

# ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ



Δ.Π.Μ.Σ. Μικροσυστήματα και Νανοδιατάξεις

Διπλωματική Εργασία

Διεπιφάνειες τοπολογικού μονωτή με κύματα πυκνότητας  
φορτίου, σπιν και υπεραγώγιμες καταστάσεις τάξης

του Κυριάκου Δεστούνη

A.M: 09912005

Επιβλέπων Καθηγητής: Βαρελογιάννης Γεώργιος

Αθήνα, 6 Μαρτίου 2015

## Ευχαριστίες

Ύστερα από το πέρας της εργασίας αυτής θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον καθηγητή μου Γεώργιο Βαρελογιάννη, τόσο για την εμπιστοσύνη που έδειξε στο πρόσωπό μου αναθέτοντάς μου αυτή την εργασία, όσο και για την πολύτιμη βοήθεια, την εμπειρία και τις γνώσεις που μου προσέφερε σε όλο αυτό το διάστημα.

Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον υποψήφιο διδάκτορα του Ε.Μ.Π. Γεώργιο Λιβανά για τις γνώσεις, την υπομονή και την πολύτιμη βοήθεια που μου προσέφερε απλόχερα καθώς και τις αμέτρητες ώρες που αφιέρωσε για την επιτυχή εκπόνηση της διπλωματικής μου εργασίας.

Τέλος, θέλω να ευχαριστήσω θερμά τα μέλη της οικογενείας μου για την στήριξη που μου παρείχαν καθ' όλη τη διάρκεια των σπουδών μου καθώς και την κοπέλα μου Νεφέλη καθώς χωρίς την υποστήριξή της η εκπόνηση αυτής της εργασίας δεν θα ήταν εφικτή.

Δεστούνης Κυριάκος

## Περίληψη

Οι τοπολογικοί μονωτές αποτελούν νέες καταστάσεις της κβαντικής ύλης που δεν μπορούν να συνδεθούν με αδιαβατικό τρόπο με συμβατικούς μονωτές και ημιαγωγούς. Είναι ηλεκτρονικά υλικά τα οποία έχουν ενεργειακό χάσμα στο μέσο, όπως και ένας κοινός μονωτής, και τοπολογικά προστατευμένες μεταλλικές καταστάσεις στα άκρα ή στην επιφάνειά τους. Αυτές οι καταστάσεις καθίστανται δυνατές λόγω του συνδυασμού των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς και της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου. Τέτοιου είδους τοπολογικά υλικά έχουν προβλεφθεί θεωρητικά και έχουν παρατηρηθεί πειραματικά σε διάφορα είδη συστημάτων, συμπεριλαμβανομένου τα κβαντικά πηγάδια HgTe/CdTe, τα κράματα BiSb και τους κρυστάλλους Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> και Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία μελετώνται θεωρητικά και υπολογιστικά διεπιφάνειες τοπολογικού μονωτή (TI) με μονωτικές καταστάσεις τάξης, όπως το κύμα πυκνότητας φορτίου (CDW) και ο αντισιδηρομαγνήτης (AFM), και υπεραγωγίες, όπως ο s-wave (S-wave SC) και ο d-wave υπεραγωγός (D-wave SC) στον πραγματικό χώρο και στον χώρο των ορμών. Η μελέτη γίνεται με τη βοήθεια του μοντέλου Bernevig-Hughes-Zhang (BHZ), το οποίο προσομοιώνει στον πραγματικό χώρο έναν 2-D TI με 1-D μεταλλικές ιδιοκαταστάσεις άκρης υπό την ύπαρξη συνόρων, και του μοντέλου ενεργούς Χαμιλτονιανής, το οποίο προσομοιώνει στον χώρο των ορμών την επιφάνεια ενός 3-D TI, δηλαδή τις 2-D επιφανειακές μεταλλικές ιδιοκαταστάσεις. Αποδεικνύεται ότι ο τοπολογικός μονωτής εμφανίζει μεταλλικές ιδιοκαταστάσεις με ενέργεια μικρότερη του ενεργειακού χάσματος κατά την εφαρμογή συνόρου στο μοντέλο BHZ, καθώς και ότι στο σύνορο εμφανίζεται ρεύμα για κάθε προβολή του σπιν. Επίσης, με το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής δείχνεται ότι η ενεργειακή διασπορά των ιδιοκαταστάσεων στην επιφάνεια εμφανίζει κόνους Dirac στη ζώνη Brillouin, οι οποίοι μετατοπίζονται κατά την ύπαρξη χημικού δυναμικού στο σύστημα, διαφορετικά η επιφάνεια Fermi αποτελείται από κόμβους.

Αποδεικνύεται, επιπλέον, ότι στις διεπιφάνειες TI με CDW, AFM το ενεργειακό χάσμα των μονωτικών καταστάσεων υπερτερεί των μεταλλικών ιδιοκαταστάσεων άκρης και μεταφέρεται λόγω εγγύτητας σε όλο το εύρος της διεπιφάνειας. Στις διεπιφάνειες TI με S-wave SC αποδεικνύεται ότι το ενεργειακό χάσμα του S-wave SC υπερτερεί των μεταλλικών καταστάσεων άκρης και μεταφέρεται σε όλο το εύρος της διεπιφάνειας. Σύμφωνα με τον κανόνα των κουαρτέτων, η συνύπαρξη τριών παραμέτρων τάξης επάγει μια τέταρτη ώστε το γινόμενο των αναπαραστάσεων των τεσσάρων παραμέτρων τάξης στο χώρο  $\rho \times \tau \times \sigma$  να δίνει τον μοναδιαίο πίνακα. Συνεπώς, λόγω της επίδρασης της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στον S-wave SC

παρουσία χημικού δυναμικού ή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου επάγεται η p-wave παραμέτρος τάξης, η οποία και μελετάται. Για την περίπτωση της διεπιφάνειας TI με D-wave SC η εμφάνιση ενεργειακού χάσματος λόγω εγγύτητας στην επιφάνεια του TI δεν είναι αναμενόμενη, λόγω της ύπαρξης επιφάνειας Fermi στην ζώνη Brillouin αποτελούμενη από οκτώ κόμβους, όμως προκύπτει από τις προσομοιώσεις στο χώρο των ορμών. Αυτό οφείλεται στην σύζευξη της παραμέτρου τάξης του D-wave SC με τη διασπορά παρουσία αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς, καθώς επάγεται η p-wave παράμετρος τάξης η οποία και ευθύνεται για το χάσμα στον TI το οποίο εμφανίζεται σχεδόν ιστροπικό. Τα παραπάνω αποτελέσματα για τη διεπιφάνεια TI/D-wave SC έρχονται σε πλήρη συμφωνία με πρόσφατα πειραματικά δεδομένα κινεζικής ερευνητικής ομάδας τα οποία δημοσιεύθηκαν στο περιοδικό Nature Physics 9 το 2013. Ο κώδικας υλοποίησης των διεπιφανειών έχει αναπτυχθεί από τον κ. Γεώργιο Λιβανά, υποψήφιο διδάκτορα της Σχολής Ε.Μ.Φ.Ε. του Ε.Μ.Π., στο προγραμματιστικό πακέτο Matlab.

# Περιεχόμενα

<b>1</b>	<b>Πρώτη και Δεύτερη Κβάντωση</b>	<b>6</b>
1.1	Εισαγωγή . . . . .	6
1.2	Πρώτη Κβάντωση σε Μονοσωματιδιακά Συστήματα . . . . .	8
1.3	Πρώτη Κβάντωση σε Συστήματα Πολλών Σωματιδίων . . . . .	9
1.3.1	Συμμετρία μετάθεσης και μη διακρισιμότητα . . . . .	9
1.3.2	Οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις ως καταστάσεις βάσης . . . . .	10
1.3.3	Γενική μορφή τελεστών στην πρώτη κβάντωση . . . . .	12
1.4	Δεύτερη Κβάντωση . . . . .	13
1.4.1	Η αναπαράσταση του αριθμού κατάληψης . . . . .	13
1.4.2	Οι μποζονικοί τελεστές δημιουργίας και καταστροφής . . . . .	14
1.4.3	Οι φερμιονικοί τελεστές δημιουργίας και καταστροφής . . . . .	16
1.4.4	Γενική μορφή τελεστών στη δεύτερη κβάντωση . . . . .	17
1.4.5	Αλλαγή βάσης στη δεύτερη κβάντωση . . . . .	20
1.4.6	Τελεστές πεδίου και μετασχηματισμοί Fourier . . . . .	20
1.4.7	Καταστάσεις βάσης για συστήματα με διαφορετικά είδη σωματιδίων . . . . .	22
1.5	Στατιστική Μηχανική . . . . .	23
1.5.1	Συνάρτηση κατανομής μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων . . . . .	25
1.5.2	Συνάρτηση κατανομής μη αλληλεπιδρώντων μποζονίων . . . . .	25
<b>2</b>	<b>Φορμαλισμός Bogoliubov-de Gennes στο Εκτεταμένο Μοντέλο Hubbard</b>	<b>27</b>
2.1	Μοντέλο Hubbard . . . . .	27
2.1.1	Απλό μοντέλο Hubbard . . . . .	27
2.1.2	Εκτεταμένο μοντέλο Hubbard . . . . .	29
2.2	Προσέγγιση Μέσου Πεδίου . . . . .	30
2.3	Φορμαλισμός Bogoliubov-de Gennes . . . . .	33

<b>3</b>	<b>Θεωρία Υπεραγωγιμότητας</b>	<b>36</b>
3.1	Αυθόρμητο Σπάσιμο Συμμετρίας . . . . .	36
3.2	Σπάσιμο Ολικής Συμμετρίας Βαθμίδας . . . . .	38
3.3	Μικροσκοπική Θεωρία BCS . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Τοπολογικοί Μονωτές</b>	<b>46</b>
4.1	Τοπολογική Θεωρία Ζώνης . . . . .	47
4.1.1	Η μονωτική κατάσταση . . . . .	47
4.1.2	Η κβαντική κατάσταση Hall . . . . .	48
4.1.3	Το αναλλοίωτο TKNN . . . . .	48
4.2	2-D Τοπολογικοί Μονωτές . . . . .	49
4.2.1	Ενεργό μοντέλο 2-D τοπολογικού μονωτή σε κβαντικά πηγάρδια HgTe/CdTe . . . . .	50
4.2.2	Ακριβής λύση των ελικοειδών καταστάσεων άκρης . . . . .	55
4.3	3-D Τοπολογικοί Μονωτές . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Διεπιφάνειες TI/CDW, TI/AFM, TI/S-wave SC και TI/D-wave SC</b>	<b>59</b>
5.1	Μοντέλο Προσομοίωσης Διεπιφανειών . . . . .	59
5.2	Αριθμητικά Αποτελέσματα Μοντέλου Bernevig Hughes Zhang . . . . .	64
5.2.1	Προσομοίωση τοπολογικού μονωτή με το μοντέλο Bernevig Hughes Zhang	64
5.2.2	Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/κύματος πυκνότητας φορτίου (TI/CDW)	71
5.2.3	Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/S-wave υπεραγωγού (TI/S-wave SC)	77
5.3	Αριθμητικά Αποτελέσματα Μοντέλου Ενεργούς Χαμιλτονιανής . . . . .	82
5.3.1	Προσομοίωση τοπολογικού μονωτή με το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής	82
5.3.2	Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/αντισιδηρομαγνήτη (TI/AFM) . . . .	85
5.3.3	Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/S-wave υπεραγωγού (TI/S-wave SC)	92
5.3.4	Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/D-wave υπεραγωγού (TI/D-wave SC)	98
<b>6</b>	<b>Συμπεράσματα</b>	<b>111</b>
	<b>Βιβλιογραφία</b>	<b>114</b>

# Κεφάλαιο 1

## Πρώτη και Δεύτερη Κβάντωση

### 1.1 Εισαγωγή

Η κβαντική θεωρία είναι η πιο πλήρης μικροσκοπική θεωρία που υπάρχει σήμερα και δύναται να εξηγήσει την Φυσική της ενέργειας και της ύλης. Έχει εφαρμοστεί με επιτυχία στην επεξήγηση φαινομένων που απέχουν μεταξύ τους τάξεις μεγέθους, από την μελέτη των στοιχειωδών σωματιδίων της υποατομικής κλίμακας μέχρι τη μελέτη αστέρων νετρονίων και άλλων αστροφυσικών αντικειμένων της κοσμολογικής κλίμακας. Μόνο η συμπερίληψη της βαρύτητας έχει απομείνει ως άλυτο πρόβλημα στην στοιχειώδη κβαντική θεωρία.

Ιστορικά, η κβαντική φυσική ασχολήθηκε, αρχικά, με την κβάντωση της κίνησης των σωματιδίων (Heisenberg, Schrödinger, Dirac, 1925-26). Αργότερα, κβαντίστηκε το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο (Dirac, 1927) και ακόμη και τα ίδια τα σωματίδια αναπαράστηκαν από κβαντισμένα πεδία (Jordan, Wigner, 1928), οδηγώντας στην θεμελίωση της κβαντικής ηλεκτροδυναμικής (QED) και της κβαντικής θεωρίας πεδίου (QFT). Κατά σύμβαση, η αρχική μορφή της κβαντομηχανικής αναφέρεται ως πρώτη κβάντωση, ενώ η κβαντική θεωρία πεδίου ως δεύτερη κβάντωση.

Ανεξαρτήτως αναπαράστασης, είτε αυτή είναι πρώτη ή δεύτερη κβάντωση, υπάρχουν βασικές έννοιες για την διατύπωση της κβαντικής θεωρίας. Το σημείο εκκίνησης είναι η έννοια των κβαντικών καταστάσεων και των παρατηρήσιμων μεγεθών ενός συστήματος. Η κβαντική θεωρία απαιτεί όλες οι κβαντικές καταστάσεις να αναπαρίστανται από διανύσματα καταστάσεων σε ένα χώρο Hilbert, και όλα τα παρατηρήσιμα μεγέθη να αναπαρίστανται από Ερμιτιανούς τελεστές που δρουν στον χώρο αυτό. Παράλληλα διανύσματα καταστάσεων αντιπροσωπεύουν την ίδια φυσική κατάσταση, επομένως επιβάλλεται η χρήση κανονικοποιημένων διανυσμάτων καταστάσεων. Κάθε Ερμιτιανός τελεστής  $A$  έχει έναν αριθμό από  $|\psi_\alpha\rangle$  ιδιοκαταστάσεις, για τις οποίες ισχύει η σχέση  $A|\psi_\alpha\rangle = a|\psi_\alpha\rangle$ , όπου  $a$  πραγματικοί βαθμωτοί παράγοντες. Οι βαθμ-

μωτοί παράγοντες  $\alpha$  ονομάζονται ιδιοτιμές του τελεστή. Το σύνολο των ιδιοδιανυσμάτων κάθε Ερμιτιανού τελεστή σχηματίζει μια πλήρη βάση στο χώρο Hilbert. Γενικότερα, οι ιδιοκαταστάσεις  $|\psi_\alpha\rangle$  και  $|\phi_\beta\rangle$  δύο διαφορετικών Ερμιτιανών τελεστών  $A$  και  $B$  δεν είναι ίδιες. Εκτελώντας μέτρηση τύπου  $B$ , η χβαντική κατάσταση μεταβαίνει στην ιδιοκατάσταση  $|\phi_\beta\rangle$  του τελεστή  $B$ . Η παραπάνω κατάσταση μπορεί να εκφραστεί ως γραμμικός συνδυασμός των ιδιοκαταστάσεων  $|\psi_\alpha\rangle$  του τελεστή  $A$  ως εξής:

$$|\phi_\beta\rangle = \sum_{\alpha} |\psi_\alpha\rangle C_{\alpha\beta}. \quad (1.1)$$

Αν εκτελεστεί μέτρηση στην παραπάνω κατάσταση δεν μπορεί να προβλεφθεί με σιγουριά το αποτέλεσμα της. Αυτό σημαίνει ότι, η παραπάνω κατάσταση περιγράφεται από πιθανοτικούς όρους. Η πιθανότητα να προκύψει οποιοδήποτε ιδιοδιάνυσμα  $|\psi_\alpha\rangle$  ως αποτέλεσμα, δίνεται από την απόλυτη τιμή στο τετράγωνο  $|C_{\alpha\beta}|^2$  του συντελεστή επέκτασης. Το παραπάνω μη-αιτιατό στοιχείο της χβαντικής θεωρίας ονομάζεται κατάρρευση της κυματοσυνάρτησης. Ωστόσο, μεταξύ γεγονότων κατάρρευσης η χρονική εξέλιξη των χβαντικών καταστάσεων είναι πλήρως ντετερμινιστική. Η χρονική εξέλιξη μιας κυματοσυνάρτησης  $|\psi(t)\rangle$  διέπεται από τον κεντρικό τελεστή της χβαντομηχανικής, την Χαμιλτονιανή  $H$  (ο τελεστής που σχετίζεται με την ολική ενέργεια του συστήματος), μέσω της εξίσωσης Schrödinger

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = H |\psi(t)\rangle. \quad (1.2)$$

Κάθε διάνυσμα κατάστασης  $|\psi\rangle$  σχετίζεται με ένα συζυγές διάνυσμα κατάστασης  $(|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|$ . Με τα διανύσματα  $|\phi\rangle$  και  $\langle\psi|$  κατασκευάζονται εσωτερικά γινόμενα  $\langle\psi|\phi\rangle$  μεταξύ συζητών "bra" καταστάσεων  $\langle\psi|$  και "ket" καταστάσεων  $|\phi\rangle$ , στα οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί κλασική γεωμετρική ορολογία, για παράδειγμα το μέτρο στο τετράγωνο του  $|\psi\rangle$  δίνεται από το  $\langle\psi|\psi\rangle$ , και τα  $|\phi\rangle$  και  $|\psi\rangle$  είναι ορθογώνια αν  $\langle\psi|\phi\rangle = 0$ . Αν  $\{ |\psi_\alpha\rangle \}$  μια ορθοκανονική βάση του χώρου Hilbert, τότε ο συντελεστής  $C_{\alpha\beta}$  ευρίσκεται σχηματίζοντας τα εσωτερικά γινόμενα  $C_{\alpha\beta} = \langle\psi_\alpha|\phi_\beta\rangle$ . Μια επιπλέον σχέση μεταξύ του ευθέ και του συζηγούς χώρου Hilbert δίνεται από τη σχέση  $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$ , η οποία οδηγεί στον ορισμό των συζητών τελεστών. Για κάθε τελεστή  $A$  ο συζητής τελεστής  $A^\dagger$  ορίζεται απαιτώντας να ισχύει η ισότητα  $\langle\psi|A^\dagger|\phi\rangle \equiv \langle\phi|A|\psi\rangle$  για κάθε  $|\phi\rangle$  και  $|\psi\rangle$ .



## 1.2 Πρώτη Κβάντωση σε Μονοσωματιδιακά Συστήματα

Έστω μη σχετικιστικό σωματίδιο, για παράδειγμα ένα ηλεκτρόνιο με φορτίο  $-e$ , το οποίο κινείται σε εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο που περιγράφεται από το βαθμωτό δυναμικό  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  και το διανυσματικό δυναμικό  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ . Η αντίστοιχη Χαμιλτονιανή είναι

$$H = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_{\mathbf{r}} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - e\varphi(\mathbf{r}, t). \quad (1.3)$$

Μια ιδιοκατάσταση η οποία περιγράφει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο με σπιν πάνω, το οποίο ταξιδεύει μέσα σε κουτί όγκου  $V$ , μπορεί να γραφεί ως το γινόμενο ενός επίπεδου οδεύοντος κύματος και ενός σπιν πάνω σπίνορα. Χρησιμοποιώντας τον φορμαλισμό Dirac η κατάσταση γράφεται ως  $|\psi_{\mathbf{k}, \uparrow}\rangle = |\mathbf{k}, \uparrow\rangle$ . Η κυματοσυνάρτηση και η παραπάνω κατάσταση ket σχετίζονται ως εξής

$$\psi_{\mathbf{k}, \sigma}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}, \sigma \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \chi_{\sigma}, \quad (1.4)$$

δηλαδή, από το εσωτερικό γινόμενο της θέσης  $\langle r |$  με την κατάσταση  $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$ .

Ένα πλήρες σύνολο κβαντικών αριθμών δηλώνεται ως  $\nu$ . Για παράδειγμα, για ένα ηλεκτρόνιο που περιστρέφεται γύρω από σημειακό θετικά φορτισμένο πυρήνα, οι υδρογονοειδής ιδιοκαταστάσεις είναι  $|n, l, m, \sigma\rangle$  και το σύνολο των κβαντικών αριθμών θα είναι  $\nu = (n, l, m, \sigma)$ . Η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση στην αναπαράσταση θέσης θα είναι  $\psi_{\nu}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \nu \rangle$ . Η πληρότητα μια βάσης καταστάσεων και η κανονικοποίηση των διανυσμάτων καταστάσεων παίζουν σημαντικό ρόλο στην κβαντική θεωρία. Η κανονικοποίηση προϋποθέτει ότι ένα σωματίδιο με κυματοσυνάρτηση  $\psi_{\nu}(\mathbf{r})$  θα πρέπει να βρίσκεται με πιθανότητα μονάδα κάπου στον τρισδιάστατο χώρο, δηλαδή,  $\int d\mathbf{r} |\psi_{\nu}(\mathbf{r})|^2 = 1$ , ή αντίστοιχα στο φορμαλισμό Dirac,  $1 = \int d\mathbf{r} \langle \nu | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \nu \rangle = \langle \nu | \left( \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| \right) | \nu \rangle$ . Από την προηγούμενη σχέση προκύπτει η σχέση

$$\int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| = 1. \quad (1.5)$$

Παρομοίως, η πληρότητα ενός συνόλου καταστάσεων βάσης  $\psi_{\nu}(\mathbf{r})$  προϋποθέτει ότι αν ένα σωματίδιο βρίσκεται σε μια κατάσταση  $\psi(\mathbf{r})$  πρέπει να βρίσκεται με πιθανότητα μονάδα μεταξύ των τροχιακών του συνόλου βάσης, δηλαδή,  $\sum |\langle \nu | \psi \rangle|^2 = 1$ . Χρησιμοποιώντας τον φορμαλισμό

Dirac προκύπτει ότι

$$\sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu| = 1. \quad (1.6)$$

Η σχέση πληρότητας (1.6) χρησιμοποιείται τακτικά. Ένα παράδειγμα είναι η ανάλυση μιας κυματοσυνάρτησης σε μια οποιαδήποτε βάση ιδιοδιανυσμάτων, δηλαδή,  $\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | 1 | \psi \rangle = \langle \mathbf{r} | (\sum_{\nu} |\nu\rangle \langle \nu|) | \psi \rangle = \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle \langle \nu | \psi \rangle$ , το οποίο γράφεται ως

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\nu} \psi(\mathbf{r}) \left( \int d\mathbf{r}' \psi_{\nu}^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \right) \quad \text{ή} \quad \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \sum_{\nu} \langle \mathbf{r} | \nu \rangle \langle \nu | \psi \rangle. \quad (1.7)$$

## 1.3 Πρώτη Κβάντωση σε Συστήματα Πολλών Σωματιδίων

Μελετώντας συστήματα  $N$  ταυτοτικών σωματιδίων, προσθέτονται τρεις επιπλέον παραδοχές στις βασικές προϋποθέσεις που ορίζουν την κβαντική θεωρία. Η πρώτη παραδοχή είναι η επέκταση της μονοσωματιδιακής κυματοσυνάρτησης  $\psi(\mathbf{r})$ , η οποία είναι μια μιγαδική τρισδιάστατη κυματοσυνάρτηση, στην κυματοσυνάρτηση  $N$  σωματιδίων  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , η οποία είναι μια μιγαδική  $3N$ -διάστατη κυματοσυνάρτηση.

### 1.3.1 Συμμετρία μετάθεσης και μη διακρισιμότητα

Μια θεμελιώδη διαφορά μεταξύ κλασικής και κβαντικής μηχανικής αφορά τη μη διακρισιμότητα ταυτοτικών σωματιδίων. Στην κλασική μηχανική κάθε σωματίδιο μπορεί να εφοδιαστεί με ένα αναγνωριστικό σημάδι χωρίς να επηρεαστεί η συμπεριφορά του. Συνεπώς, κάθε σωματίδιο σε ένα σύνολο ταυτοτικών σωματιδίων μπορεί να αναγνωριστεί. Στην κβαντική μηχανική δεν συμβαίνει το ίδιο καθώς όχι μόνο δεν μπορεί κάθε σωματίδιο να εφοδιαστεί με αναγνωριστικό χωρίς να επηρεαστεί η φυσική του κατάσταση, αλλά και όταν ένας αριθμός από ταυτοτικά σωματίδια βρεθούν στην ίδια περιοχή του χώρου οι κυματοσυναρτήσεις τους επικαλύπτονται. Συνεπώς, αυτά καθίστανται μη διακρίσιμα μεταξύ τους.

Επομένως, η δεύτερη παραδοχή για συστήματα  $N$  σωματιδίων είναι η μη διακρισιμότητα ταυτοτικών σωματιδίων, δηλαδή σωματιδίων που χαρακτηρίζονται από τους ίδιους κβαντικούς αριθμούς, όπως τη μάζα, το φορτίο και το σπιν.

Από τη μη διακρισιμότητα των σωματιδίων συνεπάγεται ότι αν δύο συντεταγμένες σε ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων εναλλαγούν προκύπτει η ίδια φυσική κατάσταση, και η αντίστοιχη κυματοσυνάρτηση μπορεί να διαφέρει από την αρχική κατά ένα συντελεστή  $\lambda$ . Αν λοιπόν

οι ίδιες συντεταγμένες εναλλάγουν για δεύτερη φορά, προκύπτει η αρχική κυματοσυνάρτηση, δηλαδή,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) = \lambda^2 \psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (1.8)$$

οπότε προκύπτει ότι  $\lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$ . Επομένως, μόνο δύο είδη σωματιδίων είναι πιθανά στην κβαντομηχανική, τα μποζόνια και τα φερμιόνια:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = +\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{μποζόνια}), \quad (1.9)$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_N) = -\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_k, \dots, \mathbf{r}_j, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (\text{φερμιόνια}). \quad (1.10)$$

Η μη διακρισιμότητα οδηγεί αμέσως στα παρακάτω συμπεράσματα. Για τα φερμιόνια, οδηγεί στην απαγορευτική αρχή του Pauli η οποία αναφέρει ότι δεν μπορούν δύο ταυτοτικά φερμιόνια να καταλαμβάνουν την ίδια ενεργειακή στάθμη, διότι αν στην σχέση (1.10) ισχύει  $\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_k$ , τότε  $\psi = 0$ . Το παραπάνω εξηγεί την ύπαρξη των στοιχείων του περιοδικού πίνακα. Για τα μποζόνια, η μη διακρισιμότητα είναι αναγκαία για την κατανόηση του νόμου της ακτινοβολίας Planck για το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο, καθώς και των φαινομένων της συμπύκνωσης Bose-Einstein, της υπερρευστότητας και των lasers.

### 1.3.2 Οι μονοσωματιδιακές καταστάσεις ως καταστάσεις βάσης

Οι καταστάσεις βάσης για σύστημα  $N$  σωματιδίων μπορεί να κατασκευαστεί από οποιαδήποτε πλήρη ορθοκανονική μονοσωματιδιακή βάση  $\{\psi_\nu(\mathbf{r})\}$ ,

$$\sum_{\nu} \psi_\nu^*(\mathbf{r}') \psi_\nu(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad \int d\mathbf{r} \psi_\nu^*(\mathbf{r}) \psi_{\nu'}(\mathbf{r}) = \delta_{\nu, \nu'}. \quad (1.11)$$

Ξεκινώντας από μια τυχαία κατάσταση  $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$  και προβάλλοντάς την πάνω σε όλες τις καταστάσεις βάσης  $\psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j)$ , με  $j = 1, \dots, N$ , αποδεικνύεται ότι η κατάσταση μπορεί να γραφτεί ως

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} A_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N), \quad (1.12)$$

όπου  $A_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N}$  μιγαδικός συντελεστής. Συνεπώς, κάθε κατάσταση  $N$  σωματιδίων μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός πολλαπλασιαζόμενων καταστάσεων οι οποίες περιέχουν  $N$  συντελεστές μονοσωματιδιακών καταστάσεων βάσης.

Μολονότι οι καταστάσεις  $\prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j)$  σχηματίζουν σωστή μαθηματική βάση στο χώρο Hilbert των  $N$  σωματιδίων, δεν είναι ιδιαίτερα χρήσιμη καθώς οι συντεταγμένες δεν εμφανίζονται με συμμετρικό τρόπο και η φερμιονική ή μποζονική συμμετρία δεν μπορεί να σπάσει με διαταραχές. Η συμμετρία, όμως, είναι κρυμμένη στους συντελεστές  $A_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N}$ . Μια βάση με φυσικό νόημα ευρίσκεται εφαρμόζοντας τον μποζονικό τελεστή συμμετροποίησης  $\hat{S}_+$  ή τον φερμιονικό τελεστή συμμετροποίησης  $\hat{S}_-$ , οι οποίοι ορίζονται ως εξής:

$$\hat{S}_{\pm} \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_j) = \left| \begin{array}{cccc} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \end{array} \right|_{\pm}. \quad (1.13)$$

Η περίπτωση φερμιονίων περιλαμβάνει απλές ορίζουσες Slater,

$$\left| \begin{array}{cccc} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \end{array} \right|_- = \sum_{p \in S_N} \left( \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_{p(j)}) \right) \text{sign}(p), \quad (1.14)$$

ενω, η περίπτωση μποζονίων περιλαμβάνει ορίζουσα χωρίς πρόσημο, δηλαδή, την permanent,

$$\left| \begin{array}{cccc} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_N) \\ \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_2) & \cdots & \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N) \end{array} \right|_+ = \sum_{p \in S_N} \left( \prod_{j=1}^N \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}_{p(j)}) \right). \quad (1.15)$$

Η ομάδα  $S_N$  είναι η ομάδα των  $N!$  μεταθέσεων  $p$  στο σύνολο των  $N$  συντεταγμένων, και το  $\text{sign}(p)$ , στην ορίζουσα Slater, είναι το πρόσημο της μετάθεσης  $p$ . Παρατηρείται ότι στην περίπτωση φερμιονίων, αν  $\nu_j = \nu_k$  τότε  $\psi = 0$ , δηλαδή η αρχή του Pauli. Χρησιμοποιώντας τις συμμετροποιημένες καταστάσεις βάσης, η επέκταση (1.12) αντικαθίσταται με την συμμετρική σχέση

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{\nu_1, \dots, \nu_N} B_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N} \hat{S}_{\pm} \psi_{\nu_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{\nu_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{\nu_N}(\mathbf{r}_N), \quad (1.16)$$

όπου οι συντελεστές  $B_{\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_N}$  είναι πλήρως συμμετρικοί ως προς την εναλλαγή των συντελεστών  $\nu_j$ ,  $j = 1, \dots, N$ .

### 1.3.3 Γενική μορφή τελεστών στην πρώτη κβάντωση

Η τρίτη παραδοχή, για να ολοκληρωθεί η κβαντική θεωρία  $N$  σωματιδίων, αναφέρει ότι οι μονοσωματιδιακοί τελεστές καθώς και οι τελεστές λίγων σωματιδίων παραμένουν αμετάβλητοι όταν δρουν σε καταστάσεις  $N$  σωματιδίων.

Ένας μονοσωματιδιακός τελεστής  $T_j = T(\mathbf{r}_j, \nabla_{\mathbf{r}_j})$  που δρα σε μονοσωματιδιακές καταστάσεις και περιγράφεται από την συντεταγμένη  $\mathbf{r}_j$ , για παράδειγμα ο τελεστής κινητικής ενέργειας, γράφεται στην αναπαράσταση  $|\nu\rangle$  ως

$$T_j = \sum_{\nu_a, \nu_b} T_{\nu_a \nu_b} |\psi_{\nu_b}(\mathbf{r}_j)\rangle \langle \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j)|, \quad (1.17)$$

$$\text{όπου } T_{\nu_a \nu_b} = \int d\mathbf{r}_j \psi_{\nu_b}^*(\mathbf{r}_j) T(\mathbf{r}_j, \nabla_{\mathbf{r}_j}) \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j). \quad (1.18)$$

Σε ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων όλες οι συντεταγμένες πρέπει να εμφανίζονται με συμμετρικό τρόπο, επομένως ο κατάλληλος τελεστής πρέπει να είναι ο πλήρως συμμετρικός τελεστής

$$T_{\text{tot}} = \sum_{j=1}^N T_j. \quad (1.19)$$

Η δράση του παραπάνω τελεστή σε μια κατάσταση θα δίνεται από τη σχέση

$$T_{\text{tot}} |\psi_{\nu_{n_1}}(\mathbf{r}_1)\rangle |\psi_{\nu_{n_2}}(\mathbf{r}_2)\rangle \dots |\psi_{\nu_{n_N}}(\mathbf{r}_N)\rangle = \sum_{j=1}^N \sum_{\nu_a \nu_b} T_{\nu_a \nu_b} \delta_{\nu_a, \nu_{n_j}} |\psi_{\nu_{n_1}}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{\nu_b}(\mathbf{r}_j)\rangle \dots |\psi_{\nu_{n_N}}(\mathbf{r}_N)\rangle. \quad (1.20)$$

Το δέλτα του Kronecker προκύπτει από τη σχέση  $\langle \nu_a | \nu_{n_j} \rangle = \delta_{\nu_a, \nu_{n_j}}$ .

Ένας τελεστής δύο σωματιδίων  $V_{jk}$ , για παράδειγμα ο τελεστής αλληλεπίδρασης Coulomb, που δρα σε καταστάσεις δύο σωματιδίων και περιγράφεται από τις συντεταγμένες  $\mathbf{r}_j$  και  $\mathbf{r}_k$ , γράφεται στην αναπαράσταση  $|\nu\rangle$  ως

$$V_{jk} = \sum_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} V_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} |\psi_{\nu_c}(\mathbf{r}_j)\rangle |\psi_{\nu_d}(\mathbf{r}_k)\rangle \langle \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j)| \langle \psi_{\nu_b}(\mathbf{r}_k)|, \quad (1.21)$$

$$\text{όπου } V_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} = \int d\mathbf{r}_j d\mathbf{r}_k \psi_{\nu_c}^*(\mathbf{r}_j) \psi_{\nu_d}^*(\mathbf{r}_k) V(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) \psi_{\nu_a}(\mathbf{r}_j) \psi_{\nu_b}(\mathbf{r}_k). \quad (1.22)$$

Σε ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων όλες οι συντεταγμένες πρέπει να εμφανίζονται με συμμετρικό

τρόπο, επομένως ο κατάλληλος τελεστής πρέπει να είναι ο πλήρως συμμετρικός τελεστής

$$V_{\text{tot}} = \sum_{j>k}^N V_{jk} = \frac{1}{2} \sum_{j,k \neq j}^N V_{jk}. \quad (1.23)$$

Η δράση του παραπάνω τελεστή σε μια κατάσταση θα δίνεται από τη σχέση

$$\begin{aligned} V_{\text{tot}} |\psi_{\nu_{n_1}}(\mathbf{r}_1)\rangle |\psi_{\nu_{n_2}}(\mathbf{r}_2)\rangle \dots |\psi_{\nu_{n_N}}(\mathbf{r}_N)\rangle = \\ \frac{1}{2} \sum_{j \neq 1}^N \sum_{\nu_a \nu_b \nu_c \nu_d} V_{\nu_c \nu_d, \nu_a \nu_b} \delta_{\nu_a, \nu_{n_j}} \delta_{\nu_b, \nu_{n_k}} |\psi_{\nu_{n_1}}(\mathbf{r}_1)\rangle \dots |\psi_{\nu_c}(\mathbf{r}_j)\rangle \dots |\psi_{\nu_d}(\mathbf{r}_k)\rangle \dots |\psi_{\nu_{n_N}}(\mathbf{r}_N)\rangle. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Τελικά, η Χαμιλτονιανή για ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων που αλληλεπιδρούν ανά δύο θα έχει τη μορφή

$$H = T_{\text{tot}} + V_{\text{tot}} = \sum_{j=1}^N T_j + \frac{1}{2} \sum_{j,k \neq j}^N V_{jk}. \quad (1.25)$$

## 1.4 Δεύτερη Κβάντωση

Η Φυσική πολλών σωματιδίων διατυπώνεται στην αναπαράσταση της δεύτερης κβάντωσης ή αλλιώς στην αναπαράσταση του αριθμού κατάληψης. Η αρχή του φορμαλισμού είναι η έννοια της μη διακρισιμότητας των σωματιδίων σε συνδυασμό με την παρατήρηση ότι οι ορίζουσες και οι permanents μονοσωματιδιακών καταστάσεων σχηματίζουν μια βάση στον χώρο Hilbert των καταστάσεων  $N$  σωματιδίων. Θα δειχθεί ότι η κβαντική θεωρία μπορεί να διατυπωθεί σύμφωνα με τους αριθμούς κατάληψης των μονοσωματιδιακών καταστάσεων.

### 1.4.1 Η αναπαράσταση του αριθμού κατάληψης

Έστω ταξινομημένη πλήρης μονοσωματιδιακή βάση  $\{|\nu_1\rangle, |\nu_2\rangle, |\nu_3\rangle, \dots\}$ , όπου η ταξινόμηση είναι πρωταρχικής σημασίας για τα φερμιόνια. Υπάρχει δυνατότητα σχηματισμού αναπαράστασης στην οποία απλά θα μετράται ο αριθμός των σωματιδίων σε κάθε τροχιακό  $|\nu\rangle$ . Αυτό επιτυγχάνεται με την αναπαράσταση του αριθμού κατάληψης.

Οι καταστάσεις βάσης για ένα σύστημα  $N$  σωματιδίων στην αναπαράσταση του αριθμού

κατάληψης ευρίσκονται καταγράφοντας τους αριθμούς κατάληψης για κάθε κατάσταση βάσης,

$$|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, n_{\nu_3}, \dots\rangle, \quad \sum_j n_{\nu_j} = N, \quad (1.26)$$

όπου  $n_{\nu_j}$  ο αριθμός σωματιδίων κάθε κατάστασης και  $N$  ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων του συστήματος. Συνεπώς, ορίζονται οι τελεστές αριθμού κατάληψης  $\hat{n}_{\nu_j}$  με ιδιοκαταστάσεις τις καταστάσεις βάσης  $|n_{\nu_j}\rangle$  και ιδιοτιμές τους πραγματικούς αριθμούς  $n_{\nu_j}$ , δηλαδή,

$$\hat{n}_{\nu_j} |n_{\nu_j}\rangle = n_{\nu_j} |n_{\nu_j}\rangle. \quad (1.27)$$

Παρακάτω, θα δειχθεί ότι για φερμιόνια  $n_{\nu_j} = 0, 1$ , ενώ για μποζόνια  $n_{\nu_j} \geq 0$ , δηλαδή,

$$n_{\nu_j} = \begin{cases} 0, 1 & (\text{φερμιόνια}) \\ 0, 1, 2, \dots & (\text{μποζόνια}). \end{cases} \quad (1.28)$$

Ο χώρος της βάσης του αριθμού κατάληψης ονομάζεται χώρος Fock  $\mathcal{F}$ . Ορίζεται ως  $\mathcal{F} = \mathcal{F}_0 \oplus \mathcal{F}_1 \oplus \mathcal{F}_2 \oplus \dots$ , όπου  $\mathcal{F}_N = \text{span}\{|n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, n_{\nu_3}, \dots\rangle | \sum_j n_{\nu_j} = N\}$ .

### 1.4.2 Οι μποζονικοί τελεστές δημιουργίας και καταστροφής

Αρχικά, γίνεται σύνδεση μεταξύ πρώτης και δεύτερης κβάντωσης για τα μποζόνια. Έχοντας τον τελεστή αριθμού κατάληψης είναι εύλογο να οριστεί η έννοια του τελεστή δημιουργίας μποζονίων  $b_{\nu_j}^\dagger$ , ο οποίος αυξάνει τον αριθμό σωματιδίων της κατάστασης  $|\nu_j\rangle$  κατά 1, δηλαδή,

$$b_{\nu_j}^\dagger |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j}, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle = B_+(\nu_j) |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j} + 1, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle, \quad (1.29)$$

όπου  $B_+(\nu_j)$  είναι μια σταθερά κανονικοποίησης. Τα μόνα μη μηδενικά στοιχεία της μήτρας  $b_{\nu_j}^\dagger$  θα είναι τα  $\langle n_{\nu_j} + 1 | b_{\nu_j}^\dagger | n_{\nu_j} \rangle$ , όπου για λόγους συντομίας ο αριθμός κατάληψης γράφεται  $\nu_j$ . Αντίστοιχα, ορίζεται ο τελεστής καταστροφής μποζονίων  $b_{\nu_j} \equiv (b_{\nu_j}^\dagger)^\dagger$ , ο οποίος μειώνει τον αριθμό σωματιδίων της κατάστασης  $|\nu_j\rangle$  κατά 1, δηλαδή,

$$b_{\nu_j} |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j}, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle = B_-(\nu_j) |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j} - 1, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle. \quad (1.30)$$

Οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής είναι οι ακρογωνιαίοι λίθοι του φορμαλισμού αριθμού κατάληψης. Αποδεικνύεται ότι κάθε τελεστής μπορεί να εκφραστεί ως προς αυτούς.

Εφόσον τα μποζόνια ακολουθούν συμμετρική στατιστική πρέπει οι  $b_{\nu_j}^\dagger$  και  $b_{\nu_k}^\dagger$  να μετατί-

θενται, και άρα και οι  $b_{\nu_j}$  και  $b_{\nu_k}$  μετατίθενται, αφού είναι οι Ερμιτιανοί συζυγής τελεστές των προηγούμενων. Πρέπει, επίσης, όταν  $j \neq k$  οι τελεστές  $b_{\nu_j}$  και  $b_{\nu_k}^\dagger$  να μετατίθενται. Ωστόσο, η περίπτωση  $j = k$  χρίζει ιδιαίτερης προσοχής. Είναι φανερό ότι εφόσον σε μια μη κατελλημένη κατάσταση δεν μπορεί να αφαιρεθεί άλλο σωματίδιο πρέπει  $b_{\nu_j} |\dots, 0, \dots\rangle = 0$ , δηλαδή,  $B_-(0) = 0$ . Σε αυτό το φορμαλισμό υπάρχει η ελευθερία κανονικοποίησης των τελεστών ώστε  $B_+(0) = 1$ , δηλαδή,  $b_{\nu_j}^\dagger |\dots, 0, \dots\rangle = |\dots, 1, \dots\rangle$ . Αφού όμως,  $\langle 1 | b_{\nu_j}^\dagger | 0 \rangle^* = \langle 0 | b_{\nu_j} | 1 \rangle$ , θα ισχύει ότι  $B_-(1) = 1$ , δηλαδή,  $b_{\nu_j} |\dots, 1, \dots\rangle = |\dots, 0, \dots\rangle$ .

Επιπλέον, ορίζεται η άλγεβρα των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής μποζονίων από τις τρεις παρακάτω σχέσης μετάθεσης:

$$[b_{\nu_j}^\dagger, b_{\nu_k}^\dagger] = 0, \quad [b_{\nu_j}, b_{\nu_k}] = 0, \quad [b_{\nu_j}, b_{\nu_k}^\dagger] = \delta_{\nu_j, \nu_k}. \quad (1.31)$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω άλγεβρα, αποδεικνύεται ότι

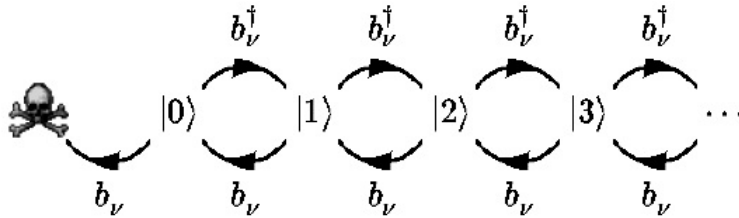
$$b_\nu^\dagger b_\nu = \hat{n}_\nu, \quad b_\nu^\dagger b_\nu |n_\nu\rangle = n_\nu |n_\nu\rangle, \quad n_\nu = 0, 1, 2, \dots \quad (1.32)$$

$$b_\nu |n_\nu\rangle = \sqrt{n_\nu} |n_\nu - 1\rangle, \quad b^\dagger |n_\nu\rangle = \sqrt{n_\nu + 1} |n_\nu + 1\rangle, \quad (b_\nu^\dagger)^{n_\nu} |0\rangle = \sqrt{n_\nu!} |n_\nu\rangle. \quad (1.33)$$

Η τελική αντιστοιχία της πρώτης με τη δεύτερη χβάντωση φαίνεται στην παρακάτω σχέση:

$$\hat{S}_+ |\psi_{\nu_{n_1}}(\tilde{\mathbf{r}}_1)\rangle |\psi_{\nu_{n_2}}(\tilde{\mathbf{r}}_2)\rangle \dots |\psi_{\nu_{n_N}}(\tilde{\mathbf{r}}_N)\rangle = b_{\nu_{n_1}}^\dagger b_{\nu_{n_2}}^\dagger \dots b_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle, \quad (1.34)$$

όπου κάθε μέλος περιγράφει σύστημα  $N$  σωματιδίων με πλήρως συμμετρικές καταστάσεις ως προς τον μονοσωματιδιακό δείκτη  $\nu_{n_j}$ . Στην Εικόνα 1.1 παρατηρείται η δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στο χώρο του αριθμού κατάληψης.



**Εικόνα 1.1:** Δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στο χώρο του αριθμού κατάληψης των μποζονίων.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [1], σελ. 12



### 1.4.3 Οι φερμιονικοί τελεστές δημιουργίας και καταστροφής

Όπως για τα μποζόνια έτσι και για τα φερμιόνια ορίζεται ο τελεστής δημιουργίας  $c_{\nu_j}^\dagger$  και ο τελεστής καταστροφής  $c_{\nu_j}$ , όπου

$$c_{\nu_j}^\dagger |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j}, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle = C_+(\nu_j) |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j} + 1, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle, \quad (1.35)$$

$$c_{\nu_j} |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j}, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle = C_-(\nu_j) |\dots, n_{\nu_{j-1}}, n_{\nu_j} - 1, n_{\nu_{j+1}}, \dots\rangle. \quad (1.36)$$

Σε αυτή τη περίπτωση, λόγω της φερμιονικής αντισυμμετρικής στατιστικής κατά την εναλλαγή σωματιδίων, πρέπει εκτός από τον αριθμό κατάληψης να δοθεί σημασία και στη σειρά των κατηλλημένων καταστάσεων. Συνεπώς, απαιτείται να ισχύει η σχέση

$$|\dots, n_{\nu_j} = 1, \dots, n_{\nu_k} = 1, \dots\rangle = -|\dots, n_{\nu_k} = 1, \dots, n_{\nu_j} = 1, \dots\rangle, \quad (1.37)$$

οπότε και οι τελεστές  $c_{\nu_j}^\dagger$  και  $c_{\nu_k}^\dagger$  πρέπει να αντιμετατίθενται, και άρα και οι  $c_{\nu_j}$  και  $c_{\nu_k}$  να αντιμετατίθενται, αφού είναι οι Ερμιτιανοί συζυγής τελεστές των προηγούμενων. Πρέπει, επίσης, όταν  $j \neq k$  οι τελεστές  $c_{\nu_j}$  και  $c_{\nu_k}^\dagger$  να αντιμετατίθενται. Ωστόσο, η περίπτωση  $j = k$  χρίζει ιδιαίτερης προσοχής και πάλι. Είναι φανερό ότι εφόσον σε μια μη κατελλημένη κατάσταση δεν μπορεί να αφαιρεθεί άλλο σωματίδιο πρέπει  $c_{\nu_j} |\dots, 0, \dots\rangle = 0$ , δηλαδή,  $C_-(0) = 0$ . Σε αυτό το φορμαλισμό υπάρχει η ελευθερία κανονικοποίησης των τελεστών ώστε  $C_+(0) = 1$ , δηλαδή,  $c_{\nu_j}^\dagger |\dots, 0, \dots\rangle = |\dots, 1, \dots\rangle$ . Αφού όμως,  $\langle 1|c_{\nu_j}^\dagger|0\rangle^* = \langle 0|c_{\nu_j}|1\rangle$ , θα ισχύει ότι  $C_-(1) = 1$ , δηλαδή,  $c_{\nu_j} |\dots, 1, \dots\rangle = |\dots, 0, \dots\rangle$ .

Επιπροσθέτως, ορίζεται η άλγεβρα των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής φερμιονίων από τις τρεις παρακάτω σχέσης αντιμετάθεσης:

$$\{c_{\nu_j}^\dagger, c_{\nu_k}^\dagger\} = 0, \quad \{c_{\nu_j}, c_{\nu_k}\} = 0, \quad \{c_{\nu_j}, c_{\nu_k}^\dagger\} = \delta_{\nu_j, \nu_k}. \quad (1.38)$$

Ένα άμεσο αποτέλεσμα των παραπάνω σχέσεων αντιμετάθεσης είναι οι παρακάτω σχέσεις:

$$(c_{\nu_j}^\dagger)^2 = 0, \quad (c_{\nu_j})^2 = 0. \quad (1.39)$$

Χρησιμοποιώντας την παραπάνω άλγεβρα, αποδεικνύεται ότι

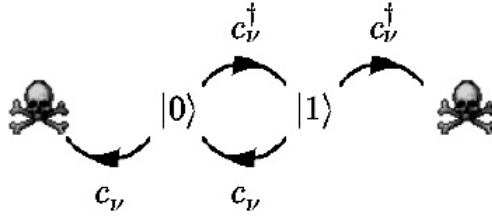
$$c_\nu^\dagger c_\nu = \hat{n}_\nu, \quad c_\nu^\dagger c_\nu |n_\nu\rangle = n_\nu |n_\nu\rangle, \quad n_\nu = 0, 1 \quad (1.40)$$

$$c_\nu |0\rangle = 0, \quad c_\nu^\dagger |0\rangle = 1, \quad c_\nu |1\rangle = 0, \quad c_\nu^\dagger |1\rangle = 0. \quad (1.41)$$

Η τελική αντιστοιχία της πρώτης με τη δεύτερη κβάντωση φαίνεται στην παρακάτω σχέση:

$$\hat{S}_- |\psi_{\nu_{n_1}}(\tilde{\mathbf{r}}_1)\rangle |\psi_{\nu_{n_2}}(\tilde{\mathbf{r}}_2)\rangle \dots |\psi_{\nu_{n_N}}(\tilde{\mathbf{r}}_N)\rangle = c_{\nu_{n_1}}^\dagger c_{\nu_{n_2}}^\dagger \dots c_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle, \quad (1.42)$$

όπου κάθε μέλος περιγράφει σύστημα  $N$  σωματιδίων με πλήρως αντισυμμετρικές καταστάσεις ως προς τον μονοσωματιδιακό δείκτη  $\nu_{n_j}$  σε συμφωνία με την απαγορευτική αρχή του Pauli. Στην Εικόνα 1.2 παρατηρείται η δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στο χώρο του αριθμού κατάληψης.



**Εικόνα 1.2:** Δράση των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής στο χώρο του αριθμού κατάληψης των φερμιονίων.<sup>1</sup>

#### 1.4.4 Γενική μορφή τελεστών στη δεύτερη κβάντωση

Όπως και στην πρώτη κβάντωση, έτσι και στη δεύτερη, οι μονοσωματιδιακοί τελεστές καθώς και οι τελεστές λίγων σωματιδίων παραμένουν αμετάβλητοι όταν δρουν σε καταστάσεις  $N$  σωματιδίων. Όλοι οι τελεστές εκφράζονται ως προς τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής. Η επανεγγραφή των τελεστών από τις σχέσεις (1.20) και (1.24) στη μορφή της δεύτερης κβάντωσης θα γίνει χρησιμοποιώντας τις ταυτότητες καταστάσεων βάσης (1.34) και (1.42) οι οποίες συνδέουν τις δύο αναπαραστάσεις.

Έστω ο μονοσωματιδιακός τελεστής  $T_{tot}$  της σχέσης (1.20) ο οποίος δρα σε ένα σύστημα  $N$  μποζονίων. Δρώντας αριστερά και δεξιά στην παραπάνω σχέση με τους μποζονικούς τελεστές συμμετροποίησης, γνωρίζοντας ότι οι  $T_{tot}$  και  $S_+$  μετατίθενται και επικαλώντας την ταυτότητα (1.34) προκύπτει

$$T_{tot} b_{\nu_{n_1}}^\dagger \dots b_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle = \sum_{\nu_a \nu_b} T_{\nu_b \nu_a} \sum_{j=1}^N \delta_{\nu_a, \nu_{n_j}} b_{\nu_{n_1}}^\dagger \dots b_{\nu_b}^\dagger \dots b_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle, \quad (1.43)$$

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [1],σελ. 14

όπου στο δεξί μέλος της εξίσωσης ο τελεστής  $b_{\nu_b}^\dagger$  βρίσκεται στη περιοχή του  $n_j$ . Για να γίνουν τα kets στα δύο μέλη παρόμοια, εστιάζεται η κατάσταση  $\nu \equiv \nu_{n_j}$ . Αρχικά, στο αριστερό μέλος, η κατάσταση  $\nu$  μπορεί να εμφανιστεί, για παράδειγμα,  $p$  φορές οδηγώντας σε συνεισφορά  $(b_\nu^\dagger)^p |0\rangle$ , με  $p > 0$  καθώς σε κάθε άλλη περίπτωση και τα δύο μέλη θα ήταν μηδενικά. Στο δεξί μέλος η αντίστοιχη συνεισφορά θα είναι  $b_{\nu_b}^\dagger (b_\nu^\dagger)^{p-1} |0\rangle$ . Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.31), (1.32) και (1.33) προκύπτει

$$b_{\nu_b}^\dagger (b_\nu^\dagger)^{p-1} |0\rangle = b_{\nu_b}^\dagger \left( \frac{1}{p} b_\nu b_\nu^\dagger \right) (b_\nu^\dagger)^{p-1} |0\rangle = \left( \frac{1}{p} b_{\nu_b}^\dagger b_\nu \right) (b_\nu^\dagger)^p |0\rangle. \quad (1.44)$$

Συνεπώς, οι  $p$  στο αριθμό τελεστές  $b_\nu^\dagger$  μπορούν να ανακατανεμηθούν στις αρχικές τους θέσεις όπως αυτές εμφανίζονται στην (1.43). Το άθροισμα στα  $j$  μαζί με το δέλτα του Kronecker  $\delta_{\nu_a, \nu_{n_j}}$  οδηγεί σε  $p$  πανομοιότυπες συνεισφορές, οπότε ο συντελεστής  $1/p$  απαλείφεται, οδηγώντας στο αποτέλεσμα

$$T_{\text{tot}} \left[ b_{\nu_{n_1}}^\dagger \cdots b_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle \right] = \sum_{a,b} T_{\nu_a, \nu_b} b_{\nu_b}^\dagger b_{\nu_a} \left[ b_{\nu_{n_1}}^\dagger \cdots b_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle \right]. \quad (1.45)$$

Εφόσον το παραπάνω αποτέλεσμα είναι έγκυρο για κάθε κατάσταση βάσης  $b_{\nu_{n_1}}^\dagger \cdots b_{\nu_{n_N}}^\dagger |0\rangle$ , προκύπτει η ταυτότητα μονοσωματιδιακού τελεστή  $T_{\text{tot}} = \sum_{i,j} T_{\nu_i, \nu_j} b_{\nu_i}^\dagger b_{\nu_j}$ .

Η γενίκευση του παραπάνω αποτελέσματος σε τελεστή δύο σωματιδίων (ή οποιουδήποτε αριθμού σωματιδίων) που δρα σε μποζόνια είναι άμεση και με παρόμοιο τρόπο. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.38), (1.40) και (1.41), εξάγονται οι αντίστοιχοι τελεστές για την περίπτωση φερμιονίων λαμβάνοντας υπ'όψιν το πρόσημο που εμφανίζεται στους αντιμεταθέτες. Υποθέτοντας ότι ο τελεστής  $a^\dagger$  υποδηλώνει είτε τον μποζονικό τελεστή  $b^\dagger$  είτε τον φερμιονικό τελεστή  $c^\dagger$ , προκύπτει η γενική μορφή του μονοσωματιδιακού τελεστή και του τελεστή δύο σωματιδίων στη δεύτερη χβάντωση:

$$T_{\text{tot}} = \sum_{\nu_i, \nu_j} T_{\nu_i \nu_j} a_{\nu_i}^\dagger a_{\nu_j}, \quad (1.46)$$

$$V_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{\nu_i, \nu_j, \nu_k, \nu_l} V_{\nu_i \nu_j \nu_k \nu_l} a_{\nu_i}^\dagger a_{\nu_j}^\dagger a_{\nu_l} a_{\nu_k}, \quad (1.47)$$

όπου  $T_{\nu_i \nu_j} = \langle \nu_i | T | \nu_j \rangle$  και  $V_{\nu_i \nu_j \nu_k \nu_l} = \langle \nu_i, \nu_j | V | \nu_k, \nu_l \rangle$ . Στην Εικόνα 1.3 παρατηρείται η γραφική αναπαράσταση των δύο παραπάνω στοιχειωδών τελεστών.

Οι τελεστές στη δεύτερη χβάντωση αποτελούνται από γραμμικούς συνδυασμούς γινομένων τελεστών δημιουργίας και καταστροφής ζυγοσταθμισμένοι με τα κατάλληλα στοιχεία μήτρας του τελεστή που υπολογίστηκε στην πρώτη χβάντωση. Η σειρά των δεικτών είναι άκρως

σημαντική στην περίπτωση των φερμιονικών τελεστών δύο σωματιδίων. Στην πρώτη χβάντωση τα στοιχεία μήτρας μπορούν να διαβαστούν ως μια μετάβαση που προκαλείται από την αρχική κατάσταση  $|\nu_k \nu_l\rangle$  στην τελική κατάσταση  $|\nu_i \nu_j\rangle$ . Στην δεύτερη χβάντωση η αρχική κατάσταση καταστρέφεται, καταστρέφοντας πρώτα την κατάσταση  $|\nu_k\rangle$  και ύστερα την  $|\nu_l\rangle$ , ενώ η τελική κατάσταση δημιουργείται, δημιουργώντας πρώτα την κατάσταση  $|\nu_j\rangle$  και ύστερα την κατάσταση  $|\nu_i\rangle$ , δηλαδή,

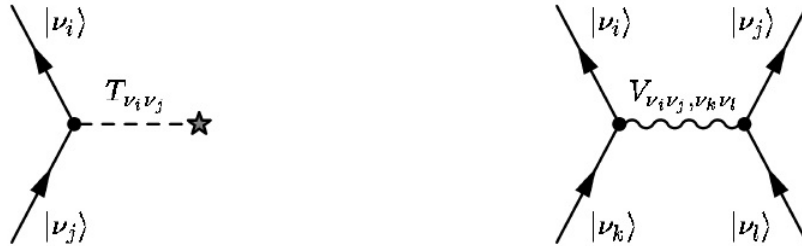
$$a_{\nu_l} a_{\nu_k} |\nu_k \nu_l\rangle = |0\rangle, \quad a_{\nu_i}^\dagger a_{\nu_j}^\dagger |0\rangle = |\nu_i \nu_j\rangle. \quad (1.48)$$

Παρατηρείται ότι οι ιδιότητες της συμμετρίας μετάθεσης διατηρούνται από την άλγεβρα του τελεστών  $a_\nu^\dagger$  και  $a_\nu$ .

Τελικά, η Χαμιλτονιανή στη δεύτερη χβάντωση για ένα σύστημα ταυτοτικών σωματιδίων τα οποία κινούνται με κινητική ενέργεια  $T$  παρουσία ενός εξωτερικού δυναμικού  $V$  και αλληλεπιδρούν μέσω του δυναμικού  $U$ , θα έχει τη μορφή

$$H = T_{\text{tot}} + V_{\text{tot}} = \sum_{\nu_i, \nu_j} T_{\nu_i \nu_j} a_{\nu_i}^\dagger a_{\nu_j} + \frac{1}{2} \sum_{\nu_i, \nu_j, \nu_k, \nu_l} U_{\nu_i \nu_j \nu_k \nu_l} a_{\nu_i}^\dagger a_{\nu_j}^\dagger a_{\nu_l} a_{\nu_k}, \quad (1.49)$$

όπου  $T_{\nu_i \nu_j} = \langle \nu_i | T + V | \nu_j \rangle$  και  $V_{\nu_i \nu_j \nu_k \nu_l} = \langle \nu_i, \nu_j | U | \nu_k, \nu_l \rangle$ .



**Εικόνα 1.3:** Γραφική αναπαράσταση μονοσωματιδιακού τελεστή και τελεστή δύο σωματιδίων στη δεύτερη χβάντωση. Τα εισερχόμενα και εξερχόμενα βέλη αναπαριστούν αρχικές και τελικές καταστάσεις, αντίστοιχα. Οι διακεκομμένες και λικνισμένες γραμμές αναπαριστούν τα πλάτη μετάβασης για τις αλληλεπιδράσεις ενός σωματιδίου και δύο σωματιδίων που περιέχονται στους τελεστές.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [1], σελ. 15

### 1.4.5 Αλλαγή βάσης στη δεύτερη κβάντωση

Διαφορετικοί τελεστές εκφράζονται σε διαφορετικές αναπαραστάσεις καθιστώντας την αλλαγής βάσης κεντρικό θέμα στην κβαντική φυσική.

Έστω  $\{|\psi_{\nu_1}\rangle, |\psi_{\nu_2}\rangle, \dots\}$  και  $\{|\tilde{\psi}_{\nu_1}\rangle, |\tilde{\psi}_{\nu_2}\rangle, \dots\}$  δύο πλήρεις ταξινομημένα σύνολα μονοσωματιδιακών βάσεων. Από τη γνωστή συνθήκη πληρότητας προκύπτει ο κανόνας μετασχηματισμού για μονοσωματιδιακές καταστάσεις:

$$|\tilde{\psi}_\mu\rangle = \sum_\nu |\psi_\nu\rangle \langle\psi_\nu|\tilde{\psi}_\mu\rangle = \sum_\nu \langle\tilde{\psi}_\mu|\psi_\nu\rangle^* |\psi_\nu\rangle. \quad (1.50)$$

Στην περίπτωση μονοσωματιδιακών συστημάτων ορίζονται με σαφή τρόπο οι τελεστές δημιουργίας  $a_\mu^\dagger$  και  $\tilde{a}_\mu^\dagger$  που αντιστοιχούν στα δύο σύνολα βάσεων. Από τη σχέση (1.50) προκύπτει ότι  $\tilde{a}_\mu^\dagger|0\rangle = |\tilde{\psi}_\mu\rangle = \sum_\nu \langle\tilde{\psi}_\mu|\psi_\nu\rangle^* a_\nu^\dagger|0\rangle$ , από την οποία προκύπτουν οι κανόνες μετασχηματισμού των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής

$$\tilde{a}_\mu^\dagger = \sum_\nu \langle\tilde{\psi}_\mu|\psi_\nu\rangle^* a_\nu^\dagger, \quad \tilde{a}_\mu = \sum_\nu \langle\tilde{\psi}_\mu|\psi_\nu\rangle a_\nu. \quad (1.51)$$

Οι κανόνες μετασχηματισμού (1.51) οδηγούν σε δύο σημαντικά αποτελέσματα. Πρώτον, ο μετασχηματισμός βάσης διατηρεί την μποζονική και φερμιονική στατιστική,

$$\begin{aligned} [\tilde{a}_{\mu_1}, \tilde{a}_{\mu_2}^\dagger]_\pm &= \sum_{\nu_j \nu_k} \langle\tilde{\psi}_{\mu_1}|\psi_{\nu_j}\rangle \langle\tilde{\psi}_{\mu_2}|\psi_{\nu_k}\rangle^* [a_{\nu_j}, a_{\nu_k}^\dagger]_\pm \\ &= \sum_{\nu_j \nu_k} \langle\tilde{\psi}_{\mu_1}|\psi_{\nu_j}\rangle \langle\psi_{\nu_k}|\tilde{\psi}_{\mu_2}\rangle \delta_{\nu_j, \nu_k} = \sum_{\nu_j} \langle\tilde{\psi}_{\mu_1}|\psi_{\nu_j}\rangle \langle\psi_{\nu_j}|\tilde{\psi}_{\mu_2}\rangle = \delta_{\mu_1, \mu_2}, \end{aligned} \quad (1.52)$$

και δεύτερον, ο μετασχηματισμός βάσης δεν επηρεάζει τον συνολικό αριθμό των σωματιδίων,

$$\sum_\mu \tilde{a}_\mu^\dagger \tilde{a}_\mu = \sum_\mu \sum_{\nu_j \nu_k} \langle\psi_{\nu_j}|\tilde{\psi}_\mu\rangle \langle\tilde{\psi}_\mu|\psi_{\nu_k}\rangle a_{\nu_j}^\dagger a_{\nu_k} = \sum_{\nu_j \nu_k} \langle\psi_{\nu_j}|\psi_{\nu_k}\rangle a_{\nu_j}^\dagger a_{\nu_k} = \sum_{\nu_j} a_{\nu_j}^\dagger a_{\nu_j}. \quad (1.53)$$

### 1.4.6 Τελεστές πεδίου και μετασχηματισμοί Fourier

Η αναπαράσταση δεύτερης κβάντωσης απαιτεί ιδιαίτερη προσοχή, καθώς η αναπαράσταση στον πραγματικό χώρο οδηγεί στον ορισμό των κβαντικών τελεστών πεδίου. Έστω το μετασχηματισμένο σύνολο βάσης  $\{|\tilde{\psi}_\mu\rangle\}$  από την προηγούμενη υποενότητα. Θεωρώντας το μετασχηματισμένο σύνολο ως το συνεχές σύνολο των καταστάσεων θέσης  $|\mathbf{r}\rangle$ , αποκρύπτωντας τον δείκτη

του σπιν και αντικαθιστώντας το  $\tilde{a}_\mu^\dagger$  με το  $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$  στην σχέση (1.51) προκύπτει

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) \equiv \sum_\nu \langle \mathbf{r} | \psi_\nu \rangle^* a_\nu^\dagger = \sum_\nu \psi_\nu^*(\mathbf{r}) a_\nu^\dagger, \quad \Psi(\mathbf{r}) \equiv \sum_\nu \langle \mathbf{r} | \psi_\nu \rangle a_\nu = \sum_\nu \psi_\nu(\mathbf{r}) a_\nu. \quad (1.54)$$

Παρατηρείται ότι οι  $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$  και  $\Psi(\mathbf{r})$  είναι τελεστές δεύτερης κβάντωσης, ενώ οι συντελεστές  $\psi_\nu^*(\mathbf{r})$  και  $\psi_\nu(\mathbf{r})$  είναι κυματοσυναρτήσεις πρώτης κβάντωσης. Κατά κάποιον τρόπο, ο τελεστής  $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$  είναι το άθροισμα όλων των πιθανών τρόπων που μπορεί να προστεθεί ένα σωματίδιο σε ένα σύστημα στη θέση  $\mathbf{r}$  σε οποιαδήποτε από τις καταστάσεις βάσης  $\psi_\nu(\mathbf{r})$ . Συνεπώς, αφού οι  $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$  και  $\Psi(\mathbf{r})$  είναι τελεστές δεύτερης κβάντωσης που ορίζονται σε κάθε σημείο του χώρου ονομάζονται κβαντικοί τελεστές πεδίου. Από τη σχέση (1.52) προκύπτουν άμεσα οι θεμελιώδεις σχέσεις μετάθεσης και αντιμετάθεσης,

$$[\Psi(\mathbf{r}_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2)] = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad \text{μποζονικό πεδίο} \quad (1.55)$$

$$\{\Psi(\mathbf{r}_1), \Psi^\dagger(\mathbf{r}_2)\} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad \text{φερμιονικό πεδίο.} \quad (1.56)$$

Η εισαγωγή των κβαντικών τελεστών πεδίου καθιστά εύκολη την γραφή τελεστών στην αναπαράσταση του πραγματικού χώρου. Εφαρμόζοντας τη σχέση (1.54) στον μονοσωματιδιακό τελεστή δεύτερης κβάντωσης (1.46) προκύπτει

$$\begin{aligned} T &= \sum_{\nu_i \nu_j} \left( \int d\mathbf{r} \psi_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) T_{\mathbf{r}} \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}) \right) a_{\nu_i}^\dagger a_{\nu_j} \\ &= \int d\mathbf{r} \left( \sum_{\nu_i} \psi_{\nu_i}^*(\mathbf{r}) a_{\nu_i}^\dagger \right) T_{\mathbf{r}} \left( \sum_{\nu_j} \psi_{\nu_j}(\mathbf{r}) a_{\nu_j} \right) = \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) T_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Επομένως, στην αναπαράσταση του πραγματικού χώρου, δηλαδή χρησιμοποιώντας τους τελεστές πεδίου, οι τελεστές δεύτερης κβάντωσης έχουν μορφή ανάλογη με αυτή των στοιχείων μήτρα πρώτης κβάντωσης.

Τέλος, δουλεύοντας σε ομογενή συστήματα είναι σκόπιμο να εκτελείται μετασχηματισμός μεταξύ πραγματικού χώρου και χώρου ορμών, το οποίο επιτυγχάνεται με το μετασχηματισμό Fourier. Αντικαθιστώντας στην (1.54) την βάση  $|\psi_\nu\rangle$  με την βάση του χώρου των ορμών  $|\mathbf{k}\rangle$  προκύπτει

$$\Psi^\dagger(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \quad \Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}}. \quad (1.58)$$

Ο αντίστροφος μετασχηματισμός προκύπτει πολλαπλασιάζοντας με  $e^{\pm i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$  και ολοκληρώνοντας

ως προς  $\mathbf{r}$ ,

$$a_{\mathbf{q}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \Psi^\dagger(\mathbf{r}), \quad a_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}). \quad (1.59)$$

### 1.4.7 Καταστάσεις βάσης για συστήματα με διαφορετικά είδη σωματιδίων

Στις προηγούμενες υποενότητες ορίστηκαν οι μποζονικοί και φερμιονικοί τελεστές. Όμως, μέχρι στιγμής δεν έχουν αντιμετωπιστεί συστήματα με διαφορετικού είδους σωματίδια τα οποία είναι συζευγμένα. Κλασικό παράδειγμα ενός τέτοιου συστήματος είναι τα ηλεκτρόνια σε ένα μέταλλο που αλληλεπιδρούν με τις πλεγματικές ταλαντώσεις (φωνόνια).

Τα παρακάτω γενικεύονται πολύ εύκολα για πιο περίπλοκα συστήματα. Έστω δύο διαφορετικά είδη σωματιδίων. Αρχικά, έστω ότι τα δύο διαφορετικά είδη σωματιδίων δεν αλληλεπιδρούν μεταξύ τους. Έστω ότι το πρώτο είδος σωματιδίων περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή  $H_1$  και από το πλήρες σύνολο καταστάσεων βάσης  $\{|\nu\rangle\}$ . Ομοίως, το δεύτερο είδος περιγράφεται από τα  $H_2$  και  $\{|\mu\rangle\}$ . Για τα δύο μη αλληλεπιδρώντα συστήματα ένα παράδειγμα ξεχωριστών συνόλων βάσης στην αναπαράσταση αριθμού κατάληψης είναι τα

$$|\psi^{(1)}\rangle = |n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots\rangle, \quad (1.60)$$

$$|\psi^{(2)}\rangle = |n_{\mu_1}, n_{\mu_2}, \dots, n_{\mu_j}, \dots\rangle. \quad (1.61)$$

Όταν εμφανίζεται αλληλεπίδραση  $H_{12}$  μεταξύ των δύο συστημάτων, πρέπει να μεγεθυνθεί ο χώρος Hilbert. Ο φυσικός ορισμός των αλληλεπιδρώντων καταστάσεων βάσης είναι το εξωτερικό γινόμενο των καταστάσεων, δηλαδή,

$$|\psi\rangle = |\psi^{(1)}\rangle |\psi^{(2)}\rangle \quad (1.62)$$

$$= |n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots\rangle |n_{\mu_1}, n_{\mu_2}, \dots, n_{\mu_l}, \dots\rangle \quad (1.63)$$

$$= |n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots; n_{\mu_1}, n_{\mu_2}, \dots, n_{\mu_l}, \dots\rangle. \quad (1.64)$$

Μια γενική κατάσταση  $|\Phi\rangle$  μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός καταστάσεων βάσης κατά τα γνωστά,

$$|\Phi\rangle = \sum_{\{\nu_j\}\{\mu_l\}} C_{\{\nu_j\}\{\mu_l\}} |n_{\nu_1}, n_{\nu_2}, \dots, n_{\nu_j}, \dots; n_{\mu_1}, n_{\mu_2}, \dots, n_{\mu_l}, \dots\rangle. \quad (1.65)$$

## 1.5 Στατιστική Μηχανική

Το βασικό αξίωμα της στατιστικής μηχανικής είναι το αξίωμα της εργοδικότητας. Το αξίωμα αυτό αναφέρει ότι καθώς ο χρόνος κυλάει ένα σύστημα καταλαμβάνει όλες τις πιθανές καταστάσεις που πληρούν τους εξωτερικούς περιορισμούς, για παράδειγμα τις καταστάσεις με ολική ενέργεια  $E$ . Με άλλα λόγια, λόγω της τυχαιότητας του συστήματος όλος ο διαθέσιμος χώρος φάσεων καλύπτεται. Ο χρόνος που χρειάζεται στο σύστημα για να καλύψει όλο το χώρο φάσεων ονομάζεται χρόνος εργοδικότητας.

Έστω ένα μικρό σύστημα που συνδέεται με τον υπόλοιπο κόσμο, γνωστό ως reservoir, και έστω ότι ως ολότητα τα δύο συστήματα αποτελούν ένα κλειστό σύστημα με ολική ενέργεια  $E_T$ . Η ενέργεια του μικρού συστήματος υποδηλώνεται ως  $E_s$  και η ενέργεια του υπόλοιπου κόσμου (reservoir) ως  $E_r$ , δηλαδή  $E_T = E_s + E_r$ . Σύμφωνα με το αξίωμα της εργοδικότητας συμπαίρνεται ότι η πιθανότητα ένα υποσύστημα να έχει καθορισμένη ενέργεια  $E_s$  είναι ανάλογη με τον αριθμό των τρόπων με τους οποίους το υποσύστημα μπορεί να καταλάβει αυτή την ενέργεια. Η πυκνότητα καταστάσεων ορίζεται ως  $d(E) = dN(E)/dE$ , όπου  $N(E)$  ο αριθμός των καταστάσεων με ενέργεια μικρότερη από  $E$ . Η πυκνότητα καταστάσεων του ολικού συστήματος θα είναι  $d(E_T)$ , ενώ το μικρό σύστημα και το reservoir έχει πυκνότητα καταστάσεων  $d_s(E_s)$  και  $d_r(E_r)$ , αντίστοιχα. Στη στατιστική μηχανική μελετώντας είτε κλασικό είτε κβαντικό σύστημα το οποίο συνδέεται με ένα reservoir, μια κατάσταση  $s$  με ενέργεια  $E_s$  εμφανίζει πιθανότητα κατάληψης, σύμφωνα με την κατανομή Boltzmann

$$P(E_s) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_s}, \quad (1.66)$$

όπου  $\beta = 1/k_B T$  και ο συντελεστής κανονικοποίησης,  $Z$ , η συνάρτηση επιμερισμού

$$Z = \sum_s e^{-\beta E_s}. \quad (1.67)$$

Η σχέση (1.67) ερμηνεύεται σωστά αν θεωρηθεί ότι το άθροισμα καταστάσεων εκτελείται στις ιδιοτιμές της Χαμιλτονιανής. Χρησιμοποιώντας τις καταστάσεις βάσης  $|\nu\rangle$ , όπου  $H|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle$ , είναι εύλογο να οριστεί ο τελεστής μήτρας πυκνότητας  $\rho$ , ο οποίος αντιστοιχεί στον κλασικό παράγοντα Boltzmann  $e^{-\beta E}$ ,

$$\rho \equiv e^{-\beta H} = \sum_\nu |\nu\rangle e^{-\beta E_\nu} \langle \nu|. \quad (1.68)$$



Επομένως, η συνάρτηση επιμερισμού μπορεί να γραφτεί και ως

$$Z = \sum_{\nu} \langle \nu | \rho | \nu \rangle = \text{Tr} [\rho]. \quad (1.69)$$

Με παρόμοιο τρόπο, η μέση τιμή οποιουδήποτε χβαντικού τελεστή  $A$  εκφράζεται με τη βοήθεια της μήτρας πυκνότητας  $\rho$ . Ακολουθώντας τον στοιχειώδη ορισμό προκύπτει

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\nu} \langle \nu | A | \nu \rangle e^{-\beta E_{\nu}} = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\rho A] = \frac{\text{Tr} [\rho A]}{\text{Tr} [\rho]}. \quad (1.70)$$

Οι σχέσεις (1.69) και (1.70) εκφράζονται ανεξαρτήτως βάσης, αφού το άθροισμα στις καταστάσεις οδηγεί σε ίχνος τελεστών. Στο κανονικό σύνολο το ίχνος είναι περιορισμένο να καλύπτει καταστάσεις με καθορισμένο αριθμό σωματιδίων.

Στο μεγαλοκανονικό σύνολο ο αριθμός των σωματιδίων δεν διατηρείται, καθώς ανταλλάσσονται σωματίδια με το reservoir, οπότε εισάγεται το χημικό δυναμικό  $\mu$  του reservoir. Αντικαθιστώντας  $H \rightarrow H - \mu N$ , όπου  $N$  ο τελεστής αριθμού σωματιδίων, η μήτρα πυκνότητας  $\rho_G$  και η συνάρτηση επιμερισμού  $Z_G$  του μεγαλοκανονικού συνόλου ορίζονται ως

$$\rho_G \equiv e^{-\beta(H-\mu N)}, \quad Z_G = \text{Tr} [\rho_G]. \quad (1.71)$$

Η νέα Χαμιλτονιανή του μεγαλοκανονικού συνόλου θα είναι

$$H_G \equiv H - \mu N. \quad (1.72)$$

Η συνάρτηση επιμερισμού παίζει πολύ σημαντικό ρόλο στη στατιστική φυσική. Παραδείγματος χάριν, η ελεύθερη ενέργεια  $F \equiv U - TS$  και το θερμοδυναμικό δυναμικό  $\Omega \equiv U - TS - \mu N$  σχετίζονται άμεσα με τις συναρτήσεις επιμερισμού  $Z$  και  $Z_G$ , αντίστοιχα, με τον εξής τρόπο:

$$Z = e^{-\beta F}, \quad (1.73)$$

$$Z_G = e^{-\beta \Omega}. \quad (1.74)$$

Η ελεύθερη ενέργεια ελαχιστοποιείται όταν η εντροπία μεγιστοποιείται, αφού

$$F = U - TS = \langle H \rangle - TS. \quad (1.75)$$

Σε διάφορες προσεγγιστικές μεθόδους, όπως τη θεωρία μέσου πεδίου που θα αναλυθεί στο

επόμενο κεφάλαιο, χρησιμοποιείται η αρχή ελαχιστοποίησης της ενέργειας. Αυτό σχετίζεται στην ανισότητα

$$F \leq \langle H \rangle_0 - TS_0, \quad (1.76)$$

όπου τα  $\langle H \rangle_0$  και  $S_0$  υπολογίζονται στην προσέγγιση  $\rho \approx \rho_0 = e^{-\beta H_0}$ , για παράδειγμα

$$\langle H \rangle_0 = \frac{\text{Tr} [\rho_0 H]}{\text{Tr} [\rho_0]}. \quad (1.77)$$

Η παραπάνω ανισότητα διαβεβαιώνει ότι ελαχιστοποιώντας την ελεύθερη ενέργεια που υπολογίστηκε από την προσεγγισμένη Χαμιλτονιανή, γίνεται η καλύτερη δυνατή προσέγγιση σύμφωνα με την δοκιμαστική Χαμιλτονιανή  $H_0$  που έχει επιλεγεί.

### 1.5.1 Συνάρτηση κατανομής μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων

Καθώς η θερμοκρασία αυξάνεται από το μηδέν σε ένα σύστημα μη αλληλεπιδρώντων φερμιονίων ο αριθμός κατάληψης για μεμονωμένες ιδιοκαταστάσεις ενέργειας ξεκινά να κυμαίνεται παρά να είναι συνεχώς 0 ή 1. Χρησιμοποιώντας το μεγαλοκανονικό σύνολο ευρίσκεται η κατανομή Fermi-Dirac  $n_F(\epsilon)$ .

Έστω η ηλεκτρονιακή κατάσταση  $|\mathbf{k}\sigma\rangle$  με ενέργεια  $\epsilon_{\mathbf{k}}$ . Η κατάσταση μπορεί να περιέχει 0 ή 1 ηλεκτρόνιο. Η μέση κατάληψη  $n_F(\epsilon_{\mathbf{k}})$  θα είναι

$$n_F(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{\text{Tr} [\rho_G n_{\mathbf{k}}]}{\text{Tr} [\rho_G]} = \frac{\sum_{n_{\mathbf{k}}=0,1} n_{\mathbf{k}} e^{-\beta(n_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu n_{\mathbf{k}})}}{\sum_{n_{\mathbf{k}}=0,1} e^{-\beta(n_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu n_{\mathbf{k}})}} = \frac{0 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}}{1 + e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} + 1}. \quad (1.78)$$

Από τη σχέση (1.78) παρατηρείται ότι η φυσική μονοσωματιδιακή μεταβλητή της ενέργειας είναι η  $\xi_{\mathbf{k}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ . Για μικρές διεγέρσεις οι ενέργειες  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  μεταβάλλονται γύρω από το  $\mu$  ενώ οι  $\xi_{\mathbf{k}}$  γύρω από το 0.

### 1.5.2 Συνάρτηση κατανομής μη αλληλεπιδρώντων μποζονίων

Με πανομοιότυπο τρόπο, χρησιμοποιώντας το μεγαλοκανονικό σύνολο, ευρίσκεται η κατανομή Bose-Einstein  $n_B(\epsilon)$ . Έστω μποζονική κατάσταση η οποία χαρακτηρίζεται από τη θεμελιώδη ενέργεια της  $\epsilon_{\mathbf{k}}$ . Ο αριθμός κατάληψης της κατάστασης μπορεί να είναι οποιοσδήποτε μη αρνητικός ακέραιος αριθμός. Στο μεγαλοκανονικό σύνολο ο μέσος αριθμός κατάληψης ευρίσκεται γράφοντας  $\lambda_{\mathbf{k}} = e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}$  και χρησιμοποιώντας τους τύπους  $\sum_{n=0}^{\infty} n \lambda^n = \lambda \frac{d}{d\lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n$  και

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n = \frac{1}{1-\lambda}:$$

$$n_B(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{\sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} n_{\mathbf{k}} e^{-\beta(n_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu n_{\mathbf{k}})}}{\sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} e^{-\beta(n_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu n_{\mathbf{k}})}} = \frac{\lambda_{\mathbf{k}} \frac{d}{d\lambda_{\mathbf{k}}} \sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \lambda_{\mathbf{k}}^{n_{\mathbf{k}}}}{\sum_{n_{\mathbf{k}}=0}^{\infty} \lambda_{\mathbf{k}}^{n_{\mathbf{k}}}} = \frac{\frac{\lambda_{\mathbf{k}}}{(1-\lambda_{\mathbf{k}})^2}}{\frac{1}{1-\lambda_{\mathbf{k}}}} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} - 1}. \quad (1.79)$$

Και οι δύο κατανομές συγκλίνουν στην κλασική κατανομή Maxwell-Boltzmann,  $n_{\mathbf{k}} = e^{\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}$ , για πολύ μικρούς αριθμούς κατάληψης.

## Κεφάλαιο 2

# Φορμαλισμός Bogoliubov-de Gennes στο Εκτεταμένο Μοντέλο Hubbard

### 2.1 Μοντέλο Hubbard

Είναι αυτονόητο ότι η ακριβής επίλυση μιας Χαμιλτονιανής πολλών σωματιδίων είναι πάρα πολύ δύσκολη αν όχι αδύνατη. Επομένως, πρέπει να χρησιμοποιηθεί κάποιο μοντέλο περιγραφής του συστήματος. Το μοντέλο Hubbard είναι το απλούστερο μοντέλο το οποίο περιγράφει ουσιαστικά δύο τάσεις. Η τάση της κινητικής ενέργειας (μεταπήδηση ηλεκτρονίων) προσπαθεί να απεντοπίσει τα ηλεκτρόνια σε καταστάσεις Bloch (οδεύουσες καταστάσεις) και οδηγεί σε μεταλλική συμπεριφορά ενώ η τάση αλληλεπίδρασης γειτονικών ηλεκτρονίων προσπαθεί να εντοπίσει τα ηλεκτρόνια σε θέσεις και οδηγεί σε μεταβάση Mott μονωτή (η μετάβαση Mott είναι μια συλλογική εντόπιση όλων των ηλεκτρονίων η οποία προκαλείται από μια αλληλεπίδραση).

#### 2.1.1 Απλό μοντέλο Hubbard

Η συνηθέστερη μορφή του απλού μοντέλου Hubbard μονής ζώνης στον πραγματικό χώρο περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (2.1)$$

όπου ο τελεστής  $c_{j\sigma}^{\dagger}$  δημιουργεί ένα ηλεκτρόνιο στην κατάσταση  $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$  με  $j$  δείκτη θέσης πλέγματος και σπιν  $\sigma$ ,  $\hat{n}_{i\sigma}$  ο τελεστής αριθμού κατάληψης,  $t$  ο συντελεστής μεταπήδησης και  $U$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης Coulomb. Οι φερμιονικοί τελεστές  $c_{j\sigma}^{\dagger}, c_{i\sigma}$  ακολουθούν

τις αντιμεταθετικές σχέσεις (1.38) με έναν επιπλέον δείκτη. Το άθροισμα στα κοντινότερα γειτονικά ζεύγη  $\langle i, j \rangle$  περιγράφει την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων, ή αλλιώς την ενέργεια μεταπήδησης ηλεκτρονίων μεταξύ κοντινότερων γειτονικών θέσεων

$$H_{band} = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (2.2)$$

και η ενέργεια των ζωνών είναι συνήθως κεντραρισμένη στο μηδέν<sup>1</sup>. Το μοντέλο στο οποίο η Χαμιλτονιανή περιέχει μόνο τον παραπάνω κινητικό όρο ονομάζεται tight binding. Ο όρος αλληλεπίδρασης

$$H_U = U \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} \quad (2.3)$$

περιγράφει την αλληλεπίδραση Coulomb μεταξύ των ηλεκτρονίων που μοιράζονται το ίδιο τροχιακό (πλεγματική θέση), επομένως, η αλληλεπίδραση είναι μικρής κλίμακας και τα ηλεκτρόνια κοντινών γειτονικών θέσεων δεν αλληλεπιδρούν. Ο συντελεστής  $U$  ορίζεται ως

$$U = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 |\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)|^2. \quad (2.4)$$

Ας σημειωθεί ότι το απλό μοντέλο Hubbard μονής ζώνης είναι ουσιαστικά μοντέλο μονού τροχιακού καθώς σε κάθε πλεγματική θέση υπάρχει μόνο ένα τροχιακό. Σε πλέγματα Bravais το μοντέλο μονού τροχιακού εμφανίζει μόνο μια ενεργειακή ζώνη, ενώ στα υπόλοιπα πλέγματα εμφανίζονται αρκετές ζώνες.

Η συμπεριφορά του μοντέλου σε μηδενική θερμοκρασία καθορίζεται από δύο παραμέτρους: την σχετική δύναμη αλληλεπίδρασης  $U/t$  και την πυκνότητα ηλεκτρονίων  $n = N/L$ , ή αλλιώς παράγοντα γεμίσματος, όπου  $N$  ο συνολικός αριθμός ηλεκτρονίων και  $L$  ο αριθμός πλεγματικών θέσεων.

Η γενική μορφή του απλού μοντέλου Hubbard θα είναι

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i, \sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (2.5)$$

όπου  $\mu$  το χημικό δυναμικό και  $\hat{N} = \sum_{i, \sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$  ο τελεστής συνολικού αριθμού σωματιδίων.

Το απλό μοντέλο Hubbard είναι ένα μοντέλο τεσσάρων καταστάσεων, με την έννοια ότι

---

<sup>1</sup>Η γενικότερη μορφή της (2.2) είναι  $H_{band} = \sum_{i, \sigma} \epsilon_0 \hat{n}_{i\sigma} - t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$ . Όταν η ενέργεια των ζωνών είναι κεντραρισμένη στο μηδέν τότε  $\epsilon_0 = 0$  και άρα απαλείφεται ο πρώτος όρος του δεξιού μέλους που περιγράφει την on-site ενέργεια των ηλεκτρονίων.

κάθε πλεγματική θέση μπορεί να βρίσκεται σε μια από τις τέσσερις παρακάτω καταστάσεις βάσης:

- $|0\rangle_j$  (η θέση  $j$  είναι άδεια) (2.6)

- $|\uparrow\rangle_j = c_{j\uparrow}^\dagger |0\rangle_j$  (η θέση  $j$  είναι κατειλημμένη με ένα ηλεκτρόνιο με σπιν  $\uparrow$ ) (2.7)

- $|\downarrow\rangle_j = c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle_j$  (η θέση  $j$  είναι κατειλημμένη με ένα ηλεκτρόνιο με σπιν  $\downarrow$ ) (2.8)

- $|d\rangle_j = c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger |0\rangle_j$  (η θέση  $j$  είναι διπλά κατειλημμένη) (2.9)

Στο χώρο των ορμών το απλό μοντέλο Hubbard γράφεται ως

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}, \quad (2.10)$$

όπου  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$  η σχέση διασποράς τρισδιάστατου πλέγματος με κυματάνυσμα  $\mathbf{k}$  το οποίο παίρνει διακριτές τιμές σύμφωνα με τη δομή του πλέγματος.

### 2.1.2 Εκτεταμένο μοντέλο Hubbard

Παρά την καλή συμπεριφορά του απλού μοντέλου Hubbard είναι αναγκαία η επέκτασή του για να εξηγηθούν συμπεριφορές σύγχρονων υλικών. Για αυτό το λόγο επεκτείνεται ώστε να υπάρξει αλληλεπίδραση μεταξύ απομακρυσμένων γειτονικών πλεγματικών σημείων με συντελεστή δυναμικού  $V$  και να υπάρξει δυνατότητα μεταπήδησης των ηλεκτρονίων σε απομακρυσμένες γειτονικές πλεγματικές θέσεις με συντελεστή ενέργειας μετάβασης  $t'$ . Το νέο μοντέλο ονομάζεται εκτεταμένο μοντέλο Hubbard.

Στο μοντέλο αυτό λαμβάνονται υπ' όψιν μόνο αλληλεπιδράσεις μικρής κλίμακας, δηλαδή στο ίδιο πλεγματικό σημείο και στα αμέσως επόμενα γειτονικά σημεία, ώστε να θεωρείται η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων με αντιπαράλληλα σπιν σημαντικότερη, αγνοώντας την περίπτωση αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίων με παράλληλα σπιν. Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου αυτού είναι

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + t' \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + V \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \quad (2.11)$$

Ο πρώτος όρος της παραπάνω σχέσης περιγράφει την ενέργεια μεταπήδησης στις κοντινότερες γειτονικές πλεγματικές θέσεις, ο δεύτερος όρος την ενέργεια μεταπήδησης στις επόμενες κον-

τινότερες γειτονικές πλεγματικές θέσεις, ο τρίτος όρος την ενέργεια αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ δύο ηλεκτρονίων στην ίδια πλεγματική θέση, ο τέταρτος όρος την ενέργεια αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων στις κοντινότερες γειτονικές πλεγματικές θέσεις και ο πέμπτος το χημικό δυναμικό του συστήματος. Ας σημειωθεί ότι η παραπάνω σχέση είναι γραμμένη σε γενική μορφή χωρίς να ληφθεί υπ' όψιν η γεωμετρία του πλέγματος. Για παράδειγμα, σε τρισδιάστατο τετραγωνικό απλό κυβικό πλέγμα οι όροι μεταπήδησης και αλληλεπίδρασης γειτονικών ηλεκτρονίων θα πρέπει να μετασχηματιστούν ώστε οι κοντινότεροι και επόμενοι κοντινότεροι γείτονες να είναι οι  $\rho = (\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)$  και  $\rho' = (\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (0, \pm 1, \pm 1)$ , αντίστοιχα, δηλαδή,

$$\begin{aligned}
H = & -t \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + t' \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho'} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\
& + V \sum_{i,j} \delta_{i,j+\rho} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} - \mu \sum_{j,\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}. \tag{2.12}
\end{aligned}$$

Στην περίπτωση εισαγωγής εξωτερικού μαγνητικού πεδίου στο σύστημα, προσθέτονται στην παραπάνω Χαμιλτονιανή οι επιπλέον όροι αλληλεπίδρασης του μαγνητικού πεδίου με το spin των ηλεκτρονίων  $-B \sum_i c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow}$  και  $B \sum_i c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}$ , δηλαδή

$$\begin{aligned}
H = & -t \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + t' \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho'} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\
& + V \sum_{i,j} \delta_{i,j+\rho} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} - \mu \sum_{j,\sigma} c_{j\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - B \sum_i c_{i,\uparrow}^{\dagger} c_{i,\uparrow} + B \sum_i c_{i,\downarrow}^{\dagger} c_{i,\downarrow}. \tag{2.13}
\end{aligned}$$

Οι παράμετροι που καθορίζουν τη συμπεριφορά του μοντέλου είναι η πυκνότητα ηλεκτρονίων ή παράγοντας γεμίσματος  $n$ , οι όροι μεταπήδησης  $t, t'$ , τα δυναμικά  $U, V$  και η θερμοκρασία του συστήματος  $T$ . Το σύστημα θα βρίσκεται στην περιοχή ισχυρών αλληλεπιδράσεων όταν  $|U| \gg t$  και  $|V| \gg t$ , ενώ για  $|U| \ll t$  και  $|V| \ll t$  το σύστημα θα βρίσκεται στην περιοχή των ασθενών αλληλεπιδράσεων.

## 2.2 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου

Η επίλυση ενός συστήματος αλληλεπιδρώντων σωματιδίων φαίνεται ότι απλοποιείται με τη χρήση του μοντέλου Hubbard. Όμως, ακόμη και με τη χρήση αυτού του μοντέλου εμφανίζονται όροι στην Χαμιλτονιανή οι οποίοι δεν μπορούν να υπολογιστούν επακριβώς, λόγω του μεγάλου πλήθους τελεστών που περιέχουν. Σε τέτοιες περιπτώσεις αρκεί να συμπεριληφθούν οι

αλληλεπιδράσεις κατά μέσο όρο, πράγμα που σημαίνει ότι η επίδραση των άλλων σωματιδίων συμπεριλαμβάνονται ως μια μέση πυκνότητα, ή ως μέσο πεδίο, οδηγώντας σε μονοσωματιδιακό πρόβλημα, το οποίο είναι επιλύσιμο. Τα μέσα πεδία επιλέγονται ώστε να ελαχιστοποιείται η ελευθερη ενέργεια του συστήματος και επομένως να διασφαλίζεται η συνέπεια της μεθόδου. Αυτή η προσεγγιστική μέθοδος ονομάζεται θεωρία μέσου πεδίου.

Έστω δύο τελεστές  $A, B$  οι οποίοι γράφονται ως το άθροισμα της μέσης τιμής συν της διακύμανσης γύρω από τη μέση τιμή τους, όπως φαίνεται παρακάτω:

$$A = \langle A \rangle + [A - \langle A \rangle], \quad (2.14)$$

$$B = \langle B \rangle + [B - \langle B \rangle]. \quad (2.15)$$

Το γινόμενο των τελεστών  $AB$  θα γράφεται σύμφωνα με τις παραπάνω σχέσεις ως εξής:

$$\begin{aligned} AB &= \langle A \rangle \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle + [A - \langle A \rangle][B - \langle B \rangle] \\ &= A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle + [A - \langle A \rangle][B - \langle B \rangle]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Κατά την προσέγγιση μέσου πεδίου ο τελευταίος όρος της (2.16), ο οποίος είναι τετραγωνικός ως προς τις διακυμάνσεις, αγνοείται οδηγώντας στη σχέση

$$AB \approx A \langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle. \quad (2.17)$$

Η παραπάνω προσέγγιση ουσιαστικά αποτελείται από τον τελεστή  $A$  συζευγμένο με το μέσο πεδίο του  $B$  συν τον  $B$  συζευγμένο με το μέσο πεδίο του  $A$  και για να αποφευχθεί διπλή μέτρηση αφαιρείται το γινόμενο των μέσων πεδίων  $\langle A \rangle \langle B \rangle$ . Για φερμιονικούς τελεστές  $c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger$  οι σχέσεις (2.14), (2.15) και (2.17) παίρνουν την παρακάτω μορφή:

$$c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} = \langle c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} \rangle + [c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} - \langle c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} \rangle], \quad (2.18)$$

$$c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} c_{i\sigma}^{(\dagger)} \approx c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} \langle c_{j\sigma'}^{(\dagger)} c_{i\sigma}^{(\dagger)} \rangle + \langle c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} \rangle c_{j\sigma'}^{(\dagger)} c_{i\sigma}^{(\dagger)} - \langle c_{i\sigma}^{(\dagger)} c_{j\sigma'}^{(\dagger)} \rangle \langle c_{j\sigma'}^{(\dagger)} c_{i\sigma}^{(\dagger)} \rangle. \quad (2.19)$$



Έστω τώρα ένα φερμιονικό σύστημα με Χαμιλτονιανή

$$H = H_0 + V_{\text{int}}, \quad (2.20)$$

$$H_0 = \sum_{i,\sigma} \epsilon_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (2.21)$$

$$V_{\text{int}} = \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} V_{ij\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} c_{i\sigma}. \quad (2.22)$$

Ο όρος αλληλεπίδρασης μπορεί να μετασχηματιστεί σε μονοσωματιδιακό χρησιμοποιώντας τη σχέση (2.19), δηλαδή θα γίνει

$$H = H_0 + V_{\text{MF}} \quad (2.23)$$

όπου

$$V_{\text{MF}} = \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} V_{ij\sigma\sigma'} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \langle c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle + c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle - \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle \langle c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle \right). \quad (2.24)$$

Συνεπώς, η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου  $H_{\text{MF}}$  είναι

$$H_{\text{MF}} = H_0 + V_{\text{MF}}. \quad (2.25)$$

Η ερώτηση που τίθεται είναι πώς υπολογίζονται τα μέσα πεδία  $\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle$  και  $\langle c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle$ . Ένας τρόπος είναι ο αυτοσυνεπής κατά τον οποίο υπολογίζοντας τα μέσα πεδία

$$\bar{n}_{i\sigma} \equiv \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle, \quad (2.26)$$

$$\bar{n}_{j\sigma'} \equiv \langle c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle, \quad (2.27)$$

και χρησιμοποιώντας την νέα Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου, προκύπτουν οι ίδιες τιμές αν είχαν υπολογιστεί τα μέσα πεδία με την αρχική Χαμιλτονιανή. Συνεπώς, θα ισχύει ότι

$$\bar{n}_{i\sigma} \equiv \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle_{\text{MF}} = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} \text{Tr} \left( e^{-\beta H_{\text{MF}}} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right), \quad (2.28)$$

$$\bar{n}_{j\sigma'} \equiv \langle c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \rangle_{\text{MF}} = \frac{1}{Z_{\text{MF}}} \text{Tr} \left( e^{-\beta H_{\text{MF}}} c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} \right), \quad (2.29)$$

όπου  $Z_{\text{MF}}$  η συνάρτηση επιμερισμού μέσου πεδίου

$$Z_{\text{MF}} = \text{Tr} (e^{-\beta H_{\text{MF}}}) . \quad (2.30)$$

Οι σχέσεις (2.28) και (2.29) ονομάζονται αυτοσυνεπής εξισώσεις, καθώς τα  $\bar{n}_{i\sigma}$  και  $\bar{n}_{j\sigma'}$  δίνονται ως προς τα  $H_{\text{MF}}$  και  $Z_{\text{MF}}$  τα οποία με τη σειρά τους εξαρτώνται από τα  $\bar{n}_{i\sigma}$  και  $\bar{n}_{j\sigma'}$ . Τελικά, η προσέγγιση μέσου πεδίου παρέχει μια συνεπή και φυσικά λογική μέθοδο μελέτης αλληλεπιδρώντων συστημάτων όπου οι συσχετίσεις των σωματιδίων δεν είναι τόσο σημαντικές. Ας σημειωθεί ότι για να καθίσταται η προσέγγιση έγκυρη πρέπει οι αποκλίσεις από τα μέσα πεδία να είναι αρκετά μικρές και άρα όχι σημαντικές. Αν αυτές δεν είναι αρκετά μικρές σημαίνει ότι είτε η παράμετρος μέσου πεδίου έχει επιλεγθεί λανθασμένα, είτε η μέθοδος αποτυγχάνει και πρέπει να χρησιμοποιηθεί διαφορετική προσέγγιστική μέθοδος.

## 2.3 Φορμαλισμός Bogoliubov-de Gennes

Μια Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου περιέχει μόνο μονοσωματιδιακούς τελεστές και μπορεί να επιλυθεί μετά από κατάλληλο μετασχηματισμό. Για την επίλυση οποιασδήποτε Χαμιλτονιανής της μορφής

$$H = \sum_{ij} \Psi_i^\dagger h_{ij} \Psi_j, \quad (2.31)$$

με  $h_{ij}$  ένα τετραγωνικό πίνακα και  $\Psi_i$  κατάλληλο σπίνορα, αρκεί η διαγωνοποίηση του πίνακα  $h_{ij}$  και στη συνέχεια το γέμισμα των ενεργειακών σταθμών που προκύπτουν ως ιδιοενέργειες με διεγερμένες καταστάσεις, με τρόπο που ικανοποιεί την απαγορευτική αρχή του Pauli. Η διαγωνοποίηση επιτυγχάνεται με τη βοήθεια του μετασχηματισμού Bogoliubov-de Gennes, ο οποίος μετασχηματίζει τον σπίνορα  $\Psi_i$  που περιέχει τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής  $c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}$  σε μια υπέρθεση κατάλληλων παραμέτρων του μετασχηματισμού επί τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής στη βάση των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής μέσου πεδίου  $\gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{n\sigma}$ .

Εισάγοντας το σπίνορα  $\Psi_i = \left( c_{i,\uparrow}, c_{i,\downarrow}, c_{i,\uparrow}^\dagger, c_{i,\downarrow}^\dagger \right)^T$  η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου παίρνει την παρακάτω συμπαγή μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \begin{bmatrix} \hat{H}_{i,j} & \hat{\Delta}_{i,j} \\ \hat{\Delta}_{i,j}^\dagger & -\hat{H}_{i,j}^* \end{bmatrix} \Psi_j, \quad (2.32)$$

όπου οι  $2 \times 2$  πίνακες  $\hat{H}_{i,j}$  και  $\hat{\Delta}_{i,j}$  περιλαμβάνουν μέσα πεδία τύπου σωματιδίου-οπής και

σωματιδίου-σωματιδίου αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι η μήτρα της Χαμιλτονιανής έχει την απαραίτητη Ερμιτιανή μορφή. Η επίλυση του συστήματος που αντιστοιχεί στην ανεύρεση των ιδιοενεργειών και των ιδιοκαταστάσεων που αντιστοιχούν στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος, επιτυγχάνεται εφαρμόζοντας τον παρακάτω μοναδιαίο μετασχηματισμό (Bogoliubov)  $\hat{U}$

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \hat{U} \hat{U}^\dagger H_{i,j} \hat{U} \hat{U}^\dagger \Psi_j = \Gamma^\dagger H^d \Gamma, \quad (2.33)$$

όπου  $H^d = \hat{U}^\dagger H \hat{U}$  η διαγώνια μορφή της Χαμιλτονιανής μήτρας με στοιχεία της διαγωνίου τις ιδιοτιμές του συστήματος  $E_n$ ,  $\Gamma = (\gamma_{i,\uparrow}, \gamma_{i,\downarrow}, \gamma_{i,\uparrow}^\dagger, \gamma_{i,\downarrow}^\dagger)^T = \hat{U}^\dagger \Psi_j$  ο ιδιοσπίνορας του συστήματος και  $\hat{U} = \begin{pmatrix} u_{n,i} & v_{n,i}^* \\ -v_{n,i} & u_{n,i}^* \end{pmatrix}$  η μοναδιαία μήτρα, όπου  $\hat{U} \hat{U}^\dagger = I$ , των ιδιοδιανυσμάτων με  $\sum_i |u_{n,i}|^2 + |v_{n,i}|^2 = 1$ . Ο παραπάνω μοναδιαίος μετασχηματισμός διαγωνοποιεί τη Χαμιλτονιανή εκφράζοντας τους τελεστές  $c, c^\dagger$  ως γραμμικό συνδυασμό των νέων τελεστών  $\gamma, \gamma^\dagger$  ως εξής:

$$c_{i,\uparrow} = \sum_n (\gamma_{n,\uparrow} u_{n,i} - \gamma_{n,\downarrow}^\dagger v_{n,i}^*), \quad (2.34)$$

$$c_{i,\downarrow} = \sum_n (\gamma_{n,\downarrow} u_{n,i} + \gamma_{n,\uparrow}^\dagger v_{n,i}^*), \quad (2.35)$$

$$c_{i,\uparrow}^\dagger = \sum_n (\gamma_{n,\uparrow}^\dagger u_{n,i}^* - \gamma_{n,\downarrow} v_{n,i}), \quad (2.36)$$

$$c_{i,\downarrow}^\dagger = \sum_n (\gamma_{n,\downarrow}^\dagger u_{n,i}^* + \gamma_{n,\uparrow} v_{n,i}). \quad (2.37)$$

Οι νέοι τελεστές θα πληρούν τις αντιμεταθετικές σχέσεις της φερμιονικής στατιστικής που διέπει του παλιούς τελεστές. Υπολογίζοντας τους μεταθέτες της Χαμιλτονιανής (2.32) με τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής  $c^\dagger, c$ , αξιοποιώντας τις σχέσεις που προκύπτουν από τις αντιμεταθετικές σχέσεις, και υπολογίζοντας τους μεταθέτες της διαγώνιας Χαμιλτονιανής (2.33) με τους  $c^\dagger, c$  προκύπτει σύστημα εξισώσεων, όπου οι στήλες του πίνακα μετασχηματισμού  $\hat{U}$  αποτελούν τις ιδιοκαταστάσεις του συστήματος και ικανοποιούν την παρακάτω εξίσωση ιδιοτιμών (Bogoliubov-de Gennes)

$$\begin{bmatrix} \hat{H}_{i,j} & \hat{\Delta}_{i,j} \\ \hat{\Delta}_{i,j}^\dagger & -\hat{H}_{i,j}^* \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_{n,j} \\ v_{n,j}^* \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_{n,i} \\ v_{n,i}^* \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

όπου  $E_n$  οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες του συστήματος. Έχοντας υπολογίσει τις ιδιοενέργειες και τις ιδιοκαταστάσεις του συστήματος μπορούν να υπολογιστούν οι τιμές των μέσων πεδίων.

Οι παράμετροι που προκύπτουν από την προσέγγιση μέσου πεδίου, π.χ. η παράμετρος  $\langle n_{i\sigma} \rangle$ , μπορούν να υπολογισθούν με τη βοήθεια του μετασχηματισμού Bogoliubov-de Gennes και τις εξισώσεις που προέκυψαν για τις άγνωστες παραμέτρους του μετασχηματισμού. Οι σχέσεις αυτές εκφράζουν τις παραμέτρους του μέσου πεδίου συναρτήσει των παραμέτρων του μετασχηματισμού οι οποίες εξαρτώνται από τις πρώτες, αποτελώντας εξισώσεις αυτοσυνέπειας οι οποίες επιλύονται αριθμητικά.

Με βάση τα παραπάνω, για την εύρεση των παραμέτρων υποθέτονται, αρχικά, τυχαίες τιμές για τις παραμέτρους μέσου πεδίου και στη συνέχεια επιλύεται το πρόβλημα ιδιοτιμών προσδιορίζοντας τις ιδιοενέργειες  $E_n$  και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Μέσω των εξισώσεων αυτοσυνέπειας υπολογίζονται οι νέες τιμές των παραμέτρων και η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι τη σύγκλιση των παραμέτρων σε πεπερασμένες ή μηδενικές τιμές.

## Κεφάλαιο 3

# Θεωρία Υπεραγωγιμότητας

Ένα από τα πιο εντυπωσιακά παραδείγματα της παραβίασης συμμετρίας βαθμίδας είναι η υπεραγωγίμη αλλαγή φάσης. Κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία το μέταλλο που μετατρέπεται σε υπεραγωγό εμφανίζει μηδενική ηλεκτρική αντίσταση και τέλειο διαμαγνητισμό (φαινόμενο Meissner), το οποίο σημαίνει ότι τα μαγνητικά πεδία αποβάλλονται πλήρως από το εσωτερικό του υλικού. Τα παραπάνω φαινόμενα προκύπτουν από τη νέα μορφή παραβίασης συμμετρίας της υπεραγωγίμης φάσης, την παραβίαση ολικής συμμετρίας βαθμίδας  $U(1)$ . Αξίζει να σημειωθεί ότι εκτός από την υπεραγωγιμότητα αυτή κάθε αυτή, και οι Meissner υπεραγωγοί εμφανίζουν έναν αριθμό από ιδιότητες, για παράδειγμα διακριτές μονοσωματιδιακές ιδιότητες, που οδηγούν στην εμφάνιση ενεργειακού χάσματος στο φάσμα διεγέρσεων.

Η νέα μορφή φάσης και η εμφάνιση ενεργειακού χάσματος διέγερσης εξηγούνται πλήρως από την θεωρία Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) που διατυπώθηκε το 1957. Είναι, πιθανώς, η πιο επιτυχημένη θεωρία στη φυσική στερεάς κατάστασης και έχει εφαρμογές σε άλλους κλάδους της Φυσικής, για παράδειγμα για να εξηγήσει την ευστάθεια πυρήνων με ζυγό αριθμό νουκλεονίων και στο Καθιερωμένο Πρότυπο της φυσικής υψηλών ενεργειών.

### 3.1 Αυθόρμητο Σπάσιμο Συμμετρίας

Για μια Χαμιλτονιανή με μια συγκεκριμένη συμμετρία (π.χ. συμμετρία μετατόπισης, συμμετρία περιστροφής, συμμετρία στο χώρο των σπιν) υπάρχει ένας τελεστής ο οποίος αντανακλά αυτή τη συμμετρία και συνεπώς μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή. Εφόσον ο τελεστής και η Χαμιλτονιανή μετατίθενται, σύμφωνα με τη θεωρία των Ερμιτιανών τελεστών υπάρχει ένα σύνολο κοινών ιδιοκαταστάσεων. Έστω για παράδειγμα η περίπτωση ενός ρευστού όπου η Χαμιλτονιανή του έχει συμμετρία μετατόπισης, δηλαδή ο τελεστής μετατόπισης  $T(\mathbf{R})$  μετατίθεται με την

Χαμιλτονιανή,  $[H, T(\mathbf{R})] = 0$ . Ο τελεστής μετατόπισης μετατοπίζει όλες τις συντεταγμένες των σωματιδίων κατά  $\mathbf{R}$ . Συνεπώς, μπορεί να γραφτεί ως  $T = e^{i\mathbf{R}\cdot\mathbf{P}}$ , όπου  $\mathbf{P}$  ο τελεστής ολικής ορμής. Ο τελεστής ολικής ορμής είναι, επομένως, διατηρήσιμη ποσότητα και δίνεται από τη σχέση

$$\mathbf{P} = \hbar \sum_{\mathbf{k}\sigma} \mathbf{k} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.1)$$

Στη συνέχεια μπορεί να επιλεγεί μια ορθογώνια βάση καταστάσεων με καθορισμένη ολική ορμή, η  $|\mathbf{P}\rangle$ . Το παραπάνω γεγονός χρησιμοποιείται για να αποδειχθεί το μη φυσικό αποτέλεσμα της μη ύπαρξης κυμάτων πυκνότητας. Ένα κύμα πυκνότητας, με κυματαριθμό  $\mathbf{Q}$ , σημαίνει ότι ο μετασχηματισμός Fourier του τελεστή πυκνότητας

$$\rho(\mathbf{Q}) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}, \quad (3.2)$$

έχει πεπερασμένη αναμενόμενη τιμή. Όμως,

$$\langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mathbf{P}} e^{-\beta E_{\mathbf{P}}} \langle \mathbf{P} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} | \mathbf{P} \rangle = 0, \quad (3.3)$$

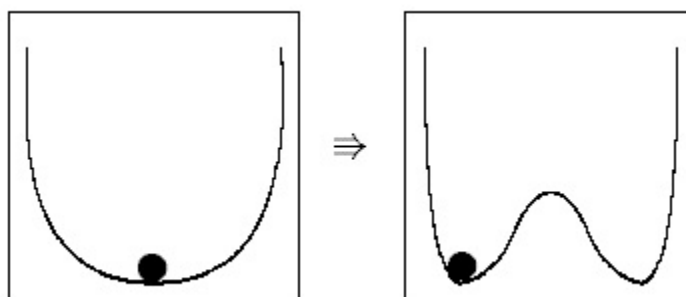
καθώς η κατάσταση  $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} | \mathbf{P} \rangle$  έχει ορμή  $\mathbf{P} - \mathbf{Q}$  και άρα είναι όρθογώνια στην κατάσταση  $\mathbf{P}$ . Τελικά, αποδείχθηκε ότι δεν υπάρχουν κρυσταλλικές δομές. Με παρόμοιο τρόπο μπορεί να αποδειχθεί ότι ο μαγνητισμός, η υπεραγωγιμότητα και άλλα πολύ γνωστά φυσικά φαινόμενα δεν μπορούν να συμβούν.

Το παραπάνω αποτέλεσμα προφανώς και είναι λάθος. Η απόδειξη καταρρέει όταν το άθροισμα των καταστάσεων στη αναμενόμενη τιμή περιορίζεται. Παρόλο που οι κρύσταλλοι με διαφορετικά χωρικά σημεία αναφοράς έχουν θεωρητικά την ίδια ενέργεια, ουσιαστικά δεν έχουν λόγω της μεγάλης ενέργειας που απαιτείται για να τηχθεί ένας κρύσταλλος και στη συνέχεια να ξανακρυσταλλωθεί σε μια νέα κατάσταση με μετατοπισμένο σημείο αναφοράς. Σε τέτοιες περιπτώσεις όπου πολλές καταστάσεις του συστήματος είναι εκφυλισμένες αλλά χωρίζονται από μεγάλα ενεργειακά φράγματα, δεν έχει νόημα να συμπεριλαμβάνονται αυτές επί ίσοις όροις στην αναμενόμενη τιμή, όπως στη σχέση (3.3), καθώς αντιστοιχούν μακροσκοπικά σε εντελώς διαφορετικές διαμορφώσεις. Επομένως, ο χώρος φάσης του συστήματος καταρρέει σε φυσικά διαχωριζόμενα τμήματα.

Όταν σε κάποιο κρίσιμο σημείο (θερμοκρασία, μαγνητικό πεδίο, πίεση) η θερμοδυναμική κατάσταση του συστήματος αναπτύσει μη μηδενική αναμενόμενη τιμή μιας μακροσκοπικής ποσότητας, η οποία έχει χαμηλότερη συμμετρία από αυτή της Χαμιλτονιανής, τότε το φαινόμενο

αυτό ονομάζεται αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας. Η πεπερασμένη ποσότητα η οποία υποδεικνύει την αλλαγή φάσης και το σπάσιμο της συμμετρίας ονομάζεται παράμετρος τάξης. Μερικά παραδείγματα παραμέτρων τάξης είναι το κύμα πυκνότητας στους κρυστάλλους, η μαγνήτιση στους σιδηρομαγνήτες και το συμπύκνωμα ζευγών Cooper στους υπεραγωγούς.

Ένα παράδειγμα είναι το μοντέλο διπλού φράγματος των αλλαγών φάσης (βλ. Εικόνα 2.1).



**Εικόνα 3.1:** Το μοντέλο του διπλού φράγματος.<sup>1</sup>

Στην παραπάνω εικόνα παρατηρείται ότι πάνω από το κρίσιμο σημείο το δυναμικό του συστήματος έχει καλώς ορισμένο ελάχιστο στο σημείο συμμετρίας και το σύστημα βρίσκεται σε κατάσταση υψηλής συμμετρίας. Κάτω από το κρίσιμο σημείο το δυναμικό μετατρέπεται σε διπλό πηγάδι δυναμικού και το σύστημα επιλέγει μεταξύ δύο καταστάσεων κενού. Παρόλο που το δυναμικό είναι ακόμη συμμετρικό το σύστημα θα παραμείνει μόνο σε ένα από τα δύο πηγάδια λόγω του μακροσκοπικά μεγάλου ενεργειακού χάσματος που τα χωρίζει και άρα η νέα κατάσταση του συστήματος θα έχει χαμηλότερη συμμετρία από αυτή του δυναμικού.

Τελικά, για να αποφευχθεί το παράδοξο της σχέσης (3.3) πρέπει να εισαχθεί στη θεωρία η δυνατότητα ύπαρξης μιας νέας φάσης του συστήματος. Στην προσέγγιση μέσου πεδίου αυτό επιτυγχάνεται συμπεριλαμβάνοντας την παράμετρο τάξης στις επιλογές των πεπερασμένων πεδίων και φυσικά αποδεικνύοντας ότι η προκύπτουσα Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου οδηγεί σε αυτοσυνεπή πεπερασμένο αποτέλεσμα.

## 3.2 Σπάσιμο Ολικής Συμμετρίας Βαθμίδας

Η συμμετρία βαθμίδας που παραβιάζεται για να προκύψει η υπεραγώγιμη φάση ενός υλικού ονομάζει ολική συμμετρία βαθμίδας  $U(1)$ , η οποία δηλώνει ότι δίνοντας σε όλα τα ηλεκτρόνια του υλικού μια επιπλέον σταθερή φάση  $e^{i\varphi}$  η Χαμιλτονιανή του συστήματος παραμένει αμετάβλητη.

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [1], σελ. 71

Μια αντίστοιχη περίπτωση είναι αυτή ενός σιδηρομαγνήτη όπου όλα τα σπιν του συστήματος μπορούν να περιστραφούν κατά μια γωνία χωρίς να μεταβληθεί η Χαμιλτονιανή. Συνεπώς, ο σιδηρομαγνήτης έχει ολική συμμετρία  $SO(3)$ . Σε αυτή τη περίπτωση, όταν σπάσει η ολική συμμετρία  $SO(3)$  η αναμενόμενη τιμή  $\langle \mathbf{S} \rangle$  δεν παραμένει αμετάβλητη στην περιστροφή των σπιν, καθώς θα αλλάξει την κατεύθυνση της μαγνήτισης. Με αντίστοιχο τρόπο η περιστροφή φάσης μεταβάλλει την παράμετρο τάξης της υπεραγωγίσιμης φάσης, η οποία είναι της μορφής  $\langle c_{\nu} c_{\nu'} \rangle$ . Επομένως, η παράμετρος τάξης του υπεραγωγού περιλαμβάνει την αναμενόμενη τιμή δύο τελεστών καταστροφής. Φυσικά και ο αριθμός των σωματιδίων διατηρείται.

Παρόλο που είναι ξεκάθαρο γιατί η πεπερασμένη αναμενόμενη τιμή  $\langle \mathbf{S} \rangle$  οδηγεί σε πεπερασμένη μαγνήτιση στην περίπτωση του σιδηρομαγνήτη, δεν είναι ξεκάθαρο γιατί η παραβιασμένη συμμετρία στην υπεραγωγίσιμη περίπτωση οδηγεί σε ένα σύστημα χωρίς αντίσταση. Υποστηρίχθηκε ότι η υπεραγωγίσιμη κατάσταση ενός υλικού είναι ευαίσθητη στις αλλαγές ολικής φάσης, αλλά είναι επίσης ξεκάθαρο ότι μια σταθερή φάση δεν μπορεί να έχει κάποια μετρήσιμη επίδραση καθώς όλες οι αναμενόμενες τιμές προκύπτουν από την απόλυτη τιμή του τετραγώνου της κυματοσυνάρτησης. Ωστόσο, οι κλίσεις φάσεων μπορούν να έχουν επίδραση στο σύστημα. Έστω, λοιπόν, ότι εφαρμόζεται μια φάση  $\varphi(\mathbf{r})$ , η οποία εξαρτάται από τη θέση, σε ένα υπεραγωγίσιμο σύστημα και η θέση μεταβάλλεται εξαιρετικά αργά, έτσι ώστε να χρειάζεται μια μακροσκοπική απόσταση για να εμφανιστούν σημαντικές διαφορές στην  $\varphi(\mathbf{r})$ . Για οποιοδήποτε άλλο μη υπεραγωγίσιμο σύστημα δεν υπάρχει νόημα εφαρμογής χβαντομηχανικών διαφορών φάσης σε μακροσκοπικές αποστάσεις, καθώς η χβαντική συνοχή καταστρέφεται από φαινόμενα σκέδασης σε πολύ μικρές κλίμακες μήκους. Συμπερασματικά, η υπεραγωγίσιμότητα είναι ένα μακροσκοπικό χβαντικό φαινόμενο.

Για να μελετηθούν οι συνέπειες της εισαγωγής φάσης στο σύστημα παρουσιάζεται ο μοναδιαίος μετασχηματισμός που αλλάζει τη φάση

$$U = \exp \left( i \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \right), \quad (3.4)$$

όπου  $\rho(\mathbf{r}) = \Psi^\dagger(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$  ο τελεστής πυκνότητας. Ο παραπάνω μοναδιαίος μετασχηματισμός έχει τις παρακάτω ιδιότητες όταν εφαρμοστεί στους χβαντικούς τελεστές πεδίου:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\mathbf{r}) &= U\Psi(\mathbf{r})U^{-1} = \exp \left( i \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) \exp \left( -i \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) \right) \\ &= \Psi(\mathbf{r}) \exp(-i\varphi(\mathbf{r})), \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\tilde{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) = U\Psi^\dagger(\mathbf{r})U^{-1} = \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \exp(i\varphi(\mathbf{r})). \quad (3.6)$$



Μετασχηματίζοντας τον τελεστή πυκνότητας και υπολογίζοντας την μετασχηματισμένη συνάρτηση επιμερισμού, προκύπτει

$$\tilde{Z} = \text{Tr}' [U e^{-\beta H} U^{-1}] = \text{Tr}' [e^{-\beta \tilde{H}}]. \quad (3.7)$$

Αν είχε εφαρμοστεί η κυκλική ιδιότητα του ίχνους, οι μοναδιαίοι μετασχηματισμοί  $U$  και  $U^{-1}$  θα είχαν αλληλοεξουδετερωθεί. Ωστόσο, διαπιστώθηκε προηγουμένως ότι τα συστήματα με παραβιασμένη συμμετρία χρίζουν διαφορετικής αντιμετώπισης, καθώς το άθροισμα στις καταστάσεις πρέπει να είναι περιορισμένο. Για αυτό τον λόγο η κυκλική ιδιότητα δεν εφαρμόζεται και ο περιορισμός του αθροίσματος υποδεικνύεται από το σύμβολο  $\text{Tr}'$ . Ο μόνος όρος που δεν παραμένει αμετάβλητος στην μετατόπιση φάσης είναι ο κινητικός όρος της Χαμιλτονιανής, καθώς ο όρος αλληλεπίδρασης Coulomb, ο όρος σκέδασης προσμίξεων και ο όρος φωνονιακής σύζευξης εξαρτάται από τον τελεστή πυκνότητας  $\rho(\mathbf{r})$ , ο οποίος σύμφωνα με τις σχέσεις (3.5) και (3.6) παραμένει αμετάβλητος κατά την μετατόπιση της φάσης. Ο κινητικός όρος γίνεται

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= \frac{1}{2m_e} \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) e^{i\varphi(\mathbf{r})} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\mathbf{A} \right)^2 e^{-i\varphi(\mathbf{r})} \Psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{1}{2m_e} \int d\mathbf{r} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left( \frac{\hbar}{i} \nabla + e\mathbf{A} - \hbar \nabla \varphi(\mathbf{r}) \right)^2 \Psi(\mathbf{r}) \\ &= H - \hbar \int d\mathbf{r} \nabla \varphi(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m_e} \int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) (\nabla \varphi(\mathbf{r}))^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Είναι γνωστό ότι στην υπεραγώγιμη κατάσταση η φάση είναι μια μακροσκοπική ποσότητα. Συνεπώς, θα ελαχιστοποιηθεί η ελεύθερη ενέργεια ως προς τη φάση ώστε να ευρεθεί η συνθήκη για την χαμηλότερη ελεύθερη ενέργεια. Από την (3.8) είναι ξεκάθαρο ότι η ενέργεια δεν εξαρτάται από την φάση  $\varphi(\mathbf{r})$ , αλλά από την κλίση της φάσης  $\nabla \varphi(\mathbf{r})$ . Επομένως,

$$\frac{\delta F}{\delta \nabla \varphi} = \frac{\delta \langle \tilde{H} \rangle}{\delta \nabla \varphi} = -\hbar \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}) \rangle + \frac{\hbar^2}{m_e} \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle \nabla \varphi(\mathbf{r}) = 0, \quad (3.9)$$

και άρα η ενέργεια ελαχιστοποιείται όταν το σύστημα φέρει ρεύμα, ακόμη και στη θερμοδυναμική ισοροπία, το οποίο δίνεται από τη σχέση

$$-\hbar \langle \mathbf{J}(\mathbf{r}) \rangle + \frac{\hbar^2}{m_e} \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle \nabla \varphi(\mathbf{r}) = 0 \Rightarrow \langle \mathbf{J} \rangle = \frac{\hbar \rho_0}{m_e} \nabla \varphi. \quad (3.10)$$

Η παραπάνω σχέση αποδεικνύει ότι εφαρμόζοντας μια κλίση φάσης το σύστημα ελαχιστοποιεί την ελεύθερη ενέργειά του φέροντας ρεύμα, ακόμη και στη θερμοδυναμική ισοροπία, πράγμα

που σημαίνει ότι το ρεύμα διατηρείται επί άπειρον. Στη κανονική κατάσταση των μετάλλων το ρεύμα σχετίζεται πάντα με μια κατάσταση εκτός ισοροπίας, όπου η ενέργεια διαχέεται διαρκώς από την οδηγό δύναμη και απορροφάται στον αγωγό. Προφανώς και υπάρχει ενεργειακό κόστος στο σύστημα για να φέρει το άπειρο ρεύμα, αλλά όσο αυτό το κόστος είναι μικρότερο από το κόστος στην κανονική κατάσταση το σύστημα παραμένει στην υπεραγώγιμη. Το κρίσιμο ρεύμα επιτυγχάνεται όταν τα ενεργειακά κόστη είναι ίσα για τις δύο καταστάσεις, και τότε ο υπεραγωγός μεταπίπτει στην κανονική κατάσταση.

Τελικά, αποδείχθηκε ότι εάν μια κλίση φάσης εφαρμοστεί σε ένα σύστημα, όπου η ενέργεια θεωρείται ότι εξαρτάται από διαφορές φάσης σε μακροσκοπική κλίμακα, αυτό αναπόφευκτά θα φέρει ρεύμα που διατηρείται επί άπειρον ώστε να ελαχιστοποιήσει το ενεργειακό κόστος της κλίσης φάσης. Ας σημειωθεί, λοιπόν, ότι η εμφάνιση του ενεργειακού χάσματος διέγερσης δεν αποτελεί λόγο ύπαρξης της υπεραγωγιμότητας αυτής καθέ αυτής. Η υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται λόγω της έλλειψης αναλλοιωτής βαθμίδας.

### 3.3 Μικροσκοπική Θεωρία BCS

Η κατανόηση της υπεραγωγιμότητας ως ένα φαινόμενο που σχετίζεται σθενά με την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωτονίου ήταν γεγονός στις αρχές του 1950. Επίσης, η ιδέα ότι η υπεραγωγιμότητα εμφανίζει ομοιότητες με τη συμπύκνωση Bose-Einstein, όπου τα μποζόνια είναι ζεύγη ηλεκτρονίων, είχε δοκιμαστεί και ήταν η υποκείμενη ιδέα της θεωρίας του London το 1935. Ωστόσο, το 1956 ο Cooper έδειξε ότι η επιφάνεια Fermi του μετάλλου κανονικής κατάστασης είναι ασταθής στο σχηματισμό ζευγών δέσμιων ηλεκτρονίων. Οι αρχές της υπεραγωγιμότητας έγιναν πλήρως γνωστές το 1957 όταν αναπτύχθηκε η μικροσκοπική θεωρία των Bardeen, Cooper και Schrieffer, ή αλλιώς θεωρία BCS.

Η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου που διαμεσολαβείται από φωνόνια έχει ένα εύρος συχνότητας και χώρου ορμών στο οποίο η αλληλεπίδραση είναι αρνητική, δηλαδή ελκτική. Αυτό συμβαίνει σε ανταλλαγές ενεργειών της τάξης της ενέργειας Debye,  $\omega_D$ , όπου στα μέταλλα είναι πολύ μικρότερη από την ενέργεια Fermi,  $\omega_D \ll E_F$ . Επιπλέον, από την αστάθεια Cooper είναι γνωστό ότι η αλληλεπίδραση που διαμεσολαβείται από φωνόνια τείνει να δημιουργεί ζεύγη ηλεκτρονίων με αντίθετο spin και ορμή.

Έστω ο τελεστής ζεύγους Cooper στον χώρο των ορμών

$$b_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}\downarrow}c_{-\mathbf{k}\uparrow}. \quad (3.11)$$

Το Χαμιλτονιανό μοντέλο BCS, το οποίο περιγράφει την υπεραγώγιμη κατάσταση είναι το

παρακάτω:

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (3.12)$$

όπου  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  η ενέργεια αλληλεπίδρασης η οποία είναι μη μηδενική για καταστάσεις με ενέργεια  $\xi_{\mathbf{k}}$  μεταξύ  $\xi_F \pm \omega_D$  και επιπλέον σταθερή και αρνητική,  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -V_0$ , σε αυτό το εύρος ενεργειών. Η αλληλεπίδραση συμπεριλαμβάνει μόνο όρους ζευγών και η απομένουσα αλληλεπίδραση συμπεριλαμβάνεται στην  $\xi_{\mathbf{k}}$  μέσω ενός επιπλέον όρου. Η προέλευση της ελκτικής αλληλεπίδρασης μπορεί να γίνει κατανοητή διασθητικά με τον παρακάτω τρόπο. Όταν ένα ηλεκτρόνιο διαδίδεται σε ένα κρύσταλλο έλκει τα θετικά ιόντα και ουσιαστικά δημιουργεί ένα θετικό μονοπάτι πίσω του. Αυτό το μονοπάτι γίνεται αισθητό από τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια ως ελκτική αλληλεπίδραση. Συνεπώς, αυτή η αλληλεπίδραση είναι πολύ σημαντική για ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν καταστάσεις με συμμετρία αντιστροφής χρόνου και ουσιαστικά μπορούν να δημιουργήσουν δέσμιες καταστάσεις που ονομάζονται ζεύγη Cooper. Το ζεύγος Cooper, συνεπώς, είναι μια δέσμια κατάσταση ενός ηλεκτρονίου στην κατάσταση  $\psi_{\nu}(\mathbf{r})$  και ενός ηλεκτρονίου στην κατάσταση  $\psi_{\nu}^*(\mathbf{r})$ , ή στην ομογενή περίπτωση ηλεκτρονίων στην κατάσταση  $\mathbf{k}$  και  $-\mathbf{k}$ .

Η υπόθεση που γίνεται από την BCS είναι η εξής: ο τελεστής ζεύγους έχει πεπερασμένη αναμενόμενη τιμή και συνεπώς αποκλίνει ελάχιστα από την μέση τιμή της. Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου BCS θα είναι

$$H_{\text{BCS}}^{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle, \quad (3.13)$$

όπου

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle. \quad (3.14)$$

Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου είναι τετραγωνική σε ηλεκτρονιακούς τελεστές. Για να επιλυθεί χρησιμοποιείται ο μετασχηματισμός Bogoliubov-de Gennes. Οπότε, η Χαμιλτονιανή γράφεται

$$\begin{aligned} H_{\text{BCS}}^{\text{MF}} &= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{H}_{\mathbf{k}} \mathbf{A}_{\mathbf{k}} + \text{constant}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

όπου

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (3.16)$$

Για να μετατραπεί η Χαμιλτονιανή σε διαγώνια μορφή, εισάγεται ο μοναδιαίος μετασχηματισμός

$$\mathbf{B}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbf{U}_{\mathbf{k}}^{-1} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{U}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix}, \quad (3.17)$$

ο οποίος διαγωνοποιεί τη Χαμιλτονιανή εάν

$$\mathbf{U}_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{H}_{\mathbf{k}} \mathbf{U}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} E_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & \tilde{E}_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (3.18)$$

Εκτελώντας τις αλγεβρικές πράξεις, προκύπτουν οι λύσεις για τα  $u, v$  και για τις ενέργειες  $E, \tilde{E}$

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad |v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (3.19)$$

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2} = -\tilde{E}_{\mathbf{k}}. \quad (3.20)$$

Οι φερμιονικοί τελεστές που διαγωνοποιούν τη Χαμιλτονιανή αποτελούνται από υπερθέσεις ηλεκτρονίων και οπών. Αυτοί οι τελεστές εμφανίζονται στη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου καθώς δεν τηρείται η διατήρηση των σωματιδίων. Από τη σχέση (3.17) προκύπτουν οι μετασχηματισμοί από του παλιούς τελεστές  $c_{\mathbf{k}}$  στους νέους  $\gamma_{\mathbf{k}}$  με τον εξής τρόπο

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^* & u_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} \\ \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (3.21)$$

και η Χαμιλτονιανή γίνεται

$$H_{\text{BCS}}^{\text{MF}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left( \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}\downarrow} \right) + \text{constant}. \quad (3.22)$$

Όπως φαίνεται από την παραπάνω Χαμιλτονιανή και τη σχέση (3.20), δεν μπορούν να υπάρξουν φερμιονικές διεγέρσεις με ενέργεια μικρότερη από  $|\Delta|$ . Η παράμετρος μέσου πεδίου παρέχει ένα ενεργειακό χάσμα, το οποίο και ονομάζεται υπεραγωγίμο χάσμα.

Η αυτοσυνεπής λύση ευρίσκεται από τη σχέση (3.14), η οποία ονομάζεται εξίσωση χάσματος, υπολογίζοντας την αναμενόμενη τιμή του δεξιού μέλους χρησιμοποιώντας την διαγωνοποιημένη

Χαμιλτονιανή. Πράγματι, με τη βοήθεια των σχέσεων (3.17), (3.19) και (3.20) προκύπτει

$$\begin{aligned}
\Delta_{\mathbf{k}} &= - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}'\downarrow} c_{\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \\
&= - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle (u_{\mathbf{k}'}^* \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} - v_{\mathbf{k}'} \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger) (u_{\mathbf{k}'}^* \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} + v_{\mathbf{k}'} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger) \rangle \\
&= - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left( u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \langle \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger \rangle - v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* \langle \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow} \gamma_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger \rangle \right) \\
&= - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} [1 - 2n_F(E_{\mathbf{k}'})], \tag{3.23}
\end{aligned}$$

όπου στο τελευταίο βήμα οι τελεστές της σχέσης (3.22) είναι ελεύθερα φερμιόνια και συνεπώς η συνάρτηση κατανομής τους είναι η γνωστή κατανομή Fermi-Dirac. Γνωρίζοντας ότι η ενέργεια αλληλεπίδρασης  $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$  είναι πεπερασμένη μόνο για  $\xi_{\mathbf{k}}, \xi_{\mathbf{k}'} \in [-\omega_D, \omega_D]$ , και ότι  $\omega_D \ll E_F$ , προκύπτει ότι

$$|\Delta| = V_0 \frac{d(E_F)}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{|\Delta|}{2E} [1 - 2n_F(E)], \tag{3.24}$$

και το χάσμα  $|\Delta|$  καθορίζεται από την ολοκληρωτική εξίσωση

$$\frac{2}{V_0 d(E_F)} = \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{\tanh\left(\beta \sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2/2}\right)}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}, \tag{3.25}$$

η οποία μπορεί να επιλυθεί αριθμητικά. Η κρίσιμη θερμοκρασία υπολογίζεται ορίζοντας  $\Delta = 0$  στην παραπάνω ολοκληρωτική εξίσωση και έτσι προκύπτει η σχέση

$$kT_C = 1.13\omega_D e^{-2/V_0 d(E_F)}. \tag{3.26}$$

Για μηδενική θερμοκρασία το χάσμα  $\Delta_0$  υπολογίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned}
\frac{2}{V_0 d(E_F)} &= \int_0^{\omega_D} d\xi \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + |\Delta_0|^2}} = \sinh^{-1} \frac{2\omega_D}{\Delta_0^2} \Rightarrow \\
\Delta_0 &= \frac{\omega_D}{\sinh(2/V_0 d(E_F))} \approx 2\omega_D e^{-2/V_0 d(E_F)}, \tag{3.27}
\end{aligned}$$

καθώς στα μέταλλα ο όρος  $V_0 d(E_F)$  είναι πάρα πολύ μικρός. Συνδυάζοντας τις σχέσεις (3.26) και (3.27) προκύπτει η πρόβλεψη BCS για τον λόγο του χάσματος προς την κρίσιμη θερμοκρα-

σία, δηλαδή

$$\frac{2\Delta_0}{kT_C} = 3.53. \quad (3.28)$$

Ο παραπάνω λόγος βρίσκεται σε μεγάλη συμφωνία με τα πειραματικά ευρήματα. Ας σημειωθεί ότι ο όρος αλληλεπίδρασης  $V_0$  εμφανίζεται με έναν μη διαταραχτικό τρόπο στις σχέσεις (3.26) και (3.27), καθώς η συνάρτηση  $e^{-1/x}$  δεν μπορεί να αναπτυχθεί κατά Taylor στο  $x = 0$ . Αυτό αποδεικνύει ότι το παραπάνω αποτέλεσμα δεν θα μπορούσε ποτέ να εξαχθεί με θεωρία διαταραχών οποιασδήποτε τάξης.

Η θεωρία BCS παρέχει ένα μοντέλο που περιγράφει επακριβώς την συμπεριφορά υπεραγωγών χαμηλής κρίσιμης θερμοκρασίας. Ωστόσο, δεν έχει γίνει ακόμη αντιληπτό με ποιό τρόπο μπορεί αυτή η θεωρία να βοηθήσει στην επεξήγηση της υπεραγωγιμότητας υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας καθώς και άλλων εξωτικών υπεραγωγικών υλικών.

## Κεφάλαιο 4

# Τοπολογικοί Μονωτές

Ένα πολύ σημαντικό θέμα έρευνας στο πεδίο της Φυσικής συμπυκνωμένης ύλης είναι η ανακάλυψη και ταξινόμηση των διακριτών φάσεων της ύλης. Συνήθως, οι φάσεις μπορούν να κατανοηθούν με τη χρήση της προσέγγισης του Landau, η οποία χαρακτηρίζει καταστάσεις ως προς υποκείμενες συμμετρίες οι οποίες παραβιάζονται αυθόρμητα. Τα τελευταία 30 χρόνια, η μελέτη του κβαντικού φαινομένου Hall οδήγησε σε ένα διαφορετικό πρότυπο ταξινόμησης, βασισμένο στην έννοια της τοπολογικής τάξης. Η κατάσταση η οποία ευθύνεται για το κβαντικό φαινόμενο Hall δεν σπάει κάποια συμμετρία, αλλά ορίζει μια τοπολογική φάση με την έννοια ότι συγκεκριμένες στοιχειώδης ιδιότητες είναι μη ευαίσθητες σε ομαλές αλλαγές των παραμέτρων του υλικού και δεν μπορούν να αλλάξουν εκτός αν το σύστημα διέλθει από μια κβαντική μετάβαση φάσης.

Τα τελευταία χρόνια ένα νέο πεδίο της Φυσικής συμπυκνωμένης ύλης εμφανίστηκε, το οποίο βασίζεται στην αντίληψη ότι η αλληλεπίδραση τροχιάς και σπιν μπορεί να οδηγήσει σε τοπολογικά μονωτικές ηλεκτρονικές καταστάσεις, και στην πρόβλεψη και παρατήρηση αυτών των φάσεων σε πραγματικά υλικά. Ένας τοπολογικός μονωτής, όπως και ένα μονωτής, έχει ένα ενεργειακό χάσμα στο μεγαλύτερο του μέρος το οποίο χωρίζει την υψηλότερη κατειλημμένη ηλεκτρονιακή ζώνη από την χαμηλότερη μη κατειλημμένη ζώνη. Η επιφάνεια (ή τα άκρα σε δύο διαστάσεις) ενός τοπολογικού μονωτή, ωστόσο, έχει απαραίτητως μεταλλικές καταστάσεις οι οποίες προστατεύονται από τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου. Οι τοπολογικοί μονωτές είναι στενά συσχετισμένοι με τη διδιάστατη ακέραια κβαντική κατάσταση Hall, η οποία επίσης περιέχει μεταλλικές καταστάσεις στα άκρα. Οι καταστάσεις άκρων ενός τοπολογικού μονωτή οδηγούν σε μια αγώγιμη κατάσταση με πρωτόγνωρες ιδιότητες. Επιπροσθέτως του στοιχειώδους ενδιαφέροντος που εμφανίζουν, αυτές οι καταστάσεις προβλέπεται να έχουν ειδικές ιδιότητες οι οποίες μπορούν να είναι χρήσιμες σε εφαρμογές όπως η σπιντρονική και ο κβαντικός υπολογισμός.

Η δισδιάστατη φάση τοπολογικού μονωτή εμφανίζεται πειραματικά σε κβαντικά πηγάδια HgTe/CdTe ενώ η τρισδιάστατη φάση τοπολογικού μονωτή εμφανίζεται στα υλικά Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> και Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>. Ένας νέος θεωρητικός τοπολογικός μονωτής ο οποίος εμφανίζει υπεραγώγιμη φάση στις ηλεκτρονικές καταστάσεις άκρων σε θερμοκρασία δωματίου ονομάζεται Stanene και αποτελείται από άτομα Sn οργανωμένα σε μονοδιάστατο στρώμα, όπως και το Γραφένιο. Προσθέτοντας άτομα F στο πλέγμα του Sn η κρίσιμη θερμοκρασία μπορεί να αυξηθεί μέχρι τους 100 °C.

## 4.1 Τοπολογική Θεωρία Ζώνης

### 4.1.1 Η μονωτική κατάσταση

Η μονωτική κατάσταση είναι η πιο βασική κατάσταση της ύλης. Ο απλούστερος μονωτής είναι ένας ατομικός μονωτής, όπου περιέχει δέσμια ηλεκτρόνια σε άτομα σε κλειστές τροχιές. Ένα τέτοιο υλικό είναι ηλεκτρικά αδρανές καθώς χρειάζεται πεπερασμένο ποσό ενέργειας για να αποσπαστεί ένα ηλεκτρόνιο. Ισχυρότερη αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων σε έναν κρύσταλλο οδηγεί σε ομοιοπολικό δεσμό. Η θεωρία ζώνης των στερεών υλικών παρέχει μια γλώσσα περιγραφής της ηλεκτρονικής δομής τέτοιων καταστάσεων και εκμεταλλεύεται τη συμμετρία μετατόπισης του κρυστάλλου για να ταξινομήσει ηλεκτρονικές καταστάσεις ως προς την κρυσταλλική τους ορμή  $\mathbf{k}$ , η οποία ορίζεται στην περιοδική ζώνη Brillouin. Οι καταστάσεις Bloch  $|u_m(\mathbf{k})\rangle$ , οι οποίες ορίζονται σε μια μοναδιαία κυψελίδα του κρυστάλλου, είναι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής Bloch  $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ . Οι ιδιοτιμές  $E_m(\mathbf{k})$  ορίζουν ενεργειακές ζώνες οι οποίες σχηματίζουν συνολικά τη δομή της ζώνης. Σε έναν μονωτή το ενεργειακό χάσμα χωρίζει τις κατειλημμένες καταστάσεις της ζώνης σθένους από τις μη κατειλημμένες καταστάσεις της ζώνης αγωγιμότητας. Παρόλο που το ενεργειακό χάσμα σε έναν ατομικό μονωτή, όπως το Αργό, είναι πολύ μεγαλύτερο από αυτό ενός ημιαγωγού, και τα δύο υλικά ανήκουν κατα κάποιο τρόπο στην ίδια φάση. Η Χαμιλτονιανή των δύο υλικών θα μπορούσε να παραμορφωθεί ομαλά με τέτοιο τρόπο χωρίς να κλείσει το ενεργειακό χάσμα. Μια τέτοια διαδικασία ορίζει μια τοπολογική ισοδυναμία μεταξύ διαφορετικών μονωτικών καταστάσεων. Υιοθετώντας ένα χονδροειδές τοπολογικό πρότυπο κατάταξης, το οποίο εξισώνει καταστάσεις με διαφορετικούς αριθμούς τετριμμένων ζωνών, προκύπτει ότι όλοι οι συμβατικοί μονωτές είναι ισοδύναμοι. Πράγματι, οι παραπάνω μονωτές είναι ισοδύναμοι με το κενό, το οποίο σύμφωνα με τη σχετικιστική κβαντική θεωρία του Dirac εμφανίζει ενεργειακό χάσμα (για τη δημιουργία ζεύγους ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου), ζώνη αγωγιμότητας (ηλεκτρόνια) και ζώνη σθένους (ποζιτρόνια).



### 4.1.2 Η χβαντική κατάσταση Hall

Σύμφωνα με τη θεωρία του Dirac όλες οι ηλεκτρονικές καταστάσεις που παρουσιάζουν ενεργειακό χάσμα πρέπει να είναι τοπολογικά ισοδύναμες με το κενό. Η παραπάνω πρόταση είναι προφανώς λάθος και τα αντιπαραδείγματα αποτελούν μια νέα κατάσταση της ύλης. Το πιο απλό αντιπαραδείγμα είναι η ακέραια χβαντική κατάσταση Hall, η οποία εμφανίζεται όταν ηλεκτρόνια περιορισμένα σε δύο διαστάσεις τοποθετηθούν σε ένα ισχυρό μαγνητικό πεδίο. Η χβάντωση των κυκλικών ηλεκτρονιακών τροχιών με κυκλοτρονική συχνότητα  $\omega_c$  οδηγεί στα χβαντισμένα επίπεδα Landau με ενέργεια  $\epsilon_m = \hbar\omega_c(m + 1/2)$ . Αν  $N$  επίπεδα είναι κατειλημμένα και τα υπόλοιπα είναι άδεια, τότε ένα ενεργειακό χάσμα χωρίζει τις κατειλημμένες από τις άδειες καταστάσεις όπως συμβαίνει και σε έναν μονωτή. Αντίθετα, όμως, από έναν μονωτή ένα ηλεκτρικό πεδίο προκαλεί ολίσθηση στις κυκλοτρονικές τροχιές, οδηγώντας σε ένα ρεύμα Hall το οποίο χαρακτηρίζεται από την χβαντισμένη αγωγιμότητα Hall

$$\sigma = \frac{Ne^2}{h}. \quad (4.1)$$

### 4.1.3 Το αναλλοίωτο TKNN

Η διαφορά μεταξύ ενός μονωτή και μιας χβαντικής κατάστασης Hall που περιγράφεται από την (4.1) εξηγήθηκε το 1982 από τους Thouless, Kohmoto, Nightingale και de Nijs (TKNN) και είναι θέμα τοπολογίας. Μια διδιάστατη δομή ζώνης αποτελείται από την απεικόνιση της χρυσταλλικής ορμής  $\mathbf{k}$  (η οποία είναι ορισμένη σε έναν δακτύλιο) στη Χαμιλτονιανή Bloch  $\mathcal{H}(\mathbf{k})$ . Οι δομές ζώνης με ενεργειακό χάσμα μπορούν να ταξινομηθούν τοπολογικά στις κλάσεις των ισοδύναμων  $\mathcal{H}(\mathbf{k})$  οι οποίες μπορούν να παραμορφωθούν με συνεχή τρόπο από τη μία στην άλλη χωρίς να κλείσει το ενεργειακό χάσμα. Αυτές οι κλάσεις διακρίνονται από ένα τοπολογικό αναλλοίωτο  $n \in \mathbb{Z}$ , το οποίο ονομάζεται αναλλοίωτο Chern.

Το αναλλοίωτο Chern μπορεί να γίνει κατανοητό με τη βοήθεια της φάσης Berry. Όταν η χρυσταλλική ορμή  $\mathbf{k}$  μεταδοθεί σε ένα κλειστό βρόχο, η κυματοσυνάρτηση Bloch  $|u_m(\mathbf{k})\rangle$  αποκτά μια καλώς ορισμένη φάση Berry, η οποία δίνεται από το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα του  $\mathcal{A}_m = i \langle u_m | \nabla_{\mathbf{k}} | u_m \rangle$ . Με τη βοήθεια του θεωρήματος Green, το επικαμπύλιο ολοκλήρωμα του  $\mathcal{A}_m$  ισούται με το επιφανειακό ολοκλήρωμα του στροβιλισμού της φάσης Berry, δηλαδή της ροής Berry  $\mathcal{F}_m = \nabla \times \mathcal{A}_m$ . Το αναλλοίωτο Chern είναι η ολική ροή Berry στη ζώνη Brillouin

$$n_m = \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{k} \mathcal{F}_m, \quad (4.2)$$

όπου  $n_m$  ακέραιος χβαντισμένος αριθμός. Ο συνολικός αριθμός Chern προκύπτει από το άθροισμα όλων των αριθμών Chern των κατειλημμένων ζωνών, δηλαδή  $n = \sum_{m=1}^N n_m$ , και είναι αναλλοίωτο ακόμη και αν υπάρχουν εκφυλισμένες κατειλημμένες ζώνες, υπό την προϋπόθεση ότι το χάσμα που χωρίζει τις κατειλημμένες από της μη κατειλημμένες ζώνες παραμένει πεπερασμένο. Οι TKNN έδειξαν ότι τα επίπεδα Landau  $N$  της (4.1) είναι ταυτόσημα με τον αριθμό  $n$ . Ο αριθμός Chern  $n$  είναι ένα τοπολογικό αναλλοίωτο υπό την έννοια ότι δεν αλλάζει όταν η Χαμιλτονιανή μεταβάλλεται ομαλά.

Το νόημα της (4.2) γίνεται ξεκάθαρο με μια απλή αναλογία. Αντί για απεικονίσεις από τη ζώνη Brillouin στο χώρο Hilbert, θεωρούνται απλές απεικονίσεις από τις δύο διαστάσεις στις τρεις, οι οποίες περιγράφουν επιφάνειες. Οι διδιάστατες επιφάνειες μπορούν να ταξινομηθούν τοπολογικά από το γένος,  $g$ , το οποίο απαριθμεί τον αριθμό οπών στην επιφάνεια. Για παράδειγμα, μια σφαίρα έχει γένος  $g = 0$ , ενώ ένας δακτύλιος γένος  $g = 1$ . Το μαθηματικό θεώρημα των Gauss και Bonnet αναφέρει ότι το ολοκλήρωμα μιας Γκαουσιανής καμπυλότητας σε μια κλειστή επιφάνεια είναι χβαντισμένο τοπολογικό αναλλοίωτο, επομένως ο αριθμός Chern είναι ένα ολοκλήρωμα μιας σχετικής καμπυλότητας.

## 4.2 2-D Τοπολογικοί Μονωτές

Η διδιάστατη κατάσταση τοπολογικού μονωτή ανακαλύφθηκε, αρχικά, σε χβαντικά πηγάδια διεπιφάνειας HgTe/CdTe. Οι Bernevig, Hughes και Zhang εισήγαγαν την έρευνα την κατάστασης αυτής και προέβλεψαν την χβαντική αλλαγή φάσης σε χβαντικά πηγάδια HgTe/CdTe συναρτήσει του πάχους  $d_{QW}$  του πηγαδιού. Το σύστημα χβαντικών πηγαδιών προβλέπεται να είναι συμβατικός μονωτής για  $d_{QW} < d_c$  και τοπολογικός μονωτής για  $d_{QW} > d_c$ , όπου  $d_c$  το κρίσιμο πάχος του πηγαδιού. Η πρώτη πειραματική επιβεβαίωση της ύπαρξης τοπολογικής κατάστασης σε πηγάδια HgTe/CdTe επιτεύχθηκε από τον König. Η κατάσταση τοπολογικού μονωτή είναι αναλλοίωτη κατά την αντιστροφή χρόνου, παρουσιάζει ενεργειακό χάσμα στο διδιάστατο μέσο του υλικού και έχει τοπολογικά προστατευόμενες μονοδιάστατες καταστάσεις στα άκρα χωρίς ενεργειακό χάσμα οι οποίες βρίσκονται μέσα στο μονωτικό χάσμα του μέσου. Οι καταστάσεις άκρων αποτελούνται από δύο καταστάσεις με αντίθετο σπιν οι οποίες διαδίδονται με αντίθετες κατευθύνσεις στα άκρα. Για τον παραπάνω λόγο ονομάζονται και ελικοειδής καταστάσεις άκρων, δηλαδή το σπιν είναι συσχετισμένο με τη διεύθυνση κίνησης. Οι καταστάσεις άκρων αποτελούνται από ζεύγη καταστάσεων, ενώ η συμμετρία αντιστροφής χρόνου διαβεβαιώνει την ύπαρξη σημείου τομής των ενεργειακών σταθμών τους σε ειδικά σημεία της ζώνης Brillouin. Λόγω της ύπαρξης σημείου τομής, το φάσμα της διδιάστατης κατάστασης

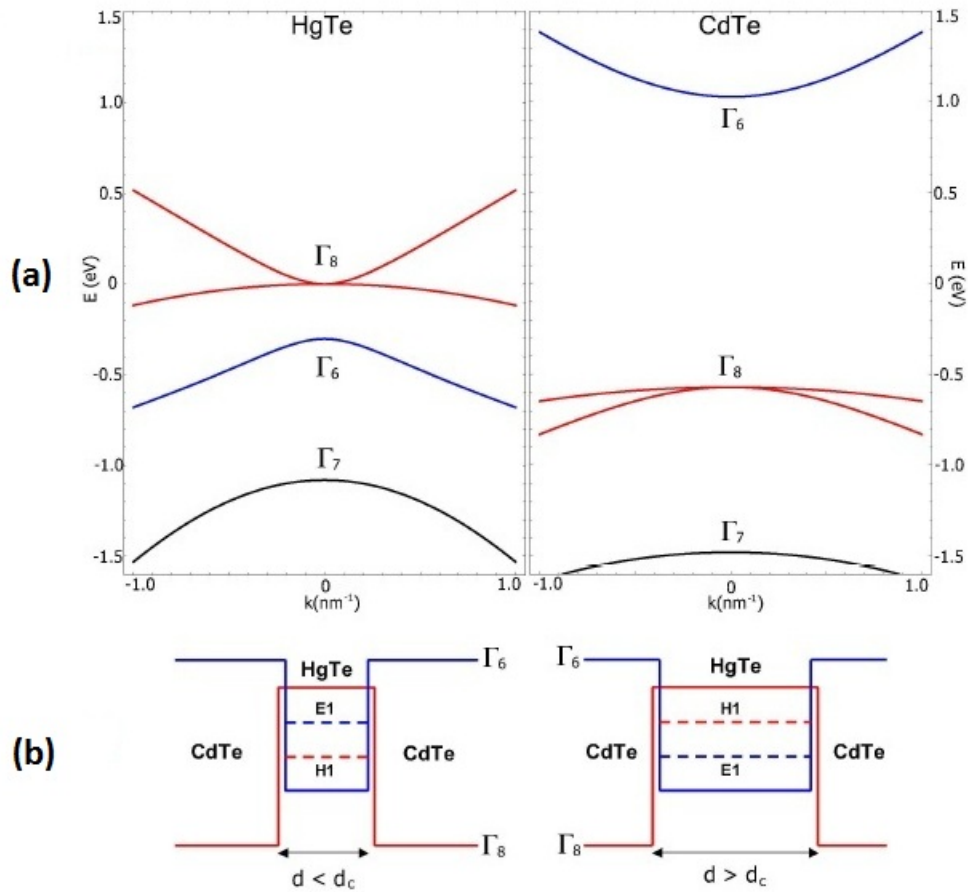
τοπολογικού μονωτή δεν μπορεί να παραμορφωθεί αδιαβατικά σε μια κατάσταση τοπολογικά τετριμμένου μονωτή χωρίς ελικοειδής καταστάσεις άκρων. Συνεπώς, ο διδιάστατος τοπολογικός μονωτής αντιπροσωπεύει μια νέα τοπολογικά διακριτή κατάσταση της ύλης.

Σε αυτή την ενότητα θα περιγραφεί η βασική θεωρία της διδιάστατης κατάστασης τοπολογικού μονωτή στο σύστημα HgTe/CdTe λόγω της απλότητας και της πειραματικής αντιστοιχίας που εμφανίζει.

#### 4.2.1 Ενεργό μοντέλο 2-D τοπολογικού μονωτή σε κβαντικά πηγάδια HgTe/CdTe

Σε αυτή την υποενότητα παρουσιάζεται η βασική ηλεκτρονική δομή του μέσου των υλικών HgTe και CdTe καθώς και το μοντέλο που εισήγαγαν οι Bernevig, Hughes και Zhang (BHZ) για να περιγράψουν την Φυσική των ζωνών των HgTe/CdTe κβαντικών πηγαδίων. Τα υλικά HgTe και CdTe κρυσταλλώνονται σε πλέγμα zincblende. Η παραπάνω δομή εμφανίζει παρόμοια γεωμετρία με αυτή του αδάμαντα, δηλαδή, δύο αλληλοδιαπερνόμενα εδροκεντρικά κυβικά πλέγματα μετατοπισμένα κατά τη διαγώνιο του χώρου, αλλά με διαφορετικά άτομα σε κάθε υποπλέγμα. Η παρουσία δύο διαφορετικών ατόμων ανά πλέγμα σπάει τη συμμετρία αντιστροφής του πλέγματος. Ωστόσο, παρόλο που η συμμετρία αντιστροφής παραβιάζεται, η φυσική του τοπολογικού μονωτή δεν εμφανίζεται μεγάλες αλλαγές. Για λόγους απλότητας, η ασυμμετρία αντιστροφής στο μέσο του υλικού θα αγνοηθεί.

Οι σημαντικές ενεργειακές ζώνες που βρίσκονται κοντά στην ενέργεια Fermi για τα υλικά HgTe και CdTe εμφανίζονται κοντά στα σημεία  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = 0$ ) της ζώνης Brillouin (βλ. Εικόνα 3.1). Οι σημαντικές ενεργειακές ζώνες αποτελούνται από μια s-type ζώνη ( $\Gamma_6$ ) και μια p-type ζώνη χωρισμένη από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς σε μια  $J = 3/2$  ζώνη ( $\Gamma_8$ ) και μια  $J = 1/2$  ζώνη ( $\Gamma_7$ ). Το CdTe έχει διάταξη ζωνών παρόμοια με το GaAs με μια s-type ζώνη αγωγιμότητας ( $\Gamma_6$ ) και δύο p-type ζώνες σθένους, την  $\Gamma_8$ , η οποία αποτελείται από τη ζώνη ελαφριών οπών και τη ζώνη βαριών οπών, και την ζώνη split-off σπιν-τροχιάς  $\Gamma_7$ . Η ζώνη σθένους χωρίζεται από τη ζώνη αγωγιμότητας με ενεργειακό χάσμα 1.6 eV. Το HgTe εμφανίζει ισχυρή αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς λόγω του στοιχείου Hg η οποία οδηγεί στην αναστροφή της σειράς των ζωνών. Το αρνητικό ενεργειακό χάσμα -300 meV υποδεικνύει ότι η ζώνη  $\Gamma_8$ , η οποία συνήθως παίζει το ρόλο της ζώνης σθένους, θα βρισκείται επάνω από την ζώνη  $\Gamma_6$ . Επομένως, η ζώνη  $\Gamma_8$  των ελαφριών οπών γίνεται η ζώνη αγωγιμότητας, η ζώνη  $\Gamma_8$  των βαριών οπών γίνεται η ζώνη σθένους και η ζώνη  $\Gamma_6$  εμφανίζεται κάτω από το επίπεδο Fermi μεταξύ της ζώνης των βαριών οπών και της ζώνης του split-off σπιν-τροχιάς. Λόγω του εκφυλισμού των ζωνών ελαφριάς και βαριάς οπής στο σημείο  $\Gamma$ , το υλικό HgTe αποτελεί ημιαγωγό μηδενικού ενεργειακού χάσματος.

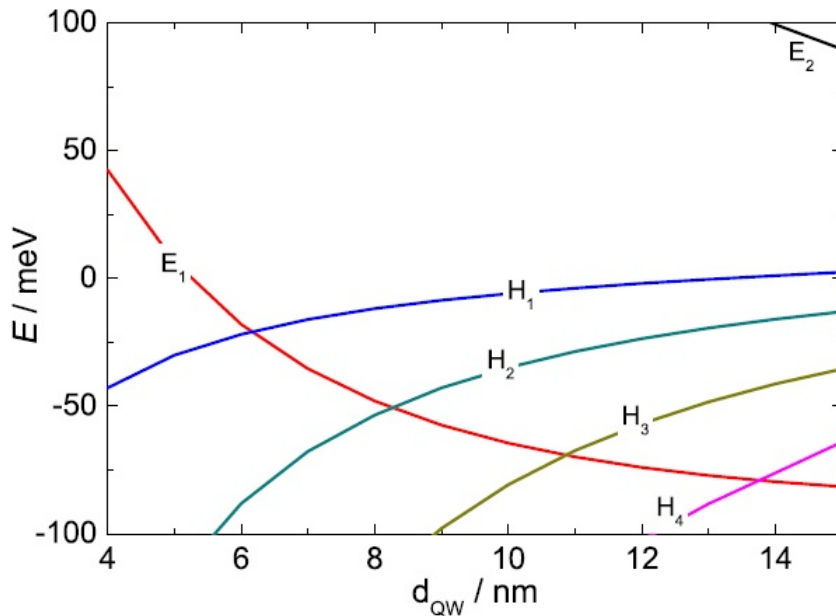


**Εικόνα 4.1:** (a) Δομή ενεργειακών ζωνών του μέσου των υλικών HgTe και CdTe. (b) Σχηματική απεικόνιση της γεωμετρίας του χβαντικού πηγαδιού της ετεροδομής HgTe/CdTe και των χαμηλότερων υποζωνών για δύο διαφορετικά πλάτη πηγαδιού.<sup>1</sup>

Κατά την κατασκευή χβαντικών πηγαδιών με βάση το υλικό HgTe οι ιδιόμορφες ιδιότητες του μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να μεταβληθεί η ηλεκτρονική δομή. Για ευρή πλάτος του χβαντικού πηγαδιού  $d_{QW}$  ο χβαντικός περιορισμός είναι αδύναμος και η δομή των ζωνών παραμένει ανεστραμμένη. Ωστόσο, η ενέργεια περιορισμού μεγαλώνει όσο το πλάτος του πηγαδιού μικραίνει. Επομένως, τα ενεργειακά επίπεδα θα μετακινηθούν και, τελικά, οι ενεργειακές ζώνες θα τοποθετηθούν στη κανονική τους θέση εάν το πάχος του χβαντικού πηγαδιού καταστεί μικρότερο από το κρίσιμο πλάτος  $d_c$ . Σκεπτόμενοι με ευριστικό τρόπο τα παραπάνω γίνονται κατανοητά ως εξής: για μικρού πλάτος χβαντικά πηγάδια η ετεροδομή HgTe/CdTe συμπερι-

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [10], σελ. 5

φέρεται παρόμοια με το υλικό CdTe και έχει κανονική διάταξη ενεργειακών ζωνών, δηλαδή οι ζώνες με συμμετρία  $\Gamma_6$  θα συνεισφέρουν στις υποζώνες αγωγιμότητας και οι ζώνες με συμμετρία  $\Gamma_8$  θα συνεισφέρουν στις υποζώνες σθένους. Από την άλλη, καθώς το  $d_{QW}$  αυξάνεται, το υλικό θα συμπεριφέρεται όλο και περισσότερο σαν το HgTe, το οποίο έχει ανεστραμμένες ζώνες. Καθώς το  $d_{QW}$  αυξάνεται περισσότερο, το πλάτος του πηγαδιού εξισώνεται με το κρίσιμο πλάτος  $d_c$  όπου οι υποζώνες  $\Gamma_6$  και  $\Gamma_8$  διασταυρώνονται και στη συνέχεια αναστρέφονται, με τις  $\Gamma_8$  να παίζουν τον ρόλο της ζώνης αγωγιμότητας και τις  $\Gamma_6$  το ρόλο της ζώνης σθένους. Η μετατόπιση των ενεργειακών σταθμών παραθέτεται στην Εικόνα 3.2. Οι καταστάσεις χβαντικού πηγαδιού που προκύπτουν από τη ζώνη βαριών οπών  $\Gamma_8$  αναφέρονται ως  $H_n$ , όπου ο δείκτης  $n = 1, 2, 3, \dots$  περιγράφει καταστάσεις πηγαδιού με αύξοντα αριθμό κόμβων στην κατεύθυνση  $z$ . Παρομοίως, οι καταστάσεις χβαντικού πηγαδιού που προκύπτουν από τη ζώνη αγωγιμότητας  $\Gamma_6$  αναφέρονται ως  $E_n$ . Η αντιστροφή μεταξύ των ζωνών  $E_1$  και  $H_1$  συμβαίνει για κρίσιμο πλάτος  $d_{QW} = d_c = 6.3$  nm.



**Εικόνα 4.2:** Ενεργειακές στάθμες του χβαντικού πηγαδιού συναρτήσει του πλάτους του πηγαδιού.<sup>1</sup>

Υπό την υπόθεση της συμμετρίας αντιστροφής, οι σχετικές υποζώνες,  $E_1$  και  $H_1$ , πρέπει να είναι διπλά εκφυλισμένες καθώς η συμμετρία αντιστροφής χρόνου είναι παρούσα. Οι κατα-

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [10], σελ. 6

στάσεις εκφράζονται στη βάση  $\{|E_1+\rangle, |H_1+\rangle, |E_1-\rangle, |H_1-\rangle\}$ , όπου οι καταστάσεις  $|E_1\pm\rangle$  και  $|H_1\pm\rangle$  είναι δύο σύνολα ζευγών Kramer. Οι καταστάσεις  $|E_1\pm\rangle$  και  $|H_1\pm\rangle$  έχουν αντίθετη ισοτιμία, επομένως ένα στοιχείο μήτρας της Χαμιλτονιανής το οποίο συνδέει αυτές θα έχει περιττή ισοτιμία. Συνεπώς, οι καταστάσεις  $(|E_1+\rangle, |H_1+\rangle)$  και  $(|E_1-\rangle, |H_1-\rangle)$  θα είναι αλληλεπιδρώσες με έναν γραμμικό όρο  $k$ . Η κατάσταση βαριάς οπής  $|H_1+\rangle$  δημιουργείται από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς  $p$ -τροχιακών  $|p_x + ip_y, \uparrow\rangle$ , ενώ η κατάσταση βαριάς οπής  $|H_1-\rangle$  δημιουργείται από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς  $p$ -τροχιακών  $|-(p_x - ip_y), \downarrow\rangle$ . Επομένως, για να διατηρείται η συμμετρία περιστροφής γύρω από τον άξονα  $z$ , τα στοιχεία μήτρας πρέπει να είναι ανάλογα του  $k\pm = k_x \pm ik_y$ . Οι μόνοι όροι που επιτρέπονται στα διαγώνια στοιχεία είναι όροι οι οποίοι αποτελούνται από δυνάμεις του  $k$  και περιέχουν όρους ανεξάρτητους από το  $k$ . Οι υποζώνες πρέπει να υπάρχουν ως εκφυλισμένα ζεύγη σε κάθε  $\mathbf{k}$ , ώστε να μην υπάρχουν στοιχεία μήτρας μεταξύ των  $+$  και  $-$  καταστάσεων της ίδιας ζώνης. Τέλος, αν υπήρχαν μη μηδενικά στοιχεία μεταξύ των  $|E_1+\rangle, |H_1-\rangle$  ή  $|E_1-\rangle, |H_1+\rangle$ , τότε θα υπάρχει μια υψηλότερης τάξης διαδικασία η οποία θα συνδέει τις  $\pm$  καταστάσεις της ίδιας ζώνης και θα αίρει τον εκφυλισμό. Επομένως, αυτά τα στοιχεία μήτρας θα είναι μηδενικά. Τα παραπάνω οδηγούν στο μοντέλο BHZ,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & h^*(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

$$h(\mathbf{k}) = \epsilon(\mathbf{k})\mathbb{I}_{2\times 2} + d_a(\mathbf{k})\sigma^a, \quad (4.4)$$

όπου  $\mathbb{I}_{2\times 2}$  είναι η  $2 \times 2$  μοναδιαία μήτρα, και

$$\epsilon(\mathbf{k}) = C - D(k_x^2 + k_y^2), \quad (4.5)$$

$$d_a(\mathbf{k}) = (Ak_x, -Ak_y, M(\mathbf{k})), \quad (4.6)$$

$$M(\mathbf{k}) = -B(k_x^2 + k_y^2), \quad (4.7)$$

όπου οι συντελεστές  $A, B, C, D, M$  είναι παράμετροι του υλικού οι οποίοι εξαρτώνται από τη γεωμετρία του κβαντικού πηγαδιού και  $a$  η πλεγματική σταθερά. Η μηδενική ενέργεια επιλέγεται να είναι το άκρο της ζώνης σθένους του HgTe για  $\mathbf{k} = 0$  (βλ. Εικόνα 4.1(α)).

Το ενεργειακό φάσμα του μέσου του υλικού του μοντέλου BHZ δίνεται από τη σχέση

$$E_{\pm} = \epsilon(k) \pm \sqrt{d_a d_a} \quad (4.8)$$

$$= \epsilon(k) \pm \sqrt{A^2(k_x^2 + k_y^2) + M^2(k)}. \quad (4.9)$$

Για  $B = 0$ , το μοντέλο υποβιβάζεται σε δύο αντίγραφα της Χαμιλτονιανής Dirac με μάζα σε (2+1)D. Η μάζα  $M$  αντιστοιχεί στην διαφορά ενέργειας μεταξύ των  $E_1$  και  $H_1$  ενεργειακών επιπέδων στο σημείο  $\Gamma$ . Η μάζα  $M$  αλλάζει πρόσημο στο κρίσιμο πάχος  $d_c$ , όπου οι  $E_1$  και  $H_1$  εκφυλίζονται. Στο κρίσιμο σημείο, το σύστημα περιγράφεται από δύο αντίγραφα, ένα για κάθε σπιν, της άμαζης Χαμιλτονιανής Dirac στην κοιλάδα  $\mathbf{k} = 0$ . Η παραπάνω κατάσταση είναι παρόμοια με αυτή του Γραφενίου, η οποία επίσης περιγράφεται από την άμαζη Χαμιλτονιανή Dirac σε (2+1)D. Ωστόσο, η βασική διαφορά στηρίζεται στο γεγονός ότι το Γραφένιο έχει τέσσερις κόνους Dirac, που αποτελούνται από δύο κοιλάδες και δύο σπιν, ενώ στην παραπάνω περίπτωση υπάρχουν δύο κόνου Dirac, ένας για κάθε σπιν, σε μια μοναδική κοιλάδα. Για  $d_{QW} > d_c$ , το επίπεδο  $E_1$  πέφτει χαμηλότερα από το επίπεδο  $H_1$  στο σημείο  $\Gamma$ , και η μάζα  $M$  γίνεται αρνητική. Ένα μοντέλο Dirac με μάζα δεν διαφοροποιείται μεταξύ θετικής και αρνητικής μάζας  $M$ . Εφόσον το σύστημα που περιγράφεται είναι μη σχετικιστικό, ο όρος  $B$  είναι επιτρεπτός. Ακριβολογώντας, η μάζα  $M$  καλείται μάζα Dirac, ενώ η μάζα  $B$  Νευτώνεια μάζα, καθώς περιγράφει τον τυπικό όρο μη σχετικιστικής μάζας με τετραγωνική σχέση διασποράς. Θα δειχθεί παρακάτω ότι το σχετικό πρόσημο των όρων  $M$  και  $B$  καθορίζει εάν το μοντέλο περιγράφει τοπολογικό μονωτή με τοπολογικά προστατευμένες καταστάσεις άκρων ή όχι.

Για τη μελέτη των τοπολογικών ιδιοτήτων του συστήματος, καθώς και των καταστάσεων άκρης, είναι βολική η κανονικοποίηση του πλέγματος του συνεχές μοντέλου (4.3) η οποία οδηγεί στο ενεργειακό φάσμα σε όλη τη ζώνη Brillouin, δηλαδή στην αναπαράσταση tight-binding. Εφόσον η ενδιαφέρουσα φυσική σε χαμηλές ενέργειες συμβαίνει κοντά στα σημεία  $\Gamma$ , η συμπεριφορά της διασποράς για ενέργειες πολύ μεγαλύτερες από το ενεργειακό χάσμα στο σημείο  $\Gamma$  δεν είναι σημαντική για το σύστημα. Συνεπώς, μπορεί να επιλεγθεί μια κανονικοποίηση που θα απλοποιεί τους υπολογισμούς. Το προκύπτον απλοποιημένο πλεγματικό μοντέλο θα είναι το μοντέλο (4.3) αντικαθιστώντας τις σχέσεις (4.5), (4.6), (4.7) με τις παρακάτω:

$$\epsilon(\mathbf{k}) = C - 2Da^{-2}(2 - \cos k_x a - \cos k_y a), \quad (4.10)$$

$$d_a(\mathbf{k}) = (Aa^{-1} \sin k_x a, -Aa^{-1} \sin k_y a, M(\mathbf{k})), \quad (4.11)$$

$$M(\mathbf{k}) = M - 2Ba^{-2}(2 - \cos k_x a - \cos k_y a). \quad (4.12)$$

Είναι ξεκάθαρο ότι κοντά στο σημείο  $\Gamma$  η Χαμιλτονιανή υποβιβάζεται στο συνεχές μοντέλο BHZ (4.3). Για λόγους απλότητας, η πλεγματική σταθερά επιλέγεται  $a = 1$ .

#### 4.2.2 Ακριβής λύση των ελικοειδών καταστάσεων άκρης

Η ύπαρξη τοπολογικά προστατευμένων καταστάσεων άκρης είναι μια σημαντική ιδιότητα των τοπολογικών μονωτών. Οι καταστάσεις άκρης προκύπτουν επιλύοντας το μοντέλο BHZ (4.3) με ανοιχτή συνοριακή συνθήκη. Έστω η Χαμιλτονιανή (4.3) ορισμένη στο για  $x > 0$  στο επίπεδο  $xy$ . Η Χαμιλτονιανή μπορεί να χωριστεί σε δύο μέρη,

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1, \quad (4.13)$$

$$\tilde{H}_0 = \tilde{\epsilon}(k_x) + \begin{pmatrix} \tilde{M}(k_x) & Ak_x & 0 & 0 \\ Ak_x & -\tilde{M}(k_x) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{M}(k_x) & -Ak_x \\ 0 & 0 & -Ak_x & -\tilde{M}(k_x) \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

$$\tilde{H}_1 = -Dk_y^2 + \begin{pmatrix} -Bk_y^2 & iAk_y & 0 & 0 \\ -iAk_y & Bk_y^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -Bk_y^2 & iAk_y \\ 0 & 0 & -iAk_y & Bk_y^2 \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

όπου  $\tilde{\epsilon}(k_x) = C - Dk_x^2$  και  $\tilde{M}(k_x) = M - Bk_x^2$ . Όλοι οι όροι εξαρτώμενοι από το  $k_x$  περιέχονται στο μέρος  $\tilde{H}_0$  της Χαμιλτονιανής. Για τέτοιου είδους ημιάπειρο σύστημα, το  $k_x$  πρέπει να αντικατασταθεί από τον τελεστή  $-i\partial_x$ . Από την άλλη, η συμμετρία μετατόπισης στον άξονα  $y$  διατηρείται, συνεπώς το  $k_y$  είναι καλός κβαντικός αριθμός. Για  $k_y = 0$ , προκύπτει  $\tilde{H}_1 = 0$  και η κυματοσυνάρτηση δίνεται από την εξίσωση

$$\tilde{H}_0(k_x \rightarrow -i\partial_x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (4.16)$$

Επειδή η  $\tilde{H}_0$  είναι μπλοκ διαγώνια, οι ιδιοκαταστάσεις θα είναι της μορφής

$$\Psi_{\uparrow}(x) = \begin{pmatrix} \psi_0 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \Psi_{\downarrow}(x) = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \psi_0 \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

όπου  $\mathbf{0}$  το μηδενικό διάνυσμα και οι ιδιοκαταστάσεις σχετίζονται μεταξύ τους με τη συμμετρία μετατόπισης. Για τις καταστάσεις άκρων, η κυματοσυνάρτηση  $\psi_0(x)$  είναι εντοπισμένη στο άκρο



του υλικού και ικανοποιεί την κυματική εξίσωση

$$\left( \tilde{\epsilon}(-i\partial_x) + \begin{pmatrix} \tilde{M}(-i\partial_x) & -iA_1\partial_x \\ -iA_1\partial_x & -\tilde{M}(-i\partial_x) \end{pmatrix} \right) \psi_0(x) = E\psi_0(x). \quad (4.18)$$

Για να αποδειχθεί η ύπαρξη των καταστάσεων άκρων και για να ευρεθεί η περιοχή στην οποία υπάρχουν αυτές θα παραληφθεί το  $\tilde{\epsilon}$ . Παραλείποντάς το, η κυματική εξίσωση (4.18) παρουσιάζει συμμετρία σωματιδίου-οπής. Επομένως, αναμένεται να υπάρχει ειδική κατάσταση άκρης με  $E = 0$ . Χρησιμοποιώντας την δοκιμαστική κυματοσυνάρτηση  $\psi_0 = \phi e^{\lambda x}$ , η (4.18) απλοποιείται στη μορφή

$$(M + B\lambda^2)\tau_y\phi = A\lambda\phi, \quad (4.19)$$

άρα η κυματοσυνάρτηση  $\phi$  θα είναι ιδιοκατάσταση της μήτρας Pauli  $\tau_y$ . Ορίζοντας έναν σπινόρα δύο στοιχείων  $\phi_{\pm}$  από τη σχέση  $\tau_y\phi_{\pm} = \pm\phi_{\pm}$ , η (4.19) απλοποιείται σε μια εξίσωση με τετραγωνικούς όρους του  $\lambda$ . Αν το  $\lambda$  είναι λύση του  $\phi_+$ , τότε το  $-\lambda$  θα είναι λύση του  $\phi_-$ . Κατά συνέπεια, η γενική λύση θα είναι η

$$\psi_0(x) = (ae^{\lambda_1 x} + be^{\lambda_2 x})\phi_+ + (ce^{-\lambda_1 x} + de^{-\lambda_2 x})\phi_-, \quad (4.20)$$

όπου το  $\lambda_{1,2}$  ικανοποιεί τη σχέση

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2B}(A \pm \sqrt{A^2 - 4MB}). \quad (4.21)$$

Οι συντελεστές  $a, b, c, d$  καθορίζονται από τη συνοριακή συνθήκη  $\phi(0) = 0$ . Σε συνεργασία με την κανονικοποιησιμότητα της κυματοσυνάρτησης στην περιοχή  $x > 0$ , η ανοιχτή συνοριακή συνθήκη οδηγεί στη συνθήκη ύπαρξης των καταστάσεων άκρης:  $\Re\lambda_{1,2} < 0$  ( $c, d = 0$ ) ή  $\Re\lambda_{1,2} > 0$  ( $a, b = 0$ ), όπου  $\Re$  το πραγματικό μέρος της σχέσης  $\lambda_{1,2}$ . Όπως φαίνεται στη σχέση (4.21), οι παραπάνω συνθήκες μπορούν να ικανοποιηθούν στην ανεστραμμένη περιοχή, δηλαδή όταν  $d_{QW} > d_c$ , όταν  $M/B > 0$ . Επιπλέον, μπορεί ναδειχθεί ότι όταν  $A/B < 0$ , τότε  $\Re\lambda_{1,2} < 0$ , ενώ όταν  $A/B > 0$ , τότε  $\Re\lambda_{1,2} > 0$ . Επομένως, η κυματοσυνάρτηση για τις καταστάσεις άκρης στο σημείο  $\Gamma$  θα δίνονται από τη σχέση

$$\psi_0(x) = \begin{cases} a(e^{\lambda_1 x} - e^{\lambda_2 x})\phi_+, & A/B < 0 \\ c(e^{-\lambda_1 x} - e^{-\lambda_2 x})\phi_-, & A/B > 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

Το πρόσημο του  $A/B$  καθορίζει την πόλωση του σπιν των καταστάσεων άκρης, πράγμα το οποίο αποτελεί κομβικό σημείο για τον καθορισμό της ελικότητας της Χαμιλτονιανής Dirac για

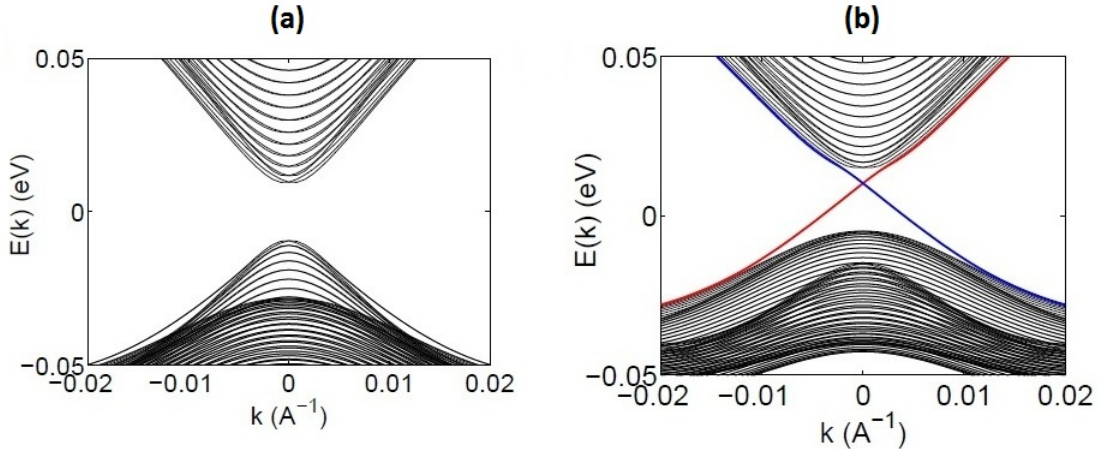
τις τοπολογικές καταστάσεις άκρης.

Το ενεργό μοντέλο άκρων προσδιορίζεται προβάλλοντας την Χαμιλτονιανή του μέσου στις καταστάσεις άκρης  $\Psi_{\uparrow}$  και  $\Psi_{\downarrow}$  που ορίστηκαν στη σχέση (4.17). Αυτή η διαδικασία οδηγεί σε μια  $2 \times 2$  ενεργό Χαμιλτονιανή, η οποία ορίζεται ως  $H_{\text{edge}}^{\alpha\beta}(k_y) = \langle \Psi_{\alpha} | (\tilde{H}_0) + \tilde{H}_1 | \Psi_{\beta} \rangle$ . Σε πρώτη τάξη του  $k_y$ , η ενεργός Χαμιλτονιανή για τις ελικοειδής καταστάσεις άκρης είναι

$$H_{2\text{DTI,edge}} = Ak_y\sigma_z. \quad (4.23)$$

Για κβαντικά πηγάδια HgTe, ο συντελεστής θα είναι  $A \approx 3.6 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$ , και η ταχύτητα Dirac των καταστάσεων άκρης θα είναι  $A/\hbar = 5.5 \times 10^5 \text{ m/s}$ .

Οι παραπάνω υπολογισμοί μπορούν να επαληθευθούν με ακριβής αριθμητική διαγωνιοποίηση της Χαμιλτονιανής (4.3) σε μια λωρίδα υλικού πεπερασμένου μήκους, η οποία μπορεί να περιέχει τη συνεισφορά του όρου  $\epsilon(\mathbf{k})$  που είχε παραληφθεί προηγουμένως. Το ενεργειακό φάσμα της ενεργού Χαμιλτονιανής (4.3) σε κυλινδρική γεωμετρία θα εμφανίζει ενεργειακό χάσμα για  $d_{\text{QW}} < d_c$  και καταστάσεις άκρης που συνδέουν τη ζώνη σθένους με τη ζώνη αγωγιμότητας για  $d_{\text{QW}} > d_c$  (βλ. Εικόνα 4.3).



**Εικόνα 4.3:** Ενεργειακό φάσμα της ενεργού Χαμιλτονιανής (4.3) σε κυλινδρική γεωμετρία. (a) Για  $d_{\text{QW}} < d_c$  εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα μεταξύ της ζώνης σθένους και της ζώνης αγωγιμότητας. (b) Για  $d_{\text{QW}} > d_c$  εμφανίζονται καταστάσεις άκρης χωρίς χάσμα στο αριστερό και στο δεξί άκρο του υλικού (κόκκινη και μπλε γραμμή, αντίστοιχα).<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [10], σελ. 8

### 4.3 3-D Τοπολογικοί Μονωτές

Το μοντέλο της Χαμιλτονιανής για τον διδιάστατο τοπολογικό μονωτή σε κβαντικά πηγάδια HgTe παρέχει ένα βασικό πρότυπο, το οποίο μπορεί να γενικευθεί σε τρισδιάστατο και οδηγεί σε ένα απλό μοντέλο για τα υλικά Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> και Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. Όπως και στο αντίστοιχο 2-D μοντέλο, τα παραπάνω υλικά μπορούν να περιγραφούν από ένα απλό αλλά ρεαλιστικό μοντέλο, όπου η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς οδηγεί σε αναστροφή των ζωνών στο σημείο Γ της ζώνης Brillouin. Στη μη τετριμμένη τοπολογική φάση, οι καταστάσεις του μέσου εμφανίζουν πλήρες ενεργειακό χάσμα, αλλά υπάρχει μια τοπολογικά προστατευόμενη επιφανειακή κατάσταση που αποτελείται από ένα άμαζο φερμιόνιο Dirac. Το 2-D άμαζο φερμιόνιο Dirac είναι ελικοειδές, δηλαδή το σπιν του ηλεκτρονίου δείχνει κάθετα στην ορμή, σχηματίζοντας μια αριστερόστροφη ελικοειδής υφή στο χώρο των ορμών. Παρόμοια με τις 1-D καταστάσεις άκρης, η άμαζη φερμιονική κατάσταση Dirac είναι ολογραφική, υπό την έννοια ότι δεν μπορεί να συμβεί σε ένα αμιγώς 2-D σύστημα με συμμετρία αντιστροφής χρόνου, αλλά μπορεί να συμβεί ως το σύνορο ενός 3-D μονωτή. Οι μονοσωματιδιακές διαταραχές οι οποίες είναι αναλλοίωτες στην αντιστροφή χρόνου δεν μπορούν να εισάγουν ενεργειακό χάσμα στην επιφανειακή κατάσταση. Όμως, ένα ενεργειακό χάσμα μπορεί να εμφανιστεί στην επιφανειακή κατάσταση όταν μια διαταραχή παραβίασης αντιστροφής χρόνου εισαχθεί στην επιφάνεια. Επιπλέον, το σύστημα γίνεται πλήρως μονωτικό, και στο μέσο αλλά και στην επιφάνεια.

Ύστερα από τη θεωρητική πρόβλεψη του 3-D τοπολογικού μονωτή στα υλικά Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (Zhang και άλλοι, 2009) και Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> (Zhang και άλλοι, 2009· Xia και άλλοι, 2009), παρατήρηθηκαν οι επιφανειακές καταστάσεις με ένα κόνιο Dirac με τη βοήθεια της διάταξης ARPES (Chen και άλλοι, 2009· Xia και άλλοι, 2009· Hsieh και άλλοι, 2009). Επιπλέον μετρήσεις παρατήρησαν την αριστερόστροφη ελικοειδής υφή σπιν του άμαζου φερμιονίου Dirac (Hsieh και άλλοι, 2009).

Σε αναλογία με τη διαδικασία της προηγούμενης ενότητας του 2-D τοπολογικού μονωτή, μπορεί να κατασκευαστεί κατάλληλο ενεργο μοντέλο για τον 3-D τοπολογικό μονωτή. Το ενεργό μοντέλο της επιφάνειας προκύπτει, σε πλήρη αντιστοιχία, προβάλλοντας την Χαμιλτονιανή του μέσου στις επιφανειακές καταστάσεις. Σε πρώτη τάξη των  $k_x, k_y$ , η ενεργός επιφανειακή Χαμιλτονιανή  $H_{\text{surf}}$  θα έχει την παρακάτω μητρική μορφή:

$$H_{3\text{DTI,surf}}(k_x, k_y) = C + A(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y), \quad (4.24)$$

όπου οι παράμετροι  $C, A$  προκύτουν από την Χαμιλτονιανή του μέσου και ευρίσκονται με ab initio υπολογισμούς.

# Κεφάλαιο 5

## Διεπιφάνειες TI/CDW, TI/AFM, TI/S-wave SC και TI/D-wave SC

### 5.1 Μοντέλο Προσομοίωσης Διεπιφανειών

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας της ερευνητικής ομάδας του κ. Γεώργιου Βαρελογιάννη που έχει σχεδιαστεί από τον κ. Γεώργιο Λιβανά. Ο κώδικας αυτός, προσομοιώνει διεπιφάνειες φυλλοειδών συστημάτων χρησιμοποιώντας το εκτεταμένο μοντέλο Hubbard. Οι διεπιφάνειες προσομοιώνονται με τη βοήθεια της παρακάτω Χαμιλτονιανής:

$$H = \sum_l H_l + \sum_{l'} H_{l'}, \quad (5.1)$$

όπου  $H_l$  η Χαμιλτονιανή που περιγράφει την διάδοση και αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων σε κάθε επιφάνεια και  $H_{l'}$  η Χαμιλτονιανή σύζευξης που περιγράφει την διάδοση ηλεκτρονίων μεταξύ των επιφανειών.

Η  $H_l$  έχει την παρακάτω μορφή:

$$H_l = \mu \sum_{i,s} \hat{n}_{isl} + \sum_{i,j,s,s'} t_{ijss'} c_{isl}^\dagger c_{js'l} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i,j} V_{ij} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + \sum_{i,s,s'} (\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{ss'} c_{isl}^\dagger c_{is'l}, \quad (5.2)$$

όπου  $i$  ο δείκτης των πλεγματικών συντεταγμένων,  $s$  ο δείκτης του σπιν και  $l$  ο δείκτης της κάθε επιφάνειας. Ο πρώτος όρος αντιπροσωπεύει το χημικό δυναμικό ενώ ο δεύτερος τον όρο

μεταπήδησης κοντινότερων γειτόνων. Ο συντελεστής μεταπήδησης είναι

$$t_{ijss'} = t\delta_{s,s'}\delta_{i,j+\rho}, \quad (5.3)$$

όπου  $\rho = (\pm 1, 0), (0, \pm 1)$ . Ο τρίτος όρος αντιπροσωπεύει την on-site αλληλεπίδραση με συντελεστή  $U$  ενώ ο τέταρτος όρος την αλληλεπίδραση μεταξύ κοντινότερων γειτόνων. Ο συντελεστής αλληλεπίδρασης κοντινότερων γειτόνων είναι

$$V_{ij} = V\delta_{i,j+\rho}. \quad (5.4)$$

Ο τελευταίος όρος της  $H_l$  αντιπροσωπεύει το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο με  $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$  το διάνυσμα του μαγνητικού πεδίου και  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  τις μήτρες του Pauli.

Η  $H_{ll'}$  έχει τη παρακάτω γενική μορφή

$$H_{ll'} = \sum_{i,j,s,s'} t_{ijll's's'} c_{il's}^\dagger c_{j'l's'}, \quad (5.5)$$

η οποία εκφράζει την διεπιφανειακή μεταπήδηση, δηλαδή, τη σύζευξη των επιφανειών. Σε αυτή την εργασία ο δείκτης διεπιφανειακής μεταπήδησης θα είναι  $t_{ijll's's'} = t_{l+1}$ , δηλαδή η σύζευξη θα γίνεται κατά τη διεύθυνση  $(0,0,1)$ .

Όπως αναφέρθηκε και στο Κεφάλαιο 2, η επίλυση του γενικότερου προβλήματος των αλληλεπιδρώντων σωματιδίων είναι εξαιρετικά δύσκολη και εν γένει αδύνατη. Για την επίλυση του προβλήματος εφαρμόζεται η προσέγγιση μέσου πεδίου η οποία δίνει ικανοποιητικά αποτελέσματα στο όριο της ασθενούς σύζευξης. Σύμφωνα με την προσέγγιση αυτή πραγματοποιείται η ακόλουθη αντικατάσταση:

$$c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} = \langle c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} \rangle + [c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} - \langle c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} \rangle]. \quad (5.6)$$

όπου  $\langle c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} \rangle$  το μέσο πεδίο των συγκεκριμένων τελεστών και  $[c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} - \langle c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} \rangle]$  η διακύμανση του μέσου πεδίου. Στην προσέγγιση μέσου πεδίου αγνοούνται οι όροι που προκύπτουν από τις αλληλεπιδράσεις των διακυμάνσεων των μέσων πεδίων. Οι αλληλεπιδράσεις των μέσων πεδίων συνεισφέρουν σταθερούς όρους στην Χαμιλτονιανή οι οποίοι μπορούν να απορροφηθούν στον ορισμό του χημικού δυναμικού και συνεπώς δεν συνεισφέρουν στην δυναμική του συστήματος. Ανάλογα με τους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος υπάρχει ένα μεγάλο σύνολο από δυνατά μέσα πεδία. Επομένως, στην συγκεκριμένη περίπτωση για συγκεκριμένες συντεταγμένες  $i, j$  και  $l, l'$  υπάρχουν 16 μέσα πεδία εκ των οποίων λόγω της Ερμιτιανής μορφής

της Χαμιλτονιανής μόνο τα 8 είναι ανεξάρτητα. Παρόλο που στην γενική περίπτωση οι συντεταγμένες  $\mathbf{i}, \mathbf{j}$  και  $l, l'$  μπορούν να πάρουν οποιαδήποτε τιμή, στην παρούσα ανάλυση θεωρούνται μη μηδενικά μόνο τα μέσα πεδία που σχετίζονται με την μορφή των συγκεκριμένων αλληλεπιδράσεων, δηλαδή  $\langle c_{i,l,s}^{(\dagger)} c_{j,l',s'}^{(\dagger)} \rangle \neq 0$  μόνο για  $l = l'$  και  $\mathbf{i} = \mathbf{j}$ ,  $\mathbf{j} = \mathbf{i} \pm (1, 0)$ ,  $\mathbf{j} = \mathbf{i} \pm (0, 1)$ . Εφαρμόζοντας την προσέγγιση μέσου πεδίου στην (5.2) προκύπτουν οι παρακάτω όροι

$$\begin{aligned} \sum_{j,l,ss'} [U_i(1 - \delta_{ss'})\delta_{i,j}\delta_{l,l'} + V_{\langle ij \rangle}] \langle c_{j,l,s}^\dagger c_{j,l,s} \rangle & \langle c_{i,l,s'}^\dagger c_{i,l,s'} \rangle, \\ \sum_{j,s} U_i \delta_{i,j} \delta_{l,l'} \langle c_{j,l,s}^\dagger c_{j,l,s'} \rangle & \langle c_{i,l,s'}^\dagger c_{i,l,s} \rangle, \end{aligned} \quad (5.7)$$

με μέσα πεδία τύπου σωματιδίου-οπής και

$$\sum_{j,ss'} [U(1 - \delta_{s,s'})\delta_{i,j}\delta_{l,l'} + V_{\langle ij \rangle}] \langle c_{i,l,s}^\dagger c_{j,l,s'}^\dagger \rangle \langle c_{j,l,s'} c_{i,l,s} \rangle, \quad (5.8)$$

με μέσα πεδία τύπου σωματιδίου-σωματιδίου. Με την προσέγγιση μέσου πεδίου όπως περιγράφηκε παραπάνω, η Χαμιλτονιανή (5.2) παίρνει μονοσωματιδιακή μορφή και το πρόβλημα καθίσταται επακριβώς επιλύσιμο. Όπως περιγράφηκε στην ενότητα 2.3, εισάγοντας το σπίνορα  $\Psi_i = (c_{i,\uparrow}, c_{i,\downarrow}, c_{i,\uparrow}^\dagger, c_{i,\downarrow}^\dagger)^T$  η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου παίρνει την παρακάτω συμπαγή μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \begin{bmatrix} \hat{H}_{i,j} & \hat{\Delta}_{i,j} \\ \hat{\Delta}_{i,j}^\dagger & -\hat{H}_{i,j}^* \end{bmatrix} \Psi_j, \quad (5.9)$$

όπου οι  $2 \times 2$  πίνακες  $\hat{H}_{i,j}$  και  $\hat{\Delta}_{i,j}$  περιλαμβάνουν μέσα πεδία τύπου σωματιδίου-οπής και σωματιδίου-σωματιδίου αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι η μήτρα της Χαμιλτονιανής έχει την απαραίτητη Ερμιτιανή μορφή. Η επίλυση του συστήματος που αντιστοιχεί στην ανεύρεση των ιδιοενεργειών και των ιδιοκαταστάσεων που αντιστοιχούν στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος, επιτυγχάνεται εφαρμόζοντας τον παρακάτω μοναδιαίο μετασχηματισμό (Bogoliubov)  $\hat{U}$

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \hat{U} \hat{U}^\dagger H_{i,j} \hat{U} \hat{U}^\dagger \Psi_j = \Gamma^\dagger H^d \Gamma, \quad (5.10)$$

όπου  $H^d = \hat{U}^\dagger H \hat{U}$  η διαγώνια μορφή της Χαμιλτονιανής μήτρας,  $\Gamma = \hat{U}^\dagger \Psi_j$  ο ιδιοσπίνορας του συστήματος και  $\hat{U} = \begin{pmatrix} u_{n,j,s,s'} & v_{n,j,s,s'}^* \\ -v_{n,j,s,s'} & u_{n,j,s,s'}^* \end{pmatrix}$  η μοναδιαία μήτρα, όπου  $\hat{U} \hat{U}^\dagger = I$ , των ιδιο-

διανυσμάτων με  $\sum_{s,j} = |u_{n,j,s}|^2 + |v_{n,j,s}|^2 = 1$ . Οι στήλες του πίνακα μετασχηματισμού  $\hat{U}$  αποτελούν τις ιδιοκαταστάσεις του συστήματος και ικανοποιούν την παρακάτω εξίσωση ιδιοτιμών (Bogoliubov-de Gennes)

$$\begin{bmatrix} \hat{H}_{i,j} & \hat{\Delta}_{i,j} \\ \hat{\Delta}_{i,j}^\dagger & -\hat{H}_{i,j}^* \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_{n,j} \\ v_{n,j}^* \end{pmatrix} = E_n \begin{pmatrix} u_{n,i} \\ v_{n,i}^* \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

όπου  $E_n$  οι αντίστοιχες ιδιοενέργειες του συστήματος. Έχοντας υπολογίσει τις ιδιοενέργειες και τις ιδιοκαταστάσεις του συστήματος μπορούν να υπολογιστούν οι τιμές των μέσων πεδίων βάσει της παρακάτω γενικής εξίσωσης

$$\langle \psi_{i,l,s}^\dagger \psi_{j,l,s'}^{(\dagger)} \rangle = \frac{1}{4} \langle \Psi_i^\dagger f_{i,j,s,s',l} \Psi_j \rangle = \frac{1}{4} \sum_n \left[ \hat{U} f_{i,j,s,s',l} \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n), \quad (5.12)$$

όπου  $f_{i,j,s,s',l}$  κατάλληλη μήτρα (συνάρτηση μορφής) που συνδέει τους συγκεκριμένους τελεστές και  $n_F(E_n) = \frac{1}{1+e^{\beta E_n}}$ , η κατανομή Fermi. Ο σπίνορας  $\Psi_i = (c_{i,\uparrow}, c_{i,\downarrow}, c_{i,\uparrow}^\dagger, c_{i,\downarrow}^\dagger)^T$  που εισήχθη νωρίτερα ορίζει ένα  $SU(4)$  χώρο γεννητώρων του οποίου οι  $4 \times 4$  πίνακες  $\boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\sigma}$  αποτελούν βάση των  $SU(2)$  χώρων Nambu και σπιν, αντίστοιχα, όπου  $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\sigma}$  οι πίνακες Pauli επαυξημένοι με τον μοναδιαίο πίνακα. Κατάλληλοι γραμμικοί συνδυασμοί των παραπάνω μέσων πεδίων αντιστοιχούν σε φυσικές ποσότητες ή παραμέτρους τάξης. Παρακάτω παρουσιάζονται οι εξισώσεις ορισμού και υπολογισμού για κάποιες από αυτές τις παραμέτρους τάξης. Οι εξισώσεις αυτές αποκτούν πιο συμπαγή μορφή χρησιμοποιώντας τους πίνακες  $\boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\sigma}$ .

$$N_{i,l} = \sum_s \langle \psi_{i,l,s}^\dagger \psi_{i,l,s} \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi_i^\dagger f_{i,j,l}^N \tau_3 \sigma_0 \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_n \left[ \hat{U} f_{i,j,l}^N \tau_3 \sigma_0 \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n). \quad (5.13)$$

$$\mathbf{M}_{i,l} = \frac{1}{2} \langle \Psi_i^\dagger f_{i,j,s,s',l}^M \tau_3 \mathbf{d}_M \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_n \left[ \hat{U} f_{i,j,l}^M \tau_3 \mathbf{d}_M \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n), \quad (5.14)$$

όπου  $N_{i,l}$  η τοπική πυκνότητα σωματιδίων (φορτίου) και  $\mathbf{M}_{i,l}$  το διάνυσμα της τοπικής μαγνήτισης με κατεύθυνση  $\mathbf{d}_M$ ,  $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_1, \tau_3 \sigma_2, \sigma_3)$  και  $f_{i,j,l}^N = f_{i,j,l}^M = \delta_{i,j}$  οι αντίστοιχες μήτρες που αναφέρονται πλέον μόνο στον χώρο των θέσεων καθώς ο χώρος των σπιν εκφράζεται πλέον από τους πίνακες  $\sigma$ . Αντίστοιχα, ορίζονται οι τοπικές παράμετροι τάξης της singlet υπεραγωγιμότητας

$$\Delta_{i,j}^s = V_{\langle i,j \rangle} \langle \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'}^\dagger - \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{j,s}^\dagger \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi_i^\dagger f_j \tau_2 \sigma_2 \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_n \left[ \hat{U} f_j \tau_2 \sigma_2 \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n). \quad (5.15)$$

Οι τοπικοί s-wave και d-wave παράμετροι τάξης ορίζονται αντίστοιχα παρακάτω:

$$\Delta_{i,s} = \sum_j f_j^s \Delta_{i,j}^s = \frac{U}{2} \sum_n \left[ \hat{U} f_j^s \tau_y \sigma_y \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n), \quad (5.16)$$

$$\Delta_{i,d} = \frac{1}{4} \sum_j f_j^d \Delta_{i,j}^d = \frac{V_{\langle i,j \rangle}}{2} \sum_n \left[ \hat{U} f_j^d \tau_y \sigma_y \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n), \quad (5.17)$$

όπου  $f_j^s = \delta_{ij}$  και  $f_j^d = \delta_{j,i+(\pm 1,0)} - \delta_{j,i+(0,\pm 1)}$  οι συναρτήσεις μορφής για τον s-wave και d-wave υπεραγωγό, αντίστοιχα. Ο s-wave υπεραγωγός σταθεροποιείται για δυναμικά  $U < 0$  και  $V_{\langle i,j \rangle} \geq 0$  ενώ ο d-wave για  $U \geq 0$  και  $V_{\langle i,j \rangle} < 0$ . Οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης που θα μελετηθούν παρακάτω παίρνουν τη μορφή  $\Delta^{px} \equiv \Delta_{i,i+(0,\pm 1)} \tau_1 \sigma_3$  και  $\Delta^{py} \equiv \Delta_{i,i+(\pm 1,0)} \tau_2 \sigma_0$ , όπου

$$P_x \rightarrow \Delta_i^{px} = \frac{1}{2} \sum_j f_j^y \Delta_{i,j}^{tx} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} f_j^y \langle \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s}^\dagger + \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{j,s'}^\dagger \rangle = V_{\langle i,j \rangle} \sum_n \left[ \hat{U} f_j^y \tau_1 \sigma_3 \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n) \quad (5.18)$$

$$P_y \rightarrow \Delta_i^{py} = \frac{1}{2} \sum_j f_j^x \Delta_{i,j}^{ty} = \frac{1}{N} \sum_{i,j} f_j^x \langle \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s}^\dagger - \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{j,s'}^\dagger \rangle = V_{\langle i,j \rangle} \sum_n \left[ \hat{U} f_j^x \tau_2 \sigma_0 \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n) \quad (5.19)$$

Ύστερα από την παρουσίαση της προσέγγισης μέσου πεδίου μπορεί πλέον να περιγραφεί η γενικότερη διαδικασία αυτοσυνεπούς επίλυσης του προβλήματος. Επιλέγοντας κατάλληλες αρχικές τιμές για τα μέσα πεδία διαγωνοποιείται η Χαμιλτονιανή μήτρα και υπολογίζονται οι ιδιοενέργειες και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα. Εν συνεχεία, μέσω των εξισώσεων αυτοσυνεπείας (5.12) υπολογίζονται εκ νέου οι τιμές των μέσων πεδίων και αντικαθιστώνται στην Χαμιλτονιανή μήτρα. Τα βήματα της διαγωνοποίησης και του υπολογισμού των μέσων πεδίων επαναλαμβάνονται μέχρι η διαφορά τιμών μεταξύ διαδοχικών επαναλήψεων για κάθε μέσο πεδίο να γίνει μικρότερη από μία ορισμένη τιμή (κριτήριο σύγκλισης το οποίο συνήθως είναι της τάξης  $10^{-6}$ ). Η αυτοσυνεπής διαδικασία ισοδυναμεί με την ανεύρεση ενός τοπικού ελάχιστου με ακρίβεια της τάξης του κριτηρίου σύγκλισης.



## 5.2 Αριθμητικά Αποτελέσματα Μοντέλου Bernevig Hughes Zhang

### 5.2.1 Προσομοίωση τοπολογικού μονωτή με το μοντελο Bernevig Hughes Zhang

Για να προσομοιωθεί διεπιφάνεια με τοπολογικό μονωτή εισάγεται στον κώδικα το γενικευμένο Bernevig Hughes Zhang (BHZ) μοντέλο (βλέπε [8], σελ. 2), το οποίο προσομοιώνει τον τοπολογικό μονωτή με δύο ενεργειακές ζώνες και είναι της μορφής

$$H_{\text{BHZ}} = \sum_{i,s,\alpha} \epsilon_\alpha c_{isa}^\dagger c_{isa} + \sum_{\langle i,j \rangle, s, \alpha, \beta} c_{isa}^\dagger [t_s(\delta)]_{\alpha\beta} c_{js\beta}, \quad (5.20)$$

$$t_s(\pm x) = \begin{pmatrix} t_1 & \pm i s t_{so} \\ \pm i s t_{so} & t_2 \end{pmatrix}, \quad t_s(\pm y) = \begin{pmatrix} t_1 & \pm t_{so} \\ \mp t_{so} & t_2 \end{pmatrix}, \quad (5.21)$$

όπου οι δείκτες  $i$  και  $j$  αναφέρονται στις πλεγματικές συντεταγμένες, οι  $\alpha$  και  $\beta$  στις ενεργειακές ζώνες του τοπολογικού μονωτή και ο  $s$  στο σπιν. Ο όρος  $t_s(\delta)$  με  $\delta = \pm x(\pm y)$  ορίζει την εξαρτημένη από το σπιν μεταπήδηση κατά τον άξονα  $x$  και  $y$ . Θεωρείται ότι  $t_1 = -t_2 = -t$  και  $\epsilon_1 = -\epsilon_2 = -t$ , όπου  $t$  ο όρος μεταπήδησης. Η μη τετριμμένη τοπολογική φάση οδηγείται από το πεπερασμένο διαθεσιακό και διατροχιακό υβριδισμό  $t_{so}$  για  $0 < |\epsilon| < 4t$ .

Για να αποκτηθεί μια καλύτερη εικόνα του μοντέλου BHZ εισάγονται οι αντίστοιχοι τελεστές καταστροφής και δημιουργίας στον χώρο των ορμών

$$c_{\mathbf{k}s\beta} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}} c_{i s \beta}, \quad c_{\mathbf{k}s\beta}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}} c_{i s \beta}^\dagger, \quad (5.22)$$

και ο σπίνορας  $\Phi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\uparrow\alpha}^\dagger \ c_{\mathbf{k}\uparrow\beta}^\dagger \ c_{\mathbf{k}\downarrow\alpha}^\dagger \ c_{\mathbf{k}\downarrow\beta}^\dagger)$  που αναφέρεται στον χώρο  $SU(4)$  των σπιντροχιακών με γεννήτορες τις μήτρες  $\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\kappa}$ , όπου η βάση  $\boldsymbol{\sigma}$  αναφέρεται στον χώρο του σπιν και η βάση  $\boldsymbol{\kappa}$  στον χώρο των τροχιακών. Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου στον χώρο των ορμών αποκτά την παρακάτω μορφή

$$H_{\text{BHZ}} = \Phi_{\mathbf{k}}^\dagger [-2t(0.5 + \cos k_x + \cos k_y) \sigma_0 \kappa_3 + 2t_{so}(\sin k_x \sigma_3 \kappa_1 + \sin k_y \sigma_0 \kappa_2)] \Phi_{\mathbf{k}}. \quad (5.23)$$

Διαγωνοποιώντας την παραπάνω Χαμιλτονιανή προκύπτει το διπλά εκφυλισμένο φάσμα ιδιοε-

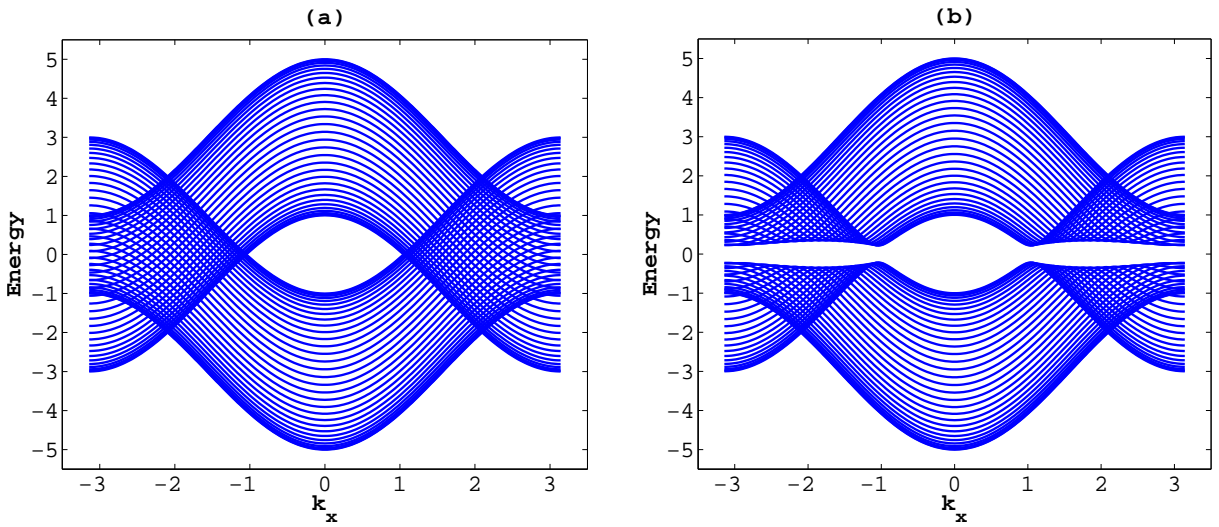
νεργειών του συστήματος στον χώρο των ορμών:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm 2\sqrt{t^2(0.5 + \cos k_x + \cos k_y)^2 + t_{so}^2(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y)}. \quad (5.24)$$

Μηδενίζοντας την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς ( $t_{so} = 0$ ) η παραπάνω σχέση γίνεται:

$$E_{t_{so}=0,\pm}(\mathbf{k}) = \pm 2t(0.5 + \cos k_x + \cos k_y), \quad (5.25)$$

όπου  $E_{t_{so}=0,\pm}(\mathbf{k})$  οι ιδιοενέργειες ενός μετάλλου με συνάρτηση διασποράς. Στην παρακάτω εικόνα παραθέτονται οι ιδιοενέργειες του μετάλλου για  $t_{so} = 0$  και οι ιδιοενέργειες του τοπολογικού μονωτή για  $t_{so} = 0.125$ .



**Εικόνα 5.1:** (a) Φάσμα ιδιοενεργειών μετάλλου για  $t_{so} = 0$  στον χώρο των ορμών. (b) Φάσμα ιδιοενεργειών τοπολογικού μονωτή για  $t_{so} = 0.125$  στον χώρο των ορμών. Παρατηρείται η εμφάνιση ενεργειακού χάσματος κατά την εισαγωγή αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στο σύστημα. Συνεπώς, το μοντέλο είναι διζωνικό με το ενεργειακό χάσμα να εξαρτάται από τον όρο  $t_{so}$ .

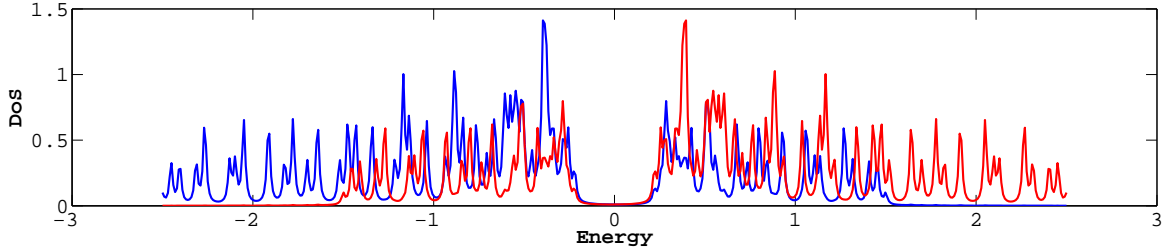
Στη συνέχεια, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της επίλυσης του μοντέλου BHZ στον πραγματικό χώρο για  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$  και  $t_{so} = 0.125$  με περιοδικές και μη περιοδικές συνθήκες. Αρχικά, παρουσιάζεται η τοπική πυκνότητα καταστάσεων, η οποία υπολογίζεται με βάση την παρακάτω σχέση

$$N_{i,s}(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_n \left[ |u_{i,s}|^2 \frac{\Gamma^2}{(\omega - E_n)^2 + \Gamma^2} + |v_{i,s}|^2 \frac{\Gamma^2}{(\omega + E_n)^2 + \Gamma^2} \right], \quad (5.26)$$

όπου  $\Gamma = 0.001$  ο αντίστροφος χρόνος ημιζωής των οιονεί-σωματιδίων του συστήματος. Στο όριο  $\Gamma = 0$  οι κατανομές Lagrange μετατρέπονται σε κατανομές Dirac και η παραπάνω σχέση παίρνει την μορφή

$$N_{i,s}(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_n [|u_{i,s}|^2 \delta(\omega - E_n) + |v_{i,s}|^2 \delta(\omega + E_n)] , \quad (5.27)$$

όπου  $u, v$  οι ιδιοσυναρτήσεις των σωματιδίων και οπών, αντίστοιχα. Παρακάτω, παραθέεται η πυκνότητα καταστάσεων του τοπολογικού μονωτή χωρίς σύνορο για  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $t_{so} = 0.125$ .

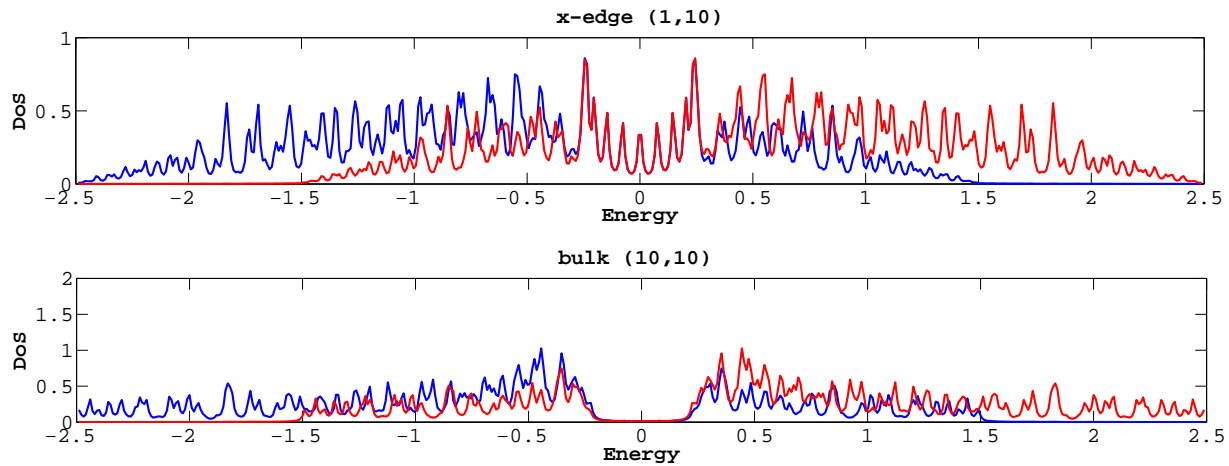


**Εικόνα 5.2:** Πυκνότητα καταστάσεων του τοπολογικού μονωτή με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $t_{so} = 0.125$  για πλέγμα  $20 \times 20$ . Η πυκνότητα καταστάσεων στην πρώτη και δεύτερη ενεργειακή ζώνη απεικονίζεται με μπλε και κόκκινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται η εμφάνιση ενεργειακού χάσματος της τάξης των 0.4 eV σε όλο το εύρος του πλέγματος.

Στην παραπάνω εικόνα παρουσιάζεται η πυκνότητα καταστάσεων σε όλες τις πλεγματικές θέσεις για τις δύο ενεργειακές ζώνες στον πραγματικό χώρο. Παρατηρείται ότι υπάρχει ενεργειακό χάσμα για  $E = 0$ , πράγμα που σημαίνει ότι το υλικό είναι μονωτικό σε όλα τα πλεγματικά σημεία. Επιπροσθέτως, η πυκνότητα καταστάσεων που απεικονίζεται αντιπροσωπεύει τις καταστάσεις με σπιν πάνω και τις καταστάσεις με σπιν κάτω, δηλαδή, η πυκνότητα καταστάσεων και στις δύο περιπτώσεις είναι πανομοιότυπη σε όλα τα πλεγματικά σημεία. Αυτό συμβαίνει λόγω της απουσίας εξωτερικού μαγνητικού πεδίου στο σύστημα.

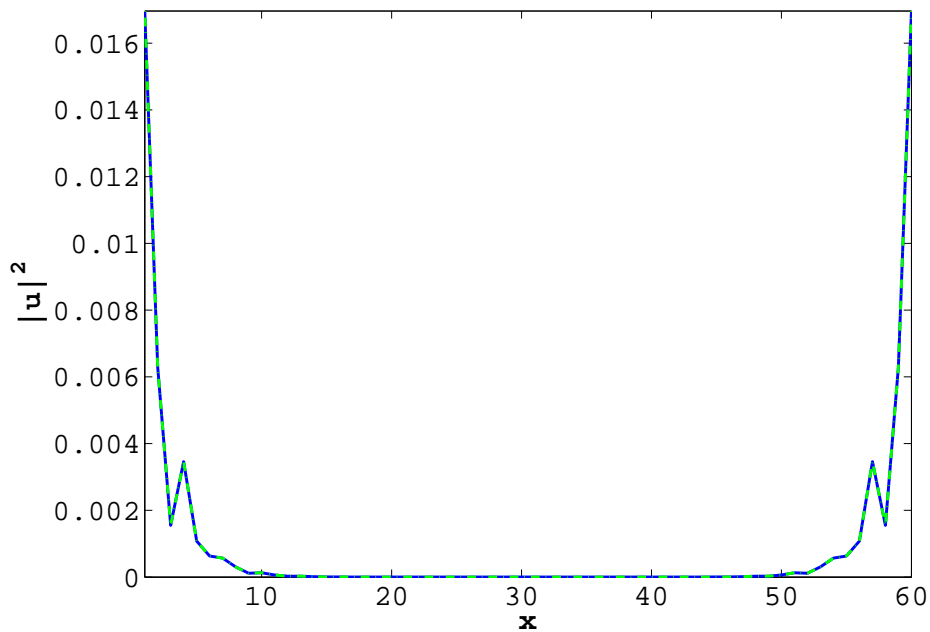
Για τις ίδιες παραμετρους εφαρμόζεται στο πλέγμα σύνορο ως προς μια από τις δύο κατευθύνσεις (ή και τις δύο) ώστε να αναδειχθούν οι τοπολογικά προστατευμένες μεταλλικές ιδιοκαταστάσεις. Με την εισαγωγή των συνόρων σπάει η συμμετρία μεταφοράς στον χώρο και η πυκνότητα καταστάσεων είναι εν γένει διαφορετική σε κάθε πλεγματικό σημείο. Ίδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η πυκνότητα καταστάσεων πάνω στο σύνορο όπου παρατηρείται ότι εμφανίζονται ιδιοκαταστάσεις του συστήματος με ενέργεια μικρότερη από το ενεργειακό χάσμα στο εσωτερικό του συστήματος. Κατά μήκος της διάστασης όπου υπάρχουν περιοδικές συνθή-

κες η πυκνότητα καταστάσεων είναι ίδια ενώ προς το κέντρο του συστήματος εμφανίζεται το ενεργειακό χάσμα και η πυκνότητα καταστάσεων προσομοιάζει αυτή των περιοδικών συνθηκών. Από τα παραπάνω γίνεται εμφανές ότι στο σύνορο του συστήματος εμφανίζονται εντοπισμένες ιδιοκαταστάσεις οι οποίες αποσβένονται στο μέσο του συστήματος.



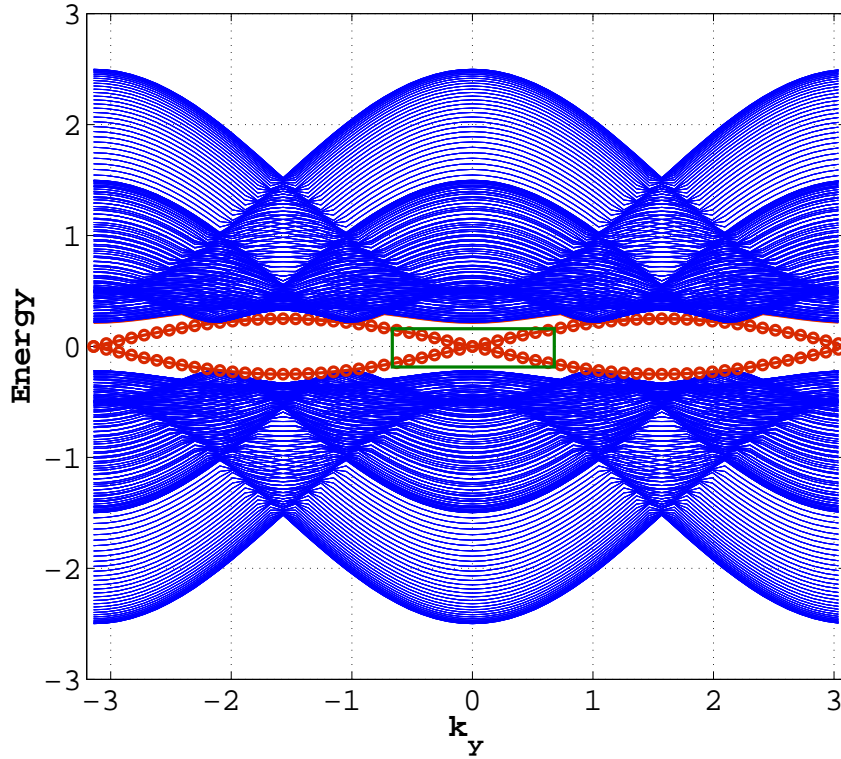
**Εικόνα 5.3:** Πυκνότητα καταστάσεων του τοπολογικού μονωτή με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $t_{so} = 0.125$  και σύνορο στην κατεύθυνση  $x$  για πλέγμα  $20 \times 20$ . Η πυκνότητα καταστάσεων στην πρώτη και δεύτερη ενεργειακή ζώνη απεικονίζεται με μπλε και κόκκινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται η εμφάνιση εντοπισμένων ιδιοκαταστάσεων στο άκρο κατά την κατεύθυνση  $x$  οι οποίες αποσβένονται στο μέσο του συστήματος.

Αυτό προκύπτει και από την Εικόνα 5.4 όπου προβάλλονται οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος για ενέργεια μικρότερη του ενεργειακού χάσματος  $|E| \leq 0.2$ . Η εικόνα είναι ακριβώς ίδια και για τα δύο τροχιακά του συστήματος. Παρατηρείται ότι σε απόσταση 10 πλεγματικών σημείων από το σύνορο του συστήματος οι ιδιοκαταστάσεις αυτές σχεδόν μηδενίζονται. Ο ρυθμός απόσβεσης των καταστάσεων αυτών δεν είναι εν γένει ο ίδιος αλλά εξαρτάται από την ενέργεια τους με αυτές με την μεγαλύτερη ενέργεια να έχουν μικρότερο βαθμό απόσβεσης.



**Εικόνα 5.4:** Γραφική αναπαράσταση πλάτους ιδιοκαταστάσεων ως προς την πλεγματική θέση  $x$  για πλέγμα  $60 \times 60$  και ενέργεια μικρότερη του ενεργειακού χάσματος  $|E| < 0.2$ . Παρατηρείται ότι στα σύνορα κατά τη κατεύθυνση  $x$  οι ιδιοκαταστάσεις αποκτούν πεπερασμένο πλάτος ενώ προς το μέσο αυτές μηδενίζονται. Συνεπώς, οι ιδιοκαταστάσεις αυτές αποτελούν τις εντοπισμένες ιδιοκαταστάσεις άκρης του τοπολογικού μονωτή.

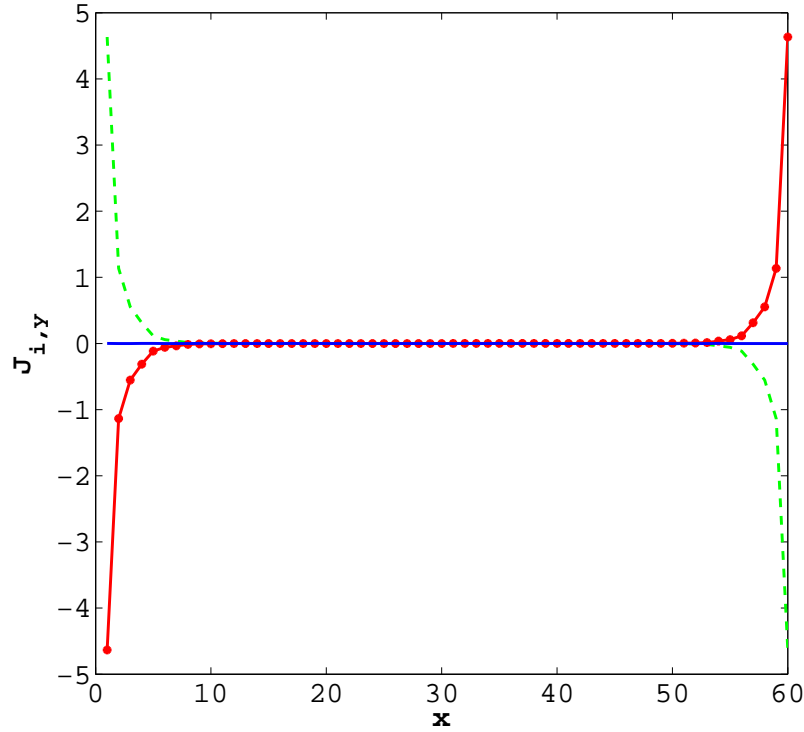
Στην Εικόνα 5.5 προβάλλονται οι ιδιοενέργειες του συστήματος με σύνορο στην κατεύθυνση  $y$  συναρτήσει της ορμής κατά την διάσταση  $y$ , η οποία λόγω περιοδικών συνθηκών παραμένει κάλος κβαντικός αριθμός. Η αντίθετη κλίση για τις δύο μπάντες που δημιουργούν οι καταστάσεις αυτές υποδεικνύει την εμφάνιση ενός ρεύματος.



**Εικόνα 5.5:** Φάσμα ιδιοενεργειών τοπολογικού μονωτή με σύνορο στην κατεύθυνση  $y$  στο χώρο των ορμών για πλέγμα  $60 \times 60$ . Με κόκκινο συμβολίζονται οι συνοριακές ιδιοκαταστάσεις με ενέργεια μικρότερη του ενεργειακού χάσματος του συστήματος οι οποίες παρουσιάστηκαν στην Εικόνα 5.4. Παρατηρείται η γραμμική διασπορά των ιδιοκαταστάσεων για χαμηλές ενέργειες.

Πράγματι, όπως φαίνεται στην παρακάτω Εικόνα 5.6 στα σύνορα του συστήματος εμφανίζεται ρεύμα το οποίο είναι ίδιου μέτρου και αντίθετης φοράς για κάθε προβολή του σπιν, ενώ επίσης είναι αντίθετο μεταξύ των δύο πλευρών του συστήματος. Αυτό οδηγεί στην εμφάνιση ρεύματος σπιν αντίθετης φοράς στις δύο πλευρές του τοπολογικού μονωτή. Ας σημειωθεί ότι στην περίπτωση αυτή το ρεύμα φορτίου είναι παντού μηδενικό. Αυτό είναι σύμφωνο με την διατήρηση της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου, το οποίο είναι βασικό χαρακτηριστικό του τοπολογικού μονωτή. Η παράμετρος τάξης που μετράει το ρεύμα για κάθε σπιν στον τοπολογικό μονωτή είναι

$$J_{i,y} = st[\langle c_{i,l,s}^\dagger c_{i+(0,1),l,s} - c_{i,l,s}^\dagger c_{i-(0,1),l,s} \rangle]. \quad (5.28)$$

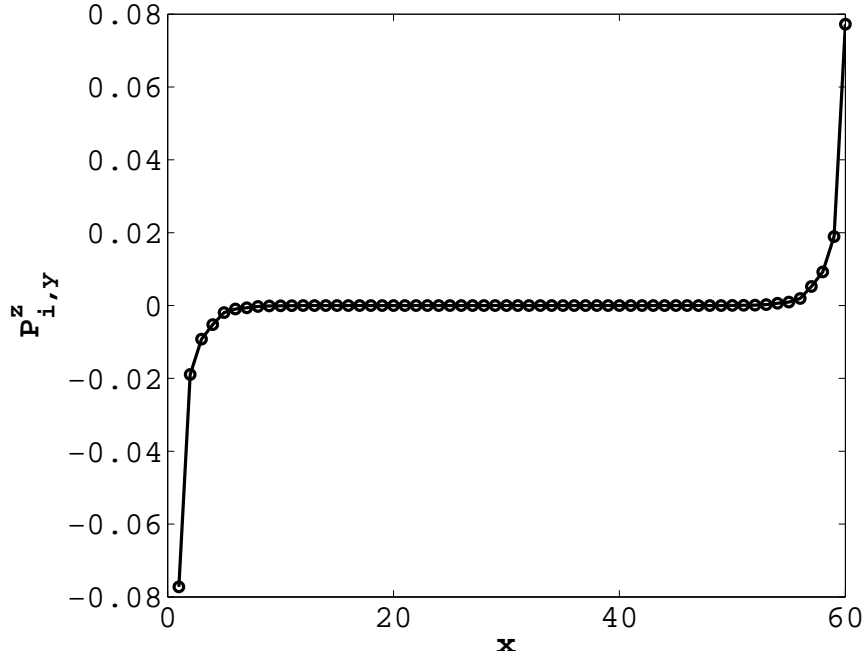


**Εικόνα 5.6:** Αναπαράσταση των ρευμάτων στο σύνορο του τοπολογικού μονωτή κατά τη κατεύθυνση  $y$  με κόκκινο και πράσινο χρώμα για κάθε προβολή του σπιν και πλέγμα  $60 \times 60$ . Με μπλε χρώμα αναπαριστάται το συνολικό ρεύμα του συστήματος το οποίο, όπως είναι αναμενόμενο, είναι μηδενικό. Παρατηρείται ότι τα ρεύματα έχουν ίδιο μέτρο και αντίθετη φορά για κάθε προβολή και αντίθετο μέτρο μεταξύ των δύο πλευρών του συστήματος.

Τέλος, στην Εικόνα 5.7 παρατηρείται στα άκρα του τοπολογικού μονωτή η παράμετρος τάξης

$$\begin{aligned}
 P_{i,y}^z &= \sum_s s [ \langle c_{i,l,s}^\dagger c_{i+(0,1),l,s} - c_{i,l,s}^\dagger c_{i-(0,1),l,s} \rangle ] \\
 &= \frac{1}{2} \langle \Psi^\dagger f_{y,j} \tau_0 \sigma_3 \Psi \rangle = \frac{1}{2} \sum_n \left[ \hat{U} f_{j,y} \tau_0 \sigma_3 \hat{U}^\dagger \right]_{nn} n_F(E_n) \quad (5.29)
 \end{aligned}$$

η οποία αντιστοιχεί ακριβώς στο ρεύμα σπιν που παρατηρείται γι' αυτό και αλλάζει πρόσημο στις δύο πλευρές. Παρατηρείται ότι η παραμετρος τάξης είναι ουσιαστικά η 1-D ενεργός συνοριακή Χαμιλτονιανή του 2-D τοπολογικού μονωτή.



**Εικόνα 5.7:** Αναπαράσταση της παραμέτρου τάξης  $P_{i,y}^z$  στα άκρα του τοπολογικού μονωτή κατά την κατεύθυνση  $y$ . Παρατηρείται ότι αυτή η παράμετρος τάξης αντιστοιχεί στο ρεύμα σπιν που προβάλλεται στην Εικόνα 4.6. Επίσης, η  $P_{i,y}^z$  είναι ουσιαστικά η 1-D ενεργός συνοριακή Χαμιλτονιανή του 2-D τοπολογικού μονωτή.

## 5.2.2 Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/κύματος πυκνότητας φορτίου (TI/CDW)

Mott μονωτής είναι το υλικό το οποίο για υψηλές θερμοκρασίες συμπεριφέρεται ως μέταλλο ενώ για χαμηλές θερμοκρασίες ως μονωτής. Η μετάβαση Mott οφείλεται στην on-site αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου, όπου για χαμηλές θερμοκρασίες ξεπερνά την ενέργεια των διακυμáσεων φορτίου η οποία κάνει το υλικό μεταλλικό. Μια μορφή Mott μονωτή είναι και ένα κύμα πυκνότητας φορτίου, το οποίο παρουσιάζει διαμόρφωση στην πυκνότητα φορτίου. Αυτή η διαμόρφωση χωρίζει το σύστημα σε δύο "υποπλέγματα" όπου το καθένα έχει διαφορετική πυκνότητα καταστάσεων, σπάζοντας την συμμετρία μετατόπισης στους κοντινότερους γείτονες.



Η προσομοίωση του υλικού επιτυγχάνεται ενεργοποιώντας τον όρο της Χαμιλτονιανής (5.2)

$$U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (5.30)$$

Η κατάσταση διαμόρφωσης πυκνότητας φορτίου σταθεροποιείται για ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης  $U < 0$ . Στην προσέγγιση μέσου πεδίου ο όρος αλληλεπίδρασης αποκτά την παρακάτω μορφή:

$$\begin{aligned} & U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rightarrow \\ & U \sum_i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle \rightarrow \\ & U \sum_i \langle \hat{N}_{i,l,\uparrow} \rangle \hat{N}_{i,l,\downarrow} + \hat{N}_{i,l,\uparrow} \langle \hat{N}_{i,l,\downarrow} \rangle - \langle \hat{N}_{i,l,\uparrow} \rangle \langle \hat{N}_{i,l,\downarrow} \rangle \rightarrow \\ & \frac{1}{2} U \sum_i \langle \hat{N}_{i,l} + \hat{M}_{i,l}^z \rangle (\hat{N}_{i,l} - \hat{M}_{i,l}^z) + (\hat{N}_{i,l} + \hat{M}_{i,l}^z) \langle \hat{N}_{i,l} - \hat{M}_{i,l}^z \rangle \\ & - \frac{1}{2} \langle \hat{N}_{i,l} + \hat{M}_{i,l}^z \rangle \langle \hat{N}_{i,l} - \hat{M}_{i,l}^z \rangle \end{aligned} \quad (5.31)$$

όπου  $\hat{N}_{i,l} = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$ ,  $\hat{M}_{i,l} = c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}$  οι τοπικοί τελεστές πυκνότητας φορτίου και μαγνήτισης κατά τον  $z$  άξονα, αντίστοιχα. Από την παραπάνω ανάλυση είναι προφανές ότι για ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης το σύστημα ελαχιστοποιεί την ενέργεια του όταν συσσωρεύει φορτίο στο ίδιο πλεγματοειδές σημείο παρόλο που για να διατηρήσει το συνολικό φορτίο πρέπει να ελαττώσει την πυκνότητα φορτίου σε άλλα πλεγματοειδή σημεία. Εισάγοντας τον σπίνορα  $\Psi_i = (c_{i\uparrow}, c_{i\downarrow}, c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)^T$  η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου για την κατάσταση διαμόρφωσης πυκνότητας φορτίου παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$H_l = \sum_i \Psi_i^\dagger \left[ (t_{\langle i,j \rangle} + \mu + U \langle \hat{N}_{i,l} \rangle) \tau_3 \sigma_0 - U \langle \hat{M}_{i,l}^z \rangle \tau_3 \sigma_3 \right] \Psi_i, \quad (5.32)$$

όπου  $t_{\langle i,j \rangle}$  το ολοκλήρωμα μεταφοράς στους κοντινότερους γείτονες. Η ενέργεια δημιουργίας των μέσων πεδίων  $\frac{1}{2} \langle \hat{N}_{i,l} + \hat{M}_{i,l}^z \rangle \langle \hat{N}_{i,l} - \hat{M}_{i,l}^z \rangle$  δεν επηρεάζει την δυναμική των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων και επομένως αγνοείται. Ενώ εν γένει το διάνυσμα διαμόρφωσης της πυκνότητας φορτίου μπορεί να είναι οποιοσδήποτε γραμμικός συνδυασμός των κυματοανυσμάτων της ζώνης Brillouin του πλέγματος, για το συγκεκριμένο σύστημα τετραγωνικού πλέγματος με όρους μεταπήδησης μόνο στους κοντινότερους γείτονες αποδεικνύεται ότι για  $\mu \simeq 0$  το σύστημα ελαχιστοποιεί την ενέργεια του για το διάνυσμα διαμορφωσης  $Q = (\pi, \pi)$ . Για σύστημα με

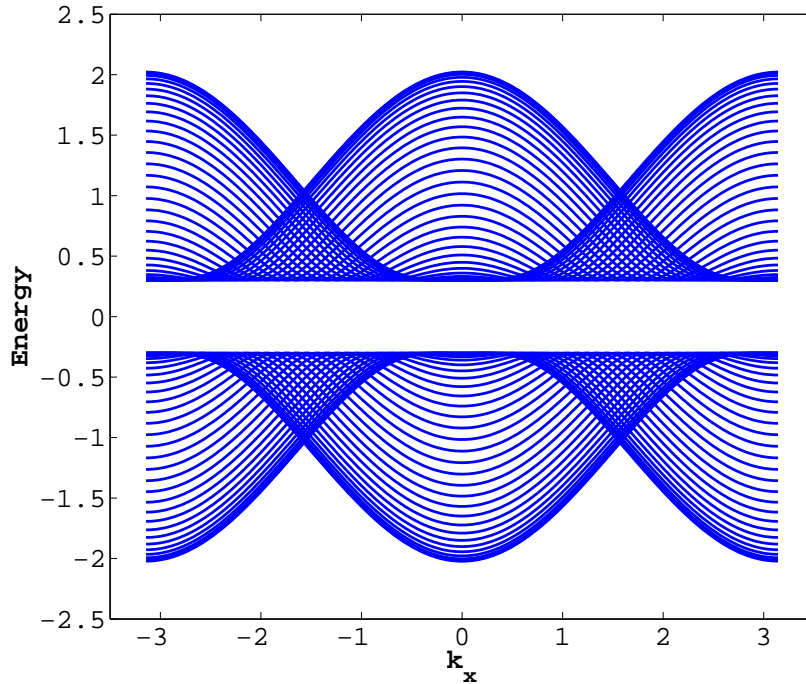
περιοδικές συνθήκες, και συνεπώς αναλλοίωτο στον μετασχηματισμό μεταφοράς, η Χαμιλτονιανή του συστήματος μπορεί να εκφραστεί στον χώρο των ορμών εισάγοντας τους αντίστοιχους τελεστές. Η Χαμιλτονιανή παίρνει την παρακάτω μορφή

$$H_{\text{CDW}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \left[ g_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_3 \sigma_0 + \mu \rho_0 \tau_3 \sigma_0 + \Delta_{\text{CDW}} \rho_1 \tau_3 \sigma_0 \right] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.33)$$

όπου έχει εισαχθεί ο σπίνορας  $\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})$  ενώ οι τελεστές  $\rho$ ,  $\tau$ ,  $\sigma$  ενεργούν στον χώρο των ορμών, Nambu και σπίν αντίστοιχα. Επίσης,  $g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό και  $\Delta_{\text{CDW}} = \frac{1}{N} U \sum_{\mathbf{k},s} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},s}^{\dagger} c_{\mathbf{k},s} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}} \langle \hat{N}_i \rangle$  η παράμετρος τάξης του CDW. Διαγωνοποιώντας την (5.33) προκύπτουν οι ιδιοενέργειες του CDW στο χώρο των ορμών:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \mu \pm \sqrt{g_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\text{CDW}}^2}. \quad (5.34)$$

Η γραφική παράσταση των ιδιοενεργειών (5.34) για  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\Delta_{\text{CDW}} = 0.3$ , φαίνεται παρακάτω.

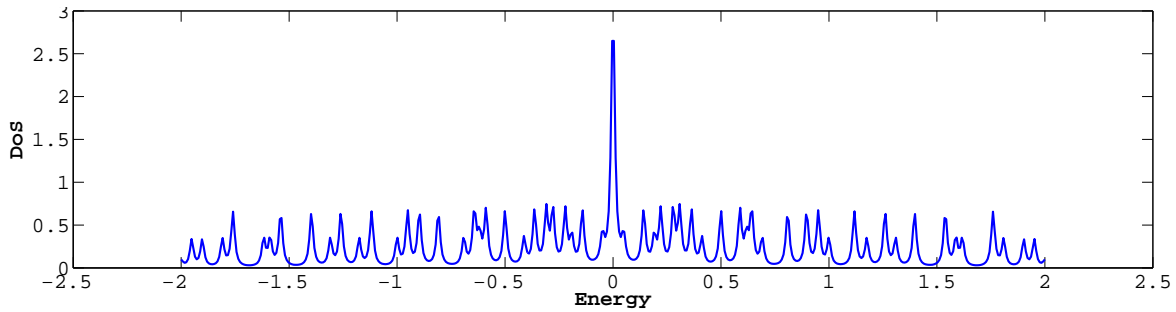


**Εικόνα 5.8:** Φάσμα ιδιοενεργειών CDW με  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\Delta_{\text{CDW}} = 0.3$  στο χώρο των ορμών. Παρατηρείται η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος εύρους 0.6 eV το οποίο είναι αναμενόμενο καθώς ισούται με το διπλάσιο του συντελεστή  $\Delta_{\text{CDW}}$ .

Προσομοιώνοντας υπό την έλλειψη on-site αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου στο σύστημα, το υλικό θα είναι μεταλλικό. Για

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = 0$ ,

η πυκνότητα καταστάσεων στον πραγματικό χώρο παρουσιάζεται παρακάτω.

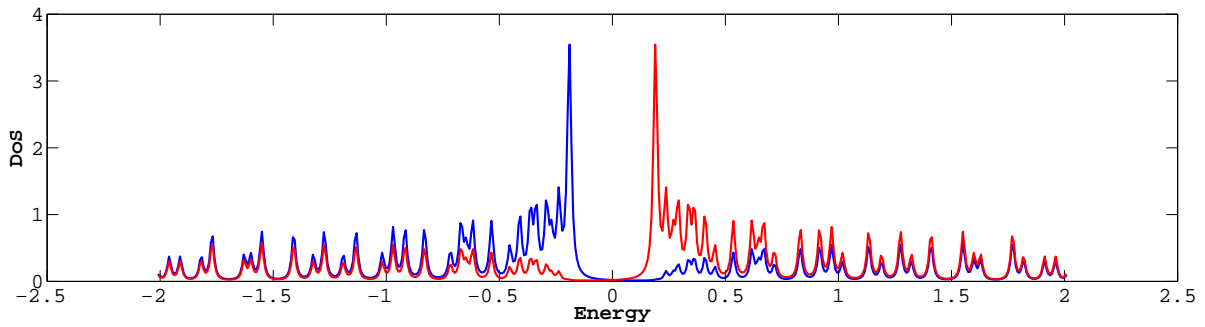


**Εικόνα 5.9:** Πυκνότητα καταστάσεων μετάλλου με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $U = 0$  για πλέγμα  $20 \times 20$  στον πραγματικό χώρο.

Πράγματι, παρατηρείται ότι λόγω έλλειψης on-site αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων ( $U = 0$ ) το υλικό εμφανίζει μεταλλικές ιδιότητες, δηλαδή πεπερασμένη πυκνότητα καταστάσεων για ενέργεια  $E = 0$  (επιφάνεια Fermi). Ενεργοποιώντας την on-site αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου στο σύστημα, δηλαδή για

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = -1$ ,

το υλικό αλλάζει φάση και εμφανίζει μονωτικές ιδιότητες, δηλαδή ενεργειακό χάσμα. Η πυκνότητα καταστάσεων του CDW στον πραγματικό χώρο παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα.



**Εικόνα 5.10:** Πυκνότητα καταστάσεων CDW με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $U = -1$  για πλέγμα  $20 \times 20$  στον πραγματικό χώρο. Οι πυκνότητες καταστάσεων των ηλεκτρονίων και των οπών απεικονίζονται με μπλε και κόκκινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται η εμφάνιση ενεργειακού χάσματος λόγω της ύπαρξης της παραμέτρου τάξης CDW το οποίο επιβεβαιώνεται και από την Εικόνα 5.8.

Από την παραπάνω εικόνα συμπεραίνεται ότι το υλικό χωρίζεται σε δύο “υποπλέγματα”, όπου το ένα περιέχει την πυκνότητα φορτίου των ηλεκτρονίων και το άλλο την πυκνότητα φορτίου των οπών. Παρατηρείται ότι η πυκνότητα καταστάσεων του CDW είναι συμμετρική στον μετασχηματισμό ηλεκτρονίου-οπής. Επίσης, εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα στο υλικό λόγω της ύπαρξης της παραμέτρου τάξης του κύματος πυκνότητας φορτίου.

Ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι διεπιφάνειες TI/CDW, καθώς λόγω εγγύτητας εμφανίζονται φαινόμενα μεταφοράς ιδιοτήτων από το ένα υλικό στο άλλο. Για να προσομοιωθεί η διεπιφάνεια TI/CDW στον πραγματικό χώρο χρησιμοποιούνται οι παρακάτω συντελεστές:

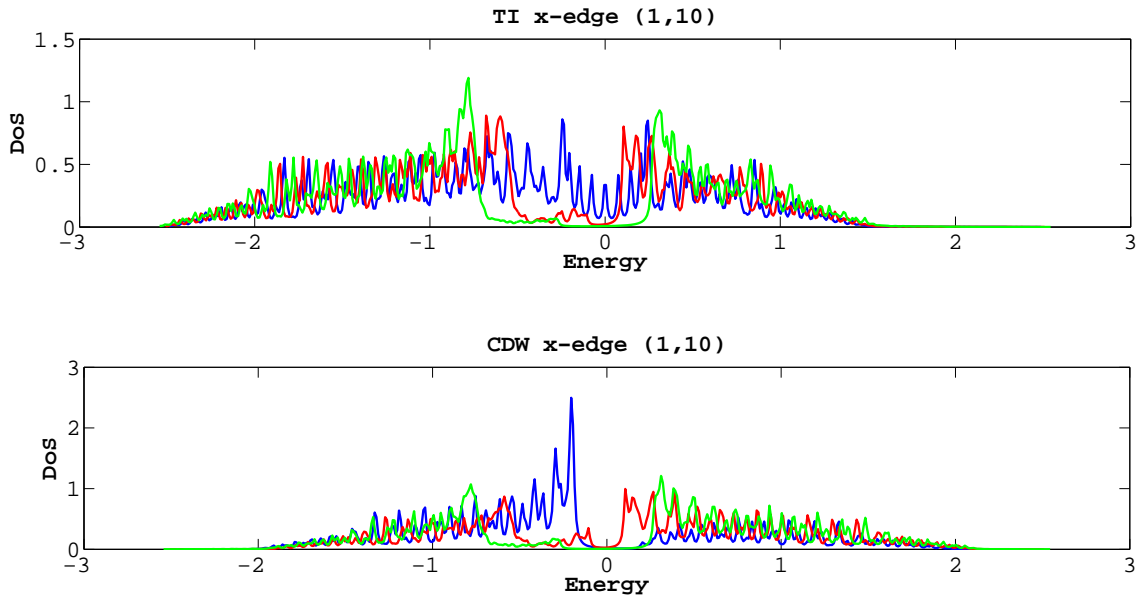
- $t = 0.5$ ,  $t_1 = -0.5$ ,  $t_2 = 0.5$
- $\mu = 0$ ,  $\epsilon_1 = -0.5$ ,  $\epsilon_2 = 0.5$ ,
- $t_{so} = 0.125$ ,
- σύνορο στην κατεύθυνση  $x$ ,

για τις δύο ενεργειακές ζώνες του τοπολογικού μονωτή, και

- $t = \mp 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = -1$ ,

για τις δύο ενεργειακές ζώνες του CDW (το CDW προσομοιώνεται με δύο ενεργειακές ζώνες

για λόγους πληρότητας, αφού και ο τοπολογικός μονωτής στο μοντέλο BHZ προσομοιώνεται με δύο ενεργειακές ζώνες). Η σύζευξη μεταξύ των επιφανειών καθορίζεται από τον συντελεστή μεταπήδησης  $t_{u+1}$  και γίνεται μεταξύ της πρώτης με την τέταρτη ενεργειακή ζώνη και της δεύτερης με την τρίτη. Παρακάτω απεικονίζεται η πυκνότητα καταστάσεων της διεπιφάνειας για διάφορες τιμές του συντελεστή  $t_{u+1}$  στον πραγματικό χώρο.



**Εικόνα 5.11:** Πυκνότητα καταστάσεων διεπιφάνειας TI/CDW για  $t_{u+1} = 0, 0.3, 0.5$  με μπλε, κοκκίνο και πράσινο χρώμα αντίστοιχα, και πλέγμα  $20 \times 20$  στον πραγματικό χώρο. Παρατηρείται ότι καθώς ο συντελεστής διεπιφανειακής σύζευξης αυξάνεται το ενεργειακό χάσμα του CDW μεταφέρεται στο σύνορο του τοπολογικού μονωτή κατά την κατεύθυνση  $x$  εξαλείφοντας την κατάσταση άκρης και δημιουργώντας ενεργειακό χάσμα.

Στην παραπάνω εικόνα παρατηρείται ότι κατά την έλλειψη σύζευξης μεταξύ των επιφανειών ο τοπολογικός μονωτής και το CDW συμπεριφέρονται με τον αναμενόμενο τρόπο. Ο τοπολογικός μονωτής εμφανίζει καταστάσεις άκρης στην κατεύθυνση  $x$  ενώ το CDW εμφανίζει ενεργειακό χάσμα. Καθώς ο συντελεστής αυξάνεται το ενεργειακό χάσμα του CDW μεταφέρεται στο σύνορο του τοπολογικού μονωτή δημιουργώντας ενεργειακό χάσμα. Με περαιτέρω αύξηση του συντελεστή παρατηρείται η εμφάνιση παρόμοιας διασποράς μεταξύ των δύο επιφανειών.

### 5.2.3 Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/S-wave υπεραγωγού (TI/S-wave SC)

Ένας singlet s-wave υπεραγωγός είναι ένας ιστροπικός συμβατικός υπεραγωγός στον οποίο η παράμετρος τάξης του υπεραγωγίμου χάσματος δεν εξαρτάται από την ορμή του συστήματος και η αλληλεπίδραση που καθορίζει την υπεραγωγίμη φάση είναι η on-site αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-οπής.

Η υπεραγωγίμη κατάσταση σταθεροποιείται για ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης  $U < 0$ . Στην προσέγγιση μέσου πεδίου ο όρος αλληλεπίδρασης αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned}
& U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rightarrow \\
& U \sum_i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \rightarrow \\
& \frac{1}{2} \sum_{i,s} \Delta_{i,l}^\dagger c_{i,s'l} c_{i,s,l} + \Delta_{i,l} c_{i,s,l}^\dagger c_{i,s'l}^\dagger - \frac{1}{2} \Delta_{i,l}^\dagger \Delta_{i,l}
\end{aligned} \tag{5.35}$$

όπου  $\Delta_{i,l}^\dagger = \frac{1}{2}U \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow}^\dagger - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow}^\dagger \rangle$  το τοπικό μέσο πεδίο της υπεραγωγίμης κατάστασης. Το πεδίο αυτό είναι αναγκαστικά singlet καθώς αναφέρεται σε τελεστές του ίδιου πλεγματοειδούς σημείου και γι' αυτό είναι αναγκαστικά αντισυμμετρικό ως προς την εναλλαγή των σπιν. Εισάγοντας τον σπίνορα  $\Psi_i = (c_{i\uparrow}, c_{i\downarrow}, c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)^T$  η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου για την υπεραγωγίμη κατάσταση παίρνει την παρακάτω μορφή

$$H_l = \sum_i \Psi_i^\dagger [(t_{\langle i,j \rangle} + \mu)\tau_z \sigma_0 + \Delta_{i,l} \tau_y \sigma_y] \Psi_i, \tag{5.36}$$

όπου  $t_{\langle i,j \rangle}$  το ολοκλήρωμα μεταφοράς στους κοντινότερους γείτονες. Η ενέργεια δημιουργίας των μέσων πεδίων  $\frac{1}{2}\Delta_{i,l}^\dagger \Delta_{i,l}$  δεν επηρεάζει την δυναμική των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων και συνεπώς αγνοείται. Για σύστημα με περιοδικές συνθήκες, και συνεπώς αναλλοίωτο στον μετασχηματισμό μεταφοράς, η Χαμιλτονιανή του συστήματος μπορεί να εκφραστεί στον χώρο των ορμών εισάγοντας τους αντίστοιχους τελεστές. Η Χαμιλτονιανή παίρνει την παρακάτω μορφή

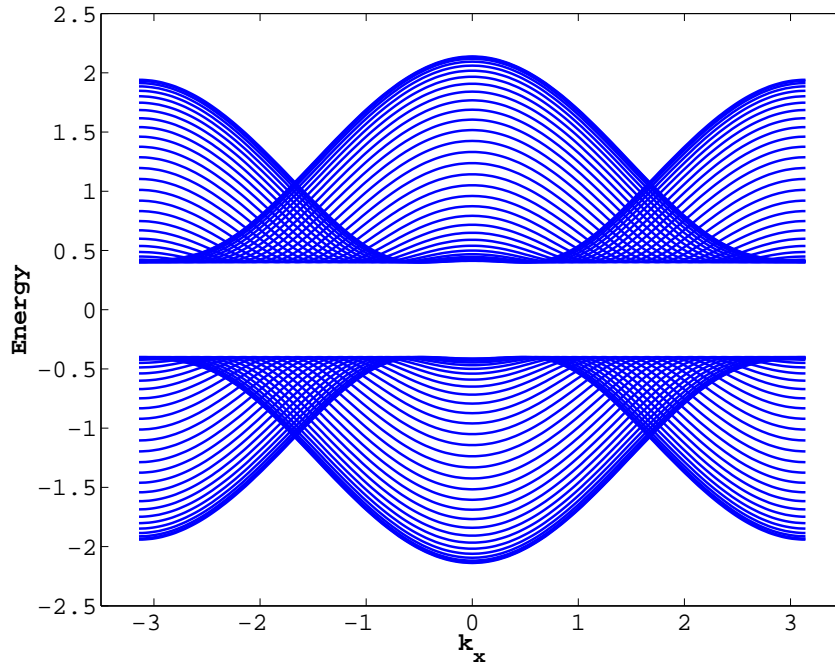
$$H_{\text{S-wave SC}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [g_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_3 \sigma_0 + \mu \rho_0 \tau_3 \sigma_0 + \Delta \rho_0 \tau_2 \sigma_2] \Psi_{\mathbf{k}}, \tag{5.37}$$

όπου έχει εισαχθεί ο σπίνορας  $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})$ , ενώ οι τελεστές  $\rho, \tau, \sigma$  ενεργούν στον χώρο των ορμών, Nambu και σπίν αντίστοιχα. Επίσης,

$g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό και  $\Delta = \frac{1}{2N}U \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow}c_{\mathbf{k},\uparrow} - c_{-\mathbf{k},\uparrow}c_{\mathbf{k},\downarrow} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \Delta_{i,l}$  η παράμετρος τάξης της υπεραγώγιμης κατάστασης. Διαγωνοποιώντας την (5.37) προκύπτουν οι ιδιοενέργειες του s-wave υπεραγωγού στο χώρο των ορμών:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(g_{\mathbf{k}} + \mu)^2 + \Delta^2}. \quad (5.38)$$

Η γραφική αναπαράσταση των ιδιοενεργειών (5.38) για  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\Delta = 0.4$ , φαίνεται παρακάτω.



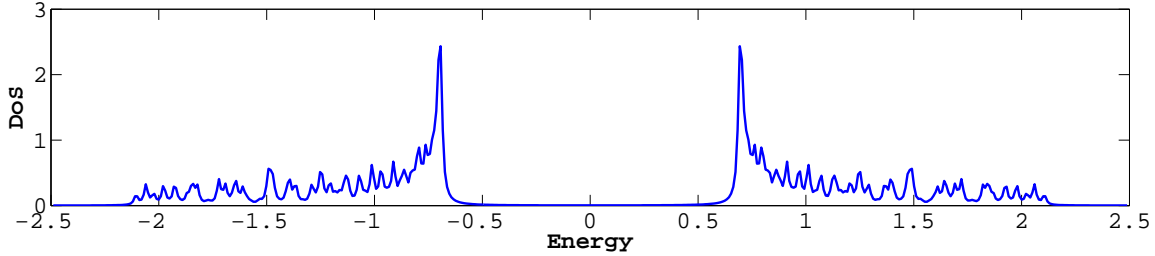
**Εικόνα 5.12:** Φάσμα ιδιοενεργειών singlet s-wave υπεραγωγού με  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $\Delta = 0.4$  στο χώρο των ορμών. Παρατηρείται η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος εύρους 0.8 eV το οποίο είναι αναμενόμενο καθώς ισούται με το διπλάσιο του συντελεστή  $\Delta$ .

Ο singlet s-wave υπεραγωγός προσομοιώνεται στον πραγματικό χώρο με τη βοήθεια των παρακάτω συντελεστών:

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = -2$ ,

όπου τώρα ο συντελεστής  $U$  καθορίζει την on-site αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-οπής. Στην

επόμενη εικόνα παραθέεται η πυκνότητα καταστάσεων του s-wave υπεραγωγού στον πραγματικό χώρο. Παρατηρείται η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος, καθώς η παράμετρος τάξης  $\Delta$  είναι πεπερασμένη.



**Εικόνα 5.13:** Πυκνότητα καταστάσεων singlet s-wave υπεραγωγού με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $U = -2$  για πλέγμα  $20 \times 20$  στον πραγματικό χώρο. Παρατηρείται η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος η οποία επιβεβαιώνεται και από την Εικόνα 5.12.

Για να προσομοιωθεί η διεπιφάνεια TI/S-wave SC στον πραγματικό χώρο χρησιμοποιούνται οι παρακάτω συντελεστές:

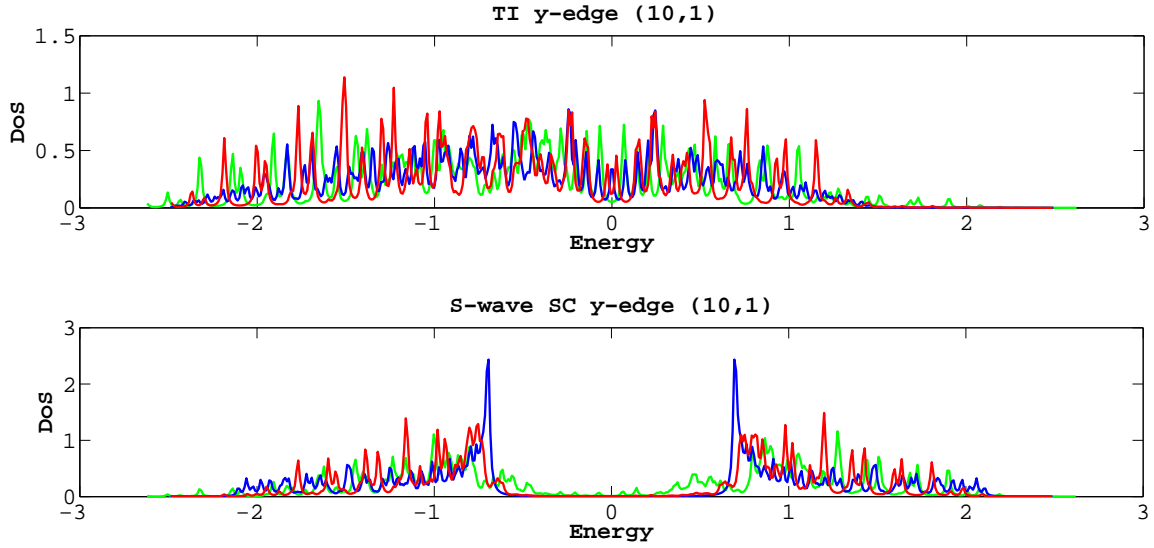
- $t = 0.5$ ,  $t_1 = -0.5$ ,  $t_2 = 0.5$
- $\mu = 0$ ,  $\epsilon_1 = -0.5$ ,  $\epsilon_2 = 0.5$ ,
- $t_{so} = 0.125$ ,
- σύνορο στην κατεύθυνση  $y$ ,

για τις δύο ενεργειακές ζώνες του τοπολογικού μονωτή, και

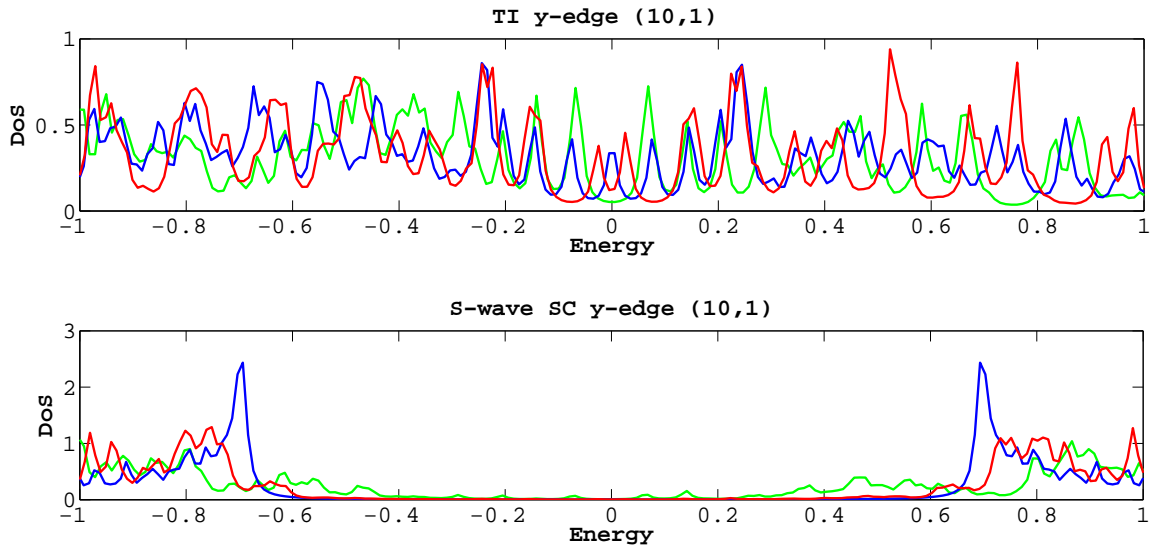
- $t = \pm 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = -2$ ,

για τις δύο ενεργειακές ζώνες του singlet s-wave υπεραγωγού (ο s-wave υπεραγωγός προσομοιώνεται με δύο ενεργειακές ζώνες για λόγους πληρότητας, αφού και ο τοπολογικός μονωτής στο μοντέλο BHZ προσομοιώνεται με δύο ενεργειακές ζώνες). Η σύζευξη μεταξύ των επιφανειών καθορίζεται από τον συντελεστή  $t_{u+1}$  και γίνεται μεταξύ της πρώτης με την τέταρτη ενεργειακή ζώνη και της δεύτερης με την τρίτη. Παρακάτω απεικονίζεται η πυκνότητα καταστάσεων της διεπιφάνειας για διάφορες τιμές του συντελεστή  $t_{u+1}$  στον πραγματικό χώρο.





**Εικόνα 5.14:** Πυκνότητα καταστάσεων διεπιφάνειας TI/S-wave SC για  $t_{l+1} = 0, 0.3, 0.5$  με μπλε και κοκκινο χρώμα αντίστοιχα, και πλέγμα  $20 \times 20$  στον πραγματικό χώρο. Παρατηρείται ότι καθώς ο συντελεστής διεπιφανειακής σύζευξης γίνεται πεπερασμένος το ενεργειακό χάσμα του s-wave υπεραγωγού μεταφέρεται στο σύνορο του τοπολογικού μονωτή κατά την κατεύθυνση  $y$  εξαλείφοντας την κατάσταση άκρης και δημιουργώντας ενεργειακό χάσμα.



**Εικόνα 5.15:** Εστίαση στην ενέργεια  $E = 0$  της πυκνότητας καταστάσεων διεπιφάνειας TI/S-wave SC για  $t_{l+1} = 0, 0.3, 0.5$  με μπλε και κοκκινο χρώμα αντίστοιχα, και πλέγμα  $20 \times 20$ .

Στις παραπάνω εικόνες παρατηρείται η μεταφορά του ενεργειακού χάσματος από τον υπεραγωγό στο σύνορο του τοπολογικού μονωτή. Με περαιτέρω αύξηση της διεπιφανειακής σύζευξης ο τοπολογικός μονωτής και ο υπεραγωγός αναμένεται να αποκτήσουν παρόμοια διασπορά πυκνότητας καταστάσεων.

## 5.3 Αριθμητικά Αποτελέσματα Μοντέλου Ενεργούς Χαμιλτονιανής

### 5.3.1 Προσομοίωση τοπολογικού μονωτή με το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής

Για να μελετηθούν τα φαινόμενα εγγύτητας διεπιφανειών που εμπεριέχουν τοπολογικό μονωτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί, αντί του μοντέλου BHZ, το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής το οποίο περιγράφει τις ιδιοκαταστάσεις άκρης ή επιφάνειας του τοπολογικού μονωτή. Για 2-D τοπολογικό μονωτή, όπως δείχθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, η 1-D ενεργός Χαμιλτονιανή άκρης στο συνεχή χώρο έχει την παρακάτω μορφή

$$H_{2\text{DTI,edge}} = \int \frac{dk}{2\pi} \Psi_k^\dagger [C\rho_0\tau_3\sigma_0 + Ak\rho_3\tau_0\sigma_3] \Psi_k, \quad (5.39)$$

όπου  $k$  η 1-D ορμή,  $C$  ένας όρος χημικού δυναμικού και  $A$  η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς. Η αντίστοιχη ενεργός Χαμιλτονιανής επιφάνειας ενός 3-D τοπολογικού μονωτή στο συνεχή χώρο παίρνει τη μορφή

$$H_{3\text{DTI,surf}} = \int \frac{d\mathbf{k}}{2\pi} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [C\rho_0\tau_3\sigma_0 + A(k_y\rho_3\tau_0\sigma_1 - k_x\rho_3\tau_3\sigma_2)] \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (5.40)$$

Οι παραπάνω σχέσεις έχουν εκφραστεί με την βοήθεια του σπίνορα

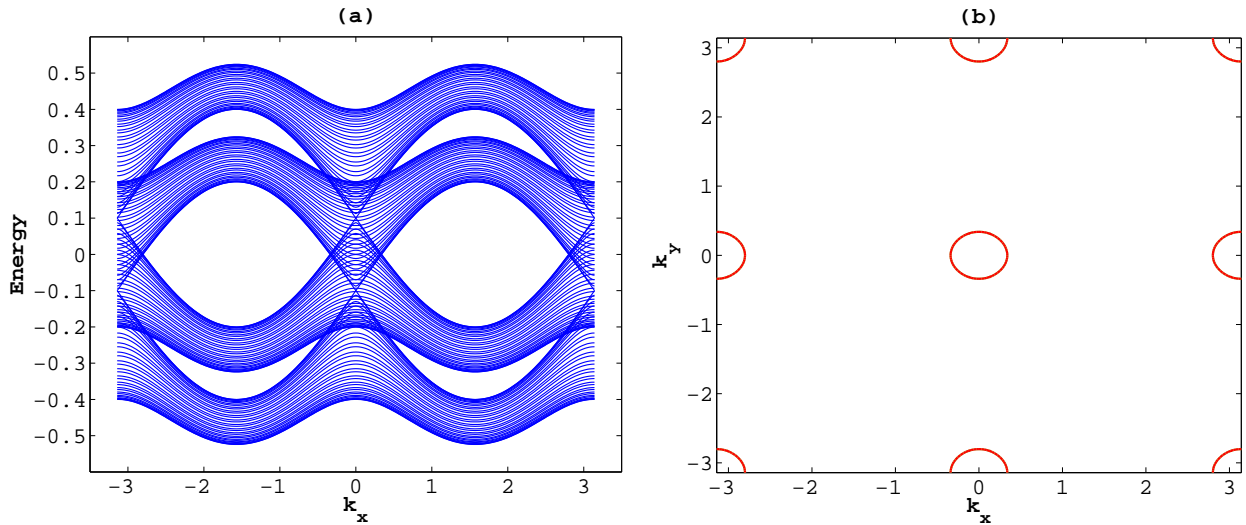
$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})$  στον χώρο  $SU(8)$   $\boldsymbol{\rho} \times \boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\sigma}$ , όπου  $\boldsymbol{\rho}$  οι μήτρες Pauli που αναφέρονται στο χώρο των ορμών,  $\boldsymbol{\tau}$  οι μήτρες Pauli που αναφέρονται στον χώρο Nambu,  $\boldsymbol{\sigma}$  οι μήτρες Pauli που αναφέρονται στον χώρο των σπιν και  $\rho_0 = \tau_0 = \sigma_0 = I$ . Στον διακριτό πλεγματοειδή χώρο η ενεργός Χαμιλτονιανή στο σύνορο ενός 3-D τοπολογικού μονωτή αποκτά την παρακάτω μορφή

$$H_{3\text{DTI,surf}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [R(\sin k_y\rho_3\tau_0\sigma_1 - \sin k_x\rho_3\tau_3\sigma_2) + \mu\rho_0\tau_3\sigma_0] \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (5.41)$$

Διαγωνοποιώντας την (5.41) προκύπτει το φάσμα ιδιοενεργειών της ενεργούς Χαμιλτονιανής του τοπολογικού μονωτή στον χώρο των ορμών:

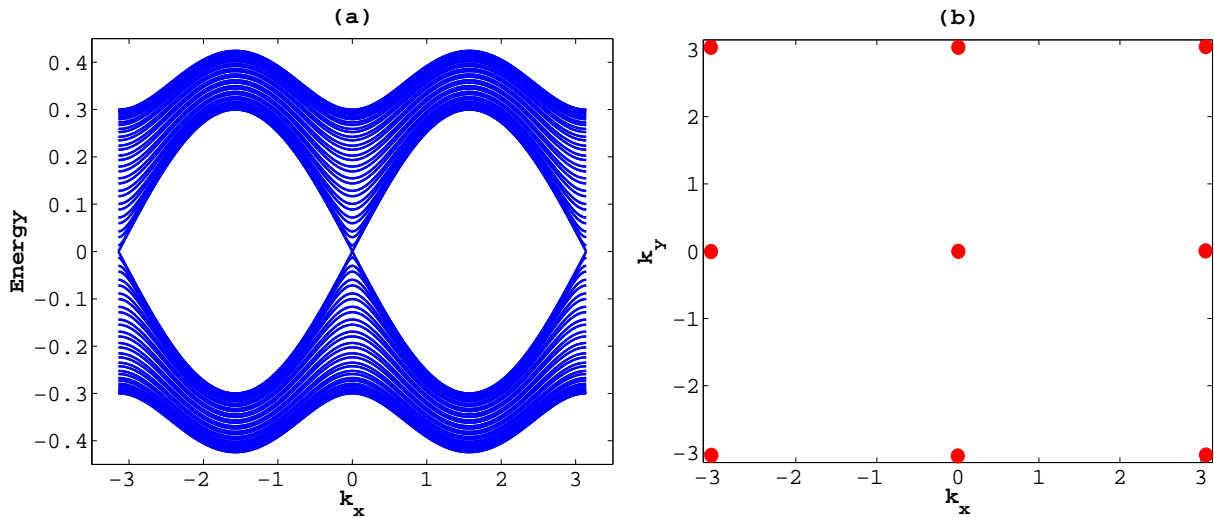
$$E_{\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm\mu \pm R\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}. \quad (5.42)$$

Η γραφική αναπαράσταση των ιδιοενεργειών (5.42) για  $R = 0.3$ ,  $\mu = 0.1$ , καθώς και η επιφάνεια Fermi στην πρώτη ζώνη Brillouin, απεικονίζεται παρακάτω.



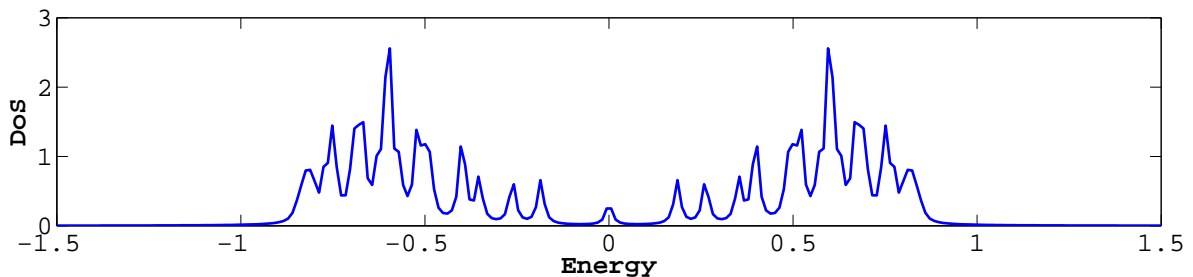
**Εικόνα 5.16:** (a) Φάσμα ιδιοενεργειών της επιφάνειας του 3-D τοπολογικού μονωτή με  $R = 0.3$ ,  $\mu = 0.1$  στον χώρο των ορμών. (b) Επιφάνεια Fermi της επιφάνειας του 3-D τοπολογικού μονωτή για  $R = 0.3$ ,  $\mu = 0.1$  στην πρώτη ζώνη Brillouin.

Στην παραπάνω εικόνα παρατηρείται ότι για  $\mu = 0.1$  υπάρχει επιφάνεια Fermi της μορφής (b). Για  $\mu = 0$  η γραφική παράσταση των ιδιοενεργειών και η επιφάνεια Fermi φαίνεται στην παρακάτω εικόνα.



**Εικόνα 5.17:** (a) Φάσμα ιδιοενεργειών της επιφάνειας του 3-D τοπολογικού μονωτή με  $R = 0.3$ ,  $\mu = 0$  στον χώρο των ορμών. (b) Επιφάνεια Fermi της επιφάνειας του 3-D τοπολογικού μονωτή για  $R = 0.3$ ,  $\mu = 0$  στην πρώτη ζώνη Brillouin. Παρατηρείται ότι η επιφάνεια Fermi περιέχει εννέα κόμβους και το φάσμα των ιδιοενεργειών έναν κώνο Dirac στο κέντρο της ζώνης Brillouin.

Στην παρακάτω εικόνα παρουσιάζεται η πυκνότητα καταστάσεων στην επιφάνεια ενός 3-D τοπολογικού μονωτή με  $\mu = 0$ ,  $R = 0.3$  στον πραγματικό χώρο. Παρατηρείται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi λόγω των επιφανειακών μεταλλικών ιδιοκαταστάσεων.



**Εικόνα 5.18:** Πυκνότητα καταστάσεων επιφάνειας 3-D τοπολογικού μονωτή με  $\mu = 0$ ,  $R = 0.3$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Παρατηρείται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi λόγω των επιφανειακών μεταλλικών ιδιοκαταστάσεων.

### 5.3.2 Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/αντισιδηρομαγνήτη (TI/AFM)

Ο αντισιδηρομαγνήτης (AFM) είναι ένας Mott μονωτής ο οποίος παρουσιάζει διαμόρφωση στην μαγνήτιση κατά τον άξονα  $z$  (διαμόρφωση στον κανάλι του σπιν κατα τον άξονα  $z$ ). Βρίσκεται σε πλήρη αντιστοιχία με το κύμα πυκνότητας φορτίου με τη διαφορά ότι στο CDW υπάρχει διαμόρφωση στην πυκνότητα φορτίου. Για αυτό το λόγο ονομάζεται και κύμα πυκνότητας σπιν (SDW).

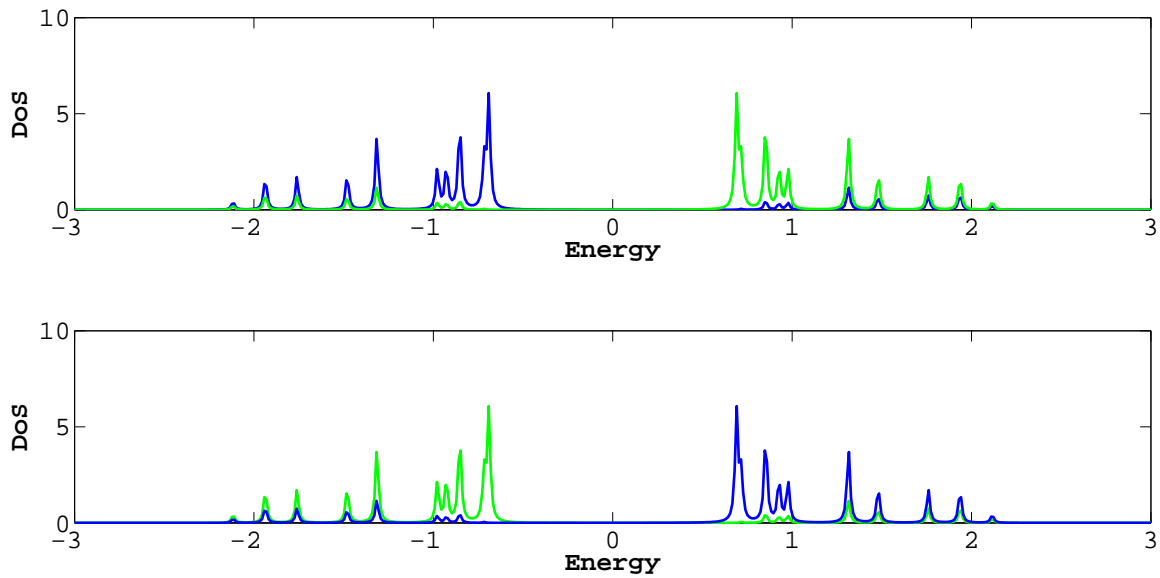
Η Χαμιλτονιανή του αντισιδηρομαγνήτη στον χώρο των ορμών έχει την παρακάτω μορφή:

$$H_{\text{AFM}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} [g_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_3 \sigma_0 + \mu \rho_0 \tau_3 \sigma_0 + \Delta_{\text{SDW}} \rho_1 \tau_3 \sigma_3] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.43)$$

όπου  $g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό και  $\Delta_{\text{SDW}} = \frac{1}{N} U \sum_{\mathbf{k}, s} s \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, s}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, s} \rangle$  η παράμετρος τάξης του αντισιδηρομαγνήτη. Διαγωνοποιώντας την (5.43) προκύπτουν οι ιδιοενέργειες του αντισιδηρομαγνήτη στο χώρο των ορμών:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \mu \pm \sqrt{g_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\text{SDW}}^2}. \quad (5.44)$$

Το φάσμα ιδιοενεργειών του AFM είναι πανομοιότυπο με αυτό του CDW της Εικόνας 5.8 αλλά οι ιδιοκαταστάσεις έχουν διαφορετική δομή στον χώρο των σπιν. Η αντισιδηρομαγνητική φάση σταθεροποιείται για θετικές τιμές του on-site δυναμικού αλληλεπίδρασης σε αντίθεση με την υπεραγώγιμη φάση και την φάση διαμόρφωσης πυκνότητας φορτίου. Η πυκνότητα καταστάσεων του AFM για  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $U = 2$  παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα.



**Εικόνα 5.19:** Πυκνότητα καταστάσεων AFM για θετική και αρνητική τοπική μαγνήτιση με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $U = 2$  για πλέγμα  $20 \times 20$ . Οι πυκνότητες καταστάσεων των ηλεκτρονίων με σπιν πάνω και σπιν κάτω απεικονίζονται με μπλε και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται η εμφάνιση ενεργειακού χάσματος λόγω της ύπαρξης της παραμέτρου τάξης  $\Delta_{SDW}$ . Επίσης, παρατηρείται η άρση του εκφυλισμού των σπιν λόγω της μαγνήτισης κατά τον άξονα  $z$  καθώς και η ανεστραμμένη πυκνότητα καταστάσεων μεταξύ κοντινότερων γειτόνων οι οποίοι ζουν σε διαφορετικά υποπλέγματα στον κανάλι των σπιν.

Από την παραπάνω εικόνα συμπεραίνεται ότι η πυκνότητα καταστάσεων του AFM χωρίζεται στην πυκνότητα καταστάσεων των ηλεκτρονίων με σπιν πάνω και σπιν κάτω. Αυτό συμβαίνει λόγω της παρουσίας εξωτερικού μαγνητικού πεδίου κατά τον άξονα  $z$ . Επίσης, εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα στο υλικό λόγω της ύπαρξης της παραμέτρου τάξης του κύματος πυκνότητας σπιν. Τέλος, λόγω της διαμόρφωσης στο κανάλι των σπιν τα δύο υποπλέγματα έχουν ανεστραμμένη πυκνότητα καταστάσεων λόγω της αντίθετης τοπικής μαγνήτισης στους κοντινότερους γείτονες.

Ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι διεπιφάνειες TI/AFM, καθώς λόγω εγγύτητας εμφανίζονται φαινόμενα μεταφοράς ιδιοτήτων από το ένα υλικό στο άλλο. Η Χαμιλτονιανή της διεπιφάνειας

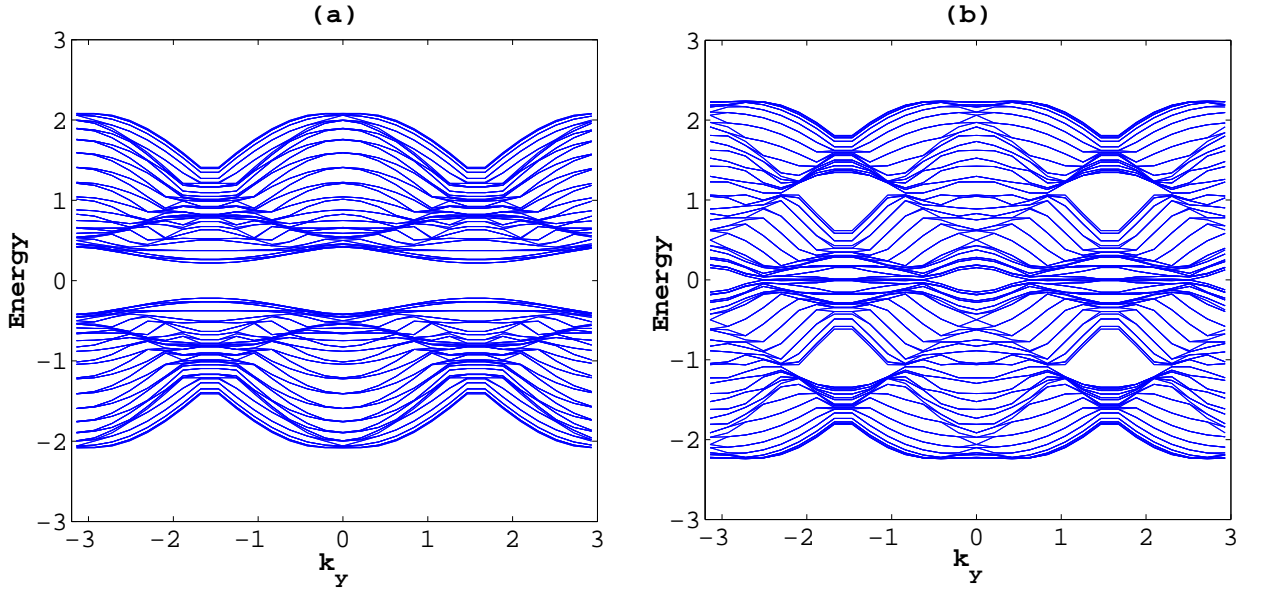
στο χώρο των ορμών θα είναι

$$H_{\text{TI-AFM}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} [(g_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_3 \sigma_0 + \mu \rho_0 \tau_3 \sigma_0) + \Delta_{\text{SDW}} \rho_1 \tau_3 \sigma_3 + R(\sin k_y \rho_3 \tau_0 \sigma_1 - \sin k_x \rho_3 \tau_3 \sigma_2)] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.45)$$

όπου  $g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό,  $R$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς τύπου Rashba και  $\Delta_{\text{SDW}}$  η παράμετρος τάξης του αντισιδηρομαγνήτη. Διαγωνοποιώντας την (5.45) προκύπτει το φάσμα ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας στο χώρο των ορμών:

$$E_{\pm, \pm, \pm}(\mathbf{k}) = \pm \mu \pm \sqrt{g_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\text{SDW}}^2} \pm R \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}. \quad (5.46)$$

Η γραφική αναπαράσταση των ιδιοενεργειών (5.46) για  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $R = 0.2$ ,  $\Delta_{\text{SDW}} = 0.5$  (a) και  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $R = 0.6$ ,  $\Delta_{\text{SDW}} = 0.5$  (b) εμφανίζεται παρακάτω. Παρατηρείται ότι για  $R > \Delta_{\text{SDW}}/\sqrt{2}$  το ενεργειακό χάσμα εξαφανίζεται όταν  $\mu = 0$ .



**Εικόνα 5.20:** (a) Φάσμα ιδιοενεργειών διεπιφάνειας TI/AFM με  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $R = 0.2$ ,  $\Delta_{\text{SDW}} = 0.5$  στο χώρο των ορμών. (b) Φάσμα ιδιοενεργειών διεπιφάνειας TI/AFM με  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $R = 0.6$ ,  $\Delta_{\text{SDW}} = 0.5$  στο χώρο των ορμών. Παρατηρείται ότι η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος εξαρτάται από τους συντελεστές  $R$ ,  $\Delta_{\text{SDW}}$ . Για  $R > \Delta_{\text{SDW}}/\sqrt{2}$  το ενεργειακό χάσμα κλείνει.



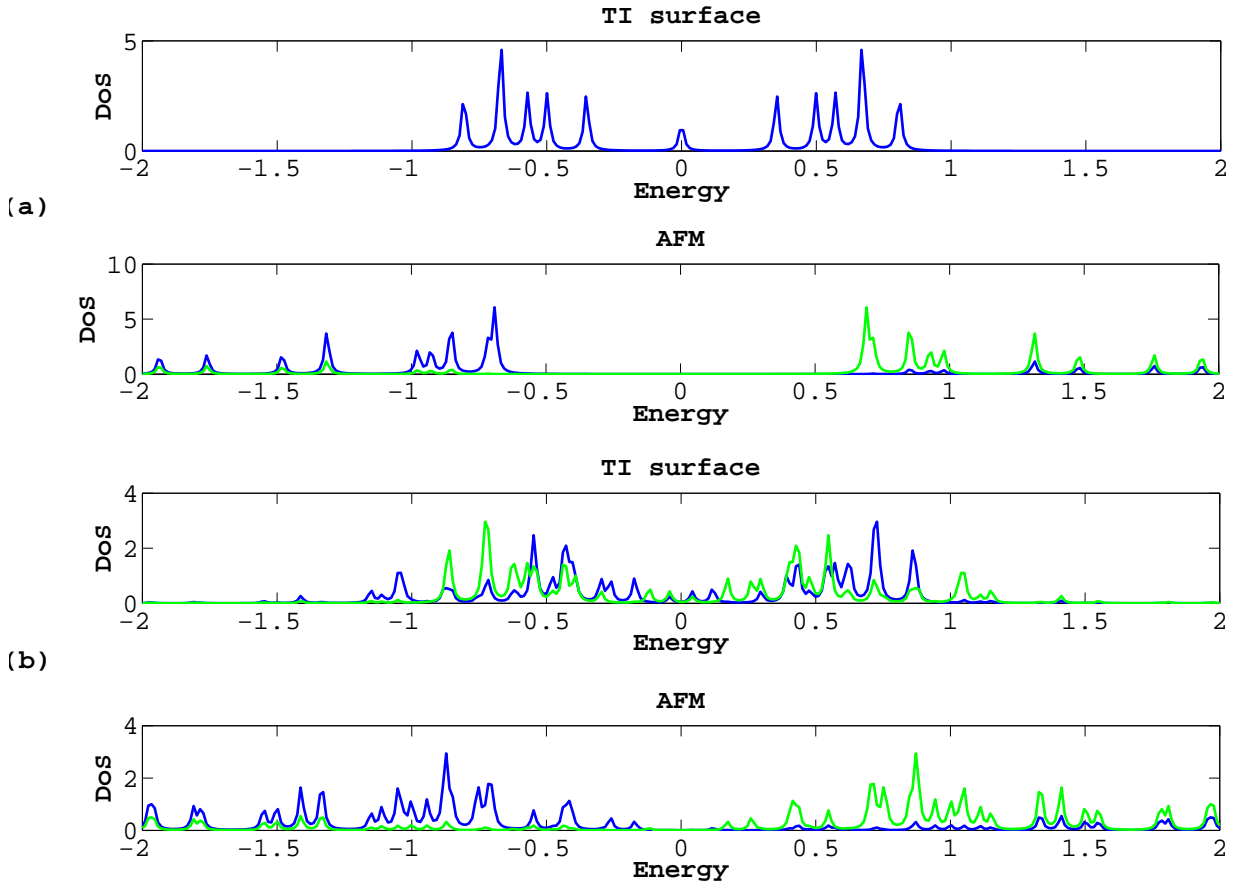
Στην περίπτωση του μοντέλου ενεργούς Χαμιλτονιανής οι παράμετροι για την υλοποίηση της διεπιφάνειας TI/AFM στο χώρο των ορμών είναι

- $\mu = 0$
- $R = 0.3$

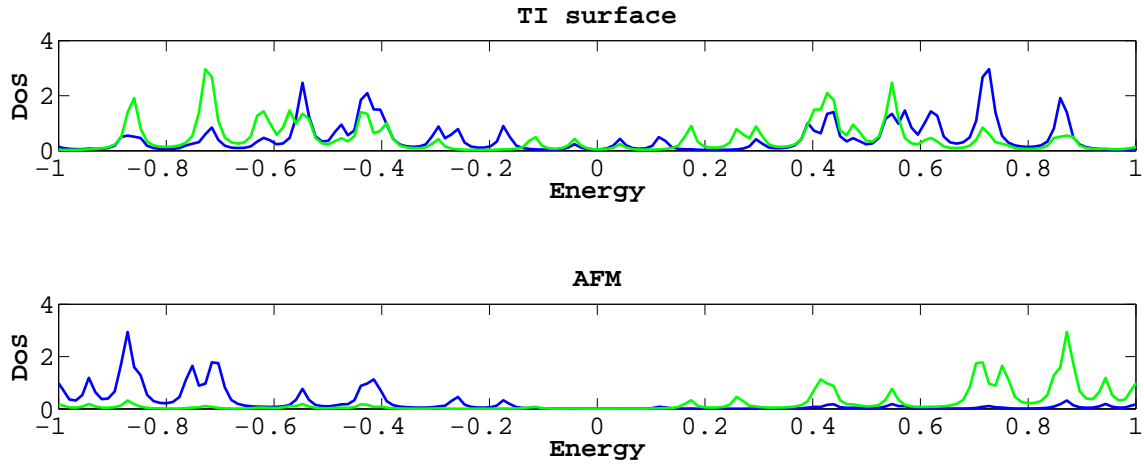
για τον τοπολογικό μονωτή, και

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = 2$ ,

για τον AFM. Η σύζευξη μεταξύ των επιφανειών καθορίζεται από τον συντελεστή  $t_{l+1}$  όπου σε αυτή την περίπτωση συζευγνύει την πρώτη ενεργειακή ζώνη (TI) με την δεύτερη (AFM). Η πυκνότητα καταστάσεων της διεπιφάνειας φαίνεται στην παρακάτω εικόνα για διάφορες τιμές του συντελεστή  $t_{l+1}$ .



**Εικόνα 5.21:** (a) Πυκνότητα καταστάσεων διεπιφάνειας TI/AFM για  $t_{l+1} = 0$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Οι καταστάσεις με σπιν πάνω και σπιν κάτω απεικονίζονται με μπλέ και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι η διεπιφάνεια είναι μη συζευγμένη. (b) Πυκνότητα καταστάσεων διεπιφάνειας TI/AFM για  $t_{l+1} = 0.3$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Οι καταστάσεις με σπιν πάνω και σπιν κάτω απεικονίζονται με μπλέ και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι κατά την ύπαρξη σύζευξης στη διεπιφάνεια το ενεργειακό χάσμα του AFM μεταφέρεται στον τοπολογικό μονωτή. Επιπρόσθετα, γίνεται άρση του εκφυλισμού των σπιν τοπολογικό μονωτή λόγω εγγύτητας.



**Εικόνα 5.22:** Εστίαση στην ενέργεια  $E = 0$  της πυκνότητας καταστάσεων διεπιφάνειας TI/AFM για  $t_{u+1} = 0.3$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Οι καταστάσεις με σπιν πάνω και σπιν κάτω απεικονίζονται με μπλέ και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα.

Στις παραπάνω εικόνες παρατηρείται ότι κατά την έλλειψη σύζευξης μεταξύ των επιφανειών ο τοπολογικός μονωτής και ο AFM συμπεριφέρονται με τον αναμενόμενο τρόπο. Η επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή εμφανίζει κατάσταση άκρης ενώ ο AFM εμφανίζει ενεργειακό χάσμα και άρση του εκφυλισμού των καταστάσεων των ηλεκτρονίων με σπιν πάνω και σπιν κάτω. Καθώς ο συντελεστής γίνεται μη μηδενικός το ενεργειακό χάσμα του AFM μεταφέρεται στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή δημιουργώντας ενεργειακό χάσμα. Επίσης, γίνεται άρση του εκφυλισμού των καταστάσεων των ηλεκτρονίων με σπιν πάνω και σπιν κάτω στον τοπολογικό μονωτή λόγω εγγύτητας με τον αντισιδηρομαγνήτη που εμφανίζει μαγνήτιση κατά τον άξονα  $z$ .

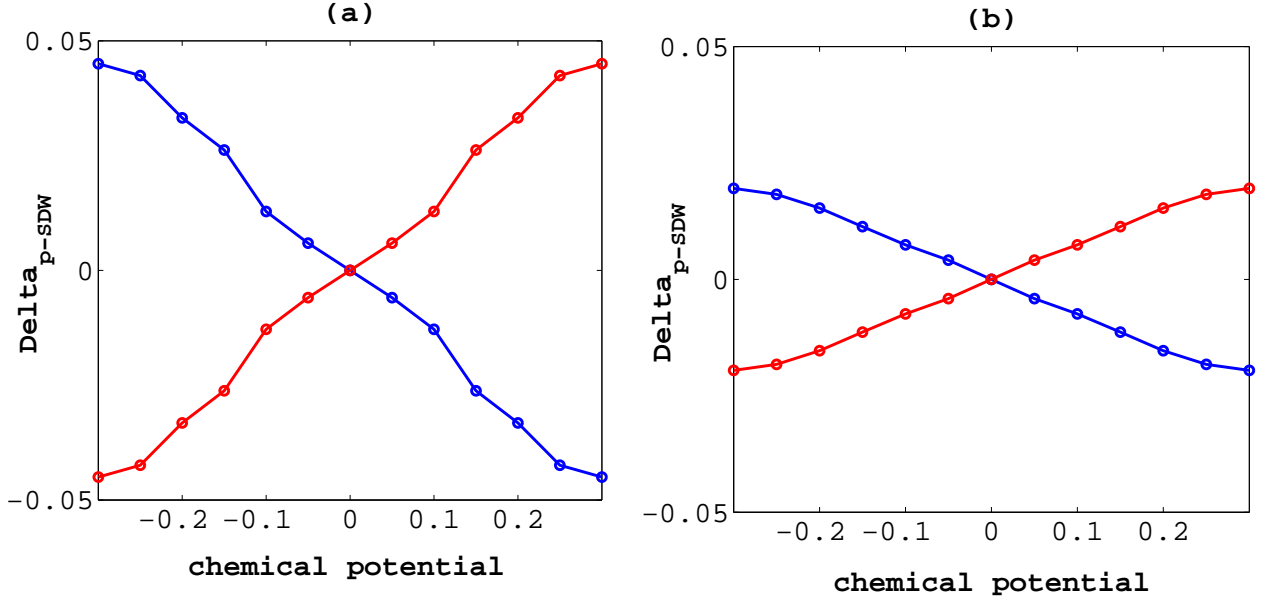
Μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει ο κανόνας κουαρτέτων, κατά τον οποίο η συνύπαρξη τριών παραμέτρων τάξης στο σύστημα επάγει μια τέταρτη, ώστε το γινόμενο των τεσσάρων παραμέτρων τάξης στην αναπαράσταση των μητρών Pauli στον χώρο  $SU(8)$   $\boldsymbol{\rho} \times \boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\sigma}$  να είναι η μοναδιαία μήτρα. Έστω ότι η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς αναλύεται στις συνιστώσες  $R_x \sin k_y$  και  $R_y \sin k_x$ . Σύμφωνα με τον κανόνα κουαρτέτων για πεπερασμένο χημικό δυναμικό (ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής), η επίδραση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στον αντισιδηρομαγνήτη

επάγει τις παρακάτω παραμέτρους τάξης:

$$\Delta_{\text{SDW}}\rho_1\tau_3\sigma_3 + R_x \sin k_y\rho_3\tau_0\sigma_1 + \mu\rho_0\tau_3\sigma_0 \rightarrow \Delta_{\text{p-SDW}} \sin k_y\rho_2\tau_0\sigma_2, \quad (5.47)$$

$$\Delta_{\text{SDW}}\rho_1\tau_3\sigma_3 + R_y \sin k_x\rho_3\tau_3\sigma_2 + \mu\rho_0\tau_3\sigma_0 \rightarrow \Delta_{\text{p-SDW}} \sin k_x\rho_2\tau_3\sigma_1. \quad (5.48)$$

Στην παρακάτω εικόνα παρουσιάζεται η συμπεριφορά των επαγόμενων παραμέτρων τάξης συναρτήσει του χημικού δυναμικού.



**Εικόνα 5.23:** Γραφική παράσταση των επαγόμενων παραμέτρων τάξης  $\Delta_{\text{p-SDW}} \sin k_x$  και  $\Delta_{\text{p-SDW}} \sin k_y$  συναρτήσει του χημικού δυναμικού με κόκκινο και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα, στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή **(a)** και του αντισιδηρομαγνήτη **(b)**. Παρατηρείται ότι κατά την έλλειψη χημικού δυναμικού οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης είναι μηδενικοί, δηλαδή, υπάρχει σύζευξη μεταξύ της παραμέτρου τάξης του αντισιδηρομαγνήτη  $\Delta_{\text{SDW}}$  και του χημικού δυναμικού.

Δυστυχώς, δεν υπάρχουν απλές αναλυτικές εκφράσεις για τις ιδιοενέργειες του συστήματος αν συμπεριληφθούν και οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης.

### 5.3.3 Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/S-wave υπεραγωγού (TI/S-wave SC)

Εισάγοντας τον σπίνορα  $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})$  του χώρου  $SU(8)$   $\boldsymbol{\rho} \times \boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\sigma}$  προκύπτει η Χαμιλτονιανή της διεπιφάνειας TI/S-wave SC στο χώρο των ορμών:

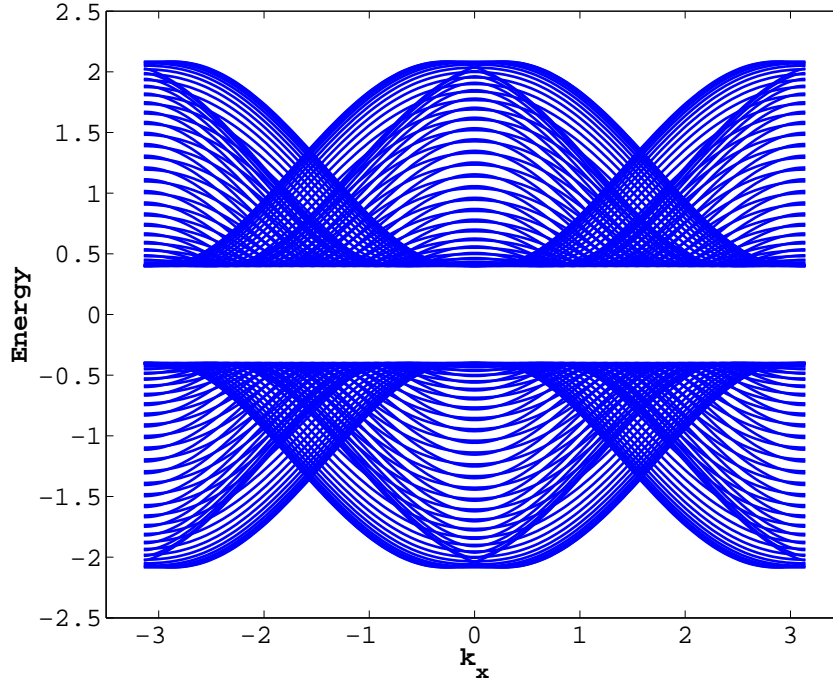
$$H_{\text{TI-SwaveSC}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [(g_{\mathbf{k}}\rho_3\tau_3\sigma_0 + \mu\rho_0\tau_3\sigma_0) + \Delta\rho_0\tau_2\sigma_2 + R(\sin k_y\rho_3\tau_0\sigma_1 - \sin k_x\rho_3\tau_3\sigma_2)] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.49)$$

όπου  $g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό,  $R$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς τύπου Rashba και  $\Delta = \frac{1}{2N}U \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow}c_{\mathbf{k},\uparrow} - c_{-\mathbf{k},\uparrow}c_{\mathbf{k},\downarrow} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \Delta_{i,l}$  η παράμετρος τάξης του singlet υπεραγωγού, η οποία δεν εξαρτάται από την ορμή.

Διαγωνοποιώντας την (5.49) προκύπτει το φάσμα ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας για στον χώρο των ορμών

$$E_{\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + [(g_{\mathbf{k}} + \mu) \pm R\sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}]^2}. \quad (5.50)$$

Η γραφική αναπαράσταση των ιδιοενεργειών (5.50) για  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $R = 0.3$ ,  $\Delta = 0.4$  είναι πανομοιότυπη με αυτή της Εικόνας 5.16 για την περίπτωση της διεπιφάνειας TI/S-wave SC.



**Εικόνα 5.24:** Φάσμα ιδιοενεργειών διεπιφάνειας TI/S-wave SC με  $t = 1$ ,  $\mu = 0$ ,  $R = 0.3$ ,  $\Delta = 0.4$  στο χώρο των ορμών. Παρατηρείται η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος εύρους 0.8 eV το οποίο είναι αναμενόμενο καθώς ισούται με το διπλάσιο της παραμέτρου τάξης  $\Delta$ .

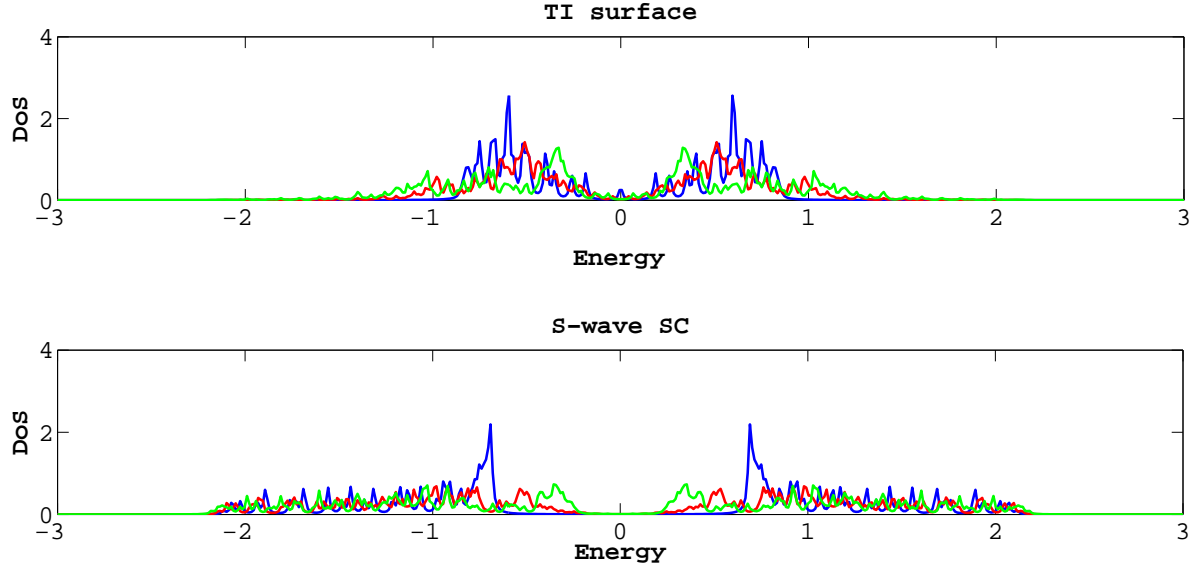
Οι παράμετροι για την υλοποίηση της διεπιφάνειας TI/S-wave SC στο χώρο των ορμών είναι

- $\mu = 0$
- $R = 0.3$

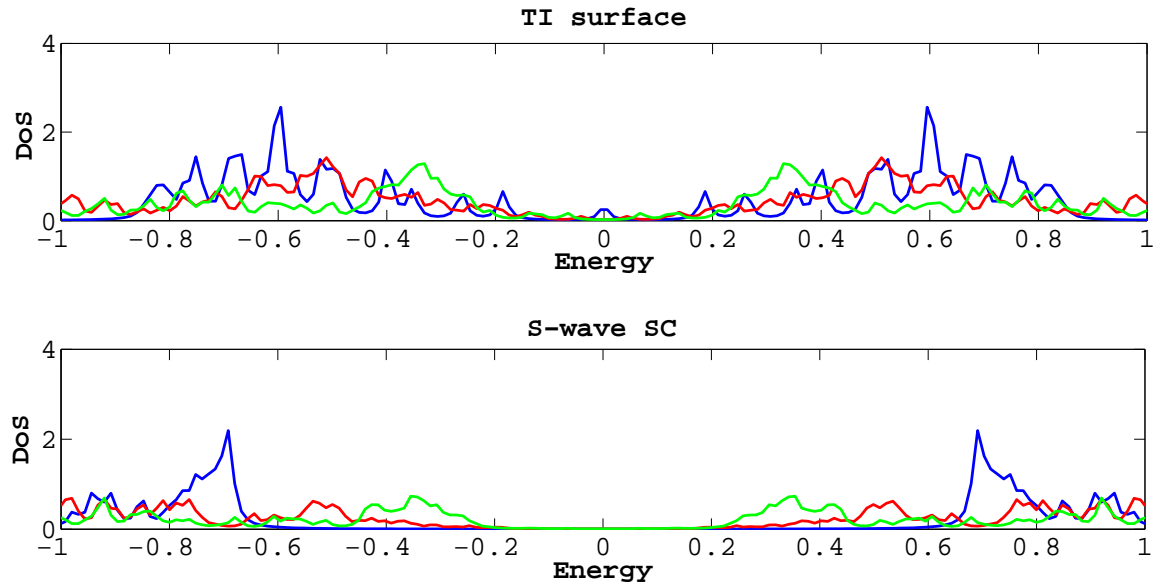
για τον τοπολογικό μονωτή, και

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = -2$ ,

για τον singlet s-wave υπεραγωγό. Η σύζευξη μεταξύ των επιφανειών καθορίζεται από τον συντελεστή  $t_{u+1}$  όπου σε αυτή την περίπτωση συζευγνύει την πρώτη ενεργειακή ζώνη (TI) με την δεύτερη (S-wave-SC). Η πυκνότητα καταστάσεων της διεπιφάνειας φαίνεται στην παρακάτω εικόνα για διάφορες τιμές του συντελεστή  $t_{u+1}$ .



**Εικόνα 5.25:** Πυκνότητα καταστάσεων διεπιφάνειας TI/S-wave SC για  $t_{ll+1} = 0, 0.3, 0.5$  με μπλε, κοκκίνο και πράσινο χρώμα αντίστοιχα, και πλέγμα  $20 \times 20$ . Παρατηρείται ότι καθώς ο συντελεστής σύζευξης αυξάνεται το ενεργειακό χάσμα του singlet s-wave υπεραγωγού μεταφέρεται στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή εξαλείφοντας την επιφανειακή κατάσταση και δημιουργώντας ενεργειακό χάσμα. Κατά την περαιτέρω αύξηση του συντελεστή συσχέτισης παρατηρείται ότι οι πυκνότητες καταστάσεων αποκτούν παρόμοια διασπορά.



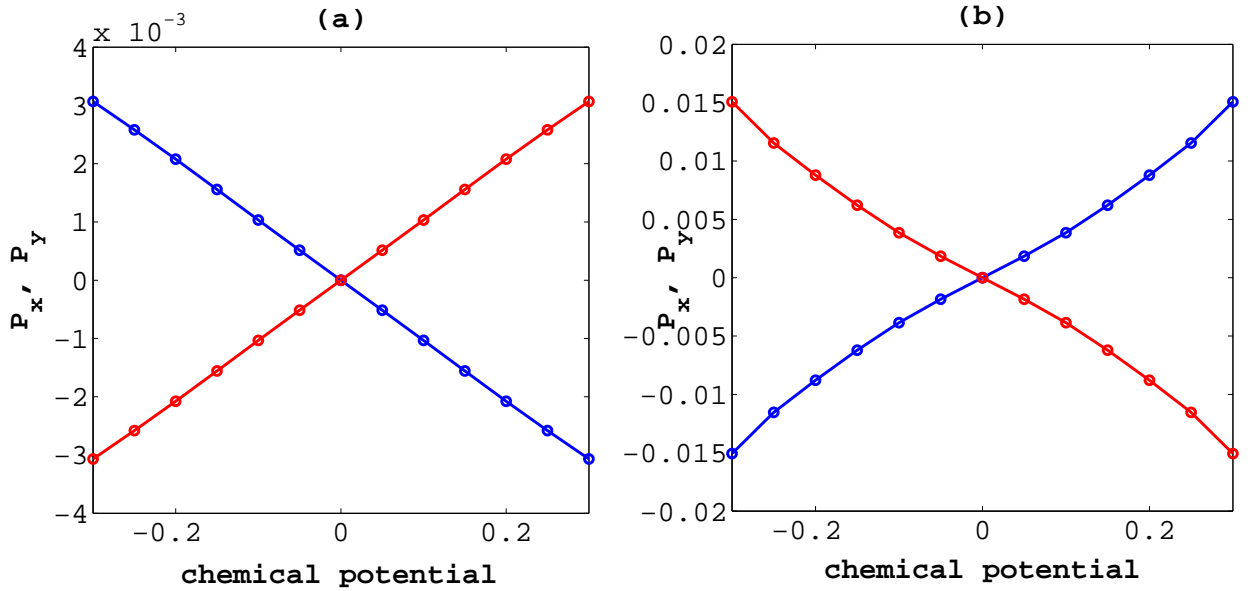
**Εικόνα 5.26:** Εστίαση στην ενέργεια  $E = 0$  της πυκνότητας καταστάσεων διεπιφάνειας TI/S-wave SC για  $t_{ijll'ss'} = 0, 0.3, 0.5$  με μπλε, κοκκίνο και πράσινο χρώμα αντίστοιχα.

Έστω ότι η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς αναλύεται στις συνιστώσες  $R_x \sin k_y$  και  $R_y \sin k_x$ . Μελετώντας τη διεπιφάνεια με τον κανόνα κουαρτέτων αποδεικνύεται ότι επάγονται οι παρακάτω παράμετροι τάξης:

$$\Delta\rho_0\tau_2\sigma_2 + \mu\rho_0\tau_3\sigma_0 + R_x \sin k_y \rho_3 \tau_0 \sigma_1 \rightarrow P_x \sin k_y \rho_3 \tau_1 \sigma_3, \quad (5.51)$$

$$\Delta\rho_0\tau_2\sigma_2 + \mu\rho_0\tau_3\sigma_0 + R_y \sin k_x \rho_3 \tau_3 \sigma_2 \rightarrow \Im P_y \sin k_x \rho_3 \tau_2 \sigma_0, \quad (5.52)$$

όπου  $P_x \sin k_y$  και  $P_y \sin k_x$  οι επαγόμενες p-wave παράμετροι τάξης. Σε αυτή την περίπτωση η παράμετρος τάξης  $\Delta$  συζεύγνυται με το χημικό δυναμικό για να αναδυθούν οι  $P_x \sin k_y$  και  $P_y \sin k_x$  κατά την ύπαρξη αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς. Αυτό σημαίνει ότι κατά τον μηδενισμό του χημικού δυναμικού δεν θα αναδυθούν οι p-wave παράμετροι τάξης. Στην ακόλουθη εικόνα αναπαριστώνται οι  $P_x$  και  $P_y$  ως προς το χημικό δυναμικό  $\mu$  στις δύο επιφάνειες της TI/S-wave SC με  $R = 0.3$ ,  $U = -1$ ,  $t = 0.5$  και συντελεστή σύζευξης  $t_{ll+1} = 0.3$ .



**Εικόνα 5.27:** Γραφική παράσταση των  $P_x$  και  $P_y$  επαγόμενων παραμέτρων τάξης ως προς το χημικό δυναμικό της TI/S-wave SC διεπιφάνειας με μπλε και κόκκινο χρώμα, αντίστοιχα, για τον τοπολογικό μονωτή (a) και τον singlet s-wave υπεραγωγό (b). Παρατηρείται ότι για  $\mu = 0$  οι p-wave παράμετροι τάξης είναι  $P_x = P_y = 0$ . Επίσης, παρατηρείται ότι  $P_x = -P_y$ , αφού  $R_x = -R_y$  για την ενεργό Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή στην περίπτωση σύζευξης με s-wave υπεραγωγό.



Στην παραπάνω εικόνα φαίνεται ότι για  $\mu = 0$  οι παράμετροι τάξης της p-wave υπεραγωγιμότητας είναι  $P_x = P_y = 0$ . Το αποτέλεσμα αυτό είναι αναμενόμενο, σύμφωνα με τον κανόνα κουαρτέτων, καθώς δεν υπάρχει χημικό δυναμικό για να συσχετιστεί η παράμετρος τάξης  $\Delta$ . Παρακάτω παρουσιάζονται οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης  $P_x, P_y$  όταν οι singlet υπεραγωγιμικοί παράμετροι τάξης συναπάρχουν με αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς σε περιβάλλον ασυμμετρίας σωματιδίου-οπής. Αρχικά, θεωρείται  $R_y = 0$  καθώς αυτή η παράμετρος τάξης σχετίζεται με την συγκεκριμένη υπεραγωγίμη παράμετρο τάξης. Οι ιδιοενέργειες του συστήματος αποκτούν της παρακάτω μορφή:

$$E_{\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + \left[ (g_{\mathbf{k}} + \mu) \pm R \sin k_y \right]^2}. \quad (5.53)$$

Η παράμετρος τάξης που επάγεται θα είναι

$$\begin{aligned} P_x &= \sum_{\mathbf{k}',s} \sin k'_y \langle c_{-\mathbf{k}',s} c_{\mathbf{k}',s} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} \sin k'_y \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \tau_1 \sigma_3 \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \pm \pm \frac{\Delta_{\mathbf{k}} \sin k_y}{\sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + [R_{x,\mathbf{k}} \pm (g_{\mathbf{k}} + \mu)]^2}} n_F(E_{\pm,\pm}(\mathbf{k})) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \pm \pm \frac{\Delta_{\mathbf{k}} \sin k_y}{E_{+,\pm}(\mathbf{k})} n_F(E_{\pm,\pm}(\mathbf{k})) \simeq \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \sin k_y \left[ \frac{1}{E_{+,-}(\mathbf{k})} - \frac{1}{E_{+,+}(\mathbf{k})} \right], \quad (5.54) \end{aligned}$$

όπου  $n_F(E) = \frac{1}{1+e^{\beta E(k)}}$  η κατανομή Fermi και η τελευταία σχέση ισχύει για  $T = 0$  όπου  $n_F(E_{+,+}(\mathbf{k})) = n_F(E_{+,-}(\mathbf{k})) = 0$ . Παρατηρείται ότι αν  $R = 0$  ή  $\mu = 0$  τότε  $E_{+,+}(\mathbf{k}) = E_{+,-}(\mathbf{k})$  και συνεπώς  $P_x = 0$ . Επίσης, ο όρος  $g_{\mathbf{k}}$  δεν σχετίζεται με την s-wave υπεραγωγιμότητα καθώς ενώ ισχύει  $g_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = -g_{\mathbf{k}}$  έχουμε  $E_{+,\pm}(\mathbf{k}) = E_{+,\pm}(\mathbf{k}+\mathbf{Q})$ , ενώ  $\sin k_y + \pi = -\sin k_y$ . Για  $R_y \neq 0$  και  $T = 0$  η παραπάνω σχέση τροποποιείται στην παρακάτω

$$P_x \simeq \sum_{\mathbf{k}} \text{sign}[(g_{\mathbf{k}} + \mu)] \Delta_{\mathbf{k}} \sin k_y \frac{R_{x,\mathbf{k}}}{\sqrt{(R_{x,\mathbf{k}}^2 + R_{y,\mathbf{k}}^2)}} \left[ \frac{1}{E_{+,-}(\mathbf{k})} - \frac{1}{E_{+,+}(\mathbf{k})} \right]. \quad (5.55)$$

Παρόμοιες σχέσεις ισχύουν και για την παράμετρο τάξης  $P_y$ . Για την ενεργό Χαμιλτονιανή της επιφάνειας ενός τοπολογικού μονωτή ισχύει  $R_x = -R_y$  οπότε προκύπτει  $P_x = -P_y$  για την περίπτωση της s-wave υπεραγωγιμότητας. Οπότε, οι ιδιοενέργειες του συστήματος προκύπτουν από την παρακάτω απλοποιημένη σχέση

$$E_{\pm,\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\left[ \Delta \pm P \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y} \right]^2 + \left[ g_{\mathbf{k}} \pm \mu \pm R \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y} \right]^2} \quad (5.56)$$

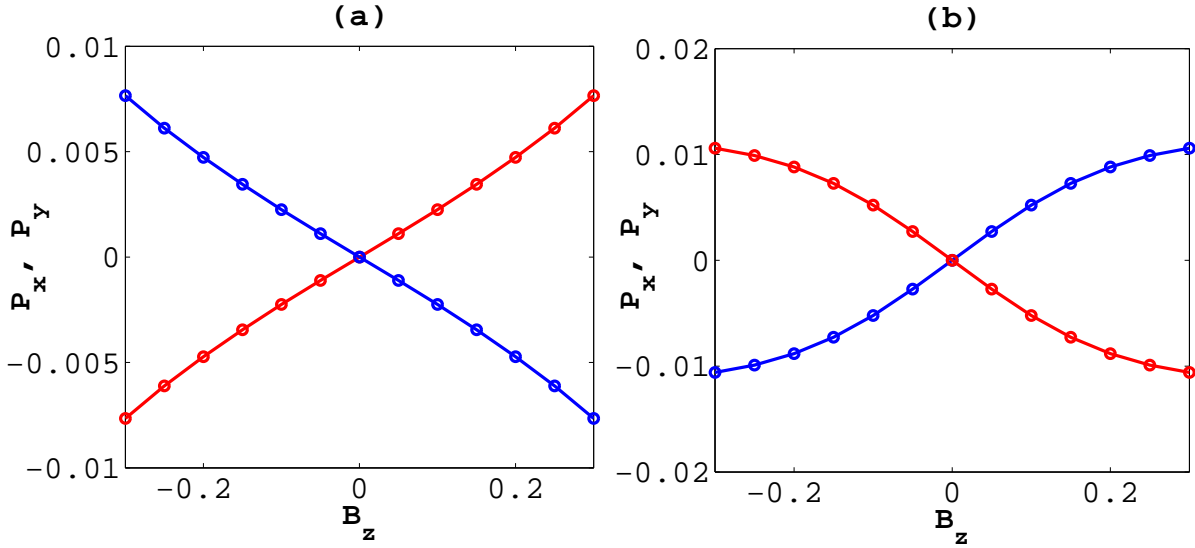
Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι η επιφάνεια Fermi εξαφανίζεται για  $|\pm\mu \pm \frac{R\Delta}{P}| > 2t$ .

Η επαγόμενη p-wave υπεραγωγιμότητα μπορεί να προκύψει κατά την έλλειψη χημικού δυναμικού με την εισαγωγή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου κατά τον άξονα z στη διεπιφάνεια. Σε αυτή την περίπτωση επάγονται οι παρακάτω παράμετροι τάξης:

$$\Delta\rho_0\tau_2\sigma_2 + B_z\rho_0\tau_3\sigma_3 + R_x \sin k_y\rho_3\tau_0\sigma_1 \rightarrow P_x \sin k_y\rho_3\tau_1\sigma_0, \quad (5.57)$$

$$\Delta\rho_0\tau_2\sigma_2 + B_z\rho_0\tau_3\sigma_3 + R_y \sin k_x\rho_3\tau_3\sigma_2 \rightarrow \Im P_y \sin k_x\rho_3\tau_2\sigma_3. \quad (5.58)$$

Κατά την έλλειψη χημικού δυναμικού, η παράμετρος τάξης  $\Delta$  συσχετίζεται με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο κατά τον άξονα z,  $B_z$ , για να προκύψουν οι  $P_x \sin k_y$  και  $P_y \sin k_x$ . Αυτό σημαίνει ότι κατά τον μηδενισμό του μαγνητικού πεδίου δεν επάγονται οι p-wave παράμετροι τάξης. Στην ακόλουθη εικόνα αναπαριστώνται οι επαγόμενες p-wave παραμέτροι τάξης ως προς το μαγνητικό πεδίο  $B_z$  στις δύο επιφάνειες της TI/S-wave SC με  $R = 0.3$ ,  $U = -1$ ,  $t = 0.5$  και συντελεστή σύζευξης  $t_{ll+1} = 0.3$ .



**Εικόνα 5.28:** Γραφική παράσταση των  $P_x$ ,  $P_y$  επαγόμενων παραμέτρων τάξης ως προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο της διεπιφάνειας TI/S-wave SC με μπλε και κόκκινο χρώμα, αντίστοιχα, για τον τοπολογικό μονωτή (a) και τον singlet s-wave υπεραγωγό (b). Παρατηρείται ότι για  $B_z = 0$  προκύπτει  $P_x = P_y = 0$ . Επίσης, παρατηρείται ότι  $P_x = -P_y$ , αφού  $R_x = -R_y$  για την ενεργό Χαμιλτονιανή του τοπολογικού μονωτή στην περίπτωση σύζευξης με s-wave υπεραγωγό.

### 5.3.4 Διεπιφάνεια τοπολογικού μονωτή/D-wave υπεραγωγού (TI/D-wave SC)

Ένας d-wave υπεραγωγός είναι ένας μη συμβατικός υπεραγωγός στον οποίο η παράμετρος τάξης του υπεραγωγού εξαρτάται από την ορμή του συστήματος και η αλληλεπίδραση που καθορίζει την υπεραγωγίμη φάση είναι η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-οπής κοντινότερων γειτόνων (πρέπει  $U \geq 0$  και  $V_{ij} < 0$ ).

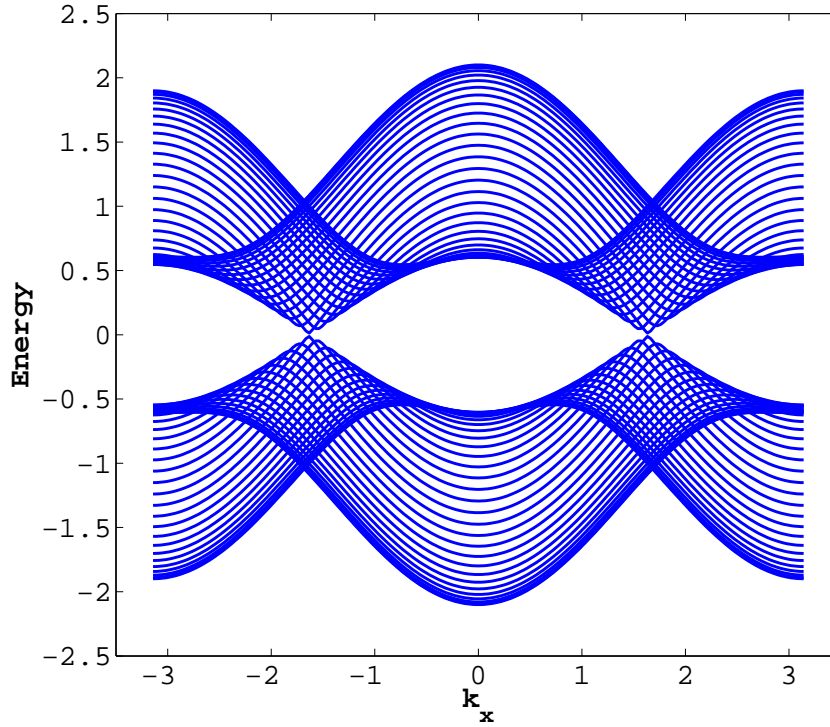
Εισάγοντας τον σπίνορα  $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow})$  του χώρου SU(8)  $\boldsymbol{\rho} \times \boldsymbol{\tau} \times \boldsymbol{\sigma}$  προκύπτει η Χαμιλτονιανή του d-wave υπεραγωγού στον χώρο των ορμών

$$H_{\text{DwaveSC}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [g_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_3 \sigma_0 + \mu \rho_0 \tau_3 \sigma_0 + \Delta_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_2 \sigma_2] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.59)$$

όπου  $g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό και  $\Delta_{\mathbf{k}} = D(\cos k_x - \cos k_y)$  η παράμετρος τάξης του υπεραγωγού, που σε αυτή την περίπτωση εξαρτάται από την ορμή. Διαγωνοποιώντας την (5.59) προκύπτουν οι ιδιοενέργειες του d-wave υπεραγωγού στο χώρο των ορμών:

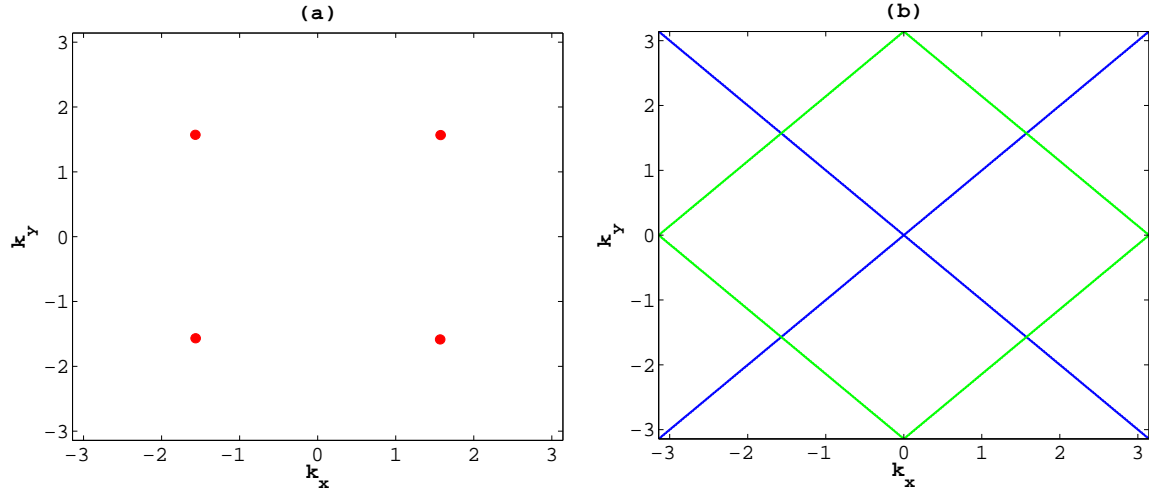
$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{(g_{\mathbf{k}} + \mu)^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2}. \quad (5.60)$$

Η γραφική αναπαράσταση των ιδιοενεργειών (5.60) για  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $D = 0.3$  φαίνεται παρακάτω.



**Εικόνα 5.29:** Φάσμα ιδιοενεργειών d-wave υπεραγωγού με  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $D = 0.3$  στον χώρο των ορμών. Παρατηρείται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi στον d-wave υπεραγωγό.

Από την παραπάνω εικόνα συμπεραίνεται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi στον υπεραγωγό. Η επιφάνεια Fermi παρουσιάζεται εκτενέστερα στην πρώτη ζώνη Brillouin της Εικόνας 5.22 για  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $D = 0.3$ . Από αυτή την εικόνα προκύπτει ότι η επιφάνεια Fermi ενός d-wave υπεραγωγού αποτελείται από τέσσερις κόμβους, οι οποίοι προκύπτουν από τα σημεία τομής της παράμετρου τάξης  $\Delta_{\mathbf{k}}$  και της διασποράς  $g_{\mathbf{k}}$ .

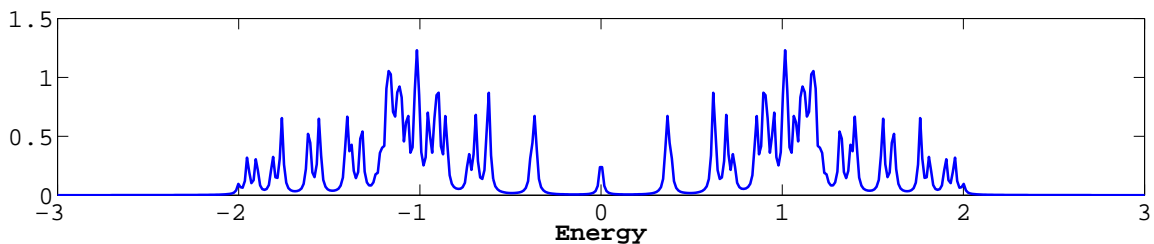


**Εικόνα 5.30:** (a) Επιφάνεια Fermi του d-wave υπεραγωγού στην πρώτη ζώνη Brillouin για  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $D = 0.3$ . Παρατηρείται η ύπαρξη τεσσάρων κόμβων. (b) Γραφική αναπαράσταση της παράμετρου τάξης  $\Delta_{\mathbf{k}}$  και της διασπορά  $g_{\mathbf{k}}$ . Υπολογίζοντας τα σημεία τομής τους ευρίσκονται οι κόμβοι της επιφάνειας Fermi του d-wave υπεραγωγού.

Ο d-wave υπεραγωγός προσομοιώνεται στο χώρο των ορμών με τις παρακάτω παραμέτρους:

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = 0$ ,
- $V_{ij} = -2$ ,

όπου  $V_{ij}$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής κοντινότερων γειτόνων. Η πυκνότητα καταστάσεων του d-wave υπεραγωγού στον πραγματικό χώρο παραθέτεται στην παρακάτω εικόνα.



**Εικόνα 5.31:** Πυκνότητα καταστάσεων d-wave υπεραγωγού με  $t = 0.5$ ,  $\mu = 0$ ,  $V_{ij} = -2$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Παρατηρείται ότι ο υπεραγωγός εμφανίζει επιφάνεια Fermi που αντιστοιχεί

στους τέσσερις κόμβους της Εικόνας 5.27.

Η Χαμιλτονιανή της διεπιφάνειας TI/D-wave SC είναι

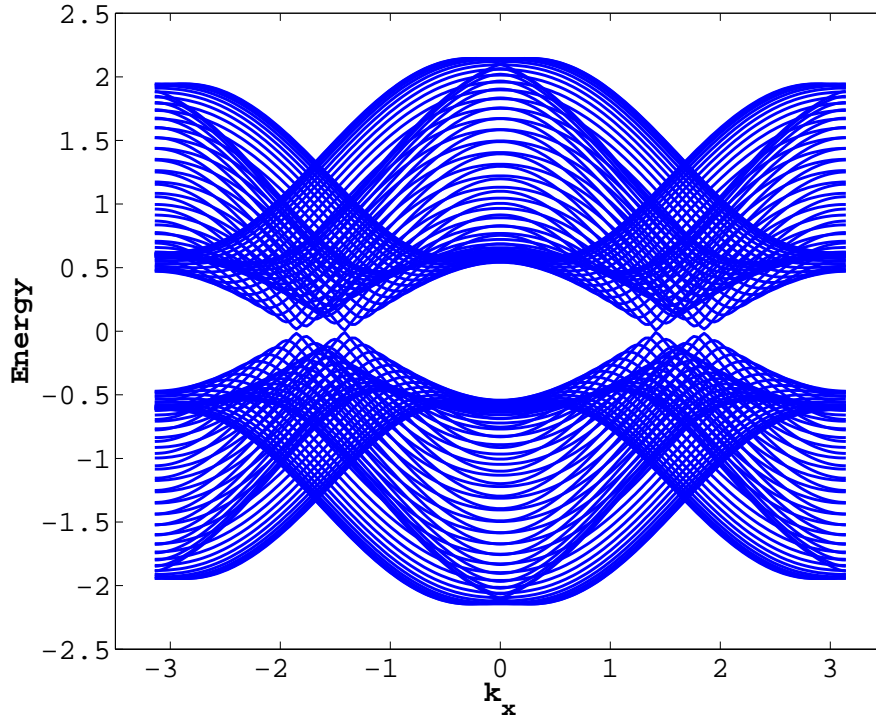
$$H_{\text{TI-DwaveSC}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} [(g_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_3 \sigma_0 + \mu \rho_0 \tau_3 \sigma_0) + \Delta_{\mathbf{k}} \rho_3 \tau_2 \sigma_2 + R(\sin k_y \rho_3 \tau_0 \sigma_1 - \sin k_x \rho_3 \tau_3 \sigma_2)] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (5.61)$$

όπου  $g_{\mathbf{k}} = t(\cos k_x + \cos k_y)$  η συνάρτηση διασποράς,  $\mu$  το χημικό δυναμικό,  $R$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς τύπου Rashba και  $\Delta(\mathbf{k}) = D(\cos k_x - \cos k_y)$  η παράμετρος τάξης του υπεραγωγού στο χώρο των ορμών.

Διαγωνοποιώντας την (5.61) προκύπτει το φάσμα ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας στον χώρο των ορμών:

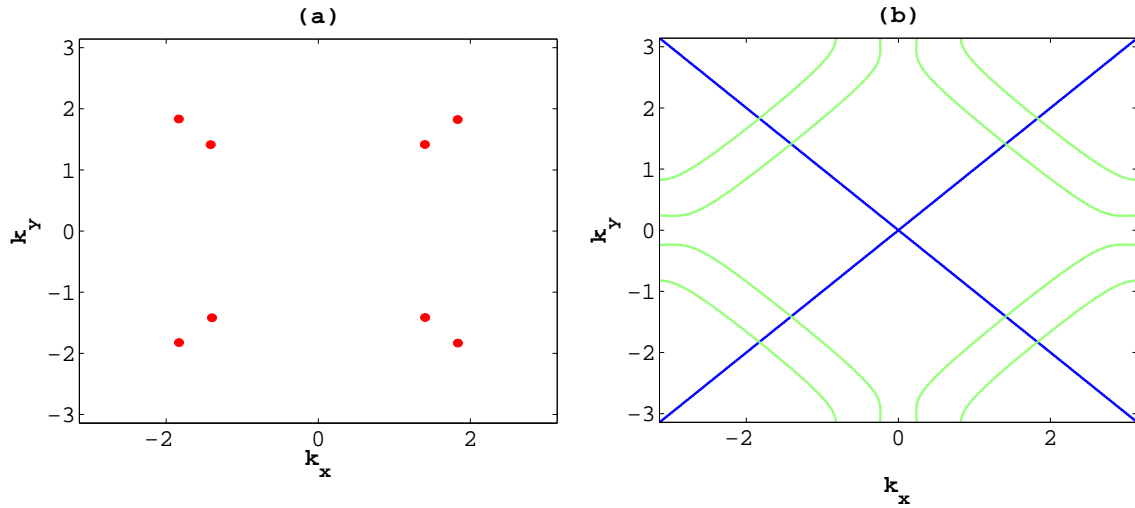
$$E_{\pm, \pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + [(g_{\mathbf{k}} + \mu) \pm R \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y}]^2}. \quad (5.62)$$

Η γραφική αναπαράσταση των ιδιοενεργειών (5.62) για  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $R = 0.3$ ,  $D = 0.3$  εμφανίζεται παρακάτω.



**Εικόνα 5.32:** Φάσμα ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας TI/D-wave SC με  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $R = 0.3$ ,  $D = 0.3$  στον χώρο των ορμών. Παρατηρείται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi στη διεπιφάνεια.

Από την παραπάνω εικόνα συμπεραίνεται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi στη διεπιφάνεια TI/D-wave SC. Η επιφάνεια Fermi παρουσιάζεται εκτενέστερα στην πρώτη ζώνη Brillouin της Εικόνας 5.30 για  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $R = 0.3$ ,  $D = 0.3$ . Από αυτή την εικόνα προκύπτει ότι η επιφάνεια Fermi της TI/D-wave SC αποτελείται από οκτώ κόμβους, οι οποίοι προκύπτουν από τα σημεία τομής της παράμετρου τάξης  $\Delta_{\mathbf{k}}$  και της επιφάνειας Fermi του τοπολογικού μονωτή με διασπορά  $g_{\mathbf{k}}$ .



**Εικόνα 5.33:** (a) Επιφάνεια Fermi διεπιφάνειας TI/D-wave SC στην πρώτη ζώνη Brillouin για  $t = 1$ ,  $\mu = 0.1$ ,  $R = 0.3$ ,  $D = 0.3$ . Παρατηρείται η ύπαρξη οκτώ κόμβων. (b) Γραφική αναπαράσταση της παράμετρου τάξης  $\Delta_{\mathbf{k}}$  και της επιφάνειας Fermi του τοπολογικού μονωτή με διασπορά  $g_{\mathbf{k}}$ . Υπολογίζοντας τα σημεία τομής τους ευρίσκονται τα σημεία Fermi της διεπιφάνειας TI/D-wave SC.

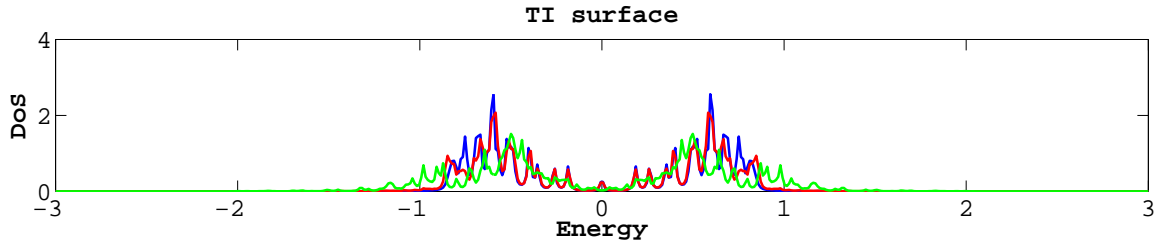
Οι παράμετροι για την υλοποίηση της διεπιφάνειας TI/D-wave SC είναι:

- $\mu = 0$
- $R = 0.3$

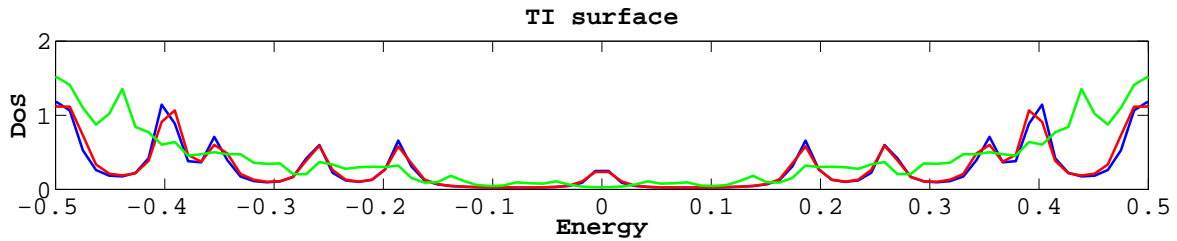
για τον τοπολογικό μονωτή, και

- $t = 0.5$ ,
- $\mu = 0$ ,
- $U = 0$ ,
- $V_{ij} = -2$ ,

για τον d-wave υπεραγωγό, όπου  $V_{ij}$  ο συντελεστής αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής κοντινότερων γειτόνων. Η σύζευξη μεταξύ των επιφανειών καθορίζεται από τον συντελεστή  $t_{u+1}$  όπου σε αυτή την περίπτωση συζευγνύει την πρώτη ενεργειακή ζώνη (TI) με την δεύτερη (Dwave-SC). Η πυκνότητα καταστάσεων στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή φαίνεται στην παρακάτω εικόνα για διάφορες τιμές του συντελεστή  $t_{u+1}$ .



**Εικόνα 5.34:** Πυκνότητα καταστάσεων τοπολογικού μονωτή της διεπιφάνειας TI/D-wave SC για  $\mu = 0$ ,  $R = 0.3$ ,  $t = 0.5$ ,  $V_{ij} = -2$  και συντελεστή σύζευξης  $t_{u+1} = 0, 0.1, 0.3$  με μπλε, κοκκίνο και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι καθώς ο συντελεστής σύζευξης αυξάνεται εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα στον τοπολογικό μονωτή.



**Εικόνα 5.35:** Εστίαση στην ενέργεια  $E = 0$  της πυκνότητας καταστάσεων του τοπολογικού μονωτή της διεπιφάνειας TI/D-wave SC για  $\mu = 0$ ,  $R = 0.3$ ,  $t = 0.5$ ,  $V_{ij} = -2$  και συντελεστή σύζευξης  $t_{u+1} = 0, 0.1, 0.3$  με μπλε, κοκκίνο και πράσινο χρώμα, αντίστοιχα. Παρατηρείται ότι καθώς ο συντελεστής σύζευξης αυξάνεται εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα στον τοπολογικό



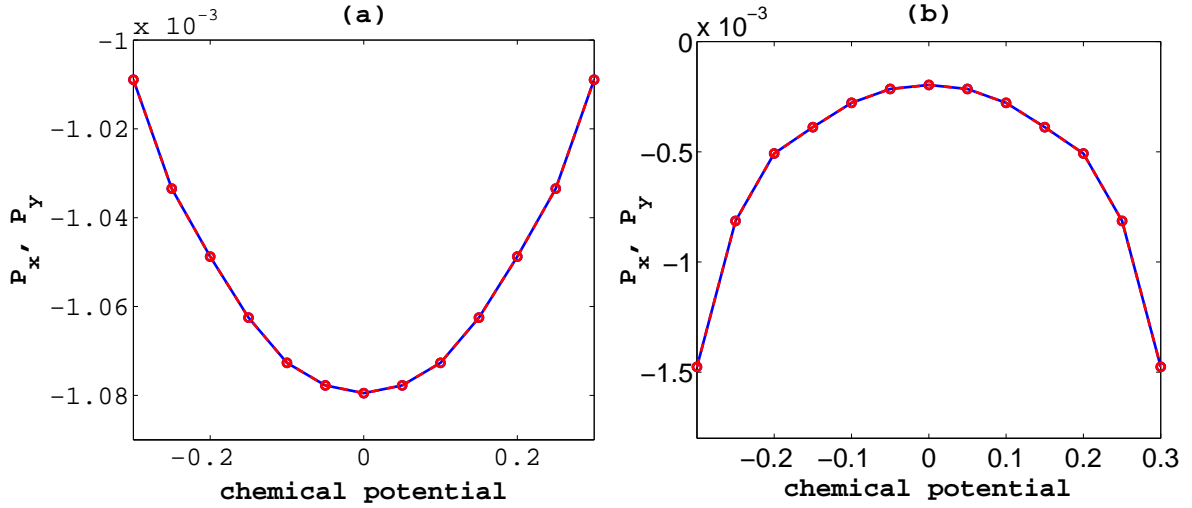
μονωτή.

Στην παραπάνω εικόνα παρατηρείται ότι κατά την αύξηση του συντελεστή σύζευξης των επιφανειών δημιουργείται ενεργειακό χάσμα στον τοπολογικό μονωτή της διεπιφάνειας TI/D-wave SC. Το αποτέλεσμα αυτό δεν είναι αναμενόμενο καθώς σύμφωνα με την Εικόνα 5.33 πρέπει να υπάρχει επιφάνεια Fermi στην διεπιφάνεια. Το αποτέλεσμα αυτό προκύπτει καθώς στην προηγούμενη διαδικασία υπολογισμού του φάσματος των ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας στον χώρο των ορμών δεν συμπεριλήφθηκαν οι επαγόμενες παράμετροι τάξης λόγω της συνήπαρξης αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιας, χημικού δυναμικού και d-wave υπεραγωγού. Όπως και στη διεπιφάνεια TI/S-wave SC έτσι και τώρα ισχύουν οι σχέσεις (5.51) και (5.52), με τη διαφορά ότι η παράμετρος τάξης του d-wave υπεραγωγού  $\Delta_{\mathbf{k}}$  συσχετίζεται με τη διασπορά  $g_{\mathbf{k}}$  και όχι με το χημικό δυναμικό, δηλαδή,

$$\Delta_{\mathbf{k}}\rho_3\tau_2\sigma_2 + g_{\mathbf{k}}\rho_3\tau_3\sigma_0 + R_x \sin k_y\rho_3\tau_0\sigma_1 \rightarrow P_x \sin k_y\rho_3\tau_1\sigma_3, \quad (5.63)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}\rho_3\tau_2\sigma_2 + g_{\mathbf{k}}\rho_3\tau_3\sigma_0 + R_y \sin k_x\rho_3\tau_3\sigma_2 \rightarrow \Im P_y \sin k_x\rho_3\tau_2\sigma_0, \quad (5.64)$$

όπου  $P_x \sin k_y$  και  $P_y \sin k_x$  οι επαγόμενες παράμετροι τάξης της p-wave υπεραγωγιμότητας. Στην ακόλουθη εικόνα αναπαριστώνται οι παράμετροι τάξης  $P_x$  και  $P_y$  ως προς το χημικό δυναμικό  $\mu$  για τις δύο επιφάνειες της TI/D-wave SC με  $R = 0.3$ ,  $V_{ij} = -2$ ,  $t = 0.5$  και συντελεστή σύζευξης  $t_{ll+1} = 0.3$ .



**Εικόνα 5.36:** Γραφική παράσταση των επαγόμενων παραμέτρων τάξης  $P_x$  και  $P_y$  ως προς το χημικό δυναμικό της διεπιφάνειας TI/D-wave SC για  $R = 0.3$ ,  $V_{ij} = -2$ ,  $t = 0.5$  με μπλε

και κόκκινο χρώμα, αντίστοιχα, για τον τοπολογικό μονωτή **(a)** και τον d-wave υπεραγωγό **(b)**. Παρατηρείται ότι για  $\mu = 0$  οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης δεν μηδενίζονται, όπως είναι αναμενόμενο.

Από την παραπάνω εικόνα συμπεραίνεται ότι όντως η παράμετρος τάξης του υπεραγωγού δεν συζεύγνυται με το χημικό δυναμικό, αφού για  $\mu = 0$  οι  $P_x$  και  $P_y$  δεν μηδενίζονται. Λαμβάνοντας υπό όψιν τις  $P_x$  και  $P_y$  το φάσμα ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας στο χώρο των ορμών θα εκφράζεται από τη σχέση

$$E_{\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + P_{x,\mathbf{k}}^2 + P_{y,\mathbf{k}}^2 + R_{x,\mathbf{k}}^2 + R_{y,\mathbf{k}}^2 + (g_{\mathbf{k}} + \mu)^2 \pm 2C}, \quad (5.65)$$

$$C = \sqrt{[R_{y,\mathbf{k}}P_{x,\mathbf{k}} - R_{x,\mathbf{k}}P_{y,\mathbf{k}}]^2 + [\Delta_{\mathbf{k}}P_{y,\mathbf{k}} + (g_{\mathbf{k}} + \mu)R_{y,\mathbf{k}}]^2 + [\Delta_{\mathbf{k}}P_{x,\mathbf{k}} + (g_{\mathbf{k}} + \mu)R_{x,\mathbf{k}}]^2},$$

όπου  $P_{x,\mathbf{k}} = P_x \sin k_y$ ,  $P_{y,\mathbf{k}} = P_y \sin k_x$ ,  $R_{x,\mathbf{k}} = R_x \sin k_y$ ,  $R_{y,\mathbf{k}} = R_y \sin k_x$ , οι p-wave επαγόμενοι παράμετροι τάξης και οι παράμετροι τάξης της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς, αντίστοιχα.

Με παρόμοιο τρόπο όπως παρουσιάστηκε και στην περίπτωση της s-wave υπεραγωγιμότητας μπορεί να δείχθει ότι στην περίπτωση αυτή θα ισχύει  $P_x = P_y$ , αφού  $R_x = R_y$ , οπότε η παραπάνω σχέση απλοποιείται ως εξής:

$$E_{\pm,\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^2 + (P^2 + R^2)(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y) + (g_{\mathbf{k}} \pm \mu)^2 \pm 2C} \quad (5.66)$$

$$C = \sqrt{4R^2P^2 \sin^2 k_y \sin^2 k_x + [\Delta_{\mathbf{k}}P - (g_{\mathbf{k}} \pm \mu)R]^2 \sin^2 k_x + [\Delta_{\mathbf{k}}P + (g_{\mathbf{k}} \pm \mu)R]^2 \sin^2 k_y}, \quad (5.67)$$

Εν συνεχεία, εξετάζονται οι ακόλουθες ειδικές περιπτώσεις:

- $R_x = R_y \rightarrow 0$

$$E_{\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\left[ \Delta_{\mathbf{k}} \pm P \sqrt{(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y)} \right]^2 + (g_{\mathbf{k}} + \mu)^2}, \quad (5.68)$$

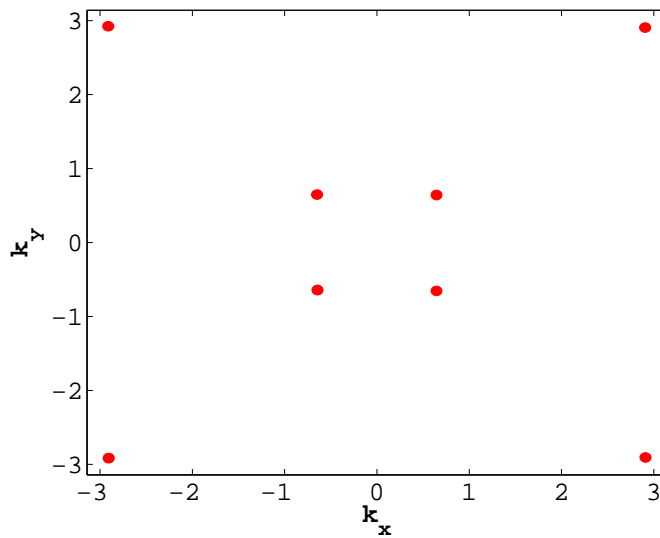
από όπου προκύπτει η συνθήκη  $|\frac{\mu P}{\Delta}| < t$  για την ύπαρξη επιφάνειας Fermi στον d-wave υπεραγωγό.

- $D = 0, P \rightarrow 0$

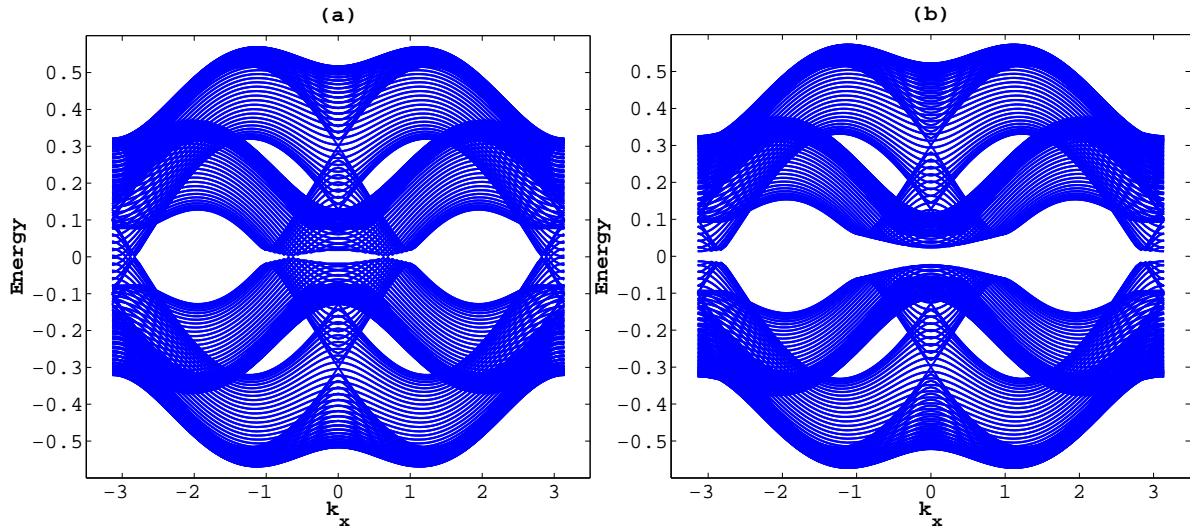
$$E_{\pm,\pm}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{P^2(\sin^2 k_x + \sin^2 k_y) + \left[ g_{\mathbf{k}} + \mu + R \sqrt{\sin^2 k_x + \sin^2 k_y} \right]^2} \quad (5.69)$$

από όπου προκύπτει ότι το ενεργειακό χάσμα στον τοπολογικό μονωτή θα είναι  $\Delta E \sim |P|$ .

Θεωρώντας ότι η διεπιφάνεια είναι σχεδόν μη συσχετισμένη θα μελετηθεί η ύπαρξη κόμβων χωρίς την παρουσία των επαγόμενων παραμέτρων τάξης  $P_x$  και  $P_y$  καθώς και με την παρουσία αυτών. Λαμβάνοντας μετρήσεις από τις προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν βρέθηκαν οι παρακάτω απλοποιημένες τιμές των συντελεστών στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή:  $t = 0.1$ ,  $R_x = R_y = 0.3$ ,  $m = 0.1$ ,  $P_x = P_y = 0.05$ ,  $D = 0.04$ . Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται παρακάτω με τη βοήθεια της σχέσης (5.65).

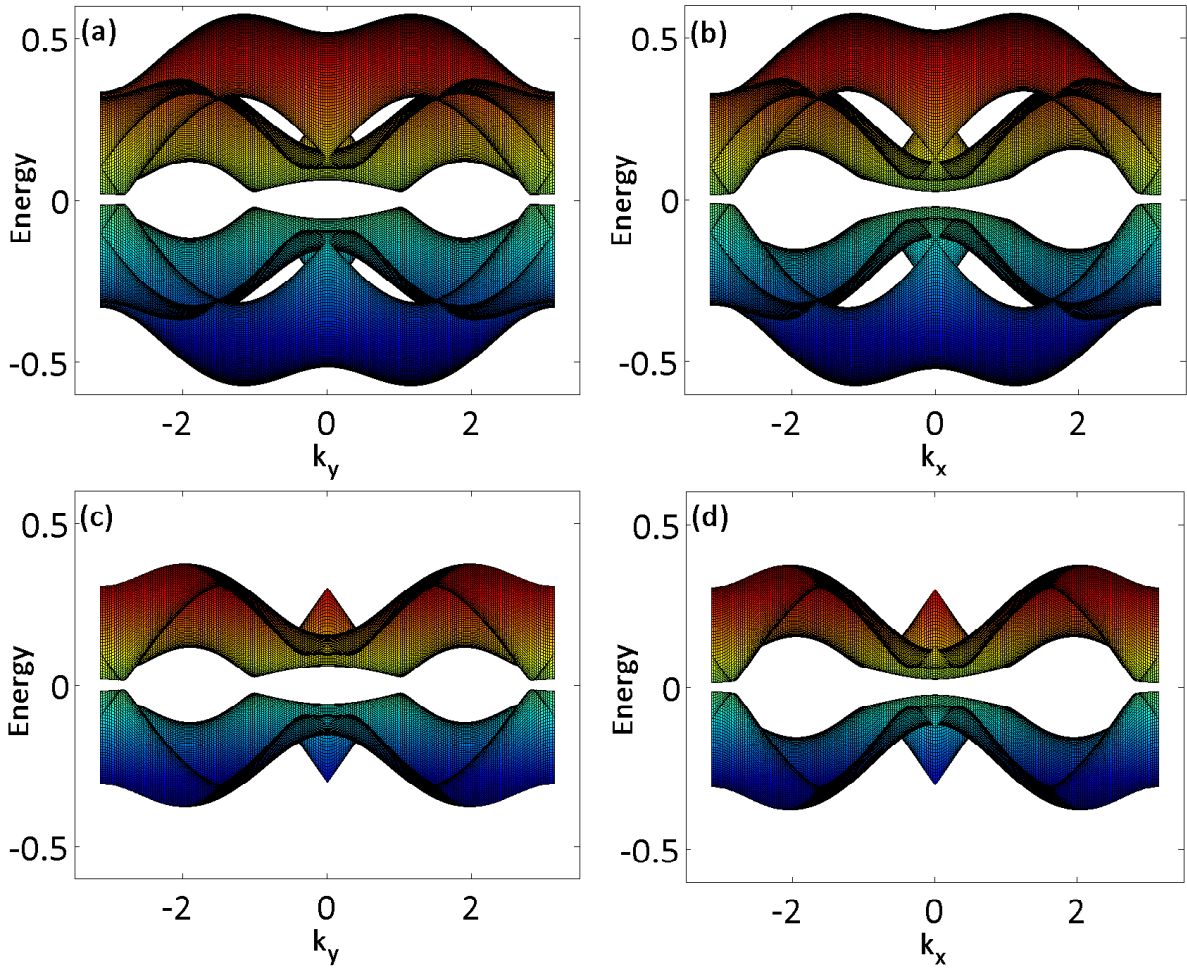


**Εικόνα 5.37:** Ζώνη Brillouin του τοπολογικού μονωτή της διεπιφάνειας TI/D-wave SC για  $t = 0.1$ ,  $R_x = R_y = 0.3$ ,  $m = 0.1$ ,  $P_x = P_y = 0$ ,  $D = 0.04$ . Παρατηρείται η εμφάνιση οκτώ κόμβων που απαρτίζουν την επιφάνεια Fermi στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή χωρίς τη συγκαταλογή των επαγόμενων p-wave παραμέτρων τάξης.

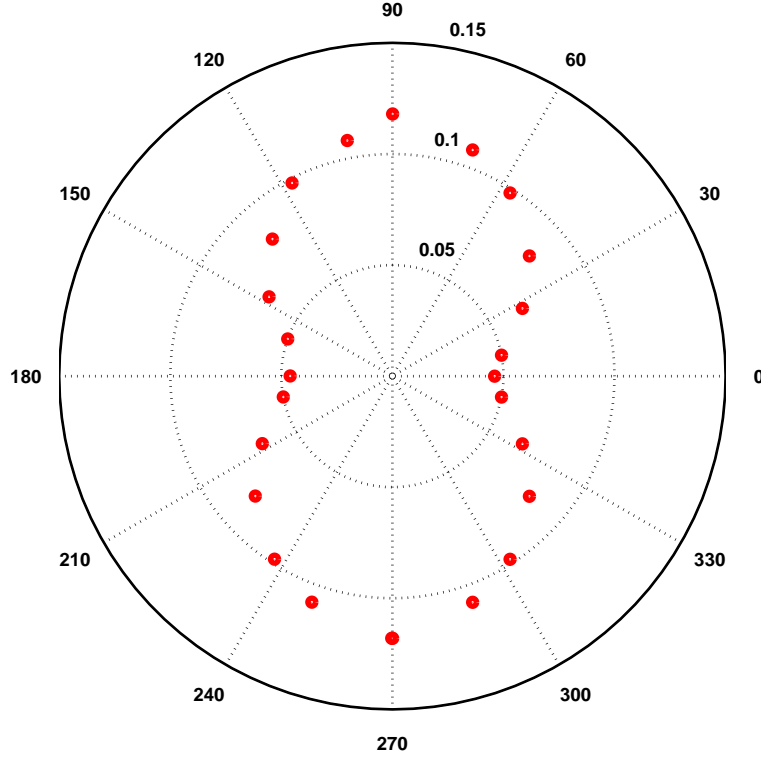


**Εικόνα 5.38:** (a) Φάσμα ιδιοενεργειών διεπιφάνειας TI/D-wave SC για την επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή με  $t = 0.1$ ,  $R_x = R_y = 0.3$ ,  $m = 0.1$ ,  $P_x = P_y = 0$ ,  $D = 0.04$  στον χώρο των ορμών (σχέση (5.65)). Παρατηρείται η ύπαρξη επιφάνειας Fermi αποτελούμενη από κόμβους (βλ. Εικόνα 5.37). (b) Φάσμα ιδιοενεργειών διεπιφάνειας TI/D-wave SC για την επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή με  $t = 0.1$ ,  $R_x = R_y = 0.3$ ,  $m = 0.1$ ,  $P_x = P_y = 0.05$ ,  $D = 0.04$  στον χώρο των ορμών (σχέση (5.65)). Παρατηρείται ότι με την συγκαταλογή των επαγόμενων p-wave παραμέτρων τάξης εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα της τάξης των παραμέτρων  $P_x, P_y$  ( $\Delta E \sim |0.05|$ ).

Στην παραπάνω εικόνα είναι ξεκάθαρη η συνεισφορά των επαγόμενων παραμέτρων τάξης καθώς με την συγκαταλογή αυτών στον υπολογισμό των ιδιοενεργειών (σχέση (5.65)) η επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή εμφανίζει ενεργειακό χάσμα της τάξης  $\Delta E \sim |P|$ . Το ενεργειακό χάσμα παρουσιάζεται εκτενέστερα στις παρακάτω εικόνες όπου αναπαριστάται το φάσμα ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας σε τρεις διαστάσεις ως προς τα  $k_x$  και  $k_y$  καθώς και το ενεργειακό χάσμα συναρτήσει της γωνίας που σχηματίζει το κυματόνυσμα  $\mathbf{k}$  με τον άξονα  $x$ .

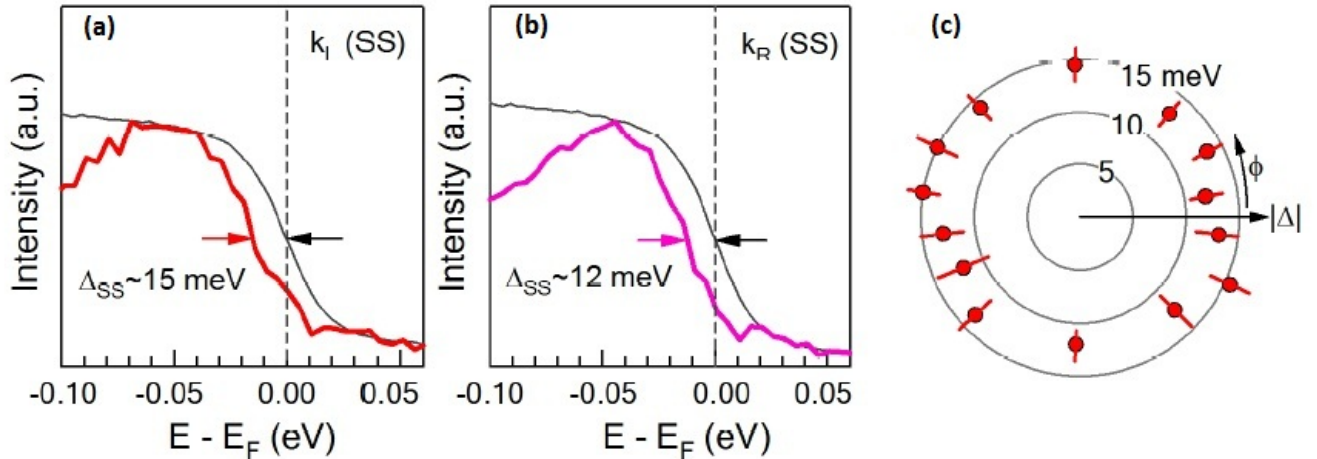


**Εικόνα 5.39:** Τρισδιάστατο φάσμα ιδιοενεργειών της επιφάνειας του τοπολογικού μονωτή στη διεπιφάνεια TI/D-wave SC για  $t = 0.1$ ,  $R_x = R_y = 0.3$ ,  $m = 0.1$ ,  $P_x = P_y = 0.05$ ,  $D = 0.04$  και πλέγμα  $20 \times 20$ . Στις γραφικές παραστάσεις (a), (b) παρουσιάζεται το φάσμα ως προς τα  $k_y$ ,  $k_x$ , αντίστοιχα, ενώ στις (c), (d) οι δύο από τους τέσσερις κλάδους του φάσματος ιδιοενεργειών ως προς τα  $k_y$ ,  $k_x$ , αντίστοιχα. Παρατηρείται η εμφάνιση δύο κόνων Dirac. Από τα παραπάνω φαίνεται ότι το ενεργειακό φάσμα είναι σχεδόν ιστροπικό (βλ. Εικόνα 5.36).



**Εικόνα 5.40:** Αναπαράσταση ενεργειακού χάσματος συναρτήσει της γωνίας που σχηματίζει το κυματόνισμα  $\mathbf{k}$  με τον άξονα  $x$  για  $t = 0.1$ ,  $R_x = R_y = 0.3$ ,  $m = 0.1$ ,  $P_x = P_y = 0.05$ ,  $D = 0.04$ . Με κόκκινο εμφανίζεται η τιμή του ενεργειακού χάσματος η οποία κυμαίνεται από 0.046 eV έως 0.118 eV.

Τα παραπάνω αποτελέσματα έρχονται σε πλήρη συμφωνία με πρόσφατα πειραματικά δεδομένα κινεζικής ερευνητικής ομάδας τα οποία δημοσιεύθηκαν στον περιοδικό Nature Physics 9 (βλέπε [9]). Ο Erwin Wang και άλλοι εναπόθεσαν φιλμ τοπολογικού μονωτή  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  σε d-wave υπεραγωγό BiSCO χρησιμοποιώντας μοριακή επιταξία δημιουργώντας υπεραγωγιμότητα υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας στις επιφανειακές ιδιοκαταστάσεις του τοπολογικού μονωτή. Χρησιμοποιώντας τη μέθοδο angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) παρατήρησαν την ενέργεια Fermi για  $T > T_c$  και  $T < T_c$  για διάφορες γωνίες των κυματανυσμάτων στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή. Τα αποτελέσματα του πειράματος παρουσιάζονται στην παρακάτω εικόνα.



**Εικόνα 5.41:** Δεδομένα από τη μέθοδο ARPES για θερμοκρασία 20 K και ενέργεια φωτονίων 50 eV. (a), (b) Παρατηρείται η εμφάνιση ενεργειακού χάσμα στις επιφανειακές καταστάσεις του τοπολογικού μονωτή για κυματανύσματα  $k_l$ ,  $k_R$ , αντίστοιχα. Με μαύρο χρώμα απεικονίζεται η ένταση συναρτήσεως της ενέργειας της επιφάνειας του τοπολογικού μονωτή για  $T > T_c$  και με κόκκινο και μωβ η ένταση συναρτήσεως της ενέργειας για  $T < T_c$  (ενεργοποίηση της d-wave υπεραγωγιμότητας). Παρατηρείται ενεργειακό χάσμα στον τοπολογικό μονωτή και στις δύο κατευθύνσεις των κυματανυσμάτων με την ενεργοποίηση του d-wave υπεραγωγού στη διεπιφάνεια (12 και 15 eV για  $k_R$ ). (c) Ενεργειακό χάσμα στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή συναρτήσεως της γωνίας των κυματανυσμάτων. Παρατηρείται ότι το ενεργειακό χάσμα είναι σχεδόν ισοτροπικό με διακυμάνσεις από 12 meV έως 15 meV.<sup>1</sup>

Από την παραπάνω εικόνα συμπεραίνεται ότι η επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή εμφανίζει σχεδόν ισοτροπικό ενεργειακό χάσμα όταν βρίσκεται σε εγγύτητα με d-wave υπεραγωγό για  $T < T_c$ . Το χάσμα κυμαίνεται από 12 meV έως 15 meV, δεδομένο που υποδεικνύει την ισοτροπία του. Το πείραμα αποδεικνύει την ύπαρξη ενεργειακού χάσματος στον τοπολογικό μονωτή της διεπιφάνειας και αποκλείει το ενδεχόμενο ύπαρξης επιφάνειας Fermi με κόμβους, όπως ακριβώς έγινε και παραπάνω με κατάλληλους αριθμητικούς υπολογισμούς και προσομοιώσεις. Συμπερασματικά, τα παραπάνω αριθμητικά και προσομοιωτικά αποτελέσματα συνάδουν με αυτά του παραπάνω πρόσφατου πειράματος καθώς είναι ποιοτικά ίδια και εξηγούν τον λόγο τον οποίο προκύπτει το ενεργειακό χάσμα στον τοπολογικό μονωτή της διεπιφάνειας, ο οποίος είναι η επαγωγή της p-wave παράμετρου τάξης λόγω συνύπαρξης των παραμέτρων τάξης της d-wave υπεραγωγιμότητας και της διασποράς παρουσία αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς.

<sup>1</sup>Πηγή εικόνας: [9], σελ. 5

# Κεφάλαιο 6

## Συμπεράσματα

Βασικός στόχος της παρούσας εργασίας είναι η θεωρητική και υπολογιστική μελέτη διεπιφανειών με τοπολογικό μονωτή στον πραγματικό χώρο και στο χώρο των ορμών. Αφού μελετήθηκε το απαραίτητο θεωρητικό υπόβαθρο των καταστάσεων που απαρτίζουν τις διεπιφάνειες, προσομοιώθηκαν στον πραγματικό χώρο χρησιμοποιώντας τον κώδικα που αναπτύχθηκε από τον κ. Γεώργιο Λιβανά, ο οποίος προσομοιώνει το πρόβλημα των διεπιφανειών χρησιμοποιώντας το εκτεταμένο μοντέλο Hubbard και το επιλύει απλοποιώντας τις αλληλεπιδράσεις με την προσέγγιση μέσου πεδίου και τον μετασχηματισμό Bogoliubov-de Gennes. Ο τοπολογικός μονωτής προσομοιώθηκε με τη βοήθεια δύο διαφορετικών μοντέλων, το μοντέλο BHZ, το οποίο προσομοιώνει έναν 2-D τοπολογικού μονωτή στον πραγματικό χώρο, και το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής, το οποίο προσομοιώνει την επιφάνεια ενός 3-D τοπολογικού μονωτή στον χώρο των ορμών, όπου και εμφανίζονται οι μεταλλικές επιφανειακές ιδιοκαταστάσεις.

Το μοντέλο BHZ είναι διζωνικό με ενεργειακό χάσμα το οποίο εξαρτάται από τον όρο αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς  $t_{so}$ . Μελετώντας την πυκνότητα καταστάσεων με ύπαρξη συνόρων παρατηρείται ότι πράγματι εμφανίζονται εντοπισμένες μεταλλικές ιδιοκαταστάσεις με ενέργεια μικρότερη του ενεργειακού χάσματος οι οποίες αποσβένονται στο μέσο του τοπολογικού μονωτή. Αυτές οι ιδιοκαταστάσεις έχουν γραμμική διασπορά για χαμηλές ενέργειες. Επιπλέον, παρατηρήθηκε ότι στα σύνορα του συστήματος εμφανίζεται ρεύμα ίδιο μέτρου και αντίθετης φοράς για κάθε προβολή του σπιν καθώς και αντίθετου προσήμου μεταξύ των δύο πλευρών του συστήματος. Συνεπώς, εμφανίζεται ρεύμα σπιν αντίθετης φοράς στις δύο πλευρές του τοπολογικού μονωτή.

Αφού το μοντέλο BHZ είναι διζωνικό, το δεύτερο υλικό της διεπιφάνειας προσομοιώνεται



με δύο ενεργειακές ζώνες για λόγους πληρότητας. Παρατηρείται ότι κατά την ύπαρξη σύζευξης στην διεπιφάνεια TI/CDW το ενεργειακό χάσμα του CDW μεταφέρεται στο άκρο του τοπολογικού μονωτή εξαφανίζοντας τις μεταλλικές ιδιοκαταστάσεις άκρης και δημιουργώντας ενεργειακό χάσμα. Με περαιτέρω αύξηση της σύζευξης στη διεπιφάνεια τα υλικά αποκτούν παρόμοια διασπορά. Τα ίδια αποτελέσματα εμφανίζονται και στην διεπιφάνεια TI/S-wave SC όπου κατά την ύπαρξη σύζευξης μεταξύ των επιφανειών το ενεργειακό χάσμα του singlet s-wave υπεραγωγού μεταφέρεται στο άκρο του τοπολογικού μονωτή εξαφανίζοντας την ιδιοκατάσταση άκρης του τοπολογικού μονωτή.

Το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής προσομοιώνει την επιφάνεια του 3-D τοπολογικού μονωτή, δηλαδή τις επιφανειακές ιδιοκαταστάσεις σε μία ενεργειακή ζώνη. Παρατηρείται ότι κατά την έλλειψη χημικού δυναμικού η επιφάνεια Fermi στην ζώνη Brillouin αποτελείται από εννέα κόμβους όπου στο σημείο  $\Gamma$  η γραμμική διασπορά των ιδιοενεργειών υποδεικνύει την ύπαρξη κόνου Dirac. Η ύπαρξη επιφάνειας Fermi επιβεβαιώνεται από την πυκνότητα καταστάσεων της ενεργούς Χαμιλτονιανής.

Αφού το μοντέλο ενεργούς Χαμιλτονιανής περιέχει μια ενεργειακή ζώνη, το δεύτερο υλικό της διεπιφάνειας προσομοιώνεται με μία. Στην διεπιφάνεια TI/AFM παρατηρείται ότι κατά την ύπαρξη σύζευξης μεταξύ των επιφανειών το ενεργειακό χάσμα του AFM μεταφέρεται στην επιφανειακή κατάσταση του τοπολογικού μονωτή δημιουργώντας χάσμα. Επιπλέον, η πεπερασμένη μαγνήτιση του AFM, η οποία αίρει τον εκφυλισμό των σπιν, επάγεται και στον τοπολογικό μονωτή αίροντας τον εκφυλισμό των καταστάσεων με σπιν πάνω και σπιν κάτω. Στην διεπιφάνεια μελετήθηκαν, επίσης, οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης οι οποίοι προκύπτουν λόγω της επίδρασης της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στον αντισιδηρομαγνήτη για πεπερασμένο χημικό δυναμικό, σύμφωνα με τον κανόνα κουαρτέτων. Συμπεραίνεται ότι, οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης εξαρτώνται με τέτοιο τρόπο με το χημικό δυναμικό ώστε κατά την έλλειψή του αυτοί να είναι μηδενικοί. Αυτό υποδεικνύει σύζευξη μεταξύ των παραμέτρων τάξης του αντισιδηρομαγνήτη και του χημικού δυναμικού. Ας σημειωθεί επιπλέον ότι στον AFM ευρέθηκε η συνθήκη ύπαρξης του χάσματος κατά την οποία η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς πρέπει να είναι μικρότερη της παραμέτρου τάξης του AFM για να υπάρχει χάσμα, δηλαδή, για  $R > \Delta_{SDW}$  το χάσμα εξαφανίζεται.

Η διεπιφάνεια TI/S-wave SC στο ενεργό μοντέλο παρουσιάζει παρόμοια αποτελέσμα με αυτό του μοντέλο BHZ. Περαιτέρω μελέτη της διεπιφάνειας γίνεται με τον κανόνα κουαρτέτων κατά τον οποίο η επίδραση της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στον singlet s-wave υπεραγωγό

για πεπερασμένο χημικό δυναμικό επάγει τις p-wave παραμέτρους τάξης, οι οποίες προκύπτουν λόγω σύζευξης της παραμέτρου τάξης του χημικού δυναμικού και του s-wave υπεραγωγού. Αποδείχθηκε ότι πράγματι η παραπάνω σύζευξη οδηγεί στην εμφάνιση της τέταρτης παραμέτρου τάξης, καθώς μηδενίζοντας το χημικό δυναμικό μηδενίζονται οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης της p-wave υπεραγωγιμότητας. Επιπλέον, αποδείχθηκε ότι κατά την έλλειψη χημικού δυναμικού οι παράμετροι τάξης προκύπτουν με την εφαρμογή εξωτερικού μαγνητικού πεδίου κατά τον άξονα z στη διεπιφάνεια. Σε αυτή την περίπτωση η σύζευξη που οδηγεί την επαγωγή των νέων παραμέτρων τάξης είναι αυτή της παραμέτρου τάξης του singlet s-wave υπεραγωγού με το μαγνητικό πεδίο κατά την ύπαρξη αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς.

Τέλος, μελετήθηκε η διεπιφάνεια TI/D-wave SC στην οποία κατά την ύπαρξη σύζευξης εμφανίζεται ενεργειακό χάσμα στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή. Το αποτέλεσμα αυτό δεν είναι αναμενόμενο καθώς η διεπιφάνεια αναμένεται να έχει επιφάνεια Fermi αποτελούμενη από οκτώ κόμβους, σύμφωνα με προσομοιώσεις που υπολογίζουν την πρώτη ζώνη Brillouin. Αυτό συμβαίνει διότι στην εξίσωση ιδιοενεργειών της διεπιφάνειας δεν λήφθηκαν υπ' όψιν οι επαγόμενοι p-wave παράμετροι τάξης, οι οποίοι σε αυτή την περίπτωση προκύπτουν από τη σύζευξη της παραμέτρου τάξης του d-wave υπεραγωγού με την διασπορά κατά την ύπαρξη αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς. Οι επαγόμενοι παράμετροι τάξης παίζουν κεντρικό ρόλο σε αυτή τη διεπιφάνεια καθώς δημιουργούν σχεδόν ιστροπικό ενεργειακό χάσμα εξαφανίζοντας την αναμενόμενη επιφάνεια Fermi στις επιφανειακές καταστάσεις του τοπολογικού μονωτή. Λαμβάνοντας υπ' όψιν τις επαγόμενες παραμέτρους τάξης στις ιδιοενέργειες της διεπιφάνειας αποδείχθηκε η ύπαρξη σχεδόν ιστροπικού ενεργειακού χάσματος στην επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή, πράγμα το οποίο είναι σύμφωνο με την πυκνότητα καταστάσεων που υπολογίσθηκε στο χώρο των ορμών. Τα παραπάνω αποτελέσματα έρχονται σε πλήρη συμφωνία με πρόσφατα πειραματικά δεδομένα κινεζικής ερευνητικής ομάδα τα οποία δημοσιεύθηκαν στο περιοδικό Nature Physics 9, 2013. Με πειράματα στη διάταξη ARPES αποδεικνύουν ότι η επιφάνεια του τοπολογικού μονωτή διεπιφάνειας TI/D-wave SC εμφανίζει ενεργειακό χάσμα για  $T < T_c$  (ενεργοποίηση d-wave υπεραγωγού) το οποίο είναι σχεδόν ιστροπικό. Τελικά, τα παραπάνω αποτελέσματα αυτής της εργασίας συμπίπτουν με τα πειραματικά αποτελέσματα και εξηγούν τον λόγο εμφάνισης ενεργειακού χάσματος στον τοπολογικό μονωτή της διεπιφάνειας, ο οποίος είναι η επαγωγή της p-wave παραμέτρου τάξης λόγω του κανονα των κουαρτέτων, δηλαδή λόγω της συνύπαρξης των παραμέτρων τάξης της διασποράς, του d-wave υπεραγωγού και της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς.

# Βιβλιογραφία

- [1] Henrik Bruus, Karsten Flensburg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*. Oxford University Press, 2002.
- [2] Patrik Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. World Scientific, 1999.
- [3] U. Rössler, *Solid State Theory: An Introduction*. Springer, 2009.
- [4] T. Tsuneto, *Superconductivity and Superfluidity*. Cambridge University Press, 1998.
- [5] James F. Annett, *Superconductivity, Superfluids and Condensates*. Oxford University Press, 2003.
- [6] Michael Tinkham, *Introduction to Superconductivity, Second Edition*. McGraw-Hill Inc., 1996.
- [7] Makul S. Laad, Dipan K. Ghosh, *Extended Hubbard model in two dimensions*. J. Phys.: Condens. Matter 3, 1991.
- [8] Suguru Ueda, Norio Kawakami, Manfred Sigrist, *Proximity effects in a topological-insulator/Mott-insulator heterostructure*. [arXiv:1303.2781v1], 2013.
- [9] Eryin Wang et al., *Fully gapped topological surface states in Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> films induced by a d-wave high-temperature superconductor*. Nature Physics 9, 621-625, [arXiv:1309.6676v2], 2013.
- [10] Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, *Topological insulators and superconductors*. [arXiv:1008.2026v1], 2010.
- [11] M. Z. Hasan, C. L. Kane, *Topological insulators*. [arXiv:1002.3895v2], 2010.

- [12] Γρηγόριος Χ. Ψαλτάκης, *Κβαντικά Συστήματα Πολλών Σωματιδίων*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2012.
- [13] Ε. Ν. Οικονόμου, *Φυσική Στερεάς Κατάστασης: Τόμος II*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2003.
- [14] Γεώργιος Λιβανάς, *Διπλωματική Εργασία Δ.Π.Μ.Σ. Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές*, 2010.
- [15] Παναγιώτης Χριστοδούλου, *Διπλωματική Εργασία Ε.Μ.Π. Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών*, 2013.