\sigma(\mathbf{k}) + v_\sigma^*(\mathbf{k})\Gamma_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right] c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \right\} |FS\rangle. \quad (2.73) \end{aligned}$$

Εάν τώρα θεωρήσουμε την περίπτωση όπου η κατάσταση $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ του μη συμπυκνωμένου συστήματος είναι κατειλημμένη τότε $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger|FS\rangle = 0$ και ταυτόχρονα η $|\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma\rangle$ ακατάλυτη, τότε $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}|FS\rangle = 0$ και η θεμελιώδης κατάσταση γίνεται

$$|gs\rangle = \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \prod_{\sigma=\pm} \left[A_\sigma(\mathbf{k}) + \Gamma_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \right] |FS\rangle, \quad (2.74)$$

διότι ο όρος $B_\sigma(\mathbf{k})c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$ δρα στην $|FS\rangle = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}, \sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger |0\rangle$ και δίνει μηδέν. Επιπλέον, ο τελεστής αρίθμησης $c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$ δρώντας στην $|FS\rangle$ δίνει μηδέν γιατί καμία τέτοια θέση δεν είναι κατειλημμένη, ενώ αντίθετα $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} |FS\rangle = 1|FS\rangle$. Κατ' αυτόν τον τρόπο, η δράση του $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}$ στην $|gs\rangle$ απλοποιείται ως εξής

$$\gamma_{\mathbf{k},\sigma} |gs\rangle = \prod_{\mathbf{k}' \neq \mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \prod_{\sigma=\pm} [A_\sigma(\mathbf{k}') + \Gamma_\sigma(\mathbf{k}') c_{\mathbf{k}'+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}',\sigma}] [u_\sigma^*(\mathbf{k}) A_\sigma(\mathbf{k}) + v_\sigma^*(\mathbf{k}) \Gamma_\sigma(\mathbf{k})] c_{\mathbf{k},\sigma} |FS\rangle. \quad (2.75)$$

Για να ισχύει $\gamma_{\mathbf{k},\sigma} |gs\rangle = 0$, θα πρέπει να ικανοποιηθεί η συνθήκη $u_\sigma^*(\mathbf{k}) A_\sigma(\mathbf{k}) + v_\sigma^*(\mathbf{k}) \Gamma_\sigma(\mathbf{k}) = 0$. Επιλέγουμε μία συγκεκριμένη μορφή για τις παραμέτρους της κυματοσυνάρτησης και προκύπτει τελικά πως

$$|gs\rangle = \prod_{\mathbf{k} \neq \mathbf{0}} \prod_{\sigma=\pm} [v_\sigma^*(\mathbf{k}) - u_\sigma^*(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}] |FS\rangle. \quad (2.76)$$

Η ικανοποίηση της παραπάνω συνθήκης οδηγεί αναγκαστικά στη σχέση $\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger |gs\rangle = 0$, η οποία δηλώνει ότι η μονοσωματιδιακή κατάσταση $|\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma\rangle$ είναι κατειλημμένη.

3 Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

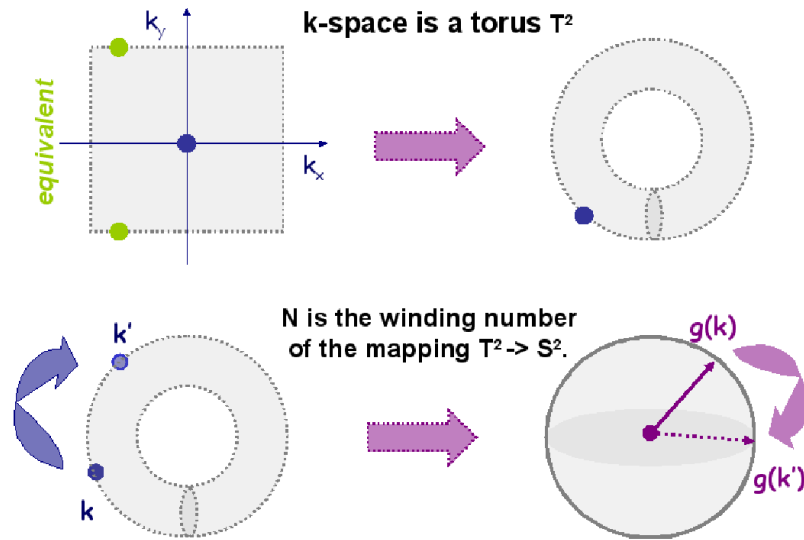
Στο προηγούμενο κεφάλαιο, μελετήσαμε κάποιες γενικές ιδιότητες των μη συμβατικών Κυμάτων Πυκνότητας φορτίου και Σπιν, καθώς επίσης διακρίναμε τις καταστάσεις που αναμένεται να κυριαρχούν στο διάγραμμα φάσης μη συμβατικών υπεραγωγών που περιγράφονται από το μικροσκοπικό μας μοντέλο. Συγκεκριμένα καταλήξαμε στο ότι ευνοείται ο σχηματισμός καταστάσεων της μορφής $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ τις οποίες έχουμε ήδη χαρακτηρίσει ως τοπολογικές, χωρίς παρ'ολ' αυτά να το αναλύσουμε σε βάθος. Σε αυτό το κεφάλαιο, θα δώσουμε τον ορισμό της τοπολογικής κατάστασης και θα αναδείξουμε τα τοπολογικά χαρακτηριστικά των υπό εξέταση καταστάσεων. Θα σταθούμε συγκεκριμένα στην εισαγωγή τοπολογικά αναλλοίωτων ποσοτήτων καθώς και στη δυνατότητα Τοπολογικών Κβαντικών Μεταβάσεων Φάσης στα συγκεκριμένα συστήματα. Τέλος, θα μελετήσουμε τη συμπεριφορά αυτών των καταστάσεων στο σύνορο του υλικού στο οποίο εμφανίζονται, αναδεικνύοντας την ύπαρξη φερμιονικών πεδίων μηδενικής ενέργειας (edge modes). Η ύπαρξη του τοπολογικού αναλλοίωτου είναι σημαντική για την ευστάθεια αυτών των πεδίων.

3.1 Τοπολογικό αναλλοίωτο

Η έννοια της τοπολογικής κατάστασης συνδέεται με την ύπαρξη πεπερασμένων ποσοτήτων οι οποίες καλούνται τοπολογικά αναλλοίωτες. Ονομάζονται έτσι, διότι δεν εξαρτώνται από τις λεπτομέρειες της Χαμιλτονιανής, αλλά από μόνο από γενικά χαρακτηριστικά όπως είναι η διάσταση του χωροχρόνου. Συνεπώς, αναμένουμε να υπάρχουν διάφορα ήδη τοπολογικών αναλλοίωτων ποσοτήτων που μπορούμε να ορίσουμε ανάλογα την περίπτωση. Στην δική μας περίπτωση ο χώρος έχει δύο χωρικές διαστάσεις και μπορούμε να ορίσουμε το τοπολογικό αναλλοίωτο μέγεθος [212]

$$\tilde{\mathcal{N}} = \frac{1}{8\pi} \int dk_x dk_y \varepsilon_{ij} \varepsilon_{lmn} \hat{g}_l(\mathbf{k}) \frac{\partial \hat{g}_m(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \hat{g}_n(\mathbf{k})}{\partial k_j} = \frac{1}{4\pi} \int dk_x dk_y \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right), \quad (3.1)$$

όπου $\hat{\mathbf{g}}$ ένα μοναδιαίο διάνυσμα, συνάρτηση του κυματανύσματος \mathbf{k} σε έναν εσωτερικό χώρο. Παραπάνω εισάγαμε τα πλήρως αντισυμμετρικά σύμβολα Levi-Civita και θεωρήσαμε άθροιση στους επαναλαμβανόμενους δείκτες. Η παραπάνω ποσότητα είναι αναλλοιώτη εάν μεταβάλλουμε το διάνυσμα $\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k}) \rightarrow \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k}) + \delta \hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k})$ [213]. Θεωρώντας ότι το διάνυσμα $\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k})$ λαμβάνει την ίδια τιμή στο σύνορο του χώρου \mathbf{k} , κάθε συνοριακό σημείο γίνεται ισοδύναμο και ο χώρος μετατρέπεται σε συμπαγή. Έτσι λοιπόν σε αυτήν την περίπτωση έχουμε τον χώρο τον \mathbf{k} να μετατρέπεται σε μία σφαίρα ($\mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow S^2$). Το τοπολογικό αναλλοίωτο $\tilde{\mathcal{N}}$ είναι ο αριθμός που απεικονίζει την σφαίρα του χώρου των ορμών στη σφαίρα που σχηματίζει το διάνυσμα $\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k})$ αφού έχει σταθερό μέτρο [214]. Η απεικόνιση αυτή, είναι ένας αριθμός που μας λέει πόσες φορές θα σαρωθεί η επιφάνεια της σφαίρας του διανύσματος $\hat{\mathbf{g}}(\mathbf{k})$, όταν θα σαρώσουμε μία φορά την σφαίρα του χώρου των \mathbf{k} . Αυτός ο αριθμός δεν μπορεί να είναι παρά ένας ακέραιος και ονομάζεται αριθμός περιέλιξης (winding number). Φυσικά στην περίπτωση των κρυσταλλικών συστημάτων, ο χώρος είναι ήδη συμπαγής, αφού η 1η ζώνη Brillouin αποτελεί μία τοροειδή επιφάνεια (Σχ.3.1), λόγω του



Σχήμα 3.1: Η 1η ζώνη Brillouin αποτελεί μία τοροειδή διδιάστατη επιφάνεια, διότι σημεία του χώρου \mathbf{k} που συνδέονται με ένα διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος είναι ισοδύναμα. Το τοπολογικό αναλλοίωτο \tilde{N} είναι ένας ακέραιος, και αποτελεί μία απεικόνιση της τοροειδούς επιφάνειας στη σφαίρα που διαγράφει το μοναδιαίο διάνυσμα $\hat{g}(\mathbf{k})$.

ότι σημεία του χώρου \mathbf{k} που διαφέρουν κατά ένα διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος είναι ισοδύναμα [207]. Πρέπει να σημειώσουμε ότι το παραπάνω τοπολογικό αναλλοίωτο ορίζεται για διανύσματα $\hat{g}(\mathbf{k})$ με μοναδιαίο, άρα μη μηδενικό μέτρο. Η συγκεκριμένη ιδιότητα θέτει περιορισμούς στα εν δυνάμει τοπολογικά συστήματα και όπως θα δούμε μεταφράζεται στην ύπαρξη ενός χάσματος στις μονοδωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος.

Έχοντας εισάγει το παραπάνω τοπολογικό αναλλοίωτο ή όπως πολλές φορές αποκαλείται τοπολογικό φορτίο, μπορούμε να ορίσουμε ως **Τοπολογική Κατάσταση**, αυτήν για την οποία το παραπάνω Τοπολογικό Αναλλοίωτο είναι πεπερασμένο. Η ύπαρξη του τοπολογικού αναλλοίωτου είναι σημαντική, διότι σε μηδενική θερμοκρασία όλες οι ποσότητες που χαρακτηρίζουν την απόκριση του συστήματος σχετίζονται με αυτήν και είναι χβαντισμένες. Μάλιστα, όπως θα δούμε και στο επόμενο κεφάλαιο, στο όριο των μικρών κυματανυσμάτων και χαμηλών συχνοτήτων, οι τοπολογικές καταστάσεις μπορούν να περιγραφούν με **Τοπολογικές Θεωρίες Πεδίου** [213]. Για μη μηδενικές θερμοκρασίες, οι τοπολογικές ιδιότητες δεν χάνονται, αλλά τα μεγέθη σταματούν πλέον να είναι χβαντισμένα. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί η εκδήλωση του χβαντικού φαινομένου Hall [215]. Η παρουσία του εξωτερικά εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου κάθετα στην επιφάνεια ενός διδιάστατου υλικού, οδηγεί το παραπάνω τοπολογικό αναλλοίωτο σε πεπερασμένη τιμή, με αποτέλεσμα την χβάντωση της αγωγιμότητας Hall σε ακέραια πολλαπλάσια του $\frac{e^2}{h}$, όταν εφαρμόσουμε επιπρόσθετα ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο.

3.2 Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα της ανάλυσης για το διάγραμμα φάσης του προηγούμενο κεφαλαίου, καταλήξαμε στις ακόλουθες τέσσερις πιθανές θεμελιώδεις καταστάσεις

- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$: $M_{\mathbf{Q},6}^{\Re} \neq 0$ και $M_{\mathbf{Q},2}^{\Im} \neq 0$,
- $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$: $M_{\mathbf{Q},6}^{z,\Re} \neq 0$ και $M_{\mathbf{Q},2}^{z,\Im} \neq 0$,
- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}^z$: $M_{\mathbf{Q},6}^{\Re} \neq 0$ και $M_{\mathbf{Q},2}^{z,\Im} \neq 0$,
- $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}$: $M_{\mathbf{Q},6}^{z,\Re} \neq 0$ και $M_{\mathbf{Q},2}^{\Im} \neq 0$.

Μέσω της ανάλυσης που προηγήθηκε είδαμε ότι δεν είναι δυνατό να έχουμε συνύπαρξη μαγνητικών και μη μαγνητικών καταστάσεων, συνεπώς οι παραπάνω καταστάσεις αναμένεται να μην συνυπάρχουν. Κατ' αυτόν τον τρόπο μπορούμε να τις μελετήσουμε ξεχωριστά. Η γενική μορφή της Χαμιλτονιανής Μέσου Πεδίου που αντιστοιχεί σε αυτές τις καταστάσεις είναι

$$\mathcal{H}_{qp} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z + \varepsilon(\mathbf{k}) & [M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^* \\ M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) & -\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z - \varepsilon(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \end{pmatrix}, \quad (3.2)$$

όπου με τη βοήθεια των πινάκων Pauli του 'ισοσπιν' $\boldsymbol{\tau}$ και την εισαγωγή του ισοσπίνορα $\Psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \end{pmatrix}$, μπορεί να γραφεί με τον ακόλουθο συμπαγή τρόπο

$$\mathcal{H}_{qp} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma = \pm} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \left[-\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z + \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\tau} \right] \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}. \quad (3.3)$$

Παρατηρούμε ότι έχουμε δύο παρόμοια υποσυστήματα σπιν όπου έχουμε εισαγάγει τα διανύσματα στο χώρο του ισοσπιν

$$\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = \left([M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^\Re, [M_{\mathbf{Q}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k})]^\Im, \varepsilon(\mathbf{k}) \right), \quad (3.4)$$

και παράλληλα ορίσαμε το πραγματικό $^\Re$ και φανταστικό $^\Im$ μέρος των παραμέτρων τάξης. Αναλόγως την τοπολογική κατάσταση, τα διανύσματα αυτά παίρνουν τη μορφή

- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = \left(M_{\mathbf{Q},6} \sin k_x \sin k_y, M_{\mathbf{Q},2}(\cos k_x - \cos k_y), -2t(\cos k_x + \cos k_y) \right)$,
- $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = \left(\sigma M_{\mathbf{Q},6} \sin k_x \sin k_y, \sigma M_{\mathbf{Q},2}(\cos k_x - \cos k_y), -2t(\cos k_x + \cos k_y) \right)$,
- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}^z$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = \left(M_{\mathbf{Q},6} \sin k_x \sin k_y, \sigma M_{\mathbf{Q},2}(\cos k_x - \cos k_y), -2t(\cos k_x + \cos k_y) \right)$,
- $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = \left(\sigma M_{\mathbf{Q},6} \sin k_x \sin k_y, M_{\mathbf{Q},2}(\cos k_x - \cos k_y), -2t(\cos k_x + \cos k_y) \right)$,

ενώ οι μονοσωματιδιακές διεγέρσεις, δίνονται σε όλες τις περιπτώσεις από την ίδια σχέση

$$\begin{aligned} E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) &= -\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z + \nu |\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})| \\ &= -\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z + \nu \sqrt{M_{\mathbf{Q},6}^2 (\sin k_x \sin k_y)^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 (\cos k_x - \cos k_y)^2 + 4t^2 (\cos k_x + \cos k_y)^2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Εάν αγνοήσουμε το χημικό δυναμικό και το πεδίο Zeeman, η ενέργεια των μονοδωματιδιακών διεγέρσεων $E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})$ δίνεται από τα μέτρα $E_\sigma(\mathbf{k}) = |\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})|$, τα οποία στις υπό εξέταση περιπτώσεις ταυτίζονται. Λόγω της μορφής των παραμέτρων τάξης, τα μέτρα αυτών των διανυσμάτων δεν μηδενίζονται σε κανένα σημείο της 1ης ζώνης Brillouin. Συνεπώς μπορούμε να ορίσουμε για κάθε ένα από αυτά, τις τοπολογικά αναλλοίωτες ποσότητες

$$\tilde{\mathcal{N}}_\sigma = \frac{1}{4\pi} \int dk_x dk_y \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right). \quad (3.6)$$

Υπολογίζοντας την παραπάνω ποσότητα, μπορούμε να δούμε ότι είναι πράγματι μη μηδενική και στην κάθε τοπολογική κατάσταση έχουμε

- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ και $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$: $\tilde{\mathcal{N}}_\sigma = -1$,
- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ και $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$: $\tilde{\mathcal{N}}_\sigma = -\sigma$.

Παρατηρούμε ότι ανά δύο οι καταστάσεις αυτές είναι όμοιες τοπολογικά. Θα ονομάσουμε τις καταστάσεις με $\tilde{\mathcal{N}}_\sigma = -1$, **Χειρικές** (chiral) ή τροχιακούς σιδηρομαγνήτες (orbital ferromagnets) και τις καταστάσεις με $\tilde{\mathcal{N}}_\sigma = -\sigma$, **Ελικοειδείς** (helical). Οι ονομασίες συνδέονται άρρηκτα με τις τοπολογικές ιδιότητες που παρουσιάζουν οι δύο κατηγορίες καταστάσεων καθώς και τις συμμετρίες που αυτές παραβιάζουν ή όχι. Οι δύο εμπλεκόμενες συμμετρίες είναι η ομοτιμία στις δύο διαστάσεις \mathcal{P} που περιγράφεται από τον μετασχηματισμό $(k_x, k_y) \rightarrow (-k_x, k_y)$ (ανάκλαση) καθώς και η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} που περιγράφεται από τους μετασχηματισμούς $\sigma \rightarrow -\sigma$, $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ και τη μιγαδική συζυγία. Έτσι μία παράμετρος τάξης μετασχηματίζεται κάτω από την δράση των τελεστών της ομοτιμίας και της αντιστροφής του χρόνου με τον ακόλουθο τρόπο $\mathcal{P}M_\sigma(\mathbf{k})\mathcal{P}^{-1} = M_\sigma(-k_x, k_y)$ και $\mathcal{T}M_\sigma(\mathbf{k})\mathcal{T}^{-1} = M_{-\sigma}^*(-\mathbf{k})$. Μπορούμε να δούμε ότι στην περίπτωση των Χειρικών Κυμάτων Πυκνότητας, παραβιάζονται ταυτόχρονα και οι δύο συμμετρίες. Το αποτέλεσμα είναι η συγκεκριμένη κατάσταση να έχει πεπερασμένη μακροσκοπική εγγενή στροφορμή που κατευθύνεται κατά τον άξονα \hat{z} . Το τοπολογικό αναλλοίωτο είναι ένα μέτρο αυτής της στροφορμής και η μακροσκοπική παραβίαση της συμμετρίας της αντιστροφής του χρόνου απαιτεί $\tilde{\mathcal{N}}_+ \neq \tilde{\mathcal{N}}_-$. Αντίθετα, στην περίπτωση των Ελικοειδών Κυμάτων Πυκνότητας, παραβιάζεται μόνο η ομοτιμία, η οποία δεν είναι αρκετή ώστε να οδηγήσει σε πεπερασμένη στροφορμή. Συνεπώς, η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου διατηρείται και αυτό οδηγεί στον περιορισμό $\tilde{\mathcal{N}}_+ = -\tilde{\mathcal{N}}_-$.

Μελετώντας την ενεργειακή διασπορά, μπορούμε να αντιληφθούμε καλύτερα ποιά σημεία της ανηγμένης ζώνης Brillouin έχουν την κύρια συνεισφορά στο τοπολογικό αναλλοίωτο. Όπως έχουμε προαναφέρει, αναμένουμε την τιμή της αναπαράστασης d_{xy} να είναι μικρή σε σχέση με αυτήν της αναπαράστασης $d_{x^2-y^2}$. Έτσι λοιπόν, τα σημεία που διαδραματίζουν τον σημαντικότερο ρόλο, είναι αυτά που βρίσκονται πιο κοντά στην επιφάνεια Fermi, τα οποία είναι φυσικά τα $(\pm\frac{\pi}{2}, \pm\frac{\pi}{2})$. Αφού αυτά είναι τα σημαντικότερα σημεία, που καθορίζουν τη συμπεριφορά του συστήματος, θα αναπτύξουμε τα διανύσματα $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})$ γύρω από αυτά. Θα επικεντρωθούμε στην περίπτωση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ αφού τα συμπεράσματα για τις υπόλοιπες περιπτώσεις μπορούν να εύκολα να προσδιοριστούν έπειτα. Προκύπτουν λοιπόν τα ακόλουθα:

- $(+\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2})$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = \left(+M_{\mathbf{Q},6}, -\sqrt{2}M_{\mathbf{Q},2} \frac{\bar{k}_x - \bar{k}_y}{\sqrt{2}}, 2\sqrt{2}t \frac{\bar{k}_x + \bar{k}_y}{\sqrt{2}} \right) \equiv (+m, -v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y)$,
- $(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (+m, +v_x \kappa_x, -v_y \kappa_y)$,
- $(+\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (-m, -v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x)$,

- $\left(-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}\right)$: $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (-m, +v_x\kappa_y, -v_y\kappa_x)$.

όπου τα $\tilde{k}_{x,y}$ μετρούν από τα αντίστοιχα σημεία, ενώ επιπλέον θέσαμε $m \equiv M_{\mathbf{Q},6}$, $v_x \equiv \sqrt{2}M_{\mathbf{Q},2}$, $v_y \equiv 2\sqrt{2}t$, $\kappa_x \equiv \frac{\tilde{k}_x - \tilde{k}_y}{\sqrt{2}}$ και $\kappa_y \equiv \frac{\tilde{k}_x + \tilde{k}_y}{\sqrt{2}}$. Λόγω του ότι περιοριζόμαστε στην ανηγμένη ζώνη, το ήμισυ των παραπάνω ενεργειακών διασπορών βρίσκεται μέσα στον χώρο των \mathbf{k} που μας αφορά. Έτσι λοιπόν έχουμε μόνο δύο ανεξάρτητα σημεία, τα οποία θα θεωρήσουμε ότι είναι τα $a = \left(+\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}\right)$ και $b = \left(+\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right)$. Υπολογίζοντας το τοπολογικό αναλλοίωτο για αυτά τα σημεία είναι $\tilde{N}_{\sigma,a} = \tilde{N}_{\sigma,b} = -\frac{1}{2} \cdot \text{sign}(mv_xv_y)$. Παρατηρούμε λοιπόν ότι και τα δύο συνεισφέρουν κατά το ήμισυ στο συνολικό τοπολογικό αναλλοίωτο. Πρέπει σε αυτό το σημείο να παρατηρήσουμε ότι το τοπολογικό αναλλοίωτο του κάθε σημείου είναι ρητός αριθμός το οποίο φαίνεται να αντιβαίνει στο γεγονός ότι το τοπολογικό αναλλοίωτο είναι ακέραιος. Παρ' όλ' αυτά, η απαίτηση του τοπολογικού αναλλοίωτου να είναι ακέραιος ισχύει μόνο όταν έχουμε λάβει υπόψη μας όλες τις συνεισφορές. Συνεπώς αυτό δεν αποτελεί παραβίαση, διότι τα σημεία με ημιακέραιο τοπολογικό αναλλοίωτο ή τοπολογικό φορτίο, εμφανίζονται σε άρτιο αριθμό.

Τέλος, πρέπει να αναφέρουμε ότι η τιμή του συγκεκριμένου τοπολογικού αναλλοίωτου δεν επηρεάζεται από την παρουσία του χημικού δυναμικού και του πεδίου Zeeman, εφόσον δεν καταστρατηγείται το χάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων σε κανένα σημείο \mathbf{k} της ανηγμένης ζώνης Brillouin. Ισοδύναμα θα πρέπει οι συγκεκριμένες ποσότητες να βρίσκονται μέσα στο χάσμα. Λόγω του ότι θεωρούμε χάσμα στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις για κάθε προβολή του σπιν, είναι σαν να περιοριζόμαστε μόνο στις ενεργειακές καταστάσεις με αρνητική ενέργεια $E_{-,\sigma}(\mathbf{k})$ οι οποίες είναι κατειλημμένες. Συνεπώς το συγκεκριμένο τοπολογικό αναλλοίωτο δεν είναι παρά το τοπολογικό αναλλοίωτο μόνο των $\nu = -$ ενεργειακών καταστάσεων. Εάν υπάρχουν διεγέρσεις είτε λόγω του χημικού δυναμικού, είτε της θερμοκρασίας στις καταστάσεις $E_{+,\sigma}(\mathbf{k})$, τότε συνεισφέρουν και αυτές στο συνολικό 'τοπολογικό' φορτίο του συστήματος το οποίο ασφαλώς δεν είναι πλέον χβαντισμένο.

3.3 Τοπολογικές Κβαντικές Μεταβάσεις Φάσης

Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε ότι οι υπό εξέταση τοπολογικές καταστάσεις, μπορούν να μελετηθούν εάν περιοριστούμε μόνο στην περιοχή δύο σημείων της ανηγμένης ζώνης Brillouin. Κάθε ένα από αυτά συνεισφέρει στο συνολικό τοπολογικό φορτίο (για κάθε προβολή του σπιν) κατά $-\frac{1}{2} \cdot \text{sign}(mv_xv_y)$ στην περίπτωση των Χειρικών καταστάσεων και κατά $-\sigma \cdot \frac{1}{2} \cdot \text{sign}(mv_xv_y)$ στην περίπτωση των Ελικοειδών. Είναι εμφανές ότι τα πρόσημα των παραμέτρων m, v_x, v_y καθορίζουν το πρόσημο του τοπολογικού φορτίου. Οι διαφορετικές τιμές του τοπολογικού φορτίου αντιστοιχούν σε διαφορετικές τοπολογικές καταστάσεις. Ειδική περίπτωση αποτελεί αυτήν κατά την οποία κάποια από τις τρεις παραμέτρους είναι μηδενική που αντιστοιχεί στην κανονική κατάσταση, ή τοπολογικά τετριμμένη, ή τοπολογική κατάσταση μηδενικού τοπολογικού φορτίου. Οι μεταβάσεις από μία τοπολογική κατάσταση σε μία άλλη, ορίζει μία Τοπολογική Κβαντική Μετάβαση Φάσης. Ο κβαντικός χαρακτήρας υπεισέρχεται φυσικά λόγω της μηδενικής θερμοκρασίας στην οποία γίνονται, ώστε να έχει νόημα το τοπολογικό αναλλοίωτο.

Κάθε Τοπολογική Κβαντική Μετάβαση Φάσης απαιτεί αναγκαστικά μία από τις παραπάνω παραμέτρους να μηδενιστεί. Κάθε λοιπόν τέτοια μετάβαση, μπορεί να γίνει μόνο εάν στο κρίσιμο σημείο το σύστημα βρεθεί στην κανονική κατάσταση όπου το τοπολογικό φορτίο είναι μηδέν και το ενεργειακό χάσμα έχει κλείσει. Σε αυτά τα σημεία του παραμετρικού χώρου όπου το χάσμα μηδενίζεται και λαμβάνει χώρα μία τοπολογική μετάβαση, μπορούμε να ορίσουμε ένα διαφορετικό τοπολογικό αναλλοίωτο ή φορτίο που χαρακτηρίζει συστήματα στις δύο χωρικές διαστάσεις που παρουσιάζουν σημεία Fermi, δηλαδή μεμονωμένα σημεία μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος [212]. Το νέο αυτό τοπολογικό φορτίο

ορίζεται με τον ακόλουθο τρόπο

$$\mathcal{N} = \frac{1}{8\pi} \varepsilon_{ijr} \oint_S dS_r \varepsilon_{lmn} \hat{g}_l(\mathbf{k}) \frac{\partial \hat{g}_m(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \hat{g}_n(\mathbf{k})}{\partial k_j}, \quad (3.7)$$

όπου S μία κλειστή επιφάνεια η οποία περιβάλλει το σημείο Fermi όπου μηδενίζεται το ενεργειακό χάσμα. Από τη δομή του παραπάνω τοπολογικού φορτίου, βλέπουμε ότι ορίζεται σε έναν τριδιάστατο χώρο. Στην προκειμένη περίπτωση που εξετάζουμε, τα τοπολογικά κύματα πυκνότητας φορτίου περιγράφονται από τα διανύσματα $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (+m, -v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y)$ και $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (-m, -v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x)$ που ορίζονται στη γειτονιά των σημείων $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ και $(\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2})$ αντίστοιχα. Ακριβώς, στο κρίσιμο σημείο της μετάβασης η μάζα m των παραπάνω σωματιδίων Dirac (τα ονομάζουμε έτσι λόγω της συγκεκριμένης μορφής των διανυσμάτων) μηδενίζεται. Πέρα λοιπόν από τις ορμές κ_x και κ_y που μηδενίζονται για $\kappa_x = \kappa_y = 0$ υπάρχει και άλλη μία παράμετρος που μηδενίζεται για $m = 0$. Συνεπώς η συγκεκριμένη παράμετρος παίζει το ρόλο μίας τρίτης ορμής $\kappa_z \equiv m$. Συνολικά είναι σαν να βρισκόμαστε σε έναν τριδιάστατο χώρο, που προκύπτει από συνδυασμό διαστάσεων του φυσικού χώρου καθώς και του παραμετρικού [212, 213]. Σε αυτόν τον χώρο υπάρχει ένα σημείο Fermi, το $(\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z) = \mathbf{0}$ το οποίο έχει τοπολογικό φορτίο $\mathcal{N} = \text{sign}(mv_x v_y)$ στα σημεία $(\frac{\pi}{2}, \pm \frac{\pi}{2})$. Το τοπολογικό φορτίο \mathcal{N} ισούται με τη διαφορά των τοπολογικών φορτίων $\tilde{\mathcal{N}}$ στις δύο πλευρές της μετάβασης. Στην περίπτωσή μας, η μεταβολή της παραμέτρου m σε $-m$ οδηγεί σε ένα τοπολογικό κύμα πυκνότητας αντίθετου τοπολογικού φορτίου, από αυτό της αρχικής. Κατά συνέπεια $\mathcal{N} = \tilde{\mathcal{N}}(-m) - \tilde{\mathcal{N}}(m)$. Το συγκεκριμένο φορτίο \mathcal{N} αντιστοιχεί στο απαραίτητο φορτίο που ανταλλάσσεται μεταξύ των καταστάσεων με καθορισμένο τοπολογικό φορτίο $\tilde{\mathcal{N}}$.

Από τα παραπάνω, παρατηρούμε ότι όντας σε μία από τις τέσσερις τοπολογικές καταστάσεις, μέσω της μεταβολής της παραμέτρου m , μπορούμε να προσεγγίσουμε μία κατάσταση η οποία παρόλο που έχει μηδενικό τοπολογικό φορτίο $\tilde{\mathcal{N}}$, παρουσιάζει μη μηδενικό φορτίο \mathcal{N} . Επιπλέον η κατάσταση αυτή αποτελεί μία οριακή περίπτωση, παρά μία δυνατή θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος αφού δεν είναι ενεργειακά συμφέρουσα διότι δεν δημιουργεί χάσμα στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος. Μια πραγματικά μη οριακή περίπτωση κανονικής κατάστασης, με ταυτόχρονα μηδενικά και τα δύο τοπολογικά φορτία $\tilde{\mathcal{N}}$ και \mathcal{N} , είναι δυνατόν να προσεγγιστεί μόνο εάν συνυπάρχει και ένα ιστροπικό κύμα πυκνότητας φορτίου ή σπιν με την ήδη σχηματισμένη τοπολογική κατάσταση. Ήδη έχουμε αναφέρει ότι οι ιστροπικές καταστάσεις κύματος πυκνότητας φορτίου και σπιν είναι και αυτές δυνατόν να εμφανιστούν πέρα από την κυρίαρχη αναπαράσταση $d_{x^2-y^2}$.

Σαν παράδειγμα θα θεωρήσουμε την κατάσταση $s + d_{xy} + id_{x^2-y^2}$. Το κύμα πυκνότητας φορτίου $s - wave$ είναι άρτιο κάτω από τη δράση της ομοτιμίας και της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου. Ως αποτέλεσμα, τα διανύσματα $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})$ γύρω από τα σημεία $(\frac{\pi}{2}, \pm \frac{\pi}{2})$, παίρνουν τη μορφή $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (s + m, -v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y)$ και $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) = (s - m, -v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x)$, όπου θεωρήσαμε ως s την παράμετρο τάξης του συμβατικού κύματος πυκνότητας φορτίου. Παρατηρούμε ότι η ιστροπικότητα του συμβατικού κύματος πυκνότητας φορτίου δημιουργεί ασυμμετρία στις μάζες των φερμιονίων Dirac σε αυτά τα δύο σημεία. Τα αντίστοιχα τοπολογικά φορτία γίνονται $\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma,a} = -\frac{1}{2} \cdot \text{sign}((s + m)v_x v_y)$ και $\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma,b} = +\frac{1}{2} \cdot \text{sign}((s - m)v_x v_y)$ αντίστοιχα. Εάν θεωρήσουμε την περίπτωση όπου $m > 0$ μπορούμε να διακρίνουμε τις ακόλουθες τρεις περιοχές στον παραμετρικό χώρο.

- $s > m$. Σε αυτήν την περίπτωση $\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma,a} = -\frac{1}{2}$ και $\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma,b} = +\frac{1}{2}$, και κατά συνέπεια το συνολικό τοπολογικό φορτίο είναι μηδέν $\tilde{\mathcal{N}} = 0$. Η συγκεκριμένη κατάσταση παρουσιάζει παντού ενεργειακό χάσμα αλλά είναι τοπολογικά τετριμμένη. Επιπλέον, η μετάβασή της σε μία κατάσταση με μηδενικό χάσμα, χρειάζεται μηδενικό τοπολογικό φορτίο $\mathcal{N} = 0$. Αυτή η κατάσταση $s + d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ είναι ισοδύναμη με την $s + id_{x^2-y^2}$.

- $-m < s < m$. Σε αυτήν την περίπτωση $\widetilde{\mathcal{N}}_{\sigma,a} = -\frac{1}{2}$ και $\widetilde{\mathcal{N}}_{\sigma,b} = -\frac{1}{2}$, και κατά συνέπεια το συνολικό τοπολογικό φορτίο είναι $\widetilde{\mathcal{N}} = -2$, όπου αθροίσαμε και στα σπιν. Αυτή η κατάσταση $s + d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ είναι ισοδύναμη με την $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$.
- $s < -m$. Σε αυτήν την περίπτωση προκύπτουν $\widetilde{\mathcal{N}}_{\sigma,a} = +\frac{1}{2}$ και $\widetilde{\mathcal{N}}_{\sigma,b} = -\frac{1}{2}$. Η κατάσταση είναι τοπολογικά τετριμμένη και ισοδυναμεί με την κατάσταση $s + id_{x^2-y^2}$.

Από τα παραπάνω συμπεραίνουμε πως μία πιθανή πορεία ώστε η κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ να μεταβεί στην κανονική, είναι η διαμεσολάβηση μίας κατάστασης συνύπαρξης με ένα συμβατικό κύμα πυκνότητας φορτίου ή σπιν. Ως αποτέλεσμα, μία από τις δυνατές μεταβάσεις είναι $d_{xy} + id_{x^2-y^2} \rightarrow s + d_{xy} + id_{x^2-y^2} \rightarrow id_{x^2-y^2}$. Με παρόμοιο τρόπο περιμένουμε να υπάρχουν αντίστοιχες περιπτώσεις και για τις υπόλοιπες τοπολογικές καταστάσεις σε συνύπαρξη με συμβατικά κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν.

3.4 Φερμιόνια στο σύνορο των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας

Παραπάνω είδαμε ότι κατά τη μετάβαση από μία τοπολογική κατάσταση που χαρακτηρίζεται από τοπολογικό φορτίο $\widetilde{\mathcal{N}}_1$ σε μία άλλη τοπολογικού φορτίου $\widetilde{\mathcal{N}}_2$, αναγκαστικά μεσολαβεί μία κατάσταση μηδενικού ενεργειακού χάσματος που χαρακτηρίζεται από τοπολογικό φορτίο $\mathcal{N} = \widetilde{\mathcal{N}}_2 - \widetilde{\mathcal{N}}_1$. Είναι λοιπόν απολύτως αναμενόμενο τέτοιες καταστάσεις να βρίσκονται στο **σύνορο του πραγματικού υλικού** με την τετριμμένη τοπολογικά, κανονική κατάσταση. Σε αυτήν την περίπτωση θα υπάρχει \mathcal{N} -αριθμός συνοριακών φερμιονικών βαθμών ελευθερίας που χαρακτηρίζονται από μηδενικό ενεργειακό χάσμα και άρα μπορούν να διεγερθούν με μηδενικό ενεργειακό κόστος (edge modes). Πρέπει να επισημάνουμε ότι τέτοιες καταστάσεις δεν αποκλείεται να βρεθούν και μεταξύ δύο τοπολογικά τετριμμένων καταστάσεων. Η διαφορά των δύο περιπτώσεων έγκειται στο ότι στην πρώτη περίπτωση ο αριθμός τους είναι απολύτως καθορισμένος και είναι τοπολογικά προστατευμένος όσο δεν αλλάζουν τα τοπολογικά φορτία [212].

Θα θεωρήσουμε λοιπόν ότι η παράμετρος m εξαρτάται από τη θέση του υλικού στον ευθύ χώρο, δηλαδή ότι $m = m(\mathbf{r})$ και $\mathbf{r} = (x, y)$. Παράλληλα, για να μελετήσουμε καταστάσεις προς την τετριμμένη τοπολογικά κατάσταση, θα θεωρήσουμε ότι επιπροσθέτως υπάρχουν τα αντίστοιχα συμβατικά κύματα πυκνότητας φορτίου s ή σπιν s^z . Συγκεκριμένα για να εξασφαλίσουμε μετάβαση από την τοπολογική κατάσταση στην τετριμμένη θα θεωρήσουμε τις ακόλουθες περιπτώσεις

- $s + d_{xy} + id_{x^2-y^2}$:

$$\mathbf{g}_{\sigma,a}(\mathbf{k}) = (s + m, -v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y), \quad \mathbf{g}_{\sigma,b}(\mathbf{k}) = (s - m, -v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x). \quad (3.8)$$

- $s^z + d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$:

$$\mathbf{g}_{\sigma,a}(\mathbf{k}) = (\sigma(s + m), -\sigma v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y), \quad \mathbf{g}_{\sigma,b}(\mathbf{k}) = (\sigma(s - m), -\sigma v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x). \quad (3.9)$$

- $s^z + d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$:

$$\mathbf{g}_{\sigma,a}(\mathbf{k}) = (\sigma(s + m), -v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y), \quad \mathbf{g}_{\sigma,b}(\mathbf{k}) = (\sigma(s - m), -v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x). \quad (3.10)$$

- $s + d_{xy} + id_{x^2-y^2}^z$:

$$\mathbf{g}_{\sigma,a}(\mathbf{k}) = \left(s + m, -\sigma v_x \kappa_x, +v_y \kappa_y \right), \quad \mathbf{g}_{\sigma,b}(\mathbf{k}) = \left(s - m, -\sigma v_x \kappa_y, +v_y \kappa_x \right). \quad (3.11)$$

Μπορούμε εύκολα να δούμε ότι λόγω της παραπάνω μορφής των διανυσμάτων, τα αποτελέσματα είναι ίδια για τις τοπολογικές καταστάσεις που ανήκουν στην ίδια τοπολογική κατηγορία. Επιπλέον, μπορούμε μελετώντας την κατηγορία των Χειρικών καταστάσεων, να εξάγουμε τα συμπεράσματα για τις Ελικοειδείς μέσω της αντικατάστασης $v_x \rightarrow \sigma v_x$. Κάτω από αυτές τις προϋποθέσεις μπορούμε να περιοριστούμε στη μελέτη της κατάστασης $s + d_{xy} + id_{x^2-y^2}^z$. Θα θεωρήσουμε το ακόλουθο προφίλ για την παράμετρο m

$$m(\mathbf{r}) = m(x) = \frac{s}{2} + s\Theta(x) - s\Theta(x - L). \quad (3.12)$$

όπου $s > 0$, ενώ θεωρήσαμε ότι η τοπολογική κατάσταση είναι περιορισμένη στο διάστημα $x \in (0, L)$ και η τοπολογικά τετριμμένη εκτός από αυτό. Αυτό συμβαίνει λόγω της μορφής που διαλέξαμε για την παράμετρο m . Θα επιδιώξουμε να επιλύσουμε τις εξίσώσεις Dirac για τα σημεία a, b με την παραπάνω μορφή της παραμέτρου $m(\mathbf{r})$ με στόχο να βρούμε λύσεις με μηδενική ενέργεια (πέρα από την επίδραση του χημικού δυναμικού και του πεδίου Zeeman), οι οποίες να είναι εντοπισμένες κοντά στα σημεία $x = 0, L$ τα οποία θεωρούμε ότι είναι καλά απομακρυσμένα. Στην περίπτωση που δεν ισχύει αυτό, είναι εύκολο να δειχθεί ότι οι μηδενικές λύσεις θα αποκτήσουν μη μηδενική ενέργεια της τάξης $e^{-L/\xi}$ όπου ξ ένα χαρακτηριστικό μήκος. Στην περίπτωση όπου το μήκος L είναι η μεγαλύτερη κλίμακα μήκους στο σύστημα, οι λύσεις αποκτούν πρακτικά μηδενική ενέργεια [216].

Παρατηρούμε ότι από τα δύο σημεία του χώρου \mathbf{k} , α και β , μόνο το δεύτερο μπορεί να έχει μηδενισμό του μέτρου του αντίστοιχου διανύσματος $\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})$. Κατά συνέπεια μόνο αυτό μπορεί να δώσει λύση μηδενικής ενέργειας κατά την συγκεκριμένη διαδοχή μεταβάσεων και για αυτό θα περιοριστούμε μόνο σε αυτό.

Η εξίσωση Dirac για το συγκεκριμένο σημείο γράφεται με τον ακόλουθο τρόπο

$$\left\{ [s - m(x)]\tau_x - v_x \kappa_y \tau_y - i v_y \partial_x \tau_z \right\} \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = E_{\kappa_y, \sigma} \Psi_{\kappa_y}(x), \quad (3.13)$$

όπου αντικαταστήσαμε $\kappa_x \rightarrow -i\partial_x$. Η μεταβλητή κ_y δεν άλλαξε διότι το σύστημα συνεχίζει να έχει μεταφορική συμμετρία κατά τη διεύθυνση y και η κυματοσυνάρτηση μπορεί να συνεχίσει να χαρακτηρίζεται από καθορισμένο κυμαάνυσμα κ_y . Χρησιμοποιώντας τη σχέση

$$\begin{aligned} \mathcal{H}\Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = E_{\kappa_y, \sigma}\Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) &\Rightarrow (\mathcal{H} - E_{\kappa_y, \sigma})\Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = 0 \Rightarrow \\ (\mathcal{H} + E_{\kappa_y, \sigma})(\mathcal{H} - E_{\kappa_y, \sigma})\Psi_{\kappa_y}(x) = 0 &\Rightarrow \mathcal{H}^2\Psi_{\kappa_y}(x) = E_{\kappa_y, \sigma}^2\Psi_{\kappa_y}(x), \end{aligned} \quad (3.14)$$

λαμβάνουμε την ακόλουθη εξίσωση

$$\left\{ -v_y^2 \partial_x^2 + [s - m(x)]^2 + (v_x \kappa_y)^2 - v_y m'(x) \tau_y \right\} \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = E_{\kappa_y, \sigma}^2 \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x), \quad (3.15)$$

όπου με $' \equiv \partial_x$. Λόγω της συγκεκριμένης μορφής που θεωρήσαμε για την παράμετρο m , προκύπτει $m'(x) = s[\delta(x) - \delta(x - L)]$. Βλέπουμε λοιπόν, ότι πέρα από τα σημεία $x = 0, L$ ο όρος με τον πίνακα Pauli δεν συνεισφέρει στην εξίσωση. Άρα για $x \neq 0, L$, έχουμε απλά την εξίσωση

$$\left\{ -v_y^2 \partial_x^2 + \left(\frac{s}{2}\right)^2 + (v_x \kappa_y)^2 \right\} \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = E_{\kappa_y, \sigma}^2 \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x), \quad (3.16)$$

όπου ήδη αντικαταστήσαμε την συνάρτηση $m(x)$. Η παραπάνω εξίσωση επιδέχεται δέσμιων καταστάσεων της μορφής $e^{\kappa x}$, με ενεργειακή διασπορά $E_{\kappa_x, \kappa_y, \sigma}^2 = -(v_y \kappa_x)^2 + (\frac{s}{2})^2 + (v_x \kappa_y)^2$. Ακριβώς στα σημεία $x = 0, L$ οι συναρτήσεις δέλτα προσφέρουν συνοριακές συνθήκες για τις λύσεις αυτές. Συγκεκριμένα ολοκληρώνουμε την εξίσωση γύρω από το σημείο $x = 0$ και προκύπτει

$$-v_y^2 [\Psi'_{\kappa_y, \sigma}(0^+) - \Psi'_{\kappa_y, \sigma}(0^-)] - s v_y \tau_y \Psi_{\kappa_y, \sigma}(0) = 0. \quad (3.17)$$

Θεωρώντας ότι για 0^+ και 0^- έχουμε τις κυματοσυναρτήσεις $\Psi_{\kappa_y, \sigma}(0^+) = \Psi_{\kappa_y, \sigma} e^{-\kappa x}$ και $\Psi_{\kappa_y, \sigma}(0^-) = \Psi_{\kappa_y, \sigma} e^{+\kappa x}$, οι οποίες ικανοποιούν την αρχική εξίσωση γύρω στο $x = 0$, είναι συνεχείς στο $x = 0$ και ταυτόχρονα συμπεριφέρονται καλά για $x \rightarrow \pm\infty$ προκύπτει

$$\left(v_y \kappa + \frac{s}{2} \tau_y\right) \Psi_{\kappa_y, \sigma} = 0. \quad (3.18)$$

Η παραπάνω εξίσωση έχει ιδιοδιανύσματα τα ιδιοδιανύσματα του πίνακα τ_y . Ο συγκεκριμένος πίνακας έχει τα ακόλουθα ιδιοδιανύσματα

$$\tau_y \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = +1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \tau_y \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = -1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Η κυματοσυνάρτηση μπορεί να γραφεί ως γραμμικός συνδυασμός αυτών στη μορφή

$$\Psi_{\kappa_y, \sigma} = c_{\kappa_y, \sigma}^+ \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} + c_{\kappa_y, \sigma}^- \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Αντικαθιστώντας στην παραπάνω εξίσωση, προκύπτει

$$\left(v_y \kappa \pm \frac{s}{2}\right) c_{\kappa_y, \sigma}^{\pm} = 0. \quad (3.21)$$

Η παραπάνω εξίσωση ικανοποιείται για $v_y \kappa = \frac{s}{2}$ και $c_+ = 0, c_- \neq 0$. Έτσι λοιπόν έχουμε μόνο το ένα ιδιοδιάνυσμα μη μηδενικό, και η κυματοσυνάρτηση κοντά στο $x = 0$, παίρνει τη μορφή

$$\Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = c_{\kappa_y, \sigma}^- e^{-\kappa|x|} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

Η ενέργεια της συγκεκριμένης λύσης μπορεί να προσδιοριστεί από τη σχέση διασποράς. Παρατηρούμε ότι για $\kappa_y = 0$ έχουμε $E_{0,0,\sigma} = 0$. Βρήκαμε λοιπόν τη λύση την οποία αναζητούσαμε. Για κάθε προβολή του σπιν, υπάρχει ένας φερμιονικός βαθμός ελευθερίας με μηδενική ενέργεια εντοπισμένος γύρω στο σύνορο $x = 0$. Επιπλέον, για πεπερασμένα κυματονύσματα κατά τη διεύθυνση y , η ενέργεια προκύπτει εάν θεωρήσουμε στην εξίσωση Dirac (γραμμική) ότι η λύση είναι το ιδιοδιάνυσμα του πίνακα τ_y με ιδιοτιμή +1

$$\begin{aligned} \left\{ [s - m(x)] \tau_x - v_x \kappa_y \tau_y - i v_y \partial_x \tau_z \right\} \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) &= E_{\kappa_y, \sigma} \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) \Rightarrow \\ \left\{ [s - m(x)] \tau_x - i v_y \partial_x \tau_z \right\} \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) &= \left(E_{\kappa_y, \sigma} + v_x \kappa_y \right) \Psi_{\kappa_y, \sigma}(x). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Με παρόμοια βήματα βλέπουμε ότι για πεπερασμένα κ_y πρέπει $E_{\kappa_y, \sigma} = -v_x \kappa_y$. Συνεπώς οι συνοριακοί φερμιονικοί βαθμοί ελευθερίας είναι Χειρικά φερμιόνια που διαδίδονται κατά την αρνητική κατεύθυνση y με ταχύτητα v_x . Η φορά διάδοσης καθορίζεται ασφαλώς για την συγκεκριμένη επιλογή προσήμων των

παραμέτρων και κατά συνέπεια για την συγκεκριμένη τιμή του τοπολογικού φορτίου της τοπολογικής κατάστασης που σχηματίζεται για $x \in (0, L)$. Μάλιστα υπάρχουν 2 Χειρικά φερμιόνια, όσα δηλαδή περιμένουμε από τη μεταφορά τοπολογικού φορτίου $\mathcal{N}(x=0) = \widetilde{\mathcal{N}}(x>0) - \widetilde{\mathcal{N}}(x<0) = -2 - 0 = -2$ [212]. Το πρόσημο του τοπολογικού φορτίου $\mathcal{N}(x=0)$ καθορίζει το πρόσημο της ταχύτητας των Χειρικών φερμιονίων.

Ανάλογα, παρατηρούμε ότι στη γειτονιά του σημείου $x = L$, η κυματοσυνάρτηση ικανοποιεί την εξίσωση

$$-v_y^2 [\Psi'_{\kappa_y, \sigma}(0^+) - \Psi'_{\kappa_y, \sigma}(0^-)] + sv_y \tau_y \Psi_{\kappa_y, \sigma}(0) = 0, \quad (3.24)$$

όπου είναι όμοια με αυτή στο σημείο $x = 0$, με τη μόνη διαφορά ότι $s \rightarrow -s$. Το πρόσημο αυτό όμως είναι πολύ σημαντικό, διότι επιτρέπει σαν λύση μόνο του ιδιοδιανύσματος του πίνακα τ_y με ιδιοτιμή -1 . Η κυματοσυνάρτηση κοντά στο $x = L$ έχει τη μορφή

$$\Psi_{\kappa_y, \sigma}(x) = c_{\kappa_y, \sigma}^+ e^{-\kappa|x-L|} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

και η ενέργεια αυτών των πεδίων δίνεται από τη σχέση $E_{\kappa_y, \sigma} = +v_x \kappa_y$. Έχουμε λοιπόν κοντά στο σημείο $x = L$, 2 Χειρικά φερμιόνια που διαδίδονται όμως κατά τη θετική κατεύθυνση y . Σε αντίθετη δηλαδή φορά από τα φερμιόνια του άλλου άκρου. Και σε αυτήν την περίπτωση έχουμε αντίστοιχα $\mathcal{N}(x=L) = \widetilde{\mathcal{N}}(x>L) - \widetilde{\mathcal{N}}(x<L) = 0 - (-2) = +2$. Έτσι λοιπόν έχουμε αντίθετο τοπολογικό φορτίο και αντίθετη ταχύτητα. Σε κάθε σύνορο τα Χειρικά φερμιόνια έχουν την απαιτούμενη κατεύθυνση ώστε να αντισταθμίσουν το τοπολογικό φορτίο της τοπολογικής κατάστασης μεταξύ $(0, L)$ ώστε να μεταβούμε στις τοπολογικά τετριμμένες καταστάσεις για $x < 0$ και $x > L$. Συγκεντρωτικά μπορούμε να γράψουμε ότι

$$E_{\kappa_y, \sigma} = \text{sign}[\Delta \widetilde{\mathcal{N}}_\sigma(x)] v_x \kappa_y. \quad (3.26)$$

Παρουσία πεπερασμένου χημικού δυναμικού και πεδίου Zeeman θα λαμβάναμε την ενεργειακή διασπορά

$$E_{\kappa_y, \sigma}(x) = -\mu(x) - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z(x) + \text{sign}[\Delta \widetilde{\mathcal{N}}_\sigma(x)] v_x \kappa_y, \quad x = 0, L. \quad (3.27)$$

Με αυτά τα συμπεράσματα, μπορούμε να αντιληφθούμε ποιό είναι το αποτέλεσμα για τις τέσσερις περιπτώσεις μας

- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ και $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$: $E_{\kappa_y, \sigma}(x) = -\mu(x) - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z(x) + \text{sign}[\Delta \widetilde{\mathcal{N}}_\sigma(x)] v_x \kappa_y, \quad x = 0, L.$
- $d_{xy} + id_{x^2-y^2}^z$ και $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}$: $E_{\kappa_y, \sigma}(x) = -\mu(x) - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z(x) + \text{sign}[\Delta \widetilde{\mathcal{N}}_\sigma(x)] \sigma v_x \kappa_y, \quad x = 0, L.$

Παρατηρούμε ότι στις δύο πρώτες κατηγορίες, τα φερμιονικά πεδία διαδίδονται κατά την ίδια διεύθυνση ανεξαρτήτως σπιν, σχηματίζοντας Χειρικά φερμιόνια (chiral edge modes). Αντίθετα, στις δύο τελευταίες περιπτώσεις, η κατεύθυνση των συνοριακών φερμιονικών πεδίων καθορίζεται από το γινόμενο της προβολής του σπιν και της ορμής, σχηματίζοντας Ελικοειδή φερμιονικά πεδία (helical edge modes). Έτσι λοιπόν, οι συνοριακοί βαθμοί ελευθερίας στις δύο συνοριακές επιφάνειες είναι δυνατόν να χαρακτηρίσουν την τοπολογική κατάσταση που περιορίζεται μέσα σε αυτές. Στην περίπτωση των Χειρικών φερμιονικών πεδίων παραβιάζεται η ομοτιμία και η συμμετρία αντιστροφής το χρόνου με αποτέλεσμα να έχουμε μη μηδενικό

τοπολογικό φορτίο στην τοπολογική κατάσταση. Αντίθετα όσον αφορά τους E -λικοειδείς συνοριακούς βαθμούς ελευθερίας, η καθορισμένη προβολή του σπιν σε κάθε κυματόνυμα διατηρεί την συμμετρία αντιστροφής του χρόνου οδηγώντας σε αντίθετο τοπολογικό φορτίο για την κάθε προβολή του σπιν της τοπολογική κατάσταση ανάμεσα στις δύο συνοριακές επιφάνειες.

4 Αλληλεπίδραση Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν με το Ηλεκτρομαγνητικό Πεδίο

Σε αυτό το κεφάλαιο θα εξετάσουμε ένα σύνολο δυναμικών ιδιοτήτων των τοπολογικών κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν, και συγκεκριμένα την απόκριση σε ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Ξεκινώντας από την αναπαράσταση των ολοκληρωμάτων διαδρομής, θα βρούμε την ενεργό δράση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που προκύπτει από την αλληλεπίδρασή του με τα υπό εξέταση μη συμβατικά κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν. Η δράση που βρίσκουμε για μηδενική θερμοκρασία, είναι της μορφής Chern-Simons για τις Χειρικές Τοπολογικές καταστάσεις και της μορφής BF για τις Ελικοειδή. Οι συγκεκριμένες ενεργές θεωρίες είναι άμεση συνέπεια των πεπερασμένων τοπολογικών αναλλοίωτων και οδηγούν στην κβάντωση των συντελεστών απόκρισης, όπως είναι οι αγωγιμότητες των Αυθόρμητων Κβαντικών φαινομένων Hall που πρόκειται να εξετάσουμε.

4.1 Υπολογισμός του ηλεκτρικού τετραρεύματος

Το πρώτο βήμα για να μελετήσουμε την απόκριση των συγκεκριμένων συστημάτων σε εξωτερικά ηλεκτρομαγνητικά πεδία, είναι ο υπολογισμός της πυκνότητας του ηλεκτρικού φορτίου και ρεύματος. Για τον υπολογισμό της πυκνότητας του ηλεκτρικού φορτίου, ξεκινάμε από τον όρο αλληλεπίδρασης του ηλεκτρονικού φορτίου $\rho_{c,i} = -e \sum_{\sigma} c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma}$ της κάθε πλεγματοειδούς θέσης \mathbf{R}_i , με το βαθμωτό δυναμικό V_i [10]. Έχουμε λοιπόν

$$\begin{aligned} \sum_i \rho_{c,i} V_i &= -e \sum_{i,\sigma} V_i c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} = -\frac{e}{N} \sum_{i,\sigma} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} c_{\mathbf{k}_1, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}_2, \sigma} V_i e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_i} \\ &= \sum_{\mathbf{q}} V(-\mathbf{q}) \left[\sum_{\mathbf{k}, \sigma} (-e c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}) \right] = \sum_{\mathbf{q}} V(-\mathbf{q}) \rho_c(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (4.1)$$

όπου εισαγάγαμε τον μετασχηματισμό Fourier, $V(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_i V_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i}$. Καταλήγουμε λοιπόν στο ότι

$$\rho_c(\mathbf{q}) = -e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} = -e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} \right) = -e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \tau_0 \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \quad (4.2)$$

όπου $\mathbf{k} \in \mathcal{R.B.Z.}$. Λόγω του ότι επιθυμούμε να μελετήσουμε ιδιότητες για μεγάλα μήκη κύματος, μεγαλύτερα από αυτά της πλεγματοειδούς σταθεράς του υλικού μας, θα θεωρήσουμε το συνεχές όριο των μεταβλητών $\mathbf{R}_i, \mathbf{k}, \mathbf{q}$. Γνωρίζοντας τώρα την πυκνότητα φορτίου, μπορούμε εύκολα να βρούμε το αντίστοιχο διατηρήσιμο ηλεκτρικό ρεύμα μέσω της εξίσωσης συνέχειας

$$\dot{\rho}_c(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_c(\mathbf{r}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{\rho}_c(\mathbf{q}) + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{J}_c(\mathbf{q}) = 0. \quad (4.3)$$

Η χρονική παράγωγος της πυκνότητας φορτίου, μπορεί εύκολα να βρεθεί από τον μεταθέτη με την Χαμιλτονιανή Μέσου Πεδίου του συστήματος, η οποία έχει τη γενική μορφή $\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k},\sigma}$. Έχουμε λοιπόν,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_c(\mathbf{q}) &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho_c(\mathbf{q})] = \frac{e}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma,\sigma'} [\psi_{\mathbf{k}',\sigma'}^\dagger \mathcal{H}_{\sigma'}(\mathbf{k}') \psi_{\mathbf{k}',\sigma'} - \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \tau_0 \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}] \\ &= \frac{e}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \{ \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \tau_0 - \tau_0 \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \simeq i\mathbf{q} \cdot \frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{\partial \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

που ισχύει με πολύ καλή προσέγγιση στα μεγάλα μήκη κύματος ή ισοδύναμα στα μικρά κυματανύσματα \mathbf{q} . Από την εξίσωση συνέχειας προκύπτει ότι για κάθε \mathbf{q}

$$\mathbf{J}_c(\mathbf{q}) = -\frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{\partial \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \equiv -e \sum_{\sigma} \mathbf{V}_\sigma(\mathbf{q}), \quad (4.5)$$

όπου εισαγάγαμε τις ταχύτητες

$$\mathbf{V}_\sigma(\mathbf{q}) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{\partial \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}. \quad (4.6)$$

Φυσικά η παραπάνω σχέση δεν εκφράζει παρά τη σύνδεση της ταχύτητας και της ενεργειακής διασποράς σε ένα σύστημα ηλεκτρονίων Bloch [207]. Η αλληλεπίδραση με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο γράφεται με τον ακόλουθο τρόπο

$$\mathcal{V}_{em} = \sum_{\mathbf{q}} [\rho_c(-\mathbf{q})V(\mathbf{q}) - \mathbf{J}_c(-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q})] = \sum_{\mathbf{q}} [\rho_c(-\mathbf{q})A^0(\mathbf{q}) - J_c^i(-\mathbf{q})A^i(\mathbf{q})] = \sum_{\mathbf{q}} J_\mu(-\mathbf{q})A^\mu(\mathbf{q}),$$

όπου ορίσαμε το τετραρέυμα $J_\mu(\mathbf{q}) = (\rho_c(\mathbf{q}), -\mathbf{J}_c(\mathbf{q}))$ ενώ η μετρική είναι $g_{\mu\nu} = \text{diag}(1, -1, -1)$ όπου $\mu, \nu = 0, 1, 2$. Στο επόμενο υποκεφάλαιο, θα προσθέσουμε αυτήν την αλληλεπίδραση στην γενικότερη Χαμιλτονιανή Μέσου Πεδίου και θα λάβουμε την ενεργό δράση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου.

4.2 Διατήρηση του σπιν και η εισαγωγή του U(1) πεδίου βαθμίδας του σπιν

Εφόσον σε αυτήν τη διατριβή θα μελετήσουμε τοπολογικές καταστάσεις είτε μη μαγνητικές ή πολωμένες κατά τον άξονα z , υπάρχει διατήρηση του σπιν κατά αυτόν τον άξονα. Αυτό σημαίνει ότι υπάρχει ελευθερία στροφής της κατεύθυνσης του σπιν μέσα στο επίπεδο όπου θεωρούμε ότι είναι εγκλωβισμένο το σύστημα. Αντίστοιχα με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο βαθμίδας, μπορούμε να εισαγάγουμε και ένα πεδίο βαθμίδας του σπιν B^μ . Αντίστοιχα με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, το πεδίο σπιν αλληλεπιδρά με τα ηλεκτρόνια με την ακόλουθη μορφή $\sum_{\mathbf{q}} J_\mu^z(-\mathbf{q})B^\mu(\mathbf{q})$, όπου εισαγάγαμε το τετραρέυμα σπιν κατά τον άξονα z που δίνεται από τις εκφράσεις

$$\rho_s^z(\mathbf{q}) = -\mu_B \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \tau_0 \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{J}_s^z(\mathbf{q}) = -\frac{\mu_B}{\hbar} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma \psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{\partial \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \equiv -\mu_B \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{V}_\sigma(\mathbf{q}). \quad (4.8)$$

Το επόμενο βήμα είναι να δούμε εάν αυτά τα πεδία είναι φυσικά. Δηλαδή εάν μπορούμε πράγματι να βρούμε περιπτώσεις που να μπορούν να αποτελέσουν τους γεννήτορες μετασχηματισμών βαθμίδας. Εν γένει, κάθε όρος που είναι δυνατόν να προστεθεί στην Χαμιλτονιανή, μπορεί να οδηγήσει σε μετασχηματισμό βαθμίδας των πεδίων αυτών μόνο εάν είναι πολλαπλασιασμένος με σ . Όροι που μπορούν να οδηγήσουν σε μετασχηματισμούς βαθμίδας αυτών των πεδίων, σχετίζονται άμεσα με την αλληλεπίδραση Zeeman. Λόγω του ότι ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να αλληλεπιδρά με το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο και με το σπιν του, μπορούμε να έχουμε πράγματι τέτοιους όρους οι οποίοι συνδέονται με το μαγνητικό πεδίο κατά τον άξονα z στην περίπτωση μας. Θα θεωρήσουμε την ακόλουθη γενική δράση στον πραγματικό χώρο

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \int d^3x \sum_{\sigma} \Psi_{\sigma}^{\dagger}(t, \mathbf{x}) \left\{ \left(i \frac{\partial}{\partial t} + eA^0 + \sigma \mu_B B^0 \right) - \mathcal{H}(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A} + \sigma \mu_B \mathbf{B}, \mathbf{x}) \right\} \Psi_{\sigma}(t, \mathbf{x}) \\ &+ \int d^3x \Psi_{\sigma}^{\dagger}(t, \mathbf{x}) \sigma \mu_B (\mathcal{B}_z(t) + \mathcal{B}_z(\mathbf{x})) \Psi_{\sigma}(t, \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.9)$$

όπου υποθέσαμε ότι το πεδίο Zeeman, μπορεί να χωριστεί σε ένα χρονοεξαρτώμενο και ένα χωροεξαρτώμενο κομμάτι. Είναι εύκολο να συμπεράνουμε ότι μπορούμε να έχουμε τον μετασχηματισμό βαθμίδας για το βαθμωτο πεδίο B^0 , $B^0 \rightarrow B^0 - \mathcal{B}_z(t)$. Για να βρούμε τον αντίστοιχο μετασχηματισμό βαθμίδας που ισχύει για το διανυσματικό δυναμικό, εκτελούμε πρώτα ένα μετασχηματισμό βαθμίδας για το βαθμωτό δυναμικό B^0 . Συγκεκριμένα θεωρούμε $B^0 \rightarrow B^0 - \sigma \mathcal{B}_z(\mathbf{x})$ και ταυτόχρονα $\Psi_{\sigma}(t, \mathbf{x}) \rightarrow e^{-i\sigma \mu_B \mathcal{B}_z(\mathbf{x})t} \Psi_{\sigma}(t, \mathbf{x})$. Λόγω του ότι η συγκεκριμένη φάση είναι ταυτόχρονα χωροχρονομεταβαλλόμενη, μπορεί να απορροφηθεί με έναν μετασχηματισμό βαθμίδας του διανυσματικού δυναμικού του σπιν \mathbf{B} . Έχουμε λοιπόν, $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{B} + \nabla \mathcal{B}_z t$. Αυτός ο μετασχηματισμός, είναι ο ορισμός για το πώς μετασχηματίζεται το \mathbf{B} παρουσία βαθμίδων του πεδίου Zeeman. Πρέπει να κάνουμε σε αυτό το σημείο μια πολύ σημαντική παρατήρηση. Στην περίπτωση που θεωρήσαμε το πεδίο B^0 είναι ομογενές και χρονομεταβαλλόμενο και το \mathbf{B} ανομοιογενές εν γένει και χρονοανεξάρτητο. Παρ'ολ' αυτά, θα μπορούσαμε ισοδύναμα να θεωρήσουμε ότι το B^0 είναι χωροχρονομεταβαλλόμενο με τον μετασχηματισμό βαθμίδας $B^0(\mathbf{x}, t) \rightarrow B^0(\mathbf{x}, t) - \mathcal{B}_z(\mathbf{x}, t)$. Σε αυτήν την περίπτωση το διανυσματικό πεδίο είναι απλά βοηθητικό διότι δεν υπάρχει άλλος όρος για να ορίσει ένα μετασχηματισμό βαθμίδας για αυτό. Εμείς επιλέξαμε την παραπάνω μέθοδο ώστε όλες οι χωροχρονικές συνιστώσες να έχουν φυσικό περιεχόμενο.

4.3 Ενεργός δράση των πεδίων βαθμίδας

Το πρώτο μας μέλημα είναι να εκφράσουμε την συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος, χρησιμοποιώντας τα ολοκληρώματα διαδρομής [217, 218]. Σύμφωνα με τις αναφορές και το παράρτημα

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \mathcal{D}\psi_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \times \text{Exp} \left(- \int_0^{\beta} d\tau \right. \\ &\left. \sum_{\mathbf{k},\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + \mathcal{H}_{\sigma}(\mathbf{k}) \right] \psi_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) + \sum_{\mathbf{q}} J_{\mu}(-\mathbf{q}, \tau) A^{\mu}(\mathbf{q}, \tau) + \sum_{\mathbf{q}} J_{\mu}^z(-\mathbf{q}, \tau) B^{\mu}(\mathbf{q}, \tau) \right) \\ &= \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) \mathcal{D}\psi_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \times \text{Exp} \left(- \int_0^{\beta} d\tau \right. \\ &\left. \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma} \bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}(\tau) \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + \mathcal{H}_{\sigma}(\mathbf{k}) \right] \delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} + \Gamma_{\mu}^{\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) A^{\mu}(\mathbf{q}, \tau) + \Delta_{\mu}^{\sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) B^{\mu}(\mathbf{q}, \tau) \right\} \psi_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \right) \\ &= \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \mathcal{D}\psi_{\mathbf{k},\sigma} \times \text{Exp} \end{aligned}$$

$$\left(- \sum_{k,q,\sigma} \bar{\psi}_{k+q,\sigma} \left\{ [-ik_\nu + \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})] \delta_{q,0} + \Gamma_\mu^\sigma(k+q, k) A^\mu(q) + \Delta_\mu^\sigma(k+q, k) B^\mu(q) \right\} \psi_{k,\sigma}(\tau) \right), \quad (4.10)$$

όπου ik_ν και $i\omega_s$ οι φερμιονικές και μποζονικές συχνότητες Matsubara αντίστοιχα [10, 203, 204, 217, 218], $\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma}(ik_\nu, i\omega_s)$ η συνάρτηση Green ενός σωματιδίου, ενώ παράλληλα θέσαμε $\psi_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{ik_\nu} \psi_{\mathbf{k},\sigma} e^{-ik_\nu \tau}$ και $A^\mu(q) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_s} A^\mu(\mathbf{q}, \tau) e^{i\omega_s \tau}$, $B^\mu(q) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_s} B^\mu(\mathbf{q}, \tau) e^{i\omega_s \tau}$. Η αντιστοιχία πραγματικού και φανταστικού χρόνου δίνεται από τη στροφή Wick, $\tau = it$. Επιπλέον χρησιμοποιήσαμε τους ορισμούς $k = k^\mu = (ik_\nu, \mathbf{k})$ και $q = q^\mu = (i\omega_s, \mathbf{q})$ και εισαγάγαμε τις κορυφές αλληλεπίδρασης (interaction vertices) $\Gamma_\mu^\sigma(k+q, k) = (-e, +e\mathbf{V}_\sigma(\mathbf{k}))$ και $\Delta_\mu^\sigma(k+q, k) = (-\sigma\mu_B, +\sigma\mu_B\mathbf{V}_\sigma(\mathbf{k})) \equiv \frac{\sigma\mu_B}{e} \Gamma_\mu^\sigma(k+q, k)$. Παρατηρούμε ότι η έκφραση $-ik_\nu + \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})$ δεν είναι τίποτα άλλο παρά το αντίθετο του αντιστρόφου της συνάρτησης Green ενός σωματιδίου του ελεύθερου συστήματος. Δηλαδή ισχύει $\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu, i\omega_s) = [ik_\nu - \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})]^{-1} \delta_{q,0}$. Αντίστοιχα, η συνολική έκφραση $[-ik_\nu + \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})] \delta_{q,0} + \Gamma_\mu^\sigma(k+q, k) A^\mu(q)$ ισούται με το αντίθετο του αντιστρόφου της συνολικής συνάρτησης Green, $\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{q},\sigma}(ik_\nu, i\omega_s)$. Η έκφραση της συνάρτησης επιμερισμού απλοποιείται περισσότερο, επειδή είναι τετραγωνική ως προς τα φερμιονικά πεδία, δίνοντας ως αποτέλεσμα μία ορίζουσα φερμιονίων. Έχουμε λοιπόν

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \mathcal{D}\bar{\psi}_{k+q,\sigma} \mathcal{D}\psi_{k,\sigma} \times \text{Exp} \\ &\left(- \sum_{k,q,\sigma} \bar{\psi}_{k+q,\sigma} \left\{ -[\mathcal{G}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}^0(ik_\nu, i\omega_s)]^{-1} + \Gamma_\mu^\sigma(k+q, k) A^\mu(q) + \Delta_\mu^\sigma(k+q, k) B^\mu(q) \right\} \psi_{k,\sigma}(\tau) \right) \\ &= \text{Det} \left(-[\hat{\mathcal{G}}^0]^{-1} + \hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) = e^{\ln \text{Det}(-[\hat{\mathcal{G}}^0]^{-1} + \hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu)} = e^{\text{Tr} \ln(-[\hat{\mathcal{G}}^0]^{-1} + \hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu)}, \quad (4.11) \end{aligned}$$

όπου πλέον οι ποσότητες με το καπελάκι είναι τελεστές που θα δράσουν σε μια βάση ιδιοκαταστάσεων και το ίχνος Tr ορίζεται ως προς τους δείκτες $\mathbf{k}, \mathbf{q}, \sigma, ik_\nu, i\omega_s$. Καταφέραμε λοιπόν να ολοκληρώσουμε τους φερμιονικούς βαθμούς ελευθερίας και να καταλήξουμε σε μία συνάρτηση επιμερισμού που είναι συνάρτηση μόνο του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου. Ο λογάριθμος που εμφανίζεται στον εκθέτη, μπορεί να αναπτυχθεί σε δυνάμεις ως προς το πεδίο βαθμίδας. Στην περίπτωσή μας, μας ενδιαφέρουν όροι οι οποίοι είναι τετραγωνικοί στα πεδία και πρώτης τάξεως στην τετραορμή. Έχουμε λοιπόν,

$$\text{Tr} \ln \left(-[\hat{\mathcal{G}}^0]^{-1} + \hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) = \text{Tr} \ln \left(-[\hat{\mathcal{G}}^0]^{-1} \right) + \text{Tr} \ln \left[\hat{\mathbb{I}} - \hat{\mathcal{G}}^0 \left(\hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) \right], \quad (4.12)$$

και ο δεύτερος όρος είναι που μας ενδιαφέρει και γράφεται

$$\text{Tr} \ln \left[\hat{\mathbb{I}} - \hat{\mathcal{G}}^0 \left(\hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) \right] = -\text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[\hat{\mathcal{G}}^0 \left(\hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) \right]^n. \quad (4.13)$$

Αναπτύσσουμε τώρα τον παραπάνω όρο μέχρι δεύτερη τάξη. Σε αυτό το σημείο, πρέπει να θυμηθούμε ότι η συνάρτηση Green περιλαμβάνει τον όρο Zeeman. Λόγω της παρουσίας του πεδίου βαθμίδας B^μ μπορεί να παραλειφθεί, και να ενσωματωθεί στο τέλος μέσω ενός μετασχηματισμού βαθμίδας. Ο πρώτης τάξης όρος της παραπάνω έκφρασης, αντιστοιχεί στην αναμενόμενη τιμή του τετραρεύματος φορτίου και σπιν, το οποίο είναι μηδέν στη θεμελιώδη κατάσταση. Συνεπώς, ο πρώτης τάξης όρος δεν συνεισφέρει. Προχωρούμε στον όρο δεύτερης τάξης όπου ισχύει

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \text{Tr} \left[\left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu \right) \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Gamma}_\nu \hat{A}^\nu \right) + \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Delta}_\nu \hat{B}^\nu \right) + \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu \right) \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Delta}_\nu \hat{B}^\nu \right) + \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu \right) \left(\hat{\mathcal{G}}^0 \hat{\Gamma}_\nu \hat{A}^\nu \right) \right] \\ &= -\frac{\beta N}{2} \sum_{q,\sigma} \sum_{X,Y=A,B} \left[X^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{XY}(q) Y^\nu(q) \right], \end{aligned}$$

όπου ορίσαμε τους ταυιστές πόλωσης (Polarization Tensors) [219],

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{AA}(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_k \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Gamma_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Gamma_\nu^\sigma(k+q, k) \equiv \Pi_{\mu\nu}^\sigma(q), \quad (4.14)$$

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{BB}(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_k \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Delta_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Delta_\nu^\sigma(k+q, k) = \left(\frac{\mu_B}{e}\right)^2 \Pi_{\mu\nu}^\sigma(q), \quad (4.15)$$

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{AB}(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_k \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Gamma_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Delta_\nu^\sigma(k+q, k) = \frac{\sigma\mu_B}{e} \Pi_{\mu\nu}^\sigma(q), \quad (4.16)$$

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{BA}(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_k \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Delta_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Gamma_\nu^\sigma(k+q, k) = \frac{\sigma\mu_B}{e} \Pi_{\mu\nu}^\sigma(q). \quad (4.17)$$

Φυσικά τα παραπάνω αποτελέσματα ήταν αναμενόμενα εξ αρχής αφού η κορυφή αλληλεπίδρασης του ενός πεδίου διαφέρει κατά έναν παράγοντα $\sigma\mu_B/e$ σε σχέση με το άλλο. Έτσι λοιπόν έχουμε απλά

$$\sum_{X,Y=A,B} \left[X^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{XY}(q) Y^\nu(q) \right] = \left\{ \left[A^\mu(-q) + \frac{\sigma\mu_B}{e} B^\mu(-q) \right] \Pi_{\mu\nu}^\sigma(q) \left[A^\nu(q) + \frac{\sigma\mu_B}{e} B^\nu(q) \right] \right\}. \quad (4.18)$$

Σχέσεις Onsager

Παρατηρούμε, ότι για να μη μηδενίζεται ο παραπάνω όρος πρέπει οι ταυιστές πόλωσης να έχουν κάποιες ιδιότητες. Θεωρούμε τον όρο

$$\sum_{q,\sigma} \left[X^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{XY}(q) Y^\nu(q) + Y^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{YX}(q) X^\nu(q) \right]. \quad (4.19)$$

Λόγω του ότι αθροίζουμε σε όλα τα q μπορούμε να αλλάξουμε τον δεύτερο όρο και να πάρουμε ισοδύναμα

$$\sum_{q,\sigma} \left[X^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{XY}(q) Y^\nu(q) + Y^\mu(q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{YX}(-q) X^\nu(-q) \right] = \sum_{q,\sigma} X^\mu(-q) \left[\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{XY}(q) + \Pi_{\nu\mu,\sigma}^{YX}(-q) \right] Y^\nu(q).$$

Εάν θεωρήσουμε ότι ο ταυιστής πόλωσης είναι συμμετρικός στην εναλλαγή των X, Y τότε πρέπει ο όρος $\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{XY}(q) + \Pi_{\nu\mu,\sigma}^{YX}(-q)$ να μην μηδενίζεται. Σε αυτήν την περίπτωση διακρίνουμε δύο περιπτώσεις. Στην πρώτη θεωρούμε ότι ο ταυιστής πόλωσης είναι άρτια συνάρτηση του τετρακυματανύσματος. Σε αυτήν την περίπτωση, για να έχουμε μη μηδενικό όρο αλληλεπίδρασης πρέπει ο ταυιστής πόλωσης να είναι άρτιος και στην εναλλαγή των χωροχρονικών δεικτών μ, ν . Ομοίως εάν ο ταυιστής πόλωσης είναι περιττή συνάρτηση του τετρακυματανύσματος, τότε οφείλει να είναι και περιττός ως προς την εναλλαγή των χωροχρονικών δεικτών. Πρέπει τέλος να τονίσουμε ότι η εναλλαγή της θέσης των πεδίων έγινε με τη θεώρηση, είτε ότι μπορούμε να αγνοήσουμε τους επιφανειακούς όρους είτε θεωρώντας ότι τα πεδία βρίσκονται σε κατάλληλη βαθμίδα. Οι παραπάνω συνθήκες ονομάζονται σχέσεις Onsager [10].

4.3.1 Τανυστής Πόλωσης

Χρησιμοποιώντας τα γενικά αποτελέσματα που έχουμε εξάγει για τον Τανυστή Πόλωσης στο Παράρτημα, καταλήγουμε στα εξής συμπεράσματα για τα στοιχεία του ταυιστή στις περιπτώσεις που εξετάζουμε. Συγκεκριμένα έχουμε

$$\frac{N}{+e^2} \Pi_{00}^\sigma(q) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} + g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) + E_{\mathbf{k},\sigma} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} + g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) - E_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) + E_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) - E_{\mathbf{k},\sigma} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}}. \quad (4.20)
\end{aligned}$$

Θέλουμε να κρατήσουμε όρους μέχρι πρώτης τάξης ως προς τα κυματανύσματα και την συχνότητα. Θεωρούμε ότι είμαστε σε χαμηλές θερμοκρασίες, πολύ χαμηλότερες σε σχέση με την κλίμακα του μικρότερου ενεργειακού χάσματος. Υπό αυτές τις συνθήκες, οι καταστάσεις με ενέργεια $E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma}$ θεωρούνται κατειλημμένες ενώ οι καταστάσεις με ενέργεια $E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},+\sigma}$ μη κατειλημμένη. Αυτά βέβαια ισχύουν με την προϋπόθεση ότι περιοριζόμαστε σε μικρά κυματανύσματα. Έχοντας επιβάλει αυτούς τους περιορισμούς, το εν λόγω στοιχείο του Τανυστή Πόλωσης γίνεται

$$\Pi_{00}^\sigma(q) = \mathcal{O}(q^2), \quad (4.21)$$

όπου κάναμε χρήση του γεγονότος ότι οι συναρτήσεις $g_{\mathbf{k},\sigma}^m$ είναι καθορισμένης ομοτιμίας. Προχωρούμε στο επόμενο στοιχείο

$$\begin{aligned}
& \frac{N}{-e^2} \Pi_{0i}^\sigma(q) = \\
& = \sum_{\mathbf{k}} \frac{+E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^l + i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) + E_{\mathbf{k},\sigma} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^i} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{-E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^l + i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) - E_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^i} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{-E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^l - i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) + E_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^i} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{+E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^l - i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) - E_{\mathbf{k},\sigma} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^i}.
\end{aligned}$$

πάλι στα πλαίσια των ίδιων παραδοχών, προκύπτει

$$\Pi_{0i}^\sigma(q) = \frac{C^\sigma}{N} q^i + \frac{e^2}{N} \sum_{\mathbf{k},j} (iq^j) \frac{\varepsilon_{mnl}}{2E_{\mathbf{k},\sigma}^3} g_{\mathbf{k},\sigma}^m \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j} + \mathcal{O}(q^2). \quad (4.22)$$

Αντίστοιχα

$$\Pi_{i0}^\sigma(q) = \frac{C^\sigma}{N} q^i - \frac{e^2}{N} \sum_{\mathbf{k},j} (iq^j) \frac{\varepsilon_{mnl}}{2E_{\mathbf{k},\sigma}^3} g_{\mathbf{k},\sigma}^m \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j} + \mathcal{O}(q^2). \quad (4.23)$$

Πρέπει να επισημάνουμε ότι η ποσότητα C^σ δεν έχει υπολογισθεί γιατί τελικά δεν συνεισφέρει στην δράση. Αυτό εξηγείται εύκολα με βάση τις σχέσεις Onsager. Λόγω του ότι αναζητούμε γραμμικούς

όρους ως προς το κυματόνισμα ισχύουν $\Pi_{i0}^\sigma(q) = -\Pi_{i0}^\sigma(-q)$ και $\Pi_{0i}^\sigma(q) = -\Pi_{0i}^\sigma(-q)$. Σύμφωνα με τις σχέσεις Onsager που εξάγαμε στην προηγούμενη παράγραφο πρέπει να ισχύει $\Pi_{i0}^\sigma(q) = -\Pi_{0i}^\sigma(q)$. Ο εν λόγω όρος που προκύπτει από τους υπολογισμούς δεν έχει αυτήν την ιδιότητα και δεν μπορεί να συνεισφέρει στα συγκεκριμένα στοιχεία του ταυυστή πόλωσης. Καταλήγουμε λοιπόν στη σχέση

$$\Pi_{0i}^\sigma(q) = +\frac{e^2}{2N} \sum_{\mathbf{k},j} (iq^j) \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k^i} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k^j} \right) + \mathcal{O}(q^2), \quad (4.24)$$

$$\Pi_{i0}^\sigma(q) = -\frac{e^2}{2N} \sum_{\mathbf{k},j} (iq^j) \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k^i} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k^j} \right) + \mathcal{O}(q^2). \quad (4.25)$$

Προχωράμε τώρα στον τελευταίο όρο

$$\begin{aligned} & \frac{N}{+e^2} \Pi_{ij}^\sigma(q) = \\ & = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) \delta_{nl} + i\varepsilon_{mnl} \left(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^m - E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) + g_{\mathbf{k},\sigma}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l + g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \\ & \quad \times \frac{n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) + E_{\mathbf{k},\sigma} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) \delta_{nl} - i\varepsilon_{mnl} \left(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^m - E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) + g_{\mathbf{k},\sigma}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l + g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \\ & \quad \times \frac{n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) - E_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} + g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) \delta_{nl} + i\varepsilon_{mnl} \left(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^m + E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) - g_{\mathbf{k},\sigma}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l - g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \\ & \quad \times \frac{n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) + E_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j} \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\left(E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} + g_{\mathbf{k},\sigma}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) \delta_{nl} - i\varepsilon_{mnl} \left(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} g_{\mathbf{k},\sigma}^m + E_{\mathbf{k},\sigma} g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^m \right) - g_{\mathbf{k},\sigma}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^l - g_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^n g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{2E_{\mathbf{k},\sigma} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \\ & \quad \times \frac{n_F(-\mu_\sigma - E_{\mathbf{k},\sigma}) - n_F(-\mu_\sigma + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})}{i\omega_s - (\mu_\sigma - \mu_\sigma) - E_{\mathbf{k},\sigma} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Στο πνεύμα των ίδιων προσεγγίσεων προκύπτει

$$\begin{aligned} \Pi_{ij}^\sigma(q) & = -\frac{e^2}{N} \delta_{i,j} \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k},\sigma}^2 \delta_{nl} - g_{\mathbf{k},\sigma}^n g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{E_{\mathbf{k},\sigma}^3} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^n}{\partial k^i} \frac{\partial g_{\mathbf{k},\sigma}^l}{\partial k^j} \\ & \quad + \frac{e^2}{2N} i(i\omega_s) \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k^i} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k^j} \right) + \mathcal{O}(q^2). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Ο πρώτος όρος παραβιάζει τη συμμετρία βαθμίδας, διότι είναι ένας όρος μάζας για το διανυσματικό δυναμικό. Η ύπαρξή του οφείλεται στο ότι δεν έχουμε λάβει υπόψη μας τα διαμαγνητικά ρεύματα που

οφείλουν να τον ακυρώσουν [10]. Αγνοώντας λοιπόν τον πρώτο όρο, τελικά καταλήγουμε στη σχέση

$$\Pi_{\mu\nu}^{\sigma}(q) = \frac{e^2}{2\pi} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (iq^{\lambda}) \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma}, \quad (4.28)$$

όπου $q^{\lambda} = (i\omega_s, \mathbf{q})$, ενώ χρησιμοποιήσαμε παράλληλα τον ορισμό του τοπολογικού φορτίου

$$\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma} = \frac{1}{4\pi} \int dk_x dk_y \hat{\mathbf{g}}_{\sigma}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right), \quad (4.29)$$

που εισαγάγαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Όπως ήδη έχουμε δείξει στις Χειρικές τοπολογικές καταστάσεις $\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma} = -1$, ενώ στις ελικοειδή $\tilde{\mathcal{N}}_{\sigma} = -\sigma$.

4.3.2 Γενική έκφραση της ενεργού δράσης

Η συνάρτηση επιμερισμού λαμβάνει τη μορφή

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \exp \left\{ -\frac{\beta N}{2} \sum_{q,\sigma} \left[A^{\mu}(-q) + \frac{\sigma\mu_B}{e} B^{\mu}(-q) \right] \frac{e^2}{h} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (iq^{\lambda}) \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma} \left[A^{\nu}(q) + \frac{\sigma\mu_B}{e} B^{\nu}(q) \right] \right\} \Rightarrow$$

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \frac{1}{2} \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma} \int d^3x \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \left[A^{\mu}(x) + \frac{\sigma\mu_B}{e} B^{\mu}(x) \right] \partial^{\nu} \left[A^{\lambda}(x) + \frac{\sigma\mu_B}{e} B^{\lambda}(x) \right] \Rightarrow \quad (4.30)$$

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_0 + \mathcal{S}_{CS}^a + \mathcal{S}_{CS}^b + \mathcal{S}_{ab} + \mathcal{S}_{ba}, \quad (4.31)$$

όπου εισαγάγαμε τις δράσεις

$$\mathcal{S}_{CS}^a = \int d^3x \frac{\theta_{aa}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} A^{\mu} F^{\nu\lambda}, \quad \theta_{aa} = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma}, \quad (4.32)$$

$$\mathcal{S}_{CS}^b = \int d^3x \frac{\theta_{bb}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B^{\mu} \mathcal{F}^{\nu\lambda}, \quad \theta_{bb} = \frac{\mu_B^2}{h} \sum_{\sigma} \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma}, \quad (4.33)$$

$$\mathcal{S}_{ab} = \int d^3x \frac{\theta_{ab}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} A^{\mu} \mathcal{F}^{\nu\lambda}, \quad \theta_{ab} = \frac{e\mu_B}{h} \sum_{\sigma} \sigma \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma}, \quad (4.34)$$

$$\mathcal{S}_{ba} = \int d^3x \frac{\theta_{ba}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B^{\mu} F^{\nu\lambda}, \quad \theta_{ba} = \frac{e\mu_B}{h} \sum_{\sigma} \sigma \tilde{\mathcal{N}}_{\sigma} = \theta_{ab}, \quad (4.35)$$

όπου $\mathcal{F}^{\mu\nu}$ ο ταυσιτής πεδίου του πεδίου βαθμίδας B^{μ} . Όπως βλέπουμε, οι δύο πρώτοι όροι αντιστοιχούν στη δράση Chern-Simons [220], ενώ οι δύο τελευταίοι στη δράση BF που συνδέει ένα πεδίο B με τον ταυσιτή F ενός άλλου [221]. Με αυτόν τον τρόπο λαμβάνουμε μία δράση που αναλόγως την τιμή των τοπολογικών αναλλοίωτων, μπορεί να είναι τύπου Chern-Simons ή BF.

4.4 Εξισώσεις κίνησης της γενικής δράσης

Σε αυτήν την παράγραφο, θα μελετήσουμε τις εξισώσεις κίνησης της γενικής τοπολογικής δράσης που εξαγάγαμε παραπάνω εφοδιασμένοι με κινητικούς όρους για τα πεδία

$$\mathcal{S}_{F^2} = - \int d^3x \frac{1}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu}, \quad \mathcal{S}_{\mathcal{F}^2} = - \int d^3x \frac{1}{4} \mathcal{F}^{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu}, \quad (4.36)$$

καθώς και με όρους ρευμάτων

$$\mathcal{S}_j = - \int d^3x j_\mu A^\mu, \quad \mathcal{S}_{jz} = - \int d^3x j_\mu^z B^\mu, \quad (4.37)$$

καταλήγοντας στην συνολική δράση

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_{F^2} + \mathcal{S}_{\mathcal{F}^2} + \mathcal{S}_{CS}^a + \mathcal{S}_{CS}^b + \mathcal{S}_{ab} + \mathcal{S}_{ba} + \mathcal{S}_j + \mathcal{S}_{jz}. \quad (4.38)$$

Οι εξισώσεις κίνησης θα προέλθουν από το μηδενισμό της μεταβολής της συνολικής δράσης $\delta\mathcal{S} = 0$, ως προς τις μεταβολές δA^μ και δB^μ των πεδίων βαθμίδας. Παραθέσουμε αναλυτικά την μεταβολή των επιμέρους όρων για πληρότητα. Έχουμε λοιπόν

$$\delta\mathcal{S}_{F^2} = - \int d^3x \frac{1}{2} F^{\mu\nu} \delta F_{\mu\nu} = \int d^3x \partial^\nu F_{\nu\mu} \delta A^\mu + \int dS n^\nu F_{\mu\nu} \delta A^\mu, \quad (4.39)$$

$$\delta\mathcal{S}_{\mathcal{F}^2} = - \int d^3x \frac{1}{2} \mathcal{F}^{\mu\nu} \delta \mathcal{F}_{\mu\nu} = \int d^3x \partial^\nu \mathcal{F}_{\nu\mu} \delta B^\mu + \int dS n^\nu \mathcal{F}_{\mu\nu} \delta B^\mu, \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{S}_{CS}^a &= \int d^3x \left[\frac{\theta_{aa}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\delta A^\mu) F^{\nu\lambda} + \frac{\theta_{aa}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} A^\mu \delta F^{\nu\lambda} \right] \\ &= \int d^3x \left[\frac{\theta_{aa}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} F^{\nu\lambda} + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{aa}) A^\lambda \right] \delta A^\mu - \int dS n^\nu \left(\frac{\theta_{aa}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} A^\lambda \right) \delta A^\mu, \end{aligned} \quad (4.41)$$

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{S}_{CS}^b &= \int d^3x \left[\frac{\theta_{bb}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\delta B^\mu) \mathcal{F}^{\nu\lambda} + \frac{\theta_{bb}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B^\mu \delta \mathcal{F}^{\nu\lambda} \right] \\ &= \int d^3x \left[\frac{\theta_{bb}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \mathcal{F}^{\nu\lambda} + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{bb}) B^\lambda \right] \delta B^\mu - \int dS n^\nu \left(\frac{\theta_{bb}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B^\lambda \right) \delta B^\mu, \end{aligned} \quad (4.42)$$

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{S}_{ab} &= \int d^3x \frac{\theta_{ab}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} [\mathcal{F}^{\nu\lambda} \delta A^\mu + F^{\nu\lambda} \delta B^\mu] + \int d^3x \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{ab}) A^\lambda \delta B^\mu \\ &\quad - \int dS n^\nu \left(\frac{\theta_{ab}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} A^\lambda \right) \delta B^\mu, \end{aligned} \quad (4.43)$$

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{S}_{ba} &= \int d^3x \frac{\theta_{ba}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} [F^{\nu\lambda} \delta B^\mu + \mathcal{F}^{\nu\lambda} \delta A^\mu] + \int d^3x \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{ba}) B^\lambda \delta A^\mu \\ &\quad - \int dS n^\nu \left(\frac{\theta_{ba}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} B^\lambda \right) \delta A^\mu, \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\delta\mathcal{S}_j = - \int d^3x j_\mu \delta A^\mu, \quad (4.45)$$

$$\delta\mathcal{S}_{jz} = - \int d^3x j_\mu^z \delta B^\mu. \quad (4.46)$$

4.4.1 Εξισώσεις κίνησης για το πεδίο βαθμίδας ηλεκτρικού φορτίου

Συγκεντρώνοντας τους όρους της μεταβολής της δράσης που είναι ανάλογοι της μεταβολής του πεδίου βαθμίδας A^μ , προκύπτουν οι εξισώσεις κίνησης στον όγκο του υλικού

$$\partial^\nu F_{\nu\mu} + \frac{\theta_{aa}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} F^{\nu\lambda} + \frac{\theta_{ab}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \mathcal{F}^{\nu\lambda} + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{aa}) A^\lambda + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{ba}) B^\lambda = j_\mu, \quad (4.47)$$

καθώς και οι συνοριακές συνθήκες

$$n^i (F_{\mu i}^+ - F_{\mu i}^-) = \frac{\theta_{aa}^+ - \theta_{aa}^-}{2} \varepsilon_{\mu i \lambda} n^i A^\lambda + \frac{\theta_{ba}^+ - \theta_{ba}^-}{2} \varepsilon_{\mu i \lambda} n^i B^\lambda, \quad (4.48)$$

όπου εννοείται ότι το διάνυσμα \mathbf{n} είναι κάθετο στο σύνορο και τα πεδία υπολογίζονται στην ίδια χρονική στιγμή. Με \pm συμβολίζουμε τις ποσότητες που ορίζονται ακριβώς πάνω και κάτω από την συνοριακή επιφάνεια. Το πάνω και κάτω αντιστοιχεί στο παράλληλα και αντιπαράλληλα στο διάνυσμα \mathbf{n} . Το δεξί μέλος της εξίσωσης 4.48 αντιστοιχεί σε ένα επιφανειακό ρεύμα που προκύπτει λόγω της ασυνέχειας των θ στο σύνορο. Το ίδιο συμβαίνει και με την εξίσωση 4.47, όπου μπορούμε να δούμε ότι το ρεύμα δεν διατηρείται [222, 223]

$$\partial^\mu j_\mu = \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\mu \theta_{aa}) F^{\nu\lambda} + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\mu \theta_{ba}) \mathcal{F}^{\nu\lambda}, \quad (4.49)$$

αναδεικνύοντας ότι η δράση Chern-Simons δεν είναι αναλλοίωτη κατά μετασχηματισμούς βαθμίδας, λόγω της ύπαρξης της συνοριακής επιφάνειας. Παρ' όλ' αυτά γνωρίζουμε ότι οι καταστάσεις που περιγράφουμε δεν είναι υπεραγωγίμες και οφείλουν να είναι αναλλοίωτες σε μετασχηματισμούς βαθμίδας. Συνεπώς θα πρέπει σε αυτό το σημείο να αγνοούμε κάποια συνεισφορά ρεύματος η οποία να επαναφέρει αυτήν την αναλλοιότητα. Η συνεισφορά αυτή προέρχεται από τα φερμιονικά πεδία που διαδίδονται στο σύνορο του υλικού. Όπως έχει δείχθει [222, 223], εάν συμπεριλάβουμε το ρεύμα αυτών των βαθμών ελευθερίας, η συμμετρία βαθμίδας αποκαθίσταται και οι όροι που περιλαμβάνουν τις παραγώγους των θ , δεν χρειάζεται να ληφθούν υπόψη.

4.4.2 Εξισώσεις κίνησης για το πεδίο βαθμίδας σπιν

Συγκεντρώνοντας τους όρους της μεταβολής της δράσης που είναι ανάλογοι της μεταβολής του πεδίου βαθμίδας A^μ , προκύπτουν οι εξισώσεις κίνησης

$$\partial^\nu \mathcal{F}_{\nu\mu} + \frac{\theta_{bb}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \mathcal{F}^{\nu\lambda} + \frac{\theta_{ba}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} F^{\nu\lambda} + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{bb}) B^\lambda + \frac{1}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\nu \theta_{ab}) A^\lambda = j_\mu^z, \quad (4.50)$$

καθώς και οι συνοριακές συνθήκες

$$n^i (\mathcal{F}_{\mu i}^+ - \mathcal{F}_{\mu i}^-) = \frac{\theta_{bb}^+ - \theta_{bb}^-}{2} \varepsilon_{\mu i \lambda} n^i B^\lambda + \frac{\theta_{ab}^+ - \theta_{ab}^-}{2} \varepsilon_{\mu i \lambda} n^i A^\lambda, \quad (4.51)$$

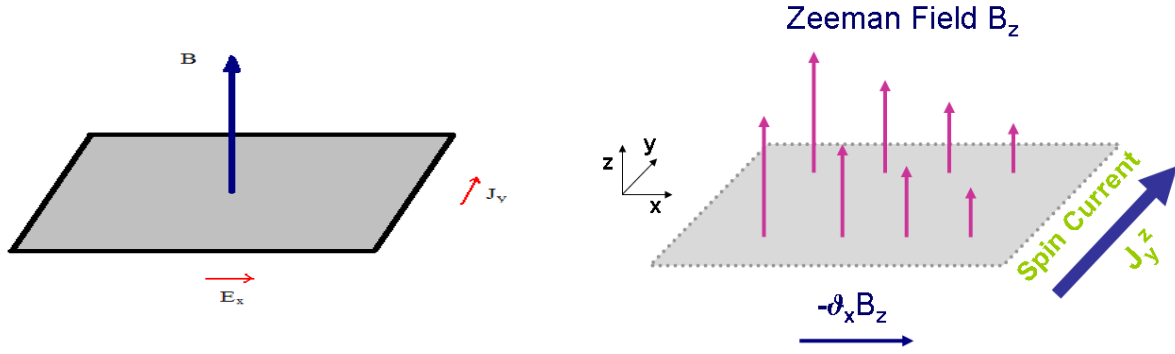
Παρόμοια είναι τα συμπεράσματα και σε αυτήν την περίπτωση. Και πάλι το ρεύμα σπιν δεν διατηρείται στο σύνορο

$$\partial^\mu j_\mu^z = \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\mu \theta_{bb}) \mathcal{F}^{\nu\lambda} + \frac{1}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\partial^\mu \theta_{ab}) F^{\nu\lambda}, \quad (4.52)$$

αλλά και σε αυτήν την περίπτωση, οι συνοριακοί βαθμοί ελευθερίας διατηρούν τη συμμετρία βαθμίδας του σπιν [224].

4.5 Τοπολογική μεταφορά φορτίου και σπιν

Έχοντας την ενεργό δράση των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν συναρτήσει των πεδίων βαθμίδας A^μ και B^μ , μας δίνει την δυνατότητα να υπολογίσουμε την αυθόρμητη (ή ανώμαλη) τοπολογική απόκριση αυτών των καταστάσεων. Η απόκριση αυτή, χαρακτηρίζει τη θεμελιώδη κατάσταση όπως αναμένουμε είναι τύπου Hall. Δηλαδή εφαρμόζουμε μία εξωτερική διαταραχή σε μία διεύθυνση και περιμένουμε την απόκριση στην κάθετη. Για αυτό το λόγο ονομάζεται αυθόρμητη, διότι δεν χρειάζεται να εφαρμόσουμε δύο διαφορετικού τύπου εξωτερικές διαταραχές για να την παρατηρήσουμε, αλλά μόνο



Σχήμα 4.1: a. Αυθόρμητο Κβαντικό Φαινόμενο Hall. Η εφαρμογή ενός ηλεκτρικού πεδίου, οδηγεί σε ένα εγκάρσιο ρεύμα, δίχως την υποχρεωτική παρουσία ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. b. Αυθόρμητο Κβαντικό Φαινόμενο Hall του Σπιν. Αντίστοιχα με την προηγούμενη περίπτωση, η εφαρμογή μιας μαγνητοβαθμίδας κατά τον άξονα \hat{z} μπορεί να οδηγήσει στη μεταφορά σπιν στην εγκάρσια διεύθυνση με πόλωση σπιν παράλληλα στον ίδιο άξονα. P. Kotetes and G. Varelogiannis, *Europhys. Lett.* **84**, 37012 (2008) [190] και P. Kotetes and G. Varelogiannis, *J. Supercond. Nov. Magn.* **22**, 141 (2009) [191].

ενός. Από τις παραπάνω εξισώσεις, εάν θεωρήσουμε ότι μηδενίζονται οι παράγωγοι των ταχυστών των πεδίων $\partial^\mu F_{\mu\nu} = \partial^\mu \mathcal{F}_{\mu\nu} = 0$, αφήνοντας έτσι μόνο σταθερά ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία φορτίου και σπιν, έχουμε

$$j_\mu = \frac{\theta_{aa}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} F^{\nu\lambda} + \frac{\theta_{ab}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \mathcal{F}^{\nu\lambda} = \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\theta_{aa} \partial^\nu A^\lambda + \theta_{ab} \partial^\nu B^\lambda), \quad (4.53)$$

$$j_\mu^z = \frac{\theta_{bb}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \mathcal{F}^{\nu\lambda} + \frac{\theta_{ba}}{2} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} F^{\nu\lambda} = \varepsilon_{\mu\nu\lambda} (\theta_{ba} \partial^\nu A^\lambda + \theta_{bb} \partial^\nu B^\lambda), \quad (4.54)$$

όπου αγνοήσαμε την ύπαρξη συνοριακών επιφανειών και κατά συνέπεια τη ανομοιογένεια των θ_{ij} με $i, j = a, b$. Παρατηρούμε ότι η παραπάνω σχέση είναι αρκετά συμμετρική και μπορεί να γραφεί πιο συμπυκνωμένα ως εξής

$$\begin{pmatrix} j_\mu \\ j_\mu^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \theta_{aa} & \theta_{ab} \\ \theta_{ba} & \theta_{bb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \partial^\nu A^\lambda \\ \varepsilon_{\mu\nu\lambda} \partial^\nu B^\lambda \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

Μπορούμε τώρα να αντικαταστήσουμε τα τετραρεύματα και τα αντίστοιχα πεδία και να πάρουμε

$$\begin{pmatrix} \rho_c \\ \rho_s^z \\ j_x \\ j_x^z \\ j_y \\ j_y^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +\sigma_{xy}^c & +\sigma_{xy}^{cs} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +\sigma_{xy}^{cs} & +\sigma_{xy}^s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +\sigma_{xy}^c & +\sigma_{xy}^{cs} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +\sigma_{xy}^{cs} & +\sigma_{xy}^s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{xy}^c & -\sigma_{xy}^{cs} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{xy}^{cs} & -\sigma_{xy}^s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{B}_z \\ 0 \\ \mathcal{E}_y \\ -\partial_y \mathcal{B}_z \\ \mathcal{E}_x \\ -\partial_x \mathcal{B}_z \end{pmatrix}, \quad (4.56)$$

όπου εισαγάγαμε την Αυθόρμητη αγωγιμότητα Hall φορτίου $\sigma_{xy}^c = -\theta_{aa}$, την Αυθόρμητη αγωγιμότητα Hall σπιν $\sigma_{xy}^s = -\theta_{bb}$ και την αυθόρμητη μαγνητοηλεκτρική αγωγιμότητα Hall $\sigma_{xy}^{cs} = -\theta_{ab}$. Παραπάνω θεωρήσαμε ότι όλα τα πεδία και οι κλίσεις των πεδίων είναι σταθερά.

4.5.1 Χειρικές Τοπολογικές Καταστάσεις

Στην περίπτωση των Χειρικών Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, ισχύει $\widetilde{\mathcal{N}}_{\uparrow} = \widetilde{\mathcal{N}}_{\downarrow} \Rightarrow \widetilde{\mathcal{N}} \neq 0$. Συνεπώς $\theta_{aa} = \frac{e^2}{h}\widetilde{\mathcal{N}}$, $\theta_{bb} = \frac{\mu_B^2}{h}\widetilde{\mathcal{N}}$ και $\theta_{ab} = \theta_{ba} = 0$. Προκύπτει λοιπόν

$$\begin{pmatrix} \rho_c \\ \rho_s^z \\ j_x \\ j_x^z \\ j_y \\ j_y^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} +\sigma_{xy}^c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +\sigma_{xy}^s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +\sigma_{xy}^c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +\sigma_{xy}^s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{xy}^c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{xy}^s \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{B}_z \\ 0 \\ \mathcal{E}_y \\ -\partial_y \mathcal{B}_z \\ \mathcal{E}_x \\ -\partial_x \mathcal{B}_z \end{pmatrix}. \quad (4.57)$$

4.5.2 Ελικοειδείς Τοπολογικές Καταστάσεις

Στην περίπτωση των Ελικοειδών Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, ισχύει $\widetilde{\mathcal{N}}_{\uparrow} = -\widetilde{\mathcal{N}}_{\downarrow}$. Συνεπώς, $\theta_{aa} = \theta_{bb} = 0$ και $\theta_{ab} = \theta_{ba} = \frac{e\mu_B}{h}\widetilde{\mathcal{N}}$ και προκύπτει

$$\begin{pmatrix} \rho_c \\ \rho_s^z \\ j_x \\ j_x^z \\ j_y \\ j_y^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & +\sigma_{xy}^{cs} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +\sigma_{xy}^{cs} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +\sigma_{xy}^{cs} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +\sigma_{xy}^{cs} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{xy}^{cs} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{xy}^{cs} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{B}_z \\ 0 \\ \mathcal{E}_y \\ -\partial_y \mathcal{B}_z \\ \mathcal{E}_x \\ -\partial_x \mathcal{B}_z \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

4.6 Δυναμική απόκριση και διάδοση των φωτονίων

Σε αυτήν την παράγραφο θα μελετήσουμε τις δυναμικές ιδιότητες των υπό εξέταση τοπολογικών καταστάσεων, όπως αυτές προκύπτουν από τις εξισώσεις κίνησης των ενεργών Τοπολογικών Θεωριών Πεδίου. Σε κάθε μία από τις δύο διαφορετικές τοπολογικές καταστάσεις θα μελετήσουμε την ενεργειακή διασπορά των φωτονίων [220, 225] όπως αυτή διαμορφώνεται μέσω της αλληλεπίδρασης με τα Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας.

4.6.1 Χειρικές Τοπολογικές Καταστάσεις

Έχοντας λάβει υπόψη τη συνεισφορά των συνοριακών βαθμών ελευθερίας, θα μελετήσουμε τώρα τις εξισώσεις κίνησης της δράσης που είναι αναλλοίωτες σε μετασχηματισμούς βαθμίδας. Υπενθυμίζουμε ότι $\mathcal{E} = -\nabla V - \partial_t \mathbf{A} \Rightarrow \mathcal{E}^i = -\partial_i A^0 - \partial_0 A^i = \partial^i A^0 - \partial^0 A^i \equiv F^{i0}$ και $\mathcal{B} = \nabla \times \mathbf{A} \Rightarrow \mathcal{B}^i = \varepsilon_{ijk} \partial_j A^k = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} F^{kj} \Rightarrow F^{ji} = \varepsilon^{ijk} \mathcal{B}^k$. Επιπλέον, λαμβάνουμε υπόψη ότι το πεδίο B^μ είναι χρονομεταβαλλόμενο, $\theta_{aa} = -\sigma_{xy}^c$, $\theta_{ab} = 0$ και $\theta_{bb} = -\sigma_{xy}^s$. Παίρνουμε τελικά τις ακόλουθες εξισώσεις:

$$\frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial y} + \frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{B}_z = +\rho_c, \quad (4.59)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial t} - \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial y} - \frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{E}_y = -j_x, \quad (4.60)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} + \frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{E}_x = -j_y, \quad (4.61)$$

$$-\frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial y^2} = +\rho_s^z, \quad (4.62)$$

$$+\sigma_{xy}^s \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial y} = -j_x^z, \quad (4.63)$$

$$-\sigma_{xy}^s \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} = -j_y^z. \quad (4.64)$$

Το παραπάνω σύστημα είναι υπερορισμένο, δηλαδή υπάρχουν περισσότερες εξισώσεις παρά πεδία. Αυτό αντιμετωπίζεται με τον ακόλουθο τρόπο: κάποιες από αυτές τις εξισώσεις, και συγκεκριμένα οι τρεις τελευταίες, δεν πρέπει να χρησιμοποιηθούν για την εύρεση της δυναμικής των πεδίων. Αντίθετα χρησιμεύουν για να υπολογίσουμε τα ρεύματα και την πυκνότητα σπιν. Για τη μελέτη λοιπόν των δυναμικών ιδιοτήτων περιοριζόμαστε στις τρεις πρώτες εξισώσεις. Θα θεωρήσουμε τώρα ότι τα πιθανά ρεύματα που είναι δυνατόν να εμφανιστούν ότι υπακούουν το νόμο του Ohm $\mathbf{j}(\omega, \mathbf{q}) = \sigma \mathbf{E}(\omega, \mathbf{q})$. Μετασχηματίζοντας κατά Fourier τα πεδία καταλήγουμε στις εξισώσεις

$$+iq_x \mathcal{E}_x(\omega, \mathbf{q}) + iq_y \mathcal{E}_y(\omega, \mathbf{q}) + \frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{B}_z(\omega, \mathbf{q}) = \rho_c(\omega, \mathbf{q}), \quad (4.65)$$

$$-(i\omega - \sigma) \mathcal{E}_x(\omega, \mathbf{q}) - \frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{E}_y(\omega, \mathbf{q}) - iq_y \mathcal{B}_z(\omega, \mathbf{q}) = 0, \quad (4.66)$$

$$+\frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{E}_x(\omega, \mathbf{q}) - (i\omega - \sigma) \mathcal{E}_y(\omega, \mathbf{q}) + iq_x \mathcal{B}_z(\omega, \mathbf{q}) = 0, \quad (4.67)$$

όπου τα $\mathcal{E}_{x,y}, \mathcal{B}_z$ και ρ_c είναι συναρτήσεις της συχνότητας και του κυματανύσματος. Βέβαια, και η Αυθόρμητη Αγωγιμότητα Hall, εξαρτάται από την συχνότητα και το κυματάνυσμα. Παρ'ολ αυτά, στις περιπτώσεις που εξετάζουμε η συχνότητα είναι μικρότερη από το χάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων, κάτι που μας επιτρέπει με ασφάλεια να θεωρήσουμε την σ_{xy}^c σταθερή. Παρατηρούμε πως εάν $\rho_c \neq 0$ το παραπάνω σύστημα εξισώσεων έχει μία μη μηδενική λύση. Αντίθετα, εάν η πυκνότητα φορτίου είναι μηδενική τότε το σύστημα εξισώσεων είναι ομογενές. Σε αυτήν την περίπτωση εάν θέσουμε την ορίζουσα ίση με το μηδέν μπορούμε να βρούμε τις σχέσεις διασποράς των φωτονίων. Η ορίζουσα \mathbf{D} δίνει

$$\mathbf{D} = -\left(\sigma_{xy}^c/d\right) \left[(\omega + i\sigma)^2 - \mathbf{q}^2 - \left(\sigma_{xy}^c/d\right)^2 \right]. \quad (4.68)$$

Κατ' αρχήν θα μελετήσουμε την περίπτωση της μηδενικής αγωγιμότητας και πυκνότητας φορτίου. Σε αυτήν την περίπτωση το σύστημα είναι πολύ καλά μονωμένο, δηλαδή βρισκόμαστε στην περιοχή όπου η αγωγιμότητα Hall είναι χβαντισμένη. Παρατηρούμε ότι για $\omega > 0$ και $|\mathbf{q}| = 0$ ο μηδενισμός της ορίζουσας δίνει $\omega = |\sigma_{xy}^c|/d$. Αυτό σημαίνει ότι για να δημιουργήσουμε ένα φωτόνιο απαιτείται ενεργειακή δαπάνη ίση με $|\sigma_{xy}^c|/d$. Το αποτέλεσμα αυτό έχει πολύ σημαντικές συνέπειες. **Παρόλο που η κατάσταση μας δεν είναι υπεραγώγιμη και άρα δεν συνοδεύεται με αυθόρμητο σπάσιμο της συμμετρίας βαθμίδας $U(1)$, το φωτόνιο έχει μάζα [220, 225].** Στην περίπτωση μας όμως η μάζα είναι τοπολογική προέλευσης. Για πεπερασμένα κυματάνυσμα, το φωτόνιο υπακούει στη σχέση διασποράς ενός έμμαζου πεδίου Klein-Gordon, $\omega^2 = |\mathbf{q}|^2 + \left(\sigma_{xy}^c/d\right)^2$. Στην στατική περίπτωση $\omega = 0$ ισχύει $|\mathbf{q}| = \pm i \left(\sigma_{xy}^c/d\right)$. Σε αυτήν την περίπτωση τα πεδία αντί να διαδίδονται στον χώρο, σβήνουν εκθετικά. Η συγκεκριμένη ιδιότητα καταδεικνύει την θωράκιση του υλικού από τα εξωτερικά εφαρμολζόμενα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία. **Μάλιστα, η θωράκιση από το μαγνητικό πεδίο οδηγεί στο Τοπολογικό Φαινόμενο Meissner [189].**

Στην περίπτωση της πεπερασμένης αγωγιμότητας σ , η διασπορά των φωτονίων γίνεται

$$\omega = \sigma_{\Im} \pm \sqrt{|\mathbf{q}|^2 + \left(\sigma_{xy}^c/d\right)^2} - i\sigma_{\Re}. \quad (4.69)$$

Παρατηρούμε ότι το φανταστικό μέρος της αγωγιμότητας σ_{\Im} δρα σαν ένα χημικό δυναμικό που μετατοπίζει την ενεργειακή διασπορά. Αντίθετα, το πραγματικό μέρος σ_{\Re} δίνει μία φανταστική συνιστώσα στην ενεργειακή διασπορά, που αντιστοιχεί σε έναν πεπερασμένο χρόνο ζωής για τα φωτόνια.

Για πεπερασμένη πυκνότητα φορτίου, το σύστημα έχει την ακόλουθη μοναδική λύση

$$\mathcal{E}_x(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{d}{\sigma_{xy}^c} \frac{\omega q_y + i [\sigma q_y - (\sigma_{xy}^c/d) q_x]}{(\omega + i\sigma)^2 - \mathbf{q}^2 - (\sigma_{xy}^c/d)^2} \rho_c(\omega, \mathbf{q}), \quad (4.70)$$

$$\mathcal{E}_y(\omega, \mathbf{q}) = +\frac{d}{\sigma_{xy}^c} \frac{\omega q_x + i [\sigma q_x + (\sigma_{xy}^c/d) q_y]}{(\omega + i\sigma)^2 - \mathbf{q}^2 - (\sigma_{xy}^c/d)^2} \rho_c(\omega, \mathbf{q}), \quad (4.71)$$

$$\mathcal{B}_z(\omega, \mathbf{q}) = +\frac{d}{\sigma_{xy}^c} \frac{(\omega + i\sigma)^2 - (\sigma_{xy}^c/d)^2}{(\omega + i\sigma)^2 - \mathbf{q}^2 - (\sigma_{xy}^c/d)^2} \rho_c(\omega, \mathbf{q}). \quad (4.72)$$

Βλέπουμε ότι για $\mathbf{q} = 0$ προκύπτει $\frac{\sigma_{xy}^c}{d} \mathcal{B}_z(\omega, \mathbf{q}) = \rho_c(\omega, \mathbf{q})$. Εάν λοιπόν εφαρμόσουμε ένα μαγνητικό πεδίο στο σύστημα, τότε σε αυτήν την περίπτωση δημιουργεί μία πεπερασμένη πυκνότητα φορτίου στο υλικό. Αντίθετα, εάν το υλικό παρουσιάζει πεπερασμένη πυκνότητα φορτίου, τότε παρουσιάζεται πεπερασμένη μαγνήτιση τροχιακής προέλευσης η οποία μπορεί κατά κανόνα να ανιχνευτεί σε μία διάταξη SQUID.

4.6.2 Ελικοειδείς Τοπολογικές Καταστάσεις

Ακολουθώντας παρόμοια βήματα, λαμβάνουμε υπόψη ότι στην περίπτωση των ελικοειδών καταστάσεων ισχύει $\theta_{ab} = -\sigma_{xy}^{cs}$, $\theta_{aa} = \theta_{bb} = 0$ και παίρνουμε

$$\frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial y} = +\rho_c, \quad (4.73)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial t} - \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial y} + \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial y} = -j_x, \quad (4.74)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} - \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} = -j_y, \quad (4.75)$$

$$-\frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial y^2} + \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \mathcal{B}_z = +\rho_s^z, \quad (4.76)$$

$$-\frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \mathcal{E}_y = -j_x^z, \quad (4.77)$$

$$+\frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \mathcal{E}_x = -j_y^z. \quad (4.78)$$

Και σε αυτήν την περίπτωση το σύστημα εξισώσεων είναι υπερορισμένο και χρειαζόμαστε την κατάλληλη τακτική για να το επιλύσουμε. Όπως και στην περίπτωση των χειρικών καταστάσεων, θα κρατήσουμε σαν κύριους όρους αυτούς που προέρχονται από τα τροχιακά φαινόμενα και ως δευτερεύοντες αυτούς που σχετίζονται με το πεδίο Zeeman. Ξαναγράφουμε τις εξισώσεις, παίρνοντας

$$\frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial y} = +\rho_c, \quad (4.79)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_x}{\partial y \partial t} - \left(1 - \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d}\right) \frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial y^2} = -\frac{\partial j_x}{\partial y}, \quad (4.80)$$

$$\frac{\partial^2 \mathcal{E}_y}{\partial x \partial t} + \left(1 - \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d}\right) \frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial x^2} = -\frac{\partial j_y}{\partial x}, \quad (4.81)$$

$$+ \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial t} \simeq + \frac{\partial \rho_s^z}{\partial t}, \quad (4.82)$$

$$+ \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial x} = + \frac{\partial j_x^z}{\partial x}, \quad (4.83)$$

$$- \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d} \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial y} = + \frac{\partial j_y^z}{\partial y}. \quad (4.84)$$

Προσθέτοντας τις τρεις τελευταίες εξισώσεις και κάνοντας χρήση της εξίσωσης της συνέχειας του σπιν, προκύπτει η σχέση

$$\frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial y} - \frac{\partial \mathcal{E}_y}{\partial x}, \quad (4.85)$$

ο οποίος δεν είναι άλλος από το νόμο της επαγωγής του Faraday [226]. Αφαιρώντας τώρα την δεύτερη από την τρίτη εξίσωση προκύπτει τελικά η εξίσωση για το μαγνητικό πεδίο

$$\frac{\partial^2 \mathcal{B}_z}{\partial t^2} - \left(1 - \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d}\right) \nabla^2 \mathcal{B}_z = \frac{\partial j_y}{\partial x} - \frac{\partial j_x}{\partial y}. \quad (4.86)$$

Η παραπάνω εξίσωση περιγράφει τη διάδοση κυμάτων μαγνητικού πεδίου και απουσία ρευμάτων φορτίου δίνει την ακόλουθη σχέση διασποράς:

$$\omega = \pm \sqrt{1 - \frac{\sigma_{xy}^{cs}}{d}} |\mathbf{q}|, \quad (4.87)$$

η οποία αναλόγως την τιμή του υπόρριζου οδηγεί σε δύο διαφορετικές περιπτώσεις. Εάν το υπόρριζο είναι θετικό, τότε η παραπάνω εξίσωση περιγράφει διαδιδόμενα κύματα με γραμμική διασπορά $\omega = c|\mathbf{q}|$ και ταχύτητα η οποία καθορίζεται από τη μαγνητοηλεκτρική αγωγιμότητα. Στην αντίθετη περίπτωση έχουμε $\omega = ic|\mathbf{q}|$ που δείχνει ότι το κύμα του μαγνητικού πεδίου δεν διαδίδεται, αλλά αντίθετα φθίνει με την πάροδο του χρόνου. Μέσω της εξίσωσης Faraday μπορούμε να βρούμε και την συμπεριφορά του ηλεκτρικού πεδίου. Λόγω της γραμμικότητας της εξίσωσης Faraday τα κύματα του ηλεκτρικού πεδίου ακολουθούν την συμπεριφορά των μαγνητικών κυμάτων.

5 Αδιαβατική μεταφορά φορτίου και Γεωμετρική Φάση Berry

Στις παραπάνω παραγράφους μελετήσαμε την απόκριση των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν όταν εφαρμόζουμε ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Σε όλη τη συζήτηση μείναμε πιστοί στην απαίτηση της χαμηλής συχνότητας και των μικρών κυματανυσμάτων, ώστε μην προκαλέσουμε τον σχηματισμό μονοσωματιδιακών διεγέρσεων στο σύστημα. Μάλιστα είναι αυτή η απαίτηση που μας επιτρέπει να περιγράψουμε αυτές τις καταστάσεις με μία θεωρία είτε Chern-Simons ή BF. Μία διαταραχή πολύ μικρής συχνότητας σημαίνει ότι εξελίσσεται πολύ αργά στον χρόνο. **Κατ' αυτόν τον τρόπο, η τοπολογική απόκριση που λάβαμε παραπάνω, προκύπτει όταν εφαρμόσουμε ένα εξωτερικό πεδίο στο αδιαβατικό όριο.** Σε αυτό το κεφάλαιο θα προσεγγίσουμε τα φαινόμενα που παρουσιάσαμε σε προηγούμενες παραγράφους, χρησιμοποιώντας την αδιαβατική προσέγγιση και τη γεωμετρική φάση που προκύπτει σε μια τέτοια διαδικασία. Με αυτόν τον τρόπο θα μπορέσουμε να διασαφηνίσουμε ακόμα περισσότερο την έννοια του τοπολογικού φορτίου και τη σύνδεσή του με τα μαγνητικά πεδία και μονόπολα Berry που ορίζονται στον χώρο των κυματανυσμάτων.

5.1 Γεωμετρική φάση Berry

Η επίδραση αδιαβατικών διαταραχών μελετήθηκε για πρώτη φορά από τον Berry το 1984 [227, 228] και άνοιξε το δρόμο σε νέα φαινόμενα. Έστω λοιπόν ότι η Χαμιλτονιανή μας εξαρτάται από ένα σύνολο παραμέτρων $\mathbf{R} = (R_1, R_2, \dots, R_n)$ που μεταβάλλονται πολύ αργά με τον χρόνο. Τα ιδιοδιανύσματα κατάστασης του συστήματος $|\Psi_\nu(t)\rangle$, ικανοποιούν την παραμετρική εξίσωση Schrödinger

$$\mathcal{H}[\mathbf{R}(t)] |\Psi_\nu(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi_\nu(t)\rangle. \quad (5.1)$$

Λόγω της αδιαβατικής εξέλιξης των παραμέτρων, κάθε ιδιοδιάνυσμα κατάστασης παραμένει ιδιοδιάνυσμα της Χαμιλτονιανής την εκάστοτε χρονική στιγμή, και το μόνο που μπορεί να μεταβάλλεται είναι η φάση του. Έτσι λοιπόν σύμφωνα με την πρόταση του Berry, θεωρούμε ότι τα διανύσματα κατάστασης μπορούν να γραφούν ως

$$|\Psi_\nu(t)\rangle = e^{i\gamma_\nu[\mathbf{R}(t)]} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_\nu[\mathbf{R}(t')] dt'} |\Phi_\nu[\mathbf{R}(t)]\rangle, \quad (5.2)$$

όπου εισαγάγαμε τα αδιαβατικά ιδιοδιανύσματα $|\Phi_\nu[\mathbf{R}(t)]\rangle$ που ικανοποιούν την εξίσωση

$$\mathcal{H}[\mathbf{R}(t)] |\Phi_\nu[\mathbf{R}(t)]\rangle = E_\nu[\mathbf{R}(t)] |\Phi_\nu[\mathbf{R}(t)]\rangle, \quad (5.3)$$

καθώς και τη φάση Berry $\gamma_\nu[\mathbf{R}(t)]$. Το άλλο τμήμα της φάσης ονομάζεται δυναμική φάση και σχετίζεται με την χρονική εξέλιξη ενός ιδιοδιανύσματος. Μπορούμε να δούμε ότι η φάση Berry ικανοποιεί τη σχέση

$$\gamma_\nu[\mathbf{R}(t)] - \gamma_\nu[\mathbf{R}(0)] = \int_0^t dt' \langle \Phi_\nu[\mathbf{R}(t')] | i\partial_{t'} | \Phi_\nu[\mathbf{R}(t')] \rangle, \quad (5.4)$$

$$= \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} d\mathbf{R} \cdot \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle. \quad (5.5)$$

Λόγω του ότι υπάρχει η συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ και κατά συνέπεια η ελευθερία επιλογής φάσης, μπορούμε να θεωρήσουμε για ευκολία ότι τα ιδιοδιανύσματα πολλαπλασιάζονται με μία φάση ώστε να ισχύει $\gamma_\nu[\mathbf{R}(0)] = 0$. Παρατηρούμε πως παραπάνω ο χρόνος εισέρχεται μόνο σαν συνοριακή συνθήκη στις τιμές $\mathbf{R}(0)$ και $\mathbf{R}(t)$ του ορισμένου ολοκληρώματος. Μάλιστα μπορούμε ισοδύναμα να θεωρήσουμε ότι το διάνυσμα μεταβάλλεται στο χρόνο και οι τιμές του διαγράφουν μια τροχιά C . Άρα τα όρια του ολοκληρώματος εξαρτώνται από την αρχή και το τέλος αυτής της τροχιάς. Εάν εισαγάγουμε σε αυτό το σημείο το διανυσματικό δυναμικό Berry

$$\mathbf{A}_\nu(\mathbf{R}) = \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle, \quad (5.6)$$

η μεταβολή της φάσης Berry γράφεται ως

$$\gamma_\nu = \int_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_\nu(\mathbf{R}). \quad (5.7)$$

Θα εξετάσουμε λίγο καλύτερα σε αυτό το σημείο τις ιδιότητες του διανυσματικού δυναμικού που εισαγάγαμε. Εάν θεωρήσουμε ότι τα αδιαβατικά ιδιοδιανύσματα αποκτούν μία φάση, δηλαδή $|\Phi_\nu(\mathbf{R})\rangle \rightarrow e^{i\theta_\nu(\mathbf{R})} |\Phi_\nu(\mathbf{R})\rangle$, τότε το δυναμικό μετασχηματίζεται ως $\mathbf{A}_\nu(\mathbf{R}) \rightarrow \mathbf{A}_\nu(\mathbf{R}) - \frac{\partial \theta_\nu(\mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}}$. Παρατηρούμε λοιπόν ότι το διανυσματικό πεδίο είναι ένα πεδίο βαθμίδας $U(1)$ στον παραμετρικό χώρο \mathbf{R} . Το γεγονός ότι το διανυσματικό δυναμικό εξαρτάται από την επιλογή της βαθμίδας, συνεπάγεται ότι και η φάση Berry είναι μια τέτοια ποσότητα γιατί μεταβάλλεται ως $\gamma_\nu \rightarrow \gamma_\nu + \{\theta_\nu[\mathbf{R}(0)] - \theta_\nu[\mathbf{R}(t)]\}$. Στη φύση όμως μπορούμε να παρατηρήσουμε μόνο ποσότητες που είναι αναλλοίωτες κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας και άρα η φάση αυτή δεν μπορεί εν γένει να έχει φυσικές συνέπειες.

Παρ' όλ' αυτά, υπάρχει μία περίπτωση όπου η φάση αυτή μπορεί να είναι αναλλοίωτη και να έχει παρατηρήσιμες συνέπειες. Αυτό συμβαίνει μόνο όταν η καμπύλη στον παραμετρικό χώρο είναι κλειστή, δηλαδή $\mathbf{R}(t) = \mathbf{R}(0)$. Το γεγονός αυτό συνεπάγεται ότι $e^{i\theta_\nu[\mathbf{R}(t)]} = e^{i\theta_\nu[\mathbf{R}(0)]}$ που μας δίνει $\theta_\nu[\mathbf{R}(0)] - \theta_\nu[\mathbf{R}(t)] = 2\pi\kappa$ όπου κ ακέραιος. Έτσι λοιπόν για μία κλειστή καμπύλη, η φάση Berry ισούται με $\gamma_\nu + 2\pi\kappa$. Σε αυτήν την περίπτωση η φάση Berry μπορεί να αλλάξει μόνο κατά 2π . Η τιμή όμως αυτή δεν μπορεί να έχει κάποια φυσική επίπτωση διότι εμφανίζεται σαν το όρισμα μίας φάσης. Συνεπώς για μία κλειστή καμπύλη στον παραμετρικό χώρο, οι φυσικές συνέπειες της φάσης Berry δεν αλλάζουν κάτω από μετασχηματισμούς βαθμίδας και άρα είναι παρατηρήσιμες. Έτσι λοιπόν η φάση Berry έχει νόημα μόνο για κλειστές καμπύλες, δηλαδή

$$\gamma_\nu \equiv \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}_\nu(\mathbf{R}). \quad (5.8)$$

Ο χαρακτηρισμός της φάσης Berry ως γεωμετρικής είναι προφανής πλέον από την παραπάνω σχέση. Κι αυτό γιατί προκύπτει από την τιμή ενός επικαμπύλιου ολοκληρώματος σε μία κλειστή καμπύλη και επιπροσθέτως δεν εξαρτάται από το χρόνο. Το γεγονός ότι η φάση Berry ορίζεται για κλειστές καμπύλες, μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε το Θεώρημα του Stokes και να γράψουμε το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα ως επιφανειακό, σε μία επιφάνεια S που περικλείει την καμπύλη C . Έχουμε λοιπόν

$$\gamma_\nu = \int d\mathbf{S} \cdot [\nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_\nu(\mathbf{R})] = \int d\mathbf{S} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{R}), \quad (5.9)$$

όπου $d\mathbf{S}$ το διανυσματικό στοιχείο επιφάνειας ενώ παράλληλα εισαγάγαμε το μαγνητικό πεδίο Berry (ή καμπυλότητα Berry), $\boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A}_\nu(\mathbf{R})$. Βλέπουμε λοιπόν ότι η φάση Berry δεν είναι παρά η μαγνητική ροή στον παραμετρικό χώρο. Χρησιμοποιώντας το Θεώρημα του Gauss βλέπουμε ότι

$$\gamma_\nu = \int dv \nabla_{\mathbf{R}} \cdot \boldsymbol{\Omega}_\nu(\mathbf{R}), \quad (5.10)$$

όπου ν ο όγκος της κλειστής επιφάνειας. Είναι πλέον προφανής η αναλογία με τον νόμο του Gauss, $Q = \int dV \nabla \cdot \mathbf{E}$ στον ηλεκτρομαγνητισμό. Η φάση Berry ισούται με το συνολικό φορτίο των μαγνητικών μονόπολων που υπάρχουν στον παραμετρικό χώρο για το ιδιοδιάνυσμα κατάστασης με δείκτη ν . Τα φορτία των μαγνητικών μονόπολων είναι ακέραια πολλαπλάσια του 2π αφού η φάση Berry μπορεί να αλλάξει μόνο κατά $2\pi k$.

Μπορούμε να κατανοήσουμε ακόμα καλύτερα το ρόλο και το λόγο ύπαρξης του μαγνητικού πεδίου Berry εάν το φέρουμε σε μία πιο βολική μορφή

$$\begin{aligned} \Omega_\nu^i(\mathbf{R}) &= \varepsilon_{ijk} \frac{\partial}{\partial R_j} A_\nu^k(\mathbf{R}) = i \left[\frac{\partial \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \partial | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_j} - \frac{\partial \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \partial | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_k} \frac{\partial}{\partial R_j} \right] \quad (5.11) \\ &= +i \sum_{\nu'} \left[\frac{\partial \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \partial | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle \langle \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) | \partial | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_j} - \frac{\partial \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \partial | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle \langle \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) | \partial | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_k} \frac{\partial}{\partial R_j} \right] \\ &= -i \sum_{\nu' \neq \nu} \left[\langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \frac{\partial | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_j} \langle \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) | \frac{\partial | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_k} - \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \frac{\partial | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_k} \langle \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) | \frac{\partial | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_j} \right] \\ &= +i \sum_{\nu' \neq \nu} \left[\frac{\langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \partial \mathcal{H}(\mathbf{R}) / \partial R_j | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle \langle \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) | \partial \mathcal{H}(\mathbf{R}) / \partial R_k | \Phi_\nu(\mathbf{R}) \rangle}{[E_\nu(\mathbf{R}) - E_{\nu'}(\mathbf{R})]^2} - j \leftrightarrow k \right], \quad (5.12) \end{aligned}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την σχέση

$$\langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \frac{\partial | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_j} = - \frac{\partial \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle}{\partial R_j} = - \frac{1}{E_\nu(\mathbf{R}) - E_{\nu'}(\mathbf{R})} \langle \Phi_\nu(\mathbf{R}) | \frac{\partial \mathcal{H}(\mathbf{R})}{\partial R_j} | \Phi_{\nu'}(\mathbf{R}) \rangle, \nu \neq \nu'.$$

Παρατηρούμε ότι το μαγνητικό πεδίο Berry ενός ιδιοδιανύσματος ν έχει συνεισφορές από όλα τα υπόλοιπα ιδιοδιανύσματα ν' . Αυτό είναι το αποτέλεσμα της αδιαβατικής εξωτερικής διαταραχής. Εάν βρισκόμαστε σε μία ιδιοκατάσταση πριν την εφαρμογή της αδιαβατικής διαταραχής, τότε οι μεταβάσεις σε άλλες ιδιοκαταστάσεις δεν επιτρέπονται και συνεχίζουμε να παραμένουμε σε αυτήν συνεχώς. Η επιπλέον φάση που αποκτά το ιδιοδιάνυσμα, περιλαμβάνει κατά κάποιον τρόπο την εναπομείνουσα 'αλληλεπίδραση' αυτού του ιδιοδιανύσματος με τα υπόλοιπα [228]. Έτσι λοιπόν, εάν αθροίσουμε σε όλα τα ιδιοδιανύσματα το μαγνητικό πεδίο Berry, θα πάρουμε μηδέν $\sum_\nu \Omega_\nu(\mathbf{R}) = 0$, όπως μπορούμε εύκολα να δούμε από την σχέση 5.12. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι το μαγνητικό πεδίο Berry αποκλίνει στα σημεία όπου ακουμπούν οι διαφορετικές ενεργειακές ιδιοτιμές $E_\nu, E_{\nu'}$. Αυτές είναι οι θέσεις των μονόπολων για το μαγνητικό πεδίο Berry που λειτουργούν ως πηγές και δίνουν πεπερασμένη μαγνητική ροή.

Το μαγνητικό πεδίο Berry παρόλο που ορίζεται στον παραμετρικό χώρο παίζει τον ίδιο ρόλο με το ηλεκτρομαγνητικό, όσον αφορά τις ιδιότητες μεταφοράς φορτίου. Έτσι λοιπόν, εάν εφαρμόζουμε ένα ηλεκτρικό πεδίο \mathcal{E} σε μία κατεύθυνση, περιμένουμε ένα ρεύμα Hall στην κατεύθυνση $\mathcal{E} \times \Omega_\nu$ για το κάθε επιμέρους ιδιοδιάνυσμα ν , όπου φυσικά πρέπει να πολλαπλασιάσουμε με το κατάλληλο φορτίο. Έτσι λοιπόν, η τοπολογική μεταφορά φορτίου και σπιν που εξετάσαμε προηγουμένως στα πλαίσια των Τοπολογικών Θεωριών Πεδίου, μπορεί να κατανοηθεί και στα πλαίσια της Γεωμετρικής Φάσης Berry. Όπως αναφέραμε και προηγουμένως, και οι δύο τρόποι δίνουν τα ίδια αποτελέσματα γιατί έχουμε ενεργειακό χάσμα. Το όριο των χαμηλών συχνοτήτων ταυτίζεται με το αδιαβατικό όριο που μελετούμε στην δεύτερη περίπτωση.

5.2 Μαγνητικό πεδίο Berry στα Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

Δείξαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο ότι η Χαμιλτονιανή των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, έχει για κάθε προβολή του σπιν $\sigma = \pm$ δύο ιδιοκαταστάσεις $\nu = \pm$, με ενεργειακές διασπορές $E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) = -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z + \nu E_\sigma(\mathbf{k})$. Τα ιδιοδιανύσματα έχουν τη μορφή

$$\Phi_{+,\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} u_\sigma(\mathbf{k}) \\ v_\sigma(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad \Phi_{-,\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -v_\sigma^*(\mathbf{k}) \\ u_\sigma^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

όπου ισχύει

$$u_\sigma(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{E_\sigma(\mathbf{k}) + g_{3,\sigma}(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})}}, \quad v_\sigma(\mathbf{k}) = e^{i\varphi_\sigma(\mathbf{k})} \sqrt{\frac{E_\sigma(\mathbf{k}) - g_{3,\sigma}(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})}}, \quad (5.14)$$

$$M_Q(\mathbf{k}) + \sigma M_Q^z(\mathbf{k}) = g_{1,\sigma}(\mathbf{k}) + ig_{2,\sigma}(\mathbf{k}) = \sqrt{[g_{1,\sigma}(\mathbf{k})]^2 + [g_{2,\sigma}(\mathbf{k})]^2} e^{i\varphi_\sigma(\mathbf{k})}. \quad (5.15)$$

Θα υπολογίσουμε σε αυτό το σημείο το μαγνητικό πεδίο Berry της κάθε ιδιοκατάστασης. Για να το κάνουμε αυτό, θα εκτελέσουμε πρώτα την αλλαγή μεταβλητών

$$E_\sigma(\mathbf{k}) \cos[\vartheta_\sigma(\mathbf{k})] = g_{3,\sigma}(\mathbf{k}), \quad (5.16)$$

$$E_\sigma(\mathbf{k}) \sin[\vartheta_\sigma(\mathbf{k})] \cos[\varphi_\sigma(\mathbf{k})] = g_{1,\sigma}(\mathbf{k}), \quad (5.17)$$

$$E_\sigma(\mathbf{k}) \sin[\vartheta_\sigma(\mathbf{k})] \sin[\varphi_\sigma(\mathbf{k})] = g_{2,\sigma}(\mathbf{k}). \quad (5.18)$$

Με τη χρήση αυτού του μετασχηματισμού, τα ιδιοδιανύσματα γράφονται

$$|\Phi_{+,\sigma}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta_\sigma}{2} \\ \sin \frac{\vartheta_\sigma}{2} e^{i\varphi_\sigma} \end{pmatrix}, \quad |\Phi_{-,\sigma}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\vartheta_\sigma}{2} e^{i\varphi_\sigma} \\ \cos \frac{\vartheta_\sigma}{2} \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Υπολογίζουμε τώρα το διανυσματικό πεδίο Berry,

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) &= \langle \Phi_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) | i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} | \Phi_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) \rangle = i \langle \Phi_{\nu,\sigma} | \frac{\partial}{\partial \vartheta_\sigma} | \Phi_{\nu,\sigma} \rangle \frac{\partial \vartheta_\sigma}{\partial \mathbf{k}} + i \langle \Phi_{\nu,\sigma} | \frac{\partial}{\partial \varphi_\sigma} | \Phi_{\nu,\sigma} \rangle \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial \mathbf{k}} \\ &= i \langle \Phi_{\nu,\sigma} | \frac{\partial}{\partial \varphi_\sigma} | \Phi_{\nu,\sigma} \rangle \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial \mathbf{k}} = i \frac{i}{2} [1 - \nu \cos \vartheta_\sigma(\mathbf{k})] \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial \mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Το επόμενο βήμα είναι να υπολογίσουμε την παράγωγο που εμφανίζεται παραπάνω

$$\tan \varphi_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{g_{2,\sigma}(\mathbf{k})}{g_{1,\sigma}(\mathbf{k})} \Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \tan \varphi_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{[g_{1,\sigma}(\mathbf{k})]^2} \left[\frac{\partial g_{2,\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} g_{1,\sigma}(\mathbf{k}) - \frac{\partial g_{1,\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} g_{2,\sigma}(\mathbf{k}) \right], \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \tan \varphi_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{1}{\cos^2 \varphi_\sigma(\mathbf{k})} \frac{\partial \varphi_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \frac{[g_{1,\sigma}(\mathbf{k})]^2 + [g_{2,\sigma}(\mathbf{k})]^2}{[g_{1,\sigma}(\mathbf{k})]^2} \frac{\partial \varphi_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}. \quad (5.22)$$

Χρησιμοποιώντας τις δύο ισοδύναμες σχέσεις παίρνουμε την απλή έκφραση

$$\frac{\partial \varphi_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{g_{1,\sigma}^2(\mathbf{k}) + g_{2,\sigma}^2(\mathbf{k})} \left[\frac{\partial g_{2,\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} g_{1,\sigma}(\mathbf{k}) - \frac{\partial g_{1,\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} g_{2,\sigma}(\mathbf{k}) \right], \quad (5.23)$$

που μας δίνει την τελική σχέση για το διανυσματικό δυναμικό [191]

$$\mathcal{A}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \left[1 - \nu \frac{g_{3,\sigma}(\mathbf{k})}{E_\sigma(\mathbf{k})} \right] \frac{1}{g_{1,\sigma}^2(\mathbf{k}) + g_{2,\sigma}^2(\mathbf{k})} \left[\frac{\partial g_{2,\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} g_{1,\sigma}(\mathbf{k}) - \frac{\partial g_{1,\sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} g_{2,\sigma}(\mathbf{k}) \right]. \quad (5.24)$$

Μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι το δυναμικό των δύο ιδιοδιανυσμάτων διαφέρει μόνο στο πρόσημο του $g_{3,\sigma}(\mathbf{k})$. Συνεπώς μπορούμε να υπολογίσουμε το δυναμικό μόνο για την μία και να προκύψει και το δυναμικό της άλλης με την αλλαγή του προσήμου του παραπάνω όρου. Αντίστοιχα, θα υπολογίσουμε το μαγνητικό πεδίο Berry. Μάλιστα πρέπει να τονίσουμε, ότι λόγω του ότι τα υπό εξέταση συστήματα είναι περιορισμένα στο επίπεδο $x - y$, το μαγνητικό πεδίο Berry μπορεί να έχει συνιστώσα μόνο κατά τον άξονα z . Έχουμε λοιπόν

$$\Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) = \frac{\partial \mathcal{A}_{\nu,\sigma}^y(\mathbf{k})}{\partial k_x} - \frac{\partial \mathcal{A}_{\nu,\sigma}^x(\mathbf{k})}{\partial k_y}. \quad (5.25)$$

Μετά από κάποιους υπολογισμούς [191], μπορεί σχετικά εύκολα ναδειχθεί ότι

$$\Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) = -\nu \frac{1}{2E_\sigma^3(\mathbf{k})} \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right). \quad (5.26)$$

Παρατηρούμε ότι $\Omega_{+,\sigma}^z(\mathbf{k}) = -\Omega_{-,\sigma}^z(\mathbf{k})$. Αυτό όμως δεν πρέπει να μας εκπλήσει. Όπως ήδη προαναφέραμε ισχύει $\sum_{\nu,\sigma} \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) = 0$. Στην περίπτωση μας όμως κάθε υποσύστημα σπιν είναι ανεξάρτητο, πράγμα που σημαίνει ότι $\sum_{\nu} \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) = 0$. Επειδή στην περίπτωση μας έχουμε δύο ιδιοδιανύσματα για κάθε προβολή του σπιν, αναγκαστικά τα δύο προκύπτοντα μαγνητικά πεδία Berry θα έχουν αντίθετο πρόσημο. Από αυτό συμπεραίνουμε ότι εάν το συνολικό πεδίο Berry προέρχεται από το άθροισμα των δύο επιμέρους, τότε αυτό θα είναι μηδέν εάν και οι δύο ιδιοκαταστάσεις είναι το ίδιο κατειλημμένες. Τέλος, πρέπει να παρατηρήσουμε ότι με τη θεωρία της φάσης Berry, μπορούμε να κατανοήσουμε καλύτερα και την τοπολογικά αναλλοίωτη ποσότητα $\tilde{\mathcal{N}}_\sigma$ που εισάγαμε προηγουμένως.

$$\tilde{\mathcal{N}}_\sigma = \frac{1}{4\pi} \int dk_x dk_y \Omega_{-,\sigma}^z(\mathbf{k}) \equiv \frac{1}{2\pi} \gamma_{-,\sigma}. \quad (5.27)$$

Δηλαδή η τοπολογικά αναλλοίωτη ποσότητα, συνδέεται με τη μαγνητική ροή του ιδιοδιανύσματος που αντιστοιχεί σε ενέργεια $E_{-,\sigma}(\mathbf{k})$, την οποία έχουμε θεωρήσει πλήρως κατειλημμένη κατά την εξαγωγή της ενεργούς δράσης για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο. Λόγω του ότι η φάση Berry έχει τη μορφή $\gamma_{-,\sigma} = 2\pi \times \text{κακέραιος}$, το τοπολογικό φορτίο $\tilde{\mathcal{N}}_\sigma$ είναι ακριβώς το φορτίο των μαγνητικών μονόπολων στον παραμετρικό χώρο.

5.3 Αδιαβατική Μεταφορά Ρεύματων Hall Φορτίου και Σπιν

Η παρουσία του μαγνητικού πεδίου Berry αναμένουμε να έχει μη τετριμμένες επιπτώσεις στη μεταφορά ρεύματος και σπιν, ακριβώς όπως και το σύνθητες μαγνητικό πεδίο Maxwell. Θα εφαρμόσουμε λοιπόν

ένα εξωτερικό ηλεκτρικό πεδίο \mathcal{E} καθώς και μία σταθερή βαθμίδα μαγνητικού πεδίου Zeeman $\nabla\mathcal{B}_z$, και θα υπολογίσουμε τα ρεύματα Hall που μπορούν να προκύψουν. Θεωρούμε ότι το ηλεκτρικό πεδίο προέρχεται από ένα χρονομεταβαλλόμενο διανυσματικό δυναμικό $\mathbf{A}(t) = -\mathcal{E}t$ και η βαθμίδα πεδίου από ένα χρονομεταβαλλόμενο πεδίο $\mathbf{B}(t) = \nabla\mathcal{B}_z t$. Μέσω της ελάχιστης σύζευξης, τα διανυσματικά δυναμικά μεταβάλλουν το κυματόνυσμα με τον ακόλουθο τρόπο

$$\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}(t) + \frac{\sigma\mu_B}{\hbar}\mathbf{B}(t) = \mathbf{k} - \left[\frac{e}{\hbar}\mathcal{E} + \frac{\sigma\mu_B}{\hbar}(-\nabla\mathcal{B}_z) \right] t. \quad (5.28)$$

Συνεπώς το κυματόνυσμα γίνεται χρονομεταβαλλόμενο $\dot{\mathbf{k}} = -\frac{e}{\hbar}\mathcal{E} - \frac{\sigma\mu_B}{\hbar}(-\nabla\mathcal{B}_z)$. Παρατηρούμε ότι η σχέση αυτή εκφράζει την ημικλασική Νευτώνια εξίσωση $\hbar\dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}_e + \mathbf{F}_z = -e\mathcal{E} - \sigma\mu_B(-\nabla\mathcal{B}_z)$. Σύμφωνα με τα προηγούμενα, για να μπορέσουμε να έχουμε μία ανεξάρτητη σε μετασχηματισμούς βαθμίδας φάση Berry, θα πρέπει η παράμετρος που μεταβάλλεται να λαμβάνει τιμές σε μία κλειστή καμπύλη. Στην περίπτωση μας η συγκεκριμένη παράμετρος είναι το κυματόνυσμα \mathbf{k} . Η χρονική του παράγωγος, δηλώνει ότι το κυματόνυσμα συνεχώς αυξάνεται δίχως την δυνατότητα να σχηματιστεί κλειστός βρόχος. Παρ'όλ' αυτά πρέπει να θυμηθούμε πως λόγω του ότι είμαστε στην ανηγμένη ζώνη Brillouin, τα διανύσματα \mathbf{k} και $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ μπορούν να είναι ισοδύναμα, αν και μόνο αν το κυματόνυσμα \mathbf{G} αποτελεί ένα διάνυσμα του αντιστρόφου πλέγματος. Αυτό σημαίνει ότι τα σημεία \mathbf{k} και $\mathbf{k} + \frac{\pi}{a}(n, m)$ όπου a η πλεγματική σταθερά του υλικού και m, n ακέραιοι, είναι ισοδύναμα. Λόγω λοιπόν του ότι η ανηγμένη ζώνη Brillouin όπως άλλωστε και κάθε ζώνη Brillouin, είναι μία τοροειδής επιφάνεια, το ηλεκτρικό πεδίο που εφαρμόζουμε (παρόλο που δεν είναι εναλλασσόμενο) εμφανίζει περιοδικότητα με περίοδο

$$\frac{e|\mathcal{E}|T}{\hbar} = \frac{\pi}{a} \Rightarrow T = \frac{\pi\hbar}{ae|\mathcal{E}|}. \quad (5.29)$$

Σε κάθε 'κύκλο' έχουμε την αδιαβατική μεταφορά φορτίου λόγω του ρεύματος που δημιουργείται. Γνωρίζουμε ότι η πυκνότητα ηλεκτρικού φορτίου στα Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν γράφεται ως

$$\rho_c(\mathbf{q}) = -e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}, \sigma} \right), \quad (5.30)$$

ενώ αντίστοιχα η πυκνότητα σπιν με πόλωση κατά τον z άξονα

$$\rho_s^z(\mathbf{q}) = -\mu_B \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma \left(c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}, \sigma} \right). \quad (5.31)$$

Λόγω του ότι σε αυτήν την περίπτωση οι ιδιοκαταστάσεις εξαρτώνται από το χρόνο, μέσω της μεταβολής του κυματόνυσματος, είναι προτιμότερο να εκφράσουμε τους τελεστές πυκνότητας φορτίου συναρτήσει των ιδιοκαταστάσεων. Για αυτό το λόγο χρησιμοποιούμε τον μετασχηματισμό Bogoliubov, και παίρνουμε

$$\begin{aligned} \rho_c(\mathbf{q}) = & -e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[\Phi_{+, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{+, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + \Phi_{-, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{-, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}, \sigma} \right. \\ & \left. + \Phi_{+, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{-, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}, \sigma} + \Phi_{-, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{+, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \right], \quad (5.32) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_s^z(\mathbf{q}) = & -e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma \left[\Phi_{+, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{+, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} + \Phi_{-, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{-, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}, \sigma} \right. \\ & \left. + \Phi_{+, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{-, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}+\mathbf{q}, \sigma} + \Phi_{-, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \Phi_{+, \sigma}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \right]. \quad (5.33) \end{aligned}$$

Οι παραπάνω τελεστές έχουν γραφτεί συναρτήσει των αδιαβατικών καταστάσεων. Αυτές εξαρτώνται από τον χρόνο παραμετρικά. Δηλαδή στην περίπτωση μας αφού οι ιδιοσυναρτήσεις είναι οι αδιαβατικές, η πυκνότητα φορτίου και σπιν θα εξαρτώνται και αυτές παραμετρικά από το χρόνο. Η εξέλιξη των συγκεκριμένων τελεστών, δεν θα προσδιοριστεί αυτή τη φορά από το μεταθέτη της Χαμιλτονιανής $\dot{\rho}_{c,s}(\mathbf{q}) = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho_{c,s}(\mathbf{q})]$, αλλά από τη ρητή του εξάρτηση των τελεστών ως προς τον χρόνο $\dot{\rho}_{c,s}(\mathbf{q}) = \frac{\partial \rho_{c,s}(\mathbf{q})}{\partial t}$. Από την άλλη, η διατήρηση του φορτίου ορίζει όπως έχουμε προαναφέρει τα ρεύματα φορτίου και σπιν $\mathbf{J}_c(\mathbf{q})$, με τον ακόλουθο τρόπο

$$\dot{\rho}_{c,s}(\mathbf{q}) + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{J}_{c,s}(\mathbf{q}) = 0 \Rightarrow \mathbf{J}_{c,s}(\mathbf{q}) = i \frac{\partial \dot{\rho}_{c,s}(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}}. \quad (5.34)$$

Στην περίπτωση μας αναζητούμε το ομοιόμορφο ρεύμα, δηλαδή $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Έτσι λοιπόν θα πρέπει να πάρουμε την πρώτη παράγωγο της χρονικής παραγωγού των τελεστών πυκνότητας φορτίου και σπιν ως προς \mathbf{q} κι έπειτα να μηδενίσουμε το κυματόνισμα. Σε αυτήν την περίπτωση ισχύει $\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$ και έχουμε

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_c &\equiv \mathbf{J}_c(\mathbf{0}) = i \left. \frac{\dot{\rho}_c(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \equiv i \left. \frac{\partial^2 \rho_c(\mathbf{q})}{\partial t \partial \mathbf{q}} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} \\ &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\partial}{\partial t} \left[\Phi_{+, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial \Phi_{+, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} + \Phi_{-, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial \Phi_{-, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \right. \\ &\quad \left. + \Phi_{+, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial \Phi_{-, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} + \Phi_{-, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial \Phi_{+, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} \right]. \quad (5.35) \end{aligned}$$

Παίρνουμε την αναμενόμενη τιμή του ρεύματος στη θεμελιώδη κατάσταση, όπου $\langle \gamma_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma} \rangle = \langle \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, \sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = 0$. Αντίθετα οι αναμενόμενες τιμές των άλλων δύο δίνουν ως αποτέλεσμα την κατανομή Fermi-Dirac. Προκύπτει λοιπόν

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}_c \rangle &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[\frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right] n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \\ &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[\frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} + \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \sum_{\nu', \sigma'} \frac{\partial \Phi_{\nu', \sigma'}(\mathbf{k})}{\partial t} \Phi_{\nu', \sigma'}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} n_F[E_{\nu', \sigma'}(\mathbf{k})] \right] n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \\ &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[\frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \sum_{\nu', \sigma'} \frac{\partial \Phi_{\nu', \sigma'}(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu', \sigma'}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu', \sigma'}(\mathbf{k})] \right] n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \\ &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[\frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \sum_{\nu', \sigma'} \frac{\partial \Phi_{\nu', \sigma'}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \frac{\partial \Phi_{\nu', \sigma'}(\mathbf{k})}{\partial t} n_F[E_{\nu', \sigma'}(\mathbf{k})] \right] n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \\ &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[\frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial t} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial t} \right] n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \\ &= -ie \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \sum_{m=x, y} \dot{k}_m \left[\frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial k_m} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}^\dagger(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial \Phi_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_m} \right] n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})], \quad (5.36) \end{aligned}$$

$$(5.37)$$

όπου χρησιμοποιώντας τον ορισμό του μαγνητικό πεδίου Berry, έχουμε την απλή έκφραση για το ρεύμα φορτίου

$$\langle \mathbf{J}_c \rangle = e \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \dot{\mathbf{k}} \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})]. \quad (5.38)$$

Χρησιμοποιώντας τώρα την σχέση $\hbar \dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}_e + \mathbf{F}_z = -e\mathcal{E} - \sigma\mu_B(-\nabla\mathcal{B}_z)$ προκύπτουν οι τελικές εκφράσεις για τα ρεύματα φορτίου και σπιν

$$\langle \mathbf{J}_c \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[-\frac{e^2}{\hbar} \mathcal{E} - \sigma \frac{e\mu_B}{\hbar} (-\nabla\mathcal{B}_z) \right] \times \Omega_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})], \quad (5.39)$$

$$\langle \mathbf{J}_s \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[-\sigma \frac{e\mu_B}{\hbar} \mathcal{E} - \frac{\mu_B^2}{\hbar} (-\nabla\mathcal{B}_z) \right] \times \Omega_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})]. \quad (5.40)$$

Οι παραπάνω σχέσεις ορίζουν τις αγωγιμότητες των Αυθόρμητων Φαινομένων Hall

$$\sigma_{xy}^c = -\frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})], \quad (5.41)$$

$$\sigma_{xy}^s = -\frac{\mu_B^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \quad (5.42)$$

$$\sigma_{xy}^{cs} = -\frac{e\mu_B}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \sigma \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})]. \quad (5.43)$$

Μπορούμε εύκολα να δούμε ότι εάν είναι κατειλημμένες μόνο οι ενεργειακές καταστάσεις $E_{-, \sigma}(\mathbf{k})$ τότε οι συγκεκριμένες εκφράσεις ταυτίζονται με αυτές που βρήκαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο, χρησιμοποιώντας τις μεθόδους της Κβαντικής Θεωρίας Πεδίου. Το κύριο χαρακτηριστικό είναι ότι με αυτήν τη μέθοδο λάβαμε με ευθύ τρόπο την Αυθόρμητη απόκριση σε πεπερασμένα χημικό δυναμικό, πεδίο Zeeman και βέβαια θερμοκρασία. Μπορούμε εύκολα να δούμε ότι το χημικό δυναμικό και η θερμοκρασία οδηγούν στην ελλάτωση των αγωγιμοτήτων και καταστρέφουν την τοπολογική μεταφορά φορτίου [191].

Για παράδειγμα, στο Σχ.5.1, παρουσιάζουμε την αγωγιμότητα του σπιν σ_{xy}^s για τη μία προβολή του σπιν. Εάν αντικαταστήσουμε με $\mu_B = \hbar/2$ τότε για μηδενικό χημικό δυναμικό και θερμοκρασία, η αγωγιμότητα είναι κβαντισμένη και ισούται με $\sigma_{xy}^s = \hbar/8\pi$. Εάν λάβουμε υπόψη ότι η τοπολογική σταθερότητα βασίζεται στη σταθερότητα του ενεργειακού χάσματος των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων, τότε η συμπεριφορά που παρουσιάζεται στο παραπάνω σχήμα είναι απολύτως αναμενόμενη. Ένα λουτρό θερμοκρασίας διεγείρει θερμικά, φορείς στις ενεργειακές καταστάσεις $E_{+, \sigma}(\mathbf{k})$, οι οποίες έχουν αντίθετο μαγνητικό πεδίο Berry σε σχέση με τις αρχικά πλήρως κατειλημμένες ενεργειακές καταστάσεις $E_{-, \sigma}(\mathbf{k})$. Παρόμοια αρνητική επίδραση προκύπτει από την παρουσία του χημικού δυναμικού όπου η θέση του καθορίζει την κατάληψη των δύο τύπων ενεργειακών καταστάσεων. Εν γένει, η μέγιστη αγωγιμότητα επιτυγχάνεται μόνο όταν οι καταστάσεις $E_{+, \sigma}(\mathbf{k})$ είναι κατειλημμένες (κενές) και οι $E_{-, \sigma}(\mathbf{k})$ κενές (κατειλημμένες).

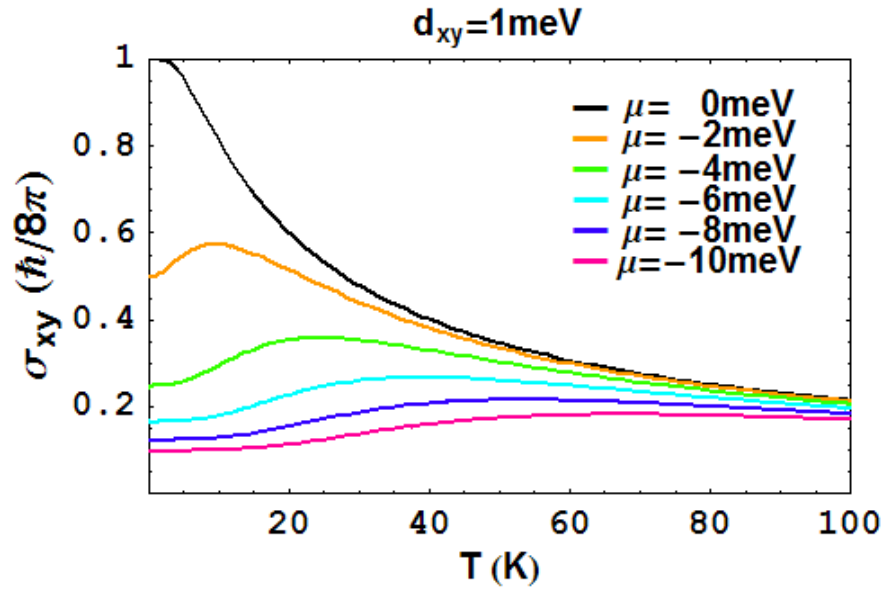
Ανώμαλη συνεισφορά στην ταχύτητα των ηλεκτρονίων

Στην προηγούμενη παράγραφο είδαμε ότι σε πεπερασμένο ηλεκτρικό πεδίο \mathcal{E} , το ρεύμα του ηλεκτρονίου αποκτά μία συνιστώσα κάθετη στη διεύθυνση του ηλεκτρικού πεδίου και της μαγνητοβαθμίδας Zeeman. Συγκεκριμένα για κάθε πόλωση του σπιν έχουμε

$$\langle \mathbf{J}_\sigma \rangle = e \sum_{\mathbf{k}, \nu} \dot{\mathbf{k}} \times \Omega_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \equiv -e \sum_{\mathbf{k}, \nu} \mathbf{v}_{\nu, \sigma}^{anom}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})]. \quad (5.44)$$

Αυτό υποδηλώνει ότι κάθε μονοσωματιδιακή ηλεκτρονιακή κατάσταση έχει μία επιπρόσθετη συνεισφορά στην ταχύτητα, παίρνοντας συνολικά

$$\mathbf{v}_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \dot{\mathbf{k}} \times \Omega_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}), \quad (5.45)$$



Σχήμα 5.1: Επίδραση της θερμοκρασίας και του χημικού δυναμικού στην Αυθόρμητη αγωγιμότητα Hall του σπιν σ_{xy}^s , όταν το σύστημα οργανώνεται σε μία Χειρική Τοπολογική κατάσταση. Σε μηδενική θερμοκρασία και χημικό δυναμικό, η αγωγιμότητα είναι κβαντισμένη και ισούται με $\mu_B^2/\hbar = \hbar/8\pi$ για μία προβολή του σπιν. Η αύξηση της θερμοκρασίας και του χημικού δυναμικού καταστρέφουν την τοπολογική σταθερότητα της κατάστασης μειώνοντας την αγωγιμότητα. Στους υπολογισμούς χρησιμοποιήσαμε $t = 250\text{meV}$, $d_{x^2-y^2} = 50\text{meV}$. P. Kotetes and G. Varelogiannis, J. Supercond. Nov. Magn. **22**, 141 (2009) [191].

ενώ παράλληλα το κυματόνισμα μεταβάλλεται χρονικά ως εξής

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = \sum_m \mathbf{F}_m = -e\mathcal{E} - \sigma\mu_B(-\nabla\mathcal{B}_z). \quad (5.46)$$

6 Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας παρουσία Μαγνητικού Πεδίου

Στα προηγούμενα κεφάλαια μελετήσαμε την απόκριση των Τοπολογικών Κύματων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν σε μία ηλεκτρομαγνητική διαταραχή. Επιπλέον, είδαμε πώς μεταβάλλεται η ταχύτητα των ηλεκτρονίων Bloch όταν εφαρμόζουμε ένα ηλεκτρικό πεδίο ή μία βαθμίδα πεδίου Zeeman. Σε αυτό το κεφάλαιο θα μελετήσουμε την συμπεριφορά αυτών των συστημάτων υπό την παρουσία ενός **στατικού μαγνητικού πεδίου**. Θα δούμε, πως εκτός από τις ανώμαλες διορθώσεις που εισάγονται λόγω της ταυτόχρονης παρουσίας του πεπερασμένου μαγνητικού πεδίου Berry, **το πεδίο μπορεί να επάγει αυτές τις καταστάσεις**. Συγκεκριμένα εάν αρχικά έχει σχηματιστεί μόνο μία από τις δύο παραμέτρους τάξης με αναπαραστάσεις $d_{x^2-y^2}$ και d_{xy} , τότε αναγκαστικά θα επαχθεί και η εναπομείνουσα αναπαράσταση, οδηγώντας στον σχηματισμό μίας εκ των τεσσάρων δυνατών τοπολογικών καταστάσεων. Η αναπόφευκτη επαγωγή των εξωτικών αυτών καταστάσεων αποτελεί και το κρίσιμο χαρακτηριστικό που μας ωθεί να προτείνουμε την ύπαρξη των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν στους μη συμβατικούς υπεραγωγούς.

6.1 Τροχιακή Μαγνήτιση

Όπως έχουμε ήδη προαναφέρει, οι Τοπολογικές καταστάσεις που εξετάζουμε χαρακτηρίζονται από μη μηδενικά μαγνητικά πεδία Berry. Τα συγκεκριμένα πεδία, αν και ορίζονται σε έναν παραμετρικό χώρο μπορούν να προσδώσουν στο σύστημα πεπερασμένη φάση Berry όπως θα έκανε ένα σύννηθες μαγνητικό πεδίο. Αναμένουμε λοιπόν ότι το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο μπορεί να συζευχθεί με το μαγνητικό Berry, λόγω του ότι μοιράζονται τις ίδιες συμμετρίες. Η συγκεκριμένη αλληλεπίδραση οδηγεί σε μία τροχιακή συνεισφορά στη μαγνήτιση [228] την οποία επιθυμούμε να υπολογίσουμε σε αυτήν την παράγραφο. Έχοντας βρει την τροχιακή μαγνήτιση μπορούμε έπειτα να δούμε πως η συμπεριλήψή της μπορεί να επηρεάσει το διάγραμμα φάσης των τοπολογικών αυτών καταστάσεων.

Θα επιδιώξουμε τώρα να υπολογίσουμε την τροχιακή μαγνήτιση για πεπερασμένες θερμοκρασίες. Δουλεύοντας στο μεγαλοκανονικό σύνολο, το μεγαλοκανονικό δυναμικό ορίζεται ως $\Omega = E - TS - \mu N$ [203] και η μαγνήτιση δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{M} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mathbf{B}} \right)_{\mu, T}, \quad (6.1)$$

όπου V όγκος του υλικού. Για τον υπολογισμό της μαγνήτισης, θα ακολουθήσουμε τη μέθοδο του άρθρου [229], και θα εισαγάγουμε την ποσότητα $\widetilde{\mathbf{M}}$, η οποία δίνεται από τη σχέση

$$\widetilde{\mathbf{M}} = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial K}{\partial \mathbf{B}} \right)_{\mu, T}, \quad (6.2)$$

όπου $K = E - \mu N$. Λόγω του ότι η θερμοκρασία είναι σταθερή, η μαγνήτιση \mathbf{M} και η ποσότητα $\widetilde{\mathbf{M}}$

συνδέονται με τον ακόλουθο τρόπο

$$\frac{\partial(\beta\mathbf{M})}{\partial\beta} = \widetilde{\mathbf{M}}, \quad (6.3)$$

με $\beta = 1/k_B T$ και k_B η σταθερά του Boltzmann. Για να βρούμε αυτόν τον τύπο χρησιμοποιήσαμε τον ισοδύναμο ορισμό

$$\mathbf{M} = \widetilde{\mathbf{M}} + T \left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{B}} \right)_{\mu, T}, \quad (6.4)$$

καθώς και τη θερμοδυναμική σχέση του Maxwell,

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{B}} \right)_{\mu, T} = \left(\frac{\partial \mathbf{M}}{\partial T} \right)_{\mu, \mathbf{B}}, \quad (6.5)$$

Η σχέση αυτή μας επιτρέπει να υπολογίσουμε πρώτα την ποσότητα $\widetilde{\mathbf{M}}$ και έπειτα μέσω μιας ολοκλήρωσης να προσδιορίσουμε τη μαγνήτιση. Όπως προαναφέραμε, για απλότητα θα αγνοήσουμε προς το παρόν την συνεισφορά Zeeman, διότι είναι πολύ απλό να την ενσωματώσουμε σε επόμενο στάδιο, όπως θα δούμε παρακάτω. Ξεκινάμε από τη Χαμιλτονιανή για κάθε προβολή του σπιν των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, που όπως έχουμε προαναφέρει γράφεται ως $\mathcal{H}_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} \widehat{\psi}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \widehat{\mathcal{H}}_\sigma(\mathbf{k}) \widehat{\psi}_{\mathbf{k}, \sigma}$, με $\widehat{\mathcal{H}}_\sigma(\mathbf{k}) = \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\tau} - \mu\tau_0$. Για να δημιουργήσουμε ένα μαγνητικό πεδίο, πρέπει να προσθέσουμε στην Χαμιλτονιανή τον όρο

$$\mathcal{H}_{int} = - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{j}_c(-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) = e \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \widehat{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) \widehat{\psi}_{\mathbf{k}}. \quad (6.6)$$

Η συνολική Χαμιλτονιανή έχει τη μορφή $\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \widehat{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \widehat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^\sigma \widehat{\psi}_{\mathbf{k}, \sigma}$. Σε αυτό το σημείο υπολογίζουμε την ποσότητα K . Έχουμε λοιπόν

$$K_\sigma = \langle \mathcal{H}_\sigma \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle \widehat{\psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \widehat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^\sigma \widehat{\psi}_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_\nu, \mathbf{k}} \sum_{i\omega_s, \mathbf{q}} \mathcal{T}_r \left\{ \left[\mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \delta_{i\omega_s, 0} \delta_{\mathbf{q}, 0} + e \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) \right] \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} \right\}.$$

Χρησιμοποιώντας την εξίσωση Dyson [219] παίρνουμε $\widehat{\mathcal{G}} = \widehat{\mathcal{G}}^0 + \widehat{\mathcal{G}}^0 \widehat{\mathcal{V}} \widehat{\mathcal{G}}$, η οποία σε πρώτη τάξη ως προς τη διαταραχή δίνει $\widehat{\mathcal{G}} = \widehat{\mathcal{G}}^0 + \widehat{\mathcal{G}}^0 \widehat{\mathcal{V}} \widehat{\mathcal{G}}^0$. Για τις αναμενόμενες τιμές με τους ακόλουθους δείκτες προκύπτει

$$\widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}} = \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 + \sum_{k_1, k_2} \langle k | \widehat{\mathcal{G}}^0 | k_1 \rangle \langle k_1 | \widehat{\mathcal{V}} | k_2 \rangle \langle k_2 | \widehat{\mathcal{G}}^0 | \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle = \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{q}, 0} + e \left[\widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \right] \cdot \mathbf{A}(-\mathbf{q}), \quad (6.7)$$

που μας δίνει την ακόλουθη σχέση για το μέγεθος K

$$\begin{aligned} K &\simeq \frac{1}{\beta} \sum_{ik_\nu, \mathbf{k}} \sum_{i\omega_s, \mathbf{q}} \mathcal{T}_r \left\{ \left[\widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k}) \delta_{i\omega_s, 0} \delta_{\mathbf{q}, 0} + e \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) \right] \left[\widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{q}, 0} + e \left(\widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \right) \cdot \mathbf{A}(-\mathbf{q}) \right] \right\} \\ &\simeq \frac{1}{\beta} \sum_{ik_\nu, \mathbf{k}} \mathcal{T}_r \left[\widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k}) \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \right] - \frac{1}{\beta} \sum_{ik_\nu, \mathbf{k}} \mathcal{T}_r \left[\left(-e \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right) \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \right] \cdot \mathbf{A}(\mathbf{q}) \\ &+ e \sum_{j=x, y} \lim_{q \rightarrow 0} \left\{ \frac{\partial}{\partial q^j} \frac{1}{\beta} \sum_{ik_\nu, \mathbf{k}} \mathcal{T}_r \left[\widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k}) \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}}^0 \frac{\partial \widehat{\mathcal{H}}_0(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \widehat{\mathcal{G}}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^0 \right] \right\} \cdot q^j \mathbf{A}(-\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (6.8)$$

όπου κρατήσαμε μόνο γραμμικούς όρους του κυματανύσματος, ώστε να προκύψει το μαγνητικό πεδίο. Ο πρώτος όρος στην έκφραση του K , σχετίζεται με την αναμενόμενη τιμή αυτής της ποσότητας απουσία μαγνητικού πεδίου, ενώ ο δεύτερος είναι ίσος με την αναμενόμενη τιμή του ρεύματος στη θεμελιώδη κατάσταση, που φυσικά ισούται με το μηδέν. Η μόνη συνεισφορά προέρχεται από τον τελευταίο όρο. Έχουμε συγκεκριμένα

$$K = \frac{e}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \hat{\mathbf{g}}_{\sigma}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{g}}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right) \left\{ E_{\sigma}(\mathbf{k}) E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n'_F [E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] + \nu \mu n_F [E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \right\} \mathcal{B}_z. \quad (6.9)$$

Μπορούμε σε αυτό το σημείο να υπολογίσουμε την ποσότητα \widetilde{M}_z , η οποία δίνεται ως εξής

$$\widetilde{M}_z = \frac{e}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left\{ \nu E_{\sigma}(\mathbf{k}) \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n'_F [E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] + \mu \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) n_F [E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] \right\}. \quad (6.10)$$

Ολοκληρώνοντας αυτή τη σχέση, προκύπτει η έκφραση της τροχιακής μαγνήτισης

$$M_{\sigma}^z = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left\{ m_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) n_F [E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] + e k_B T \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})} \right) \right\}, \quad (6.11)$$

όπου έχουμε εισαγάγει την έκφραση του μαγνητικού πεδίου Berry

$$\Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) = -\frac{\nu}{2E_{\sigma}^3(\mathbf{k})} \mathbf{g}_{\sigma}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{g}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{g}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right), \quad (6.12)$$

$$(6.13)$$

καθώς και της τροχιακής μαγνητικής ροπής

$$m_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) = \frac{e}{\hbar} \nu E_{\sigma}(\mathbf{k}) \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) = -\frac{e}{2\hbar E_{\sigma}^2(\mathbf{k})} \mathbf{g}_{\sigma}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{g}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{g}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right). \quad (6.14)$$

Από τη δεύτερη έκφραση είναι φανερό ότι η τροχιακή μαγνητική ροπή δεν εξαρτάται από τον δείκτη ν . Η μόνη εξάρτηση σχετίζεται μόνο με τον δείκτη σπιν. Συγκεκριμένα, για τις Χειρικές Τοπολογικές καταστάσεις, η τροχιακή μαγνητική ροπή είναι ανεξάρτητη από το σπιν. Κατά συνέπεια παίζει το ρόλο ενός χημικού δυναμικού που έχει εξάρτηση από το κυματόνισμα. Στην περίπτωση των Ελικοειδών Τοπολογικών καταστάσεων, η τροχιακή μαγνητική ροπή είναι αντίθετη για κάθε σπιν. Έτσι λοιπόν, η τροχιακή ροπή μετατρέπεται και αυτή σε μαγνητική ροπή τύπου Zeeman. Περιμένουμε λοιπόν ότι σε αυτήν την περίπτωση υπάρχει μία μεταβολή της αρχικής μαγνήτισης σπιν.

6.2 Ελεύθερη ενέργεια και μαγνήτιση παρουσία εξωτερικού μαγνητικού πεδίου

Παραπάνω υπολογίσαμε την τροχιακή μαγνήτιση χωρίς να γνωρίζουμε εκ των προτέρων την έκφραση του μεγαλοκανονικού δυναμικού ή της ελεύθερης ενέργειας. Μπορούμε τώρα να κινηθούμε αντίστροφα και να υπολογίσουμε τα εν λόγω θερμοδυναμικά μεγέθη. Από τον ορισμό της τροχιακής μαγνήτισης είναι πολύ εύκολο να δειχθεί ότι το μεγαλοκανονικό θερμοδυναμικό δυναμικό εκφράζεται ως

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left(1 + \frac{e}{\hbar} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \mathcal{B}_z \right) \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})} \right), \quad (6.15)$$

όπου έχουμε θεωρήσει τις ενεργειακές διασπορές που ενσωματώνουν τη διόρθωση από την ύπαρξη του μαγνητικού πεδίου

$$E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) = -\mu - \sigma\mu_B\mathcal{B}_z - m_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k})\mathcal{B}_z + \nu E_\sigma(\mathbf{k}), \quad (6.16)$$

συμπεριλαμβανοντας τώρα και τη συνεισφορά Zeeman. Λόγω του ότι ήδη στις ενεργειακές διασπορές έχουμε συμπεριλάβει ένα χημικό δυναμικό, και παράλληλα δεν θα θεωρήσουμε κάποιο επιπρόσθετο εξωτερικό χημικό δυναμικό, το μεγαλοκανονικό δυναμικό Ω , συμπίπτει με την ελεύθερη ενέργεια του συστήματος \mathcal{F} . Η ελεύθερη ενέργεια, αφού συμπεριλάβουμε και τους όρους που προκύπτουν από τη Θεωρία Μέσου Πεδίου, γράφεται ως εξής

$$\mathcal{F}_{MF} = N \left(\frac{M_{\mathcal{Q},2}^2}{V_2} + \frac{M_{\mathcal{Q},6}^2}{V_6} \right) - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left(1 + \frac{e}{\hbar} \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k})\mathcal{B}_z \right) \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})} \right). \quad (6.17)$$

Η συνολική μαγνήτιση προκύπτει ως εξής

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_z &= -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial \mathcal{B}_z} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left(1 + \frac{e}{\hbar} \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k})\mathcal{B}_z \right) \sigma\mu_B n_F[E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})] \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left\{ \left(1 + \frac{e}{\hbar} \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k})\mathcal{B}_z \right) m_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})] + \frac{e}{\hbar} k_B T \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.18)$$

6.3 Επαγωγή των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου από το μαγνητικό πεδίο

Έχοντας υπολογίσει την ελεύθερη ενέργεια Μέσου Πεδίου, μπορούμε να μελετήσουμε τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας των παραμέτρων τάξης. Έχουμε δει ότι και στις δύο περιπτώσεις των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, οι διασπορές $E_\sigma(\mathbf{k})$ είναι ίδιες. Το μόνο που διακρίνει αυτές τις τοπολογικές καταστάσεις, στο πλαίσιο των εξισώσεων αυτοσυνέπειας, είναι το μαγνητικό πεδίο Berry. Για ευκολία μπορούμε να παραλείψουμε την διόρθωση μπροστά από τον λογάριθμο, διότι βρισκόμαστε ούτως ή άλλως στην περιοχή της γραμμικής προσέγγισης ως προς το πεδίο. Στα πλαίσια αυτής της προσέγγισης, μελετούμε μονάχα την επίδραση της τροχιακής μαγνητικής ροπής $m_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k})$. Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας, μπορούν να προκύψουν πολύ απλά με την ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας ως προς τις παραμέτρους τάξης. Στην περίπτωση των Χειρικών τοπολογικών καταστάσεων, όπου $m_{\nu,\uparrow}^z = m_{\nu,\downarrow}^z$, προκύπτει

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial M_{\mathcal{Q},i}} &= 0 \Rightarrow \\ M_{\mathcal{Q},i} &= \frac{V_i}{N} \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left\{ (-\nu) M_{\mathcal{Q},i} \frac{f_i^2(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})} + \frac{ea^2t}{\hbar} \mathcal{B}_z \tilde{M}_{\mathcal{Q},i} \frac{s(\mathbf{k})}{E_\sigma^2(\mathbf{k})} \left[1 - 2 \left(\frac{M_{\mathcal{Q},i}(\mathbf{k})}{E_\sigma(\mathbf{k})} \right)^2 \right] \right\} n_F[E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})], \end{aligned} \quad (6.19)$$

ενώ στα ελικοειδή, όπου $m_{\nu,\uparrow}^z = -m_{\nu,\downarrow}^z$, έχουμε

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{F}_{MF}}{\partial M_{\mathcal{Q},i}} &= 0 \Rightarrow \\ M_{\mathcal{Q},i} &= \frac{V_i}{N} \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left\{ (-\nu) M_{\mathcal{Q},i} \frac{f_i^2(\mathbf{k})}{2E_\sigma(\mathbf{k})} + \frac{\sigma ea^2t}{\hbar} \mathcal{B}_z \tilde{M}_{\mathcal{Q},i} \frac{s(\mathbf{k})}{E_\sigma^2(\mathbf{k})} \left[1 - 2 \left(\frac{M_{\mathcal{Q},i}(\mathbf{k})}{E_\sigma(\mathbf{k})} \right)^2 \right] \right\} n_F[E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})], \end{aligned} \quad (6.20)$$

όπου στην παραπάνω έκφραση έχουμε ορίσει τα μεγέθη $s(\mathbf{k}) = \sin^2(k_x a) \cos^2(k_y a) + \sin^2(k_y a)$ και $\widetilde{M}_{2,6} = M_{6,2}$, ενώ $i = 2, 6$. Για να δούμε πώς το μαγνητικό πεδίο επάγει τις Τοπολογικές Καταστάσεις που μελετούμε, θεωρούμε ότι το σύστημα έχει αρχικά σχηματίσει μόνο την παράμετρο τάξης που αντιστοιχεί στην αναπαράσταση $f_2(\mathbf{k}) = \cos(k_x a) - \cos(k_y a)$. Θέτουμε λοιπόν στο δεξί μέλος των παραπάνω εξισώσεων $M_{\mathbf{Q},2} \neq 0$ και $M_{\mathbf{Q},6} = 0$. Είναι πολύ εύκολο να δούμε ότι [185, 186]

$$M_{\mathbf{Q},6}^{ind;c,h} = \mathcal{I}_{c,h}(\mathcal{B}_z) \frac{ea^2 t \mathcal{B}_z}{\hbar} V_i M_{\mathbf{Q},2}, \quad (6.21)$$

όπου εισαγάγαμε τα ‘ολοκληρώματα’

$$\mathcal{I}_c(\mathcal{B}_z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{s(\mathbf{k}) n_F \left[-\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z + \nu \sqrt{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2} \right]}{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2},$$

$$\mathcal{I}_h(\mathcal{B}_z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{s(\mathbf{k}) \sigma n_F \left[-\mu - \sigma \mu_B \mathcal{B}_z + \nu \sqrt{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2} \right]}{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2}.$$

Παρατηρούμε ότι στην πρώτη περίπτωση, $\mathcal{I}_c(\mathcal{B}_z = 0) \neq 0$, και κατά συνέπεια οι **χειρικές τοπολογικές καταστάσεις επάγονται σε πρώτη τάξη ως προς το μαγνητικό πεδίο**. Αντίθετα, $\mathcal{I}_h(\mathcal{B}_z = 0) = 0$ που σημαίνει ότι οι **ελικοειδείς τοπολογικές καταστάσεις επάγονται σε δεύτερη τάξη ως προς το μαγνητικό πεδίο**. Αυτό ήταν εξ αρχής αναμενόμενο σύμφωνα με τις συμμετρίες των δύο τοπολογικών καταστάσεων. Οι χειρικές καταστάσεις παραβιάζουν την συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και έχουν πεπερασμένη τροχιακή μαγνητική ροπή $\sum_{\nu, \sigma} m_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})$. Αντίθετα, στις ελικοειδείς καταστάσεις έχουμε διάτηρηση αυτής της συμμετρίας και η ολική τροχιακή μαγνητική ροπή είναι μηδενική. Κατά συνέπεια δεν μπορεί να υπάρχει σύζευξη με περιττές δυνάμεις του μαγνητικού πεδίου \mathcal{B}_z . Εάν θεωρήσουμε λοιπόν ότι η αλληλεπίδραση Zeeman είναι η μικρότερη ενεργειακή κλίμακα του συστήματος, τότε

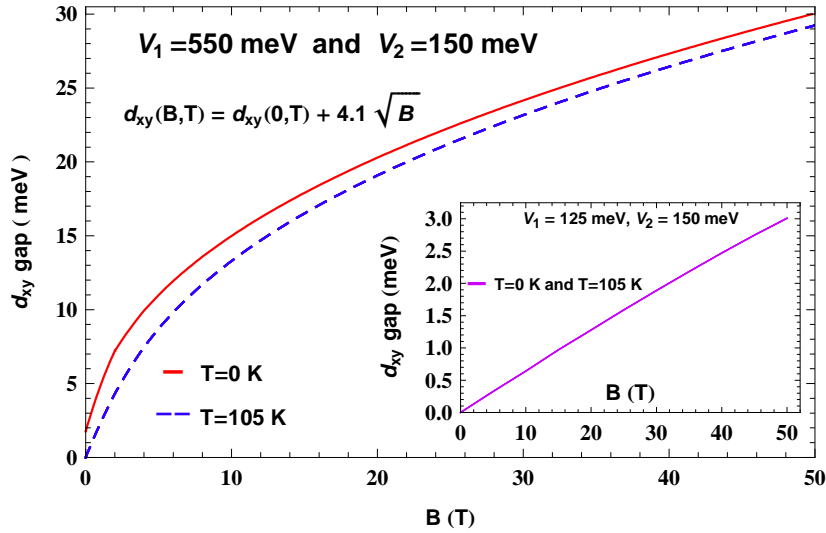
$$\mathcal{I}_c \simeq + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{s(\mathbf{k}) n_F \left[-\mu + \nu \sqrt{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2} \right]}{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2},$$

$$\mathcal{I}_h \simeq - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{s(\mathbf{k}) n'_F \left[-\mu + \nu \sqrt{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2} \right]}{4t^2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]^2 + M_{\mathbf{Q},2}^2 [\cos(k_x a) - \cos(k_y a)]^2} \mu_B \mathcal{B}_z.$$

Σύμφωνα με τα παραπάνω αποτελέσματα, παρατηρούμε ότι είναι δυνατή η επαγωγή και των δύο ειδών τοπολογικών καταστάσεων για οποδήποτε μικρά εξωτερικά πεδία, αλλά για μικρά μαγνητικά πεδία σε σχέση με το ενεργειακό χάσμα του συστήματος, οι χειρικές τοπολογικές καταστάσεις είναι κυρίαρχες. Αυτό συμβαίνει διότι το άθροισμα \mathcal{I}_c σχετίζεται απευθείας με την κατανομή Fermi-Dirac των ενεργειακών καταστάσεων, ενώ το άθροισμα \mathcal{I}_h με την παράγωγό της. Όμως, όταν το ενεργειακό χάσμα είναι η μεγαλύτερη ενεργειακή κλίμακα στο σύστημα, η παράγωγος της κατανομής Fermi-Dirac είναι μηδέν και κατά συνέπεια και το άθροισμα \mathcal{I}_h , διότι θεωρούμε ότι οι ενεργειακές καταστάσεις είναι πλήρως κατειλημμένες.

6.4 Υπολογιστική μελέτη της επαγωγής των Χειρικών Τοπολογικών Καταστάσεων

Έχοντας καταλήξει ότι παρουσία πεδίου είναι ευνοϊκότερο να επαχθεί μία Χειρική τοπολογική κατάσταση παρά μία Ελικοειδής, σε αυτήν την παράγραφο θα μελετήσουμε με υπολογιστικές μεθόδους την επαγωγή

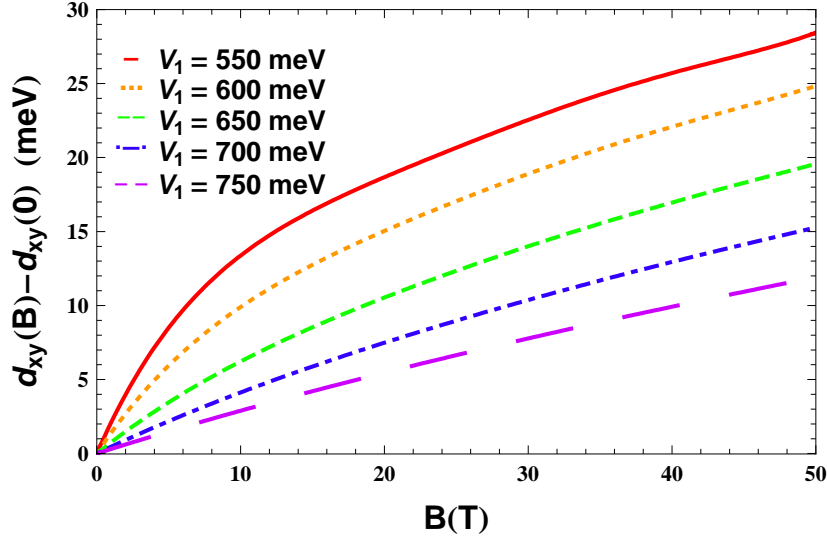


Σχήμα 6.1: Εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο B_z της επαγόμενης παραμέτρου τάξης d_{xy} που οδηγεί στην τοπολογική κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$. Στο ένθετο, παρουσιάζουμε για δύο θερμοκρασίες την εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο όταν μόνο η παράμετρος τάξης $d_{x^2-y^2}$ προϋπάρχει. Στην κεντρική εικόνα, παρατηρούμε ότι μία ήδη σχηματισμένη Χειρική Τοπολογική Κατάσταση ενισχύεται από το μαγνητικό πεδίο. Οι δύο καμπύλες που παρουσιάζονται για την παράμετρο τάξης d_{xy} , διαφέρουν μόνο κατά την τιμή για μηδενικό πεδίο, η οποία προέρχεται από το σύνηθες BCS κομμάτι της εξίσωσης αυτοσυνέπειας. Όπως παρατηρούμε δεν υπάρχει θερμοκρασιακή εξάρτηση, ενώ παρατηρούμε ότι η αρχικά γραμμική συμπεριφορά με το μαγνητικό πεδίο αποκτά τη μορφή τετραγωνικής ρίζας. P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **80**, 212401 (2009) [185].

της μη-μαγνητικής τοπολογικής κατάστασης $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ [185]. Τα αποτελέσματα που θα λάβουμε, μπορούν εύκολα να συσχετιστούν με την πιθανή εμπλοκή αυτής της κατάστασης στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού.

Για τους υπολογισμούς θα θεωρήσουμε $\mu = 0$, $t = 250\text{meV}$, $a = 5\text{\AA}$ και $V_2 = 150\text{meV}$, ενώ θα αγνοήσουμε για ευκολία την επίδραση του πεδίου Zeeman το οποίο δεν εμπλέκεται στη μαγνητική επαγωγή. Η τελευταία συνθήκη οδηγεί στον σχηματισμό ενός μη-μαγνητικού μη-συμβατικού κύματος πυκνότητας τύπου $id_{x^2-y^2}$ με παράμετρο τάξης $M_{Q,2} \simeq 53\text{meV}$ σε όλο το εύρος μαγνητικού πεδίου και θερμοκρασιών που θα εξετάσουμε στην παρούσα μελέτη. Κατ' αυτόν τον τρόπο, μπορούμε να επικεντρωθούμε στη μελέτη του σχηματισμού μόνο της παραμέτρου τάξης d_{xy} . Για τους υπολογισμούς έχουμε θεωρήσει ένα πλέγμα κυματανυσμάτων 128×128 στην ανηγμένη ζώνη Brillouin. Ο αριθμός των σημείων είναι αρκετά μεγάλος διότι είναι εύκολο να επιτευχθεί η σύγκλιση της εξίσωσης αυτοσυνέπειας 6.19, για τη συνιστώσα d_{xy} .

Πρώτα από όλα επιβεβαιώνουμε υπολογιστικά τη γραμμική εξάρτηση ως προς το μαγνητικό πεδίο της επαγόμενης παραμέτρου τάξης d_{xy} . Από τα αποτελέσματα που συγκεντρώσαμε, θα επικεντρωθούμε για ευκολία στην περίπτωση $V_6 = 125\text{meV}$. Στο ένθετο γράφημα του Σχ.6.1 παρατηρούμε την γραμμική εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο καθώς και το ότι η θερμοκρασιακή εξάρτηση είναι εξαιρετικά ασθενής. Η τελευταία μπορεί εύκολα να κατανοηθεί, εάν παρατηρήσουμε ότι το κομμάτι της εξίσωσης αυτοσυνέπειας που περιγράφει την επαγωγή της παραμέτρου τάξης d_{xy} , περιλαμβάνει τον όρο $n_F [-E(\mathbf{k}) - m_z(\mathbf{k})\mathcal{B}_z] + n_F [E(\mathbf{k}) - m_z(\mathbf{k})\mathcal{B}_z]$. Λόγω του ότι το μέτρο της παραμέτρου τάξης $d_{x^2-y^2}$ είναι η κυρίαρχη ενεργειακή κλίμακα, ο παραπάνω όρος είναι σχεδόν ίσος με τη μονάδα, αποκλείοντας κάποια ουσιαστική θερμοκρασιακή επίδραση στο υπό μελέτη διάστημα.



Σχήμα 6.2: Εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο του επαγόμενου τμήματος της παραμέτρου τάξης d_{xy} σε μία προϋπάρχουσα Χειρική Τοπολογική κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$, για διάφορες τιμές του ενεργού δυναμικού V_6 . Για μικρές τιμές του δυναμικού λαμβάνουμε την αναμενόμενη εξάρτηση $\sqrt{B_z}$, ενώ μετά από μία κρίσιμη τιμή του δυναμικού, περνάμε σε καθαρά γραμμική εξάρτηση. Η τελευταία υποδεικνύει την επικράτηση της μαγνητικής σύζευξης. P. Kotetes and G. Varelogiannis, *Phys. Rev. B* **80**, 212401 (2009) [185].

Ακόμα πιο ενδιαφέροντα αποτελέσματα προκύπτουν στην περίπτωση ενός ήδη σχηματισμένου Χειρικού Κύματος Πυκνότητας Φορτίου όταν σε αυτό εφαρμόσουμε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Θεωρούμε τον συνδυασμό των ενεργών δυναμικών $V_6 = 550\text{meV}$ και $V_2 = 150\text{meV}$, που οδηγούν στις παραμέτρους τάξης $M_{Q,6} \simeq 1.8\text{meV}$ και $M_{Q,2} \simeq 53\text{meV}$ απουσία μαγνητικού πεδίου. Όταν η τροχιακή αλληλεπίδραση με το μαγνητικό πεδίο γίνει μη μηδενική, η παράμετρος τάξης $d_{x^2-y^2}$ παραμένει σχεδόν αμετάβλητη, ενώ αντίθετα η παράμετρος της συνιστώσας d_{xy} ενισχύεται σημαντικά. Συγκεκριμένα, το μέγεθος της παραμέτρου τάξης d_{xy} γίνεται 15 φορές μεγαλύτερο από την αρχική τιμή του, όταν το μαγνητικό πεδίο είναι $B_z = 50\text{T}$. Παρατηρούμε ότι η εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο μεταβάλλεται, και από γραμμική αποκτά της μορφή της τετραγωνικής ρίζας. Αυτό συμβαίνει διότι σημαντική επίδραση έχει και ο πρώτος όρος της εξίσωσης αυτοσυνέπειας, ο οποίος δεν είναι άλλος από τον συνήθη τύπου BCS.

Όσον αφορά τη θερμοκρασιακή εξάρτηση, παρατηρούμε στο κύριο γράφημα του Σχ. 6.1, ότι για δύο διαφορετικές θερμοκρασίες έχουμε μόνο μία μετατόπιση των δύο καμπύλων, κατά την τιμή της παραμέτρου d_{xy} για μηδενικό μαγνητικό πεδίο. Βλέπουμε λοιπόν ότι το επαγόμενο κομμάτι της συγκεκριμένης παραμέτρου τάξης είναι θερμοκρασιακά αμετάβλητο. Για παράδειγμα, ένα χάσμα $M_{Q,6} = 1.8\text{meV}$, το οποίο αρχικά εξαφανιζόταν περίπου στα 30K, προκύπτει ότι τώρα είναι δυνατόν να συνεχίζει να υπάρχει μέχρι και τα 120K.

Τέλος, θα εξετάσουμε την επίδραση του ενεργού δυναμικού V_6 στο φαινόμενο της επαγωγής και συγκεκριμένα στην εξάρτηση με το μαγνητικό πεδίο. Στο Σχ. 6.2 δείχνει την εξάρτηση της παραμέτρου τάξης d_{xy} αφού πρώτα έχουμε αφαιρέσει την τιμή της για μηδενικό μαγνητικό πεδίο. Επικεντρωνόμαστε με αυτόν τον τρόπο μόνο στο επαγόμενο κομμάτι και παρατηρούμε ότι η αύξηση του δυναμικού ‘μαλακώνει’ την εξάρτηση $\sqrt{B_z}$ σε γραμμική. Υπάρχει μία κρίσιμη τιμή όπου από κει και πέρα έχουμε μόνο γραμμική συμπεριφορά.

7 Μαγνητοθερμοηλεκτρικά φαινόμενα μεταφοράς στα Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

Ο βασικός και κύριος στόχος της διατριβής αυτής, είναι να αναδείξουμε την ανάμιξη των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν ως καταστάσεις που μπορούν να εξηγήσουν φαινόμενα όπως είναι το **Γιγαντιαίο σήμα Nernst** που παρατηρείται στην κανονική κατάσταση των υπεραγωγών υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας και των βαρέων φερμιονίων. Έτσι λοιπόν, είναι απαραίτητη προϋπόθεση η εξαγωγή των γενικών σχέσεων που εκφράζουν τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα σε αυτά τα υλικά. Αυτό θα γίνει μέσω της εισαγωγής ενός βοηθητικού θερμοικού πεδίου. Συγκεκριμένα, θα υπολογίσουμε την ενεργό δράση του θερμοικού πεδίου και των πεδίων βαθμίδας $U(1)$ του φορτίου και σπιν, καταλήγοντας στον συνολικό τανυστή της μαγνητοθερμοηλεκτρικής αγωγιμότητας.

7.1 Ρεύμα θερμότητας

Το βασικό στοιχείο των θερμοηλεκτρικών φαινομένων, αποτελεί φυσικά το ρεύμα θερμότητας. Αντίστοιχα με τους τελεστές πυκνότητας φορτίου και σπιν, μπορούμε να ορίσουμε τον τελεστή της πυκνότητας ενέργειας [10] με τον ακόλουθο τρόπο

$$\rho_e(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \widehat{\mathcal{H}}_\sigma(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \quad (7.1)$$

όπου επιτρέψαμε διακυμάνσεις της ηλεκτρονιακής πυκνότητας. Το αντίστοιχο διατηρούμενο ρεύμα θα βρεθεί από την εξίσωση συνέχειας της πυκνότητας ενέργειας

$$\dot{\rho}_e(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \mathbf{J}_e(\mathbf{r}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{\rho}_e(\mathbf{q}) + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{J}_e(\mathbf{q}) = 0, \quad (7.2)$$

όπου \mathbf{J}_e το ρεύμα ενέργειας. Η χρονική παράγωγος της πυκνότητας φορτίου, μπορεί εύκολα να βρεθεί από τον μεταθέτη με την Χαμιλτονιανή Μέσου Πεδίου του συστήματος, η οποία έχει τη γενική μορφή $\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}, \sigma}$. Έχουμε λοιπόν,

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_e(\mathbf{q}) &= \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho_e(\mathbf{q})] = \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} [\psi_{\mathbf{k}', \sigma'}^\dagger \mathcal{H}_{\sigma'}(\mathbf{k}') \psi_{\mathbf{k}', \sigma'} + \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}] \\ &= \frac{i}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \{ \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) - \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q}) \} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma} \simeq -i\mathbf{q} \cdot \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \frac{\partial \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}, \end{aligned} \quad (7.3)$$

που ισχύει με πολύ καλή προσέγγιση στα μεγάλα μήκη κύματος ή ισοδύναμα στα μικρά κυματανύσματα \mathbf{q} . Από την εξίσωση συνέχειας προκύπτει ότι για κάθε \mathbf{q}

$$\mathbf{J}_e(\mathbf{q}) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k}) \frac{\partial \mathcal{H}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (7.4)$$

Παρ'όλ' αυτά, για τη μεταφορά θερμότητας απαιτείται το ρεύμα θερμότητας και όχι το ρεύμα ενέργειας. Το ρεύμα θερμότητας ισούται με $\mathbf{J}_h = \mathbf{J}_e + \frac{\mu}{e} \mathbf{J}_c$, όπου ο τελευταίος όρος περιγράφει το ηλεκτρικό ρεύμα [10, 228]. Στην δική μας περίπτωση όπου περιλαμβάνουμε ήδη ένα χημικό δυναμικό στην Χαμιλτονιανή μας, τα ρεύματα θερμότητας και ενέργειας ταυτίζονται $\mathbf{J}_h = \mathbf{J}_e$. Αντικαθιστώντας με την Χαμιλτονιανή μπορούμε να βρούμε την ακριβή μορφή του ρεύματος θερμότητας

$$\mathbf{J}_e(\mathbf{q}) = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \left\{ E_\sigma(\mathbf{k}) \frac{\partial E_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \mu \frac{\partial g_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\tau} + i \left[\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right] \cdot \boldsymbol{\tau} \right\} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}. \quad (7.5)$$

Λόγω της ύπαρξης ενός νόμου διατήρησης, θα θεωρήσουμε ότι και στην περίπτωση αυτή, υπάρχει ένα κατάλληλο πεδίο ϕ^μ το οποίο αλληλεπιδρά με την πυκνότητα και το ρεύμα ενέργειας. Το συγκεκριμένο πεδίο εισήχθη από τον Luttinger [230] και στη βιβλιογραφία αποκαλείται ως 'βαρυτικό'. Θα θεωρήσουμε συγκεκριμένα λοιπόν την αλληλεπίδραση του βαρυτικού πεδίου μόνο με το ρεύμα (αφού ενδιαφερόμαστε για την αγωγιμότητα) και έχουμε

$$\mathcal{V}_\phi = - \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{J}_h(-\mathbf{q}) \cdot \phi(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{q}, j} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger \Upsilon_j^\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) \phi^j(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (7.6)$$

όπου εισαγάγαμε την κορυφή αλληλεπίδρασης

$$\Upsilon_j^\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}) = E_\sigma(\mathbf{k}) \frac{\partial E_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} - \mu \frac{\partial g_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\tau} + i \left[\mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{g}_\sigma(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \right] \cdot \boldsymbol{\tau}. \quad (7.7)$$

Φυσικά όπως ακριβώς προσπαθήσαμε να βρούμε σε τι αντιστοιχεί το πεδίο βαθμίδας του σπιν, έτσι κι εδώ θα πρέπει να βρούμε σε τι εξωτερική διέγερση μπορούμε να αντιστοιχίσουμε το πεδίο ϕ .

7.2 Αντιστοιχία μεταξύ βαρυτικού πεδίου και θερμοβαθμίδας

Όπως προαναφέραμε, πρέπει να βρούμε τη συσχέτιση του πεδίου ϕ^μ με κάποιο φυσικό μέγεθος. Για να το κάνουμε αυτό, θα χρησιμοποιήσουμε ως αφετηρία την ημικλασική θεωρία μεταφοράς Boltzmann. Με αυτόν τον τρόπο θα δείξουμε ότι τα μεγέθη $\nabla \phi_0$ και $\partial_t \phi$ μπορούν να συνδεθούν με την ανηγμένη θερμοβαθμίδα $\frac{\nabla T}{T}$. Σύμφωνα με τη θεωρία Boltzmann [207] η κατανομή Fermi-Dirac n_F εξαρτάται εν γένει από τη θέση στο χώρο \mathbf{r} , το κυματόνισμα \mathbf{k} και το χρόνο t . Για απλότητα, σε αυτήν την παράγραφο θα περιοριστούμε σε μία ενεργειακή ζώνη Bloch $\varepsilon(\mathbf{k})$. Το κυματόνισμα \mathbf{k} έχει την ακόλουθη χρονική παράγωγο $\hbar \dot{\mathbf{k}} = \sum_m \mathbf{F}_m = -e\boldsymbol{\mathcal{E}}$, ενώ η ταχύτητα δίνεται από τη σχέση $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}}$. Φυσικά αντίστοιχο ρόλο του ηλεκτρικού πεδίου και της μαγνητοβαθμίδας, παίζει η ποσότητα $-\nabla \phi_0 - \partial_t \phi$, η οποία αποτελεί το 'ηλεκτρικό' βαρυτικό πεδίο. Το βαρυτικό 'φορτίο' ισούται με την ενέργεια της ζώνης, και κατά συνέπεια μπορούμε στην γενικότερη περίπτωση να έχουμε

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = -e\boldsymbol{\mathcal{E}} - \varepsilon(\mathbf{k}) (\nabla \phi_0 + \partial_t \phi). \quad (7.8)$$

Σε αυτό το σημείο θα δείξουμε ότι η χρονική μεταβολή που εισάγει το μέγεθος $\nabla \phi_0 + \partial_t \phi$ στη κατανομή Fermi-Dirac είναι ισοδύναμη με τη μεταβολή που εισάγει η ανηγμένη θερμοβαθμίδα $\nabla T/T$. Στην περίπτωση ενός 'ηλεκτρικού' βαρυτικού πεδίου έχουμε

$$\frac{dn_F(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{dt} = \frac{\partial n_F[\varepsilon(\mathbf{k})]}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{k}} = -n'_F[\varepsilon(\mathbf{k})] \varepsilon(\mathbf{k}) \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot (\nabla \phi_0 + \partial_t \phi). \quad (7.9)$$

Αντίστοιχα, μία θερμοβαθμίδα έχει το ακόλουθο αποτέλεσμα

$$\frac{dn_F(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{dt} = \frac{\partial n_F[\varepsilon(\mathbf{r})]}{\partial \mathbf{k}} \cdot \dot{\mathbf{r}} = -n'_F[\varepsilon(\mathbf{k})]\varepsilon(\mathbf{k})\mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\nabla T}{T}. \quad (7.10)$$

Παρατηρούμε από τα παραπάνω, ότι υπάρχει η προφανής αντιστοιχία

$$\nabla\phi_0 + \partial_t\phi \leftrightarrow \frac{\nabla T}{T}. \quad (7.11)$$

Κατά συνέπεια, μπορούμε να μελετήσουμε τις συνέπειες μιας θερμοβαθμίδας, μέσω του βαρυτικού πεδίου.

7.3 Ενεργός δράση των πεδίων του φορτίου, του σπιν και της ενέργειας

Σε προηγούμενο κεφάλαιο υπολογίσαμε την ενεργό δράση των πεδίων του σπιν και του φορτίου. Στην παρούσα φάση θέλουμε να υπολογίσουμε τις αγωγιμότητες στο δυναμικό όριο, που προκύπτουν από την αλληλεπίδραση αυτών των τριών πεδίων. Ακολουθώντας παρόμοια βήματα, πρέπει να αναπτύξουμε την ακόλουθη ποσότητα

$$\begin{aligned} & - \text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left[\hat{\mathcal{G}}^0 \left(\hat{\Gamma}_\mu \hat{A}^\mu + \hat{\Delta}_\mu \hat{B}^\mu + \hat{\Upsilon}_\mu \hat{\phi}^\mu \right) \right]^n = -\text{Tr} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \left\{ \hat{\mathcal{G}}^0 \left[\hat{\Gamma}_\mu \left(\hat{A}^\mu + \sigma \frac{\mu_B}{e} \hat{B}^\mu \right) + \hat{\Upsilon}_\mu \hat{\phi}^\mu \right] \right\}^n \\ & = -\frac{\beta N}{2} \sum_{q,\sigma} \left\{ \left[A^\mu(-q) + \sigma \frac{\mu_B}{e} B^\mu(-q) \right] \Pi_{\mu\nu}^\sigma(q) \left[A^\mu(q) + \sigma \frac{\mu_B}{e} B^\mu(q) \right] \right. \\ & + \left[A^\mu(-q) + \sigma \frac{\mu_B}{e} B^\mu(-q) \right] \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{eh}(q) \phi^\nu(q) + \phi^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^{he}(q) \left[A^\nu(q) + \sigma \frac{\mu_B}{e} B^\nu(q) \right] \\ & \left. + \phi^\mu(-q) \Pi_{\mu\nu,\sigma}^h(q) \phi^\nu(-q) \right\}, \quad (7.12) \end{aligned}$$

σε όρους δεύτερης τάξης ως προς τα πεδία. Έχουμε χρησιμοποιήσει το γεγονός ότι οι κορυφές αλληλεπίδρασης του πεδίου του φορτίου και του σπιν είναι παρόμοιες. Σε προηγούμενο κεφάλαιο, υπολογίσαμε το κομμάτι της δράσης που σχετίζεται με αυτά τα δύο πεδία και δεν χρειάζεται να το επαναλάβουμε. Επιπλέον εισαγάγαμε τους ταυιστές πόλωσης (Polarization Tensors),

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{eh}(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Gamma_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Upsilon_\nu^\sigma(k+q, k), \quad (7.13)$$

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^{he}(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Upsilon_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Gamma_\nu^\sigma(k+q, k), \quad (7.14)$$

$$\Pi_{\mu\nu,\sigma}^h(q) = \frac{1}{\beta N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{G}_{\mathbf{k},\sigma}^0(ik_\nu) \Upsilon_\mu^\sigma(k, k+q) \mathcal{G}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^0(ik_\nu + i\omega_s) \Upsilon_\nu^\sigma(k+q, k). \quad (7.15)$$

Εδώ θα περιοριστούμε μόνο σε θερμοηλεκτρικά φαινόμενα, κι όχι σε θερμικά. Έτσι λοιπόν δεν θα υπολογίσουμε τον τελευταίο όρο. Θα υπολογίσουμε μονάχα την μαγνητοθερμική και θερμοηλεκτρική αγωγιμότητα.

7.4 Τανυστής πόλωσης Τοπολογικής θερμοηλεκτρικής αγωγιμότητας

Στην θερμοηλεκτρική απόκριση, και γενικότερα στην μεταφορά κάποιου φορτίου ενδιαφερόμαστε στο δυναμικό όριο. Αυτό συνεπάγεται ότι μελετάμε το σύστημα στο όριο $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$. Έπειτα, εάν θέλουμε να μελετήσουμε την στατική (dc) αγωγιμότητα, πρέπει να πάρουμε την εξωτερική μωζονική συχνότητα να τείνει στο μηδέν. Παίρνοντας το όριο του κυματανύσματος στο μηδέν απλοποιεί κατά πολύ τους υπολογισμούς. Έχουμε λοιπόν

$$\Pi_{ij,\sigma}^{eh}(i\omega_s) = -\Pi_{ij,\sigma}^{he}(i\omega_s) = \frac{e\mu}{N} i(i\omega_s) \sum_{\mathbf{k},\nu} \Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})]. \quad (7.16)$$

Η παραπάνω έκφραση θυμίζει ασφαλώς τις τοπολογικές δράσεις που βρήκαμε νωρίτερα. Με ανάλογο τρόπο μπορούμε να ορίσουμε τις θερμοηλεκτρικές και μαγνητοθερμικές αποκρίσεις, και τελικά λαμβάνουμε τα εξής αποτελέσματα

$$\langle \mathbf{J}_c \rangle = \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left[-\frac{e^2}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} - \sigma \frac{e\mu_B}{\hbar} (-\nabla B_z) - \frac{e\mu}{\hbar} (-\partial_t \phi) \right] \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})], \quad (7.17)$$

$$\langle \mathbf{J}_s \rangle = \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left[-\sigma \frac{e\mu_B}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} - \frac{\mu_B^2}{\hbar} (-\nabla B_z) - \sigma \frac{\mu\mu_B}{\hbar} (-\partial_t \phi) \right] \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})], \quad (7.18)$$

$$\langle \mathbf{J}_h \rangle = \sum_{\mathbf{k},\nu,\sigma} \left[-\frac{e\mu}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} - \sigma \frac{\mu\mu_B}{\hbar} (-\nabla B_z) \right] \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})], \quad (7.19)$$

όπου υπενθυμίζουμε ότι έχουμε παραλείψει τη συνεισφορά της θερμικής αγωγιμότητας στο ρεύμα θερμότητας, διότι δεν θα μας απασχολήσει σε αυτήν την διατριβή.

7.5 Ρεύμα μεταφοράς θερμότητας και ο ρόλος της τροχιακής μαγνήτισης

Παραπάνω, χρησιμοποιώντας τις τεχνικές της Κβαντικής θεωρίας Πεδίου και βασιζόμενοι στη διατήρηση του ρεύματος ενέργειας, καταλήξαμε στις εξισώσεις για τα θερμοηλεκτρικά φαινόμενα που θα μας οδηγήσουν στις αντίστοιχες αγωγιμότητες. Προτού προχωρήσουμε όμως, πρέπει να σταθούμε σε ένα πολύ σημαντικό ζήτημα. Υπάρχει σαφής διάκριση μεταξύ του ρεύματος ενέργειας και του ρεύματος μεταφοράς ενέργειας. Μάλιστα, το δεύτερο είναι αυτό που θα πρέπει να συσχετιστεί με τα μαγνητοθερμοηλεκτρικά φαινόμενα μεταφοράς [228, 231]. Το ρεύμα ενέργειας που υπολογίσαμε παραπάνω, και κατά συνέπεια το ρεύμα θερμότητας, αποτελούνται από δύο συνεισφορές. Η μία είναι το ζητούμενο ρεύμα μεταφοράς ενέργειας και το δεύτερο σχετίζεται με την ενέργεια που δαπανάται. Η εν λόγω συνεισφορά [228] ισούται με

$$\sum_{\sigma} \mathbf{M}_{\sigma} \times \left[\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{\sigma\mu_B}{e} (-\nabla B_z) \right]. \quad (7.20)$$

Η συγκεκριμένη συνεισφορά, αντιστοιχεί στο γενικευμένο διάνυσμα Poynting. Θα πρέπει λοιπόν να αφαιρέσουμε τον παραπάνω όρο από το ρεύμα ενέργειας και κατά συνέπεια από το ρεύμα θερμότητας

$$\langle \mathbf{J}_h \rangle \rightarrow \langle \mathbf{J}_h \rangle - \sum_{\sigma} \mathbf{M}_{\sigma} \times \left[\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{\sigma\mu_B}{e} (-\nabla B_z) \right] \Rightarrow$$

$$\langle \mathbf{J}_h \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left[\frac{e}{\hbar} \boldsymbol{\mathcal{E}} + \sigma \frac{\mu_B}{\hbar} (-\nabla \mathcal{B}_z) \right] \times \boldsymbol{\Omega}_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) \left\{ E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] + k_B T \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})} \right) \right\}. \quad (7.21)$$

Μπορούμε τώρα να εισαγάγουμε τη θερμοηλεκτρική καθώς και τη μαγνητοθερμική αγωγιμότητα [228]

$$\tilde{\alpha}_{xy}^c = \frac{e}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \left\{ E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] + k_B T \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})} \right) \right\}, \quad (7.22)$$

$$\tilde{\alpha}_{xy}^s = \frac{\mu_B}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \sigma \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \left\{ E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})] + k_B T \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})} \right) \right\}. \quad (7.23)$$

Εισάγοντας επίσης τις ‘συζυγείς’ θερμοηλεκτρικές αγωγιμότητες $\alpha_{xy} = \tilde{\alpha}_{xy}/T$ προκύπτει ο καταστατικός πίνακας της Αυθόρμητης Μαγνητοθερμοηλεκτρικής μεταφοράς Hall των Τοπολογικών καταστάσεων

$$\begin{pmatrix} j_x^c \\ j_x^s \\ j_x^h \\ j_y^c \\ j_y^s \\ j_y^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +\sigma_{xy}^c & +\sigma_{xy}^{cs} & +\alpha_{xy}^c \\ 0 & 0 & 0 & +\sigma_{xy}^{cs} & +\sigma_{xy}^s & +\alpha_{xy}^s \\ 0 & 0 & 0 & +\tilde{\alpha}_{xy}^c & +\tilde{\alpha}_{xy}^s & +\kappa_{xy} \\ -\sigma_{xy}^c & -\sigma_{xy}^{cs} & -\alpha_{xy}^c & 0 & 0 & 0 \\ -\sigma_{xy}^{cs} & -\sigma_{xy}^s & -\alpha_{xy}^s & 0 & 0 & 0 \\ -\tilde{\alpha}_{xy}^c & -\tilde{\alpha}_{xy}^s & -\kappa_{xy} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{E}_x \\ -\partial_x \mathcal{B}_z \\ -\partial_x T \\ \mathcal{E}_y \\ -\partial_y \mathcal{B}_z \\ -\partial_y T \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

Φυσικά πρέπει να υπενθυμίσουμε ότι σε αυτή την διατριβή δεν θα μελετήσουμε θερμικά φαινόμενα και κατά συνέπεια θα αφήσουμε τις θερμικές αγωγιμότητες $\kappa_{xx}, \kappa_{yy}, \kappa_{xy}$ ως άγνωστα μεγέθη που απλά τα συμπληρώνουμε για πληρότητα. Πέρα όμως από αυτά τα στοιχεία του μαγνητοθερμοηλεκτρικού τανυστή που παρουσιάζουμε παραπάνω και είναι τοπολογικής φύσης, πρέπει να λάβουμε υπόψη και τις συνεισφορές των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων στα παραπάνω μεγέθη. Μπορεί να δειχθεί στα πλαίσια της ημικλασικής περιγραφής Boltzmann ότι οι συνεισφορές από τις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις έχουν τις ακόλουθες εκφράσεις [187, 193, 228]

$$\sigma_{xx}^{c,s} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{n'_F[E_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})]}{1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})} \left(\frac{\tau_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})}{\hbar} \right) [v_{\nu, \sigma}^{x,B}(\mathbf{k})]^2, \quad (7.25)$$

$$\alpha_{xx}^{c,s} = +\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{n'_F[E_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})]}{1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})} \left(\frac{\tau_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})}{\hbar} \right) [v_{\nu, \sigma}^{x,B}(\mathbf{k})]^2 \left(\frac{E_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})}{k_B T} \right), \quad (7.26)$$

$$\sigma_{xy,qp}^{c,s} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{n'_F[E_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})]}{1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})} \left(\frac{\tau_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})}{\hbar} \right)^2 \frac{ea^2 \mathcal{B}}{\hbar} v_{\nu, \sigma}^x(\mathbf{k}) \left(\varepsilon_{ijz} v_{\nu, \sigma}^{j,B}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} \right) v_{\nu, \sigma}^{y,B}(\mathbf{k}), \quad (7.27)$$

$$\alpha_{xy,qp}^{c,s} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{n'_F[E_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})]}{1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})} \left(\frac{\tau_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})}{\hbar} \right)^2 \frac{ea^2 \mathcal{B}}{\hbar} v_{\nu, \sigma}^{x,B}(\mathbf{k}) \left(\varepsilon_{ijz} v_{\nu, \sigma}^{j,B}(\mathbf{k}) \frac{\partial}{\partial k_i} \right) v_{\nu, \sigma}^{y,B}(\mathbf{k}) \left(\frac{E_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k})}{k_B T} \right), \quad (7.28)$$

όπου $i, j = x, y$. Οι αγωγιμότητες μετρώνται στις ακόλουθες μονάδες $[\sigma_{xx}^c], [\sigma_{xy}^c] = a^2 e^2 / h$, $[\sigma_{xx}^s], [\sigma_{xy}^s] = a^2 \mu_B^2 / h$, $[\alpha_{xx}^c], [\alpha_{xy}^c] = a^2 e k_B / h$, $[\alpha_{xx}^s], [\alpha_{xy}^s] = a^2 \mu_B k_B / h$, όπου a η σταθερά πλέγματος. Στα παραπάνω έχει ληφθεί υπόψη ότι ο χρόνος εφής μεταβάλλεται με την παρουσία του μαγνητικού πεδίου Berry, όπως και η πυκνότητα των ενεργειακών καταστάσεων [228].

$$\tau_{\nu, \sigma}^B(\mathbf{k}) = \frac{\tau_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})}. \quad (7.29)$$

Καταλήγουμε λοιπόν στον ακόλουθο μαγνητοθερμοηλεκτρικό ταυστή όπου περιλαμβάνει τόσο τις τοπικές συνεισφορές, όσο και αυτές από τις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις

$$\begin{pmatrix} j_x^c \\ j_x^s \\ j_x^h \\ j_y^c \\ j_y^s \\ j_y^h \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}^c & 0 & 0 & +\sigma_{xy}^c & +\sigma_{xy}^{cs} & +\alpha_{xy}^c \\ 0 & \sigma_{xx}^s & 0 & +\sigma_{xy}^{cs} & +\sigma_{xy}^s & +\alpha_{xy}^s \\ 0 & 0 & \kappa_{xx} & +\tilde{\alpha}_{xy}^c & +\tilde{\alpha}_{xy}^s & +\kappa_{xy} \\ -\sigma_{xy}^c & -\sigma_{xy}^{cs} & -\alpha_{xy}^c & \sigma_{yy}^c & 0 & 0 \\ -\sigma_{xy}^{cs} & -\sigma_{xy}^s & -\alpha_{xy}^s & 0 & \sigma_{yy}^s & 0 \\ -\tilde{\alpha}_{xy}^c & -\tilde{\alpha}_{xy}^s & -\kappa_{xy} & 0 & 0 & \kappa_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathcal{E}_x \\ -\partial_x \mathcal{B}_z \\ -\partial_x T \\ \mathcal{E}_y \\ -\partial_y \mathcal{B}_z \\ -\partial_y T \end{pmatrix}. \quad (7.30)$$

8 Τοπολογικές Χειρικές καταστάσεις σε πραγματικά Υλικά

Σε αυτό το κεφάλαιο ολοκληρώνουμε την προσπάθειά μας, που έχει στόχο να αναδείξουμε τη δυνατότητα κατανόησης της ανεξήγητης θερμοηλεκτρικής συμπεριφοράς που παρατηρείται σε έναν μεγάλο αριθμό υλικών, μέσω των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν. Συγκεκριμένα, όπως θα δείξουμε στις επόμενες παραγράφους, οι **Χειρικές καταστάσεις στο ισχυρά μονωτικό όριο** παρουσιάζουν μία **Γιγαντιαία απόκριση Nernst με ένα χαρακτηριστικό θερμοκρασιακό προφίλ**, το οποίο ανταποκρίνεται στην πειραματική εικόνα των συγκεκριμένων θερμοηλεκτρικών υλικών. Κατ' αυτόν τον τρόπο, θα επικεντρωθούμε σε δύο διαφορετικές κατηγορίες υλικών, τους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού και το μη-συμβατικό υπεραγωγό βαρέων φερμιονίων URu₂Si₂. Πέρα από το να δείξουμε ότι οι χειρικές καταστάσεις, $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ και $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$ αντίστοιχα, μπορούν να εξηγήσουν το παρατηρούμενο σήμα Nernst, προτείνουμε επιπλέον τρόπους για να μπορούν να επιβεβαιωθούν οι θεωρητικές μας προτάσεις. Στην περίπτωση των χαλκοξειδίων προτείνουμε τη παρατήρηση του αντιστρόφου αυθόρμητου φαινομένου Hall, ενώ στην περίπτωση του URu₂Si₂ προβλέπουμε την μέτρηση του Πολωμένου Φαινομένου Kerr. Και τα δύο φαινόμενα αποτελούν χαρακτηριστικές συνέπειες της εγγενούς χειρικότητας.

8.1 Γιγαντιαίο Φαινόμενο Nernst στους οξειδία του χαλκού

Σε αυτήν την παράγραφο, θα αναδείξουμε ότι οι Χειρικές Τοπολογικές καταστάσεις Κύματος Πυκνότητας Φορτίου $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ είναι δυνατόν να ευθύνονται για το γιγαντιαίο σήμα Nernst που παρατηρείται σε αυτά τα υλικά. Πρώτα από όλα, στους υπολογισμούς των αγωγιμοτήτων Hall που θα ακολουθήσουν [187], θα περιοριστούμε στις τοπολογικές συνεισφορές που δίνονται από τις εκφράσεις

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{\hbar N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} n_F[E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})] \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}), \quad (8.1)$$

$$\alpha_{xy} = \frac{e}{\hbar NT} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \left\{ E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) n_F[E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})] + k_B T \ln \left(1 + e^{-E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})/k_B T} \right) \right\} \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}), \quad (8.2)$$

Οι διαμήκεις αγωγιμότητες υπολογίζονται στα πλαίσια της θεωρίας Boltzmann από τις ακόλουθες σχέσεις

$$\sigma_{xx} = -\frac{e^2}{\hbar^2 N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} n'_F \left[E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) \right] \frac{v_{x, \nu, \sigma}^2(\mathbf{k}) \tau_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\left[1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B}_z \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \right]^2}, \quad (8.3)$$

$$\alpha_{xx} = \frac{e}{\hbar^2 NT} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} n'_F \left[E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) \right] \frac{v_{x, \nu, \sigma}^2(\mathbf{k}) E_{\nu, \sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) \tau_{\nu, \sigma}(\mathbf{k})}{\left[1 + \frac{e}{\hbar} \mathcal{B}_z \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \right]^2}, \quad (8.4)$$

όπου με τόνο δηλώνουμε την παραγωγή ως προς το όρισμα της συνάρτησης. Εισάγαμε της ενεργειακές διασπορές που εξαρτώνται από το μαγνητικό πεδίο $E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) = E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) - \mathbf{m}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) \cdot \mathcal{B}$ καθώς και τις ταχύτητες που δεν εξαρτώνται από το μαγνητικό πεδίο $\mathbf{v}_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} E_{\nu,\sigma}(\mathbf{k})$. Επιπλέον, στις παραπάνω σχέσεις ενσωματώσαμε τις διορθώσεις στην πυκνότητα ενεργειακών καταστάσεων και στον ιστροπικό χρόνο εφησύχασης $\tau_{\nu,\sigma}(\mathbf{k}) \equiv \tau$, λόγω της παρουσίας του μαγνητικού πεδίου Berry [228]. Όσον αφορά τον όρο Zeeman, είναι αμελητέος στη συγκεκριμένη περίπτωση, ενώ για μεγαλύτερα πεδία αναμένεται να γίνει σημαντικός και να καταστρέψει τη χειρική κατάσταση. Για τους υπολογισμούς, έχουμε χρησιμοποιήσει τα αριθμητικά αποτελέσματα του Κεφ.6, που εξάχθηκαν για $t = 250\text{meV}$, $\mu = 0$, $a = 5\text{\AA}$, $M_{\mathbf{Q},2} = 53\text{meV}$ και οδήγησαν σε μία επαγόμενη παράμετρο τάξης d_{xy} με την ακόλουθη εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο $M_{\mathbf{Q},6}(\mathcal{B}_z) = 1.76 + 4.1\sqrt{\mathcal{B}_z} \text{ meV}$ [185]. Ο χρόνος εφησύχασης τέθηκε ίσος με $\tau = 10^{-13}\text{s}$, της ίδιας τάξης με την πειραματική τιμή που έχει προκύψει από μετρήσεις αντίστασης [232]. Πρέπει να προαναγγείλουμε ότι σε αντίθεση με το σύνηθες φαινόμενο Nernst από μονοσωματιδιακές διεγέρσεις, όπου το σήμα Nernst είναι ανάλογο του χρόνου εφησύχασης, στην συγκεκριμένη περίπτωση το τοπολογικό σήμα Nernst δεν εξαρτάται γραμμικά από το χρόνο εφησύχασης, διότι οι αγωγιμότητες Hall, $\sigma_{xy}^{\mathcal{B}}$ και $\alpha_{xy}^{\mathcal{B}}$ έχουν τοπολογική προέλευση. Τέλος, πριν προχωρήσουμε, πρέπει να επισημάνουμε πως παρόλο που εδώ θα επικεντρωθούμε στη συγκεκριμένη χειρική κατάσταση, τα αποτελέσματά μας παραμένουν ποιοτικά αναλλοίωτα για συστήματα με παρόμοιο μαγνητικό πεδίο Berry.

Η αφητηρία μας για την ανάδειξη του Γιγαντιαίου Φαινομένου Nernst, είναι οι γενικές εκφράσεις της θερμικής ισχύος S και του σήματος Nernst N τα οποία δίνονται από τις σχέσεις

$$N \equiv \frac{E_y}{-\partial_x T} = \frac{\sigma_{xx}\alpha_{xy} - \alpha_{xx}\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2}, \quad (8.5)$$

$$S \equiv \frac{E_x}{\partial_x T} = \frac{\alpha_{xx}\sigma_{yy} + \alpha_{xy}\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}\sigma_{yy} + \sigma_{xy}^2}. \quad (8.6)$$

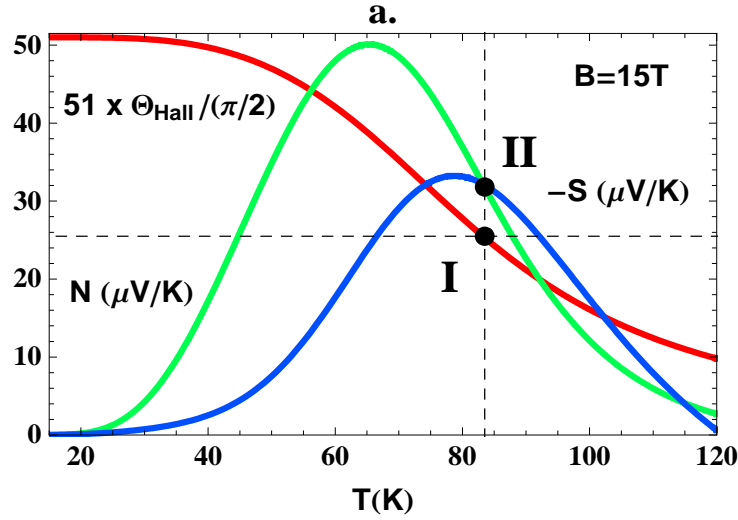
Λόγω του ισχυρά μονωτικού χαρακτήρα που θεωρούμε για την συγκεκριμένη κατάσταση, αναμένεται να έχουμε μία μεγάλη σταθερή τιμή της τοπολογικής αγωγιμότητας Hall, τουλάχιστον μέσα σε μία εκτεταμένη θερμοκρασιακή περιοχή. Την ίδια στιγμή και στο ίδιο διάστημα θερμοκρασιών, λόγω του ενεργειακού χάσματος, οι διαμήκεις αγωγιμότητες αυξάνονται πολύ αργά με μία εκθετική θερμοκρασιακή εξάρτηση. Συνεπώς, η γωνία Hall $\tan \Theta_H \equiv \sigma_{xy}/\sigma_{xx}$, λαμβάνει μεγάλες τιμές. Η θερμική ισχύς και το σήμα Nernst δίνονται με καλή προσέγγιση από τις σχέσεις

$$S \simeq \alpha_{xy}/\sigma_{xy}, \quad N \simeq -\alpha_{xx}/\sigma_{xy}. \quad (8.7)$$

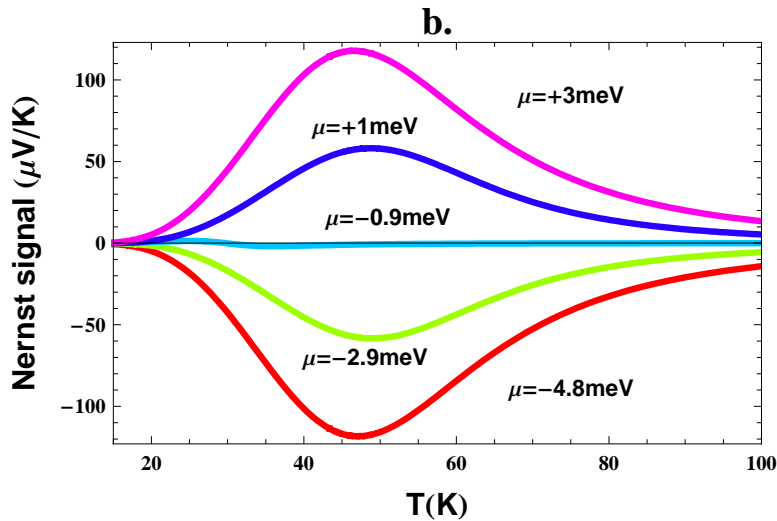
Κατά συνέπεια, και τα δύο θερμοηλεκτρικά μεγέθη αυξάνονται εκθετικά με τη θερμοκρασία, ακολουθώντας την συμπεριφορά των θερμοηλεκτρικών αγωγιμοτήτων α_{xx}, α_{xy} που σχετίζονται και οι δύο με θερμικά διεγερμένες μονοσωματιδιακές διεγέρσεις. Λόγω αυτού του εκθετικού χαρακτήρα, δημιουργείται το αριστερό κομμάτι του λόφου (hill) Nernst που φαίνεται στο σχήμα 8.2(a). Αυξάνοντας τη θερμοκρασία, περνάμε από την περιοχή μεγάλης γωνίας Hall, σε μία περιοχή όπου λόγω πλέον του μεγάλου αριθμού των θερμικά διεγερμένων μονοσωματιδιακών διεγέρσεων, οι διαμήκεις αγωγιμότητες είναι κυρίαρχες. Σε αυτήν την περιοχή, η τοπολογική αγωγιμότητα Hall μειώνεται δραματικά, επιτρέποντας την κυριαρχία της αποσβενόμενης μεταφοράς ηλεκτρικού φορτίου. Ως αποτέλεσμα, η θερμική ισχύς και το σήμα Nernst μπορούν να προσεγγιστούν στην συγκεκριμένη περίπτωση με τις εκφράσεις

$$S = \alpha_{xx}/\sigma_{xx}, \quad N = \alpha_{xy}/\sigma_{xx}. \quad (8.8)$$

Στην πορεία, από την περιοχή της υψηλής τιμής της γωνίας Hall προς την περιοχή της πολύ χαμηλής, το σύστημα αναπόφευκτα περνά από το σημείο $\sigma_{xy} = \sigma_{xx}$. Αυτό το σημείο θα το ονομάσουμε



Σχήμα 8.1: a. Σε χαμηλές θερμοκρασίες, το σήμα Nernst και η θερμική ισχύς, αυξάνονται αργά με την θερμοκρασία ακολουθώντας ένα εκθετικό νόμο. Στο **Κρίσιμο Θερμοηλεκτρικό Σημείο (I)** όπου $\sigma_{xx} = \sigma_{xy}$, το σήμα Nernst γίνεται ίσο με τη θερμική ισχύ (II) ενώ τα πρόσημα τους μπορεί να είναι ίδια ή αντίθετα. Σε αυτή μεταβατική περιοχή η συνήθως μεγάλη τιμή της θερμικής ισχύος επισφραγίζει ότι και το σήμα Nernst θα λάβει μεγάλες τιμές, αφού στο κρίσιμο σημείο αυτά τα δύο θερμοηλεκτρικά μεγέθη θα εξισωθούν. Ακριβώς μετά το θερμοηλεκτρικό σημείο, ισχύει $\sigma_{xx} \gg \sigma_{xy}$, αναγκάζοντας το σήμα Nernst να μειωθεί δραματικά δημιουργώντας το ιδιαίτερο θερμοκρασιακό προφίλ του σήματος Nernst, το οποίο παρατηρείται σε πολλούς υπεραγωγούς των χαλκοξειδίων.



Σχήμα 8.2: b. Εξάρτηση του σήματος Nernst από το χημικό δυναμικό. Η μεταβολή του χημικού δυναμικού αναστρέφει το πρόσημο του σήματος Nernst. Το σήμα Nernst είναι συμμετρικό γύρω από μία σταθερή τιμή χημικού συναμικού $\mu \simeq -0.9\text{meV}$, η οποία χρειάζεται για να αντισταθμιστεί ο όρος της τροχιακής αλληλεπίδρασης με το μαγνητικό πεδίο $-m_z \mathcal{B}_z$ ($\mathcal{B}_z = 5\text{T}$). Εάν δεν υπήρχε ο συγκεκριμένος όρος, το σήμα Nernst θα ήταν ευθέως ανάλογο του χημικού δυναμικού. P. Kotetes and G. Varelogiannis, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106404 (2010) [187].

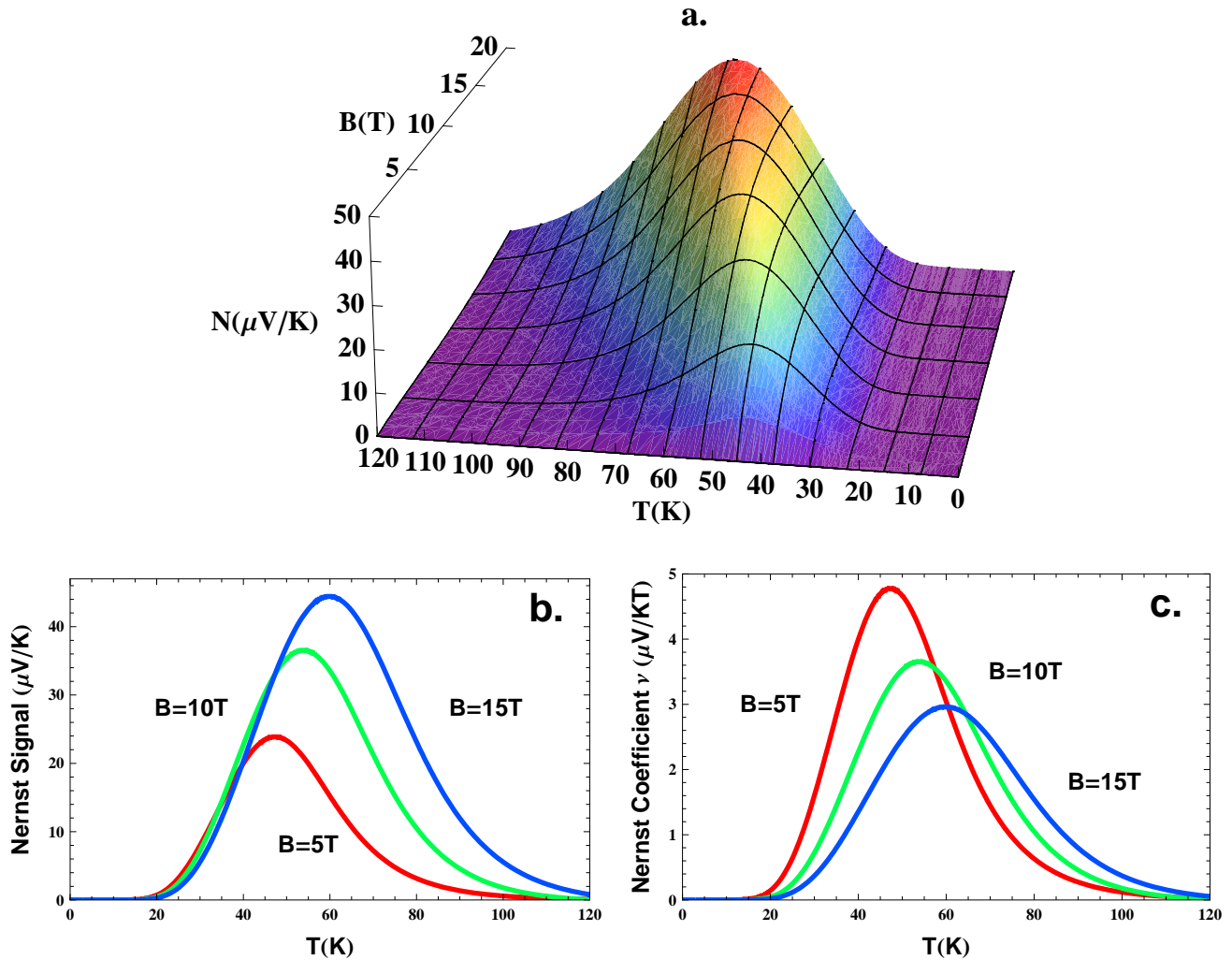
Κρίσιμο Θερμοηλεκτρικό Σημείο. Σε αυτό το σημείο, υπάρχουν τρεις δυνατές επιλογές, που εξαρτώνται από το λόγο των θερμοηλεκτρικών αγωγιμοτήτων. Όταν $\alpha_{xy} \gg \alpha_{xx}$ ($\alpha_{xy} \ll \alpha_{xx}$) η θερμική ισχύς και το σήμα Nernst έχουν το ίδιο (αντίθετο) πρόσημο ενώ οι τιμές τους είναι ίσες με $|\alpha_{xy}/2\sigma_{xx}|$ ($|\alpha_{xx}/2\sigma_{xx}|$). (Σημείο II στο Σχ.8.2(a). Λαμβάνοντας υπόψη ότι οι παράμετροι τάξης της Χειρικής Τοπολογικής κατάστασης αυξάνονται με την εφαρμογή του μαγνητικού πεδίου και κατά συνέπεια η τοπολογική αγωγιμότητα Hall παραμένει σχεδόν σταθερή, αντιλαμβανόμαστε ότι η συμπεριφορά των δύο θερμοηλεκτρικών μεγεθών καθορίζεται κυρίως από τις θερμοηλεκτρικές αγωγιμότητες. Τέλος, στην περίπτωση όπου $\alpha_{xy} \simeq \alpha_{xx}$, το σήμα Nernst γίνεται πάρα πολύ μικρό.

Στις δύο πρώτες περιπτώσεις, η παρουσία ενός μεγάλου αριθμού μονοσωματιδιακών διεγέρσεων ενισχύει σημαντικά τα αρχικά εκθετικά αυξανόμενα α_{xx} και α_{xy} , ανοίγοντας το κανάλι για το Γιγαντιαίο σήμα Nernst. *Εκ των πραγμάτων το βασικό στοιχείο που οδηγεί στην ισχυρή θερμοηλεκτρική συμπεριφορά είναι η ύπαρξη του Κρίσιμου Θερμοηλεκτρικού Σημείου όπου το σήμα Nernst γίνεται ίσο με τη θερμική ισχύ.* Κατ' αυτόν τον τρόπο η συνήθως μεγάλη τιμή της θερμικής ισχύος, συμπαρασύρει και την τιμή του σήματος Nernst σε υψηλές τιμές. Παρ' όλ' αυτά, μετά από αυτό το κρίσιμο σημείο, η τοπολογική σταθερότητα της κατάστασης αρχίζει να υποβαθμίζεται έχοντας αντίκτυπο τόσο στην τιμή της ηλεκτρικής αγωγιμότητας Hall και φυσικά στην τιμή του σήματος Nernst. Για αυτό το λόγο το σήμα Nernst μειώνεται ξανά δίνοντας ως αποτέλεσμα το δεξί τμήμα του λόφου Nernst.

Πέρα από αυτήν την ιδιαίτερη θερμοκρασιακή εξάρτηση, το Ανώμαλο σήμα Nernst που περιγράφουμε σε αυτήν τη διατριβή, παρουσιάζει και μία ιδιαίτερη εξάρτηση από το χημικό δυναμικό και άρα από τη νόθευση του υλικού. Στο Σχ. 8.3(b) παρατηρούμε ότι **μέσω της μεταβολής του χημικού δυναμικού μπορούμε ελεγχόμενα να μεταβάλλουμε το πρόσημο του σήματος Nernst.** Η αναστροφή του προσήμου είναι μία άμεση συνέπεια της γραμμικής εξάρτησης από το χημικό δυναμικό των θερμοηλεκτρικών αγωγιμοτήτων α_{xx} και α_{xy} .

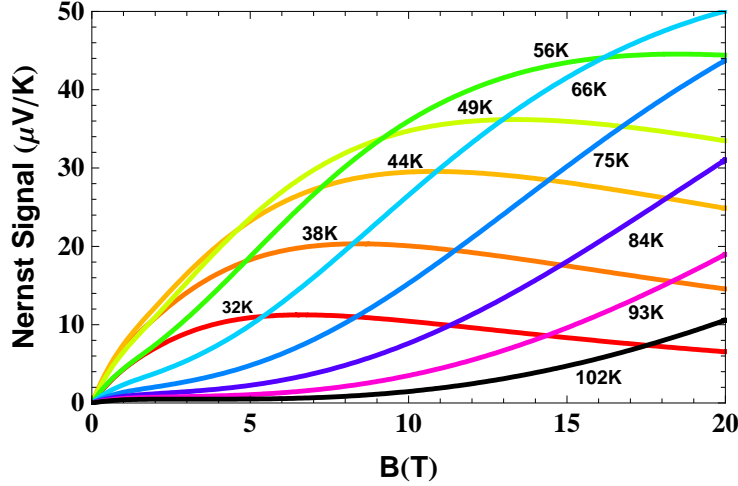
Η εξάρτηση του θερμοκρασιακού προφίλ του σήματος Nernst από το μαγνητικό πεδίο παρουσιάζεται στο Σχ.8.3(a). Η τιμή του σήματος Nernst λαμβάνει ιδιαίτερα υψηλές τιμές της τάξης των $50\mu V/K$ στο όριο των υψηλών μαγνητικών πεδίων. Στο Σχ.8.3(b), παρατηρούμε ότι το μαγνητικό πεδίο, πέρα από την αύξηση του σήματος Nernst που επιφέρει, μετατοπίζει ταυτόχρονα και τη θερμοκρασία της κορυφής του σήματος Nernst σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες. Αντίθετα όπως παρατηρούμε στο Σχ.8.3(c), ο συντελεστής Nernst, που ορίζεται ως $\nu = N/B_z$ μειώνεται με την αύξηση του μαγνητικού πεδίου, κάτι που είναι σε συμφωνία με τα πειραματικά ευρήματα στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των χαλκοξειδίων.

Σχετικά με την εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο, μπορούμε να παρατηρήσουμε στο Σχ.8.4, ότι υπάρχουν κοινά χαρακτηριστικά με πειραματικά δεδομένα για τα υπονοθευμένα $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) και $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ (Bi2212) με επίπεδο νόθευσης οπών $x = 0.07$ και $x \sim 0.09$ αντίστοιχα Σχ.1.12. Η θερμοκρασιακή κλίμακα που παρουσιάζουμε στην παρούσα μελέτη ταιριάζει με αυτήν που παρατηρείται στο Bi2212. Επιπλέον, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι η τιμή του σήματος Nernst που λαμβάνουμε από τους υπολογισμούς, είναι μία τάξη μεγέθους μεγαλύτερη από την προκύπτουσα πειραματική τιμή. Η εξέλιξη με το μαγνητικό πεδίο που παρουσιάζουμε για $40\text{K} < T < 50\text{K}$, έχει κοινά χαρακτηριστικά με το ίδιο διάστημα για αυτό το υλικό. Επιπροσθέτως, υπάρχει ποιοτική συμφωνία στην περιοχή $T < 12\text{K}$ της περίπτωσης του LSCO και αυτής που παρουσιάζουμε για $T < 56\text{K}$. Σε αυτό το εύρος θερμοκρασιών, το σήμα Nernst είναι έντονα μη γραμμικό. Για $T > 56\text{K}$ το σήμα Nernst που λαμβάνουμε από τους υπολογισμούς μας, ξεκινά να μειώνεται παρουσιάζοντας αλλαγή στην κλίση της καμπύλης. Παρ' όλ' αυτά η προκύπτουσα εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο δεν ταιριάζει απόλυτα με την περισσότερο γραμμική συμπεριφορά που παρατηρείται πειραματικά. Αυτή η ασυμφωνία, μπορεί να αποδοθεί στο ότι δεν έχουμε λάβει υπόψη τις συνεισφορές των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων στις αγωγιμότητες σ_{xy}^B και α_{xy}^B , περιοριζόμενοι μόνο στις τοπολογικές συνεισφορές. Οι αγωγιμότητες Hall των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων



Σχήμα 8.3: a. Εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο του θερμοκρασιακού προφίλ του σήματος Nernst που προκύπτει από τη Χειρική κατάσταση Κύματος Πυκνότητας Φορτίου $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$. Το σήμα Nernst μπορεί να φτάσει σε πολύ υψηλές τιμές, της τάξης των $50\mu\text{V/K}$ για υψηλά μαγνητικά πεδία. b. Το μαγνητικό πεδίο ενισχύει το σήμα Nernst λόγω του ότι μετατοπίζει την κορυφή Nernst σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες. c. Αντίθετα ο συντελεστής Nernst $\nu \equiv N/B_z$ ελαττώνεται καθώς αυξάνεται το πεδίο. P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **104**, 106404 (2010) [187].

είναι ανάλογες με το μαγνητικό πεδίο, και εάν τις είχαμε συμπεριλάβει, είναι πιθανό να είχαν οδηγήσει σε μία εξάρτηση πιο κοντά στη γραμμική ειδικά για μεγάλα μαγνητικά πεδία. Τέλος, πρέπει να αναφέρουμε πως η θεώρηση ενός Γιγαντιαίου σήματος Nernst από Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου είναι εν γένει συμβατή με τις πρόσφατες πειραματικές παρατηρήσεις, που υποδεικνύουν ότι για κάποιους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας, είναι δυνατόν το ισχυρό σήμα Nernst να προέρχεται από μονοκατευθυντικά Κύματα Πυκνότητας φορτίου ή νηματικές καταστάσεις [233, 234, 235] δίχως την αναγκαία παρουσία υπεραγωγίων δινών.



Σχήμα 8.4: Εξάρτηση του σήματος Nernst από το μαγνητικό πεδίο για διάφορες θερμοκρασίες. Το σήμα Nernst παρουσιάζει μία έντονη μη-γραμμικότητα για $T < 56\text{K}$ η οποία είναι ποιοτικά παρόμοια με τα πειραματικά δεδομένα για το υπονοθευμένο $\text{La}_{1.93}\text{Sr}_{0.07}\text{CuO}_4$ για $T < 12\text{K}$. Η αλλαγή κλίσης μετά από μία κρίσιμη θερμοκρασία ($T = 56\text{K}$ εδώ), είναι συνεπής με τα πειραματικά ευρήματα. P. Kotetes and G. Varelogiannis, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106404 (2010) [187].

8.2 Τοπολογικό Φαινόμενο Meissner στα οξειδία του χαλκού

Πέρα όμως από το γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst, τα Χειρικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, παρουσιάζουν το Τοπολογικό Φαινόμενο Meissner [189], το οποίο ισοδυναμεί με τέλειο διαμαγνητισμό σε μαγνητικά πεδία εφαρμοζόμενα κατά τη διεύθυνση της Χειρικότητας, χωρίς όμως να υπάρχει αυθόρμητη παραβίαση της συμμετρίας $U(1)$ του ηλεκτρικού φορτίου όπως συμβαίνει σε έναν υπεραγωγό. Η δυνατότητα ενός φαινομένου Meissner από την συγκεκριμένη Χειρική κατάσταση, δείχνει ότι η πρότασή μας είναι εν γένει συμβατή με τα ισχυρά διαμαγνητικά σήματα που λαμβάνονται στην περιοχή του ψευδοχάσματος και ως τώρα αποδίδονται σε υπεραγωγίμες δίνες.

Για να δείξουμε το τοπολογικό φαινόμενο Meissner, ξεκινάμε από τη ενεργό δράση του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου που έχουμε δείξει σε προηγούμενη παράγραφο ότι περιγράφει αυτά τα υλικά, η οποία περιλαμβάνει τον κινητικό όρο και τη δράση Chern-Simons

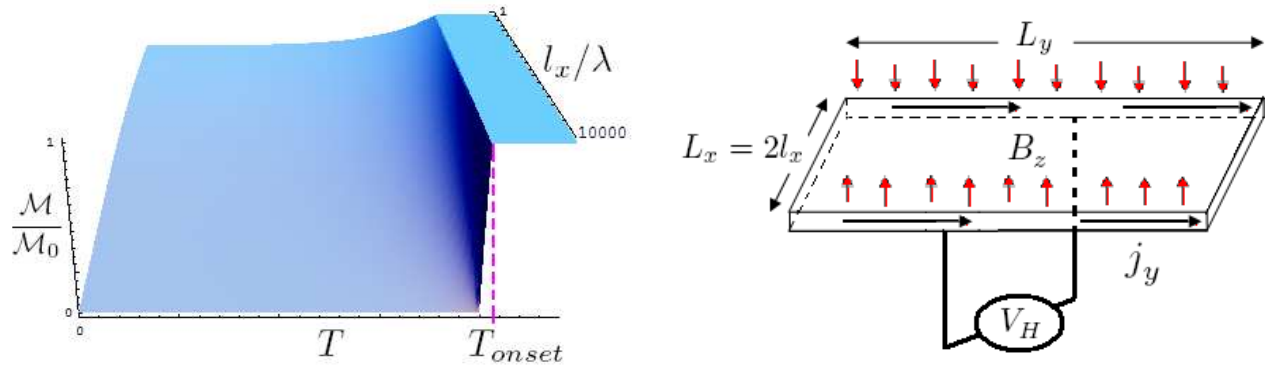
$$\mathcal{S}_{em} = \int d^3x \left(-\frac{d}{4} F^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - \frac{\sigma_{xy}}{4} \varepsilon_{\mu\nu\lambda} A^\mu F^{\nu\lambda} \right). \quad (8.9)$$

Θα θεωρήσουμε τώρα, μία συγκεκριμένη γεωμετρία για το υλικό μας, όπου $L_x = 2l_x, L_y \gg L_x$. Μάλιστα η τελευταία σχέση υποδηλώνει ότι υπάρχει αμελητέα εξάρτηση από την y -συντεταγμένη. Με αυτήν την θεώρηση καταλήγουμε στις εξισώσεις

$$\varepsilon \frac{\partial \mathcal{E}_x}{\partial x} + \frac{\sigma_{xy}}{d} \mathcal{B}_z = 0, \quad \frac{1}{\mu} \frac{\partial \mathcal{B}_z}{\partial x} + \frac{\sigma_{xy}}{d} \mathcal{E}_x = 0, \quad (8.10)$$

όπου έχουμε εισαγάγει το πάχος του υλικού d , την διηλεκτρική σταθερά ε και τη μαγνητική διαπερατότητα μ του υλικού. Είναι εύκολο να δούμε ότι ισχύει

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{1}{\lambda^2} \right) \mathcal{B}_z = 0, \quad (8.11)$$



Σχήμα 8.5: Ανηγμένη μαγνήτιση M/M_0 συναρτήσει της θερμοκρασίας T για διάφορες τιμές του λόγου l_x/λ . Για θερμοκρασίες μικρότερες $T < T_{onset}$ το σύστημα βρίσκεται στην Χειρική κατάσταση. Στα πλαίσια της θεωρίας BCS, οι καμπύλες ταυτίζονται με αυτές της υπεραγωγίμης περίπτωσης. b. Αντίστροφο Φαινόμενο Hall ως μέθοδος ανίχνευσης του χειρικού κύματος πυκνότητας φορτίου. Συμμετρικά ρεύματα διαρρέουν το υλικό κατά τη διεύθυνση y , σχηματίζοντας μία κατανομή μαγνητικού πεδίου $B_z(\pm l_x) = \pm B_0$, οδηγώντας σε μία αυθόρμητη τάση Hall, V_H . P. Kotetes and G. Varelogiannis, *Phys. Rev. B* **78**, 220509(R) (2008) [189].

η οποία αποτελεί την εξίσωση του φαινομένου Τοπολογικού Meissner. Το μήκος διείσδυσης μηδενικής θερμοκρασίας ορίζεται ως $\lambda = \sqrt{\mu/\epsilon} \frac{d}{|\sigma_{xy}|}$. Λύνουμε τώρα τις εξισώσεις με οριακές συνθήκες $B_z(\pm l_x) = B_0$. Εύκολα, ολοκληρώνοντας τη διαφορική εξίσωση λαμβάνουμε $B_z(x) = B_0[\cosh(x/\lambda)]/\cosh(l_x/\lambda)$. Εάν ολοκληρώσουμε τώρα το μαγνητικό πεδίο σε όλο το δείγμα του υλικού, προκύπτει η μαγνήτιση $M = M_0[\tanh(l_x/\lambda)]/(l_x/\lambda)$, όπου εισαγάγαμε τη μαγνήτιση σε μηδενική θερμοκρασία $M_0 = B_0 L_x L_y$, που αντιστοιχεί στην περίπτωση της πλήρους διείσδυσης του μαγνητικού πεδίου.

Σε πεπερασμένες θερμοκρασίες μπορούμε να θεωρήσουμε ότι μήκος διείσδυσης έχει την εξάρτηση BCS, $[\lambda/\lambda(T)]^2 = 1 - (T/T_{onset})^4$. Με αυτήν την απλή θεώρηση προκύπτουν οι καμπύλες του σχήματος Σχ.8.5(a) οι οποίες ταυτίζονται με την υπεραγωγίμη διαμαγνητική συμπεριφορά σε αυτό το όριο. Φυσικά η απλή αυτή προσέγγιση δεν μπορεί να δώσει αποτελέσματα που να μπορούν συγκριθούν με τα πειραματικά δεδομένα, και για αυτό το λόγο θα παραμείνουμε απλώς στο να τονίσουμε τη δυνατότητα έντονου διαμαγνητισμού από αυτήν την κατάσταση.

Μία άμεση πειραματική επιβεβαίωση της παρουσίας ενός χειρικού κύματος πυκνότητας φορτίου σε αυτά τα υλικά αποτελεί το αντίστροφο φαινόμενο Hall [189]. Για την παρατήρηση αυτού του φαινομένου, εφαρμόζεται ένα μαγνητικό πεδίο στο υλικό και εμφανίζεται μία διαφορά δυναμικού τύπου Hall, ως αποτέλεσμα της εγγενούς χειρικότητας. Η διάταξη για αυτό το πείραμα φαίνεται στο Σχ.8.5(b). Λύνουμε λοιπόν τις εξισώσεις κίνησης (8.10) με συνοριακές συνθήκες $E_x(\pm l_x) = 0$ και $B_z(\pm l_x) = \pm B_0$, όπως γίνεται και στην αναφορά [236]. Η αυθόρμητη προκύπτουσα τάση Hall δίνεται από τη σχέση $V_H = v B_0 L_x [\coth(l_x/\lambda) - \lambda/l_x]$, όπου $v = 1/\sqrt{\mu\epsilon}$ είναι η ταχύτητα του φωτός στο υλικό. Εάν $l_x \gg \lambda$, τότε $V_H = v B_0 L_x$, που υποδηλώνει ότι το εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο, μετατρέπεται εξολοκλήρου σε ένα ηλεκτρικό πεδίο.

8.3 Μη συμβατικός υπεραγωγός URu₂Si₂

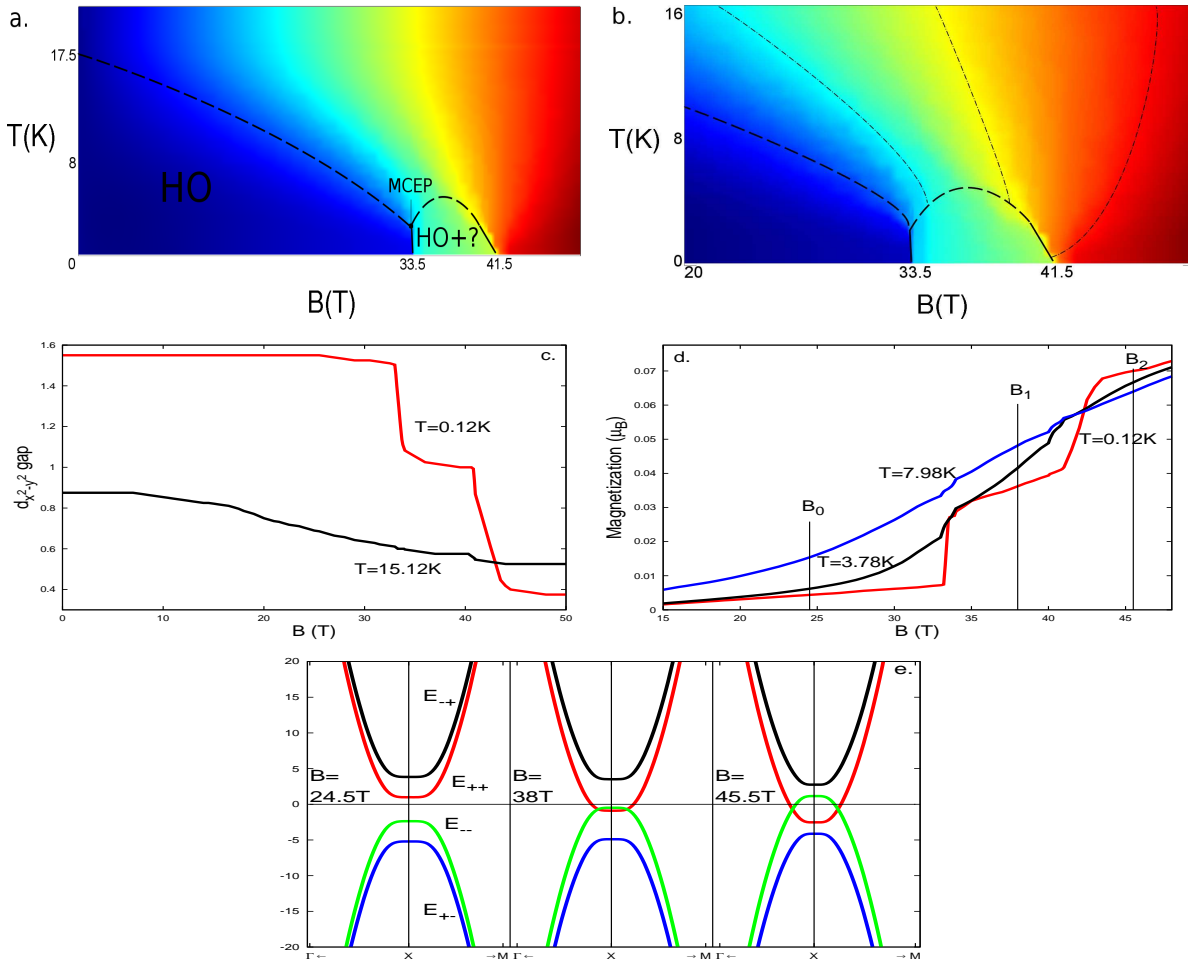
Σε αυτή τη μελέτη προτείνουμε ότι η κρυμμένη κατάσταση που ενεδρεύει στο μη υπεραγωγίμο τμήμα του διαγράμματος φάσης $B_z - T$ του URu₂Si₂ είναι ένα Χειρικό $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$ κύμα πυκνότητας σπιν

με κυματόνισμα. Όσον αφορά το κυματόνισμα αυτού του κύματος πυκνότητας, στα πλαίσια του απλού μοντέλου που θα χρησιμοποιήσουμε θεωρούμε ότι είναι το $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Για να περιγράψουμε πιο ρεαλιστικά το εν λόγω υλικό, οφείλουμε να χρησιμοποιήσουμε ένα μοντέλο τουλάχιστον τεσσάρων ενεργειακών ζωνών το οποίο είναι αρκετά πολύπλοκο. Παρ'ολ' αυτά λόγω του ότι πρόκειται να μελετήσουμε μία τοπολογική κατάσταση, γνωρίζουμε εκ των προτέρων ότι τα αποτελέσματα μας θα ισχύουν σε ένα γενικότερο πλαίσιο. Για ευκολία θα θεωρήσουμε ένα υπομοντέλο του εκτεταμένου μοντέλου Hubbard που παρουσιάσαμε σε προηγούμενο κεφάλαιο, κρατώντας μόνο τις ακόλουθες αλληλεπιδράσεις $\sum_{i \neq j} V_{ij} n_i n_j$. Επιπλέον, θεωρούμε ότι η παράμετρος τάξης είναι μαγνητική και πολωμένη κατά τον άξονα $c \equiv z$ και έχει την εξάρτηση $M_{\mathbf{Q}}^z(\mathbf{k}) = M_{\mathbf{Q},6} \sin k_x \sin k_y - i M_{\mathbf{Q},2} (\cos k_x - \cos k_y)$. Η δεύτερη κατάσταση ανήκει στο γενικότερο πλαίσιο τροχιακών καταστάσεων που προτάθηκαν παλαιότερα για αυτό το υλικό [138, 139, 140, 141]. Όπως ήδη έχουμε δείξει, η επιπρόσθετη παράμετρος τάξης d_{xy} οδηγεί στο σχηματισμό ενός Χειρικού κύματος πυκνότητας σπιν, με συνακόλουθο αποτέλεσμα πεπερασμένη τροχιακή μαγνητική ροπή. Στα πλαίσια της Θεωρίας Μέσου Πεδίου θα αναπαράγουμε αυτοσυνεπώς το πειραματικά καταγεγραμμένο $\mathcal{B}_z - T$ διάγραμμα της 'κανονικής κατάστασης'. Επιπλέον, θα απαντήσουμε με έναν ενοποιημένο τρόπο σε ζητήματα υψίστης σημασίας που χαρακτηρίζουν τη συγκεκριμένη φάση, όπως είναι ο μεταμαγνητισμός [125, 126] και το γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst [169, 170]. Πέρα από αυτά θα προτείνουμε ένα πείραμα Πολωμένου φαινομένου Kerr το οποίο μπορεί να ανιχνεύσει την ύπαρξη Χειρικότητας. Πρέπει να αναφέρουμε ότι η ύπαρξη Χειρικότητας στην κανονική κατάσταση συνάδει με την προτεινόμενη υπεραγωγίμη χειρική κατάσταση που πιστεύεται ότι ελλοχεύει σε αυτό το υλικό [122].

Η προτεινόμενη Χειρική κατάσταση αποτελεί μία αναγκαία εξέλιξη των παλαιότερων μοντέλων που αφορούσαν τροχιακές καταστάσεις τύπου $d_{x^2-y^2}$. Κι αυτό γιατί όπως έχουμε ήδη δείξει σε προηγούμενο κεφάλαιο, μία τροχιακή κατάσταση, είναι επιδεκτική στη μετάβαση της σε μία χειρική κατά την εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου [185, 186]. Έτσι λοιπόν εάν μία χειρική κατάσταση είναι μηδενική απουσία πεδίου, θα μπορεί να επαχθεί από το πεδίο και φυσικά να επηρεάσει όλες τις ιδιότητες του υλικού σε όλο το τμήμα του διαγράμματος φάσης $\mathcal{B}_z - T$ όπως και κάθε μέτρηση σήματος Nernst. Από μία άλλη σκοπιά θα μπορούσαμε να πούμε ότι το μαγνητικό πεδίο επανακανονικοποιεί την αρχική τροχιακή κατάσταση και κατά αυτόν τον τρόπο η πρότασή μας είναι ασφαλώς συμβατή με παλαιότερα θεωρητικά μοντέλα [138, 139, 140, 141]. Παρ'ολ' αυτά η μακροσκοπική παραβίαση της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου διαφοροποιεί ριζικά την πρότασή μας από τις προηγούμενες. Όπως έχουμε ήδη παρουσιάσει, η Χειρική κατάσταση χαρακτηρίζεται από την Τοπολογική μεταφορά φορτίου [190], σπιν [191] και θερμότητας [188, 237] που ήδη έχουμε μελετήσει, όπως βέβαια και το γιγαντιαίο φαινόμενο Nernst [187].

Το διάγραμμα φάσης $\mathcal{B}_z - T$ που λαμβάνουμε από τους υπολογισμούς μας $\mathcal{B}_z - T$ παρουσιάζεται στο Σχ.8.6(a,b). Παρατηρούμε ότι διάγραμμα φάσης που υπολογίσαμε απεικονίζει με μεγάλη πιστότητα, ποιοτικά και ποσοτικά χαρακτηριστικά του αντίστοιχου πειραματικού [125, 126]. Για $\mathcal{B}_z = 0\text{T}$, $M_{\mathbf{Q},6} = 0$ και $M_{\mathbf{Q},2} = 1.55\text{meV}$. Η δεύτερη παράμετρος τάξης αντιστοιχεί στην αναπαράσταση $id_{x^2-y^2}^z$ που όπως παρουσιάζουμε στο διάγραμμα 8.6c, μειώνεται ελαφρά καθώς αυξάνουμε το μαγνητικό πεδίο για μικρές θερμοκρασίες. Αντίθετα, η επαγόμενη παράμετρος τάξης d_{xy}^z , αυξάνεται μονοτονικά. Εντοπίζουμε ένα Μεταμαγνητικό Κρίσιμο Σημείο (Metamagnetic Critical End Point) [238] σε πεδίο $\mathcal{B}_{c1} = 33.5\text{T}$ και $T \simeq 3\text{K}$, μέχρι το οποίο η κυρίαρχη παράμετρος τάξης $id_{x^2-y^2}^z$, μεταβάλλεται συνεχώς με σύμφωνα με την έκφραση $M_{\mathbf{Q},2}(\mathcal{B}_z)/M_{\mathbf{Q},2}(0) \simeq 1 - (\mathcal{B}_z/\mathcal{B}_{c1})^2$. Αυτή η συμπεριφορά έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά από πειράματα μαγνητοαντίστασης [239]. Ακριβώς το αντίθετο συμβαίνει με την συγκεκριμένη παράμετρο τάξης για θερμοκρασίες κατω από το συγκεκριμένο Κρίσιμο Μεταμαγνητικό Σημείο όπου παραμένει πρακτικά σταθερή. Μία συνεχής μεταβολή δεν θα ήταν συνεπής με τον χαρακτήρα πρώτης τάξης της προκύπτουσας μεταμαγνητικής μετάβασης.

Το αυτοσυνεπές διάγραμμα που εξάγαμε, παρουσιάζει μεταμαγνητισμό δύο σκαλοπατιών Σχ.8.6(d) στα πεδία $\mathcal{B}_{c1} = 33.5\text{T}$ και $\mathcal{B}_{c2} \simeq 41\text{T}$, κάτω από τα 3K σε συμφωνία με τα πειράματα [125, 126]. Πρέπει



Σχήμα 8.6: a. Αυτοσυνεπώς υπολογισμένο διάγραμμα φάσης $B_z - T$ του Χειρικού κύματος πυκνότητας σπιν. Η Χειρική κατάσταση είναι παντού στο παραπάνω διάγραμμα φάσης. Οι ελλειπωμένες τιμές των παραμέτρων τάξης στην περιοχή των υψηλών θερμοκρασιών και πεδίων οδηγεί στην απόκρυψή της, αφού σχηματίζει ένα θερμοδυναμικό σύνορο φάσης (διακεκομμένες γραμμές). b. Ένα Μεταμαγνητικό Κρίσιμο Σημείο (Metamagnetic Critical End Point) βρίσκεται σε θερμοκρασία $T \simeq 3\text{K}$ και πεδίο $B_z = B_{c1} = 33.5\text{T}$. Τα δύο μεταμαγνητικά σκαλοπάτια εμφανίζονται για πεδία $B_{c1} = 33.5\text{T}$ και $B_{c2} \simeq 41\text{T}$ παράλληλα με τη δημιουργία μεταβατικών περιοχών (που χωρίζονται από διακεκομμένες γραμμές), σε άψογη συμφωνία με τις πειραματικές μετρήσεις [125, 126]. Για $B_{c1} < B < B_{c2}$, η Χειρική κατάσταση μπορεί να συνυπάρχει με άλλες μαγνητικά επαγόμενες καταστάσεις. c. Για $T < 3\text{K}$, η παράμετρος τάξης $d_{x^2-y^2}$ είναι πρακτικά σταθερή μέχρι το πεδίο $B = B_{c1}$, όπου μεταβάλλεται απότομα. Πάνω από το Μεταμαγνητικό Κρίσιμο Σημείο, το χάσμα εξελίσσεται ομαλά με το μαγνητικό πεδίο, εξηγώντας την εξάρτηση που έχει εξαχθεί από πειραματικές μετρήσεις [239]. Ο κορεσμός που παρατηρείται σε υψηλά πεδία δεν οδηγεί σε κάποια θερμοδυναμική ανωμαλία, καθιστώντας την Χειρική κατάσταση μη ανιχνεύσιμη. d. Τα μεταμαγνητικά σκαλοπάτια συνοδεύονται από απότομη αύξηση της μαγνήτισης. Σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες, ο πρώτης τάξης χαρακτήρας των μεταμαγνητικών μεταβάσεων γίνεται πιο ήπιος και ομαλός. e. Η σειρά από μεταμαγνητικές μεταβάσεις εμφανίζεται λόγω των επιπρόσθετων ενεργειακών ζωνών που διασταυρώνονται με το επίπεδο Fermi, σε καθένα από τα δύο κρίσιμα πεδία B_c [209]. Η αναδιοργάνωση της επιφάνειας Fermi αυξάνει απότομα τις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος και κατά συνέπεια τη μαγνήτιση. P. Kotetes, A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1002.2719.

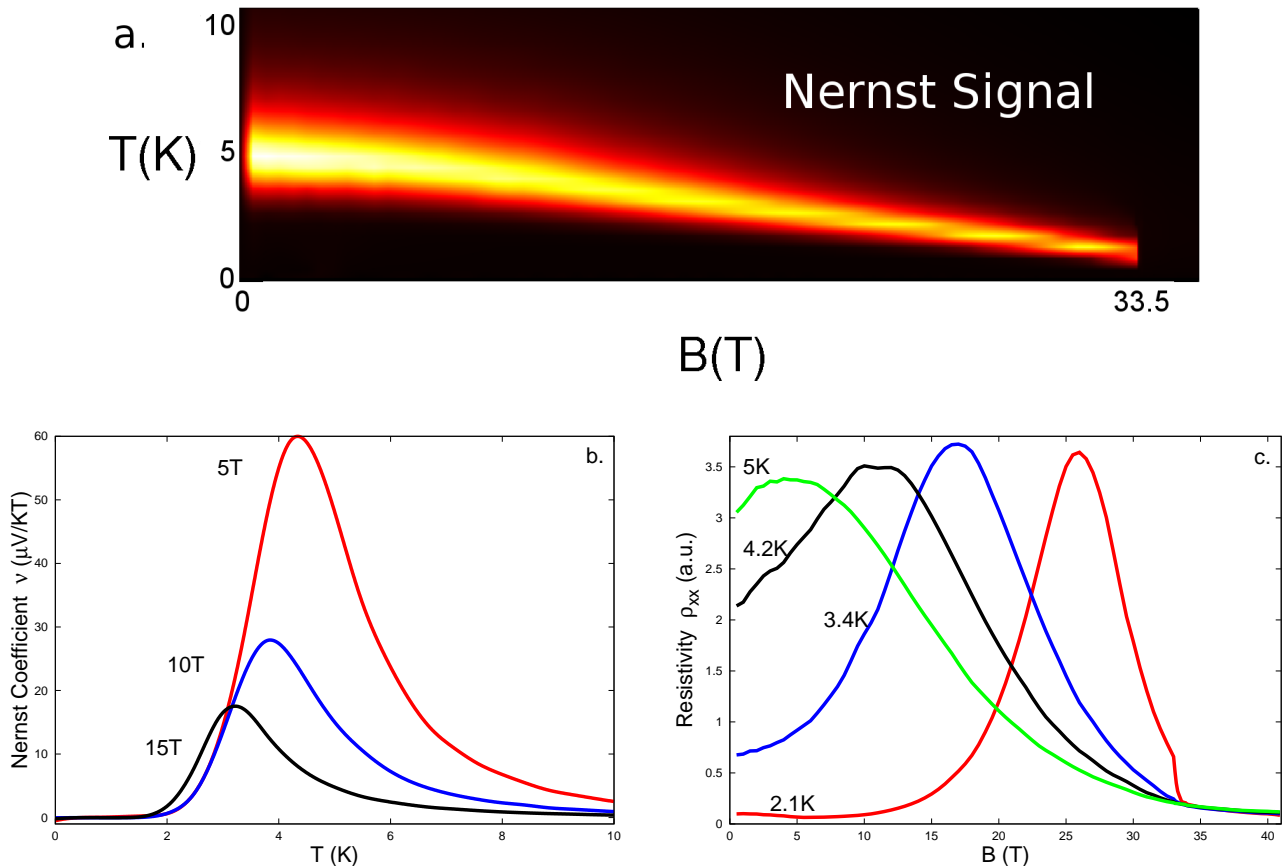
να παρατηρήσουμε ότι η εκδήλωση μεταμαγνητισμού σε τέτοια υψηλή κλίμακα πεδίων, οφείλεται στην επαγωγή της συνιστώσας d_{xy} , που οδηγεί σε αύξηση της κρίσιμης θερμοκρασίας της κυρίαρχης $d_{x^2-y^2}$ παραμέτρου τάξης. Η βαθμιαία αύξηση του πεδίου, μετατοπίζει τις τέσσερις ενεργειακές ζώνες των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων μέσω της αλληλεπίδρασης με το πεδίο. Σε κάθε κρίσιμο μαγνητικό πεδίο \mathcal{B}_c , μία επιπρόσθετη ενεργειακή ζώνη περνά το επίπεδο Fermi Σχ.8.6(e), ενισχύοντας την ήδη υπάρχουσα επιφάνεια Fermi και οδηγώντας με αυτόν τον τρόπο σε μία απότομη μεταβολή της μαγνήτισης [209]. Σε υψηλότερες θερμοκρασίες, ο πρώτης τάξης χαρακτήρας των μεταμαγνητικών μεταβάσεων, έχοντας ως αποτέλεσμα μία πιο ήπια αύξηση της μαγνήτισης σε αυτήν την περιοχή.

Οι προφανείς ομοιότητες του διαγράμματος που παρουσιάζουμε σε σύγκριση με το πειραματικό [125, 126], συνοδεύονται από σημαντικές συνέπειες που προέρχονται από την πεπερασμένη χειρικότητα της υπό μελέτη κατάστασης. Πρώτα από όλα η χειρική κατάσταση βρίσκεται παντού σε αυτό το διάγραμμα λόγω της ενισχυμένης κρίσιμης θερμοκρασίας που τη χαρακτηρίζει αφού είναι μία επαγόμενη κατάσταση από το μαγνητικό πεδίο. Για την περιοχή μαγνητικού πεδίου $\mathcal{B}_{c1} < \mathcal{B}_z < \mathcal{B}_{c2}$, και οι δύο παράμετροι τάξης της χειρικής κατάστασης υφίστανται δραματική μείωση. Κατά συνέπεια, παρόλο που η χειρική κατάσταση είναι παρούσα σε αυτήν την περιοχή, είναι καλά κρυμμένη λόγω της απώλειας της τοπολογικής της σταθερότητας. Κατ' αυτόν τον τρόπο η χειρική κατάσταση συνεχίζει να υπάρχει $\mathcal{B}_z \geq \mathcal{B}_{c2}$, συμπεριφερόμενη ως ένα πολωμένο παραμαγνητικό μέταλλο.

Παρόλη τη συνεχή παρουσία της τοπολογικής κατάστασης, η ύπαρξη του Μεταμαγνητικού Κρίσιμου Σημείου μπορεί να οδηγήσει στο σχηματισμό νέων καταστάσεων στο κρίσιμο πεδίο \mathcal{B}_{c1} , οι οποίες κάλλιστα μπορούν να συνυπάρχουν με τη χειρική κατάσταση, και να αποτελέσουν τις καταστάσεις *III, V* όπως ονομάζονται στην αναφορά [126]. Έχειδειχθεί ότι κάτω από γενικές συνθήκες, ένα μαγνητικό πεδίο Zeeman μπορεί να επάγει μία κατάσταση κύματος πυκνότητας σπιν από ένα κύμα πυκνότητας φορτίου και το αντίστροφο [209, 208]. Ακριβώς το ίδιο αποτέλεσμα εξάγαμε και εμείς σε προηγούμενο κεφάλαιο. Έτσι λοιπόν, το μαγνητικό πεδίο επιτρέπει το σχηματισμό ενός αριθμού καταστάσεων [201] όπως το χειρικό κύμα πυκνότητας φορτίου $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ [185, 187, 189, 192, 237] που έχουμε ήδη μελετήσει με αφορμή οξειδία του χαλκού σε προηγούμενη παράγραφο ή τις μαγνητικές και μη, καταστάσεις Pomeranchuk [144, 240, 241, 242, 243].

Πέρα από το διάγραμμα φάσης, μελετήσαμε με λεπτομέρεια την θερμοηλεκτρική απόκριση του συστήματος. Σύμφωνα με τα πειραματικά αποτελέσματα, το συγκεκριμένο υλικό χαρακτηρίζεται από μία ανώμαλη θερμοηλεκτρική απόκριση ως τα 35T [169, 170], όπου η μη-ταυτοποιημένη παράμετρος τάξης θεωρείται ότι έχει καταστραφεί [170]. Το σήμα Nernst που προκύπτει από αυτήν την εξωτική κατάσταση, έχει θετικό σήμα Nernst και μια υψηλή τιμή της τάξης των μερικών $\mu V/K$, ενώ το θερμοκρασιακό προφίλ του, παρουσιάζει μία κορυφή περί τα 3-4K, που φτάνει την τιμή $30\mu V/K$ για $\mathcal{B} \simeq 12T$. Έως τώρα η γιγαντιαία απόκριση του σήματος Nernst είχε θεωρηθεί ως χαρακτηριστικό του ημιμεταλλικού χαρακτήρα αυτού του υλικού το οποίο απαρτίζεται από ίσο αριθμό οπών και ηλεκτρονίων [169, 170].

Λαμβάνοντας υπόψη τόσο την τοπολογική συνεισφορά όσο και αυτή των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων για τον υπολογισμό των ηλεκτρικών (σ_{xx}, σ_{xy}) και θερμοηλεκτρικών αγωγιμοτήτων (α_{xx}, α_{xy}), μπορούμε να δούμε ότι η χειρική κατάσταση που προτείνουμε μπορεί να ερμηνεύσει την ανώμαλη θερμοηλεκτρική συμπεριφορά Nernst. Χρησιμοποιώντας τις τιμές για τις παραμέτρους τάξης που υπολογίσαμε αυτοσυνεπώς, για να αναπαράγουμε το διάγραμμα φάσης του Σχ.8.6, λαμβάνουμε μία γιγαντιαία απόκριση Nernst η οποία έχει περίπου μία τάξη μεγαλύτερη από αυτήν που παρατηρείται στα πειράματα. Η προέλευση του ιδιαίτερου προφίλ του σήματος Nernst συνδέεται άρρηκτα με τη χειρικότητα της κατάστασης και την ύπαρξη ενός ανθεκτικού ενεργειακού χάσματος των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων. Όπως εξετάσαμε σε προηγούμενες παραγράφους και στην αναφορά [187], ο ισχυρά μονωτικός χαρακτήρας της κατάστασης αναγκάζει τη θερμική ισχύ και το σήμα Nernst να εξισωθούν στο Κρίσιμο Θερμοηλεκτρικό σημείο. Στη γειτονιά αυτού του σημείου οι συνήθως υψηλές τιμές της θερμικής ισχύος συνεπάγονται και



Σχήμα 8.7: a. $B_z - T$ εξάρτηση του αυτοσυνεπώς υπολογισμένου σήματος Nernst. Το προκύπτον σήμα Nernst, παρουσιάζει μία υψηλή θετική τιμή, μίας τάξης περίπου μεγαλύτερης από αυτή που παρατηρείται πειραματικά [169]. Η υψηλή τιμή της θερμοηλεκτρικής απόκρισης οφείλεται στον τοπολογικό χαρακτήρα της χειρικής κατάστασης [187]. Η καταστροφή του υψηλού σήματος Nernst στο κρίσιμο μαγνητικό πεδίο B_{c1} συμφωνεί με το πείραμα [170], παρόλο που σε αυτήν την περίπτωση, συνοδεύεται από σημαντική μείωση, παρά απουσία των παραμέτρων τάξης $d_{xy}, d_{x^2-y^2}$. b. Ο συντελεστής Nernst $\nu = N/B_z$ παρουσιάζει μία μη γραμμική θερμοκρασιακή εξάρτηση, με μία κορυφή στην περιοχή των 3 – 5K ακολουθώντας τις πειραματικές μετρήσεις [169]. c. Εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο της διαμήκουσ αγωγιμότητας για διάφορες θερμοκρασίες. Για $T < T_o$, η παρουσία μίας ανωμαλίας, που παρατηρείται και στα πειράματα [170], μπορεί εύκολα να κατανοηθεί από τη μαγνητική ενίσχυση της παραμέτρου τάξης d_{xy} . P. Kotetes, A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1002.2719 [193].

υψηλές τιμές για το σήμα Nernst. Παρ'ολ' αυτά η θερμοηλεκτρική στιβαρότητα και την ίδια στιγμή η τάση προς τη γιγαντιαία απόκριση Nernst χάνονται ακριβώς στο κρίσιμο μαγνητικό πεδίο B_{c1} . Η απότομη μείωση της παραμέτρου τάξης $d_{x^2-y^2}$ και η αναδιοργάνωση της επιφάνειας Fermi που υποβαθμίζουν την μονωτική ικανότητα της κατάστασης, οδηγούν σε πλήρη εξάλειψη του σήματος Nernst Σχ.8.7(a) σε πολύ καλή συμφωνία με τα πειράματα [169].

Επιπλέον ο συντελεστής Nernst παρουσιάζει μία κορυφή συναρτήσει της θερμοκρασίας, η οποία μειώνεται καθώς αυξάνουμε το μαγνητικό πεδίο ήδη από τα 10K (Σχ.8.7b). Πρέπει να σημειώσουμε ότι παρόλο που αυτή η κατάσταση είναι παρούσα για πεπερασμένα μαγνητικά πεδία ακόμα και σε θερμοκρασίες μεγαλύτερες από 17.5K, δεν οδηγεί σε μία σημαντική απόκριση Nernst και καθίσταται πειραματικά μη αντιληπτή. Έχουμε υπολογίσει ακόμη την αγωγιμότητα για πεπερασμένα πεδία και θερμοκρασίες. Παρατηρούμε στο Σχ.8.7c ότι η εξάρτηση της αγωγιμότητας από το μαγνητικό πεδίο

παρουσιάζει μία ανωμαλία με την αύξηση του μαγνητικού πεδίου. Αυτό είναι μία χαρακτηριστική ένδειξη της μαγνητικά επαγόμενης και ενισχυόμενης παραμέτρου τάξης d_{xy} που παρατηρείται και πειραματικά [170]. Η συγκεκριμένη ανωμαλία μεταφέρεται σε μικρότερα πεδία με την αύξηση της θερμοκρασίας λόγω του ότι η παράμετρος τάξης d_{xy} εξασθενεί.

8.4 Πρόβλεψη πολωμένου φαινομένου Kerr

Για να ανιχνευτεί η προτεινόμενη κατάσταση, προβλέπουμε ένα πεπερασμένο σήμα Kerr, που προέρχεται από την πεπερασμένη χειρικότητα και τη μακροσκοπική παραβίαση της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου [192]. Το φαινόμενο Kerr όπως και το φαινόμενο Faraday σχετίζονται με τη μεταβολή της διεύθυνσης μίας πολωμένης μονοχρωματικής δέσμης που πέφτει κάθετα στο επίπεδο ενός υλικού. Καθώς μία δέσμη προσπίπτει πάνω στο υλικό, οδηγεί σε μία ανακλώμενη και μία διαθλώμενη δέσμη. Εάν το υλικό είναι Χειρικό, όπως είναι η περίπτωση ενός σιδηρομαγνήτη, η διαθλώμενη και ανακλώμενη δέσμη θα έχουν διαφορετική διεύθυνση σε σχέση με την προσπίπτουσα δέσμη. Το φαινόμενο Kerr αφορά την εμφάνιση μεταβολής της διεύθυνσης της ανακλώμενης δέσμης σε σχέση με την προσπίπτουσα. Η γωνία που σχηματίζεται μεταξύ αυτών των δύο διευθύνσεων, ονομάζεται γωνία Kerr, ϑ_K . Η γωνία Kerr [192, 244, 245, 247] δίνεται από τη σχέση

$$\vartheta_K = \frac{4\pi}{n(n^2 - 1)d} \frac{\sigma_{xy}^{\mathfrak{S}}(\omega)}{\omega}, \quad (8.12)$$

όπου n είναι ο δείκτης διάθλασης, d το πάχος του διδιάστατου υλικού, $a = 5\text{\AA}$ και $\sigma_{xy}^{\mathfrak{S}}$ το φανταστικό μέρος της αγωγιμότητας Hall στο δυναμικό όριο. Στη συγκεκριμένη περίπτωση αναμένουμε ότι η γωνία Kerr ϑ_K , θα έχει μία ιδιαίτερη εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο ή οποία οφείλει να ακολουθεί την μαγνητικά επαγόμενη d_{xy} παράμετρο τάξης. Μία κατάλληλη διάταξη και πειραματική μέθοδος για την ανίχνευση μαγνητο-οπτικών φαινομένων εγγενούς χειρικότητας αποτελεί το συμβολόμετρο Sagnac [245]. Ειδικότερα, για να παρατηρηθεί η συγκεκριμένη εξάρτηση θα πρέπει το υλικό να ψυχθεί κάτω από τα 17.5K και να θερμανθεί ξανά παρουσία ενός στατικού μαγνητικού πεδίου, το οποίο πολώνει τυχούσες περιοχές διαφορετικής χειρικότητας που υπάρχουν στο υλικό.

Για τον υπολογισμό της γωνίας Kerr, χρειαζόμαστε την δυναμική αγωγιμότητα Hall. Στην περίπτωσή μας, για μικρά πεδία $B_z \leq 20T$, η δυναμική αγωγιμότητα κυριαρχείται από την τοπολογική συνεισφορά. Χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του Παραρτήματος καθώς και του Κεφ.4, μπορούμε εύκολα να δούμε ότι η τοπολογική αγωγιμότητα για πεπερασμένες συχνότητες γράφεται ως

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{4E_{\sigma}^2(\mathbf{k}) n_F [E_{\nu, \sigma}^{B_z}(\mathbf{k})] \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})}{[\hbar\omega + i0^+ - 2E_{\sigma}(\mathbf{k})] [\hbar\omega + i0^+ + 2E_{\sigma}(\mathbf{k})]}. \quad (8.13)$$

Για $\omega > 0$ η αγωγιμότητα Hall έχει συνεισφορά μόνο από τον πρώτο πόλο και μπορούμε να γράψουμε

$$\sigma_{xy}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} \frac{4E_{\sigma}^2(\mathbf{k}) n_F [E_{\nu, \sigma}^{B_z}(\mathbf{k})] \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k})}{\hbar\omega + i0^+ + 2E_{\sigma}(\mathbf{k})} \left\{ \frac{P}{\hbar\omega - 2E_{\sigma}(\mathbf{k})} - i\pi\delta[\hbar\omega - 2E_{\sigma}(\mathbf{k})] \right\}, \quad (8.14)$$

όπου το σύμβολο P υποδεικνύει ότι θα πρέπει να λάβουμε την κύρια, κατά Cauchy, συνεισφορά του αθροίσματος (ολοκληρώματος). Το φανταστικό μέρος της αγωγιμότητας δίνεται από τη σχέση,

$$\sigma_{xy}^{\mathfrak{S}}(\omega) = -\frac{\pi e^2 \hbar \omega}{2\hbar N} \sum_{\mathbf{k}, \nu, \sigma} n_F [E_{\nu, \sigma}^{B_z}(\mathbf{k})] \Omega_{\nu, \sigma}^z(\mathbf{k}) \delta[\hbar\omega - 2E_{\sigma}(\mathbf{k})], \quad (8.15)$$

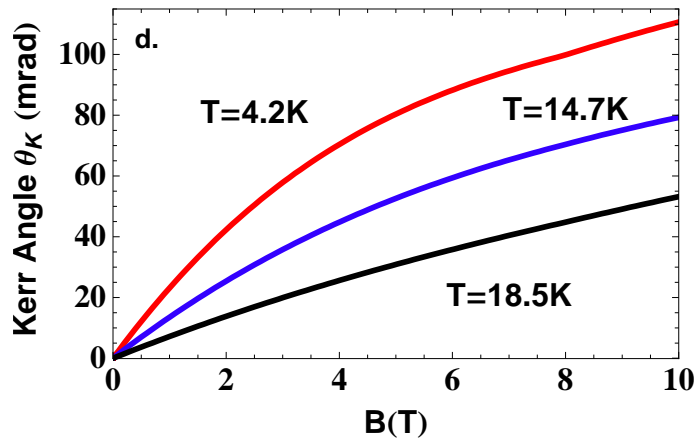
όπου λόγω της συνάρτησης δέλτα, έχουμε την απλοποίηση $E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k}) = -\mu - [\mu_B\sigma + m_z(\mathbf{k})]\mathcal{B}_z + \nu\hbar\omega/2$. Συνήθως, ο όρος $\hbar\omega$ είναι της τάξης του eV, σίγουρα μεγαλύτερος από τις χαρακτηριστικές κλίμακες του ενεργειακού χάσματος που συναντούμε στην προκειμένη περίπτωση. Αυτό σημαίνει ότι $n_F[E_{\nu,\sigma}^{\mathcal{B}_z}(\mathbf{k})] \simeq n_F[\nu\hbar\omega/2]$. Για μικρές τιμές του μαγνητικού πεδίου μπορούμε να αναπτύξουμε την ενεργειακή διασπορά γύρω από τα σημεία Fermi $\mathbf{k} = (\pm\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$. Σε αυτήν την περίπτωση, $\Omega_{\nu,\sigma}^z(\mathbf{k}) \simeq 2\nu t M_{\mathcal{Q},2} M_{\mathcal{Q},6} E_{\sigma}^3(\mathbf{k}) = 16\nu a^2 t M_{\mathcal{Q},2} M_{\mathcal{Q},6} / (\hbar\omega)^3$. Η αγωγιμότητα γράφεται τώρα ως εξής

$$\sigma_{xy}^{\mathcal{S}}(\omega) = \frac{2e^2 M_{\mathcal{Q},6}}{\hbar} \frac{1 - 2n_F(\hbar\omega/2)}{\hbar\omega} \simeq \frac{2e^2 M_{\mathcal{Q},6}}{\hbar \hbar\omega}. \quad (8.16)$$

Για ένα συμβολόμετρο Sagnac [245], ισχύουν $\hbar\omega = 0.8\text{eV} = 6420\text{cm}^{-1}$ και $\lambda = 1550\text{nm}$, ενώ η συχνότητα πλάσματος του URu₂Si₂ είναι $\hbar\omega_p = 2131\text{cm}^{-1} \simeq 266\text{meV}$ [248]. Ο δείκτης διάθλασης σε αυτήν την περίπτωση ορίζεται ως $n = \sqrt{1 - (\omega_p/\omega)^2}$. Λόγω του ότι $\omega \gg \omega_p$ μπορούμε να θεωρήσουμε την προσέγγιση $n \simeq 1$ και $n^2 - 1 = -(\omega_p/\omega)^2$. Βρίσκουμε ότι η γωνία Kerr, η οποία μετράται με αυτό το συμβολόμετρο Sagnac δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned} \vartheta_K(\mathcal{B}_z, T) &= \frac{4\pi}{n(n^2 - 1)d} \frac{\sigma_{xy}^{\mathcal{S}}(\omega)}{\omega} \\ &\simeq -2 \frac{2}{n(n^2 - 1)} \frac{e^2 \lambda M_{\mathcal{Q},6}(\mathcal{B}_z, T)}{\hbar c d \hbar\omega} \simeq -22 \frac{e^2 \lambda M_{\mathcal{Q},6}(\mathcal{B}_z, T)}{\hbar c d \hbar\omega_p} \left(\frac{\omega}{\omega_p} \right). \end{aligned} \quad (8.17)$$

Λαμβάνοντας υπόψη ότι την τιμή της σταθεράς λεπτής υφής $e^2/\hbar c = 1/137$ και θέτωντας $d \simeq 2\text{nm}$, λαμβάνουμε μία προσεγγιστική εκφραση της γωνίας Kerr $\vartheta_K \simeq 128 M_{\mathcal{Q},6} \text{mrad}$ με την παράμετρο τάξης $M_{\mathcal{Q},6}$ να μετράται σε meV. Όπως παρατηρούμε και στο σχήμα Σχ.8.8, το μέγεθος της γωνίας Kerr δείχνει ότι το μέγεθος αυτό είναι αρκετά μεγάλο και εύκολα ανιχνεύσιμο πειραματικά. Η παρατήρηση ενός πεπερασμένου σήματος Nernst θα αποτελέσει μία απόδειξη της υπάρξης αυτής της τοπολογικής κατάστασης, απαντώντας το γρίφο του URu₂Si₂.



Σχήμα 8.8: Προβλεπόμενο Πολωμένο Φαινόμενο Kerr (Polar Kerr effect) λόγω της εγγενούς χειρικότητας της προτεινόμενης χειρικής κατάστασης. Ο σχηματισμός της χειρικής κατάστασης για πεπερασμένα μαγνητικά πεδία, οδηγεί σε ένα πεπερασμένο φαινόμενο Kerr ακόμη και για θερμοκρασίες μεγαλύτερες από την κρίσιμη θερμοκρασία T_0 . P. Kotetes, A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1002.2719 [193].

9 Επίλογος

Στα πλαίσια αυτής της διατριβής αναδείξαμε τον καίριο ρόλο που μπορούν να διαδραματίσουν τα **Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν** στην κατανόηση ιδιαίτερα σημαντικών και ανεξήγητων ως τώρα φαινομένων, που λαμβάνουν χώρα στην ‘κανονική’ (μη-υπεραγώγιμη) κατάσταση δύο συγκεκριμένων κατηγοριών μη-συμβατικών υπεραγωγών. Οι συγκεκριμένες διαμορφωμένες Τοπολογικές καταστάσεις, αποτελούν μη-συμβατικά συμπυκνώματα στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής και ευνοούνται από τις ίδιες αλληλεπιδράσεις που οδηγούν στο σχηματισμό της μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας. Κατ’ αυτόν τον τρόπο, είναι πλήρως αναμενόμενο να εμφανιστούν σε περιοχές του διαγράμματος φάσης αυτών των υλικών. Πράγματι τα υλικά που εξετάσαμε στα πλαίσια αυτής της διατριβής, **οι υπεραγωγοί υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των χαλκοξειδίων καθώς και ο υπεραγωγός βαρέων φερμιονίων URu_2Si_2** , χαρακτηρίζονται από μη-ταυτοποιημένες ως τώρα καταστάσεις τάξεως στο διάγραμμα φάσης τους, οι οποίες σύμφωνα με πειραματικές ενδείξεις θα μπορούσαν κάλλιστα να αποδοθούν σε μη-συμβατικές καταστάσεις Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν. Ανάμεσα σε άλλα, κύριο χαρακτηριστικό αυτών των μη-υπεραγώγιμων περιοχών είναι ένα **Γιγαντιαίο Σήμα Nernst της τάξης των μερικών $\mu V/K$, με θετικό πρόσημο και μία χαρακτηριστική θερμοκρασιακή εξάρτηση**. Το συγκεκριμένο θερμοκρασιακό προφίλ έχει τη μορφή ενός λόφου (tilted hill) που παρουσιάζει ένα μέγιστο. Το φαινόμενο Nernst, αποτελεί κλειδί για την κατανόηση αυτών των περιοχών του διαγράμματος φάσης, ενώ παρουσιάζεται και άλλα υλικά όπως το ο υπεραγωγός βαρέων φερμιονίων $CeCoIn_5$ και τα οξυπνικτίδια του σιδήρου ($FeAs$).

Βασιζόμενοι στην γειτνίαση των μη-συμβατικών κυμάτων πυκνότητας φορτίου με τους μη-συμβατικούς υπεραγωγούς, προτείναμε τη δυνατότητα μίας ισχυρής θερμοηλεκτρικής απόκρισης Nernst Τοπολογικής προέλευσης. Συγκεκριμένα υποστηρίξαμε πως οι μη-ταυτοποιημένες εξωτικές καταστάσεις που παρατηρούνται σε αυτά τα υλικά, μπορούν να συσχετιστούν με Τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου ή Σπιν, και συγκεκριμένα με Χειρικές καταστάσεις αυτού του τύπου. Αναδείξαμε επίσης για πρώτη φορά, ότι στο ισχυρά μονωτικό όριο, οι Χειρικές Τοπολογικές καταστάσεις επιδεικνύουν μία **Γιγαντιαία απόκριση Nernst** αναπαράγοντας ταυτόχρονα το χαρακτηριστικό θερμοκρασιακό προφίλ που συνοδεύει τα υπό μελέτη υλικά. Η συγκεκριμένη θερμοκρασιακή εξάρτηση προκύπτει λόγω της ύπαρξης ενός κρίσιμου θερμοηλεκτρικού σημείου όπου η Τοπολογική απόκριση Hall εξισώνεται με τη διαμήκη αποσβενόμενη.

Για τη μελέτη του Γιγαντιαίου Τοπολογικού φαινομένου Nernst ήταν αναγκαία η περαιτέρω εμβάθυνση στις ιδιότητες των Τοπολογικών καταστάσεων. Κατ’ αυτόν τον τρόπο, μελετήσαμε βασικές θερμοδυναμικές ιδιότητες του σχηματισμού αυτών των καταστάσεων με αφετηρία ένα **εκτεταμένο μικροσκοπικό μοντέλο τύπου Hubbard**. Η μελέτη του διαγράμματος φάσης που προέκυψε στα πλαίσια αυτού του μοντέλου, ανέδειξε τα τοπολογικά Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, ως ευνοούμενες θεμελιώδεις καταστάσεις οι οποίες μπορούν πράγματι να εμφανιστούν σε αυτά τα υλικά. Το επόμενο βήμα στην ανάλυσή μας, ήταν να εξετάσουμε τις Τοπολογικές ιδιότητες αυτών των υλικών. Εισάγοντας κατάλληλες Τοπολογικές αναλλοίωτες ποσότητες, χωρίσαμε τις Τοπολογικές καταστάσεις σε **Χειρικές και Ελικοειδείς**. Οι πρώτες παραβιάζουν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου T σε μακροσκοπικό επίπεδο, ενώ οι δεύτερες την διατηρούν. Και στις δύο περιπτώσεις δείξαμε ότι είναι δυνατή η παρατήρηση ενός πλούσιου διαγράμματος φάσης σε μηδενική θερμοκρασία, που περιλαμβάνει μία

διαδοχή από **Κβαντικές Τοπολογικές Μεταβάσεις Φάσης**. Επιπλέον, δείξαμε πως η φυσική που διέπει τα Τοπολογικά υλικά στο σύνορο είναι και αυτή αρκετά πλούσια, περιλαμβάνοντας **συνοριακούς Χειρικούς και Ελικοειδείς βαθμούς ελευθερίας** οι οποίοι είναι άμεση απόρροια της ύπαρξης των Τοπολογικών αναλλοίωτων ποσοτήτων.

Στη συνέχεια, βασιζόμενοι σε μεθόδους της Κβαντικής Θεωρίας Μέσου Πεδίου, μελετήσαμε τις Τοπολογικές δράσεις που περιγράφουν σε χαμηλές συχνότητες και κυματανύσματα τις συγκεκριμένες καταστάσεις. Σύμφωνα με αποτελέσματά μας, **οι Χειρικές καταστάσεις περιγράφονται από μία δράση Chern-Simons ενώ οι Ελικοειδείς από μία θεωρία BF**. Μέσω των εξισώσεων κίνησης, μας δόθηκε η ευκαιρία να μελετήσουμε τα **Αυθόρμητα ηλεκτρικά, μαγνητικά και μαγνητοηλεκτρικά Κβαντικά Φαινόμενα** που προκύπτουν λόγω της μη τετριμμένης τοπολογικής δομής αυτών των καταστάσεων, όπως και τις διάφορες μεταβολές που υφίστανται οι **ενεργειακές διασπορές του φωτονικού πεδίου** καθώς αυτό αλληλεπιδρά με αυτές. Παρόμοια αποτελέσματα για την Τοπολογική μεταφορά φορτίου και σπιν, εξάγαμε θεωρώντας το **αδιαβατικό όριο και την πεπερασμένη φάση Berry** που εμφανίζεται κατά την εφαρμογή ηλεκτρικών πεδίων και μαγνητοβαθμίδων Zeeman. Οι Τοπολογικές αναλλοίωτες ποσότητες που εισαγάγαμε, δεν αποτελούν παρά τα Τοπολογικά φορτία των μαγνητικών μονόπολων Berry του χώρου των κυματανυσμάτων.

Το πεπερασμένο μαγνητικό πεδίο Berry συνεπάγεται την ύπαρξη μίας **τροχιακής συνεισφοράς της μαγνήτισης**, την οποία υπολογίσαμε μέσω της επανακανονικοποίησης της συνάρτησης Green στα πλαίσια της **εξίσωσης Dyson**. Ελαχιστοποιώντας την ελεύθερη ενέργεια **παρουσία μαγνητικού πεδίου**, δείξαμε πως η επιπρόσθετη εγγενής τροχιακή μαγνήτιση και αλληλεπίδραση, οδηγεί στην αναπόφευκτη ενίσχυση και **επαγωγή των Τοπολογικών καταστάσεων**, ευνοώντας κυρίως τις Χειρικές. Χρησιμοποιώντας υπολογιστικές μεθόδους, μελετήσαμε τις εξισώσεις αυτοσυνέπειας των παραμέτρων τάξης για τη Χειρική κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ επαληθεύοντας πράγματι την επαγωγή αυτής της κατάστασης, όταν αρχικά υπάρχει μόνο η $id_{x^2-y^2}$. Κατά συνέπεια, εάν μία τροχιακή κατάσταση έχει ήδη σχηματιστεί, τότε η εφαρμογή ενός πεδίου αναγκαστικά οδηγεί σε μετάβαση σε μία Χειρική. Πέρα από τα παραπάνω μαγνητοηλεκτρικά φαινόμενα, συνεχίσαμε με την **εξαγωγή του γενικότερου μαγνητοθερμοηλεκτρικού τανυστή Hall**. Για να εκμεταλλευτούμε τη μέθοδο των ολοκληρωμάτων διαδρομής, εισάγαμε το βαρυτικό πεδίο του Luttinger και καταλήξαμε στην απαραίτητη, για τον υπολογισμό του σήματος Nernst, Αυθόρμητη Θερμοηλεκτρική αγωγιμότητα Hall.

Ολοκληρώσαμε αυτήν τη μελέτη φαινομένων και ιδιοτήτων, με την πρόταση συγκεκριμένων καταστάσεων για τις **μη-υπεραγώγιμες φάσεις των χαλκοξειδίων** και του URu_2Si_2 . Στην πρώτη περίπτωση, **προτείναμε πως η Χειρική κατάσταση $d_{xy} + id_{x^2-y^2}$ ελοχεύει στην περιοχή του ψευδοχάσματος** και δείξαμε ότι είναι δυνατόν να αναπαραχθεί τόσο το μέγεθος του σήματος Nernst, το πρόσημό του όπως και το ιδιαίτερο θερμοκρασιακό προφίλ, χρησιμοποιώντας αυτοσυνεπή αριθμητικά αποτελέσματα προηγούμενων κεφαλαίων. Όπως δείξαμε, η πρότασή μας είναι παράλληλα συνεπής με τον παρατηρούμενο έντονο διαμαγνητισμό που συνοδεύει το ασυνήθιστο σήμα Nernst. Το Χειρικό κύμα πυκνότητας φορτίου, είναι δυνατόν να χαρακτηριστεί από έντονη διαμαγνητική συμπεριφορά, η οποία στην ιδανική περίπτωση μετατρέπεται στο **Τοπολογικό φαινόμενο Meissner**. Στην συγκεκριμένη περίπτωση που παρουσιάσαμε επιβεβαιώσαμε ότι το γιγαντιαίο σήμα Nernst, συνοδεύεται από ισχυρή τροχιακή μαγνήτιση. Για την ανίχνευση της συγκεκριμένης κατάστασης σε αυτά τα υλικά προτείναμε μία πειραματική μέτρηση βασιζόμενη στο **αντίστροφο Αυθόρμητο Φαινόμενο Hall**, όπου η μέτρηση μιας πεπερασμένης τάσης Hall παρουσία κατάλληλης κατανομής ρευμάτων, μπορεί να αποτελέσει ένα **γνήσιο αποτύπωμα πεπερασμένης Χειρικότητας**. Αντίστοιχα, στην περίπτωση του υπεραγωγού βαρέων φερμιονίων URu_2Si_2 υποστηρίξαμε πως η μαγνητική Χειρική κατάσταση $d_{xy}^z + id_{x^2-y^2}^z$, είναι αυτή που συνάδει με την προκύπτουσα φαινομενολογία και μπορεί να ερμηνεύσει χαρακτηριστικά φαινόμενα της **‘κρυμμένης’ κατάστασης (hidden order)**. Μέσω υπολογιστικών

μεθόδων εξάγαμε το διάγραμμα φάσης για την συγκεκριμένη κατάσταση για διάφορα μαγνητικά πεδία και θερμοκρασίες. Παρατηρήσαμε πως τα αποτελέσματά μας είναι πολύ κοντά στην πειραματική εικόνα, **ερμηνεύοντας τη σειρά των Μεταμαγνητικών Μεταβάσεων** που παρατηρείται. Επιπλέον, η πρότασή μας παρέχει μία μοναδική οδό κατανόησης της ισχυρής θερμοηλεκτρικής απόκρισης σε αυτό το υλικό, αφού **καταφέραμε να αναπαράγουμε και σε αυτήν την περίπτωση το μέγεθος, το πρόσημο καθώς και την θερμοκρασιακή εξάρτηση του σήματος Nernst**. Τέλος, προτείναμε και σε αυτήν την περίπτωση ένα πείραμα ικανό να διακρίνει την παρουσία μίας Χειρικής κατάστασης. Αυτό το πείραμα αφορά την **παρατήρηση του Πολωμένου Φαινομένου Kerr**, που σύμφωνα με τους υπολογισμούς μας, αναμένουμε ότι η παρατηρούμενη γωνία Kerr θα έχει μία ιδιαίτερη εξάρτηση από το μαγνητικό πεδίο, αποτελώντας μία **αδιαμφισβήτητη επαλήθευση της θεωρίας μας**.

Πέρα από τα συμπεράσματα που εξάγαμε για τα παραπάνω υλικά, τα αποτελέσματά μας έχουν καθολικό χαρακτήρα. Οι ιδιότητες και τα φαινόμενα που παρουσιάσαμε έχουν τοπολογική προέλευση και μπορούν να ισχύουν για μία πληθώρα συστημάτων, εκ πρώτης όψεως αρκετά διαφορετικών από αυτά που εξετάσαμε στην προκειμένη περίπτωση. Κατ' αυτόν τον τρόπο, ο νέος μηχανισμός γέννησης ενός γιγαντιαίου σήματος Nernst που προτείναμε, είναι δυνατόν να ερμηνεύσει τη συστηματική παρατήρηση ανώμαλης θερμοηλεκτρικής συμπεριφοράς σε ένα μεγάλο αριθμό υλικών. Βέβαια, είναι φυσικό και απαραίτητο η μέλετη της παρούσας διατριβής να συνεχιστεί και να επεκταθεί περαιτέρω. Σημαντικά ζητήματα που απομένουν να μελετηθούν, αποτελούν πρώτα από όλα ο ανταγωγισμός των Τοπολογικών Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν με τις αντίστοιχες μη-συμβατικές υπεραγωγίμες καταστάσεις των υπό μελέτη υλικών, η ανάλυση με βάση ρεαλιστικότερα μοντέλα ενεργειακής δομής, η επίδραση προσμίξεων και τέλος η επέκταση της Γιγαντιαίας Αυθόρμητης Θερμοηλεκτρικής Απόκρισης Nernst σε πεπερασμένες συχότητες και σε συνθήκες εκτός ισορροπίας.

Βιβλιογραφία

- [1] H. Kamerlingh Onnes, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden **Nos. 119,120,121** (1911).
- [2] W. Meissner and R. Ochsenfeld, Naturwiss **21**, 787 (1933).
- [3] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, J. Exptl. Theoret. Phys. (USSR), **20**, 1064 (1950).
- [4] P. W. Anderson, Phys. Rev. **130**, 439 (1963).
- [5] P. W. Higgs, Phys. Rev. Lett. **13**, 508 (1964).
- [6] H. Frölich, Phys. Rev. **79**, 845 (1950).
- [7] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [8] M. Sgrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- [9] J. Zinn-Zustin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (1996), Clarendon Press (Oxford).
- [10] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics* (1981), Plenum Press (New York).
- [11] P. Fulde and R. Ferrel, Phys. Rev. **135**, 550 (1964).
- [12] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965).
- [13] A. I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. **77**, 935 (2005).
- [14] G. C. Psaltakis and E. W. Fenton, J. Phys. C **16**, 3913 (1983).
- [15] S.-C. Zhang, Phys. Rev. B **42**, 1012 (1990).
- [16] M. Murakami and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **67**, 2784 (1998).
- [17] B. Kyung, Phys. Rev. B **62**, 9083 (2000).
- [18] W. M. Zhang, Phys. Rev. B **65**, 104513 (2002).
- [19] K. Seo, H.-D. Chen, and J. Hu, Phys. Rev. B **76**, 020511 (2007).
- [20] K. Seo, H.-D. Chen, and J. Hu, Phys. Rev. B **78**, 094510 (2008).
- [21] A. Aperis, G. Varelogiannis, P. B. Littlewood and B. D. Simons, J. Phys. Condens. Matter **20**, 434235 (2008).

- [22] A. Aperis, G. Varelogiannis, and P. B. Littlewood, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 216403 (2010).
- [23] M. Georgiou, G. Varelogiannis and P. Thalmeier, *EPL* **82**, 67007 (2008).
- [24] M. Georgiou and G. Varelogiannis, arXiv:1009.0122.
- [25] H.-Y. Kee, arXiv:1002.0586.
- [26] K. Machida, K. Nokura, and T. Matsubara, *Phys. Rev. B* **22**, 2307 (1980).
- [27] K. Machida, T. Koyama, and T. Matsubara, *Phys. Rev. B* **23**, 99 (1981).
- [28] M. J. Nass, K. Levin, and G. S. Grest, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 614 (1981).
- [29] P. B. Littlewood and C. M. Varma, *Phys. Rev. Lett.* **47**, 811 (1981).
- [30] G. S. Grest, K. Levin and M. J. Nass, *Phys. Rev. B* **25**, 4562 (1982).
- [31] J. L. Birman and A. I. Solomon, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 230 (1982).
- [32] A. I. Solomon and J. L. Birman, *Journal of Mathematical Physics* **28**, 1526 (1987).
- [33] R. S. Markiewicz and M. T. Vaughn, *Phys. Rev. B* **57**, R14052 (1998).
- [34] D. Podolsky, E. Altman, T. Rostunov, and E. Demler, *Phys. Rev. B* **70**, 224503 (2004).
- [35] E. Demler, W. Hanke, and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 909 (2004).
- [36] Ki-Seok Kim, *Phys. Rev. B* **75**, 075105 (2007).
- [37] V. F. Elesin, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **104**, 819 (2007).
- [38] C. J. Halboth and W. Metzner, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5162 (2000).
- [39] H. Yamase and W. Metzner, *Phys. Rev. B* **75**, 155117 (2007).
- [40] H.-D. Chen, O. Vafek, A. Yazdani, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 187002 (2004).
- [41] D. F. Agterberg and H. Tsunetsugu, *Nature Phys.* **4**, 639 (2008).
- [42] C. N. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2144 (1989).
- [43] S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 120 (1990).
- [44] C. N. Yang and S. C. Zhang, *Mod. Phys. Lett. B* **4**, 759 (1990).
- [45] I. Zapata, B. Wunsch, N. T. Zinner, E. Demler, arXiv:0910.1803.
- [46] Hui Zhai, *Phys. Rev. B* **71**, 012512 (2005).
- [47] K. Togano, P. Badica, Y. Nakamori, S. Orimo, H. Takeya, and K. Hirata, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 247004 (2004); P. Badica, T. Kondo, and K. Togano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **74**, 1014 (2005).
- [48] E. Bauer, G. Hilscher, H. Michor, Ch. Paul, E. W. Scheidt, A. Griбанov, Yu. Seropegin, H. Noël, M. Sigrist, and P. Rogl, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 027003 (2004).

- [49] M. Kenzelmann, Th. Strassle, C. Niedermayer, M. Sigrist, B. Padmanabhan, M. Zolliker, A. D. Bianchi, R. Movshovich, E. D. Bauer, J. L. Sarrao and J. D. Thompson, *Science* **321**, 1652 (2008).
- [50] K. Miyake, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **77** 123703 (2008).
- [51] D. F. Agterberg, M. Sigrist, and H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 207004 (2009).
- [52] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Z. Phys. B* **64**, 189 (1986).
- [53] M. K. Wu, J. Ashburn, C. Torng, P. Hor, R. Meng, L. Gao, Z. Huang, Y. Wang, and C. Chu, *Phys. Rev. Lett* **58**, 908 (1987).
- [54] G. Varelogiannis, *Phys. Rev. B* **57**, 13743 (1998).
- [55] G. Varelogiannis, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 117005 (2002).
- [56] A. Aperis, P. Kotetes, G. Varelogiannis and P. M. Oppeneer, arXiv:0911.1461, accepted by *Phys. Rev. B*.
- [57] D. M. Ginzberg, *Physical Properties of High Temperature Superconductors*, World Scientific (Singapore) (1989).
- [58] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
- [59] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
- [60] T. Timusk and B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 61 (1999).
- [61] J. Orenstein and A. Millis, *Science* **288**, 468 (2000).
- [62] J. C. Campuzano, M. Norman and M. Randeria, in *Physics of Conventional and Unconventional Superconductors*, edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (2003) (Springer, Berlin).
- [63] E. W. Carlson, V. Emery, S. Kivelson, and D. Orgad, in *Physics of Conventional and Unconventional Superconductors*, edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (2003) (Springer, Berlin).
- [64] A. Damascelli, Z. Hussin, and Z.-X. Shen, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 473 (2003).
- [65] S. Sachdev, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 913 (2003).
- [66] S. A. Kivelson, I. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganesyan, J. Tranquada, A. Kapitulnik, and C. Howard, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1201 (2003).
- [67] E. Demler, W. Hanke, and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 909 (2004).
- [68] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Rev. Mod. Phys.* **78**, 17 (2006).
- [69] B. C. Barrois, *Nucl. Phys. B* **129**, 390 (1977).
- [70] M. G. Alford, K. Rajagopal, and F. Wilczek, *Nucl. Phys. B* **537**, 443 (1999).

- [71] R. Casalbuoni and G. Nardulli, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 263 (2004).
- [72] M. G. Alford, A. Schmitt, K. Rajagopal, and T. Schäfer, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1455 (2008).
- [73] J. M. Maldacena, *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 231 (1998).
- [74] E. Witten, *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 253 (1998).
- [75] S. S. Gubser, *Phys. Rev. D* **78**, 065034 (2008).
- [76] S. A. Hartnoll, C. P. Herzog and G. T. Horowitz, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 031601 (2008).
- [77] S. S. Gubser and S. S. Pufu, *JHEP* **0811**, 033 (2008).
- [78] A. Aperis, P. Kotetes, E. Papantonopoulos, G. Siopsis, P. Skamagoulis and Georgios Varelogianis, arXiv:1009.6179.
- [79] F. C. Zhang and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
- [80] O. K. Andersen, A. I. Liechtenstein, O. Jepsen, and F. Paulsen, *J. Phys. Chem. Solids* **56**, 1573 (1995).
- [81] T. R. Chien, Z. Wang, and N. P. Ong, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2088 (1991).
- [82] P. W. Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2092 (1991).
- [83] Nicolas Doiron-Leyraud, Cyril Proust, David LeBoeuf, Julien Levallois, Jean-Baptiste Bonnemaison, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy and Louis Taillefer, *Nature* **447**, 565 (2007).
- [84] A. F. Bangura, J. D. Fletcher, A. Carrington, J. Levallois, M. Nardone, B. Vignolle, P. J. Heard, N. Doiron-Leyraud, D. LeBoeuf, L. Taillefer, S. Adachi, C. Proust and N. E. Hussey, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047004 (2008).
- [85] E. A. Yelland, J. Singleton, C. H. Mielke, N. Harrison, F. F. Balakirev, B. Dabrowski and J. R. Cooper, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 047003 (2008).
- [86] David LeBoeuf, Nicolas Doiron-Leyraud, Julien Levallois, R. Daou, J.-B. Bonnemaison, N. E. Hussey, L. Balicas, B. J. Ramshaw, Ruixing Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, S. Adachi, Cyril Proust and Louis Taillefer, *Nature* **450**, 533 (2007).
- [87] M. A. Kastner, R. Birgenau, G. Shirane, and Y. Endoh, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 897 (1998).
- [88] S-W. Cheong, G. Aeppli, T. E. Mason, H. Mook, S. M. Hayden, P. C. Canfield, Z. Fisk, K. N. Clausen, and J. L. Martinez, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 1791 (1991).
- [89] K. Yamada, C. H. Lee, K. Kurahashi, J. Wada, S. Wakimoto, S. Ueki, H. Kimura, Y. Endoh, S. Hosoya, G. Shirane, R. J. Birgeneau, M. Greven, M. A. Kastner, and Y. J. Kim, *Phys. Rev. B* **57**, 6165 (1998).
- [90] J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida, *Nature (London)* **375**, 561 (1995).

- [91] J. Rossat-Mignod, L. P. Regnault, C. Vettier, P. Bourges, P. Burlet, J. Bossy, J. Y. Henry and G. Lapertot, *Physica C (Amsterdam)* **185**, 86 (1991).
- [92] H. A. Mook, M. Yethiraj, G. Aeppli, T. E. Mason, and T. Armstrong, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3490 (1993).
- [93] H.-F. Fong, B. Keimer, P. W. Anderson, D. Reznik, F. Dogan, and I. A. Aksay, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 316 (1995).
- [94] D. Z. Liu, Y. Zha, and K. Levin, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4130 (1995).
- [95] N. Bulut and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **53**, 5149 (1996).
- [96] J. Brinckmann and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2915 (1999).
- [97] M. R. Norman, *Phys. Rev. B* **61**, 14751 (2000).
- [98] Ying-Jer Kao, Qimiao Si, and K. Levin, *Phys. Rev. B* **61**, R11898 (2000).
- [99] F. Onufrieva and P. Pfeuty, *Phys. Rev. B* **65**, 054515 (2002).
- [100] Ar. Abanov, A. V. Chubukov, M. Eschrig, M. R. Norman, and J. Schmalian, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 177002 (2002).
- [101] E. Demler and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4126 (1995).
- [102] S.-C. Zhang, *Science* **275**, 1089 (1997).
- [103] Y. Bazaliy, E. Demler, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1921 (1997).
- [104] E. Demler, H. Kohno, S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **58**, 5719 (1998).
- [105] O. Tchernyshyov, M. R. Norman, and A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **63**, 144507 (2001).
- [106] J. M. Tranquada, H. Woo, T. G. Perring, H. Goka, G. D. Gu, G. Xu, M. Fujita, and K. Yamada, *Nature* **429**, 534 (2004).
- [107] T. T. M. Palstra, A. A. Menovsky, J. van den Berg, A. J. Dirkmaat, P. H. Kes, G. J. Nieuwenhuys, and J. A. Mydosh, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2727 (1985).
- [108] W. Schlabitz, J. Baumann, B. Politt, U. Rauchschwalbe, H. M. Mayer, U. Ahlheim and C. D. Bredl, *Z. Phys. B* **62**, 171 (1986).
- [109] K. Andres, J. Graebner, and H. R. Ott, *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1779 (1975).
- [110] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Leike, D. E. M. W. Franz, and H. Schäfer, *Phys. Rev. Lett* **43**, 1892 (1976).
- [111] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (1999), Cambridge University Press (Cambridge).
- [112] P. Coleman and A. J. Schofield, *Nature* **433**, 226 (2005).
- [113] H. v. Löhneysen, A. Rosch, M. Vojta and P. Wölfle, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1015 (2007).

- [114] H. von Lohneysen, T. Pietrus, G. Portisch, H. G. Schlager, A. Schroeder, M. Sieck, and T. Trappmann, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3262 (1994).
- [115] H. von Löhneysen, *J. Phys. Cond. Mat.* **8**, 9689 (1996).
- [116] N. Mathur, F. M. Grosche, S. R. Julian, I. R. Walker, D. M. Freye, and G. G. Lonzarich, *Nature* **394**, 39 (1998).
- [117] M. B. Walker, W. J. L. Buyers, Z. Tun, W. Que, A. A. Menovsky and J. D. Garrett , *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2630 (1993).
- [118] H. Amitsuka and M. Yokoyama, *Physica B* **452**, 329 (2003).
- [119] S. Takagi, S. Ishihara, S. Saitoi, H.-I. Sasaki, H. Tanida, M. Yokoyama and H. Amitsuka, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 033708 (2007).
- [120] P. G. Niklowitz, C. Pfleiderer, T. Keller, M. Vojta, Y.-K. Huang and J. A. Mydosh, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106406 (2010).
- [121] T. E. Mason, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 5089 (1995).
- [122] Y. Kasahara, T. Iwasawa, H. Shishido, T. Shibauchi, K. Behnia, Y. Haga, T. D. Matsuda, Y. Onuki, M. Sigrist and Y. Matsuda, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 116402 (2007).
- [123] T. M. Rice and M. Sigrist, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, L643 (1995).
- [124] G. M. Luke, Y. Fudamoto, K. M. Kojima, M. I. Larkin, J. Merrin, B. Nachumi, Y. J. Uemura, Y. Maeno, Z. Q. Mao, Y. Mori, H. Nakamura, M. Sigrist, *Nature* **394**, 558 (1998).
- [125] N. Harrison, M. Jaime and J. A. Mydosh, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 096402 (2003).
- [126] K. H. Kim, N. Harrison, M. Jaime, G. S. Boebinger, and J. A. Mydosh, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 256401 (2003).
- [127] A. Villaume, F. Bourdarot, E. Hassinger, S. Raymond, V. Taufour, D. Aoki and J. Flouquet, *Phys. Rev. B* **78**, 012504 (2008).
- [128] Y. J. Jo, L. Balicas, C. Capan, K. Behnia, P. Lejay, J. Flouquet, J. A. Mydosh and P. Schlottmann, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 166404 (2007).
- [129] K. Haule and G. Kotliar, *Nature Physics* **5**, 796 (2009).
- [130] K. Haule and G. Kotliar, *Europhysics Letters* **89**, 57006 (2010).
- [131] D. Aoki, F. Bourdarot, E. Hassinger, G. Knebel, A. Miyake, S. Raymond, V. Taufour and J. Flouquet, *J. Phys. Soc. Jpn.* **78**, 053701 (2009).
- [132] C. Broholm, J. K. Kjems, W. J. L. Buyers, P. Matthews, T. T. M. Palstra, A. A. Menovsky and J. A. Mydosh *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1467 (1987).
- [133] F. Bourdarot, B. Fak, K. Habicht, and K. Prokes, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 067203 (2003).

- [134] C. R. Wiebe, J. A. Janik, G. J. MacDougall, G. M. Luke, J. D. Garrett, H. D. Zhou, Y.-J. Jo, L. Balicas, Y. Qiu, J. R. D. Copley, Z. Yamani and W. J. L. Buyers, *Nature Physics* **3**, 1 (2007).
- [135] P. Santini and G. Amoretti, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1027 (1994).
- [136] V. Barzykin and L. P. Gor'kov, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4301 (1995).
- [137] A. Kiss and P. Fazekas, *Phys. Rev. B* **71**, 054415 (2005).
- [138] A. P. Ramirez, P. Coleman, P. Chandra, E. Brück, A. A. Menovsky, Z. Fisk and E. Bucher, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2680 (1992).
- [139] H. Ikeda and Y. Ohashi, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3723 (1998).
- [140] P. Chandra, P. Coleman, J. A. Mydosh and V. Tripathy, *Nature* **417**, 831 (2002).
- [141] A. Virosztek, K. Maki and B. Dora, *Int. J. Mod. Phys. B* **16**, 1667 (2002).
- [142] S. Elgazzar, J. Ruzs, M. Amft, P. M. Oppeneer and J. A. Mydosh, *Nature Materials* **8**, 337 (2009).
- [143] P. M. Oppeneer, J. Ruzs, S. Elgazzar, M.-T. Suzuki, T. Durakiewicz and J. A. Mydosh, *Phys. Rev. B* **82**, 205103 (2010).
- [144] C. M. Varma and L. Zhu, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 036405 (2006).
- [145] A. V. Balatsky, A. Chantis, H. P. Dahal, D. Parker and J. X. Zhu, *Phys. Rev. B* **79**, 214413 (2009).
- [146] F. Cricchio, F. Bultmark, O. Granäs, and L. Nordström, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 107202 (2009).
- [147] F. Andres, Santander-Syro, M. Klein, F. L. Boariu, A. Nuber, P. Lejay and F. Reinert, *Nature Physics* **5**, 637 (2009).
- [148] Y. Wang, Lu Li, and N. P. Ong, *Phys. Rev. B* **73**, 024510 (2006).
- [149] Y. Wang, Lu Li, M. J. Naughton, G. D. Gu, S. Uchida and N. P. Ong, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 247002 (2005).
- [150] Lu Li, Yayu Wang, S. Komiyama, S. Ono, Y. Ando, G. D. Gu and N. P. Ong, *Phys. Rev. B* **81**, 054510 (2010).
- [151] I. Ussishkin, S. L. Sondhi and D. A. Huse *Phys. Rev. Lett.* **89**, 287001 (2002).
- [152] S. Tan and K. Levin, *Phys. Rev. B* **69**, 064510 (2004).
- [153] D. Podolsky, S. Raghu and A. Vishwanath, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 117004 (2007).
- [154] B. D. Tinh and B. Rosenstein, *Phys. Rev. B* **79**, 024518 (2009).
- [155] M. N. Serbyn, M. A. Skvortsov, A. A. Varlamov, and V. Galitski, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 067001 (2009).

- [156] B. D. Josephson, *Physics Letters*, **16**, 242 (1965).
- [157] V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature (London)* **374**, 434 (1995).
- [158] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, *J. Phys. C* **6**, 1181 (1973).
- [159] M. R. Beasley, J. E. Mooij, and T. P. Orlando, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1165 (1979).
- [160] A. S. Alexandrov and V. N. Zavaritsky, *Phys. Rev. Lett* **93**, 217002 (2004).
- [161] S. Onari, H. Kontani, and Y. Tanaka, *Phys. Rev. B* **73**, 224434 (2006).
- [162] A. Hackl, M. Vojta and S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **81**, 045102 (2010).
- [163] V. Oganesyan and I. Ussishkin, *Phys. Rev. B* **70**, 054503 (2004).
- [164] S. Tewari and C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 077001 (2009).
- [165] S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak, *Phys. Rev. B* **63**, 094503 (2001).
- [166] R. Bel, K. Behnia, and H. Berger, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 066602 (2003).
- [167] K. Behnia, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 113101 (2009).
- [168] E. H. Sondheimer, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **193**, 484 (1948).
- [169] R. Bel, H. Jin, K. Behnia, J. Flouquet and P. Lejay, *Phys. Rev. B* **70**, 220501(R) (2004).
- [170] J. Levallois, K. Behnia, J. Flouquet, P. Lejay and C. Proust, *EPL* **85**, 27003 (2009).
- [171] K. Behnia, M.-A. Measson, Y. Kopelevich, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 076603 (2007).
- [172] I. Sheikin, H. Jin, R. Bel, K. Behnia, C. Proust, J. Flouquet, Y. Matsuda, D. Aoki and Y. Onuki, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 077207 (2006).
- [173] Y. Onose, Lu Li, C. Petrovic and N. P. Ong, *EPL* **79**, 17006 (2007).
- [174] K. Izawa, K. Behnia, Y. Matsuda, H. Shishido, R. Settai, Y. Onuki and J. Flouquet, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 147005 (2007).
- [175] Z. W. Zhu, Z. A. Xu, X. Lin, G. H. Cao, C. M. Feng, G. F. Chen, Z. Li, J. L. Luo and N. L. Wang, *New J. Phys.* **10**, 063021 (2008).
- [176] H. J. Schulz, *Phys. Rev. B* **39**, 2940 (1989).
- [177] A. A. Nersesyan and G. E. Vachnadze, *J. Low Temp. Phys.* **77**, 293 (1989).
- [178] P. Thalmeier, *Z. Phys. B* **100**, 387 (1996).
- [179] X. G. Wen and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 503 (1996).
- [180] C. Nayak, *Phys. Rev. B* **62**, 4880 (2000).
- [181] H.-Y. Kee and D. Podolsky, *Europhysics Letters*, **86**, 57005 (2009).

- [182] I. Affleck and J. B. Marston, Phys. Rev. B **37**, 3774 (1988).
- [183] B. Dóra, K. Maki, A. Virosztek, and A. Ványolos, Phys. Rev. B **71**, 172502 (2005).
- [184] Y. Ran, Fa Wang, H. Zhai, A. Vishwanath and D.-H. Lee, Phys. Rev. B **79**, 014505 (2009).
- [185] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **80**, 212401 (2009).
- [186] J.-X. Zhu and A. V. Balatsky, Phys. Rev. B **65**, 132502 (2002).
- [187] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **104**, 106404 (2010).
- [188] P. Kotetes and G. Varelogiannis, J. Phys.: Conf. Ser. **150**, 052125 (2009).
- [189] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **78**, 220509(R) (2008).
- [190] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Europhys. Lett. **84** (2008) 37012.
- [191] P. Kotetes and G. Varelogiannis, J. Supercond. Nov. Magn. **22**, 141 (2009)
- [192] S. Tewari, C. Zhang, V. M. Yakovenko and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **100**, 217004 (2008).
- [193] P. Kotetes, A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1002.2719.
- [194] X.-G. Wen, F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. B **39**, 11413 (1989).
- [195] P. W. Anderson, Science **6**, 1196 (1987).
- [196] C. L. Kane, E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005)
- [197] B. A. Bernevig, T. L. Hughes and S.-C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
- [198] L. Fu and C. L. Kane, 2007, Phys. Rev. B **76**, 045302.
- [199] M. König, Science Express, 1148047 (2007).
- [200] D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, Nature **452**, 970 (2008).
- [201] S. Tsonis, P. Kotetes, G. Varelogiannis, and P. B. Littlewood, J. Phys. Condens. Matter **20**, 434234 (2008).
- [202] M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*.
- [203] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, Oxford University Press (2004).
- [204] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski, *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover (1975).
- [205] N. N. Bogoliubov, Journal of Experimental and Theoretical Physics **34**, 1 (1958).
- [206] P. G. de-Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, Advanced Book Classics (1989).

- [207] G. Grosso and P. Parravicini, *Solid State Physics*, Academic Press (2000).
- [208] A. Aperis, M. Georgiou, G. Roumpos, S. Tsonis, G. Varelogiannis and P. B. Littlewood, *Europhys. Lett.* **83**, 67008 (2008).
- [209] A. Aperis, G. Varelogiannis and P. B. Littlewood, *J. Phys.: Conf. Ser.* **150**, 042007 (2009).
- [210] G. Varelogiannis, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4172 (2000).
- [211] G. C. Milward, M. J. Calderon and P. B. Littlewood, *Nature (London)* **433**, 607 (2005).
- [212] G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Oxford Science Publications (2003).
- [213] X.-L. Qi, T. L. Hughes and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **78**, 195424 (2008).
- [214] S. R. Coleman, *Aspects of Symmetry: Selected Erice Lectures*, Cambridge University Press, Cambridge, (1985).
- [215] K. v. Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [216] R. Jackiw and C. Rebbi, *Phys. Rev. D* **13**, 3398 (1976).
- [217] J. W. Negele and H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Frontiers in Physics.
- [218] A. Atland and B. D. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press (2006).
- [219] R. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, Dover.
- [220] S. Deser, R. Jackiw and S. Templeton, *Phys. Rev. Lett.*, **48** 975 (1982).
- [221] M. C. Diamantini, P. Sodano and C. A. Trugenberger, *Nucl. Phys. B* **474**, 641 (1996).
- [222] X.-G. Wen, *Phys. Rev. B*, **43**, 11025 (1991).
- [223] N. Maeda, *Phys. Lett. B* **376**, 142 (1996).
- [224] J. Goryo and N. Maeda, arXiv:1007.4671.
- [225] E. Fradkin, *Field Theories of condensed matter systems*, Addison Wesley (1991).
- [226] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*(2nd edition), Wiley New York (1975).
- [227] M. V. Berry, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **392**, 45 (1984).
- [228] D. Xiao, M.-C. Chang and Q. Niu, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1959 (2010).
- [229] J. Shi, G. Vignale, Di Xiao, Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 197202 (2007).
- [230] J. M. Luttinger, *Phys. Rev.* **135**, A1505 (1964).
- [231] N. R. Cooper, B. I. Halperin, and I. M. Ruzin, *Phys. Rev. B* **55**, 2344 (1997).
- [232] Y. Dagan, M. M. Qazilbash, C. P. Hill, V. N. Kulkarni and R. L. Greene, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 167001 (2004).

- [233] O. Cyr-Choiniere, R. Daou, F. Laliberte, D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, J. Chang, J.-Q. Yan, J.-G. Cheng, J.-S. Zhou, J. B. Goodenough, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi, Y. Tanaka and L. Taillefer, *Nature* **458**, 743 (2009).
- [234] J. Chang, R. Daou, C. Proust, D. LeBoeuf, N. Doiron-Leyraud, F. Laliberte, B. Pingault, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, H. Takagi, A. Antunes, I. Sheikin, K. Behnia and L. Taillefer, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 057005 (2010).
- [235] R. Daou, J. Chang, D. LeBoeuf, O. Cyr-Choiniere, F. Laliberte, N. Doiron-Leyraud, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy and L. Taillefer, *Nature* **463**, 519 (2010).
- [236] A. Furusaki, M. Matsumoto and M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **64**, 054514 (2001).
- [237] C. Zhang, S. Tewari, V. M. Yakovenko and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **78**, 174508 (2008).
- [238] S. A. Grigera, R. S. Perry, A. J. Schofield, M. Chiao, S. R. Julian, G. G. Lonzarich, S. I. Ikeda, Y. Maeno, A. J. Millis and A. P. Mackenzie, *Science* **294**, 329 (2001).
- [239] S. A. M. Mentink, T. E. Mason, S. Süllow, G. J. Nieuwenhuys, A. A. Menovsky, J. A. Mydosh and J. A. A. J. Perenboom, *Phys. Rev. B* **53**(R), 6014 (1996).
- [240] H. Yamase and H. Kohno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **69**, 332 (2000).
- [241] C. J. Halboth and W. Metzner, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5162 (2000).
- [242] C. Wu, K. Sun, E. Fradkin and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **75**, 115103 (2007).
- [243] K. Sun and E. Fradkin, *Phys. Rev. B* **78**, 245122 (2008).
- [244] P. N. Argyres, *Phys. Rev.* **97**, 334 (1955).
- [245] A. Kapitulnik, J. Xia, E. Schemm and A. Palevski, *New J. Phys.* **11**, 055060 (2009).
- [246] E. P. Wohlfarth and P. Rhodes, *Philos. Mag.* **7**, 1817 (1962).
- [247] V. P. Mineev, *Phys. Rev. B* **76**, 212501 (2007).
- [248] L. Degiorgi, St. Thieme, H.R. Ott, M. Dressel, G. Grüner, Y. Dalichaouch, M.B. Maple and Z. Fisk, *Z. Phys. B* **102**, 367 (1997).

Λίστα Δημοσιεύσεων

10. **Holographic Charge Density Waves.**
A. Aperis, P. Kotetes, E. Papantonopoulos, G. Siopsis, P. Skamagoulis and G. Varelogiannis, arXiv:1009.6179.
9. **Chiral hidden order and orbital antiferromagnetic fluctuations in URu₂Si₂.**
P. Kotetes, A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1002.2719.
8. **Chirality Induced Tilted-Hill Giant Nernst Signal.**
P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **104**, 106404 (2010).
7. **Small-q Phonon Mediated Unconventional Superconductivity in the Iron Pnictides.**
A. Aperis, P. Kotetes, G. Varelogiannis and P. M. Oppeneer, arXiv:0911.1461 (accepted by Phys. Rev. B).
6. **Magnetic-field-induced chiral particle-hole condensates.**
P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **80**, 212401 (2009).
5. **Berry phase and topological spin transport in the chiral d-density wave state.**
P. Kotetes and G. Varelogiannis, J. Supercond. Nov. Magn. **22**, 141 (2009).
4. **Enhanced diamagnetism and Nernst signal from a chiral d-density wave state in the pseudogap regime of the cuprates.**
P. Kotetes and G. Varelogiannis, J. Phys.: Conf. Ser. **150**, 052125 (2009).
3. **Meissner effect without superconductivity from a chiral d-density wave.**
P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **78**, 220509(R) (2008).
2. **Spontaneous Quantum Hall Effect in chiral d-density waves.**
P. Kotetes and G. Varelogiannis, Europhys. Lett. **84**, 37012 (2008).
1. **Patterns of coexisting superconducting and particle-hole condensates.**
S. Tsonis, P. Kotetes, G. Varelogiannis and P. B. Littlewood, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 434234 (2008).

Γενικός Τανυστής Πόλωσης ενός συστήματος ισοσπίν- $\frac{1}{2}$

Θα υπολογίσουμε τον Τανυστή πόλωση, ο οποίος προκύπτει από το διάγραμμα φουσαλίδας (Bubble diagram) των συναρτήσεων Green ενός μη-αλληλεπιδρώντος συστήματος δύο καταστάσεων, για τις γενικότερες κορυφές αλληλεπίδρασης. Η Χαμιλτονιανή έχει τη μορφή $\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger (\delta_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m) \Psi_{\mathbf{k}}$, όπου με $\Psi_{\mathbf{k}}$ τον ισοσπινόρα, με τ_m έχουμε ορίσει τους πίνακες Pauli στο χώρο του ισοσπιν, ενώ παράλληλα θεωρήσαμε άθροιση στους επαναλαμβανόμενους δείκτες. Ο πίνακας μονάδα στο χώρο του ισοσπιν παραλείφθηκε για ευκολία. Η συνάρτηση Green του μη αλληλεπιδρώντος συστήματος ορίζεται ως

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}} = \frac{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{(ik_n - \delta_{\mathbf{k}})^2 - E_{\mathbf{k}}^2} = \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \left\{ \frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \right\}, \quad (1)$$

όπου $k = (ik_n, \mathbf{k})$ με ik_n τις φερμιονικές συχνότητες Matsubara και $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}}^m}$. Είναι εύκολο να αναγνωρίσουμε του προβολικούς τελεστές στις πάνω και κάτω ενεργειακές ζώνες του ισοσπιν

$$\mathcal{P}_{\mathbf{k}}^\pm = \frac{E_{\mathbf{k}} \pm g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{2E_{\mathbf{k}}}. \quad (2)$$

Ο γενικότερος Τανυστής Πόλωσης για το παραπάνω σύστημα, έχει τη μορφή

$$\Pi^{\mu\nu}(q) = \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \mathcal{T}r_\tau \left(\mathcal{G}_{\mathbf{k}} \mathcal{A}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu \mathcal{G}_{\mathbf{k}+q} \mathcal{B}_{\mathbf{k}+q, \mathbf{k}}^\nu \right), \quad (3)$$

όπου $q = (i\omega_s, \mathbf{q})$ είναι το τετρακυματόνισμα ανταλλαγής, με $i\omega_s$ παριστάνουμε την μποζονική συχνότητα Matsubara η οποία με αναλυτική συνέχιση $i\omega_s \rightarrow \omega + 0^+$, μας δίνει την απόκριση στην πραγματική συχνότητα ω στο τέλος των υπολογισμών. Το ίχνος ορίζεται στο χώρο των πινάκων Pauli του ισοσπίν. Οι χωροχρονικές κορυφές αλληλεπίδρασης $\mathcal{A}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu$ και $\mathcal{B}_{\mathbf{k}+q, \mathbf{k}}^\nu$ παίρνουν τη γενική μορφή

$$\mathcal{A}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu = A_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu + \alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^{\mu, i} \tau_i, \quad (4)$$

$$\mathcal{B}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu = B_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu + \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^{\mu, i} \tau_i. \quad (5)$$

Υπό αυτές τις συνθήκες, μπορούμε να υπολογίσουμε τον τανυστή πόλωσης ως εξής

$$\begin{aligned} \Pi^{\mu\nu}(q) &= \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \frac{1}{4E_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}+q}} \mathcal{T}r_\tau \left[\left(\frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \right) (A_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^\mu + \alpha_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+q}^{\mu, i} \tau_i) \right. \\ &\times \left. \left(\frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} + \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \right) (B_{\mathbf{k}+q, \mathbf{k}}^\nu + \beta_{\mathbf{k}+q, \mathbf{k}}^{\nu, j} \tau_j) \right] \end{aligned}$$

Για τον υπολογισμό του ίχνους θα χρησιμοποιήσουμε τις σχέσεις

$$\mathcal{T}r_\tau (\tau_n \tau_l) = 2\delta_{nl}, \quad (6)$$

$$\mathcal{T}r_\tau (\tau_m \tau_n \tau_l) = 2i\varepsilon_{mnl}, \quad (7)$$

$$\mathcal{T}r_\tau (\tau_m \tau_n \tau_l \tau_s) = 2(\delta_{mn}\delta_{ls} - \delta_{ml}\delta_{ns} + \delta_{ms}\delta_{nl}). \quad (8)$$

Προκύπτει λοιπόν

$$\begin{aligned} \Pi^{\mu\nu}(q) &= \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \frac{1}{4E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+q}} \mathcal{T}r_\tau \left\{ \right. \\ &+ \left[\frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \right. \\ &+ \left. \frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} \right] A_{k, k+q}^\mu B_{k+q, k}^\nu \\ &+ \left[\frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j \right. \\ &+ \left. \frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j \right] A_{k, k+q}^\mu \beta_{k+q, k}^{\nu, j} \\ &+ \left[\frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \right. \\ &+ \left. \frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} \right] \alpha_{k, k+q}^{\mu, i} B_{k+q, k}^\nu \\ &+ \left[\frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j \right. \\ &+ \left. \frac{E_{\mathbf{k}} + g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j + \frac{E_{\mathbf{k}} - g_{\mathbf{k}}^m \tau_m}{ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}} \tau_i \frac{E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}+q}^n \tau_n}{ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q}} \tau_j \right] \alpha_{k, k+q}^{\mu, i} \beta_{k+q, k}^{\nu, j} \left. \right\} \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} \Pi^{\mu\nu}(q) &= \frac{1}{\beta} \sum_{ik_n, \mathbf{k}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+q}} \left\{ \right. \\ &\left[\frac{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+q}^m}{(ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}})(ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q})} + \frac{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+q} + g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+q}^m}{(ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}})(ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q})} \right. \\ &+ \left. \frac{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+q}^m}{(ik_n - \delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}})(ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} + E_{\mathbf{k}+q})} + \frac{E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+q} - g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+q}^m}{(ik_n - \delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}})(ik_n + i\omega_s - \delta_{\mathbf{k}+q} - E_{\mathbf{k}+q})} \right] A_{k, k+q}^\mu B_{k+q, k}^\nu \left. \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{-E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^l - i\varepsilon_{mnl}g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} A_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu,l} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^l - i\varepsilon_{mnl}g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} A_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu,l} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^l - i\varepsilon_{mnl}g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,l} B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{-E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^l - i\varepsilon_{mnl}g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,l} B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{-E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^l + i\varepsilon_{mnl}g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,l} B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^l + i\varepsilon_{mnl}g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,l} B_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) \delta_{nl} + i\varepsilon_{mnl} (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^m - E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) + g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l + g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\
& \quad \times \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu,l} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) \delta_{nl} - i\varepsilon_{mnl} (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^m - E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) + g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l + g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\
& \quad \times \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu,l} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) \delta_{nl} + i\varepsilon_{mnl} (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^m + E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) - g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l - g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\
& \quad \times \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu,l} \\
& + \sum_{\mathbf{k}} \frac{(E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + g_{\mathbf{k}}^m g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) \delta_{nl} - i\varepsilon_{mnl} (E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}g_{\mathbf{k}}^m + E_{\mathbf{k}}g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^m) - g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^l - g_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{2E_{\mathbf{k}}E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \\
& \quad \times \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu,l}. \tag{9}
\end{aligned}$$

όπου έχουμε θεωρήσει ότι οι κορυφές αλληλεπίδρασης δεν εξαρτώνται από την μποζονική συχνότητα. Αυτό μας επιτρέπει να αθροίσουμε ως προς τις φερμιονικές συχνότητες Matsubara, κάνοντας χρήση της θεωρίας των ολοκληρωτικών υπολοίπων. Έπειτα θα εξετάσουμε και το δυναμικό όριο, δηλαδή $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$,

που είναι ιδιαίτερος χρήσιμο κατά τη μελέτη θερμοηλεκτρικών φαινομένων μεταφοράς. Έχουμε λοιπόν

$$\begin{aligned}
\Pi^{\mu\nu}(i\omega_s, \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}) &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}}} + \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}}} \right] A_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu} B_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}}} - \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}}} \right] A_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \frac{g_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}}} - \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}}} \right] \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,l} B_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu} \frac{g_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}}} + \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}}} \right] \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \frac{g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}^2} \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + 2E_{\mathbf{k}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \left[\left(\delta_{nl} - \frac{g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}^2} \right) + \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k}}^m \right] \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}})}{i\omega_s - 2E_{\mathbf{k}}} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \left[\left(\delta_{nl} - \frac{g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}^2} \right) - \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k}}^m \right], \quad (10)
\end{aligned}$$

όπου εισαγάγαμε $\bar{E}_{\mathbf{k}} = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}} E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \rightarrow E_{\mathbf{k}}$. Με αυτόν τον τρόπο κρατούμε μια πεπερασμένη συνεισφορά για τις ενδοζωνικές διαδικασίες. Για παράδειγμα αυτός ο όρος μπορεί να μας δώσει τις διαμήχεις αγωγιμότητες εάν αγνοήσουμε τη συνεισφορά προσμίξεων. Παρ'όλ' αυτά, σε αυτήν την περίπτωση θα έχουμε μία κορυφή Drude, η οποία δείχνει ότι απαιτείται η εισαγωγή των προσμίξεων. Σε αυτήν την περίπτωση όπου αναζητούμε τις διαμήχεις αγωγιμότητες, είναι προτιμότερο να στραφούμε στη θεωρία Boltzmann για τα φαινόμενα μεταφοράς. Η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφεί απλούστερα

$$\begin{aligned}
\Pi^{\mu\nu}(i\omega_s, \mathbf{q} \rightarrow 0) &= \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}}} \left(A_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu} + \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} g_{\mathbf{k}}^n \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,n} \right) \left(B_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu} + \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} g_{\mathbf{k}}^l \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \right) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\bar{\delta}_{\mathbf{k}} - \bar{E}_{\mathbf{k}})}{i\omega_s + \delta_{\mathbf{k}} - \bar{\delta}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \bar{E}_{\mathbf{k}}} \left(A_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu} - \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} g_{\mathbf{k}}^n \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,n} \right) \left(B_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu} - \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} g_{\mathbf{k}}^l \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \right) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_F(\delta_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}) - n_F(\delta_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}})}{(i\omega_s - 2E_{\mathbf{k}})(i\omega_s + 2E_{\mathbf{k}})} \alpha_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\mu,n} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{\nu,l} \left[4E_{\mathbf{k}} \left(\delta_{nl} - \frac{g_{\mathbf{k}}^n g_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}^2} \right) - 2(i\omega_s) \frac{1}{E_{\mathbf{k}}} i\varepsilon_{mnl} g_{\mathbf{k}}^m \right]. \quad (11)
\end{aligned}$$