



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών
Επιστημών

Θεωρητική μελέτη νέων λειτουργικών υλικών
και νανοδομών από την συνύπαρξη και τον
ανταγωνισμό κβαντικών καταστάσεων τάξης.

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΓΕΩΡΓΙΟΥ Ι. ΛΙΒΑΝΑ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Ε.Μ.Π.

Επιβλέπων :

Γεώργιος Βαρελογιάννης

Αναπλ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Δεκέμβριος 2016



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

Θεωρητική μελέτη νέων λειτουργικών υλικών και
νανοδομών από την συνύπαρξη και τον ανταγωνισμό
κβαντικών καταστάσεων τάξης.

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΓΕΩΡΓΙΟΥ Ι. ΛΙΒΑΝΑ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού

Τριμελής Συμβουλευτική Επιτροπή: Επταμελής Συμβουλευτική Επιτροπή:

1. Γεώργιος Βαρελογιάννης,
Αναπλ. Καθηγητής Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων)
2. Ευθύμιος Λιαροκάπης,
Καθηγητής Ε.Μ.Π.
3. Κωνσταντίνος Παρασκευαΐδης
Αναπλ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

1. Γεώργιος Βαρελογιάννης,
Αναπλ. Καθηγητής Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων)
2. Ευθύμιος Λιαροκάπης,
Καθηγητής Ε.Μ.Π.
3. Κωνσταντίνος Παρασκευαΐδης
Αναπλ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.
4. Λεωνίδας Τσέτσερης,
Αναπλ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.
5. Σπυρίδων Ευαγγέλλου,
Καθηγητής Παν. Ιωαννίνων
6. Ιωάννης Ξανθάκης,
Καθηγητής Ε.Μ.Π.
7. Manfred Sigrist,
Professor ETH Zürich

Αθήνα, Δεκέμβριος 2016

Ευχαριστίες

Για την ολοκλήρωση της παρούσας διατριβής, θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά καταρχάς τον επιβλέποντά μου Αναπληρωτή καθηγητή Γεώργιο Βαρελογιάννη για την εμπιστοσύνη που έδειξε στο πρόσωπό μου. Ο κ. Βαρελογιάννης με βοήθησε σημαντικά στη μελέτη των προβλημάτων που εξετάσαμε στην παρούσα διατριβή, με την επιστημονική του καθοδήγηση, την επιμονή και την υπομονή του. Με βαθιά γνώση του πεδίου φυσικής συμπυκνωμένης ύλης, αλλά και με φυσική διορατικότητα, τόλμη και επίμονη στην προσέγγιση θεμελιωδών ζητημάτων της σύγχρονης φυσικής, ο κ. Βαρελογιάννης μου ανέδειξε με τον καλύτερο τρόπο τον συναρπαστικό κόσμο της φυσικής επιστήμης.

Θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της συμβουλευτικής επιτροπής, Αναπληρωτή Καθηγητή Κώστα Παρασκευαΐδη και Καθηγητή Ευθύμιο Λιαροκάπη, καθώς και τον Αναπληρωτή Καθηγητή Λεωνίδα Τσέτσερη, για το ενδιαφέρον και τη βοήθεια που μου προσέφεραν όλα αυτά τα χρόνια. Θα ήθελα να εκφράσω επίσης την ευγνωμοσύνη μου προς τους Δρ. Παναγιώτη Κοτετέ και Δρ. Αλέξανδρο Απέρη για την στήριξη και την βοήθειά τους σε πολλές πτυχές της εργασίας μου. Τέλος, νιώθω την ανάγκη να ευχαριστήσω τον Καθηγητή του Ινστιτούτου Θεωρητικής Φυσικής του ETH Zürich, Prof. Manfred Sigrist για την εμπιστοσύνη του, την βοήθειά του και τη συνεργασία μας σε τμήματα της παρούσας διατριβής.

Στη διάρκεια της διδακτορικής μου διατριβής γνώρισα εξαιρετους συναδέλφους, όπως τον Δημήτρη Καλτσά, τον Γιάννη Νταλιάνη, τον Μηνά Τσουκαλά, τον Πάρη Παρισιάδη, τον Γιάννη Μητσούλα, τον Γιώργο Πάστρα καθώς και τον Γιώργο Τσάμη, οι συζητήσεις με τους οποίους με βοήθησαν στη βαθύτερη κατανόηση και αντιμετώπιση πολλών φυσικών και μη προβλημάτων.

Κλείνοντας, δε μπορώ να παραλείψω τη στήριξη και κατανόηση που έλαβα όλα αυτά τα χρόνια από την οικογένειά, για να εκπληρώσω αυτόν τον σημαντικό στόχο στη ζωή μου, καθώς τις ευχαριστίες μου για τη φίλη μου Αλίνα που με καθοδήγησε στο τελικό στάδιο ολοκλήρωσης της δουλειάς μου.

Προλογος

Τα συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων αποτελούν ένα ευρύ πεδίο μελέτης στη φυσική συμπεκνωμένης ύλης, όπου η ενέργεια αλληλεπιδράσης μεταξύ των ηλεκτρονίων είναι συγκρίσιμη με την κινητική τους ενέργεια. Οι ισχυρές αλληλεπιδράσεις στα συστήματα αυτά οδηγούν στην εμφάνιση ποικίλων χβαντικών καταστάσεων τάξης με συναρπαστικές πολλές φορές ιδιότητες. Ο ανταγωνισμός μεταξύ των καταστάσεων αυτών ευθύνεται για τα πλούσια διαγράμματα φάσης και τη δραστική μεταβολή των ιδιοτήτων που παρουσιάζουν τα συστήματα αυτά συναρτήσει, είτε της θερμοκρασίας, είτε άλλων παραμέτρων. Μια σημαντική ομάδα υλικών που εμπίπτουν στην κατηγορία αυτή, αποτελούν τα οξειδία μετάλλων μετάβασης όπου κυριαρχούν οι ισχυρές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων στα μερικώς κατηλειμμένα εξωτερικά d και f τροχιακά των ατόμων των μετάλλων μετάβασης. Για τον λόγο αυτό, στα υλικά αυτά εμφανίζεται μια πλειάδα χβαντικών καταστάσεων τάξης, όπως η μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα, ο αντισιδηρομαγνητισμός και τα κύματα πυκνότητας φορτίου, οι οποίες παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον, τόσο από θεωρητικής άποψης, όσο και από πλευράς τεχνολογικών εφαρμογών. Λόγω της πολυπλοκότητας των συστημάτων αυτών η εντατική θεωρητική έρευνα, αλλά και τα πολυάριθμα πειράματα που έχουν διεξαχθεί τα τελευταία χρόνια, δεν έχουν καταφέρει να αποσαφηνίσουν όλες τις πτυχές των αντίστοιχων διαγραμμάτων φάσης καθώς και τους μηχανισμούς που ευθύνονται για τη δημιουργία των διάφορων χβαντικών καταστάσεων τάξης.

Τα τελευταία χρόνια πέρα από τη μελέτη ομοιογενών συστημάτων η έρευνα έχει επεκταθεί και στη μελέτη ετεροδομών μεταξύ υλικών που εμφανίζουν διαφορετικές χβαντικές καταστάσεις τάξης. Οι ετεροδομές, μας επιτρέπουν να μελετήσουμε των ανταγωνισμό μεταξύ διάφορων καταστάσεων τάξης και να διερευνήσουμε τις φυσικές ιδιότητες που προκύπτουν από τη συνύπαρξή τους. Επιπλέον, μας δίνουν τη δυνατότητα να δημιουργήσουμε χβαντικές καταστάσεις οι οποίες δεν απαντώνται συχνά στη φύση και να μελετήσουμε τις ξεχωριστές ιδιότητές τους σε χωρους μειωμένων διαστάσεων.

Πράγματι, η μέχρι σήμερα έρευνα στο πεδίο αυτό έχει αποφέρει σημαντικά αποτελέσματα, όπως είναι η ανακάλυψη του διδιάστατου νέφους ηλεκτρονίων που δημιουργείται στις ετεροδομές $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$, $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ και γενικά σε ετεροδομές μεταξύ οξειδίων των μετάλλων μετάβασης. Πολυάριθμα πειράματα που έχουν διεξαχθεί κυρίως στις ετεροδομές $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$, έχουν αναδείξει την εμφάνιση σιδηρομαγνητικής τάξης, αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς και υπεραγωγιμότητας στο εντοπισμένο στη διεπαφή μεταξύ των συγκεκριμένων μονωτών ηλεκτρονιακό νέφος. Παρόλο που οι ηλεκτρονιακές αυτές ιδιότητες δεν έχουν μέχρι σήμερα εξηγηθεί πλήρως από τις διάφορες θεωρητικές προσεγγίσεις που έχουν διατυπωθεί, οι συγκεκριμένες ετεροδομές αναμένεται να παίξουν σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη καινοτόμων τεχνολογικών εφαρμογών.

Στο πεδίο των ετεροδομών όπου εμπλέκονται υπεραγώγιμες φάσεις το επίκεντρο της έρευνας έχει μετατοπιστεί τα τελευταία χρόνια από τη μελέτη του φαινομένου Josephson και του φαινομένου εγγύτητας, στη δημιουργία **τοπολογικών υπεραγώγιμων φάσεων** που παρουσιάζουν εκπληκτικές ιδιότητες. Οι τοπολογικές υπεραγώγιμες φάσεις μεταξύ άλλων εμφανίζουν διεγέρσεις **Majorana** μηδενικής ενέργειας, οι οποίες λόγω των εξωτικών ιδιοτήτων τους, όπως είναι η μη-Αβελιανή στατιστική εναλλαγής που υπακούουν και ο απεντοπισμένος τους χαρακτήρας, μπορούν να αποτελέσουν τη βάση για την ανάπτυξη τοπολογικών χβαντικών υπολογιστών.

Για τους παραπάνω λόγους στην παρούσα διατριβή μελετήσαμε **ετεροδομές μεταξύ συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων** που παρουσιάζουν διαφορετικές χβαντικές καταστάσεις τάξης. Η παρούσα εργασία βασίζεται στον κανόνα των επαγόμενων πεδίων τον

οποίο και χρησιμοποιήσαμε ως οδηγό για την ανάπτυξη των προτάσεων μας και την ανάλυση των αποτελεσμάτων μας. Η μελέτη διάφορων τύπων ετεροδομών, με **διεπαφές (001) ή (100)**, έγινε στα πλαίσια του **εκτεταμένου μοντέλου Hubbard** το οποίο και επιλύσαμε στο όριο της **προσέγγισης μέσου πεδίου**. Το μοντέλο Hubbard είναι το πιο διαδεδομένο μοντέλο για τη διερεύνηση συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων, στη γενική του μορφή όμως μπορεί να επιλυθεί μόνο προσεγγιστικά. Εκφρασμένο στον χώρο των θέσεων, το συγκεκριμένο μοντέλο μας επιτρέπει τη μελέτη, τόσο ετεροδομών, όσο και φαινομένων που εμφανίζονται στο σύνορο ομοιογενών συστημάτων. Εν γένει όμως η αριθμητική επίλυση ενός τέτοιου συστήματος στον χώρο των θέσεων απαιτεί μεγάλη υπολογιστική ισχύ, καθώς σε πολλές περιπτώσεις όπου δεν επιθυμούμε τη μελέτη φαινομένων στο σύνορο των συστημάτων, παρέχει επιπλέον πληροφορία που δεν παρουσιάζει κάποιο ενδιαφέρον. Σημειώνουμε ότι ο χώρος των θέσεων απαιτείται μόνο για την κάθετη προς το επίπεδο της διεπαφής κατεύθυνση, ενώ η έκφραση του συστήματος στον χώρο των ορμών μειώνει σημαντικά τις υπολογιστικές απαιτήσεις και τον χρόνο επίλυσης του προβλήματος. Για τον λόγο αυτό διατυπώσαμε τα συστήματα ετεροδομών, τόσο στον χώρο των θέσεων, όσο και στον χώρο ορμών-θέσεων, με τον χώρο των ορμών να αναφέρεται στις παράλληλες προς το επίπεδο της εκάστοτε διεπαφής διευθύνσεις. Για την επίλυση των συστημάτων αυτών αναπτύξαμε μια σειρά από κώδικες (σε περιβάλλον Matlab), ο καθένας από τους οποίους είναι κατάλληλος για τη μελέτη συγκεκριμένου τύπου ετεροδομής.

Αρχικά ως μια εφαρμογή του κανόνα επαγόμενων πεδίων σε ομοιογενή συστήματα, εξετάζουμε την εμφάνιση **νηματικής τάξης στα οξυπνικτίδια του σιδήρου** η οποία ισοδυναμεί με την υποβάθμιση της τετραγωνικής συμμετρίας C_4 που εμφανίζουν τα συστήματα αυτά στην κανονική τους φάση, σε ορθορομβική C_2 . Η νηματική ηλεκτρονιακή δομή που εμφανίζουν τα υλικά αυτά αποτελεί σήμερα πεδίο εντατικής διερεύνησης με τη διατύπωση διάφορων μηχανισμών που βασίζονται, είτε σε ηλεκτρονιακούς, είτε σε πλεγματοικούς βαθμούς ελευθερίας. Η δικιά μας πρόταση βασίζεται στην εμφάνιση νηματικής τάξης λόγω της δημιουργίας μιας **$S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ υπεραγώγιμης φάσης** ή εν γένει μικτών υπεραγώγιμων φάσεων στα υλικά αυτά. Χρησιμοποιώντας ένα μινιμαλιστικό ενεργειακό μοντέλο για την ηλεκτρονιακή δομή των συγκεκριμένων συστημάτων, διερευνούμε τον ανταγωνισμό μεταξύ υπεραγώγιμων φάσεων διαφορετικής συμμετρίας και την ενεργειακή σταθεροποίηση της νηματικής $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ φάσης μέσω της **θεωρίας Landau**. Επιπλέον δείχνουμε ότι νηματική τάξη επάγεται και από μικτές φάσεις μη-συμβατικών κυμάτων πυκνότητας φορτίου ή σπιν.

Εν συνεχεία, ύστερα από την ανάπτυξη κατάλληλων υπολογιστικών εργαλείων για την επίλυση συστημάτων ετεροδομών με βάση το μοντέλο Hubbard, μελετάμε περιπτώσεις όπως οι **ετεροδομές αντισιδηρομαγνήτη/d-wave υπεραγωγού, συμβατικού υπεραγωγού/ημιαγωγού και συμβατικού υπεραγωγού/τοπολογικού μονωτή**. Τα αποτελέσματά μας συμφωνούν με προηγούμενες σχετικές μελέτες και επιβεβαιώνουν και στην περίπτωση των ετεροδομών την ισχύ του κανόνα των επαγόμενων πεδίων, ο οποίος μάλιστα προσφέρει το πλαίσιο για τη βαθύτερη κατανόησή τους. Συγκεκριμένα, παρουσιάζουμε την εμφάνιση ενός **π -triplet υπεραγώγιμου πεδίου** στις ετεροδομές αντισιδηρομαγνήτη/d-wave, ενώ αντίστοιχα για τις ετεροδομές συμβατικού υπεραγωγού με ημιαγωγό ή τοπολογικό μονωτή, την εμφάνιση της **τοπολογικής υπεραγώγιμης φάσης p-wave** συμμετρίας.

Ένα ξεχωριστό τμήμα της παρούσας διατριβής αναφέρεται στη μελέτη ετεροδομών μεταξύ **κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν**. Στα συγκεκριμένα συστήματα παρατηρούμε την εμφάνιση μιας **ημι-μεταλλικής σιδηρομαγνητικής φάσης** εντοπισμένης στη διεπαφή των δύο χβαντικών καταστάσεων τάξης. Επιπλέον, παρουσιάζουμε τη δυνατότητα ελέγχου της συγκεκριμένης φάσης μέσω της εφαρμογής τάσεων πύλης ή μαγνητικών πεδίων Zeeman και περιγράφουμε τις μεταβάσεις που παρατηρούνται από μια μονωτική σε μια **ημι-μεταλλική ή μονωτική σιδηρομαγνητική φάση**. Για συγκεκριμένο τύπο σύζευξης μεταξύ των διαφορετικών περιοχών, παρατηρούμε επίσης και την αλλαγή της πόλωσης του σπιν των φορέων χαμηλής ενέργειας του συστήματος, καθώς μεταβάλλουμε το χημικό δυναμικό το οποίο μπορεί να καθοριστεί από την εφαρμογή μιας τάσεως πύλης. Η ταυτοποίηση των φάσεων και των αντίστοιχων μεταβάσεων γίνεται, τόσο με τον υπολογισμό της **τοπικής πυκνότητας καταστάσεων**, όσο και της **συνεχούς**

αγωγιμότητας παράλληλα στο επίπεδο της διεπαφής μέσω της **εξίσωσης Kubo**. Βάσει των αποτελεσμάτων μας, οι συγκεκριμένες ετεροδομές και ειδικότερα οι διεπαφές (001), αναδεικνύονται ως κατάλληλες για την ανάπτυξη τεχνολογικών εφαρμογών στον τομέα της σπιντρονικής, ενώ φαίνεται να σχετίζονται άμεσα με τις ετεροδομές οξειδίων μετάλλων μετάβασης καθώς παρουσιάζουν πολλές κοινές ιδιότητες. Τέλος, περιγράφουμε τη δημιουργία τοπολογικής υπεραγωγιμότητας p -wave συμμετρίας και την **εμφάνιση καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας στην ημι-μεταλλική φάση των διεπαφών κύματος πυκνότητας φορτίου και σπιν**.

Στην τελευταία ενότητα της διατριβής μελετάμε **ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/ υπεραγωγού**. Συγκεκριμένα, παρουσιάζουμε ένα νέο μηχανισμό για την επαγωγή τοπολογικής υπεραγωγιμότητας σε μονοδιάστατους και οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες ενσωματωμένους σε συμβατικό υπεραγωγό απουσία εγγενών αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς. Σε πολύ πρόσφατο πείραμα που σχετίζεται με τη συγκεκριμένη ετεροδομή, οι ερευνητές ανίχνευσαν δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας μέσω μετρήσεων ηλεκτρονικής φασματοσκοπίας σάρωσης. Σύμφωνα με τον μηχανισμό που προτείνουμε, η τοπολογική υπεραγωγίμη φάση επάγεται στο σύνορο των δύο συστημάτων, λόγω του μαγνητικού πεδίου του σιδηρομαγνήτη που οδηγεί στην εμφάνιση **ρευμάτων θωράχισης** και συνιστωσών του **μαγνητικού πεδίου** μέσα στο επίπεδο του υπεραγωγού. Τα ρεύματα θωράχισης προκύπτουν από την ηλεκτρομαγνητική σύζευξη του μαγνητικού πεδίου με τα τροχιακά των ηλεκτρονίων, ενώ οι συνιστώσες του πεδίου στο επίπεδο του υπεραγωγού δρουν ως ενεργά πεδία Zeeman. Η αριθμητική επίλυση των αντίστοιχων **εξισώσεων Bogoliubov de Gennes** αναδεικνύει τη δημιουργία **τοπολογικής υπεραγωγιμότητας** και την εμφάνιση **δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας** εντοπισμένες στα άκρα του σιδηρομαγνήτη. Διαπιστώνουμε επίσης ότι η εμφάνιση των συγκεκριμένων καταστάσεων αποδίδεται στην παρουσία του ρεύματος και των συνιστωσών του μαγνητικού πεδίου στο επίπεδο του υπεραγωγού, επιβεβαιώνοντας έτσι την ισχύ του μηχανισμού μας. Τέλος, παρουσιάζουμε ανάλογα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διερεύνηση του συγκεκριμένου μηχανισμού σε **ετεροδομές επιπέδων υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού**. Στην περίπτωση αυτή, δείχνουμε ότι η εξωτερική εφαρμογή υπερρευμάτων και πεδίων Zeeman στα υπεραγωγίμα επίπεδα οδηγεί πράγματι στην εμφάνιση **πολλαπλών καταστάσεων Majorana** εντοπισμένων στα άκρα του σιδηρομαγνήτη.

Preface

Systems of strongly correlated electrons constitute a broad field of condensed matter physics where the energy scale of interactions among electrons is comparable with their kinetic energy. Strong interactions in these systems are responsible for the emergence of several quantum ordered phases with extraordinary properties. Competition between ordered states is responsible for the rich phase diagrams and the drastic change of properties of these systems with respect to temperature or other parameters. A significant group of materials in this category are the transition metal oxides where strong interactions among electrons in the partially occupied outer d and f orbitals of the transition metals atoms dominate. For this reason, these materials exhibit a broad range of quantum phases with interesting properties both from a theoretical and a technological point of view, such as unconventional superconductivity, antiferromagnetism and charge density waves. Due to the complexity of these systems, the intensive theoretical work as well as the numerous experiments conducted so far, have not managed to clarify all the aspects of the corresponding phase diagrams and the microscopic mechanisms responsible for them.

Apart from bulk systems, scientific research has also extended to the study of heterostructures among materials which exhibit different properties. Heterostructures allow us to study the competition among different quantum phases and to investigate the physical properties emerging from their coexistence. Moreover, they give us the ability to form phases not encountered in bulk systems and to study their properties in spaces of reduced dimensions. Indeed, research in the field of heterostructures has already provided very interesting results, such as the discovery of the 2d electron gas formed at the interfaces of $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ and $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterostructures. Numerous experiments conducted mainly in $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ heterostructures have revealed the emergence of ferromagnetic ordering, spin-orbit interactions and superconductivity in the electron gas which emerges at the interface of these two insulating materials. Although the properties of this electron gas have not been completely explained by the several theoretical approaches presented so far, the particular heterostructures are anticipated to play a significant role in the development of novel technological applications. Moreover, in the field of heterostructures involving superconducting phases, research over the last years has focused in the engineering of **topological superconducting phases** which can host exotic excitations. In particular topological superconducting phases can support **zero energy Majorana quasiparticles** which form delocalised fermionic states and exhibit non-Abelian exchange statistics. Due to these exotic properties, zero energy Majorana quasiparticles can become the basis for the realisation of universal quantum computation.

For the aforementioned reasons, this dissertation is dedicated to the study of **heterostructures among systems of strongly correlated electrons** which exhibit different quantum ordering. This work is based on the quartet coupling rule which we use as a guide for the development of our proposals and the analysis of our results. In order to study several types of heterostructures with (001) or (100) interfaces, we employ the **extended Hubbard model** which we solve within the **mean field approximation**. Expressed in coordinate space, this model is suitable for studying heterostructures and phenomena which emerge at the boundaries of bulk systems. Unfortunately, the numerical solution of such systems in coordinate space is computationally demanding. We remark that coordinate space is required only for the perpendicular to the interface direction, while the expression of the system in momentum

space significantly reduces the computational demands. For this reason, we described the heterostructures we investigated in the coordinate as well as in the coordinate-momentum space, where momentum space refers to the parallel to the interface directions. In order to investigate these systems we developed a group of computational tools, each of which is appropriate for studying a particular type of heterostructure.

Initially, as a particular application of the rule for induced fields in bulk systems we investigate the emergence of **nematic order in iron pnictides** which reduces the C_4 tetragonal symmetry that these systems acquire in the normal phase to the C_2 orthorhombic symmetry. The nematic electronic structure of these materials remains a field of intensive research where several mechanisms have been proposed based, either in the electronic, or the lattice degrees of freedom. According to our approach, nematicity in these materials emerges due to the formation of **mixed superconducting states** such as $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$. Apart from self-consistent numerical calculations, we also utilise **Landau theory** in order to investigate the competition among superconducting phases of different symmetry and the stability of the nematic phase.

Subsequently, after the development of the necessary computational tools for solving heterostructures systems, we investigate **antiferromagnet/d-wave superconductor, conventional superconductor/semiconductor and conventional superconductor/topological insulator** heterostructures. Our results agree with previous studies and verify the validity of the induced fields rule in the case of heterostructures as well. In particular we present the emergence of a **π - triplet SC field** in **antiferromagnet/d-wave superconductor** interfaces and a **topological superconducting field** of **p - wave** symmetry in heterostructures of a conventional superconductor with a topological insulator or a semiconductor. We remark that in general the quartet coupling provides us also with a better physical insight for understanding interfacial phenomena.

Next, we investigate **heterostructures among charge and spin density waves**. In these heterostructures we observe the emergence of a **half-metallic ferromagnetic phase** localised at the interface of the two insulating states. We moreover present the behaviour of the interfacial phase with respect to applied gate voltages or Zeeman magnetic fields and we describe the phase transitions from an insulating to a half-metallic or an insulating ferromagnetic state. For a particular type of coupling among the different regions, we also observe that the spin polarisation of the low energy carriers can reverse as we modify the chemical potential of the system through the application of a gate voltage. The interfacial phases and the corresponding phase transitions are identified through the calculation of the **local density of states** and the parallel to the interface **dc conductivity via the Kubo formula**. According to our results, charge and spin density waves heterostructures exhibit similar properties with the interface of transition metal oxides heterostructures and moreover appear to be suitable for technological applications in the field of spintronics. Finally, we present the emergence of topological superconductivity and **zero energy Majorana modes, in the half-metallic interface of these heterostructures**.

In the last section of this dissertation we study several types of **ferromagnet - superconductor heterostructures**. In particular we present an alternative mechanism for inducing topological superconductivity in 1D and quasi-1D ferromagnetic wires embedded in conventional superconductors even in the absence of intrinsic spin-orbit interactions. According to our mechanism, an **equal spin p - wave superconducting field** emerges in the boundary of the two regions, due to the coexistence of conventional superconductivity with a **screening current** and in **-plane magnetic field** components. The screening current flow is triggered by the electromagnetic coupling of the ferromagnetic field with the orbitals of electrons. Moreover, the rotation of the ferromagnetic field contributes to in-plane magnetic field components which penetrate into the superconducting region and act as an effective Zeeman field. Numerical solutions of the Bogoliubov de Gennes equations reveal the formation of topological superconductivity on the ferromagnetic wire and the emergence of **zero energy Majorana bound states**. We moreover verify that these zero energy excitations emerge localised at

the edges of the ferromagnet, due to the coexistence of the current and the in-plane magnetic field. Finally, we present the results derived by applying our mechanism in **superconductor/ferromagnet/superconductor trilayers**. In this case we verify that externally applied Zeeman fields in coexistence with supercurrent flows in the superconducting layers, lead to the emergence of **multiple pairs of zero energy Majorana fermions** localised at the edges of the ferromagnet.

Περιεχόμενα

1	Εισαγωγή	1
1.1	Υπεραγωγιμότητα	1
1.1.1	Η θεωρία <i>Ginzburg – Landau</i>	2
1.1.2	Η θεωρία <i>BCS</i>	3
1.2	Συστήματα Ετεροδομών	5
1.3	Ετεροδομές οξειδίων των μετάλλων μετάβασης	11
1.4	Τοπολογικές φάσεις και φερμιόνια <i>Majorana</i>	15
2	Συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων	21
2.1	Το μοντέλο ισχυρού δεσμού	21
2.2	Συστήματα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων	22
2.3	Το μοντέλο <i>Hubbard</i>	24
2.4	Προσέγγιση μέσου πεδίου	26
2.5	Περιγραφή συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των θέσεων.	27
2.6	Περιγραφή συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των θέσεων-ορμών	37
2.7	Περιγραφή συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των ορμών	45
2.8	Περιγραφή συστημάτων διεπαφών	49
3	Επαγόμενα πεδία από συνύπαρξη διαφορετικών κβαντικών καταστάσεων τάξης	55
3.1	Εισαγωγή	55
3.2	Πεδία επαγόμενα σε ομοιογενή συστήματα	56
3.2.1	Νηματική υπεραγωγιμότητα στα οξυπνικτίδια του σιδήρου	56
3.2.2	Διερεύνηση ενεργειακής σταθεροποίησης των νηματικών έναντι των μη-νηματικών μικτών καταστάσεων	63
3.2.3	Νηματικά κύματα πυκνότητας φορτίου	68
3.3	Πεδία επαγόμενα σε διεπαφές ετεροδομών.	70
3.3.1	π -τριπλετ υπεραγωγίμο πεδίο επαγόμενο σε ετεροδομές αντισιδηρομαγνήτη/ d -wave υπεραγωγού	70
3.3.2	Επαγωγή υπεραγωγίμων πεδίων p συμμετρίας σε ετεροδομές τοπολογικού μονωτή-συμβατικού υπεραγωγού <i>TI/SC</i> .	75
3.3.3	Επαγωγή υπεραγωγίμων πεδίων p συμμετρίας σε ετεροδομές ημιαγωγού-συμβατικού υπεραγωγού <i>SM/SC</i> .	79
4	Ετεροδομές μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν	82
4.1	Εισαγωγή-Ετεροδομές οξειδίων των μετάλλων μετάβασης	82
4.2	Διεπαφές (100) <i>SDW/CDW</i>	84
4.2.1	Μαθηματική περιγραφή των διεπαφών (100) <i>SDW/CDW</i>	84
4.2.2	Επίλυση του συστήματος διεπαφών (100) <i>SDW/CDW</i>	88
4.2.3	Η p - wave υπεραγωγίμη φάση σε διεπαφές (100) <i>SDW/CDW</i>	95
4.3	Διεπαφές (001) <i>SDW/CDW</i>	100

4.3.1	Μαθηματική περιγραφή των διεπαφών (001) <i>SDW/CDW</i>	100
4.3.2	Ετεροδομές <i>SDW/CDW</i> δύο στρωμάτων	104
4.3.3	Ετεροδομές <i>SDW/CDW</i> πολλαπλών στρωμάτων	109
4.3.4	Η χειρική $p - wave$ υπεραγώγιμη φάση σε διεπαφές (001) <i>SDW/CDW</i>	111
5	Δέσμιες καταστάσεις <i>Majorana</i> μηδενικής ενέργειας σε ετεροδομές Σιδηρομαγνήτη/Υπεραγωγού	118
5.1	Εισαγωγή	118
5.1.1	Η τοπολογία στη φυσική στερεάς κατάστασης	118
5.1.2	Ταξινόμηση φυσικών συστημάτων βάσει συμμετρίας	119
5.1.3	Δέσμιες καταστάσεις <i>Majorana</i>	121
5.1.4	Αλυσίδες ατόμων σιδήρου πάνω σε συμβατικό υπεραγωγό μολύβδου: Πείραμα	123
5.2	Καταστάσεις <i>Majorana</i> σε ετεροδομές Σιδηρομαγνήτη/Υπεραγωγού.	126
5.2.1	Μονοδιάστατα σιδηρομαγνητικά συστήματα στην επιφάνεια συμβατικού υπεραγωγού	130
5.2.2	Οιονεί μονοδιάστατοι σιδηρομαγνήτες ενσωματωμένοι σε συμβατικούς υπεραγωγούς	138
5.2.3	Ετεροδομές στρωμάτων υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού	145
5.2.4	Αποτελέσματα για αυτοσυνεπείς λύσεις του συμβατικού υπεραγώγιμου πεδίου.	151
6	Συμπεράσματα	154
7	Linear Response Theory	158
7.1	Susceptibilities	162
7.2	Current operator	164
7.3	Conductivity	166
8	Topological Invariants	170
8.1	Hamiltonian classification	170
8.2	BDI chiral orthogonal class	170
8.3	D symmetry class	173
8.4	DIII symmetry class	176

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Υπεραγωγιμότητα

Το 1911, ο H. Kammerling Onnes διεξάγει μετρήσεις ηλεκτρικής αντίστασης σε δείγματα πλατίνας, χρυσού και υδραργύρου στη χαμηλότερη δυνατή θερμοκρασία με σκοπό να εξετάσει την εγκυρότητα της σχέσης Drude σύμφωνα με την οποία η ηλεκτρική αντίσταση των μετάλλων σε χαμηλές θερμοκρασίες ακολουθεί τη σχέση $\rho = \rho_0 + aT^2$, όπου ρ_0 είναι η εναπομένουσα αντίσταση λόγω ατελειών. Οι μετρήσεις του Onnes στον υδράργυρο αποκαλύπτουν την πλήρη εξαφάνιση της ηλεκτρικής αντίστασης κάτω από τους 4K, καταδεικνύοντας μια μετάβαση φάσης σε μια εντέλως διαφορετική κατάσταση της ύλης, την υπεραγωγή [1]. Τα ίδια αποτελέσματα αναπαράγονται σε πειράματα με μόλυβδο, ενώ πειράματα σε υπεραγωγίσιμους δακτυλίους επιβεβαιώνουν τη δημιουργία μη φθίνοντων ρευμάτων επιδεικνύοντας την παντελή έλλειψη ηλεκτρικής αντίστασης. Το 1933, οι Meissner και Ochsenfeld ανακαλύπτουν ακόμα μια σημαντική ιδιότητα των υπεραγωγών, τον τέλειο διαμαγνητισμό, σύμφωνα με τον οποίο οι υπεραγωγοί απωθούν τη μαγνητική ροή από το εσωτερικό τους [2]. Δύο χρόνια αργότερα, οι F. και H. London εισάγουν μια φαινομενολογική θεωρία για να περιγράψουν τις δύο αυτές ηλεκτροδυναμικές ιδιότητες των υπεραγωγών. Όμως τα πρώτα βήματα για την κατανόηση της υπεραγωγίσιμης φάσης δεν ήρθαν παρά μόνο 40 χρόνια αργότερα με τη διατύπωση της φαινομενολογικής θεωρίας Ginzburg-Landau (GL) [3] και της μικροσκοπικής θεωρίας των Bardeen, Cooper και Schieffer (BCS) [4, 5]. Λίγο αργότερα ο Gorkon δείχνει ότι η θεωρία GL είναι το όριο της μικροσκοπικής BCS κοντά στην κρίσιμη θερμοκρασία T_c της υπεραγωγίσιμης φάσης ανάγοντας τη σε κάτι παραπάνω από μια απλή φαινομενολογική θεωρία [6]. Μάλιστα, οι δύο αυτές θεωρίες μπορούν να θεωρηθούν ως συμπληρωματικές, καθώς η θεωρία BCS περιγράφει μόνο την ομοιογενή υπεραγωγιμότητα μέχρι τη θερμοκρασία του απόλυτου μηδέν, ενώ η θεωρία GL, που περιορίζεται μόνο σε θερμοκρασίες κοντά στο σημείο μετάβασης, μπορεί να περιγράψει τον σχηματισμό μη-ομογενών και μη-ισοτροπικών υπεραγωγίσιμων φάσεων.

Μετά τη διατύπωση της θεωρίας BCS, η απουσία νέων πειραματικών αποτελεσμάτων οδήγησαν στη σταδιακή μείωση του επιστημονικού και τεχνολογικού ενδιαφέροντος για την υπεραγωγιμότητα. Παρόλ' αυτά, πολλοί επιστήμονες όπως οι Pitaevskii, Emery και Anderson διατύπωσαν θεωρητικά μοντέλα για μη-ισοτροπικές ή μη-συμβατικές υπεραγωγίσιμες φάσεις. Παρόλο που η μη-συμβατική υπέρρευστη φάση του He^3 ανακαλύφθηκε το 1972, [7] και η μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα στους υπεραγωγούς βαρέων φερμιονίων είχε ήδη ανακαλυφθεί από τη δεκαετία του 80, η τεράστια ώθηση προς τη μελέτη της μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας δόθηκε από την ανακάλυψη του υπεραγωγού υψηλής θερμοκρασίας LBCO από τους BERNONZ και MULLER [8]. Το πιο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό του LBCO όμως δεν ήταν τόσο η υψηλή κρίσιμη θερμοκρασία του, όσο το γεγονός ότι άνηκε σε μια νέα κατηγορία οξειδίων τα οποία ως κακοί ηλεκτρικοί αγωγοί δεν αναμενόταν να εκδηλώνουν το φαινόμενο της υπεραγωγιμότητας. Η ανακάλυψη του YBCO με κρίσιμη θερμοκρασία $T_c=90\text{K}$ λίγους μήνες μετά καταδείκνυε ότι η υπεραγωγιμότητα ήταν ένα φαινόμενο με πολλές ακόμα ανεξήγητες πτυχές. Η ανακάλυψη ενός υπεραγωγού με κρίσιμη θερμοκρασία πάνω από το σημείο βρασμού το αζώτου, $T = 77\text{K}$, πυροδότησε μια εντατική έρευνα που κατέληξε στην ανακάλυψη μιας ολόκληρης ομάδας νέων υπεραγωγών που παρουσιάζουν παρόμοια

κρυσταλλική δομή και διαγράμματα φάσης. Η συγκεκριμένη ομάδα υλικών που αποτελείται από οξειδία του χαλκού (cuprates), χαρακτηρίζεται από ασθενώς συζευγμένα επίπεδα CuO_2 και από την εμφάνιση αντισιδηρομαγνητικής τάξης κοντά στο όριο της συμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής στη ζώνη σθένους.

Ύστερα από χρόνια έρευνας, η βασική ερώτηση που αφορά το μηχανισμό δημιουργίας της υπεραγωγικής φάσης δεν έχει ακόμα απαντηθεί. Μέχρι την ανακάλυψη του υπέρρευστου He^3 , η εμφάνιση της υπεραγωγικής φάσης αποδίδοταν στην ανταλλαγή φωνονίων μεταξύ των απεντοπισμένων (Bloch) ηλεκτρονιακών καταστάσεων του κρυστάλλου. Ο συγκεκριμένος μηχανισμός προτάθηκε αρχικά από τον Frohlich [9] και αναπτύχθηκε εκτενέστερα στη θεωρία BCS. Όμως, η απουσία φωνονίων στο υπέρρευστο He^3 , οδήγησε στη διατύπωση άλλων μηχανισμών που βασίζονταν στους ηλεκτρονικούς βαθμούς ελευθερίας και όχι στις ταλαντώσεις του κρυσταλλικού πλέγματος. Η ανακάλυψη των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας έδωσε ώθηση στη συγκεκριμένη θεώρηση κυρίως γιατί στα συγκεκριμένα υλικά, η υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται αμέσως μετά την καταστροφή μιας αντισιδηρομαγνητικής κατάστασης τάξης. Επιπλέον, η ανισοτροπία του υπεραγωγικού χάσματος αποδίδεται κατά πολλούς στην ανταλλαγή συλλογικών διεγέρσεων της πόλωσης σπιν των ηλεκτρονίων (μαγνονία). Παρόλ' αυτά, για την εμφάνιση των μη-συμβατικών υπεραγωγικών φάσεων έχουν προταθεί εναλλακτικοί μηχανισμοί που βασίζονται σε ταλαντώσεις του ιοντικού πλέγματος, όπως ο μηχανισμός φωνονίων μικρού κυματανύσματος [58, 59, 60, 61].

1.1.1 Η θεωρία Ginzburg – Landau

Η θεωρία Ginzburg-Landau είναι μια φαινομενολογική προσέγγιση του φαινομένου της υπεραγωγιμότητας βασισμένη στη γενική θεωρία Landau για τις μεταβάσεις δεύτερης τάξης και το αρχικό μοντέλο των δύο ρευστών. Στο πλαίσιο της συγκεκριμένης θεωρίας, η τοπική πυκνότητα των υπεραγωγικών ηλεκτρονίων, που αποτελεί την παράμετρο τάξης του συστήματος, περιγράφεται από μία μιγαδική ψευδο-κυματοσυνάρτηση $\psi(\mathbf{r})$. Η συγκεκριμένη θεωρία αποτελεί στην πραγματικότητα ένα ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος ως προς την παράμετρο $\psi(\mathbf{r})$ και για τον λόγο αυτό η εγκυρότητά της περιορίζεται κοντά στη θερμοκρασία μετάβασης στην υπεραγωγική φάση. Το ανάπτυγμα αυτό έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$f_s = f_{n0} + a|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\mathbf{r})|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(\frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{e^*}{c} \mathbf{A} \right) \psi(\mathbf{r}) \right|^2 + \frac{h^2}{8\pi}, \quad (1.1)$$

όπου f_{n0} είναι η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας του συστήματος στην κανονική φάση, e^* και m^* οι ενεργές τιμές φορτίου και μάζας, \mathbf{A} το διανυσματικό μαγνητικό δυναμικό και h το μαγνητικό πεδίο. Συγκεκριμένα για ομογενείς λύσεις $\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi$ απουσία ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, η εξίσωση GL αποκτά την παρακάτω μορφή.

$$f_s = f_{n0} + a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4. \quad (1.2)$$

Στην κατάσταση ισορροπίας η τιμή της παραμέτρου τάξης $|\psi|$ αντιστοιχεί σε ελάχιστο της ελεύθερης ενέργειας. Από την παραπάνω εξίσωση είναι προφανές, ότι ο συντελεστής b πρέπει να είναι θετικός ώστε η τιμή της παραμέτρου τάξης να είναι μη μηδενική. Με βάσει τον συγκεκριμένο περιορισμό διακρίνουμε τις επόμενες δύο περιπτώσεις. Για θετικό συντελεστή $a > 0$, η ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας επιτυγχάνεται για $|\psi| = 0$, ενώ για $a < 0$, η παράμετρος τάξης γίνεται μη μηδενική $|\psi|^2 = -\frac{a}{b}$ καθιστώντας την κατάσταση ισορροπίας υπεραγωγική. Καθώς οι συντελεστές $a(T)$ και $b(T)$ είναι συναρτήσεις της θερμοκρασίας, η κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης στην υπεραγωγική φάση προκύπτει από τη σχέση $a(T_c) = 0$. Από την παραπάνω σχέση της ομογενούς θεωρίας Landau, μπορούμε επίσης να υπολογίσουμε το κρίσιμο θερμοδυναμικό πεδίο της μαγνητικής επαγωγής $h_c^2 = 8\pi \frac{a^2}{2b}$. Τέλος, πρέπει να παρατηρήσουμε ότι με τον τρόπο αυτό καθορίζεται μόνο το μέτρο της μιγαδικής παραμέτρου $|\psi(\mathbf{r})|e^{i\phi(\mathbf{r})}$. Η απροσδιοριστία της φάσης

της παραμέτρου τάξης αντιστοιχεί στον εκφυλισμό της θεμελιώδους κατάστασης και την εμφάνιση άμαζων μποζονίων Goldstone, λόγω του αυθόρμητου σπάσιμου της συμμετρίας βαθμίδας $U(1)$ στην υπεραγώγιμη φάση.

Όπως προαναφέραμε, η θεωρία Landau είναι κατάλληλη για τη μελέτη μη ομογενών υπεραγώγιμων φάσεων παρουσία ηλεκτρομαγνητικού πεδίου ή ρεύματος. Στην περίπτωση αυτή απαιτείται η ελαχιστοποίηση του συναρτησιακού της ελεύθερης ενέργειας που προκύπτει από χωρική ολοκλήρωση της Εξ. 1.1, ως προς την παραμέτρο τάξης $\psi(\mathbf{r})$ και το διανυσματικό δυναμικό $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. Έτσι οδηγούμαστε στο παρακάτω σύστημα εξισώσεων

$$a\psi(\mathbf{r}) + b|\psi(\mathbf{r})|^2\psi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2m^*} \left[\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e^*}{c}\mathbf{A} \right]^2 \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (1.3)$$

$$-\frac{1}{\mu}\nabla^2\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar e^*}{m^*}|\psi(\mathbf{r})|^2 \left[\nabla\phi(\mathbf{r}) + \frac{e^*}{c\hbar}\mathbf{A} \right]. \quad (1.4)$$

Παρατηρούμε ότι η Εξ. 1.3 αποτελεί απλά μια εξίσωση Schrodinger για σωματίδιο μάζας m^* και φορτίου e^* παρουσία ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, με ιδιότημή τον συντελεστή a . Ο μη γραμμικός όρος μπορεί να θεωρηθεί ως ένα απωστικό δυναμικό που οδηγεί στην ομοιόμορφη διασπορά της κυματοσυνάρτησης $\psi(\mathbf{r})$. Από την Εξ. 1.4 μπορούμε να υπολογίσουμε το μήκος διείσδυσης (penetration depth λ) για μια ομοιογενή υπεραγώγιμη φάση, όπου $|\psi|^2 = n_s$ η πυκνότητα των υπεραγώγιμων ηλεκτρονίων.

Για την επίλυση των παραπάνων διαφορικών εξισώσεων χρειαζόμαστε κατάλληλες συνοριακές συνθήκες. Για διεπαφές μη-υπεραγωγών/υπεραγωγών απουσία ρευμάτων οι κατάλληλες συνοριακές συνθήκες έχουν την παρακάτω μορφή[10].

$$\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\psi - \frac{e^*}{c}\mathbf{A} \right) \Big|_n = \frac{i\hbar}{b}\psi \quad (1.5)$$

όπου ο συντελεστής b εξαρτάται από το μη-υπεραγώγιμο υλικό και συγκεκριμένα τείνει στο άπειρο για μονωτές και στο μηδέν για μαγνητικά υλικά. Μέσω της Εξ. 1.3 μπορούμε επίσης να ορίσουμε το μήκος $\xi(T)$ που αντιστοιχεί στο χαρακτηριστικό μήκος απόσβεσης μιας μικρής διαταραχής της υπεραγώγιμης πυκνότητας. Στο όριο καθαρών δειγμάτων το χαρακτηριστικό μήκος δίνεται από την παρακάτω έκφραση

$$\xi(T) = 0.74 \frac{\xi_0}{\sqrt{T - T_c}} \quad (1.6)$$

όπου ξ_0 το υπεραγώγιμο μήκος συνάφειας για μηδενική θερμοκρασία όπως προκύπτει από τη θεωρία BCS.

1.1.2 Η θεωρία BCS

Το 1956, ο L. Cooper δείχνει ότι η επιφάνεια Fermi είναι ασταθής ως προς τη δημιουργία ζευγών ηλεκτρονίων υπό την επίδραση μια απειροστής ελκτικής αλληλεπίδρασης [4]. Το σημαντικό αυτό αποτέλεσμα προκύπτει εξαιτίας της στατιστικής των φερμιονίων και του υποβάθρου της θάλασσας Fermi. Συγκεκριμένα έδειξε ότι δύο ηλεκτρόνια που προστίθενται στο υπόβαθρο των κατειλημμένων ηλεκτρονιακών καταστάσεων δημιουργούν μια δέσμια κατάσταση ζεύγους με ενέργεια $E = -2\hbar\omega_D e^{-2/N(0)V}$, όπου ω_D είναι η συχνότητα Debye των φωνονίων, $N(0)$ η πυκνότητα καταστάσεων στο επίπεδο Fermi και V το ελκτικό δυναμικό. Το αποτέλεσμα αυτό θεωρείται έγκυρο στο όριο ασθενούς σύζευξης, $N(0)V \ll 1$. Επιπλέον, είναι σημαντικό ότι το συγκεκριμένο αποτέλεσμα δε μπορεί να εξαχθεί με βάση τη θεωρία διαταραχών, καθώς η συγκεκριμένη έκφραση της ενέργειας του ζεύγους ηλεκτρονίων δεν είναι αναλυτική για $V = 0$.

Βασιζόμενοι στο παραπάνω αποτέλεσμα, οι Bardeen, Cooper και Schrieffer δημοσιεύουν το 1957 την πρώτη μικροσκοπική θεωρία για την υπεραγωγιμότητα, τη θεωρία BCS [5]. Στα πλαίσια της συγκεκριμένης θεωρίας το ελκτικό δυναμικό που απαιτείται για τη δημιουργία ζευγών ηλεκτρονίων οφείλεται, αφενός στην αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων - φωνονίων, όπως είχε αρχικά προταθεί από τον Frohlich [9] και αφετέρου στη θωράκιση του απωστικού δυναμικού Coulomb λόγω της δημιουργίας οιονεί-σωματιδίων, μια ιδέα που αναπτύχθηκε αρχικά από τον Landau. Χρησιμοποιώντας το απλο μοντέλο Thomas - Fermi, η απωστική αλληλεπίδραση μεταξύ των οιονεί-σωματιδίων αποκτά τη μορφή $V_{TF} = V_c e^{|r-r'|/r_{TF}}$, όπου V_c το δυναμικό Coulomb και r_{TF} το μήκος θωράκισης Thomas - Fermi. Ενσωματώνοντας την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων - φωνονίων, σύμφωνα με την οποία δύο ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν ελκτικά μέσω ανταλλαγής φωνονίων, το ενεργές δυναμικό της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου αποκτά την παρακάτω απλοποιημένη μορφή.

$$V_{eff}(\mathbf{q}, \omega) = |g_{eff}|^2 \frac{1}{\omega^2 - \omega_D^2}, \quad (1.7)$$

όπου g_{eff} η σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίου - φωνονίου. Η ενεργός αλληλεπίδραση V_{eff} είναι ελκτική μόνο για συχνότητες $\omega < \omega_D$. Μια καλή προσέγγιση για το ελκτικό δυναμικό αποτελεί η σχέση $V_{eff}(\mathbf{q}, \omega) = -|g_{eff}|^2$, καθώς μόνο ηλεκτρόνια με ενέργεια $\pm k_B T$ αλληλεπιδρούν, ενώ για το θερμοκρασιακό εύρος της υπεραγώγιμης φάσης ισχύει $k_B T \ll \hbar \omega_D$. Επομένως, στη δεύτερη κβάντωση η Χαμιλτονιανή του συστήματος αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων αποκτά την παρακάτω απλοποιημένη μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, s} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}, s} - |g_{eff}|^2 \sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, s, s'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}, s'}^\dagger c_{\mathbf{k}, s} c_{\mathbf{k}', s'}, \quad (1.8)$$

όπου το άθροισμα $\sum'_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, s, s'}$ περιορίζεται σε ορμές ηλεκτρονίων με ενέργεια $\pm \hbar \omega_D$ από το επίπεδο Fermi. Για την επίλυση της Εξ. 1.8 ο Schrieffer εισήγαγε την παρακάτω συναφή κατάσταση ηλεκτρονίων

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^* + v_{\mathbf{k}}^* \hat{P}_{\mathbf{k}}^\dagger) |0\rangle, \quad (1.9)$$

όπου $\hat{P}_{\mathbf{k}}^\dagger = c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger$, ο τελεστής δημιουργίας ζεύγους ηλεκτρονίων με μηδενική ορμή. Οι παράμετροι $u_{\mathbf{k}}$ και $v_{\mathbf{k}}$ καθορίζονται από την ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας $E = \langle \Psi_{BCS} | \mathcal{H} | \Psi_{BCS} \rangle$ οδηγώντας στο παρακάτω γραμμικό σύστημα εξισώσεων.

$$\begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu & \Delta \\ \Delta^* & -\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = E_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (1.10)$$

όπου $\Delta = |g_{eff}|^2 \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*$ η παράμετρος τάξης της θεωρίας BCS. Το παραπάνω σύστημα εξισώσεων οδηγεί στην αυτοσυνεπή εξίσωση για το υπεραγώγιμο χάσμα

$$\Delta = |g_{eff}|^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} \quad (1.11)$$

βάσει της οποίας η παράμετρος τάξης για θερμοκρασία $T = 0$ δίνεται από τη σχέση $|\Delta| = 2\hbar \omega_D e^{-1/|g_{eff}|^2 g(\varepsilon_F)}$, όπου $g(\varepsilon_F)$ η πυκνότητα καταστάσεων στην ενέργεια Fermi για κάθε πόλωση του σπιν. Θέλοντας να επεκτείνουμε την παραπάνω εξίσωση για το υπεραγώγιμο χάσμα σε πεπερασμένες θερμοκρασίες εφαρμόζουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου στο όριο της ασθενούς σύζευξης. Σύμφωνα με τη συγκεκριμένη προσέγγιση, η Χαμιλτονιανή Εξ. 1.8 αποκτά την παρακάτω γραμμικοποιημένη μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu & \Delta \\ \Delta^* & -\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\ c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad (1.12)$$

όπου το εισηγμένο μέσο πεδίο είναι η παράμετρος τάξης $\Delta = |g_{eff}|^2 \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \rangle$. Εισάγοντας τον μετασχηματισμό Bogoliubov-Valatin $b_{\mathbf{k},\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k},\uparrow} - v_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger$ η Εξ. 1.12 λύνεται επακριβώς οδηγώντας στην εξίσωση BCS για πεπερασμένες θερμοκρασίες.

$$\Delta = |g_{eff}|^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T}\right). \quad (1.13)$$

1.2 Συστήματα Ετεροδομών

Οι εκπληκτικές ιδιότητες των υπεραγωγών εκδηλώνονται επίσης σε ετεροδομές τους με μεταλλικές, μονωτικές, σιδηρομαγνητικές και εν γένει άλλες καταστάσεις τάξεως. Το πρώτο σημαντικό φαινόμενο που ανακαλύφθηκε σε τέτοιες ετεροδομές είναι το φαινόμενο Josephson, η αυθόρμητη εμφάνιση ενός υπερρεύματος σε ενώσεις δύο υπεραγωγών με πεπερασμένη διαφορά φάσης $\phi \neq 0$ [11]. Αμέσως μετά ο de Gennes ανακαλύπτει το φαινόμενο εγγύτητας, σύμφωνα με το οποίο ζεύγη ηλεκτρονίων εισχωρούν σε μη υπεραγωγίμες περιοχές, και διατυπώνει και τις σχετικές εξισώσεις που φέρουν το όνομά του, τις εξισώσεις Bogoliubov de Gennes. Τα παραπάνω φαινόμενα κατανοήθηκαν καλύτερα, ύστερα από τη διατύπωση από τον Andreev του μηχανισμού σύμφωνα με τον οποίο ένα ηλεκτρονίο από μια μεταλλική περιοχή οπισθοσχεδάζεται ως οπή στη διεπαφή μετάλλου/υπεραγωγού (N/S) [12]. Βασιζόμενοι στον συγκεκριμένο μηχανισμό οι de Gennes και Saint James [13] ήταν οι πρώτοι που μελέτησαν τη δημιουργία επιφανειακών καταστάσεων σε υπεραγωγούς και δέσμιων καταστάσεων σε ετεροδομές N/S. Τις τελευταίες δεκαετίες, η έρευνα επικεντρώνεται σε ετεροδομές μη-συμβατικών υπεραγωγών με σιδηρομαγνήτες [14, 15] και γενικά με διαφορετικές καταστάσεις τάξεως. Στη συνέχεια παρουσιάζουμε εν συντομία τα σημαντικότερα θέματα φυσικής που σχετίζονται με τις ετεροδομές υπεραγωγών.

Οι εξισώσεις Bogoliubov - de Gennes Οι εξισώσεις Bogoliubov - de Gennes (BdG) περιγράφουν τις καταστάσεις οιονεί σωματιδίων σε υπεραγωγούς όπου το υπεραγωγίμο δυναμικό ή δυναμικό ζεύξης μεταβάλλεται χωρικά [13]. Παρόλο που αρχικά διατυπώθηκαν για συμβατικούς υπεραγωγούς μπορούν εξίσου καλά να περιγράψουν και μη-συμβατικούς singlet και triplet υπεραγωγούς. Οι εξισώσεις BdG έχουν την παρακάτω γενική μορφή

$$\begin{aligned} Eu(\mathbf{r}) &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - E_F + U(\mathbf{r}) \right) u(\mathbf{r}) + \int \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') v(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ Ev(\mathbf{r}) &= - \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - E_F + U(\mathbf{r}) \right) u(\mathbf{r}) + \int \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')^* u(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (1.14)$$

όπου E_F είναι η ενέργεια Fermi, $U(\mathbf{r})$ το τοπικό δυναμικό Hartree και $u(\mathbf{r}), v(\mathbf{r})$ το μέρος της κυματοσυνάρτησης που αναφέρεται σε ηλεκτρόνια και οπές αντίστοιχα [16]. Το δυναμικό ζεύξης $\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ που εν γένει αποτελεί συνάρτηση δύο μεταβλητών, στην περίπτωση των συμβατικών υπεραγωγών απλοποιείται στο τοπικό δυναμικό $\Delta(\mathbf{r})$. Οι εξισώσεις BdG μπορούν να θεωρηθούν ως μια μικροσκοπική προσέγγιση, ανάλογη της θεωρίας BCS, στον χώρο των θέσεων και συνεπώς είναι κατάλληλες για τη μελέτη ετεροδομών που εμπλέκουν υπεραγωγίμες φάσεις. Το υπεραγωγίμο δυναμικό υπολογίζεται και σε αυτήν την περίπτωση από την παρακάτω εξίσωση αυτοσυνέπειας.

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \lambda \sum_{E>0} u(\mathbf{r}) v^*(\mathbf{r}') [1 - 2n_F(E)], \quad (1.15)$$

όπου λ η σταθερά σύζευξης της BCS θεωρίας. Η μικροσκοπική αυτή προσέγγιση, μπορεί να διατυπωθεί και βάσει των συναρτήσεων Green εισάγοντας την ανώμαλη συνάρτηση Green $F(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ για το ζεύγος ηλεκτρονίων [6]. Χρησιμοποιώντας τις συναρτήσεις Green εκφρασμένες στον χώρο των συχνοτήτων Matsubara, η Εξ. 1.14 διατυπώνεται ως εξής

$$\int d\mathbf{r}'' \begin{pmatrix} i\omega_n - H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') & \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \\ \Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') & i\omega_n + H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', i\omega_n) & F(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', i\omega_n) \\ F(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', i\omega_n) & G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', i\omega_n) \end{pmatrix} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.16)$$

όπου $H(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - E_F + U(\mathbf{r})$. Αντίστοιχα η εξίσωση αυτοσυνέπειας για το υπεραγώγιμο πεδίο εκφράζεται ως

$$\Delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{\lambda}{2} \sum_{i\omega_n} Tr(\tau_1 + i\tau_2) \hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (1.17)$$

Η διατύπωση των BdG εξισώσεων με βάση τις συναρτήσεις Green αναδεικνύει την πολυπλοκότητα και τη δυσκολία επίλυσης των συγκεκριμένων εξισώσεων λόγω της ταχείας διακύμανσης των συγκεκριμένων συναρτήσεων στην κλίμακα του κυματανύσματος Fermi l_F [14, 15]. Στις περισσότερες περιπτώσεις όπου η χαρακτηριστική κλίμακα μήκους της υπεραγωγιμότητας, όπως αυτή ορίζεται από το μήκος συνάφειας $\xi_0 = \hbar v_F / \Delta$ και το θερμικό μήκος $\xi_T = \hbar v_F / T$, είναι πολύ μεγαλύτερη από την αντίστοιχη πλεγματική σταθερά, μπορούμε προσεγγιστικά να θεωρήσουμε ότι οι συναρτήσεις Green εξαρτώνται μόνο από τις συντεταγμένες του κέντρου μάζας $(\mathbf{r} - \mathbf{r}')/2$ του ζεύγους ηλεκτρονίων. Έτσι ολοκληρώνοντας το βαθμό ελευθερίας που σχετίζεται με τη σχετική θέση των ηλεκτρονίων καταλήγουμε στις αντίστοιχες ψευδο - κλασικές εξισώσεις κίνησης για τις συναρτήσεις Green, τις εξισώσεις Eilenberger [17, 18].

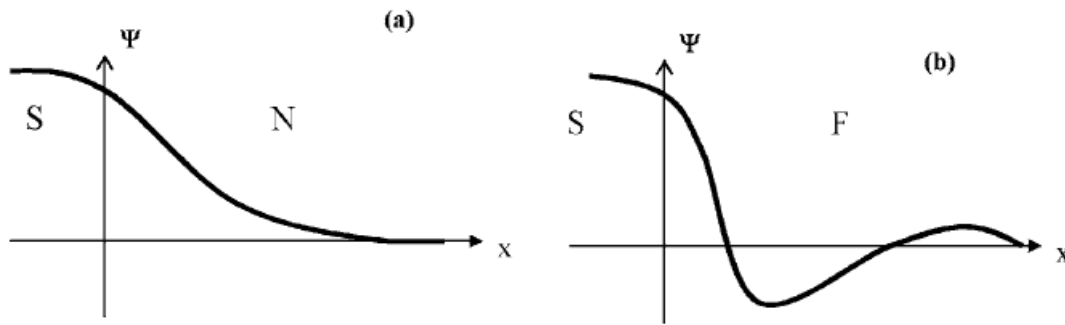
Στο μη καθαρό όριο, όπου η μέση ελεύθερη διαδρομή είναι αρκετά μικρότερη από το μήκος συνάφειας, η κίνηση των ηλεκτρονίων χαρακτηρίζεται από διάχυση και συνεπώς οι συναρτήσεις Green μπορούν να θεωρηθούν σχεδόν ισοτροπικές. Έτσι, στην περίπτωση αυτή αναπτύσσοντας τις συναρτήσεις Green σε σφαιρικές αρμονικές οδηγούμαστε στις εξισώσεις Usadel [19].

Τέλος, για τη μελέτη ετεροδομών υπεραγώγιμων φάσεων μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η φαινομενολογική θεωρία Ginzburg - Landau. Ενδεικτικά παρουσιάζουμε παρακάτω τις αντίστοιχες εξισώσεις Ginzburg - Landau για τη μελέτη ετεροδομών υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη.

$$F_G = a(H, T)|\psi|^2 + \frac{b(H, T)}{2}\psi^4 + \gamma(H, T)|\nabla\psi|^2 + \frac{\eta(H, T)}{2}|\nabla^2\psi|^2, \quad (1.18)$$

όπου έχουν προστεθεί παράγωγοι ανώτερης τάξεως για τη σταθεροποίηση μη ομογενών λύσεων για $\gamma(H, T) = 0$ [15]. Στην περίπτωση της μη ομογενούς υπεραγωγιμότητας με κυματάνασμα διαμόρφωσης \mathbf{q} η συνθήκη για την κρίσιμη θερμοκρασία μετάβασης τροποποιείται ως εξής $a(H, T) = -\gamma q^4 - \frac{\eta(H, T)}{2}q^4$.

Φαινόμενο Εγγύτητας Το φαινόμενο εγγύτητας περιγράφηκε αρχικά σε ετεροδομές μετάλλου/υπεραγωγού [10, 20] όπου το υπεραγώγιμο συμπύκνωμα εισχωρεί στη μεταλλική περιοχή σε μήκη, που σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες, μπορούν ακόμα και να υπερβούν το υπεραγώγιμο μήκος συνάφειας. Το συγκεκριμένο φαινόμενο μπορεί να περιγραφεί απλά ως μια διαρροή από ζεύγη ηλεκτρονίων στη μη υπεραγώγιμη περιοχή. Αντίθετα στην περιοχή του υπεραγωγού και σε απόσταση της τάξεως του μήκους συνάφειας ξ_s από τη διεπιφάνεια, η πυκνότητα υπεραγώγιμων ηλεκτρονίων μειώνεται (αντίστροφο φαινόμενο εγγύτητας). Παρόλο που έχει μελετηθεί εκτενώς, το φαινόμενο εγγύτητας δεν έχει κατανοηθεί πλήρως σε όλες του τις μορφές. Όμως είναι ξεκάθαρο ότι το συγκεκριμένο φαινόμενο σχετίζεται άμεσα με το μηχανισμό σκέδασης Andreev-Saint James που περιγράφεται παρακάτω [12, 13]. Οι πρώτες πειραματικές παρατηρήσεις σχετικές με το φαινόμενο εγγύτητας αφορούν στην κρίσιμη θερμοκρασία, την πυκνότητα καταστάσεων και τον



Σχήμα 1.1: Το φαινόμενο εγγύτητας στη διεπαφή συμβατικού υπεραγωγού - μετάλλου (αριστερά) και στη διεπαφή συμβατικού υπεραγωγού - σιδηρομαγνήτη (δεξιά). Παρατηρούμε την ταλαντωτική συμπεριφορά του υπεραγωγίμου πεδίου στη σιδηρομαγνητική περιοχή λόγω παρουσίας του πεδίου Zeeman που επιδρά αντίθετα σε κάθε τμήμα τους ζεύγους ηλεκτρονίων Cooper. Η συνέχεια της παραμέτρου τάξης υπονοεί την απουσία φράγματος δυναμικού στη διεπαφή ($U = 0$). Αναπαράγεται από [14].

διαμαγνητισμό σε περιοχές κοντά στον υπεραγωγό. Συγκεκριμένα, πειράματα σε διεπαφές Al/Pb έχουν δείξει ότι η κρίσιμη θερμοκρασία του λεπτού στρώματος αλουμινίου αυξάνει ως την κρίσιμη θερμοκρασία του μολύβδου καθώς αυξάνεται το πάχος του στρώματος του Pb πάνω στο Al. Τα ίδια αποτελέσματα αναπαρήχθησαν και για μη υπεραγωγίμα υλικά όπως ο χαλκός. Επιπλέον, η πυκνότητα καταστάσεων ενός μετάλλου σε εγγύτητα με έναν υπεραγωγό αναμένεται να επηρεαστεί από το αντίστοιχο δυναμικό ζεύξης. Παρατηρήσεις με τη μέθοδο φασματοσκοπίας σήραγγος επιβεβαιώνουν σχετικές μελέτες των de Gennes και Saint James σχετικά με συμβατικούς υπεραγωγούς. Τέλος έχει παρατηρηθεί, ότι μέταλλα που είναι σε επαφή με υπεραγωγίμα υλικά μπορούν να εκδηλώσουν το φαινόμενο Meissner σύμφωνα με το οποίο η μαγνητική ροή απωθείται από την υπεραγωγίμη φάση.

Τα τελευταία χρόνια η έρευνα έχει επικεντρωθεί στη μελέτη του φαινομένου εγγύτητας μεταξύ περιοχών σε διαφορετική κατάσταση τάξης. Μια ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα περίπτωση είναι αυτή των ετεροδομών υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη (S/F) όπου η singlet υπεραγωγιμότητα ανταγωνίζεται τη μαγνήτιση. Στην περίπτωση αυτή έχει δείχθει ότι στα ζεύγη ηλεκτρονίων που εισχωρούν στη μαγνητική περιοχή το κέντρο μάζας αποκτά πεπερασμένη ορμή, καθώς το ενεργό πεδίο Zeeman του σιδηρομαγνήτη επιδρά με αντίθετο τρόπο σε κάθε ηλεκτρόνιο του ζεύγους. Έτσι, η υπεραγωγιμότητα που επάγεται λόγω εγγύτητας διακυμαίνεται στον χώρο με χαρακτηριστικό κυματόνισμα που σχετίζεται με το πεδίο ανταλλαγής του σιδηρομαγνήτη όπως συμβαίνει και στην υπεραγωγίμη φάση Fulde-Ferrel και Larkin-Ovchinnikov όπου αναμένεται να σταθεροποιείται σε ομοιογενή συστήματα για πολύ υψηλά μαγνητικά πεδία. Η ταλαντωτική αυτή συμπεριφορά της επαγόμενης υπεραγωγιμότητας ευθύνεται για τη μη μονότονη εξάρτηση της κρίσιμης θερμοκρασίας σε S/F ετεροδομές από το πάχος του σιδηρομαγνητικού στρώματος και τη δημιουργία π-επαφών Josephson σε S/F/S ετεροδομές. Επιπλέον, ιδιαίτερης σημασίας είναι το φαινόμενο της βαλβίδας spin (spin-valve effect) που παρατηρείται σε ετεροδομές F/S/F όπου η κρίσιμη θερμοκρασία του υπεραγωγού εξαρτάται από τον σχετικό προσανατολισμό της μαγνήτισης στα δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα. Το φαινόμενο αυτό, που σχετίζεται επίσης και με την αύξηση της μαγνητοαντίστασης στις συγκεκριμένες διεπαφές, αποτελεί τη βάση της υπεραγωγίμης σπιντρονικής, ένα τεχνολογικό πεδίο που εξελίσσεται ραγδαία. Τέλος, σημειώνουμε ότι συζεύξεις S/F/S μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη δημιουργία απομονομένων από το περιβάλλον qubit τα οποία αποτελούν και το θεμελιώδες στοιχείο των κβαντικών υπολογιστών [14, 15].

Η ανάκλαση Andreev-Saint James Το 1964 ο Andreev μελετώντας τη μεταφορά θερμότητας σε ανομοιογενή υπεραγωγίμα συστήματα, ανακάλυψε ότι η θερμική αντίσταση αυξάνεται εξαιτίας ενός μηχανισμού σκέδασης ή καλύτερα ανάκλασης ηλεκτρονίου-οπής, την ονομαζόμενη και ανάκλαση Andreev [12]. Την ίδια περίοδο, οι de Gennes και Saint James μελετώντας την

πυκνότητα καταστάσεων μεταλλικών στρωμάτων σε επαφή με υπεραγωγούς, έδειξαν την παρουσία δέσμιων καταστάσεων πεπερασμένης ενέργειας μέσα στη μεταλλική περιοχή [13, 21]. Συγκεκριμένα, ο Saint-James διαπίστωσε ότι η διαφορά μεταξύ των ενεργειακών επιπέδων στη διεπιφάνεια N/S είναι η μισή από αυτή των δέσμιων καταστάσεων ενός ηλεκτρονίου σε ένα πηγάδι δυναμικού. Ο ίδιος απέδωσε αυτή την ιδιότητα του ενεργειακού φάσματος των διεπαφών N/S στην ανάκλαση ηλεκτρονίου-οπής.

Εν συνεχεία παρουσιάζουμε το μηχανισμό Andreev-Saint James (ASJ) σε μία μονοδιάστατη ετεροδομή μεταξύ ενός συμβατικού υπεραγωγού και μιας μεταλλικής περιοχής. Οι εξισώσεις BdG για το συγκεκριμένο σύστημα διαμορφώνονται ως εξής

$$E\Psi(x) = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - E_F + U\delta(x) & |\Delta|e^{i\phi}\Theta(x) \\ |\Delta|e^{-i\phi}\Theta(x) & -\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} - E_F + U\delta(x)\right) \end{pmatrix} \Psi(x) \quad (1.19)$$

όπου εισαγάγαμε τον σπίνορα Nambu $\Psi(x) = [u(x)v(x)]^T$ και επιπλέον ένα τοπικό φράγμα δυναμικού $U\delta(x)$ στη διεπαφή. Το δυναμικό ζεύξης, μέτρου $|\Delta|$ και φάσης ϕ , είναι πεπερασμένο μόνο για $x > 0$. Για την επίλυση των εξισώσεων BdG θεωρούμε την παρακάτω κυματοσυνάρτηση δοκιμής για ένα ηλεκτρόνιο στη μεταλλική περιοχή που σχεδιάζεται στη διεπιφάνεια N/S

$$\Psi(x) = \left[e^{-ik_N^+ x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + a_0 e^{ik_N^+ x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b_0 e^{ik_N^- x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \Theta(-x) + \left[c_0 e^{-ik_s^+ x} \begin{pmatrix} u \\ ve^{-i\phi} \end{pmatrix} + d_0 e^{ik_s^- x} \begin{pmatrix} v \\ ue^{i\phi} \end{pmatrix} \right] \Theta(x),$$

όπου $\hbar k_N^\pm = \sqrt{2m(E_F \pm E)}$, $\hbar k_s^\pm = \sqrt{2m(E_F \pm \Omega)}$ με $\Omega = \sqrt{E^2 - \Delta^2}$ για τα κυματανύσματα στη μεταλλική και την υπεραγωγίμη φάση αντίστοιχα, ενώ $u = \sqrt{\frac{E+\Omega}{E}}$, $v = \sqrt{\frac{E-\Omega}{E}}$ οι συνιστώσες του σπίνορα στην υπεραγωγίμη περιοχή. Οι συντελεστές που αντιστοιχούν στην πιθανότητα ενός ηλεκτρονίου να ανακλαστεί στη μεταλλική περιοχή ως ηλεκτρόνιο a_0 και ως οπή b_0 και αντίστοιχα να διαδοθεί στην υπεραγωγίμη περιοχή ως ηλεκτρόνιο c_0 και ως οπή d_0 , καθορίζονται από τις παρακάτω συνοριακές συνθήκες στη διεπιφάνεια $x = 0$

$$\Psi(0)^- = \Psi(0)^+ \quad \frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}\Big|_{0^-} - \frac{\partial\Psi(x)}{\partial x}\Big|_{0^+} = \frac{2m}{\hbar}U\Psi(x). \quad (1.20)$$

Καθώς εν γένει $E_F \gg E$ τα κυματανύσματα στις δύο πλευρές μπορούν σε καλή προσέγγιση να θεωρηθούν ίσα με το κυματάνυσμα Fermi k_F και στην περίπτωση αυτή οι συνοριακές συνθήκες οδηγούν στις παρακάτω σχέσεις για τις παραμέτρους της κυματοσυνάρτησης

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{Z(i+Z)(v^2 - u^2)}{N_Z}, & b_0 &= \frac{uve^{-\phi}}{N_Z} \\ c_0 &= \frac{(1-iZ)u}{N_Z}, & d_0 &= \frac{iZv}{N_Z} \end{aligned} \quad (1.21)$$

όπου $Z = \frac{mU}{\hbar^2 k_F}$ και $N_Z = (1+Z^2)u^2 - Z^2v^2$. Στην $U = 0$, οι παραπάνω σχέσεις απλοποιούνται σημαντικά καθώς $a_0 = d_0 = 0$ και $b_0 = \frac{ve^{i\phi}}{u}$, $c_0 = \frac{1}{u}$, ενώ για $\phi = 0$ η κυματοσυνάρτηση για ηλεκτρόνια με ενέργεια $E > |\Delta|$ αποκτά τη μορφή

$$\Psi(x) = \frac{1}{u} \left[\begin{pmatrix} e^{-ik_N^+ x} u \\ e^{-ik_N^- x} v \end{pmatrix} \Theta(-x) + \begin{pmatrix} e^{-ik_s^+ x} u \\ +e^{-ik_s^- x} v \end{pmatrix} \Theta(x) \right] \quad (1.22)$$

Από την παραπάνω έκφραση παρατηρούμε ότι για $\Delta \neq 0$ το ηλεκτρόνιο ανακλάται ως οπή στη μεταλλική φάση, ενώ διαδίδεται ως οιονεί-σωματίδιο Bogoliubov. Για $\Delta = 0$ η κυματοσυνάρτηση αντιστοιχεί σε ένα ελεύθερα διαδιδόμενο ηλεκτρόνιο. Για ενέργεια χαμηλότερη από το ενεργειακό χάσμα του υπεραγωγού το κυματόνυσμα k_s της κυματοσυνάρτησης αποκτά φανταστικές συνιστώσες που εκφράζουν την απόσβεση της κυματοσυνάρτησης του ηλεκτρονίου στην υπεραγώγιμη περιοχή σε βάθος της τάξεως του μήκους συνάφειας του υπεραγωγού. Πράγματι, ηλεκτρόνια με ενέργεια $E < \Delta$ εισχωρούν στην υπεραγώγιμη περιοχή μόνο ως ζεύγη ηλεκτρονίων αφήνοντας πίσω μια ανακλώμενη οπή που διαδίδεται στη μεταλλική περιοχή. Έτσι, στη συγκεκριμένη περίπτωση ισχύει $b_0 = 1$ και $a_0 = c_0 = d_0 = 0$. Τα παραπάνω αποτελέσματα μπορούν εύκολα να επεκταθούν και στην περίπτωση των μη-συμβατικών υπεραγωγών. Παρακάτω παρουσιάζουμε σχετικό παράδειγμα θεωρώντας μια διεπαφή N/S στις δύο διαστάσεις όπου ο άξονας x είναι κάθετος στο επίπεδο της διεπαφής. Σημειώνουμε ότι η συμμετρία μεταφοράς διατηρείται κατά μήκος του άξονα y που βρίσκεται παράλληλα στο επίπεδο διεπαφής συνεπάγοντας τη διατήρηση της αντίστοιχης συνιστώσας της ορμής. Το υπεραγώγιμο δυναμικό έχει τη μορφή $\Delta(k_y)$ ενώ οι παράμετροι της κυματοσυνάρτησης με τη γενική μορφή $\Psi(x, k_y)$ απουσία φράγματος δυναμικού προκύπτουν από τις παρακάτω εκφράσεις

$$b_0(E, k_y) = e^{i\phi(k_y)} \frac{v(E, k_y)}{u(E, k_y)}, \quad c_0(E, k_y) = \frac{1}{u(E, k_y)}, \quad (1.23)$$

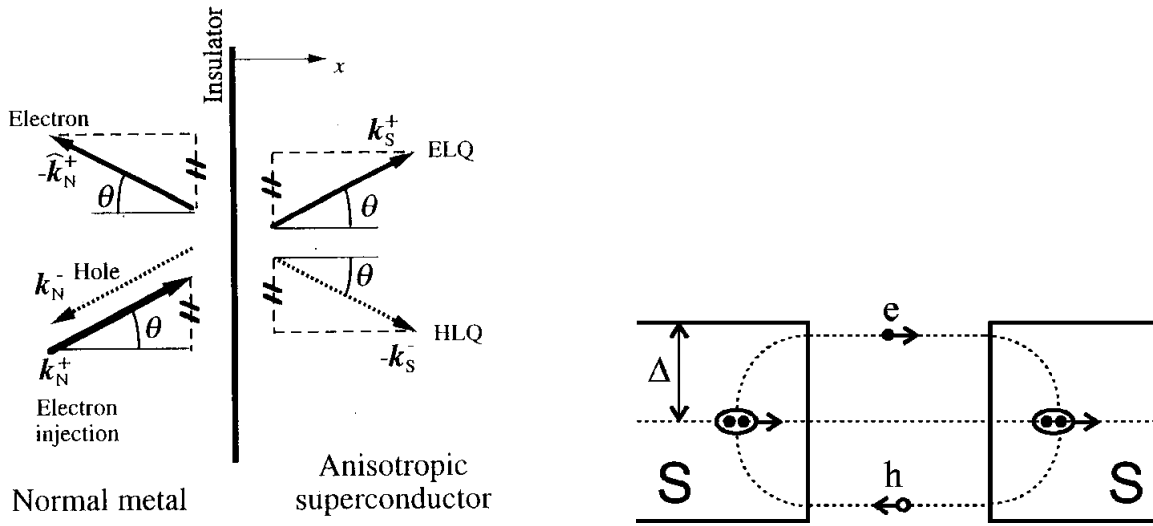
όπου $\phi(k_y) = \frac{\Delta(k_y)}{|\Delta(k_y)|}$ η φάση του υπεραγώγιμου δυναμικού που εξαρτάται από την παράλληλη προς της διεπιφάνεια συνιστώσα της ορμής [22]. Σημειώνουμε ότι για υπεραγώγιμο δυναμικό που παραβιάζει, τόσο τη συμμετρία χωρικής αντιστροφής $\phi(k_y) \neq \phi(-k_y)$, όσο και τη συμμετρία χρονικής αντιστροφής $\phi(k_y) \neq \phi(k_y)^*$, ένα αυθόρμητο υπερρεύμα εμφανίζεται κατά μήκος του άξονα y [23].

Δέσμιες καταστάσεις Andreev-Saint James Εξαιτίας του ενεργειακού χάσματος του υπεραγωγού αναμένουμε τη δημιουργία δέσμιων καταστάσεων σε ετεροδομές $I/N/S$ και $S/N/S$, καθώς οι ιδιοκαταστάσεις της μεταλλικής φάσης με ενέργεια $E < \Delta$ δε μπορούν να διαδοθούν στην υπεραγώγιμη περιοχή. Επειδή η δημιουργία των δέσμιων καταστάσεων στα συστήματα αυτά σχετίζεται με την ανάκλαση ASJ, οι συγκεκριμένες καταστάσεις ονομάζονται και δέσμιες καταστάσεις Andreev-Saint James και αποτελούν στην ουσία μια υπέρθεση ηλεκτρονίου και οπής μέσα στη μεταλλική περιοχή. Όπως αποδεικνύεται, μια ανάκλαση ASJ στη διεπαφή με τον υπεραγωγό συνεισφέρει φάση $\gamma(E) \mp \chi(E, \theta)$, όπου $\gamma(E) = a \cos(\frac{E}{|\Delta|})$ και θ η γωνία πρόσπτωσης στην N/S διεπαφή, ενώ $\chi(E, \theta)$ είναι η φάση του υπεραγώγιμου δυναμικού. Σε μία $I/N/S$ σύζευξη οι δέσμιες καταστάσεις οπισθοσχεδιάζονται κατά ASJ στη διεπαφή N/S, ενώ στη διεπαφή I/N σχεδιάζονται κατοπτρικά. Επομένως, σε κάθε κύκλο συσσωρεύουν συνολική φάση $\gamma(E) + \gamma(E) + \chi(E, \theta) + \chi(E, \pi - \theta) + \beta(E)$, όπου $\beta(E) = 2L(k_e - k_h) + \beta_0$ είναι η φάση λόγω διάδοσης στη μεταλλική περιοχή διάστασης L κάθετα προς το επίπεδο της διεπαφής, ενώ β_0 είναι η φάση λόγω ανάκλασης στη διεπαφή I/N . Στα πλαίσια της ψευδοκλασικής θεώρησης, η δημιουργία δέσμιων καταστάσεων είναι επιτρεπτή, όταν ικανοποιείται η παρακάτω συνθήκη Bohr-Sommerfeld

$$\gamma(E) + \gamma(E) + \chi(E, \theta) + \chi(E, \pi - \theta) + \beta(E) = 2n\pi. \quad (1.24)$$

Σύμφωνα με την παραπάνω σχέση, για ένα συμβατικό υπεραγωγό προκύπτει το παρακάτω αποτέλεσμα

$$2\gamma(E) + \beta(E) = 2n\pi \rightarrow \frac{E}{\Delta} = \frac{2L}{\xi_0 \cos \theta} \cos\left(\frac{E}{\Delta}\right). \quad (1.25)$$



Σχήμα 1.2: αριστερά) Ανάκλαση Andreev-Saint James για ηλεκτρόνιο που προσπίπτει σε διεπαφή N/Σ⁺ υπό γωνία θ . Οι τέσσερις πιθανές διαδρομές για ηλεκτρόνια με ενέργεια μεγαλύτερη του υπεραγωγίμου χάσματος $E > \Delta$ είναι η ανάκλαση ως ηλεκτρόνιο, η οπισθοσκέδαση ως οπής, η διάδοση ως οιονεί-σωματίδιο θετικής ενέργειας (τύπου ηλεκτρονίου *ELQ*) και η διάδοση ως οιονεί-σωματίδιο αρνητικής ενέργειας (τύπου οπής *HLQ*) που αντιστοιχούν στους συντελεστές a, b, c και d της συνολικής κυματοσυνάρτησης. Για $E < \Delta$ οι διαδρομές *ELQ* και *HLQ* δεν επιτρέπονται και το προσπίπτον ηλεκτρόνιο διαδίδεται στην υπεραγωγίμη περιοχή ως ζεύγος Cooper. δεξιά) Δέσμια κατάσταση Andreev-Saint James για ηλεκτρόνιο ενέργειας $E < \Delta$ σε ετεροδομή S/N/S. Αναπαράγεται από [22]

Η παραπάνω εξίσωση δεν έχει λύσεις για $E = 0$ καθώς $\gamma(E = 0) = \pi/2$ και $\beta(E = 0) = 0$. Συνεπώς καταλήγουμε ότι ένα ενεργειακό χάσμα επάγεται στη μεταλλική περιοχή λόγω του φαινομένου εγγύτητας. Επιπλέον οι λύσεις της Εξ. 1.25 προκύπτουν ως ζεύγη της μορφής $(E, -E)$. Συγκεκριμένα, για $L < \xi_0$ προκύπτει ένα ζεύγος λύσεων για $\theta = 0$, ενώ τα ζεύγη δέσμιων καταστάσεων αυξάνονται με τη γωνία πρόσπτωσης καθώς ένα επιπλέον ζεύγος δέσμιων καταστάσεων προκύπτει για κάθε γωνία που ικανοποιεί τη σχέση $\cos \theta = L/\pi\xi_0$. Είναι προφανές ότι ο αριθμός των δέσμιων καταστάσεων αυξάνεται με τη διάσταση L της μεταλλικής περιοχής, ενώ για $L = 0$ οι καταστάσεις αυτές αντιστοιχούν σε επιφανειακές καταστάσεις του υπεραγωγού. Η περίπτωση του μη-συμβατικού υπεραγωγού συμμετρίας $d - wave$ είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρουσα καθώς τα αποτελέσματα εξαρτώνται και από τον προσανατολισμό του υπεραγωγίμου πεδίου σε σχέση με το επίπεδο της διεπαφής. Για (100) διεπαφές προκύπτει $\chi(E, \theta) = \chi(E, \pi - \theta)$ και συνεπώς τα αποτελέσματα είναι ποιότικά τα ίδια με αυτά για ισοτροπικούς υπεραγωγούς. Όμως για (110) διεπαφές η αλλαγή προσήμου του υπεραγωγίμου πεδίου οδηγεί στη σχέση $\chi(E, \theta) - \chi(E, \pi - \theta) = \pi$ η οποία τροποποιεί την Εξ. 1.25 ως εξής

$$2\gamma(E) + \beta(E) = (2n + 1)\pi \quad (1.26)$$

Η ουσιώδης διαφορά είναι ότι στην περίπτωση αυτή η εξίσωση των δέσμιων καταστάσεων επιδέχεται λύση για $E = 0$, οι επονομαζόμενες και καταστάσεις στο μέσο του ενεργειακού χάσματος (*midgap state*). Μάλιστα για τις συγκεκριμένες διεπαφές, οι καταστάσεις αυτές προκύπτουν για κάθε τιμή της παράλληλης προς το επίπεδο της διεπαφής συνιστώσα της ορμής k_y . Γενικότερα, όταν το υπεραγωγίμο πεδίο συμμετρίας $d - wave$ σχηματίζει γωνία α με το επίπεδο της διεπαφής οι δέσμιες καταστάσεις μηδενικής ενέργειας προκύπτουν για γωνίες πρόσπτωσης $\pi/2 - \alpha < |\theta| < \pi/2 + \alpha$. Τέλος, σημειώνουμε ότι οι ASJ δέσμιες καταστάσεις προκύπτουν και σε ετεροδομές S/N/S και μάλιστα σχετίζονται άμεσα με το φαινόμενο Josephson που αναλύεται παρακάτω.

Συνεχές φαινόμενο Josephson Το 1962, ο Josephson προέβλεψε την εμφάνιση υπερρευμαμάτων μεταξύ δύο υπεραγωγίμων περιοχών που διαχωρίζονται από ένα λεπτό μονωτικό στρώμα και κατέληξε στην παρακάτω απλή σχέση

$$I_s = I_C \sin(\phi), \quad (1.27)$$

όπου I_C είναι η μέγιστη τιμή του υπερρεύματος που μπορεί να υποστηρίξει η σύζευξη και ϕ η διαφορά φάσης μεταξύ των δύο υπεραγωγίων περιοχών [11]. Λόγω του φαινομένου εγγύτητας, το φαινόμενο Josephson εμφανίζεται και σε ετεροδομές S/N/S όπου το πάχος της μεταλλικής περιοχής είναι της τάξεως των νανόμετρων. Οι συγκεκριμένες ετεροδομές διαφέρουν σημαντικά από τις ετεροδομές S/I/S όπου η επαγόμενη υπεραγωγιμότητα και συνεπώς και το φαινόμενο Josephson μειώνονται σημαντικά καθώς αυξάνει το πάχος του μονωτικού στρώματος. Σήμερα, η μελέτη του φαινομένου Josephson συνεχίζεται σε πιο σύνθετες συζεύξεις υπεραγωγών και υλικών με άλλες καταστάσεις τάξεως όπως οι σιδηρομαγνήτες [24].

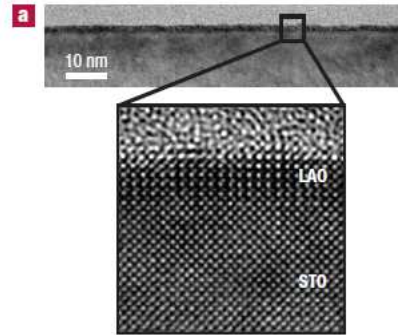
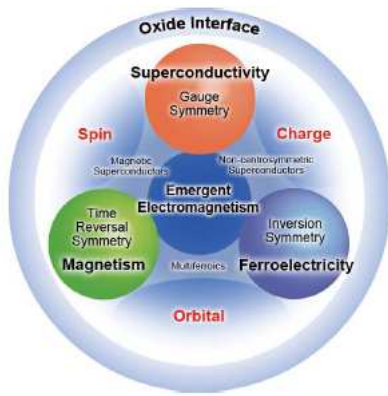
Για να καταλάβουμε πως το συγκεκριμένο φαινόμενο σχετίζεται με τον μηχανισμό και τις δέσμιες καταστάσεις ASJ, θεωρούμε ένα ηλεκτρόνιο με ενέργεια μικρότερη αυτή του ενεργειακού χάσματος του υπεραγωγού που κατευθύνεται προς μία διεπαφή N/S. Το συγκεκριμένο ηλεκτρόνιο θα οπισθοανακλασθεί ως οπή στη μεταλλική περιοχή και θα διαδοθεί ως ζεύγος ηλεκτρονίων στην υπεραγωγή. Στη συνέχεια, η δημιουργηθείσα οπή θα οπισθοανακλασθεί με τη σειρά της στην απέναντι διεπαφή ως ηλεκτρόνιο. Στην περίπτωση που η διαφορά φάσης των δύο υπεραγωγίων περιοχών είναι μηδέν, $\phi = 0$, τα ρεύματα των αντίθετα διαδιδόμενων ηλεκτρονίων αλληλοακυρώνονται όπως υπαγορεύεται και από τη συμμετρία χωρικής αντιστροφής. Μια πεπερασμένη διαφορά φάσεων όμως, σπάει τη συγκεκριμένη συμμετρία και οδηγεί έτσι στην εμφάνιση ενός υπερρεύματος μεταξύ των δύο περιοχών. Η παραπάνω ποιοτική ανάλυση, καταλήγει στην παρακάτω σχέση για το υπερρεύμα που προκύπτει από μια δέσμια κατάσταση ASJ

$$j = \frac{2e}{\hbar} \frac{dE}{d\phi}. \quad (1.28)$$

Η παραπάνω σχέση μπορεί να προκύψει απευθείας από τις BdG εξισώσεις [22] ή να επαχθεί από τη θερμοδυναμική εξίσωση $I = (2e/\hbar)\partial F/\partial\phi$ χρησιμοποιώντας μια έκφραση για την ελεύθερη ενέργεια της ετεροδομής βασισμένη σε μικροσκοπικές θεωρίες [25]. Το συνολικό ρεύμα Josephson προκύπτει από τη μέση θερμοδυναμική τιμή όλων των δέσμιων καταστάσεων ASJ. Επομένως το ρεύμα Josephson εξαρτάται από την κλίση του ενεργειακού φάσματος των καταστάσεων ASJ σε σχέση με τη διαφορά φάσης των δύο υπεραγωγίων περιοχών. Για τον λόγο αυτό στις (110) διεπαφές S/N/S υπεραγωγών με d -wave συμμετρία δεν παρατηρούνται υπερρεύματα Josephson.

1.3 Ετεροδομές οξειδίων των μετάλλων μετάβασης

Τα οξείδια των μετάλλων μετάβασης παρουσιάζουν ένα ευρύ φάσμα ηλεκτρονιακών φάσεων με εκπληκτικές ιδιότητες όπως είναι η υπεραγωγιμότητα και ο σιδηρομαγνητισμός. Πολλά από αυτά τα υλικά χαρακτηρίζονται και ως φερροϊκά (ferroics), υλικά που παρουσιάζουν τομείς με διαφορετικό προσανατολισμό για την εκάστοτε παράμετρο τάξης οι οποίοι όμως μπορούν να ευθυγραμμιστούν κάτω από την επίδραση του συζυγούς εξωτερικού πεδίου. Συγκεκριμένα, τα υλικά αυτά μπορούν να εκδηλώσουν (αντι-)σιδηρομαγνητισμό, (αντί-)ηλεκτρισμό και (αντί-)ελαστικότητα [89]. Ακόμα πιο ενδιαφέρουσες είναι οι μεταβάσεις μεταξύ αυτών των φάσεων που μπορούν να πραγματοποιηθούν με ελεγχόμενο τρόπο μεταβάλλοντας εξωτερικές παραμέτρους των πειραματικών διατάξεων όπως τη θερμοκρασία, την πίεση και το χημικό δυναμικό ή τη στοιχειομετρία του υλικού. Από τους σημαντικότερους τύπους μεταβάσης που έχουν παρατηρηθεί στα υλικά αυτά είναι οι μεταβάσεις μέταλλου - μονωτή και οι μεταβάσεις μέταλλου - υπεραγωγού [90, 91]. Η μη τετριμμένη συμπεριφορά των υλικών αυτών αποδίδεται κυρίως στα μερικώς κατειλημμένα εξωτερικά d τροχιακά και στην αλληλεπίδραση μεταξύ των βαθμών ελευθερίας φορτίου, σπιν και τροχιακών. Τα ηλεκτρόνια στα συγκεκριμένα τροχιακά υπόκεινται σε ισχυρές αλληλεπιδράσεις που οδηγούν στην εμφάνιση ιδιαίτερων φαινομένων της φυσικής πολλών σωματιδίων. Παρόλη τη μακρόχρονη και



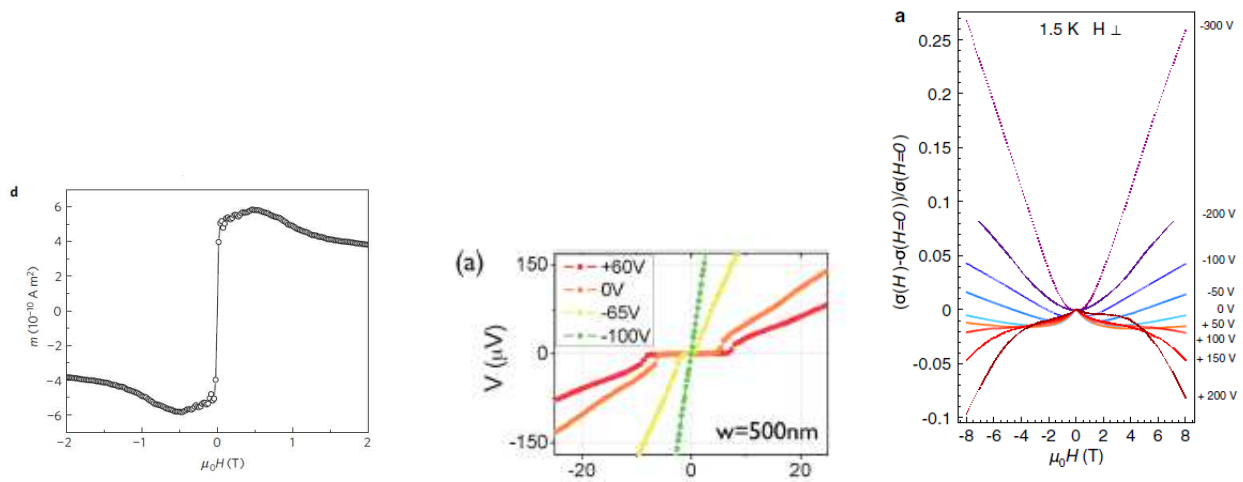
Σχήμα 1.3: αριστερά) Σχηματική αναπαράσταση των συμμετριών και των βαθμών ελευθερίας συσχετισμένων ηλεκτρονίων που μπορούν δημιουργηθούν σε διεπαφές οξειδίων μετάλλων μετάβασης [94]. δεξιά) Οι διεπαφές $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (LAO/STO) έχουν μελετηθεί διεξοδικά για τις ιδιαίτερες ιδιότητες που παρουσιάζουν. Χαρακτηρισμός δομής και μορφολογίας διεπαφών LAO/STO με μικροσκοπία μετάδοσης ηλεκτρονίου υψηλής ανάλυσης[92].

εντατική επιστημονική έρευνα για τον προσδιορισμό και τον έλεγχο των ιδιοτήτων των συγκεκριμένων οξειδίων, πολλά ζητήματα παραμένουν ανοιχτά απαιτώντας περισσότερη διερεύνηση.

Τα τελευταία χρόνια όμως, η έρευνα έχει επίσης επικεντρωθεί και στη διερεύνηση των ιδιοτήτων διάφορων ετεροδομών με βάση τα οξείδια μετάλλων μετάβασης. Οι ετεροδομές στην ουσία είναι τεχνητά υλικά που σχηματίζονται από την αλληλουχία στρωμάτων διαφορετικών οξειδίων. Το συγκεκριμένο πεδίο αναπτύσσεται ταχύτατα έχοντας τραβήξει το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας, καθώς στα συστήματα αυτά δημιουργούνται φάσεις με ιδιότητες τελείως διαφορετικές από αυτές των υλικών της ετεροδομής (Εικ. 1.3α) [93, 94, 95, 96, 97, 98]. Ηλεκτρονικές φάσεις που συνήθως δε συνυπάρχουν σε ομοιογενή συστήματα, μπορούν να συνυπάρξουν λόγω εγγύτητας σε διεπαφές όπου συνδέονται διαφορετικά υλικά, οδηγώντας στη δημιουργία νέων φάσεων με ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Επιπλέον, οι ετεροδομές δίνουν τη δυνατότητα για καλύτερο πειραματικό έλεγχο των ηλεκτρονικών φάσεων και των αντίστοιχων μεταβάσεων. Τέλος προσφέρουν ένα άμεσο τρόπο μελέτης χβαντικών καταστάσεων τάξης σε χώρους μειωμένων διαστάσεων.

Ανάμεσα στα πιο ενδιαφέροντα φαινόμενα που έχουν παρατηρηθεί και μελετηθεί σε ετεροδομές οξειδίων των μετάλλων μετάβασης, είναι και η δημιουργία αερίου ηλεκτρονίων σε διεπαφές μεταξύ μονωτικών υλικών. Ύστερα από την ανακάλυψη της πρώτης τέτοιας ετεροδομής με μεταλλική διεπαφή, $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ [99], πολλές ακόμα ετεροδομές με παρόμοιες ιδιότητες έχουν ανακαλυφθεί και μελετηθεί. Στις ετεροδομές αυτές τα υλικά που τις αποτελούν είναι μονωτικά, η μονωτική τους συμπεριφορά όμως μπορεί να αποδίδεται σε διαφορετικούς μηχανισμούς. Έτσι, διεπαφές με μεταλλικές ιδιότητες έχουν παρατηρηθεί σε ετεροδομές μονωτών ζώνης - μονωτών Mott (BI/MI) και μονωτών Mott - μονωτών Mott (MI/MI) όπου επίσης εκδηλώνεται τάξη σπιν και φορτίου λόγω παρουσίας ισχυρών αλληλεπιδράσεων. Είναι ενδιαφέρον ότι πολλές από αυτές τις ετεροδομές έχουν ως κοινό υπόστρωμα το οξείδιο SrTiO_3 το οποίο γενικά θεωρείται ως μονωτής ζώνης με πειραματικά προσδιορισμένο άμεσο ενεργειακό χάσμα $E \sim 3.75\text{eV}$. Την τελευταία δεκαετία η έρευνα έχει επικεντρωθεί στις ετεροδομές $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (Εικ. 1.3β). Το διδιάστατο αέριο ηλεκτρονίων που δημιουργείται και παραμένει εντοπισμένο στη συγκεκριμένη διεπαφή, εμφανίζει μαγνητικές [100, 101, 102] και υπεραγωγικές ιδιότητες (Εικ. 1.4) [103, 104, 105, 106, 107] καθώς και αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς [108]. Ακόμα πιο ενδιαφέρον είναι ότι οι ιδιότητες αυτές των ηλεκτρονίων στη διεπαφή μπορούν να ρυθμιστούν μέσω της εφαρμογής ηλεκτρικών τάσεων, εμπλουτισμού ηλεκτρονίων ή οπών, πίεσης ή άλλων εξωτερικών πεδίων [109, 110, 111, 112, 113, 114]. Γι' αυτό οι συγκεκριμένες ετεροδομές και ιδιαίτερα η ετεροδομή LAO/STO θεωρούνται ιδανικές για εφαρμογές στη σπιντρονική [115].

Παρόλη την εντατική έρευνα των τελευταίων χρόνων, η προέλευση του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων στις συγκεκριμένες διεπαφές παραμένει αδιευκρίνιστη σε ένα βαθμό. Μέχρι σήμερα, η πιο ελεύως αποδεκτή εξήγηση είναι το μοντέλο της επανακατασκευής της ηλεκτρονιακής δομής

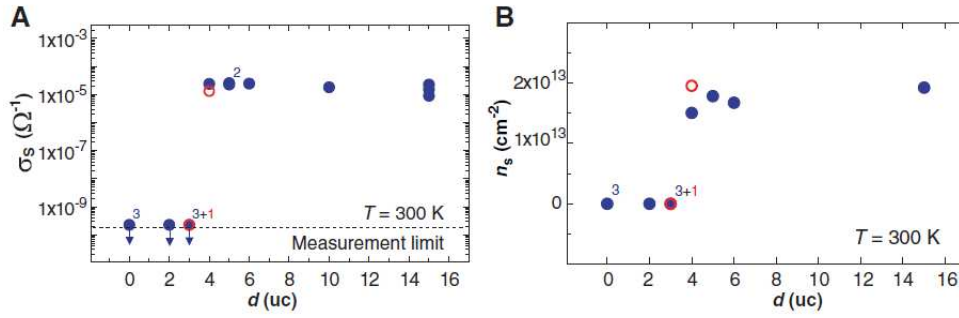


Σχήμα 1.4: Ενδεικτικά πειραματικά αποτελέσματα για διεπαφές LAO/STO. (αριστερά) Μέτρηση μαγνητισμού μέσα στο επίπεδο της διεπαφής μέσω μαγνητόμετρου ροπής. [103]. (μέση) Χαρακτηριστικές καμπύλες τάσης-ρεύματος για θερμοκρασία $T = 40\text{mK}$ που αναδεικνύουν τη δημιουργία υπεραγωγικής φάσης σε διεπαφές LAO/STO. Το κρίσιμο ρεύμα και επομένως η υπεραγωγική φάση μπορούν να ελεγχθούν μέσω της εφαρμογής τάσης πύλης. Η φάση μηδενικής πτώσης τάσης (υπεραγωγική) εξαφανίζεται για τάσεις πύλης κάτω από $V_g = -100\text{V}$. (δεξιά) Μετρήσεις μαγνητοαντίστασης $[\sigma(H) - \sigma(H = 0)]/\sigma(H = 0)$ για την αγωγιμότητα μέσα στο επίπεδο σ σε θερμοκρασία $T = 1.5\text{K}$ και για μαγνητικό πεδίο κάθετο στη διεπαφή για διαφορετικές τάσεις πύλης. Η πιο πιθανή εξήγηση για την εξάρτηση της αγωγιμότητας από το κάθετο μαγνητικό πεδίο είναι η παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς [108].

(electronic reconstruction) που βασίζεται στην ιδέα της καταστροφής πόλωσης (polar catastrophe) [99]. Σύμφωνα με τη θεωρία αυτή, η ασυνέχεια στην πόλωση μεταξύ του πολωμένου οξειδίου LaAlO_3 (LAO) και του μη πολωμένου SrTiO_3 (STO) είναι υπεύθυνη για την εμφάνιση στη διεπαφή του αερίου ηλεκτρονίων με μεταλλικές ιδιότητες όταν το πάχος του πολωμένου υλικού ξεπερνάει μια κρίσιμη τιμή (Εικ. 1.5). Η μεγαλύτερη επιτυχία της συγκεκριμένης θεωρίας είναι η σχετικά ακριβής πρόβλεψη της πειραματικά προσδιορισμένης κρίσιμης τιμής για το πάχος του στρώματος LAO. Όμως, άλλες πειραματικές παρατηρήσεις στις συγκεκριμένες διεπαφές, όπως το σχεδόν αμελητέο ηλεκτρικό πεδίο στο εσωτερικό στρωμάτων LAO πάχους μικρότερου της κρίσιμης τιμής, και η απουσία μεταλλικής συμπεριφοράς για ετεροδομές που δημιουργήθηκαν σε συνθήκες υψηλής μερικής πίεσης οξυγόνου [116], δεν επεξηγούνται στα πλαίσια της συγκεκριμένης θεωρητικής προσέγγισης. Γι' αυτό τον λόγο έχουν προταθεί πολλές εναλλακτικές θεωρίες, μερικές εκ των οποίων βασίζονται σε φαινόμενα που αναπτύσσονται κατά την πειραματική δημιουργία των συγκεκριμένων ετεροδομών. Σε κάθε περίπτωση, η κατανόηση του μηχανισμού δημιουργίας του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων στις διεπαφές αυτές είναι σημαντική, τόσο για επιστημονικούς, όσο και για τεχνολογικούς λόγους.

Βασίζόμενοι στις παραπάνω ιδιότητες των ετεροδομών των συγκεκριμένων οξειδίων μελετήσαμε στα πλαίσια της συγκεκριμένης εργασίας, ετεροδομές μεταξύ μονωτών Mott και πιο συγκεκριμένα μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν χρησιμοποιώντας το μοντέλο Hubbard. Το συγκεκριμένο μοντέλο σημειώνουμε ότι έχει χρησιμοποιηθεί για τη μελέτη των συγκεκριμένων ετεροδομών και σε άλλες μελέτες [117, 118, 119, 120, 121, 122] οι οποίες όμως βασίζονται στο μοντέλο της επανακατασκευής της ηλεκτρονιακής δομής. Παρακάτω παρουσιάζουμε τις χβαντικές καταστάσεις κύματος πυκνότητας φορτίου και σπιν που εμφανίζονται σε συστήματα ισχυρά αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων.

Κύματα πυκνότητας σπιν Τα κύματα πυκνότητας σπιν είναι χβαντικές θεμελιώδεις καταστάσεις με περιοδική διαμόρφωση της πυκνότητας σπιν και θεωρείται ότι εμφανίζονται σε μεταλλικά συστήματα λόγω ισχυρών αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-οπής. Αρχικά είχαν προταθεί από τον Overhauser το 1960, και γενικά αναμένεται η δημιουργία τους σε μη-ισοτροπικά μέταλλα. Συγκεκριμένα, τα μέταλλα των οποίων η επιφάνεια Fermi εμφανίζει ιδιότητες συναρμογής (nesting)



Σχήμα 1.5: Επίδραση του πάχους του στρώματος του LaAlO_3 στις ηλεκτρονικές ιδιότητες διεπαφών $\text{LaAlO}_3\text{-SrTiO}_3$. αριστερά) Αγωγιμότητα στο επίπεδο και δεξιά) πυκνότητα φορέων των ετεροδομων LAO/STO συναρτήσει του αριθμού των μοναδιαίων κυψελίδων για το LaAlO_3 . Οι αριθμοί δίπλα στα σημεία δεδομένων σημειώνουν τον αριθμό των δειγμάτων με μη-διακριτές τιμές. Παρατηρούμε την απότομη αύξηση της αγωγιμότητας και της πυκνότητας φορέων για κρίσιμο πάχος $4u.c.$, οι οποίες παραμένουν σταθερές για μεγαλύτερα πάχη [109].

ως προς ένα ή περισσότερα κυματανύσματα \mathbf{q} , είναι ιδιαίτερα επιδεκτικά στη δημιουργία κυμάτων πυκνότητας σπιν για τα συγκεκριμένα κυματανύσματα \mathbf{q} . Σημειώνουμε ότι τμήματα της επιφάνειας Fermi θεωρούνται ότι εμφανίζουν προσαρμογή κατά \mathbf{q} , όταν εμφανίζονται παράλληλα μεταξύ τους και συνδέονται μέσω του κυματανύσματος \mathbf{q} . Τα κύματα πυκνότητας σπιν παραβιάζουν, τόσο τη συμμετρία μεταφοράς, όσο και τη συμμετρία στροφής του σπιν. Έτσι, οι συγκεκριμένες καταστάσεις έχουν καλά καθορισμένη μαγνητική συμπεριφορά που συνοδεύεται από μαγνητικές διεγέρσεις χαμηλής ενέργειας. Οι τρόποι συλλογικής διεγερσης στα συστήματα αυτά σχετίζονται με τη μεταβολή του πλάτους, μαγνόνια, και της φάσης των κυμάτων πυκνότητας σπιν.

Οι καταστάσεις κυμάτων πυκνότητας σπιν με κυματάνυσμα ίσο με το μισό του εύρους της αντίστοιχης ζώνης Brillouin ονομάζονται αντισιδηρομαγνητικές. Τέτοιες καταστάσεις έχουν πειραματικά επιβεβαιωθεί για τις στοιχειομετρικές ενώσεις των αγωγών υψηλής θερμοκρασίας σε χαμηλές θερμοκρασίες. Μάλιστα η υπεραγωγιμότητα στα υλικά αυτά εμφανίζεται ύστερα από την εξαφάνιση των συγκεκριμένων αντισιδηρομαγνητικών φάσεων. Τα συγκεκριμένα υλικά θεωρούνται ως ψευδο-διδιάστατα συστήματα με μία ενεργειακή ζώνη κοντά στο επίπεδο Fermi. Η γενική μορφή της συγκεκριμένης ζώνης αγωγιμότητας προσεγγίζεται ικανοποιητικά από τη σχέση διασποράς $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t(\cos k_x + \cos k_y) + \mu$ που προκύπτει με βάση το μοντέλο του ισχυρού δεσμού σε πλέγματα τετραγωνικής συμμετρίας, όπου t είναι το ολοκλήρωμα μεταφοράς μεταξύ των ιόντων που καθιστούν κοντινότερους γείτονες και μ το χημικό δυναμικό. Όπως προκύπτει από την παραπάνω σχέση, για $\mu = 0$ η επιφάνεια Fermi παραμένει αναλλοίωτη ως προς τη μεταφορά κατά το διάνυσμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ στον χώρο των ορμών. Έτσι για μικρές τιμές του χημικού δυναμικού στα συστήματα αυτά ευνοείται η εμφάνιση αντισιδηρομαγνητικής τάξης στη θεμελιώδη τους κατάσταση. Στην περίπτωση αυτή το σύστημα περιγράφεται από την παρακάτω Χαμιλτονιανή.

$$H(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k},s} [\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu] c^\dagger(\mathbf{k}, s) c(\mathbf{k}, s) + M c^\dagger(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s) c(\mathbf{k}, s') + c.c. \quad (1.29)$$

όπου $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ η ενεργειακή διασπορά και $M = \sum_{\mathbf{k}} \langle c^\dagger(\mathbf{k}, s) c(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s') \rangle$ η διαμορφωμένη κατά $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ πυκνότητα του σπιν. Το ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος $E(\mathbf{k}, s) = \pm \sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu]^2 + M^2}$ αποκαλύπτει την εμφάνιση ενός ενεργειακού χάσματος εύρους $2M$. Τέλος, οι τελεστές καταστροφής (δημιουργίας) των διεγέρσεων του συστήματος έχουν την παρακάτω μορφή $\psi(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{\sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu]^2 + M^2}} c(\mathbf{k}, s) + \frac{M}{\sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k}) + \mu]^2 + M^2}} c(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s')$, όπου είναι εμφανής η συσχέτιση μεταξύ ηλεκτρονίων με αντίθετη πόλωση του σπιν [123, 124].

Κύματα πυκνότητας φορτίου Τα κύματα πυκνότητας φορτίου είναι χβαντικές καταστάσεις τάξης που οδηγούν στην εμφάνιση ενεργειακού χάσματος στην επιφάνεια Fermi και των οποίων

οι συλλογικές διεγέρσεις χαρακτηρίζονται από διαμόρφωση της πυκνότητας φορτίου. Αρχικά προτάθηκαν από τον Peierls σύμφωνα με τον οποίο οι συγκεκριμένες καταστάσεις εμφανίζονται σε συστήματα στερεάς κατάστασης λόγω της σύζευξης ηλεκτρονίων-φωτονίων. Εν συνεχεία ο Fröhlich έδειξε ότι απουσία παραγόντων απόσβεσης ή καθήλωσης, οι συγκεκριμένες καταστάσεις μπορούν να φέρουν ηλεκτρικό ρεύμα χωρίς απώλειες, αντίστοιχο με το υπερρεύμα των υπεραγωγών. Όμως, σε αντίθεση με τα ζεύγη ηλεκτρονίων στους υπεραγωγούς, τα κύματα πυκνότητας φορτίου καθηλώνονται ακόμα και στην παρουσία πολύ μικρών διαταραχών και συνεπώς τα συστήματα αυτά εμφανίζουν εν τέλει μονωτική συμπεριφορά. Καθώς οι συγκεκριμένες καταστάσεις παραβιάζουν τη συμμετρία μεταφοράς σχετίζονται με την εμφάνιση μπεζονικών διεγέρσεων μηδενικής ενέργειας που αντιστοιχούν σε διακυμάνσεις της φάσης των κυμάτων.

Όπως και τα κύματα πυκνότητας σπιν, οι συγκεκριμένες καταστάσεις εμφανίζονται σε μη-ισοτροπικά μέταλλα των οποίων η επιφάνεια Fermi εμφανίζει ιδιότητες συναρμογής. Για διδιάστατα συστήματα το μοντέλο Hubbard επεκτάθηκε ακριβώς για τη διερεύνηση των ιδιοτήτων των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και τον ανταγωνισμό τους με αντισιδηρομαγνητικές φάσεις. Τα συστήματα τετραγωνικής συμμετρίας με κύματα πυκνότητας φορτίου με κυματόνισμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, που αντιστοιχεί στο μισό του εύρους της πρώτης ζώνης Brillouin, περιγράφονται επίσης από τη Χαμιλτονιανή Εξ. 1.29 με παράμετρο τάξης $M = \sum_{\mathbf{k}} \langle c^\dagger(\mathbf{k}, s)c(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s) \rangle$ και εμφανίζουν ενεργειακό χάσμα $2M$ στο φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων. Η διαφορά με τις αντισιδηρομαγνητικές θεμελιώδεις καταστάσεις αναδεικνύεται από τη μορφή των ιδιοτελεστών του συστήματος $\psi(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{\sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k})+\mu]^2+M^2}}c(\mathbf{k}, s) + \frac{M}{\sqrt{[\varepsilon(\mathbf{k})+\mu]^2+M^2}}c(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s)$, που ενσωματώνουν συσχετίσεις μεταξύ ηλεκτρονίων με την ίδια πόλωση του σπιν.

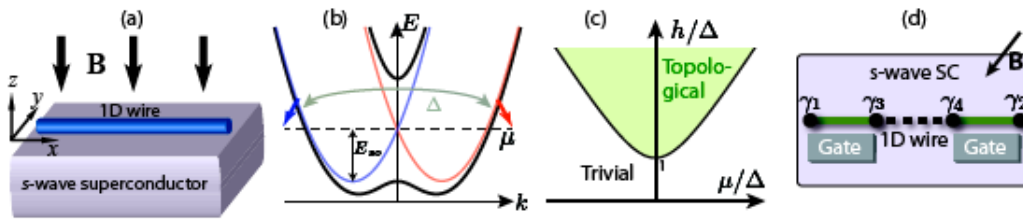
Εν κατακλείδι, σημειώνουμε ότι στην προσέγγιση ασθενούς σύζευξης τα κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν μπορούν να περιγραφούν από μια θεωρία τύπου BCS που καταλήγει σε μία εξίσωση αυτοσυνέπειας με τη γενική μορφή $\Delta = 2\varepsilon_c e^{-1/\lambda}$, όπου ε_c το όριο της ενέργειας αποκοπής και λ η αντίστοιχη για κάθε περίπτωση αδιάστατη σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίων-φωτονίων ή ηλεκτρονίων-ηλεκτρονίων, ενώ η κρίσιμη θερμοκρασία προκύπτει από τη σχέση $2\Delta = 3kT_c$ [125].

1.4 Τοπολογικές φάσεις και φερμιόνια Majorana

Η φυσική συμπυκνωμένης ύλης επικεντρώνεται στη διερεύνηση και μελέτη των χβαντικών και μη φάσεων τη ύλης. Από την εποχή που ο Landau διατύπωσε τη θεωρία του για τις μεταβάσεις δεύτερης τάξης, οι καταστάσεις της ύλης ταξινομούνται βάσει των συμμετριών του συστήματος και την έννοια της παραμέτρου τάξης. Σύμφωνα με την προσέγγιση Landau κάθε φάση θεωρείται ως μια κατάσταση τάξης που διατηρεί μόνο μια υποομάδα των συμμετριών του συστήματος στην κανονική του κατάσταση. Οι ενεργές θεωρίες πεδίου που διατυπώνονται με βάση την αντίστοιχη παράμετρο τάξης, οι επονομαζόμενες και θεωρίες Ginzburg-Landau, προσφέρουν μια οικουμενική περιγραφή των χβαντικών φάσεων της ύλης.

Στα τέλη του προηγούμενου αιώνα μια νέα προσέγγιση με βάση την τοπολογία, αναδείχθηκε ως ένα χρήσιμο εργαλείο για την ταξινόμηση των χβαντικών φάσεων της ύλης [142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 149, 150, 151, 152, 153]. Σε πλήρη αναλογία με την ταξινόμηση βάσει συμμετρίας, οι χβαντικές καταστάσεις σε αυτήν την προσέγγιση χαρακτηρίζονται από μία τοπολογική παράμετρο τάξης και οι ιδιότητές τους περιγράφονται από τοπολογικές ενεργές θεωρίες πεδίου. Ως πρώτη συστηματική εφαρμογή της τοπολογίας στη φυσική της συμπυκνωμένης ύλης θεωρείται η ταξινόμηση ατελειών σε χβαντικές καταστάσεις τάξης βάσει της θεωρίας ομοτοπίας. Η ανακάλυψη του χβαντικού φαινομένου Hall το 1980 από τον von Klitzing [154] και η τοπολογική ερμηνεία του από τον Thouless λίγα χρόνια αργότερα, το 1982 [155], κατέδειξε τις τοπολογικές μαθηματικές μεθόδους ως ιδιαίτερα χρήσιμα εργαλεία για την κατανόηση των διάφορων φαινομένων της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης. Οι χβαντικές καταστάσεις Hall είναι μονωτικές φάσεις οι οποίες όμως επιτρέπουν τη μεταφορά φορτίου μόνο κατά μήκος των συνόρων τους. Ακόμα πιο σημαντική είναι η ιδιότητα των συγκεκριμένων συστημάτων σύμφωνα με την οποία η αγωγιμότητα Hall εμφανίζεται χβαντισμένη σε μονάδες $\frac{e^2}{h}$. Επιπλέον, η χβάντωση της αγωγιμότητας εμφανίζεται

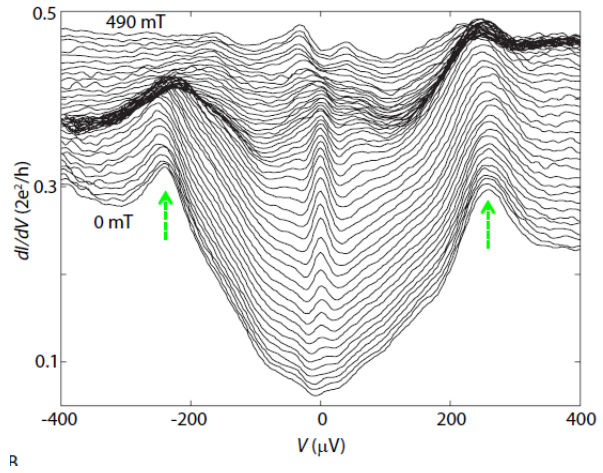
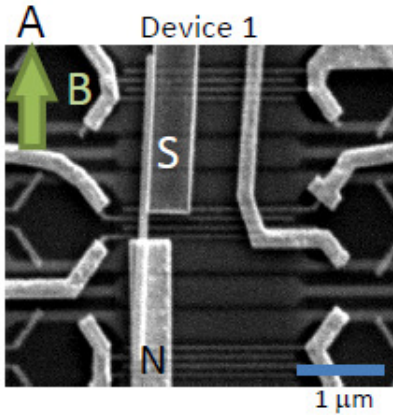
σταθερή ως προς μικρές μεταβολές μεταξύ των σχετικών δειγμάτων υπονοώντας την τοπολογική της προέλευση. Τοπολογική επίσης φάση θεωρείται και η κλασματική χβαντική κατάσταση Hall, η οποία ανακαλύφθηκε από τον Stormer το 1982 [156]. Στην κλασματική χβαντική κατάσταση Hall η αγωγιμότητα στο σύνορο του συστήματος εμφανίζεται ανάλογη κάποιου κλάσματος της θεμελιώδους χβαντικής αγωγιμότητας. Το 1990, οι Moore και Read έδειξαν ότι οι μονοσωματιδιακές διεγέρσεις στην κλασματική χβαντική κατάσταση Hall υπακούουν μη-Αβελιανές σχέσεις εναλλαγής σωματιδίων [157]. Ύστερα από την ανακάλυψη των καταστάσεων αυτών η τοπολογία άρχισε να παίζει ουσιαστικό ρόλο στη μελέτη των συστημάτων συμπυκνωμένης ύλης οδηγώντας στην ανακάλυψη πολλών νέων τοπολογικών φάσεων με εκληκτικές ιδιότητες. Συγκεκριμένα την τελευταία δεκαετία, σημαντικό κομμάτι της έρευνας έχει επικεντρωθεί στη μελέτη τοπολογικά μη-τετριμμένων υπεραγωγίων φάσεων στις οποίες εμφανίζονται μονοσωματιδιακές διεγέρσεις με εξωτικές ιδιότητες, όπως είναι οι δέσμιες καταστάσεις Majorana. Τα τελευταία χρόνια, το ενδιαφέρον της επιστημονικής κοινότητας έχει συγκεντρώσει επίσης μια νέα κλάση υλικών με μονωτική συμπεριφορά, οι τοπολογικοί μονωτές.



Σχήμα 1.6: α) Συμβατικός υπεραγωγός σε εγγύτητα με μονοδιάστατο ημιαγωγό παρουσία πεδίου Zeeman. Εξαιτίας της παρουσίας αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς και του πεδίου Zeeman, το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο μετατρέπεται μερικώς σε πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων με την ίδια συνιστώσα σπιν. β) Οι ενεργειακές ζώνες του μονοδιάστατου συστήματος παρουσία της συμμετρίας αντιστροφής χρόνου (καμπύλες με κόκκινο και μπλε χρώμα) και όταν η συγκεκριμένη συμμετρία παραβιάζεται λόγω της εφαρμογής του μαγνητικού πεδίου (μαύρη καμπύλη). Η εφαρμογή του πεδίου Zeeman δημιουργεί ενεργειακό χάσμα μεταξύ των δύο ενεργειακών ζωνών. Για συγκεκριμένες τιμές του χημικού δυναμικού μόνο μία ενεργειακή ζώνη τέμνει το επίπεδο Fermi του συστήματος οδηγώντας στην εμφάνιση τοπολογικής υπεραγωγιμότητας ίδιου σπιν. γ) Τοπολογικό διάγραμμα φάσης του συστήματος συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ και του πεδίου Zeeman h . δ) Τα άκρα των τμημάτων του μονοδιάστατου συστήματος που βρίσκονται στην τοπολογική φάση φιλοξενούν εντοπισμένες δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας, γ [159].

Πριν παρουσιάσουμε περισσότερα για τα συστήματα των τοπολογικών υπεραγωγών και των τοπολογικών μονωτών αξίζει να επεξηγήσουμε λίγο τη γενικότερη τοπολογική προσέγγιση των συστημάτων της συμπυκνωμένης ύλης. Η τοπολογία ως μαθηματική έννοια αναπτύχθηκε με σκοπό την ταξινόμηση αρχικά γεωμετρικών σχημάτων και εν συνεχεία γενικότερων μαθηματικών συνόλων βάσει ιδιοτήτων τους που παραμένουν αναλλοίωτες από την εφαρμογή απείρως διαφορίσιμων μετασχηματισμών, τα τοπολογικά αναλλοίωτα. Μεταβάσεις μεταξύ συνόλων που χαρακτηρίζονται από διαφορετικές τιμές του τοπολογικού αναλλοίωτου είναι δυνατές μόνο μέσω μετασχηματισμών που καθιστούν τον ορισμό του τοπολογικού αναλλοίωτου αδύνατο. Έτσι η διδιάστατη σφαίρα είναι τοπολογικά διακριτή από την αντίστοιχη διδιάστατη επιφάνεια ενός τόρου και μπορεί να μετασχηματισθεί σε αυτήν μόνο με την εφαρμογή ενός μη διαφορίσιμου μετασχηματισμού.

Οι χβαντικές καταστάσεις στις οποίες δεν εμφανίζονται σημεία μηδενισμού της ενέργειας στο φάσμα των μονοσωματιδιακών του διεγέρσεων, δηλαδή δεν έχουν επιφάνεια Fermi οποιουδήποτε τύπου, μπορούν ταξινομηθούν σε τοπολογικές κλάσεις κατά ανάλογο τρόπο. Τα τοπολογικά αναλλοίωτα για τα συστήματα αυτά έχουν τη μορφή ολοκληρωμάτων στον χώρο των ορμών και μπορούν να θεωρηθούν ως τοπολογικές παράμετροι τάξης που καθορίζουν τις ηλεκτρονικές ιδιότητες της αντίστοιχης χβαντικής κατάστασης. Μετασχηματισμοί και αλλαγές στις παραμέτρους του συστήματος που δεν οδηγούν στην εμφάνιση επιφάνειας Fermi μπορούν να θεωρηθούν ως το φυσικό ανάλογο των συνεχώς διαφορίσιμων μετασχηματισμών. Στην περίπτωση που κάποιος μετασχηματισμός οδηγεί στον μηδενισμό του ενεργειακού χάσματος τα τοπολογικά αναλλοίωτα

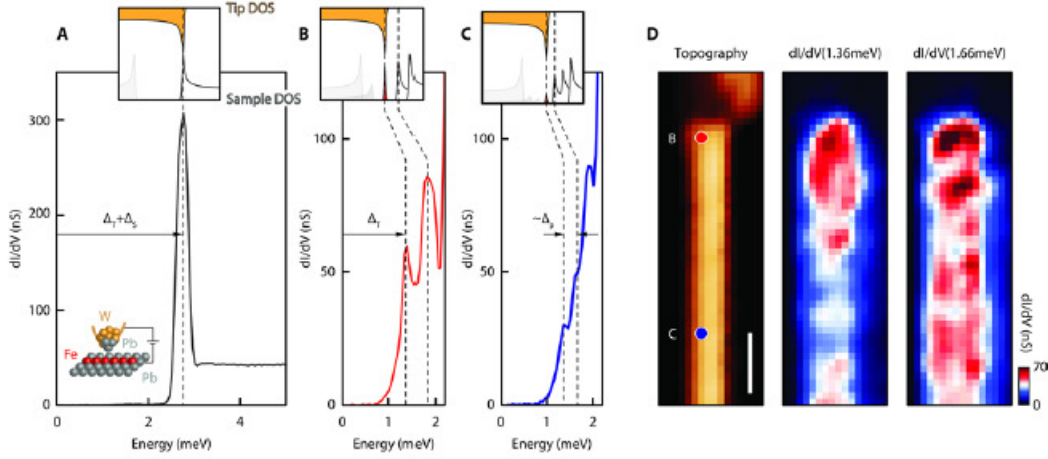


Σχήμα 1.7: Πειραματική διάταξη για τη διερεύνηση της θεωρητικής πρότασης που παρουσιάστηκε στο Σχ. 1.6. Νανοκαλώδιο αντιμονιούχου ίνδιου (InSb) με ισχυρές αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς (παράμετρος Rashba $a = 0.2eV \cdot \text{\AA}$) και μεγάλο g -παράγοντα Lande ($g \sim 50$) σε επαφή με ένα κανονικό (χρυσός Au) και με ένα υπεραγώγιμο (NbTiN) ηλεκτρόδιο. α) Εικόνα ηλεκτρονικού μικροσκοπίου σάρωσης για συσκευή με κανονικές (N) και υπεραγώγιμες (S) επαφές. Οι αριθμοί 1 έως 4 αντιστοιχούν σε ηλεκτρονικές πύλες. β) Φασματοσκοπία διαφορικής αγωγιμότητας (dI/dV) - τάσης (V) συναρτήσεως του μαγνητικού πεδίου για $\mu = 0$ σε θερμοκρασία $T = 70mK$ για μαγνητικά πεδία από $B = 0 - 490mT$ με βήμα $\delta B = 10mT$. Παρατηρούμε το επαγόμενο υπεραγώγιμο χάσμα $\Delta \sim 250meV$ και την κορυφή αγωγιμότητας μηδενικής τάσης (ZBCP) που εμφανίζεται για $B > 150mT$. Η κορυφή ZBCP μπορεί να αποδοθεί στην παρουσία δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας καθώς η κρίσιμη τιμή του μαγνητικού πεδίου συμφωνεί σε μεγάλο βαθμό με το τοπολογικό κριτήριο $h_z > |\Delta|$ για τη δημιουργία τοπολογικής υπεραγώγιμης φάσης. [213, 214, 215, 216, 217, 218]

ή ισοδύναμα τα σχετικά ολοκληρώματα δεν είναι καλά ορισμένα και τοπολογικές μεταβάσεις μεταξύ καταστάσεων με τελείως διαφορετικές ιδιότητες γίνονται επιτρεπτές. Στην πραγματικότητα όμως, μια τοπολογική μετάβαση καθορίζεται από το τοπολογικό φορτίο της επιφάνειας Fermi που εμφανίζεται στο σημείο μετάβασης.

Οι τοπολογικοί υπεραγωγοί αποτελούν μια κλάση κβαντικών καταστάσεων με πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες. Οι υπεραγωγοί έχουν μια εγγενή συμμετρία σωματιδίου-αντισωματιδίου που οδηγεί στην εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας όταν αυτοί αποκτούν μη τετριμμένο τοπολογικό χαρακτήρα. Ως σωματίδια Majorana ορίζονται σωματίδια τα οποία δε μπορούν να διακριθούν από τα τα αντισωματιδιά τους. Οι μονοσωματιδιακές διεγέρσεις σε έναν υπεραγωγό αποτελούν το ανάλογο των σωματιδίων Majorana στα συστήματα πολλών σωμάτων. Τα συγκεκριμένα σωματίδια μπορούν να θεωρηθούν ως μισά-φερμιόνια με πραγματική κυματοσυνάρτηση καθώς μόνο η υπέρθεση δύο τέτοιων καταστάσεων αντιστοιχεί σε μια διέγερση τύπου Dirac που περιγράφεται από μια μιγαδική κυματοσυνάρτηση. Ενώ γενικά είναι πάντοτε δυνατή η ανάλυση μιας φερμιονικής κυματοσυνάρτησης σε δύο πραγματικές συνιστώσες τύπου Majorana, η ανάλυση αυτή αποκτά φυσικό νόημα μόνο όταν οι αντίστοιχες καταστάσεις Majorana είναι χωρικά απομακρυσμένες. Είναι αυτή ακριβώς η μη τοπική διαμόρφωση που καθιστά τις αντίστοιχες φερμιονικές καταστάσεις τοπολογικά προστατευμένες και σταθερές απέναντι σε τοπικές διαταραχές του συστήματος. Μια ιδιαίτερα σημαντική ιδιότητα των κβαντικών καταστάσεων που περιλαμβάνουν N ζεύγη Majorana είναι ο 2^N εκφυλισμός τους που οδηγεί στον μη-τετριμμένο μετασχηματισμό τους κάτω από την εναλλαγή των συγκεκριμένων Majorana οιονεί-σωματιδίων. Οι μετασχηματισμοί μια κβαντικής κατάστασης που σχετίζεται με την εναλλαγή φερμιονίων Majorana δεν αντιμετωπίζονται εν γένει ή ισοδύναμα οι δέσμιες καταστάσεις Majorana εμφανίζουν μη-αβελιανή στατιστική εναλλαγής [157, 158, 159]. Είναι αυτές οι δύο ιδιότητες που καθιστούν τους τοπολογικούς υπεραγωγούς και τις δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας ιδανικές για την πραγματοποίηση διαδικασιών επεξεργασίας κβαντικής πληροφορίας με χαμηλή αποσυνοχή.

Τα σωματίδια Majorana μηδενικής ενέργειας μπορούν να θεωρηθούν ως το τοπολογικό α-



Σχήμα 1.8: Σιδηρομαγνητική ατομική αλυσίδα σιδήρου Fe σε επιφάνεια συμβατικού υπεραγωγού μόλυβδου Pb . Φάσματα υψηλής ενεργειακής ανάλυσης που προέκυψαν από μικροσκοπία σήραγγος σάρωσης (STM) με τη χρήση υπεραγωγικής ακίδας. α) Τα σημειακά φάσματα πάνω στο υπεραγωγικό υπόστρωμα (με ενεργειακό χάσμα Δ_S) με χρήση υπεραγωγικής ακίδας (με ενεργειακό χάσμα Δ_T) επιδεικνύουν κορυφές για ενέργεια $\Delta_S + \Delta_T$. β) Φάσματα μικροσκοπίας σήραγγος σάρωσης στα άκρα της αλυσίδας Fe επιδεικνύουν κορυφή Δ_T η οποία αντιστοιχεί σε κορυφή αγωγιμότητας μηδενικής τάσης. Από το σχήμα των συγκεκριμένων φασμάτων παρατηρούμε ότι η συγκεκριμένη κορυφή ZBII εμφανίζεται μέσα σε ένα ενεργειακό χάσμα. γ) Σημειακό φάσμα στο μέσο της αλυσίδας Fe με κορυφή για ενέργειες $\Delta_T + 300\mu V$, η οποία και αποδίδεται στο p υπεραγωγικό πεδίο που επάγεται στην αλυσίδα. δ) Τοπογραφική εικόνα της ατομικής αλυσίδας και φάσματα χωρικής ανάλυσης της αγωγιμότητας για $|eV_1| = \Delta_T = 1.36meV$ και $|eV_2| = \Delta_T + 0.3meV$. Στο αριστερό σχήμα σημειώνονται τα σημεία που αντιστοιχούν στα φάσματα (B) και (C). Η κλίμακα αντιστοιχεί σε 20.[219].

ναλλοιώτο τον αντίστοιχων υπεραγωγικών φάσεων καθώς είναι ευσταθείς διεγέρσεις μηδενικής ενέργειας έναντι διαταραχών του συστήματος. Καθώς τα σωματίδια Majorana μηδενικής ενέργειας καθιστούν τα αντισωματίδια του εαυτού τους, μπορούν να εμφανιστούν σε υπεραγωγούς με ζεύγη ηλεκτρονίων με την ίδια πόλωση του σπιν. Επειδή η κυματοσυνάρτηση ζεύγους φερμιονίων πρέπει να είναι αντισυμμετρική στην εναλλαγή των σωματιδίων, η απλούστερη μορφή τοπολογικού υπεραγωγού αφορά συμπυκνώματα με p συμμετρία. Πράγματι εύκολα αποδεικνύεται ότι υπεραγωγοί σε συστήματα μίας και δύο διαστάσεων με ζεύγη ηλεκτρονίων p συμμετρίας μπορούν να υποστηρίξουν δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας [160, 161, 162]. Δυστυχώς η υπεραγωγιμότητα συμμετρίας p εμφανίζεται σε ελάχιστα φυσικά υλικά. Υπεραγωγιμότητα συγκεκριμένης συμμετρίας έχει προταθεί αλλά δεν έχει ακόμα επιβεβαιωθεί πειραματικά για τις ενώσεις Sr_2RuO_4 και $LiFeAs$.

Για τον λόγο αυτό η έρευνα τα τελευταία έχει επικεντρωθεί στην εύρεση δομών όπου η τοπολογική υπεραγωγιμότητα επάγεται από συνδυασμό άλλων πεδίων που εμφανίζονται πιο συχνά σε διάφορα υλικά. Τον δρόμο σε αυτήν την κατεύθυνση άνοιξε η πρωτοποριακή πρόταση των Fu και Kane [163] που κατέδειξαν ότι τοπολογική υπεραγωγιμότητα και σωματίδια Majorana μηδενικής ενέργειας μπορούν εμφανιστούν σε διεπαφές συμβατικών υπεραγωγών με τοπολογικούς μονωτές [164, 165]. Εκτοτε οι πολυάριθμες προτάσεις που ακολούθησαν περιλαμβάνουν διάφορα υλικά και ποικίλους μηχανισμούς, όλες όμως χρησιμοποιούν μια μορφή σύζευξης σπιν-τροχιάς για τα ηλεκτρόνια και ένα υπεραγωγικό πεδίο με σκοπό να δημιουργήσουν ένα πεδίο ζεύξης μεταξύ ηλεκτρονίων με ίδια συνιστώσα σπιν. Μεταξύ άλλων, διακρίνουμε τις παρακάτω προτάσεις που αφορούν υβριδικά συστήματα συμβατικών υπεραγωγών και ημιαγωγών με ισχυρές αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς [166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173] (βλέπε Σχ. 1.6 και 1.7), συμβατικούς υπεραγωγούς παρουσία ανομοιογενούς μαγνητικής τάξης [174, 175, 176] ή υπό την επίδραση ελικοειδών μαγνητικών πεδίων [177, 178], σιδηρομαγνητικές αλυσίδες Shiba [179, 180, 181, 182, 183] ή σιδηρομαγνητικά νανο-καλώδια [184, 185] σε επαφή με συμβατικούς υπεραγωγούς παρουσία αλ-

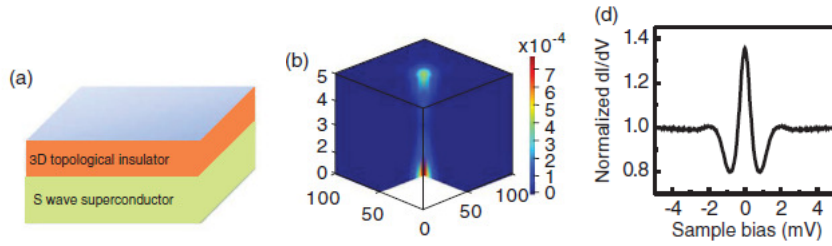
ληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς, ελικοειδείς αλυσίδες Shiba σε συμβατικούς υπεραγωγούς απουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς [186, 187, 188, 189, 190, 191, 192, 193, 194, 195], αντισιδηρομαγνητικές αλυσίδες Shiba σε συμβατικούς υπεραγωγούς παρουσία υπερρευμάτων και πεδίων Zeeman [196], μη κεντρο-συμμετρικούς υπεραγωγούς [197], συμβατικούς [198] και μη [199, 200, 201, 202] υπεραγωγούς παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν τροχιάς, οργανικούς υπεραγωγούς [203], συστήματα υπέρψυχρων ατόμων (cold atoms) [204, 205, 206] και ετεροδομές υπεραγωγού/ημι-μέταλλου [207].

Παράλληλα, σημαντική προσπάθεια συντελείται σε πειραματικό επίπεδο για την επαλήθευση των σχετικών προτάσεων για την δημιουργία τοπολογικής υπεραγωγιμότητας και την ανίχνευση των περιζήτητων σωματιδίων Majorana μηδενικής ενέργειας. Οι συγκεκριμένες δέσμιες καταστάσεις τροποποιούν με χαρακτηριστικό τρόπο τις θερμοδυναμικές ιδιότητες και τις σχέσεις μεταφοράς φορτίου/θερμότητας στα υπεραγωγίμα συστήματα τα οποία εμφανίζονται. Η πιο απλή μέθοδος για την παρατήρηση των συγκεκριμένων καταστάσεων είναι η φασματοσκοπία σήραγγος. Καθώς οι καταστάσεις αυτές έχουν μηδενική ενέργεια, μια κορυφή μηδενικής τάσης αναμένεται στα φάσματα αγωγιμότητας που προκύπτουν από τα συγκεκριμένα πειράματα, παρόλο που ένδειξη αυτή μπορεί να αλλοιωθεί από άλλες χαμηλής ενέργειας διεγέρσεις του συστήματος που οφείλονται σε άλλους μηχανισμούς. Τέτοιες κορυφές έχουν πράγματι παρατηρηθεί σε φάσματα αγωγιμότητας που προέκυψαν για (ψευδο-)μονοδιάστατα υβριδικά συστήματα υπεραγωγού ($NbTiN$) - ημιαγωγού ($InSb$). Παρόμοια μέθοδος είναι η μέτρηση της αγωγιμότητας σε βαλλιστικές συζεύξεις μετάλλου/υπεραγωγού. Παρουσία δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας, η αγωγιμότητα στα συστήματα αυτά εμφανίζεται κβαντισμένη σε ημιακέραια πολλαπλάσια της τιμής $4e^2/h$ και όχι σε ακέραια πολλαπλάσια όπως θα αναμενόταν εξαιτίας του διπλού εκφυλισμού των συμβατικών δέσμιων καταστάσεων Andreev. Το σημαντικότερο μειονέκτημα των συγκεκριμένων μεθόδων είναι η αδυναμία χωρικής ανάλυσης της κορυφής αγωγιμότητας για μηδενική τάση. Για τον λόγο αυτό η πιο άμεση μέθοδος παρατήρησης των συγκεκριμένων δέσμιων καταστάσεων είναι η φασματοσκοπία σήραγγος σάρωσης (STM) που δίνει τη δυνατότητα, τόσο ενεργειακής, όσο και χωρικής ανάλυσης των ηλεκτρονικών καταστάσεων του συστήματος. Με τη βοήθεια της συγκεκριμένης μεθόδου πιστεύεται μάλιστα ότι έγινε η πρώτη άμεση παρατήρηση δέσμιων καταστάσεων Majorana σε πρόσφατο πείραμα, όπου σιδηρομαγνητικές ατομικές αλυσίδες Fe τοποθετήθηκαν πάνω σε συμβατικό υπεραγωγό Pb. Σε ακόμα πιο πρόσφατο πείραμα οι ερευνητές, ακολουθώντας την πρόταση των Fu και Kane, ισχυρίζονται ότι παρατήρησαν δέσμιες καταστάσεις Majorana σε στροβίλους που δημιουργήθηκαν σε ετεροδομές μεταξύ του τοπολογικού μονωτή Bi_2Te_3 και του συμβατικού υπεραγωγού NbSe, μέσω μετρήσεων φασματοσκοπίας σήραγγος σάρωσης.

Όλες οι παραπάνω μέθοδοι ανιχνεύουν τα φερμιόνια Majorana μέσω μετρήσεων ηλεκτρικής αγωγιμότητας όταν το προς εξέταση σύστημα βρίσκεται σε συνθήκες εκτός ισορροπίας. Μια διαφορετική πειραματική μέθοδος βασίζεται στη δημιουργία υπερρευμάτων σε συζεύξεις υπεραγωγού/υπεραγωγού σε συνθήκες ισορροπίας λόγω του φαινομένου Josephson. Στα συγκεκριμένα συστήματα επιτρέπεται η διάδοση μέσω του φαινομένου σήραγγος ασύζευκτων ηλεκτρονίων λόγω της παρουσίας των φερμιονίων Majorana και επομένως η περιοδικότητα του υπερρεύματος σε σχέση με τη διαφορά φάσης των υπεραγωγίμων δυναμικών διπλασιάζεται από 2π σε 4π . Κατά ανάλογο τρόπο μεταβάλλεται και η περιοδικότητα του υπερρεύματος που εμφανίζεται σε υπεραγωγίμους δακτυλίους σε σχέση με την εγκλεισμένη σε αυτούς μαγνητική ροή. Έτσι και στα δύο συστήματα τα φερμιόνια Majorana θα μπορούσαν να ανιχνευθούν μέσω του φαινομένου Josephson 4π περιοδικότητας.

Τέλος μια τελείως διαφορετική πειραματική μέθοδος ανιχνεύει τα φερμιόνια Majorana μέσω μετρήσεων θερμικής αγωγιμότητας. Συγκεκριμένα παρουσία των συγκεκριμένων καταστάσεων μηδενικής ενέργειας τα υπεραγωγίμα συστήματα μετατρέπονται από θερμικοί μονωτές σε θερμικά μέταλλα. Σημειώνουμε ότι παρουσία φερμιονίων Majorana μηδενικής ενέργειας οι χειρικοί υπεραγωγοί, που ως θερμικό ανάλογο το κβαντισμένου φαινομένου Hall επιτρέπουν τη ροή θερμότητας μόνο στο σύνορό τους, αποκτούν μη μηδενική θερμική αγωγιμότητα και στο εσωτερικό τους η οποία μάλιστα εξαρτάται λογαριθμικά από τις διαστάσεις του συστήματος.

Τα τελευταία χρόνια μια νέα τοπολογική κλάση υλικών με πολύ ενδιαφέρουσες ιδιότητες είναι



Σχήμα 1.9: α) Σχηματική αναπαράσταση της ετεροδομής τοπολογικού μονωτή-υπεραγωγού. β) Αποτελέσματα σχετικών υπολογισμών που δείχνουν τις δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας στον πυρήνα στροβίλου σε ετεροδομή $\text{Bi}_2\text{Te}_3/\text{NbSe}_2$. γ) Μετρήσεις διαφορετικής αγωγιμότητας στον πυρήνα του στροβίλου, αποκαλύπτουν μια κορυφή αγωγιμότητας μηδενικής τάσης που αποδίδεται στην παρουσία δέσμιων καταστάσεων Majorana [220].

αυτή των τοπολογικών μονωτών. Χαρακτηριστικό των συγκεκριμένων συστημάτων είναι ότι διατηρούν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Οι τοπολογικοί μονωτές αποτελούν μια χβαντική κατάσταση της ύλης η οποία δε μπορεί να προκύψει μέσω αδιαβατικών διαδικασιών από συμβατικούς μονωτές ή ημιαγωγούς. Τα συστήματα αυτά μπορούν να θεωρηθούν και ως ολογραφικά μέταλλα καθώς ενώ εμφανίζουν μονωτική συμπεριφορά στο εσωτερικό τους έχουν μεταλλικές ενεργειακές ζώνες στο σύνορό τους οι οποίες προκύπτουν εξαιτίας των τοπολογικών ιδιοτήτων των συγκεκριμένων συστημάτων στο εσωτερικό τους. Ο αριθμός των συγκεκριμένων μεταλλικών ενεργειακών ζωνών αντιστοιχεί στο τοπολογικό αναλλοίωτο των συγκεκριμένων συστημάτων το οποίο είναι της μορφής Z_2 , υποδεικνύοντας ότι μόνο περιττός αριθμός τέτοιων ζωνών είναι προστατευμένος τοπολογικά.

Στους διδιάστατους τοπολογικούς μονωτές συγκεκριμένα, οι εντοπισμένες στο σύνορο τους καταστάσεις που αντιστοιχούν σε αντίθετες πολώσεις του σπιν, διαδίδονται σε αντίθετη κατεύθυνση με αποτέλεσμα την εμφάνιση πεπερασμένου ρεύματος σπιν. Οι συγκεκριμένες μεταλλικές ενεργειακές ζώνες μπορούν να περιγραφούν από την ενεργό Χαμιλτονιανή συνόρου $H_e \propto k\sigma_z$, όπου k είναι η συνιστώσα της ορμής παράλληλη προς το σύνορο. Σημειώνουμε ότι τα συγκεκριμένα συστήματα αποτελούν στην ουσία το ανάλογο των χβαντικών καταστάσεων Hall όπου διατηρείται η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και για τον λόγο αυτό ονομάζονται και σπιν χβαντικές καταστάσεις Hall. Οι διδιάστατοι τοπολογικοί μονωτές προβλέφθηκαν αρχικά θεωρητικά το 2006 από τους Bernevig, Hughes, και Zhang και παρατηρήθηκαν πειραματικά τρία χρόνια αργότερα σε χβαντικά πηγάδια HgTe/CdTe [208]. Στα συγκεκριμένα συστήματα η τοπολογική μετάβαση ελέγχεται μέσω του πάχους του στρώματος HgTe .

Τοπολογικοί μονωτές εμφανίζονται και σε τρισδιάστατα συστήματα. Οι διδιάστατες ηλεκτρονικές καταστάσεις εντοπισμένες στην επιφάνεια σύνορο των τρισδιάστατων τοπολογικών μονωτών αποτελούν ελικοειδείς καταστάσεις που σχηματίζουν ένα κώνο Dirac. Ενώ κώνοι Dirac εμφανίζονται και σε τοπολογικά τετριμμένα συστήματα όπως αυτά του γραφενίου, μόνο στους τοπολογικούς μονωτές οι ηλεκτρονικές αυτές δομές προστατεύονται τοπολογικά. Το 2009, οι κώνοι Dirac παρατηρήθηκαν πειραματικά στα υλικά Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 και Bi_2Se_3 μέσω φασματοσκοπίας φωτοεκπομπής γωνιακής ανάλυσης (ARPES). Αργότερα, μετρήσεις ARPES με ανάλυση της πόλωσης του σπιν αποκάλυψαν την προβλεπόμενη ελικοειδή διαμόρφωση του σπιν στις εντοπισμένες στην επιφάνεια ηλεκτρονικές καταστάσεις Dirac.

Τέλος, τα τελευταία χρόνια και άλλες τοπολογικές χβαντικές καταστάσεις έχουν διατυπωθεί σε θεωρητικό επίπεδο με εκπληκτικές ιδιότητες. Μεταξύ αυτών ξεχωρίζουν οι ακέραιοι και κλασματικοί μονωτές Chern και τα χειρικά και ελικοειδή κύματα πυκνότητας. Συγκεκριμένα οι μονωτές Chern παραβιάζουν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου όπως οι χβαντικές καταστάσεις Hall απουσία όμως εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Τα τοπολογικά κύματα πυκνότητας αποδεικνύεται ότι παρουσιάζουν το κολοσσιαίο φαινόμενο Nernst και το τοπολογικό φαινόμενο Meissner και γι' αυτό έχουν προταθεί για τη φάση ψευδοχάσματος των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας [209, 210, 211, 212].

Κεφάλαιο 2

Συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων

2.1 Το μοντέλο ισχυρού δεσμού

Ένας τρόπος για τον προσδιορισμό του ενεργειακού φάσματος μονοσωματιδιακών διεγέρσεων και των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων, σε ένα σύστημα στερεάς κατάστασης κρυσταλλικής δομής, είναι μέσω του μοντέλου του ισχυρού δεσμού [26]. Στην απλούστερη του μορφή του συγκεκριμένου μοντέλου, τα ηλεκτρόνια αρχικά θεωρούνται ότι καταλαμβάνουν τροχιακές καταστάσεις των ατόμων της γενικής μορφής $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{i})$, όπου \mathbf{i} οι συντεταγμένες των σημείων του κρυσταλλικού πλέγματος, αλλά μπορούν να μεταπηδούν σε διαφορετικά σημεία του πλέγματος. Έτσι, τα απεντοπισμένα στην ουσία ηλεκτρόνια, κινούνται υπό την επίδραση του περιοδικού δυναμικού των ιόντων που βρίσκονται στις πλεγματικές θέσεις και συνεπώς περιγράφονται από μια Χαμιλτονιανή της παρακάτω μορφής

$$\mathcal{H}_p = \frac{\nabla_r^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \frac{\nabla_r^2}{2m} + \sum_{\mathbf{i}} u(\mathbf{r} - \mathbf{i}), \quad (2.1)$$

όπου $\frac{\nabla_r^2}{2m} = \frac{\hat{p}}{2m}$ είναι ο τελεστής της κινητικής ενέργειας και $u(\mathbf{r} - \mathbf{i})$ είναι το δυναμικό του ιόντος στην πλεγματική θέση \mathbf{i} . Οι ιδιοκαταστάσεις της συγκεκριμένης Χαμιλτονιανής η οποία παραμένει αναλλοίωτη σε μετασχηματισμούς μεταφοράς, αγνοώντας προς το παρόν τη συμμετρία του πλέγματος, είναι συναρτήσεις Bloch που αντιστοιχούν σε συγκεκριμένη κρυσταλλική ορμή. Καθώς στα πλαίσια του μοντέλου ισχυρού δεσμού τα ηλεκτρόνια Bloch προέρχονται από τα ατομικά τροχιακά, η απλούστερη επιλογή για τις ιδιοκαταστάσεις της συγκεκριμένης Χαμιλτονιανής είναι

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j}), \quad (2.2)$$

όπου N το πλήθος των πλεγματικών σημείων. Η παραπάνω συνάρτηση είναι πράγματι μια ιδιοσυνάρτηση του τελεστή μεταφοράς καθώς $\hat{T}_{\mathbf{i}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Η σταθερά $\frac{1}{\sqrt{N}}$ απλώς κανονικοποιεί τα ιδιοδιανύσματα $\int d\mathbf{r}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})^*\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 1$. Η ενέργεια για ιδιοκατάσταση με ορμή $|\mathbf{k}\rangle$ προκύπτει

$$\begin{aligned} E_{\mathbf{k}} &= \langle \mathbf{k} | \mathcal{H}_p | \mathbf{k} \rangle = \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{j}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}'} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j}')^* \left[\frac{\nabla_r^2}{2m} + \sum_{\mathbf{i}} u(\mathbf{r} - \mathbf{i}) \right] \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{j}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j}) \\ E_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{j}'} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{j}' - \mathbf{j})} \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j}')^* \left[\frac{\nabla_r^2}{2m} + \sum_{\mathbf{i}} u(\mathbf{r} - \mathbf{i}) \right] \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j}). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Θεωρώντας τα τροχιακά σε διαφορετικές πλεγματικές θέσεις (ιόντα) ως ορθογώνια μεταξύ τους και επιπλέον $\int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i})^* \nabla_{\mathbf{r}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j}) = E_{kin} \delta_{ij}$, μπορούμε να διακρίνουμε τις παρακάτω συνιστώσες στην ενέργεια κάθε ιδιοκατάστασης. Την ατομική ενέργεια του τροχιακού

$$E_{at,i} = \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i})^* \left[\frac{\nabla_{\mathbf{r}}^2}{2m} + u(\mathbf{r} - \mathbf{i}) \right] \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i}), \quad (2.4)$$

και την πρόσθετη ενέργεια από τα τροχιακά των άλλων ιόντων

$$E_{lat,i} = \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i})^* \left[\sum_{j \neq i} u(\mathbf{r} - \mathbf{j}) \right] \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i}). \quad (2.5)$$

Οι παραπάνω συνιστώσες αποτελούν το τοπικό κομμάτι της συνολικής ενέργειας κάθε ιδιοκατάστασης το οποίο είναι ίδιο για όλες τις πλεγματικές θέσεις και έτσι μπορεί να θεωρηθεί ως ένα ομογενές χημικό δυναμικό $\mu = \mu_i = E_{at,i} + E_{lat,i}$. Η διασπορά ενέργειας των ιδιοκαταστάσεων προκύπτει από το ολοκλήρωμα μεταφοράς λόγω του δυναμικού των ιόντων

$$\begin{aligned} E_{tr,i}(\mathbf{k}) &= \int d\mathbf{r} \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j})^* \left[\sum_{j' \neq i} u(\mathbf{r} - \mathbf{j}') \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i}) \\ &= \sum_j e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{i})} \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j})^* \left[\sum_{j' \neq i} u(\mathbf{r} - \mathbf{j}') \right] \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i}). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Έτσι, το ενεργειακό φάσμα της Χαμιλτονιανής παίρνει τη μορφή $\varepsilon(\mathbf{k}) = \sum_i \frac{1}{N} E_i(\mathbf{k}) = \mu + \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{j} - \mathbf{i})} t_{i,j}$, όπου αντικαταστήσαμε το μη τοπικό ολοκλήρωμα ως εξής

$$t_{i,j} = \int d\mathbf{r} \chi(\mathbf{r} - \mathbf{j})^* \left[\sum_{j' \neq i} u(\mathbf{r} - \mathbf{j}') \right] \chi(\mathbf{r} - \mathbf{i}). \quad (2.7)$$

Εισάγοντας τους τελεστές δημιουργίας(καταστροφής) $c_{\mathbf{k}}^\dagger(c_{\mathbf{k}})$ για την ιδιοκατάσταση με κρυσταλλική ορμή \mathbf{k} , προκύπτει η μορφή της Χαμιλτονιανής στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης.

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}. \quad (2.8)$$

Ισοδύναμα μπορούμε να εισάγουμε του τελεστές πλέγματος $\psi_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \int d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{i}} c_{\mathbf{k}}$ και τους μιγαδικούς συζυγείς τους, ώστε να καταλήξουμε στη Χαμιλτονιανη εκφρασμένη στον χώρο των πλεγματικών συντεταγμένων

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} [\mu \delta_{j,i} + t_{i,j}] \psi_j^\dagger \psi_i. \quad (2.9)$$

2.2 Συστήματα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων

Οι Χαμιλτονιανές εξισώσεις για συστήματα πολλών σωματιδίων απουσία αλληλεπιδράσεων, περιλαμβάνουν μόνο όρους δεύτερης τάξης και συνεπώς είναι της παρακάτω γενικής μορφής

$$\mathcal{H} = \sum_{n,n'} \hat{a}_n^\dagger h_{n,n'} \hat{a}_{n'}, \quad (2.10)$$

όπου $\hat{a}_n^\dagger(\hat{a}_n)$ οι τελεστές δημιουργίας (καταστροφής) των κβαντικών καταστάσεων $|n\rangle$. Ενώ γενικά οι καταστάσεις $|n\rangle$ ανήκουν σε απειροδιάστατους χώρους Hilbert, εδώ θεωρούμε συστήματα όπου οι κβαντικές καταστάσεις ανήκουν σε πεπερασμένους γραμμικούς διανυσματικούς χώρους. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να συγκεντρώσουμε τους μονοσωματιδιακούς τελεστές σε ένα διανυσματικό τελεστή Φ πεπερασμένης διάστασης, ενώ οι Ερμιτιανοί Χαμιλτονιανοί τελεστές ανήκουν σε N -διάστατο χώρο ισομορφικό με τον χώρο των Ερμιτιανών μητρών διάστασης $N \times N$. Συνεπώς οι Χαμιλτονιανοί τελεστές είναι της γενικής μορφής $\mathcal{H} = \Phi^\dagger H \Phi$. Εν γένει η Χαμιλτονιανή μήτρα H , δεν έχει διαγώνια μορφή. Σε κάθε περίπτωση όμως υπάρχει κατάλληλος μοναδιαίος μετασχηματισμός βάσης \hat{U} ο οποίος μετασχηματίζει τη Χαμιλτονιανή σε μήτρα διαγώνια μορφής της οποίας τα διαγώνια στοιχεία αποτελούν τις ιδιοενέργειες του συστήματος. Οι μοναδιαίοι μετασχηματισμοί βάσης αναπαρίστανται αντίστοιχα από μοναδιαίες $N \times N$ μήτρες με την ιδιότητα $U^\dagger U = I$. Υπό την επίδραση ενός τέτοιου μετασχηματισμού U_d ο Χαμιλτονιανός τελεστής αποκτά τη μορφή $\mathcal{H} = \Phi^\dagger H \Phi = \Phi^\dagger U_d^\dagger U_d H U_d U_d^\dagger \Phi = \Gamma^\dagger H_d \Gamma$, όπου $\Gamma^\dagger = U_d \Phi^\dagger$ είναι το διάνυσμα των ιδιοτελεστών του συστήματος και H_d η Χαμιλτονιανή μήτρα διαγώνια μορφής. Αναλυτικότερα προκύπτει

$$\mathcal{H} = \sum_{n,n'} \hat{a}_n^\dagger h_{n,n'} \hat{a}_{n'} = \sum_{n,n'} \sum_{m,m'} \hat{a}_n^\dagger u_{n,m'} u_{m',n}^* h_{n,n'} u_{m',n} u_{m,n}^* \hat{a}_{n'} = \sum_m \hat{\gamma}_m^\dagger h_m \hat{\gamma}_m, \quad (2.11)$$

όπου $u_{n,m'} = \langle n | m' \rangle$. Για τους ιδιοτελεστές γ_m που αντιστοιχούν στις ιδιοκαταστάσεις $|m\rangle$ του συστήματος με ιδιοενέργειες $h_m = \epsilon_m$, ισχύουν οι παρακάτω μεταθετικές σχέσεις $[\gamma_m, \mathcal{H}] = E_m \gamma_m$ και $[\gamma_m^\dagger, \mathcal{H}] = -E_m \gamma_m^\dagger$.

Γενικά, η θερμοδυναμικά μέση τιμή ενός τελεστή \mathcal{D} ορίζεται από τη σχέση

$$\langle \mathcal{D} \rangle = \frac{\text{Tr}\{D e^{-\beta H}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta H}\}} = \frac{\text{Tr}\{D_d e^{-\beta H_d}\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta H_d}\}} = \sum_m \frac{e^{-\beta \epsilon_m}}{\sum_k e^{-\beta \epsilon_k}} [D_d]_m = \sum_m n_F(\epsilon_m) [D_d]_m, \quad (2.12)$$

όπου $D_d = U^\dagger D U$ αντιστοιχεί στον τελεστή εκφρασμένο στη βάση καταστάσεων $|m\rangle$. Επομένως η θερμοδυναμική μέση τιμή ενός τελεστή με μητρική αναπαράσταση D προκύπτει από τη σχέση $\langle \mathcal{D} \rangle = \sum_m n_F(\epsilon_m) [U_d^\dagger D U_d]_m$.

Ισοδύναμα, μπορούμε να ορίσουμε τις καθυστερημένες μονοσωματιδιακές εξισώσεις Green ως εξής

$$G^R(nt, n't') = -i\theta(t - t') \langle \{\hat{a}_n, \hat{a}_{n'}^\dagger\} \rangle, \quad (2.13)$$

Ο παραπάνω ορισμός αντιστοιχεί πράγματι σε συνάρτηση Green όντας αντίστροφος του διαφορικού Χαμιλτονιανού τελεστή

$$\sum_{n''} [(i\partial_t)\delta_{n,n''} - h_{n,n''}] G^R(n''t, n't') = \delta_{n,n'}. \quad (2.14)$$

Για συστήματα σε συνθήκες ισορροπίας μπορούμε να μετασχηματίσουμε τις παραπάνω συναρτήσεις στον χώρο συχνοτήτων

$$\sum_{n''} [(\omega + i\eta)\delta_{n,n''} - h_{n,n''}] G^R(n'', n', \omega) = \delta_{n,n'}, \quad (2.15)$$

ενώ μέσω του μετασχηματισμού Wick $\tau \rightarrow -it$ προκύπτουν οι παρακάτω εξισώσεις για τις συναρτήσεις Matsubara Green

$$\sum_{n''} [i\omega_n \delta_{n,n''} - h_{n,n''}] G^R(n'', n', i\omega_n) = \delta_{n,n'} , \quad (2.16)$$

όπου για φερμιόνια ισχύει $i\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ για τις συχνότητες Matsubara. Μέσω του μοναδιαίου μετασχηματισμού U_d μπορούμε να συσχετίσουμε της καθυστερημένη συνάρτηση Green στον χώρο καταστάσεων $|n\rangle$, με την αντίστοιχη στον χώρο των ιδιοκαταστάσεων $|m\rangle$ του συστήματος

$$G_m^R(i\omega_n) = U_d^\dagger G_n^R(i\omega_n) U_d \quad , \quad G^R(m, m', i\omega_n) = \sum_{n,n'} \langle m|n\rangle G^R(n, n', i\omega_n) \langle n'|m'\rangle . \quad (2.17)$$

Στον χώρο αυτό η συνάρτηση Green παίρνει την απλή μορφή $G^R(m, m', i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_m} \delta_{m,m'}$. Τέλος, όπως προκύπτει από τη μιγαδική ανάλυση $\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} G^R(m, i\omega_n) = n_F(\epsilon_m)$ και επομένως η θερμοδυναμική αναμενόμενη τιμή ενός τελεστή προκύπτει ισοδύναμα από την παρακάτω σχέση [27, 28, 29, 30, 31, 32]

$$\langle \mathcal{D} \rangle = \sum_m n_F(\epsilon_m) [U^\dagger D U]_m = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \text{Tr} \{ U^\dagger D U G^R(m, i\omega_n) \} = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \text{Tr} \{ D G^R(n, n', i\omega_n) \} . \quad (2.18)$$

2.3 Το μοντέλο Hubbard

Το μοντέλο Hubbard είναι ένα απλοποιημένο πλεγματοικό μοντέλο φερμιονίων που εισήχθη αρχικά για την περιγραφή της μετάβασης μετάλλου - μονωτή Mott. Στο μοντέλο Hubbard οι πολυπλοκότητες της ατομικής δομής του συστήματος αγνοούνται, και επομένως το συγκεκριμένο μοντέλο περιγράφει απλά τον ανταγωνισμό μεταξύ του χημικού δεσμού των ιόντων και μια τοπικής αλληλεπίδρασης Coulomb. Στα πλαίσια της δεύτερης κβάντωσης το μοντέλο Hubbard περιγράφεται από την παρακάτω Χαμιλτονιανή

$$H = H_t + H_U + \mu \sum_i n_i$$

$$H_t = \sum_{i \neq j, s, s'} t \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'} \quad H_U = U \sum_{i,s} n_{i,s} n_{i,s'} , \quad (2.19)$$

όπου $\psi_{i,s}(\dagger)$ είναι οι τελεστές καταστροφής(δημιουργίας) για ένα φερμιόνιο στην πλεγματοική θέση \mathbf{i} με σπιν s , ενώ $n_{i,s} = \psi_{i,s}^\dagger \psi_{i,s}$ είναι ο τελεστής τοπικής πυκνότητας για συγκεκριμένη πόλωση του σπιν και μ το χημικό δυναμικό. Η παραπάνω Χαμιλτονιανή αντιστοιχεί σε ένα σύστημα επικαλυπτόμενων τροχιακών, που περιγράφεται από τον όρο H_t (κινητικός ή όρος μεταπήδησης), τα οποία αλληλεπιδρούν μέσω ενός απωστικού δυναμικού Coulombμικρής εμβέλειας, όπως περιγράφεται από την H_U . Ο κινητικός όρος ευνοεί της ύπαρξη απεντοπισμένων ηλεκτρονιακών καταστάσεων, ενώ αντίθετα το απωστικό δυναμικό τείνει στην ακινοτοποίησή τους. Ο ανταγωνισμός μεταξύ των συγκεκριμένων δυνάμεων συμπληρώνεται από την απαγορευτική αρχή του Pauli που βρίσκεται ενσωματωμένη στην άλγεβρα των φερμιονικών τελεστών. Αν και απλό, το μοντέλο Hubbard παραμένει δύσκολο στην επίλυσή του και στον προσδιορισμό του αντίστοιχου διαγράμματος φάσεων ακόμα και σε μηδενική θερμοκρασία. Έτσι, ακόμα και ύστερα από πολυετή έρευνα το συγκεκριμένο μοντέλο δεν έχει πλήρως κατανοηθεί. Αναλυτικές ή αξιόπιστες προσεγγιστικές λύσεις μπορούν να εξαχθούν μόνο για ειδικές οριακές περιπτώσεις όπως είναι το άπειρο δυναμικό αλληλεπίδρασης, η πολύ χαμηλή πυκνότητα φορέων και τα μονοδιάστατα ή απειροδιάστατα συστήματα.

Οι ιδιότητες του συστήματος καθορίζονται από συγκεκριμένες παραμέτρους του μοντέλου όπως είναι ο λόγος W/U μεταξύ των δύο χαρακτηριστικών ενεργειών του συστήματος, του εύρους $W = 2zt$ των ενεργειακών ζωνών και του δυναμικού αλληλεπίδρασης U , η πυκνότητα σωματιδίων

για κάθε πόλωση του σπιν $n = \frac{1}{2N} \sum_i n_{i,s}$ και η αδιάστατη θερμοκρασία T/t . Για παράδειγμα, για χαμηλές πυκνότητες σωματιδίων το μοντέλο Hubbard αποκτά παρόμοιες ιδιότητες με το αέριο ασθενώς αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων ακόμα και για μικρές τιμές του λόγου W/U , ενώ για $n \sim 1$ η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος είναι μονωτική ακόμα και για μικρές τιμές του δυναμικού U .

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η θεμελιώδης κατάσταση του μοντέλου για $n = 1$ (half-filling) όπου N ηλεκτρονιακές καταστάσεις είναι κατειλημμένες. Στην περίπτωση αυτή, η θεμελιώδης κατάσταση αντιστοιχεί σε μια μακράς εμβέλειας αντισιδηρομαγνητική κατάσταση τάξης. Το αποτέλεσμα αυτό έρχεται σε συμφωνία με πολλά πειραματικά αποτελέσματα σε συνθήκες χαμηλής θερμοκρασίας, τα οποία καταδεικνύουν ότι η μετάβαση μετάλλου/μονωτή Mott συνοδεύεται από την εμφάνιση αντισιδηρομαγνητικής τάξης. Η προέλευση αυτής της φάσης μπορεί να κατανοηθεί μέσω της εκφυλισμένης θεωρίας διαταραχών δεύτερης τάξης στο όριο $W/U \ll 1$ η οποία αναδεικνύει τον μηχανισμό υπερ-εναλλαγής που αρχικά προτάθηκε από τον Anderson. Στα πλαίσια της συγκεκριμένης προσέγγισης ο κινητικός όρος H_t του μοντέλου αντιμετωπίζεται ως ασθενής διαταραχή στον όρο αλληλεπίδρασης H_U . Έτσι μέσω αυτής της προσέγγισης το μοντέλο Hubbard συνδέεται με το κβαντικό μοντέλο Heisenberg για σπιν-1/2 σωματίδια, το οποίο περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση

$$H = J \sum_{i,s} \mathbf{S}_{i,s} \cdot \mathbf{S}_{j,s'}, \quad (2.20)$$

όπου $J = \frac{4t^2}{U}$ αντιστοιχεί στην αλληλεπίδραση εναλλαγής μεταξύ των σπιν σε γειτονικές πλεγματικές θέσεις. Ο μηχανισμός υπερ-εναλλαγής που καταλήγει στην παραπάνω μορφή αλληλεπίδρασης αποτελεί ένα μηχανισμό δύο διαδικασιών σύμφωνα με τον οποίο, μεταβάσεις σε καταστάσεις με διπλα κατειλημμένες πλεγματικές θέσεις οι οποίες λαμβάνουν χώρα με πιθανότητα t οδηγώντας σε αύξηση της ενέργειας κατά U , ακολουθούνται από μεταβάσεις, πάλι με πιθανότητα t , σε καταστάσεις με μονά κατειλημμένες πλεγματικές θέσεις. Η ίδια προσέγγιση στο όριο χαμηλής πυκνότητας οπών στη χαμηλότερη ενεργειακή ζώνη Hubbard, οδηγεί στο μοντέλο $t - J$ που περιγράφεται από την παρακάτω εξίσωση

$$H = \sum_{i \neq j, ss'} t \hat{P}_s \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'} \hat{P}_s + J \sum_{i,s} \mathbf{S}_{i,s} \cdot \mathbf{S}_{j,s'}, \quad (2.21)$$

όπου \hat{P}_s ο τελεστής προβολής στη βάση των καταστάσεων με όλα τα πλεγματικά σημεία κατειλημμένα από ένα ηλεκτρόνιο.

Ενώ το απλό μοντέλο Hubbard που παρουσιάστηκε παραπάνω μπορεί να περιγράψει ικανοποιητικά τη φυσική των διακυμάνσεων του σπιν, για την ενσωμάτωση των διακυμάνσεων του φορτίου θεωρείται απαραίτητη η εισαγωγή του εκτεταμένου μοντέλου Hubbard. Το μοντέλο αυτό περιλαμβάνει επιπλέον, απωστικές δυνάμεις Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων σε διαφορετικές πλεγματικές θέσεις και περιγράφεται γενικά από την παρακάτω Χαμιλτονιανή εξίσωση

$$H = \sum_{i \neq j, ss'} t \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'} + U \sum_{i,s} n_{i,s} n_{i,s'} + V \sum_{i \neq j, s} n_{i,s} n_{j,s}. \quad (2.22)$$

Για το μοντέλο αυτό, το οποίο μάλιστα θεωρείται κατάλληλο για τη διερεύνηση του διαγράμματος φάσεων των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας, έχουν αναπτυχθεί πολλές διαφορετικές μέθοδοι επίλυσης. Μεταξύ άλλων αναφέρουμε ενδεικτικά τις παρακάτω μη διαταρακτικές μεθόδους όπως την προσέγγιση Hartree-Fock, την προσέγγιση Gutzwiller και τις προσεγγίσεις δεσμευμένου σωματιδίου (slave-particle) [31, 32, 33, 34].

2.4 Προσέγγιση μέσου πεδίου

Σε αντίθεση με τα όσα παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο τα περισσότερα φυσικά συστήματα περιλαμβάνουν αλληλεπιδράσεις διάφορων τύπων μεταξύ των στοιχείων τους. Στην περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή του συστήματος στη δεύτερη κβάντωση αποκτά την παρακάτω γενική μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{n,n'} \hat{a}_n^\dagger h_{n,n'} \hat{a}_{n'} + \sum_{n,n'}^{n'',n'''} \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger V_{n,n'}^{n'',n'''} \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} . \quad (2.23)$$

Τα συστήματα πολλών σωματιδίων παρουσία αλληλεπιδράσεων δεν είναι γενικά επιλύσιμα, καθώς δεν είναι δυνατός ο προσδιορισμός των αντίστοιχων ιδιοκαταστάσεων και ιδιοενεργειών. Ένα πρώτο βήμα για την επίλυση τέτοιων συστημάτων είναι η προσέγγιση μέσου πεδίου, η οποία απλοποιεί την Χαμιλτονιανή σε μια μορφή που αντιστοιχεί σε συστήματα μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων τα οποία είναι γενικά επιλύσιμα. Στα πλαίσια της προσέγγισης αυτής, αρχικά θεωρούνται πεπερασμένες θερμοδυναμικές μέσες τιμές (συσχετίσεις) για συγκεκριμένα ζεύγη μονοσωματιδιακών τελεστών, οι οποίες αντικαθίστανται στον όρο αλληλεπίδρασης. Με βάση την υπόθεση ότι οι συγκεκριμένες μέσες τιμές των τελεστών αυτών δε διακυμαίνονται έντονα, αγνοούνται οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των αντίστοιχων διακυμάνσεων. Έτσι, εισάγοντας τα συγκεκριμένα μέσα πεδία ο Χαμιλτονιανός τελεστής αποκτά την απλή μορφή που έχει για συστήματα μη-αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Στην ουσία, η προσέγγιση αυτή ισοδυναμεί με μια κλασική προσέγγιση του συστήματος το οποίο παραμένει όμως κβαντικό, λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονικών μονοσωματιδιακών τελεστών ή ισοδύναμα της κβαντικής στατιστικής των φερμιονίων. Συγκεκριμένα για την παραπάνω Χαμιλτονιανή μπορούμε στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου να θεωρήσουμε για παράδειγμα $\langle \hat{a}_n \hat{a}_{n'}^\dagger \rangle = \langle \hat{a}_{n'}^\dagger \hat{a}_n \rangle \neq 0$ για τις θερμοδυναμικές μέσες τιμές του τελεστή $\hat{a}_n \hat{a}_{n'}^\dagger$. Αντικαθιστώντας τους συγκεκριμένους όρους στην Εξ. 2.23 προκύπτει η παρακάτω έκφραση

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{n,n'}^{n'',n'''} [\langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger \rangle + \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger - \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger \rangle] V_{n,n'}^{n'',n'''} [\langle \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} \rangle + \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} - \langle \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} \rangle] \\ &= \sum_{n,n'}^{n'',n'''} \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger \rangle V_{n,n'}^{n'',n'''} \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} + \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger V_{n,n'}^{n'',n'''} \langle \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} \rangle , \end{aligned} \quad (2.24)$$

όπου αγνοήσαμε τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των αντίστοιχων διακυμάνσεων και τον όρο $\langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_{n'}^\dagger \rangle V_{n,n'}^{n'',n'''} \langle \hat{a}_{n''} \hat{a}_{n'''} \rangle$ που αντιστοιχεί στην ενέργεια δημιουργίας του συγκεκριμένου μέσου πεδίου ο οποίος μπορεί να απορροφηθεί από ένα μετασχηματισμό βαθμίδας [30].

Η προσέγγιση μέσου πεδίου δεν είναι απλά μια βολική επιλογή για την επίλυση του συστήματος, αλλά σχετίζεται άμεσα με την ιδέα του αυθόρμητου σπασίματος συμμετρίας. Σημειώνουμε ότι με τον όρο αυτό ονομάζουμε το φαινόμενο, όπου η θεμελιώδης κατάσταση ενός συστήματος έχει χαμηλότερη συμμετρία από τη θεωρία που περιγράφει των δυναμική του συστήματος. Το αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας συνοδεύεται πάντα από την εμφάνιση άμαζων μποζονίων Goldstone. Η επιλογή των μέσων πεδίων και της αντίστοιχης συμμετρίας γίνεται γενικά με βάση τις ιδιομορφίες που εμφανίζονται σε διαταραχτικούς όρους (Feynmann diagrams) του συστήματος των αλληλεπιδρώντων σωματιδίων, οι οποίες και είναι υπεύθυνες για τη μη επιλυσιμότητα της αρχικής Χαμιλτονιανής.

2.5 Περιγραφή συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των θέσεων.

Θεωρούμε σύστημα αλληλεπιδρώντων φερμιονίων σε πλεγματοειδή χώρο το οποίο περιγράφεται από τον παρακάτω Χαμιλτονιανό τελεστή

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_{s, s'} \sum_{\alpha, \beta} \varepsilon \psi_{\mathbf{i}, s, \alpha}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s', \beta} + \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \alpha, \beta} V n_{\mathbf{i}, \alpha} n_{\mathbf{j}, \beta} + J \mathbf{S}_{\mathbf{i}, \alpha} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{j}, \beta}, \quad (2.25)$$

όπου $\varepsilon \equiv \varepsilon_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \alpha, \beta}^{s, s'} = \langle \mathbf{i}, s, \alpha | \hat{T} | \mathbf{j}, s', \beta \rangle$ η ενέργεια μεταφοράς μεταξύ των τροχιακών $|\mathbf{i}, s, \mathbf{i}\rangle$, V και J τα δυναμικά αλληλεπίδρασης φορτίου και εναλλαγής σπιν, ενώ $n_{\mathbf{i}, \alpha} = \sum_s \psi_{\mathbf{i}, s, \alpha}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s, \alpha}$, $\mathbf{S}_{\mathbf{i}, \alpha} = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} \psi_{\mathbf{i}, s, \alpha}^\dagger [\boldsymbol{\sigma}]^{s, s'} \psi_{\mathbf{i}, s', \alpha}$ οι τελεστές τοπικής πυκνότητας φορτίου και σπιν για το τροχιακό α . Συγκεκριμένα θεωρούμε την παρακάτω γενική μορφή για τα δυναμικά αλληλεπίδρασης

$$V \equiv V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \alpha, \beta}^{s, s'} = V_{\mathbf{i}, \alpha, \beta}^0 \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} (1 - \delta_{s, s'} \delta_{\alpha, \beta}) + V_{\mathbf{i}, \alpha, \beta}^1 [\delta_{\mathbf{i}+(\pm 1, 0)} + \delta_{\mathbf{i}+(0, \pm 1)}] + V_{\mathbf{i}, \alpha, \beta}^2 \delta_{\mathbf{i}+(\pm 1, \pm 1)}$$

$$J \equiv J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \alpha, \beta}^{s, s'} = J_{\mathbf{i}, \alpha, \beta}^0 \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} (1 - \delta_{\alpha, \beta}) + J_{\mathbf{i}, \alpha, \beta}^1 [\delta_{\mathbf{i}+(\pm 1, 0)} + \delta_{\mathbf{i}+(0, \pm 1)}] + J_{\mathbf{i}, \alpha, \beta}^2 \delta_{\mathbf{i}+(\pm 1, \pm 1)}.$$

Για συστήματα με μία ενεργειακή ζώνη η παραπάνω Χαμιλτονιανή απλοποιείται ως εξής

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_{s, s'} \varepsilon \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s'} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}} \sum_s U \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s} \psi_{\mathbf{i}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s'}$$

$$+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_{s, s'} \left[V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}{4} \right] \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s} \psi_{\mathbf{j}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s'} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_s 2 \frac{J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}{4} \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s'} \psi_{\mathbf{j}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s}. \quad (2.26)$$

Όπως προαναφέραμε τα συστήματα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων δεν είναι γενικά επιλύσιμα. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιώντας την προσέγγιση μέσου πεδίου, απλοποιούμε το παραπάνω σύστημα σε ένα επιλύσιμο σύστημα μη-αλληλεπιδρώντων σωματιδίων. Σύμφωνα με τη συγκεκριμένη προσέγγιση εφαρμόζουμε την παρακάτω γενική αντικατάσταση

$$\psi_{\mathbf{i}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{j}, s'}^{(\dagger)} = \langle \psi_{\mathbf{i}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{j}, s'}^{(\dagger)} \rangle + \{ \psi_{\mathbf{i}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{j}, s'}^{(\dagger)} - \langle \psi_{\mathbf{i}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{j}, s'}^{(\dagger)} \rangle \}, \quad (2.27)$$

όπου ο όρος $\langle X_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \rangle \equiv \langle \psi_{\mathbf{i}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{j}, s'}^{(\dagger)} \rangle$ αντιστοιχεί στη μέση τιμή του αντίστοιχου τελεστή $X_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}$, ενώ οι όροι της μορφής $\{ \}$ αναφέρονται στις αντίστοιχες διακυμάνσεις. Αγνοώντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διακυμάνσεων προκύπτει η Χαμιλτονιανή του συστήματος στην προσέγγιση μέσου πεδίου. Η γραμμικοποιημένη εξίσωση που προκύπτει περιέχει τους παρακάτω όρους

$$\sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_{s, s'} \left[U_{\mathbf{i}} (1 - \delta_{s, s'}) \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} + V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}{4} \right] \langle \psi_{\mathbf{j}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s} \rangle \psi_{\mathbf{i}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s'}$$

$$\sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, s} \left[-U_{\mathbf{i}} (1 - \delta_{s, s'}) \delta_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} + 2 \frac{J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}{4} \right] \langle \psi_{\mathbf{j}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s} \rangle \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s}$$

$$\sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_{s, s'} - \left[V_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}{4} \right] \langle \psi_{\mathbf{j}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s} \rangle \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s'}$$

$$\sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \sum_s - 2 \frac{J_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}}{4} \langle \psi_{\mathbf{j}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{i}, s'} \rangle \psi_{\mathbf{i}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{j}, s} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{ij} \sum_{ss'} \left[U_i \delta_{ij} (1 - \delta_{ss'}) + V_{ij} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \psi_{j_s'}^\dagger \psi_{i_s}^\dagger \rangle \psi_{i_s} \psi_{j_s'} \\
& \sum_{ij} \sum_s 2 \frac{J_{ij}}{4} \langle \psi_{j_s'}^\dagger \psi_{i_s}^\dagger \rangle \psi_{i_s} \psi_{j_s} .
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Με βάση τους παραπάνω όρους μπορούμε να ορίσουμε τα παρακάτω πεδία

$$\begin{aligned}
\tilde{\mu}_i &= \sum_{j,s} \left[\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + V_{ij} \right] \langle \psi_{j_s}^\dagger \psi_{j_s} \rangle & \tilde{h}_i^\mu &= \sum_{j,ss'} \left[-\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \psi_{j_s}^\dagger [\sigma_\mu]_{ss'} \psi_{j_s} \rangle \\
\tilde{\mu}_{ij} &= -\frac{1}{2} \sum_s \left[V_{ij} + 3 \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \psi_{j_s}^\dagger \psi_{i_s} \rangle & \tilde{h}_{ij}^\mu &= -\frac{1}{2} \sum_{ss'} \left[V_{ij} - \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \psi_{j_s}^\dagger [\sigma_\mu]_{ss'} \psi_{i_s} \rangle \\
\tilde{\Delta}_{ij} &= \sum_{ss'} \left[U_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} (V_{ij} - 3 \frac{J_{ij}}{4}) \right] \langle \psi_{j_s'}^\dagger [i\sigma_y \sigma_0]_{ss'} \psi_{i_s}^\dagger \rangle \\
\tilde{\Delta}_{ij}^\mu &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} \left[V_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \psi_{j_s'}^\dagger [i\sigma_y \sigma_\mu]_{ss'} \psi_{i_s}^\dagger \rangle ,
\end{aligned} \tag{2.30}$$

όπου οι όροι σ_μ με $\mu = x, y, z$ αντιστοιχούν στις μήτρες Pauli . Σημειώνουμε ότι τα παραπάνω πεδία αντιστοιχούν σε τοπικά και εκτεταμένα πεδία φορτίου ($\tilde{\mu}_i$ και $\tilde{\mu}_{ij}$), σε τοπικά και εκτεταμένα μαγνητικά πεδία, και σε singlet (triplet) υπεραγωγία πεδία, $\tilde{\Delta}_{ij}^0$ ($\tilde{\Delta}_{ij}^\mu$).

Εισάγοντας τον παρακάτω σπινόρα σπιν-Nambu

$$\Psi_i^\dagger = \left(\psi_{i,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,\uparrow}, \psi_{i,\downarrow} \right) , \tag{2.31}$$

και τις μήτρες Pauli $\boldsymbol{\tau}$ και $\boldsymbol{\sigma}$ που δρουν στους χώρους Nambu και σπιν αντίστοιχα, η Χαμιλτονιανή Εξ.2.25 αποκτά την παρακάτω συμπαγή μορφή

$$\mathcal{H}^{MF} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \left[\tau_{z(0)} (\tilde{\mu}_{ij}, \tilde{\mathbf{h}}_{ij}) + \tau_{x(y)} (\tau_z \tilde{\Delta}_{ij}, \tilde{\boldsymbol{\Delta}}_{ij}) i\sigma_y \right] \cdot (\sigma_0, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}) \Psi_j , \tag{2.32}$$

όπου $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_x, \tau_z \sigma_y, \sigma_z)$ και τ_0, σ_0 οι μοναδιαίες μήτρες στους χώρους Nambu και σπιν αντίστοιχα, ενώ ο όρος $\frac{1}{2}$ εισάγεται για τον σωστό προσδιορισμό της ενέργειας του συστήματος που εκφράζεται στον χώρο Nambu. Συνεπώς καταλήγουμε στην παρακάτω μορφή για τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j , \tag{2.33}$$

η οποία μπορεί εν γένει εύκολα να επιλυθεί.

Για συγκεκριμένη πλεγματική θέση \mathbf{i}, \mathbf{j} από τους βαθμούς ελευθερίας του φερμιονικού πεδίου προκύπτουν $2^2 \times 2^2 = 16$ ανεξάρτητα πεδία. Οι αντίστοιχοι 16 τελεστές ορίζονται ως $X_{ij}^{l,k} = \Psi_i^{\dagger,l} \Psi_j^k$, όπου $l, k = 1 - 4$. Λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων, οι τελεστές των πεδίων υπακούουν την $gl(4)$ άλγεβρα Lie που ορίζεται από τις μεταθετικές σχέσεις $[X^{l,k}, X^{m,n}] = \delta_{k,m} X^{l,n} - \delta_{l,n} X^{m,k}$, όπου έχουμε αποσύρει τους δείκτες θέσης. Για τον λόγο αυτό ονομάζουμε τα παραπάνω πεδία και φερμιονικά. Ισοδύναμα, για κάθε θέση \mathbf{i}, \mathbf{j} η Χαμιλτονιανή μήτρα ανήκει στην $SU(4)$ ομάδα Lie, $H_{i,j} \in SU(4) \subset GL(4)$, καθώς λόγω της Ερμιτιανής της μορφής ισχύει $\det H_{i,j} = e^{i*\phi}|_{\phi=0} = 1$ ($Tr\{H_{i,j}\} = 0$). Οι 15 γεννήτορες της $su(4)$ άλγεβρας

αποτελούν γραμμικούς συνδυασμούς των 16 γεννητόρων της $gl(4)$ άλγεβρας και μπορούν να εκφραστούν ως γινόμενα των μητρών Pauli που δρουν στους υπόχωρους Nambu και σπιν. Συνεπώς οι Χαμιλτονιανές υπομήτρες για κάθε πλεγματική θέση έχουν την παρακάτω γενική μορφή

$$H_{i,j} = \sum_{g=1}^{15} h_{ij}^g \hat{O}_g, \quad (2.34)$$

όπου οι τελεστές $\hat{O}_g = \tau_n \sigma_p$ αντιστοιχούν στο πεδίο h_{ij}^g . Η συνολική όμως Χαμιλτονιανή μήτρα δρα στον χώρο $U(N) \times SU(4)$ με $N^2 \times 15$ γεννήτορες. Τέλος η παραπάνω περιγραφή μπορεί να επεκταθεί και για πεδία με περισσότερους βαθμούς ελευθερίας. Για παράδειγμα θεωρώντας δύο ενεργειακές ζώνες ή τροχιακά, η σχετική άλγεβρα των Χαμιλτονιανών τελεστών $H_{i,j}$ είναι η $su(8)$.

Η Χαμιλτονιανή Εξ. 2.25 ορίζεται για ένα διαδιάστατο πλεγματικό μοντέλο και επομένως εκδηλώνει τη συμμετρία G του πλέγματος. Η συγκεκριμένη συμμετρία περιορίζει τη χωρική μορφή των μέσων πεδίων Φ_{ij} σε γραμμικούς συνδυασμούς των συναρτήσεων βάσης που αντιστοιχούν σε μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις της συγκεκριμένης ομάδας συμμετρίας [23]. Στη συγκεκριμένη διατριβή εξετάζουμε γενικά συστήματα με τετραγωνική συμμετρία. Η σχετική ομάδα συμμετρίας για διδιάστατα συστήματα τετραγωνικής συμμετρίας είναι η $G \equiv D_4 \sim C_{4u}$ η οποία αποτελείται από 8 στοιχεία που ταξινομούνται σε 5 κλάσεις. Κάθε στοιχείο g μετασχηματίζει τους φερμιονικούς τελεστές και συνεπώς τα μέσα πεδία με τον εξής τρόπο $g\psi_{i,s} = \psi_{\hat{D}(g)i,s} \rightarrow g\Phi_i(\mathbf{x}) = \Phi_i[\hat{D}(g)\mathbf{x}]$, όπου $\hat{D}(g)$ είναι η μητρική αναπαράσταση της ομάδας G στον διδιάστατο χώρο θέσεων [23]. Επίσης έχουμε εισάγει τη μεταβλητή $\mathbf{x} = (x, y) = (\mathbf{j} - \mathbf{i}) \cdot (\hat{x}, \hat{y}) = ma_x + na_y$, όπου $a_x = a_y = a$ οι σταθερές πλέγματος κατά μήκος των αξόνων $x(y)$. Σύμφωνα με το θεμελιώδες θεώρημα της θεωρίας ομάδων, το πλήθος το μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων ισούται με το πλήθος των κλάσεων της ομάδας. Έτσι, η ομάδα D_4 έχει 5 μη-ισοδύναμες, μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις. Η διάσταση n των συγκεκριμένων αναπαραστάσεων προκύπτουν από τον περιορισμό $\sum_i n_i^2 = N$ όπου N ο αριθμός των στοιχείων της ομάδας.

Στον πίνακα 2.1 παρουσιάζουμε τις συναρτήσεις βάσης της ομάδας C_{4u} όπου $\mathbf{x} = \mathbf{j} - \mathbf{i}$. Οι παραπάνω αναπαραστάσεις είναι ορθογώνιες μεταξύ τους, καθώς ικανοποιούν τη σχέση $\sum_j f_n(\mathbf{x}) f_{n'}^*(\mathbf{x}) = \delta_{n,n'} m_n$, όπου m_n είναι η σταθερά κανονικοποίησης για κάθε συνάρτηση. Οι συγκεκριμένες συναρτήσεις που παρουσιάζονται, αναφέρονται σε διαμορφώσεις που περιλαμβάνουν μόνο γειτονικά και αμέσως επόμενα γειτονικά πλεγματικά σημεία. Η επέκταση σε πιο εκτενείς διαμορφώσεις είναι απλή. Σημειώνουμε ότι η E είναι μια διδιάστατη αναπαράσταση όπου οι συναρτήσεις βάσης ($f_{px}(\mathbf{x}), \pm f_{py}(\mathbf{x})$) και ($f_{cs}(\mathbf{x}), \pm f_{sc}(\mathbf{x})$) έχουν διανυσματική μορφή. Οι αντίστοιχες συναρτήσεις μορφής τετραγωνικής συμμετρίας είναι οι $f_{px \pm py}(\mathbf{x}) = i[\delta_{j,i \pm (1,0)} \pm \delta_{j,i \pm (0,1)}]$, $f_{cs+sc}(\mathbf{x}) = \pm i \delta_{j,i \pm (1,1)}$ και $f_{cs-sc}(\mathbf{x}) = \pm i \delta_{j,i \pm (-1,1)}$. Επομένως, τα μέσα πεδία που δρουν στον χώρο Nambu -σπιν έχουν τη συνολική αναπαράσταση $h_i(\mathbf{x})^g = \sum_n h_{i,n}^g f_n(\mathbf{x})$ και αποτελούν γραμμικούς συνδυασμούς των N πεδίων που αντιστοιχούν στην αναπαράσταση \hat{O}_g και την πλεγματική θέση \mathbf{i} .

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τη μορφή των πεδίων που είναι συμβατά με τις αντιμεταθετικές ιδιότητες των φερμιονίων και την απαιτούμενη Ερμιτιανή μορφή της Χαμιλτονιανής μήτρας. Εκφρασμένη στον σπινόρα Εξ. 2.31 η Χαμιλτονιανή μήτρα αποκτά την παρακάτω γενική μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j. \quad (2.35)$$

Οι αντιμεταθετικές ιδιότητες των φερμιονικών τελεστών υπαγορεύουν

$$\tau_x[H_{ij}] \tau_x = -[H_{ij}]^T, \quad (2.36)$$

ενώ η απαίτηση για πραγματικές ιδιότητες οδηγεί στον περιορισμό

	Συνάρτηση πλέγματος	Μη-αναγωγίσιμη αναπαράσταση
$f_s(\mathbf{x})$	$\delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}}$	A_1
$f_{sext}(\mathbf{x})$	$\delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,0)} + \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(0,1)}$	A_1
$f_d(\mathbf{x})$	$\delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,0)} - \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(0,1)}$	B_1
$f_{px}(\mathbf{x})$	$\pm i \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,0)}$	E
$f_{py}(\mathbf{x})$	$\pm i \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(0,1)}$	E
$f_{cc}(\mathbf{x})$	$\delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,1)} + \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,-1)}$	A_1
$f_{ss}(\mathbf{x})$	$\delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,1)} - \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,-1)}$	B_2
$f_{cs}(\mathbf{x})$	$\pm i \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,1)} \mp i \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,-1)}$	E
$f_{sc}(\mathbf{x})$	$\pm i \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,1)} \pm i \delta_{\mathbf{j}\mathbf{i}\pm(1,-1)}$	E

Πίνακας 2.1: Οι συναρτήσεις βάσης εκφρασμένες στον χώρο των θέσεων και οι μη αναγωγίσιμες αναπαράστάσεις της τετραγωνική ομάδα συμμετρίας C_{4u} στις οποίες ανήκουν.

$$[H_{ij}] = [H_{ij}]^\dagger. \quad (2.37)$$

Όπως δείχνουμε αναλυτικότερα παρακάτω, οι δύο παραπάνω απαιτήσεις υπαγορεύουν την παρακάτω γενική μορφή της Χαμιλτονιανής

$$[H_{ij}] = \begin{bmatrix} P_{i,j}^{sp} & \Delta_{i,j}^{sp} \\ \Delta_{i,j}^{sp,\dagger} & -P_{i,j}^{sp,T} \end{bmatrix}, \quad (2.38)$$

όπου $[P_{i,j}^{sp}]$ και $[\Delta_{i,j}^{sp}]$ οι υποπίνακες των πεδίων στο χώρο των θέσεων και του σπιν για το κανάλι ηλεκτρονίου-οπής και ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου αντίστοιχα. Εν συνεχεία διαχειριζόμαστε ξεχωριστά τα υπεραγωγία πεδία ή πεδία ζεύξης από τα πεδία στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Τα τοπικά πεδία ζεύξης ορίζονται από τη δράση τους στους μονοσωματιδιακούς τελεστές

$$\Delta_{i,j}^{s,s'} \psi_{j,s'} \psi_{i,s}. \quad (2.39)$$

Επιπλέον σημειώνουμε με $[\Delta^{sp}]$ τις αντίστοιχες $2N \times 2N$ μήτρες πεδίων που δρουν στον χώρο θέσεων-σπιν, ενώ με $[\Delta_{ij}]$ σημειώνουμε τις 4×4 μήτρες για συγκεκριμένη θέση \mathbf{i}, \mathbf{j} που δρουν στον χώρο Nambu -σπιν. Η συνολική $4N \times 4N$ μήτρα των πεδίων ζεύξης που δρα στον χώρο θέσεων-Nambu -σπιν έχει τη γενική μορφή $[\Delta] = \begin{bmatrix} 0 & \Delta^{sp} \\ \Delta^{sp,\dagger} & 0 \end{bmatrix}$.

Παραπάνω παρουσιάσαμε τη μέθοδο προβολής των $N^2 \times 15$ πεδίων O_{ij} βάσει των 25 γεννητόρων της $su(4)$ άλγεβρας και τις συναρτήσεις βάσης των μη-αναγωγίσιμων αναπαράστάσεων της ομάδας τετραγωνικής συμμετρίας C_4 . Ομοίως είναι δυνατή η προβολή των τοπικών πεδίων στη βάση συναρτήσεων $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}}$, όπου το κυματόνισμα \mathbf{q} ανήκει στην πρώτη ζώνη Brillouin του πλέγματος, οι οποίες καθορίζουν τη διαμόρφωση των πεδίων στον πλεγματοειδή χώρο. Η συγκεκριμένη προβολή ορίζεται μέσω της παρακάτω σχέσης

$$\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} = \frac{1}{2Nm_n} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \text{Tr}\{\hat{O}_{m,p}[\Delta_{ij}]\}, \quad (2.40)$$

όπου $\mathbf{x} = \mathbf{j} - \mathbf{i}$, N το πλήθος των πλεγματοειδών σημείων, ενώ η αναπαράσταση $\hat{O}_{m,p}$ εκφρασμένη στη βάση $\tau\sigma$ δρα στον χώρο $SU(4)$ Nambu -σπιν. Ο δείκτης $m = x, y$ αναφέρεται στον ισο-σπιν χώρο, ενώ ο δείκτης $p = 0, x, y, z$ αναφέρεται στον χώρο του σπιν. Τέλος, ο δείκτης n αναφέρεται

στις συναρτήσεις βάσης της C_4 ομάδας συμμετρίας. Με τον τρόπο αυτό έχουμε ορίσει τα $8N^2$ υπεραγωγίμα πεδία.

Μπορούμε όμως να εφαρμόσουμε και την παρακάτω μερική προβολή ορίζοντας τα παρακάτω πεδία

$$\Delta_p^{\mathbf{q},n} = \frac{1}{\sqrt{2Nm_n}} Tr\{[e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_p] [\Delta^{sp}]\}, \quad (2.41)$$

με απροσδιόριστη φάση. Γενικά μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την πιο κατάλληλη για κάθε περίπτωση προβολή των πεδίων ζεύξης. Σημειώνουμε ότι στους παραπάνω ορισμούς η αναπαράσταση \hat{O}_p αντιστοιχεί σε γεννήτορα του $SU(2)$ χώρου σπιν, ενώ ο όρος $[e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_p]$ αντιστοιχεί σε μια $2N \times 2N$ μήτρα. Αντίστροφα μπορούμε να κατασκευάσουμε τις μήτρες πεδίων ζεύξης βασισμένοι στις συνιστώσες $\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n}$ μέσω της παρακάτω σχέσης

$$\begin{aligned} [\Delta_{ij}] &= \sum_{\mathbf{q},n,m,p} \Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n^*(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}, & [\Delta^{sp}] &= \sum_{\mathbf{q},n} \Delta_p^{\mathbf{q},n} [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_p]^\dagger \\ [\Delta] &= \sum_{\mathbf{q},n,m,p} \Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}]^\dagger. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Εν συνεχεία διερευνούμε τις επιτρεπτές συνιστώσες $\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n}$ βάσεις των δύο περιορισμών που προαναφέραμε. Λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων έχουμε

$$\Delta_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^{s,s'} = -\Delta_{\mathbf{j},\mathbf{i}}^{s',s} \rightarrow [\Delta^{sp}] = -[\Delta^{sp}]^T. \quad (2.43)$$

Έτσι, σύμφωνα με την Εξ. 2.42 προκύπτει

$$[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_S] = -[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_S]^T, \quad (2.44)$$

όπου $\hat{O}_S = i\sigma_y(\sigma_0, \boldsymbol{\sigma})$. Για τις $N \times N$ μήτρες μορφής των πεδίων ισχύει

$$[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x})]^T = [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x})] \quad (2.45)$$

και συνεπώς $[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_p] = -[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_p]^T$. Έτσι προκύπτουν οι ακόλουθοι περιορισμοί $f_n(\mathbf{x}) = [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x})]$ και $f_n(\mathbf{x}) = -[e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x})]$ για τις συναρτήσεις μορφής των singlet και triplet συνιστωσών με αναπαράστασεις $\hat{O}_p = \sigma_y \sigma_0 = -(\sigma_y \sigma_0)^T$ και $\hat{O}_p = i\sigma_y \boldsymbol{\sigma} = (i\sigma_y \boldsymbol{\sigma})^T$ αντίστοιχα. Στην περίπτωση $||[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x})]|| \neq ||[e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x})]||$ και οι δύο τύποι είναι επιτρεπτοί. Συνεπώς λόγω του παραπάνω περιορισμού (Εξ. 2.43), προκύπτουν οι παρακάτω μορφές για τα υπεραγωγίμα πεδία

$$\begin{aligned} H_{sSC}^q &= \Psi_i^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} (f_s + f_{sxt} + f_d + f_{cc} + f_{ss} + f_{px}^! + f_{py}^! + f_{cs}^! + f_{sc}^!) [\Delta_{\mathbb{R}}^q \tau_y \sigma_y + \Delta_{\mathbb{S}}^q \tau_x \sigma_y] \Psi_j \\ H_{tSC}^q &= \Psi_i^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} (f_{sxt} + f_d + f_{cc} + f_{ss} + f_{px}^! + f_{py}^! + f_{cs}^! + f_{sc}^!) [\tau_x (i\sigma_y) \Delta_{\mathbb{R}}^q \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \tau_y (i\sigma_y) \Delta_{\mathbb{S}}^q \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}] \Psi_j, \end{aligned}$$

όπου με πράσινο χρώμα σημειώνουμε τις συναρτήσεις μορφής που δεν επιτρέπονται για διαμόρφωση κατά $q = (\pi, \pi)$, ενώ με κόκκινο εκείνες που δεν επιτρέπονται για διαμόρφωση κατά $q = 0$. Ομοίως με κυανό χρώμα σημειώνουμε τις συναρτήσεις που δεν επιτρέπονται για διαμόρφωση κατά $q = (0, \pi)$ ή $q = (\pi, 0)$, ενώ με μωβ χρώμα αυτές που δεν επιτρέπονται για $q = (\pi, \pi)$ ή $q = 0$. Για άλλα κυματανύσματα διαμόρφωσης όλες οι συναρτήσεις μορφής μπορούν να έχουν και singlet και

triplet συνιστώσες. Σημείωση: οι όροι με δείκτη [!] εναλλάσσονται όταν $\mathfrak{R} \leftrightarrow \mathfrak{I}$.

Επιπλέον, η απαίτηση για Ερμιτιανή Χαμιλτονιανή μήτρα οδηγεί στην παρακάτω μορφή για τη μήτρα των υπεραγωγίμων πεδίων

$$\Delta = \Delta^\dagger \rightarrow \left[\sum_{\mathbf{q},n} \Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p} \right] = \left[\sum_{\mathbf{q},n} \Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p} \right]^\dagger, \rightarrow$$

$$\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} f_n(\mathbf{x}) = \Delta_{m,p}^{-\mathbf{q},n} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n^*(-\mathbf{x}), \quad (2.46)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις ιδιότητες $\hat{O}_{m,p} = \hat{O}_{m,p}^\dagger$ και $\sum_{\mathbf{i}} e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{i}} = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$. Από τον παραπάνω περιορισμό Εξ. 2.46, προκύπτει ότι για $\mathbf{q} = 0$ οι πραγματικές (φανταστικές) συνιστώσες αντιστοιχούν σε πεδία (αντι-)συμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό χωρικής αντιστροφής, καθώς για τις αντίστοιχες συναρτήσεις μορφής ισχύει $f_n(\mathbf{x}) = -f_n^*(\mathbf{x})$ ($f_n(\mathbf{x}) = f_n^*(\mathbf{x})$).

Στην προσέγγιση μέσου πεδίου τα παραπάνω πεδία προκύπτουν ως εσωτερικά πεδία του συστήματος λόγω των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των σωματιδίων. Έτσι, στην περίπτωση αυτή τα πεδία αυτά αντιστοιχούν στις ακόλουθες θερμοδυναμικές μέσες τιμές πολλαπλασιασμένες με το αντίστοιχο δυναμικό αλληλεπίδρασης

$$\tilde{\Delta}_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^{s,s'} = \langle \psi_{\mathbf{i},s}^\dagger \psi_{\mathbf{j},s'}^\dagger \rangle = \frac{1}{Z} Tr \{ \Psi^\dagger [\delta_{\mathbf{i},\mathbf{j}}] [(\tau_x + i\tau_y)(\sigma_0 + \sigma_x)]_{s,s'} \Psi e^{-\beta H} \}. \quad (2.47)$$

Όπως προαναφέραμε τα δυναμικά αλληλεπίδρασης σχετίζονται με συγκεκριμένα μέσα πεδία

$$\tilde{\Delta}_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^0 = \frac{1}{2} \left[U_{\mathbf{i}} \delta_{\mathbf{i},\mathbf{j}} + \frac{1}{2} (V_{\mathbf{i},\mathbf{j}} - 3 \frac{J_{\mathbf{i},\mathbf{j}}}{4}) \right] \langle \Psi_{\mathbf{i}}^\dagger [i\tau_y(\tau_x)\sigma_y\sigma_0] \Psi_{\mathbf{j}} \rangle$$

$$\tilde{\Delta}_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^\mu = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} (V_{\mathbf{i},\mathbf{j}} + \frac{J_{\mathbf{i},\mathbf{j}}}{4}) \right] \langle \Psi_{\mathbf{i}}^\dagger [\tau_x(\tau_y)i\sigma_y\sigma_\mu] \Psi_{\mathbf{j}} \rangle \quad (2.48)$$

που μπορούν να θεωρηθούν ως προβολές των τοπικών πεδίων στον Nambu -σπιν χώρο

$$\tilde{\Delta}_{\mathbf{i},\mathbf{j},m,p} = \frac{1}{2} V_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^{m,p} \langle \Psi_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{O}_{m,p} \Psi_{\mathbf{j}} \rangle. \quad (2.49)$$

Προφανώς τα μέσα πεδία προβάλλονται με τον ίδιο τρόπο που παρουσιάσαμε παραπάνω και υπόκεινται στους ίδιους περιορισμούς

$$\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} = \frac{1}{2Nm_n Z} \sum_{\mathbf{i},\mathbf{x}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \frac{1}{2} V_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^{m,p} Tr \{ \Psi_{\mathbf{i}}^\dagger \hat{O}_{m,p} \Psi_{\mathbf{j}} e^{-\beta H} \}. \quad (2.50)$$

Συνεχίζουμε με τα πεδία στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Ομοίως ορίζουμε τα αντίστοιχα πεδία από τη δράση τους στους μονοσωματιδιακούς τελεστές

$$P_{\mathbf{i},\mathbf{j}}^{s,s'} \psi_{\mathbf{j},s'}^\dagger \psi_{\mathbf{i},s} \quad (2.51)$$

και αντίστοιχα ορίζουμε τις $2N \times 2N$ [P^{sp}] μήτρες πεδίων που δρουν στον χώρο θέσεων-σπιν, τις 4×4 [$P_{\mathbf{i},\mathbf{j}}$] μήτρες στη θέση \mathbf{i}, \mathbf{j} και τη συνολική $4N \times 4N$ [P] μήτρα των πεδίων στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Τα τοπικά πεδία προβάλλονται παρομοίως στις παρακάτω συνιστώσες

$$P_{m,p}^{\mathbf{q},n} = \frac{1}{2Nm_n} \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{x}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \text{Tr}\{\hat{O}_{m,p}[P_{ij}]\}, \quad (2.52)$$

όπου $\mathbf{x} = (x, y) = (\mathbf{j} - \mathbf{i}) \cdot (\hat{x}, \hat{y})$, $\mu=0, z$ με $m = 0 (m = z)$ για τα (αντί-)συμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμο φορτίου πεδία και $p = 0, x, y, z$, ενώ ο δείκτης n αναφέρεται στις συναρτήσεις βάσης της ομάδας C_4 και $\hat{O}_{m,p} \in SU(4)$ οι αναπαραστάσεις στον χώρο Nambu -σπιν εκφρασμένες στη βάση $\tau\sigma$. Ακολουθώντας την αντίστροφη πορεία, μέσω της παρακάτω σχέσης προκύπτουν οι μήτρες των πεδίων βάσει των συνιστωσών τους $P_{m,p}^{\mathbf{q},n}$

$$[P_{ij}] = \sum_{\mathbf{q}, n, m, p} P_{m,p}^{\mathbf{q},n} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}, \quad [P^{sp}] = \sum_{\mathbf{q}, n} P_p^{\mathbf{q},n} [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_p]^\dagger, \quad (2.53)$$

$$[P] = \sum_{\mathbf{q}, n, m, p} P_{m,p}^{\mathbf{q},n} [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}]^\dagger.$$

Παρακάτω διερευνούμε τις επιτρεπτές $P_{m,p}^{\mathbf{q},n}$ συνιστώσες. Η απαίτηση για Ερμιτιανή Χαμιλτονιανή μήτρα συνεπάγεται την ίδια απαίτηση για τη μήτρα $[P^{sp}]$

$$[P^{sp}] = [P^{sp}]^\dagger. \quad (2.54)$$

Επομένως από τον ορισμό της μήτρας $[P^{sp}]$ και τη σχέση $[f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_S]^T = [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_S^T]$ προκύπτει

$$\left[\sum_{\mathbf{q}, n} P_S^{\mathbf{q},n} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_S \right] = \left[\sum_{\mathbf{q}, n} P_S^{\mathbf{q},n} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_S \right]^\dagger, \quad P_S^{\mathbf{q},n} f_n(\mathbf{x}) = P_S^{-\mathbf{q},n,*} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n^*(-\mathbf{x}), \quad (2.55)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τις σχέσεις $\hat{O}_S = \hat{O}_S^\dagger$ και $\sum_{\mathbf{i}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{i}} = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$. Έτσι, για διαμόρφωση $\mathbf{q} = 0$ η Εξ. 2.55 υπαγορεύει ότι πεδία (αντι-)συμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό χωρικής αντιστροφής έχουν μόνο πραγματικές (φανταστικές) συνιστώσες.

Επιπροσθέτως λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων προκύπτει

$$P_{i,j}^{s,s'} = -P_{j,i}^{s',s} \quad (2.56)$$

και συνεπώς η συνολική μήτρα είναι της παρακάτω μορφής

$$[P] = \begin{bmatrix} [P^{sp}] & 0 \\ 0 & -[P^{sp}]^T \end{bmatrix}. \quad (2.57)$$

Από την παραπάνω σχέση για τη μήτρα $[P]$ και συνεπώς από τις αντιμεταθετικές ιδιοότητες των φερμιονίων προκύπτει $\text{Tr}\{H\} = 0$ για τη συνολική Χαμιλτονιανή μήτρα η οποία συνεπώς ανήκει στην $SU(4)$ υποομάδα της $U(4)$. Ισοδύναμα γράφουμε

$$\begin{aligned} \tau_x P \tau_x = -P^T &\Rightarrow [\tau_x f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p} \tau_x] = -e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}^T \\ &\Rightarrow [f_n(\mathbf{x}) \tau_x \hat{O}_m \tau_x \hat{O}_p] = -e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_m^T \hat{O}_p^T \\ &\Rightarrow [f_n(\mathbf{x}) \tau_x \hat{O}_m \tau_x \hat{O}_p] = -e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_m \hat{O}_p^T, \end{aligned} \quad (2.58)$$

καθώς για τα πεδία στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου οι σχετικές αναπαραστάσεις είναι οι $\hat{O}_m = \tau_{0,(z)}$ για τις οποίες ισχύει $\hat{O}_m = \hat{O}_m^T$. Έτσι, για $\mathbf{q} = 0$ τα (αντι-)συμμετρικά στη χωρική αντιστροφή πεδία σχετίζονται με τις μήτρες $\tau_z(\tau_0)$ στον χώρο Nambu

καθώς $\tau_x \hat{O}_m \tau_x = \pm \hat{O}_m$ με + για $\hat{O}_m = \tau_0$, - για $\hat{O}_m = \tau_z$ και $\hat{O}_p = \hat{O}_p^T$ (εκτός από \hat{O}_y). Το αντίθετο ισχύει για triplet πεδία κατά τον ψ άξονα του χώρου σπιν επειδή $\hat{O}_y = -\hat{O}_y^T$. Για τον συγκεκριμένο λόγο ορίζουμε

$$\tilde{\sigma} = (\sigma_x, \tau_z \sigma_y, \sigma_z), \quad (2.59)$$

ώστε τα πεδία P να παρουσιάζονται σε μια κομψή μορφή. Οι παραπάνω περιορισμοί οδηγούν στις παρακάτω επιτρεπτές συνιστώσες των πεδίων για τα 4 αναλλοίωτα ως προς τη χωρική αντιστροφή κυματανύσματα διαμόρφωσης για τα οποία $P_p^{q,n} \equiv P_p^{-q,n}$

$$\begin{aligned} H_{PH}^0 &= \Psi_i^\dagger [\tau_z (f_s + f_d + f_{sext} + f_{cc} + f_{ss}) + i\tau_0 (f_{px} + f_{py} + f_{cs} + f_{sc})] P_{i,p}^0 \tilde{\sigma}_p \Psi_j \\ H_{PH}^{(0,\pi)} &= \Psi_i^\dagger [\tau_z (f_s + f_{py} + f_d + f_{sext} + f_{cs} + f_{sc}) + i\tau_0 (f_{px} + f_d + f_{sext} + f_{cc} + f_{ss})] P_{i,p}^{(0,\pi)} \tilde{\sigma}_p \Psi_j \\ H_{PH}^{(\pi,0)} &= \Psi_i^\dagger [\tau_z (f_s + f_{px} + f_d + f_{sext} + f_{cs} + f_{sc}) + i\tau_0 (f_{py} + f_d + f_{sext} + f_{cc} + f_{ss})] P_{i,p}^{(\pi,0)} \tilde{\sigma}_p \Psi_j \\ H_{PH}^Q &= \Psi_i^\dagger [\tau_z (f_s + f_{px} + f_{py} + f_{cc} + f_{ss}) + i\tau_0 (f_d + f_{sext} + f_{cs} + f_{sc})] P_{i,p}^Q \tilde{\sigma}_p \Psi_j. \end{aligned}$$

Τα τοπικά πεδία στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου μπορούν να προκύψουν ως εσωτερικά πεδία λόγω των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων που τα αποτελούν. Στην προσέγγιση μέσου πεδίου τα πεδία αυτά προκύπτουν ως θερμοδυναμικά αναμενόμενες τιμές πολλαπλασιασμένες από το αντίστοιχο δυναμικό αλληλεπίδρασης

$$\tilde{P}_{i,j}^{s,s'} = \langle \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'} \rangle = \frac{1}{2Nm_n Z} Tr \{ \Psi^\dagger [\delta_{i,j}] [(\tau_0 + \tau_z)(\sigma_0 + \sigma_x)]_{s,s'} \Psi e^{-\beta H} \}. \quad (2.60)$$

Τα δυναμικά για κάθε μέσο πεδίο σχετίζονται με τα δυναμικά αλληλεπίδρασης ως εξής

$$\begin{aligned} \tilde{P}_{ij}^0 &= \frac{1}{2} \left[\sum_j (U_i \delta_{ij} + V_{ij}) - V_{ij} - 3 \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \Psi_i^\dagger [\tau_0 (\tau_z) \sigma_0] \Psi_j \rangle \\ \tilde{P}_{ij}^\mu &= \frac{1}{2} \left[\sum_j (-U_i \delta_{ij} + \frac{J_{ij}}{4}) - V_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right] \langle \Psi_i^\dagger [\tau_0 (\tau_z) \sigma^\mu] \Psi_j \rangle \\ \tilde{P}_{ij,m,p} &= \frac{1}{2} V_{i,j}^{m,p} \langle \Psi_i^\dagger \hat{O}_{m,p} \Psi_j \rangle. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Σημειώνουμε ότι τα δυναμικά κάθε πεδίου προκύπτουν με βάση την αναπαράστασή τους στους χώρους Nambu και C_4 και όχι με τη χωρική τους διαμόρφωση. Οι συνιστώσες των πεδίων αυτών προκύπτουν ακριβώς όπως και για τα εξωτερικώς εφαρμοζόμενα πεδία

$$\tilde{P}_{m,p}^{q,n} = \frac{V_{i,j}^{m,p}}{2Nm_n Z} Tr \{ \Psi^\dagger [e^{iq \cdot i} f_n(\mathbf{x})] \hat{O}_{m,p}^n \Psi e^{-\beta H} \}. \quad (2.62)$$

Συνολικά προκύπτουν οι παρακάτω περιορισμοί για τα πεδία. Αρχικά λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων

$$\begin{aligned} \tau_x [H_{ij}] \tau_x &= -[H_{ij}]^T \Rightarrow \begin{bmatrix} P^{sp} & \Delta^{sp} \\ \Delta^{sp'} & P^{sp'} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} P^{sp'T} & \Delta^{sp'T} \\ \Delta^{sp'T} & P^{sp'T} \end{bmatrix} \\ P^{sp'} &= -P^{sp'T} \quad // \quad \Delta^{sp} = -\Delta^{sp'T} \\ [f_n(\mathbf{x}) \tau_x \hat{O}_m \tau_x \hat{O}_p] &= -e^{iq \cdot \mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_m \hat{O}_p^T \quad // \quad [f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_p] = -[e^{-iq \cdot \mathbf{x}} f_n(-\mathbf{x}) \hat{O}_p^T]. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Ο μετασχηματισμός αντιμετάθεσης ισοδυναμεί με αντιστροφή στον χώρο του σπιν και τον χώρο των θέσεων. Ο συγκεκριμένος μετασχηματισμός συντελείται μέσω μετάθεσης της Χαμιλτονιανής μήτρας στον αντίστοιχο χώρο θέσεων-σπιν. Ο συγκεκριμένος περιορισμός καθορίζει τον μετασχηματισμό των υπεραγωγίμων πεδίων Δ σε στροφές στον χώρο του σπιν βάσει των αντίστοιχων συναρτήσεων μορφής $f_n(\mathbf{x})$ και αντίστροφα. Τα πεδία στο κανάλι ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου διαφεύγουν του συγκεκριμένου περιορισμού, καθώς λόγω του χώρου Nambu τα πεδία που συνδέονται μέσω του μετασχηματισμού αντιμετάθεσης είναι ανεξάρτητα. Αντιθέτως τα υπεραγωγίμα πεδία δε βλέπουν τον επιπλέον βαθμό ελευθερίας του χώρου Nambu. Τέλος υπενθυμίζουμε ότι οι αντιμεταθετικές ιδιοτήτες των φερμιονίων οδηγούν στην εισαγωγή του όρου $\tilde{\sigma}$. Η ερμιτιανή απαίτηση περιορίζει τη Χαμιλτονιανή μήτρα στην παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} [H_{ij}] &= [H_{ij}]^\dagger \Rightarrow \begin{bmatrix} P^{sp} & \Delta^{sp} \\ \Delta^{sp'} & P^{sp'} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P^{sp\dagger} & \Delta^{sp'\dagger} \\ \Delta^{sp\dagger} & P^{sp'\dagger} \end{bmatrix} \\ P^{sp} &= P^{sp\dagger} \quad // \quad \Delta^{sp'} = \Delta^{sp'\dagger} \\ P_p^{\mathbf{q},n} f_n(\mathbf{x}) &= P_S^{-\mathbf{q},n,*} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n^*(-\mathbf{x}) \quad // \quad \Delta_S^{\mathbf{q},n} f_n(\mathbf{x}) = \Delta_S^{-\mathbf{q},n,*} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} f_n^*(-\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Ο τελεστής ερμιτιανού μετασχηματισμού \dagger ισοδυναμεί με αντιστροφή της φάσης των πεδίων. Για τον λόγο αυτό ο περιορισμός αυτός επηρεάζει τα πεδία P τα οποία δεν καθορίζονται από τη φάση τους. Αντιθέτως τα υπεραγωγίμα πεδία μετασχηματίζονται σε ανεξάρτητες συνιστώσες και γι' αυτό διαφεύγουν του συγκεκριμένου περιορισμού. Συνοψίζοντας, η Χαμιλτονιανή μήτρα στον χώρο των θέσεων έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [H_{ij}] \Psi_j = \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{q},m,p,n} \Psi_i^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) [P_{m,p}^{\mathbf{q},n} \hat{O}_{m,p}^P + \Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} \hat{O}_{m,p}^\Delta] \Psi_j \\ &= \sum_{i,j} \sum_{\mathbf{q},m,p,n} \Psi_i^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) [\Phi_{m,p}^{\mathbf{q},n} \hat{O}_{m,p}] \Psi_j = \sum_{\mathbf{q},m,p,n} \Phi_{m,p}^{\mathbf{q},n} \Psi^\dagger [\hat{O}_{m,p}^{\mathbf{q},n}] \Psi, \end{aligned} \quad (2.65)$$

όπου οι συνιστώσες $\Phi_{m,p}^{\mathbf{q},n}$ αναφέρονται, είτε σε εξωτερικώς εφαρμοζόμενα πεδία, είτε σε εσωτερικά μέσα πεδία. Παραπάνω έχουμε εισάγει την $4N \times 4N$ μήτρα $[\hat{O}_{m,p}^{\mathbf{q},n}] = [e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x})] \hat{O}_{m,p}$ και τον $4N$ -διάστατο σπινορα Ψ που περιλαμβάνει όλα τα πλεγματικά σημεία. Επομένως λόγω των παραπάνω περιορισμών οι συνιστώσες $\Phi_{m,p}^{\mathbf{q},n}$ των πεδίων είναι λιγότερες από $15N^2$. Τα μέσα πεδία καθορίζονται από τις παρακάτω εξισώσεις αυτοσυνέπειας

$$\begin{aligned} \Phi_{m,p}^{\mathbf{q},n} &= \frac{1}{2Nm_n} \sum_{i,\mathbf{x}} V_{ij}^{m,p} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \langle \Psi_i^\dagger \hat{O}_{m,p} \Psi_j \rangle \rightarrow \\ &= \frac{1}{2Nm_n \beta} \sum_{i,j,i\omega_n} Tr \{ e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{i},\mathbf{j}) V_{i,j}^{m,p} \hat{O}_{m,p}^n \mathbf{G}(\mathbf{i},\mathbf{j},i\omega_n) \} \rightarrow \\ &= \frac{1}{2Nm_n} \sum_{i,j,p} \left[U_{p,i}^\dagger [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{i},\mathbf{j}) V_{i,j}^{m,p} \hat{O}_{m,p}^n]_{i,j} U_{j,p} \right]_{pp} n_F(E_p) \\ &= \frac{1}{2Nm_n} \sum_p \left[U^\dagger [\hat{O}_{m,p}^{\mathbf{q},n}] U \right]_{pp} n_F(E_p), \end{aligned} \quad (2.66)$$

όπου $\mathbf{G}(\mathbf{i},\mathbf{j},i\omega_n)$ η μήτρα Green, ενώ U και E οι μήτρες ιδιοδιανυσμάτων και ιδιοενεργειών του συστήματος που ορίζονται σύμφωνα με τις παρακάτω εξισώσεις

$$\sum_{j'} [i\omega_n \delta_{i,j'} - H_{i,j'}] \mathbf{G}(j',\mathbf{j},i\omega_n) = \delta_{i,j} \quad U^\dagger H U = E. \quad (2.67)$$

Τα δυναμικά για κάθε μέσο πεδίο σχετίζονται με τα δυναμικά αλληλεπίδρασης των σωματιδίων του συστήματος ως εξής

$$\begin{aligned}
V_{ij}^{x(y),0} &= \left[U_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} (V_{ij} - 3 \frac{J_{ij}}{4}) \right] & V_{ij}^{x(y),\mu} &= \frac{1}{2} \left[V_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right] \\
V_{ij}^{z(0),0} &= \left[\sum_j \left(\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + V_{ij} \right) - \frac{1}{2} (V_{ij} + 3 \frac{J_{ij}}{4}) \right] \\
V_{ij}^{z(0),\mu} &= \left[\sum_j \left(-\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right) - \frac{1}{2} (V_{ij} - \frac{J_{ij}}{4}) \right].
\end{aligned} \tag{2.68}$$

Ισοδύναμα, μπορούμε να ορίσουμε τις ακόλουθες συνιστώσες των πεδίων

$$\begin{aligned}
\Phi_{m,p}^{i,n} &= \frac{1}{2m_n} \sum_{\mathbf{x}} V_{ij}^{m,p} f_n(\mathbf{x}) \langle \Psi_i^\dagger \hat{O}_{m,p} \Psi_j \rangle \rightarrow \\
&= \frac{1}{2m_n} \sum_{j,p} \left[U_{p,i}^\dagger [f_n(\mathbf{i}j) V_{i,j}^{m,p} \hat{O}_{m,p}^n]_{i,j} U_{j,p} \right]_{pp} n_F(E_p),
\end{aligned} \tag{2.69}$$

ενώ ενεργειακό φάσμα E_n των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων και οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις $U_{i,n}$ ενός συστήματος που περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή Εξ.2.65 προσδιορίζονται από την επίλυση των παρακάτω εξισώσεων ιδιότητων

$$\sum_j H_{ij} U_{j,n} = E_n U_{i,n} \rightarrow U^\dagger [H] U = [E]. \tag{2.70}$$

Η Εξ. 2.65 επιλύεται αυτοσυνεπώς ως προς τα μέσα πεδία μέσω της διαδικασίας που περιγράφουμε παρακάτω.

- Θεωρούμε κατάλληλες αρχικές τιμές για τα μέσα πεδία. Επιλέγουμε δηλαδή το σημείο $(\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n}, P_{m,p}^{\mathbf{q},n})$ εκκίνησης της αυτοσυνεπούς διαδικασίας.
- Κατασκευάζουμε τις μητρες $[\Delta] = \sum_{\mathbf{q},n,m,p} \Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n} [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}]$ και $[P] = \sum_{\mathbf{q},n,m,p} P_{m,p}^{\mathbf{q},n} [e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \hat{O}_{m,p}]$ που περιλαμβάνουν όλα τα πεδία, είτε εσωτερικά (μέσα), είτε εξωτερικώς εφαρμοζόμενα, είτε εγγενή του συστήματος. Κατασκευάζουμε έτσι τη συνολική Χαμιλτονιανή μητρα $[H]$.
- Υπολογίζουμε τις ιδιοενέργειες και τα ιδιοδιανύσματα του συστήματος επιλύοντας την εξίσωση ιδιότητων Εξ. 2.70
- Υπολογίζουμε τις νέες τιμές των μέσων πεδίων, είτε μέσω των αυτοσυνεπών εξισώσεων Εξ. 2.66 ή Εξ. 2.69 για τις συνιστώσες των μέσων πεδίων, είτε μέσω των Εξ. 2.47 και Εξ. 2.60 για τα τοπικά μέσα πεδία $\tilde{\Delta}_{i,j}^{s,s'}$ και $\tilde{P}_{i,j}^{s,s'}$.

Επαναλαμβάνουμε τα βήματα 2-4 μέχρι η τιμή όλων των μέσων πεδίων να συγκλίνει σε μια τιμή, να συγκλίνουμε δηλαδή σε ένα σημείο $(\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n}, P_{m,p}^{\mathbf{q},n})$ στον χώρο των πεδίων. Η σύγκλιση επιτυγχάνεται, όταν η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών σημείων $(\Delta_{m,p}^{\mathbf{q},n}, P_{m,p}^{\mathbf{q},n})$ στον χώρο των πεδίων γίνει μικρότερη από ένα προκαθορισμένο όριο.

2.6 Περιγραφή συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των θέσεων-ορμών

Στην προηγούμενη ενότητα περιγράψαμε το σύστημα αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των θέσεων. Η συγκεκριμένη περιγραφή μας δίνει τη δυνατότητα να μελετήσουμε φαινόμενα στο σύνορο των υπό εξέταση συστημάτων (boundary effects). Στην περίπτωση όμως που δε μας ενδιαφέρουν τα φαινόμενα αυτά είναι χρήσιμο να περιγράψουμε τα συγκεκριμένα συστήματα στον χώρο των ορμών καθώς η ορμή αποτελεί διατηρήσιμη ποσότητα σε συστήματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Παρόλο που επί της αρχής η ποσότητα πληροφορίας που αποκτάται από την επίλυση του συστήματος, είτε στον χώρο των θέσεων, είτε στον χώρο των ορμών είναι ίδια, στη δεύτερη περίπτωση μπορούμε να παραλείψουμε την πληροφορία που δε μας ενδιαφέρει. Αυτή η δυνατότητα μας δίνεται όταν εργαζόμαστε στον χώρο των ορμών καθώς τα κυματανύσματα διαμόρφωσης \mathbf{q} αποτελούν αναλλοίωτες ποσότητες και συνεπώς οι συνιστώσες $\Phi_{m,p,l}^{\mathbf{q},n}$ των πεδίων δεν αλληλεπιδρούν. Με τον τρόπο αυτό μειώνονται δραστικά οι απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ και χρόνο για την επίλυση του εκάστοτε συστήματος. Όμως στην περίπτωση ετεροδομών ο μετασχηματισμός στον χώρο των ορμών επιτρέπεται μόνο για τις συνιστώσες που είναι παράλληλες στο επίπεδο των διεπαφών.

Για τους παραπάνω λόγους στην παρούσα ενότητα παρουσιάζουμε την περιγραφή διδιάστατων συστημάτων αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο θέσεων (κατά τον x άξονα) - ορμών (κατά τον y άξονα παράλληλο των διεπαφών). Στην περίπτωση αυτή η συνιστώσα της ορμής k_y διατηρείται και συνεπώς μπορούμε να εφαρμόσουμε τον αντίστοιχο μετασχηματισμό Fourier στην περιγραφή του συστήματος στον χώρο των θέσεων. Αυτό επιτυγχάνεται εφαρμόζοντας την παρακάτω αντικατάσταση για τους μονοσωματιδιακούς τελεστές

$$\psi_{i_x, i_y, s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k_y=1}^{N_y} e^{-ik_y i_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger, \quad \psi_{i_x, i_y, s} = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k_y=1}^{N_y} e^{ik_y i_y} \psi_{i_x, k_y, s}, \quad (2.71)$$

όπου η ορμή $k_y = -\pi + \frac{2\pi n}{N_y}$ ανήκει στο διάστημα $[-\pi, \pi)$ με $n = 0 - N_y - 1$ και N_y τα πλεγματικά σημεία ή αντίστοιχα η διάσταση του συστήματος κατά τον y άξονα. Εισάγοντας τους τελεστές Εξ. 2.71 στη Χαμιλτονιανή Εξ. 2.26 προκύπτει

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i_x, j_x} \sum_{\delta_y} \sum_{k_y} \sum_{s, s'} \varepsilon e^{-ik_y \delta_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{j_x, k_y, s'} \\ & + \frac{1}{N_y} \sum_{i_x} \sum_{k_y} \sum_{k'_y, k''_y} \sum_s U_{i_x} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{i_x, k_y + k'_y - k''_y, s} \psi_{i_x, k'_y, s'}^\dagger \psi_{i_x, k''_y, s'} \\ & + \frac{1}{N_y} \sum_{i_x, j_x} \sum_{k_y, \delta_y} \sum_{k'_y, k''_y} \sum_{s, s'} \left[V_{i_x, j_x} + (-1)^{s+s'} J_{i_x, j_x} \right] e^{i(k'_y - k''_y) \delta_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{i_x, k_y + k'_y - k''_y, s} \psi_{j_x, k'_y, s'}^\dagger \psi_{j_x, k''_y, s'} \\ & + \frac{1}{N_y} \sum_{i_x, j_x} \sum_{\delta_y} \sum_{k_y} \sum_{k'_y, k''_y} \sum_{s, s'} \frac{J_{i_x, j_x}}{4} e^{i(k'_y - k''_y) \delta_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{i_x, k_y + k'_y - k''_y, s'} \psi_{j_x, k'_y, s'}^\dagger \psi_{j_x, k''_y, s'} \end{aligned} \quad (2.72)$$

όπου $\delta_y = i_y - j_y$, ενώ κάναμε χρήση της εξίσωσης ορθογωνιότητας των τριγωνομετρικών συναρτήσεων $\sum_{i_y} e^{-i(k_y - k'_y) i_y} = N_y \delta_{k_y, k'_y}$. Γραμμικοποιούμε την παραπάνω Χαμιλτονιανή αντικαθιστώντας

$$\psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} = \langle \psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} \rangle + \{ \psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} - \langle \psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} \rangle \}, \quad (2.73)$$

και αγνοούμε αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σχετικών διακυμάνσεων (προσέγγιση μέσου πεδίου). Αντικαθιστώντας $k'_y - k''_y = q_y$ προκύπτουν οι παρακάτω όροι

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} \left[U_i (1 - \delta_{ss'}) \delta_{i,j} + \left[V_{ij} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{iq_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s} \rangle > \psi_{i, k_y, s'}^\dagger \psi_{i, k_y, s'} \\
& \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} \left[-U_i \delta_{i,j} + 2 \frac{J_{ij}}{4} e^{iq_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s'} \rangle > \psi_{i, k_y + q_y, s'}^\dagger \psi_{i, k_y, s} \\
& - \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} \left[V_{ij} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{i, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s'} \rangle > e^{-ik_y \delta_y} \psi_{j, k_y + q_y, s'}^\dagger \psi_{i, k_y, s} + \\
& - \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} 2 \frac{J_{ij}}{4} e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{i, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s} \rangle > e^{-ik_y \delta_y} \psi_{j, k_y + q_y, s'}^\dagger \psi_{i, k_y, s'} , \tag{2.74}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} \left(\left[U_i \delta_{ij} (1 - \delta_{s, s'}) + \left[V_{ij} + (-1)^{s-s'} \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik'_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j, -k'_y, s'} \psi_{i, k'_y + q_y, s} \rangle \right. \\
& \quad \left. + 2 \frac{J_{ij}}{4} (1 - \delta_{s, s'}) e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{j, -k'_y, s} \psi_{i, k'_y + q_y, s'} \rangle \right) e^{-ik_y \delta_y} \psi_{i, k_y, s}^\dagger \psi_{j, -k_y + q_y, s'} ,
\end{aligned}$$

όπου παραλείπουμε από δω και στο εξής τον δείκτη x στις συντεταγμένες i, j . Με βάση τους παραπάνω όρους ορίζουμε τα παρακάτω πεδία που χαρακτηρίζονται από το κυματόνυσμα διαμόρφωσης q_y

$$\begin{aligned}
\tilde{\mu}_i^{q_y} &= \frac{1}{N_y} \sum_{k'_y, s} \sum_{j, \delta_y} \left[\frac{U_i}{2} \delta_{i,j} + V_{ij} e^{iq_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s} \rangle \\
\tilde{h}_i^{\mu, q_y} &= \frac{1}{N_y} \sum_{k'_y, s, s'} \sum_{j, \delta_y} \left[-\frac{U_i}{2} \delta_{i,j} + \frac{J_{ij}}{4} e^{iq_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j, k'_y, s}^\dagger [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{j, k'_y + q_y, s'} \rangle \\
\tilde{\mu}_{ij}^{k_y, q_y} &= -\frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y, s} \sum_{j, \delta_y} \left[V_{ij} + 3 \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{i, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s} \rangle > e^{-ik_y \delta_y} \\
\tilde{h}_{ij}^{\mu, k_y, q_y} &= -\frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y, s, s'} \sum_{j, \delta_y} \left[V_{ij} - \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{i, k'_y, s}^\dagger [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{j, k'_y + q_y, s'} \rangle > e^{-ik_y \delta_y} \\
\tilde{\Delta}_{ij}^{0, k_y, q_y} &= \frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y, s} \sum_{j, \delta_y} \left[U_i \delta_{i,j} + \left[V_{ij} - 3 \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik'_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j, -k'_y + q_y, s'} \psi_{i, k'_y, s} \rangle > e^{-ik_y \delta_y} \\
\tilde{\Delta}_{ij}^{\mu, k_y, q_y} &= \frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y, s, s'} \sum_{j, \delta_y} \left[V_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{j, -k'_y + q_y, s'} [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{i, k'_y, s} \rangle > e^{-ik_y \delta_y} . \tag{2.75}
\end{aligned}$$

Εισάγοντας τον παρακάτω σπινόρα για συγκεκριμένο κυματόνυσμα διαμόρφωσης q_y

$$\Psi_{i, k_y, q_y}^\dagger = \left(\psi_{i, k_y, s}^\dagger, \psi_{i, k_y, s'}^\dagger, \psi_{i, -k_y, s}, \psi_{i, -k_y, s'}, \psi_{i, k_y + q_y, s}^\dagger, \psi_{i, k_y + q_y, s'}^\dagger, \psi_{i, -k_y + q_y, s}, \psi_{i, -k_y + q_y, s'} \right) , \tag{2.76}$$

και τις μήτρες Pauli ρ , τ και σ που δρουν στους ισο-σπιν χώρους $k_y, k_y + q_y$, σωματιδίου-αντισωματιδίου και σπιν αντίστοιχα, η Χαμιλτονιανή αποκτά την παρακάτω απλή μορφή

$$\mathcal{H}^{MF} = \frac{1}{2} \sum_{i, j, k_y, q_y} \Psi_{i, k_y, q_y}^\dagger \left[\rho_{x(y)} \left(\tau_{z(0)} (\tilde{\mu}_{ij}^{q_y}, \tilde{h}_{ij}^{q_y}) + \tau_{y(x)} (\tilde{\Delta}_{ij}^{0, q_y}, \tilde{\Delta}_{ij}^{q_y}) i\sigma_y \right) \right] \cdot (\sigma_0, \tilde{\sigma}) \Psi_{j, k_y, q_y} . \tag{2.77}$$

Ως εδώ η παραπάνω εξίσωση περιλαμβάνει την ίδια πληροφορία με την εξίσωση 2.32 στον χώρο των θέσεων. Παρατηρούμε όμως ότι η Χαμιλτονιανή Εξ. 2.77 έχει μπλοκ-διαγώνια μορφή στον χώρο

των ορμών k_y και q_y . Έτσι, στη συγκεκριμένη περιγραφή μας δίνεται η δυνατότητα να επιλέξουμε ποιες συνιστώσες q_y είναι πεπερασμένες. Συγκεκριμένα στην παρούσα διατριβή θα ασχοληθούμε με συστήματα όπου μόνο οι συνιστώσες $q_y = 0$ και $q_y = Q_y = \pi$ των πεδίων είναι πεπερασμένες. Στην περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή απλοποιείται ως εξής

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{MF} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[\rho_{z(0)} \left(\tau_{z(0)}(\tilde{\mu}_{ij}, \tilde{\mathbf{h}}_{ij}) + \tau_{y(x)}(\tilde{\Delta}_{ij}^0, \tilde{\Delta}_{ij}) i\sigma_y \right) \right. \\ &\quad \left. + \rho_{x(y)} \left(\tau_{z(0)}(\tilde{\mu}_{ij}^{Q_y}, \tilde{\mathbf{h}}_{ij}^{Q_y}) + \tau_{y(x)}(\tilde{\Delta}_{ij}^{0,Q_y}, \tilde{\Delta}_{ij}^{Q_y}) i\sigma_y \right) \right] \cdot (\sigma_0, \tilde{\sigma}) \Psi_{j,k_y}, \end{aligned} \quad (2.78)$$

όπου $\Psi_{i,k_y}^\dagger = \Psi_{i,k_y,Q_y}^\dagger$. Η επίλυση του συστήματος θα αποφέρει πολύ μικρότερη πληροφορία καθώς ένα μεγάλο κομμάτι της είναι ήδη ανεκτιμημένο ($\Phi^{q_y} = 0$). Έτσι η αριθμητική επίλυση της Εξ. 2.78 έχει σημαντικά μικρότερες υπολογιστικές απαιτήσεις από την επίλυση της Εξ. 2.32 στον χώρο των θέσεων.

Η Χαμιλτονιανή Εξ. 2.77 έχει μπλοκ-διαγώνια μορφή στον χώρο των k_y ορμών και συνεπώς κάθε υποσύστημα για συγκεκριμένη ορμή k_y μπορεί να επιλυθεί ανεξάρτητα. Μόνο στην προσέγγιση μέσου πεδίου τα N_y αυτά υποσύστημα συζεύγονται έμμεσα μέσω των εξισώσεων αυτοσυνέπειας. Για συγκεκριμένη ορμή k_y και θέσεις i, j η Χαμιλτονιανή μήτρα είναι της γενικής μορφής

$$H_{ij,k_y} = \sum_{g=1}^{63} h_g \hat{O}_g, \quad (2.79)$$

όπου $\hat{O}_g = \rho_u \tau_m \sigma_p$ οι 63 γεννήτορες της $su(8)$ άλγεβρας που εκφράζονται ως γινόμενα των μητρών Pauli που δρουν στους αντίστοιχους υπόχωρους. Σημειώνουμε ότι η πλήρης Χαμιλτονιανή μήτρα περιλαμβάνει $63N_x^2N_y$ σημαντικά λιγότερα από τα $15N^2$ πεδία της αντίστοιχης μήτρας στον χώρο των θέσεων. Οι συναρτήσεις μορφής των πεδίων αρχικά υπαγορεύονται πάλι από την τετραγωνική συμμετρία του πλέγματος και τις αναπαραστάσεις της αντίστοιχης ομάδας C_4 . Όμως, στις διεπαφές (100) και (110) η τετραγωνική συμμετρία παραβιάζεται και η συμμετρία του συστήματος υποβαθμίζεται στην ορθορομβική που σχετίζεται με την ομάδα C_2 . Έτσι είναι απαραίτητο να εισάγουμε και τις συναρτήσεις μορφής που αποτελούν συναρτήσεις βάσης των μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της ομάδας C_2 . Η ομάδα C_2 έχει δύο στοιχεία, το στοιχείο ταυτότητας και τον μετασχηματισμό στροφής κατά π γύρω από άξονα κάθετο στο επίπεδο του συστήματος, που ταξινομούνται σε δύο κλάσεις. Συνεπώς η αντίστοιχη ομάδα έχει δύο μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις. Στην πραγματικότητα οι συναρτήσεις μορφής στην περίπτωση αυτή είναι οι ίδιες που παρουσιάζονται στον Πιν. 2.1, αλλά για κάθε κατεύθυνση ξεχωριστά. Έτσι, εισάγουμε τις συναρτήσεις βάσης της C_2 ομάδας, Πιν. 2.2, για τον άξονα x στον χώρο των θέσεων $f_1^x = \delta_{j,i}, f_2^x = \delta_{j,i\pm 1}$ και $f_3^x = \pm \delta_{j,i\pm 1}$ και τις αντίστοιχες για τον άξονα y , στον χώρο των ορμών $f_1^y = 1, f_2^y = \cos k_y$ και $f_3^y = \sin k_y$. Οι συναρτήσεις μορφής τετραγωνικής συμμετρίας σχετίζονται με τις παραπάνω συναρτήσεις βάσης και συγκεκριμένα για συναρτήσεις των κοντινότερων γειτόνων έχουμε $f_{sext}(ij, k_y) = f_2^x f_1^y + f_1^x f_2^y, f_d(ij, k_y) = f_2^x f_1^y - f_1^x f_2^y$ και $f_{px\pm py}(ij, k_y) = i f_3^x f_1^y \pm f_1^x f_3^y$, ενώ για τις αντίστοιχες των επόμενων κοντινότερων γειτόνων έχουμε $f_{cc}(ij, k_y) = f_2^x f_2^y, f_{ss}(ij, k_y) = f_3^x f_3^y$ και $f_{sc}(ij, k_y) = i f_3^x f_2^y, f_{cs}(ij, k_y) = i f_2^x f_3^y$.

Συνεπώς, μέσω του συγκεκριμένου μετασχηματισμού Fourier στον χώρο των ορμών η Χαμιλτονιανή Εξ. 2.32 αποκτά την παρακάτω γενική μορφή

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger H_{ij,k_y} \Psi_{j,k_y} = \frac{1}{2} \sum_{k_y} \Psi_{k_y}^\dagger [H_{k_y}] \Psi_{k_y}, \quad (2.80)$$

όπου $\Psi_{i,k_y}^\dagger = \Psi_{i,k_y,Q_y}^\dagger$ απουσία πεδίων $\Phi^{q_y} = 0$ για $q_y \neq 0$ και $q_y \neq Q_y$. Η συνολική Χαμιλτονιανή εκφράζεται συναρτήσει υποπινάκων $[H_{k_y}]$ διάστασης $8N_x \times 8N_x$ για συγκεκριμένη ορμή k_y ,

C_2	E	C_2
$\hat{D}(g)$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$
$A_1; z$	1	1
$B_1; x, y$	1	-1

f_s	$\delta_{j,i}$	1	A_1
f_{sext}	$\delta_{j,i\pm 1}$	$\cos(k_y)$	A_1
f_p	$\pm\delta_{j,i\pm 1}$	$\sin(k_y)$	B_1

Πίνακας 2.2: Η ομάδα συμμετρίας C_2 και οι αντίστοιχες συναρτήσεις μορφής.

καταδεικνύοντας ότι περιγράφει ένα σύνολο N_y ανεξάρτητων υποσυστημάτων. Όπως αναφέραμε και στην προηγούμενη ενότητα, οι αντιμεταθετικές ιδιότητες των φερμιονίων καθώς και η Ερμιτιανή μορφή της Χαμιλτονιανής μείνουν τον αριθμό των επιτρεπτών πεδίων. Συγκεκριμένα λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων προκύπτει

$$\tau_x[H_{k_y}]T_x = -[H_{-k_y}]^T, \quad (2.81)$$

ενώ η Ερμιτιανή μορφή της Χαμιλτονιανής οδηγεί στον περιορισμό

$$[H_{k_y}] = [H_{k_y}]^\dagger. \quad (2.82)$$

Συνεχίζουμε την ανάλυση για τη μορφή των επιτρεπτών πεδίων ξεχωριστά για τα κανάλια αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και ηλεκτρονίου-οπής. Τα τοπικά υπεραγωγία πεδία ορίζονται ως εξής

$$\Delta_{ij,k_y}^{s,s'} \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,-k_y,s'}^\dagger \quad \Delta_{ij,k_y}^{s,s',Q_y} \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,-k_y+Q_y,s'}^\dagger \quad (2.83)$$

και αντίστοιχα ορίζουμε τις μήτρες $[\Delta_{ij,k_y}]$ διαστάσεων 8×8 για συγκεκριμένες θέσεις i, j που δρουν στον 8-διάστατο σπίνορα Ψ_{j,k_y} , τις μήτρες $[\Delta_{k_y}^{sp}]$ και $[\Delta_{k_y}^{sp,Q_y}]$ διαστάσεων $2N_x \times 2N_x$ που δρουν στον χώρο θέσεων-σπιν και τη συνολική $8N_x \times 8N_x$ μήτρα των υπεραγωγίων πεδίων $[\Delta_{k_y}]$ για συγκεκριμένη ορμή k_y που δρα στον σπίνορα Ψ_{k_y} . Λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων προκύπτει

$$\begin{aligned} \Delta_{ij,k_y}^{s,s'} &= -\Delta_{ji,-k_y}^{s',s} \rightarrow [\Delta_{k_y}^{sp}] = -[\Delta_{-k_y}^{sp}]^T \\ \Delta_{ij,k_y}^{s,s',Q_y} &= -\Delta_{ji,-k_y}^{s',s,Q_y} \rightarrow [\Delta_{k_y}^{sp,Q_y}] = -[\Delta_{-k_y}^{sp,-Q_y}]^T = -[\Delta_{-k_y+Q_y}^{sp,Q_y}]^T, \end{aligned} \quad (2.84)$$

ενώ η ερμιτιανή μορφή της Χαμιλτονιανής απαιτεί

$$[\Delta_{k_y}] = \begin{bmatrix} 0 & \Delta_{k_y}^{sp} & 0 & \Delta_{k_y}^{sp,Q_y} \\ \Delta_{k_y}^{sp,\dagger} & 0 & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp,Q_y,\dagger} & 0 \\ 0 & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp,Q_y} & 0 & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp} \\ \Delta_{k_y}^{sp,Q_y,\dagger} & 0 & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp,\dagger} & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.85)$$

Εν συνεχεία ορίζουμε τις συνιστώσες των υπεραγωγίων πεδίων προβάλλοντας τα αντίστοιχα τοπικά πεδία

$$\begin{aligned}
\Delta_{u,m,p}^{q_x,n} &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i,x,k_y} e^{-iq_x \cdot i} Tr\{f_n(k_y, x) \hat{O}_{u,m,p}[\Delta_{ij,k_y}]\} \\
\Delta_{u,m,p}^{i,n} &= \frac{1}{4N_y m_n} \sum_{k_y,x} Tr\{f_n(k_y, x) \hat{O}_{u,m,p}[\Delta_{ij,k_y}]\} \\
\Delta_{u,m,p}^{q_x,n} &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i,x,k_y} e^{-iq_x \cdot i} Tr\{f_n(k_y, x) \hat{O}_{u,m,p}[\Delta_{ij,k_y}^0]\} \\
\Delta_{u,m,p}^{Q_y,q_x,n} &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i,x,k_y} e^{-iq_x \cdot i} Tr\{f_n(k_y, x) \hat{O}_{u,m,p}[\Delta_{ij,k_y}^{Q_y}]\}, \tag{2.86}
\end{aligned}$$

όπου $x = i - j$, $\hat{O}_{u,m,p} = \rho_u \tau_m \sigma_p$ οι αναπαράστασεις στον $SU(8)$ χώρο, ενώ επιπλέον έχουμε ορίσει τις συνιστώσες $\Delta_{u,m,p}^{i,n}$ των τοπικών πεδίων και τις 4×4 μήτρες $[\Delta_{ij,k_y}^0], [\Delta_{ij,k_y}^{Q_y}]$ για τα κυματανύσματα $q_y = 0, q_y = Q_y$ αντίστοιχα. Σημειώνουμε ότι για τις συναρτήσεις μορφής τετραγωνικής συμμετρίας που ενώνουν κοντινότερα γειτονικά πλεγματικά σημεία αντιστοιχεί γενικά διαφορετική αναπαράσταση \hat{O} για κάθε συνιστώσα. Για παράδειγμα για τη συνάρτηση βάσης της A_1 μη-αναγωγίσιμης αναπαράστασης προκύπτει $f_{sext} \hat{O}_{u,m,p} = f_2^c f_1^m \rho_0 \hat{O}_{m,p} + f_1^c f_2^m \rho_z \hat{O}_{m,p}$. Αντίστροφα τα τοπικά πεδία προκύπτουν από τις παρακάτω σχέσεις

$$[\Delta_{k_y}^{sp}] = \sum_{q_x,n} \Delta_p^{q_x,n} [e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_p]^\dagger \quad [\Delta_{k_y}^{sp,Q_y}] = \sum_{q_x,n} \Delta_p^{Q_y,q_x,n} [e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_p]^\dagger. \tag{2.87}$$

Καθώς για κάθε q_x ισχύει

$$[f_n(k_y, x)]^T = [e^{-iq_x \cdot x} f_n(k_y, -x)], \tag{2.88}$$

προκύπτει άμεσα η αντιστοίχιση

$$\begin{aligned}
q_y = 0 \quad [f_n(k_y, x) \hat{O}_p] &= -[e^{-iq_x \cdot x} f_n(-k_y, -x) \hat{O}_p^T] \\
q_y = Q_y \quad [f_n(k_y, x) \hat{O}_p] &= -[e^{-iq_x \cdot x} f_n(-k_y + Q_y, -x) \hat{O}_p^T]. \tag{2.89}
\end{aligned}$$

Σημειώνουμε ότι ο όρος $[e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_p]$ αποτελεί μια $2N_x \times 2N_x$ μήτρα στον χώρο θέσεων-σπιν. Από τη σχέση Εξ. 2.89 προκύπτει ότι οι singlet συνιστώσες με $\sigma_y \sigma_0 = -(\sigma_y \sigma_0)^T$ επιτρέπονται μόνο για $f_n(k_y, x) = [e^{-iq_x \cdot x} f_n(-k_y, -x)]$ στην περίπτωση των y -ομοιογενών πεδίων και μόνο για $f_n(k_y, x) = [e^{-iq_x \cdot x} f_n(-k_y + Q_y, -x)]$ για τα Q_y -διαμορφωμένα πεδία. Τα αντίθετα ισχύουν για τις triplet συνιστώσες για τις οποίες ισχύει $i\sigma_y \sigma = (i\sigma_y \sigma)^T$. Στη γενική περίπτωση όπου $||[e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x)]|| \neq ||[e^{iq_x \cdot x} f_n(-k_y, -x)]||$ και $||[e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x)]|| \neq ||[e^{iq_x \cdot x} f_n(-k_y + Q_y, -x)]||$ και singlet και triplet όροι είναι επιτρεπτοί. Επομένως λόγω του συγκεκριμένου περιορισμού (Εξ. 2.89) γενικά καταλήγουμε στις παρακάτω μορφές για y -ομοιογενή πεδία

$$H_{sSC}^{q_x} = \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [e^{-iq_x \cdot i} (f_s + f_{sext} + f_d + f_{cc} + f_{ss} + f_{px}^\dagger + f_{cs}^\dagger + f_{sc}^\dagger) (\Delta_{\mathfrak{R}}^{q_x} + i\Delta_{\mathfrak{S}}^{q_x} \tau_z) \tau_y \sigma_y] \Psi_{j,k_y}$$

$$H_{tSC}^{q_x} = \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [e^{-iq_x \cdot ix} (f_{sext} + f_d + f_{cc} + f_{ss} + f_{px}^\dagger + f_{cs}^\dagger + f_{sc}^\dagger + f_{py}^\dagger) (\Delta_{\mathfrak{R}}^{q_x} \cdot \vec{\sigma} + i\tau_z \Delta_{\mathfrak{S}}^{q_x}) \tau_x (i\sigma_y) \cdot \vec{\sigma}] \Psi_{j,k_y},$$

και για Q_y -διαμορφωμένα πεδία

$$H_{sSC}^{q_x} = \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [e^{-iq_x \cdot i} (f_s + f_{sext} + f_d + f_{cs}^\dagger + f_{sc}^\dagger + f_{px}^\dagger + f_{cc} + f_{ss}) (\Delta_{\mathfrak{R}}^{q_x} + i\Delta_{\mathfrak{S}}^{q_x} \tau_z) \tau_y \sigma_y] \Psi_{j,k_y}$$

$$H_{tSC}^{q_x} = \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[e^{-iq_x \cdot i_x} (f_{sext} + f_d + f_{cc} + f_{ss} + f_{px}^! + f_{cs}^! + f_{sc}^! + f_{py}^!) (\Delta_{\mathfrak{R}}^{q_x} \cdot \vec{\sigma} + i\tau_z \Delta_{\mathfrak{S}}^{q_x}) \tau_x (i\sigma_y) \cdot \vec{\sigma} \right] \Psi_{j,k_y},$$

όπου με πράσινο χρώμα σημειώνουμε τις συναρτήσεις μορφής που δεν επιτρέπονται για $q_x = \pi$, ενώ με κόκκινο αυτές που δεν επιτρέπονται για $q_x = 0$. Για γενική διαμόρφωση κατά x άξονα επιτρέπονται εν γένει όλες οι συναρτήσεις. Σημείωση: οι όροι με δείκτη [!] εναλλάσσονται για $\mathfrak{R} \leftrightarrow \mathfrak{S}$.

Η Ερμιτιανή μορφή της Χαιλτονιανής οδηγεί στις παρακάτω σχέσεις

$$\begin{aligned} [\Delta_{k_y}^{q_y=0,\pi}] &= [\Delta_{k_y}^{q_y=0,\pi}]^\dagger \rightarrow \\ \left[\sum_{q_x,n} \Delta_{\rho,m,S}^{q_x,n} e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_{\rho,m,S} \right] &= \left[\sum_{q_x,n} \Delta_{\rho,m,S}^{q_x,n} e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_{\rho,m,S} \right]^\dagger \rightarrow \\ \Delta_{\rho,m,S}^{q_x,n} f_n(k_y, x) &= \Delta_{\rho,m,S}^{-q_x,n} e^{iq_x \cdot x} f_n^*(k_y, -x). \end{aligned} \quad (2.90)$$

Επομένως, λόγω του συγκεκριμένου περιορισμού οι συναρτήσεις μορφής $f_n(k_y, x)$ είναι πραγματικές(φανταστικές) για πεδία (αντι-)συμμετρικά στους μετασχηματισμούς ανάκλασης με βάση τον άξονα x ή y .

Τέλος, τα τοπικά υπεραγωγίμα πεδία μπορούν προκύψουν από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων του συστήματος και συγκεκριμένα στην προσέγγιση μέσου πεδίου προκύπτουν ως εξής

$$\begin{aligned} \Delta_{ij,k_y}^{s,s'} &= \langle \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,-k_y,s'}^\dagger \rangle = \frac{1}{4Z} \text{Tr} \left\{ \Psi_{i,k_y}^\dagger [(\rho_0 + \rho_z)(\tau_x + i\tau_y)(\sigma_0 + \sigma_x)]_{s,s'} \Psi_{j,k_y} e^{-\beta H} \right\} \\ \Delta_{ij,k_y}^{s,s',Q_y} &= \langle \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,-k_y+Q_y,s'}^\dagger \rangle = \frac{1}{4Z} \text{Tr} \left\{ \Psi_{i,k_y}^\dagger [(\rho_x + i\rho_y)(\tau_x + i\tau_y)(\sigma_0 + \sigma_x)]_{s,s'} \Psi_{j,k_y} e^{-\beta H} \right\}. \end{aligned}$$

Οι συνιστώσες των πεδίων αυτών προκύπτουν με τον ίδιο ακριβώς τρόπο

$$\Delta_{u,m,p}^{q_x,n} = \frac{1}{Nm_n} \sum_{i,x,k_y} e^{-iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \Delta_{ii+x,k_y,u,m,p}, \quad (2.91)$$

$$\text{όπου } \Delta_{ij,k_y,u,m,p} = \frac{1}{4} \sum_{k'_y,\delta_y} V_{ij,k'_y,\delta_y}^{m,p} e^{ik_y \delta_y} \langle \Psi_{i,k'_y}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{j,k'_y} \rangle.$$

Με τον ίδιο τρόπο εργαζόμαστε και για τα πεδία στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου που ορίζονται ως εξής

$$P_{ij,k_y}^{s,s'} \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,k_y,s'} \quad P_{ij,k_y}^{s,s',Q_y} \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,k_y+Q_y,s'}. \quad (2.92)$$

Αντίστοιχα ορίζουμε τις 8×8 μήτρες $[P_{ij,k_y}]$ για συγκεκριμένες θέσεις i, j και ορμή k_y που δρουν στον 8-διαστατο σπίνορα Ψ_{i,k_y} , τις $2N_x \times 2N_x$ μήτρες $[P_{k_y}^{sp}], [P_{k_y}^{sp,Q_y}]$ που δρουν στον χώρο θέσεων-σπιν και τη συνολική μήτρα $[P_{k_y}]$ διαστάσεων $8N_x \times 8N_x$ για συγκεκριμένη ορμή k_y . Λόγω της Ερμιτιανής μορφής της Χαμιλτονιανής προκύπτει

$$[P_{k_y}^{sp}] = [P_{k_y}^{sp}]^\dagger \quad [P_{k_y}^{sp,Q_y}] = [P_{k_y+Q_y}^{sp,Q_y}]^\dagger, \quad (2.93)$$

ενώ λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων

$$[P_{k_y}] = \begin{bmatrix} P_{k_y}^{sp} & 0 & P_{k_y}^{sp,Q_y} & 0 \\ 0 & -P_{-k_y}^{sp,T} & 0 & -P_{-k_y}^{sp,Q_y,T} \\ P_{k_y+Q_y}^{sp,Q_y} & 0 & P_{k_y+Q_y}^{sp} & 0 \\ 0 & -P_{-k_y+Q_y}^{sp,Q_y,T} & 0 & -P_{-k_y+Q_y}^{sp,T} \end{bmatrix}. \quad (2.94)$$

Οι συνιστώσες των πεδίων προκύπτουν ομοίως ως εξής

$$P_{u,m,p}^{0,(Q_y),q_x,n} = \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i,x} e^{-iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) Tr \{ \hat{O}_{u,m,p} [P_{ii+x,k_y}^{0,(Q_y)}] \}. \quad (2.95)$$

Αντίστροφα, οι αντίστοιχες μήτρες των πεδίων κατασκευάζονται ως εξής

$$[P_{k_y}^{sp}] = \sum_{q_x,n} P_p^{q_x,n} [e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_p]^\dagger \quad [P_{k_y}^{sp,Q_y}] = \sum_{q_x,n} P_p^{Q_y,q_x,n} [e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \hat{O}_p]^\dagger \quad (2.96)$$

και από την Εξ.2.93 έχουμε

$$\begin{aligned} q_y = 0 \quad [P_{m,S}^{q_x,n} f_n(k_y, x)] &= [P_{m,S}^{-q_x,n,*} e^{iq_x x} f_n^*(k_y, -x)] \\ q_y = Q_y \quad [P_{m,S}^{q_x,n} f_n(k_y, x)] &= [P_{m,S}^{-q_x,n,*} e^{iq_x x} f_n^*(k_y + Q_y, -x)]. \end{aligned} \quad (2.97)$$

Επομένως, για $q_y = 0$ και $q_x = 0$ τα (αντι-)συμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό ανάκλασης ως προς τον άξονα x πεδία έχουν μόνο πραγματικές(φανταστικές) συνιστώσες, ενώ το αντίθετο ισχύει για τα $q_x = \pi$ διαμορφωμένα πεδία. Αντίστοιχα για $q_y = Q_y$ και $q_x = 0$ τα (αντι-)συμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό x -ανάκλασης και Q_y μεταφοράς ορμής έχουν μόνο πραγματικές(φανταστικές) συνιστώσες, ενώ το αντίθετο ισχύει για τα $q_x = \pi$ διαμορφωμένα πεδία.

Λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων προκύπτει

$$\begin{aligned} \tau_x [P_{ij,k_y}] \tau_x &= -[P_{ij,-k_y}]^T \Rightarrow \sum_{n,q_x} e^{iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \tau_x \hat{O}_{u,m,p} \tau_x = e^{iq_x \cdot x} f_n(-k_y, -x) \hat{O}_{u,m,p}^T \\ &\Rightarrow f_n(k_y, x) \tau_x \hat{O}_m \tau_x \hat{O}_{u,p} = e^{iq_x \cdot x} f_n(-k_y, -x) \hat{O}_m \hat{O}_{u,p}^T. \end{aligned} \quad (2.98)$$

Στην προσέγγιση μέσου πεδίου τα αντίστοιχα πεδία ορίζονται ως εξής

$$P_{ij,k_y}^{s,s'} = \langle \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,k_y,s'} \rangle = \frac{1}{Z} Tr \left\{ \Psi_{i,k'_y}^\dagger [(\rho_0 + \rho_z)(\tau_0 + \tau_z)(\sigma_0 + \sigma_x)]_{s,s'} \Psi_{j,k'_y} e^{-\beta H} \right\}$$

$$P_{ij,k_y}^{s,s',Q_y} = \langle \psi_{i,k_y+Q_y,s}^\dagger \psi_{j,k_y,s'} \rangle = \frac{1}{Z} Tr \left\{ \Psi_{i,k'_y}^\dagger [(\rho_x + i\rho_y)(\tau_0 + \tau_z)(\sigma_0 + \sigma_x)]_{s,s'} \Psi_{j,k'_y} e^{-\beta H} \right\},$$

και μπορούν με τον ίδιο ακριβώς τρόπο να αναλυθούν στις παρακάτω συνιστώσες

$$\begin{aligned} P_{u,m,p}^{q_x,n} &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i,x,k_y} e^{-iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) P_{ii+x,k_y,u,m,p} \\ &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i,x,k_y} e^{-iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \sum_{k'_y,\delta_y} V_{ij,k'_y,\delta_y}^{m,p} e^{ik_y \delta_y} \langle \Psi_{i,k'_y}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{j,k'_y} \rangle. \end{aligned} \quad (2.99)$$

Συνοψίζοντας, η Χαμιλτονιανή ενός διδιάστατου συστήματος στον χώρο x θέσεων- k_y ορμών έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [H_{ij,k_y}] \Psi_{j,k_y} = \frac{1}{2} \sum_{k_y} \Psi_{k_y}^\dagger [H_{k_y}] \Psi_{k_y} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \sum_{q_x,n} \Psi_{i,k_y}^\dagger e^{iq_x \cdot i} f_n^*(k_y, x) [P_{u,m,p}^{q_x,n} \hat{O}_{u,m,p}^P + \Delta_{u,m,p}^{q_x,n} \hat{O}_{u,m,p}^\Delta] \Psi_{j,k_y} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \sum_{q_x,n} \Psi_{i,k_y}^\dagger \Phi_{u,m,p}^{q_x,n} e^{iq_x \cdot i} f_n^*(k_y, x) \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{j,k_y} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k_y} \sum_{q_x,n} \Psi_{k_y}^\dagger \Phi_{u,m,p}^{q_x,n} \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{k_y}, \end{aligned} \quad (2.100)$$

όπου

$$[H_{k_y}] = \begin{bmatrix} P_{k_y}^{sp} & \Delta_{k_y}^{sp} & P_{k_y}^{sp, Q_y} & \Delta_{k_y}^{sp, Q_y} \\ \Delta_{k_y}^{sp, \dagger} & -P_{-k_y}^{sp, T} & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp, Q_y, \dagger} & -P_{-k_y}^{sp, Q_y, T} \\ P_{k_y+Q_y}^{sp, Q_y} & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp, Q_y} & P_{k_y+Q_y}^{sp} & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp} \\ \Delta_{k_y}^{sp, Q_y, \dagger} & -P_{-k_y+Q_y}^{sp, Q_y, T} & \Delta_{k_y+Q_y}^{sp, \dagger} & -P_{-k_y+Q_y}^{sp, T} \end{bmatrix}. \quad (2.101)$$

Το ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων και οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις του συστήματος προσδιορίζονται από την παρακάτω εξίσωση ιδιοτιμών

$$\sum_{j'} [i\omega_n \delta_{ij'} - H_{ij', k_y}] \mathbf{G}(j', j, k_y, i\omega_n) = \delta_{ij} \quad \sum_j H_{ij, k_y} U_{j, n, k_y} = E_{n, k_y} U_{i, n, k_y}. \quad (2.102)$$

Κάνοντας χρήση της σχέσης $f_n(k_y, x) = e^{-ik_y \cdot f_n(x, \delta_y)}$, όπου $f_n(x, \delta_y)$ η αντίστοιχη συνάρτηση μορφής στον χώρο θέσεων, επάγουμε τις ισοδύναμες σχέσεις για τα μέσα πεδία

$$\begin{aligned} \Phi_{u, m, p}^{q_x, n} &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i, x, k_y} e^{-iq_x \cdot i} f_n(k_y, x) \sum_{k'_y, \delta_y} V_{ij, k'_y, \delta_y}^{m, p} e^{ik_y \delta_y} \langle \Psi_{i, k'_y}^\dagger \hat{O}_{u, m, p} \Psi_{j, k'_y} \rangle \rightarrow \\ &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i, x, k_y} e^{-iq_x \cdot i} e^{-ik_y \cdot f_n(x, \delta_y)} \sum_{k'_y, \delta_y} V_{ij, k'_y, \delta_y}^{m, p} e^{ik_y \delta_y} \langle \Psi_{i, k'_y}^\dagger \hat{O}_{u, m, p} \Psi_{j, k'_y} \rangle \rightarrow \\ &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i, x} e^{-iq_x \cdot i} \sum_{k'_y, f_n(x, \delta_y)} V_{ij, k'_y, \delta_y}^{m, p} \langle \Psi_{i, k'_y}^\dagger \hat{O}_{u, m, p} \Psi_{j, k'_y} \rangle \rightarrow \\ &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{i, x, k'_y} e^{-iq_x \cdot i} f_n(k'_y, x) V_{ij, n}^{m, p} \langle \Psi_{i, k'_y}^\dagger \hat{O}_{u, m, p} \Psi_{j, k'_y} \rangle, \end{aligned} \quad (2.103)$$

ενώ τα αντίστοιχα δυναμικά προκύπτουν ως εξής

$$\begin{aligned} V_{ij, n}^{m, p} f_n(k_y, x) &= \sum_{f_n(\delta_y, x)} V_{ij, k_y, \delta_y}^{m, p} \\ V_{ij, k_y, \delta_y}^{z(0), 0, q_y} &= \sum_{j, \delta_y} \left(\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + V_{ij} e^{iq_y \delta_y} \right) - [V_{ij} + 3 \frac{J_{ij}}{4}] e^{ik_y \delta_y} \\ V_{ij, k_y, \delta_y}^{z(0), \mu, q_y} &= \sum_{j, \delta_y} \left(\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} e^{iq_y \delta_y} \right) - [V_{ij} - \frac{J_{ij}}{4}] e^{ik_y \delta_y} \\ V_{ij, k_y, \delta_y}^{x(y), 0, q_y} &= \left[U_i \delta_{ij} + V_{ij} - 3 \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik_y \delta_y} \quad V_{ij}^{x(y), \mu} = \left[V_{ij} + \frac{J_{ij}}{4} \right] e^{ik_y \delta_y}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Η πρώτη εξίσωση ισχύει επειδή τα δυναμικά αλληλεπίδρασης εξαρτώνται μόνο από την απόσταση $|\mathbf{i} - \mathbf{j}|$ των πλεγματικών σημείων και όχι από την κατεύθυνση που ορίζουν. Οι εξισώσεις αυτο-συνέπειας για τα μέσα πεδία βάσει των ιδιοδιανυσμάτων U_{j, n, k_y} και των αντίστοιχων ιδιοενεργειών E_{n, k_y} ή ισοδύναμα των συναρτήσεων Green $\mathbf{G}(j', j, k_y, i\omega_n)$, έχουν την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \Phi_{u, m, p}^{q_x, n} &= \frac{1}{4Nm_n \beta} \sum_{k'_y}^{i\omega_n} Tr \{ [e^{-iq_x \cdot i} f_n(k'_y, x) V_{ij}^{m, p} \hat{O}_{u, m, p} \mathbf{G}(ij, k'_y, i\omega_n)] \} \rightarrow \\ &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{k'_y, r} \left[U_{k_y}^\dagger [e^{-iq_x \cdot i} f_n(k'_y, x) V_{ij}^{m, p} \hat{O}_{u, m, p}] U_{k_y} \right]_{rr} n_F(E_r, k'_y), \end{aligned} \quad (2.105)$$

ενώ αντίστοιχα για τα τοπικά πεδία προκύπτει

$$\Phi_{u,m,p}^{i,n} = \frac{1}{4Nm_n} \sum_{k'_y,r} \left[U_{k_y}^\dagger [f_n(k'_y, x) V_{ij}^{m,p} \hat{O}_{u,m,p}] U_{k_y} \right]_{rr} n_F(E_r, k'_y). \quad (2.106)$$

Στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου επιλύουμε την Εξ. 2.100 αυτοσυνεπώς χρησιμοποιώντας την επαναληπτική μέθοδο που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα και τις εξισώσεις Εξ. 2.102, Εξ. 2.105 ή Εξ. 2.106.

2.7 Περιγραφή συστημάτων ισχυρά αλληλεπιδρώντων σωματιδίων στον χώρο των ορμών

Σε ετεροδομες όπου η διεπαφή είναι παράλληλη στο επίπεδο των επιμέρους συστημάτων, (001) διεπαφές, όπου θεωρούμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες για τις διευθύνσεις στο επίπεδο της διεπαφής, η αντίστοιχη συνιστώσα της ορμής διατηρείται. Για τον λόγο αυτό είναι πιο κατάλληλη και από πλευράς ανάλυσης του συστήματος αλλά και από πλευράς της υπολογιστικής ισχύος που απαιτείται για την επίλυσή του, η περιγραφή της ετεροδομής στον αντίστοιχο χώρο των ορμών. Η περιγραφή αυτή προκύπτει από την Εξ. 2.25 μέσω ενός μετασχηματισμού Fourier από τον χώρο των θέσεων στον χώρο των αντίστοιχων ορμών \mathbf{k} που είναι παράλληλες προς της διεπαφή. Ο μετασχηματισμός αυτός επιτυγχάνεται μέσω της παρακάτω αντικατάστασης των φερμιονικών τελεστών

$$\psi_{i,s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}} \psi_{\mathbf{k},s}^\dagger, \quad \psi_{i,s} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{i}} \psi_{\mathbf{k},s}, \quad (2.107)$$

στη Χαμιλτονιανή Εξ. 2.25 η οποία και αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\delta,\mathbf{k}} \sum_{s,s'} \varepsilon^{ss'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k},s}^\dagger \psi_{\mathbf{k},s'} \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} \sum_s U \psi_{\mathbf{k},s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}'',s} \psi_{\mathbf{k}',s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}'',s'} \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} \sum_{\delta} \sum_{s,s'} \left[V_\delta + (-1)^{s+s'} \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k},s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}'',s} \psi_{\mathbf{k}',s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}'',s'} \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{k}''} \sum_{\delta} \sum_{s,s'} 2 \frac{J}{4} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}'')\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k},s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{k}'-\mathbf{k}'',s} \psi_{\mathbf{k}',s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}'',s}. \end{aligned} \quad (2.108)$$

Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση αυτή τα δυναμικά θεωρούνται ομοιόμορφα στο επίπεδο και επομένως έχουμε παραλείψει τους σχετικούς δείκτες. Επιπλέον η ορμή $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ λαμβάνει $N_{x,(y)}$ διακριτές τιμές με βήμα $\frac{2\pi}{N_{x,(y)}}$ στο διάστημα $[-\pi, \pi) \otimes [-\pi, \pi)$. Αντικαθιστώντας $\mathbf{k}' - \mathbf{k}'' = \mathbf{q}$ προκύπτει

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{\delta, \mathbf{k}} \sum_{s, s'} \varepsilon^{ss'} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}, s'} \\
&+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}} \sum_s U \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}', s'} \\
&+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \delta} \sum_{s, s'} \left[V_\delta + (-1)^{s+s'} \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{q}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}', s'} \\
&+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \delta} \sum_{s, s'} 2 \frac{J_\delta}{4} e^{i\mathbf{q}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}', s}, \tag{2.109}
\end{aligned}$$

Γραμμικοποιούμε την παραπάνω Χαμιλτονιανή στην προσέγγιση μέσου πεδίου αντικαθιστώντας

$$\psi_{\mathbf{k}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{k}', s'}^{(\dagger)} = \langle \psi_{\mathbf{k}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{k}', s'}^{(\dagger)} \rangle + \{ \psi_{\mathbf{k}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{k}', s'}^{(\dagger)} - \langle \psi_{\mathbf{k}, s}^{(\dagger)} \psi_{\mathbf{k}', s'}^{(\dagger)} \rangle \}, \tag{2.110}$$

και παραλείποντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διακυμάνσεων των μέσων πεδίων. Η προσέγγιση αυτή οδηγεί στην εμφάνιση των παρακάτω όρων

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N} \sum_{\delta, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{ss'} \left[U(1 - \delta_{ss'}) + \left[V_\delta + (-1)^{s-s'} \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{q}\cdot\delta} \right] \langle \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s} \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}', s'} \rangle \\
&\frac{1}{N} \sum_{\delta, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{ss'} \left[-U(1 - \delta_{ss'}) + 2 \frac{J_\delta}{4} e^{i\mathbf{q}\cdot\delta} \right] \langle \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'} \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}', s} \rangle \\
&-\frac{1}{N} \sum_{\delta, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{ss'} \left[V_\delta + (-1)^{s-s'} \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \langle \psi_{\mathbf{k}', s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'} \rangle \langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}, s} \rangle + \\
&-\frac{1}{N} \sum_{\delta, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{ss'} 2 \frac{J_\delta}{4} e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \langle \psi_{\mathbf{k}', s}^\dagger \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s} \rangle \langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'}^\dagger \psi_{\mathbf{k}, s'} \rangle \\
&\frac{1}{N} \sum_{\delta, \mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{ss'} \left(\left[-U(1 - \delta_{ss'}) + \left[V_\delta + (-1)^{s-s'} \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \right] \langle \psi_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s} \psi_{\mathbf{k}', s'} \rangle \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{J_\delta}{4} e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \langle \psi_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'} \psi_{\mathbf{k}', s} \rangle \right) \langle e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'}^\dagger \rangle,
\end{aligned}$$

βάσει των οποίων ορίζουμε τα παρακάτω μέσα πεδία

$$\begin{aligned}
\tilde{h}^{0, \mathbf{q}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}', \delta} [U + V_\delta e^{i\mathbf{q}\cdot\delta}] \langle \psi_{\mathbf{k}', s}^\dagger [\sigma_0]_{ss'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s} \rangle \\
\tilde{h}^{\mu, \mathbf{q}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}', \delta} \left[-U + \frac{J_\delta}{4} e^{i\mathbf{q}\cdot\delta} \right] \langle \psi_{\mathbf{k}', s}^\dagger [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'} \rangle \\
\tilde{h}_{0, \mathbf{k}}^{\mathbf{q}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}', \delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \left[V_\delta + 3 \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \langle \psi_{\mathbf{k}', s}^\dagger [\sigma_0]_{ss'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s} \rangle \\
\tilde{h}_{\mathbf{k}}^{\mu, \mathbf{q}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}', \delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \left[V_\delta - \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \langle \psi_{\mathbf{k}', s}^\dagger [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s'} \rangle \\
\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}^{0, \mathbf{q}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}', \delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \left[U + \left[V_\delta - 3 \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \right] \langle \psi_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s} [i\sigma_y \sigma_0]_{ss'} \psi_{\mathbf{k}', s'} \rangle \\
\tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}^{\mu, \mathbf{q}} &= \frac{1}{2N} \sum_{\mathbf{k}', \delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \left[V_\delta + \frac{J_\delta}{4} \right] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \langle \psi_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s} [i\sigma_y \sigma^\mu]_{ss'} \psi_{\mathbf{k}', s'} \rangle. \tag{2.111}
\end{aligned}$$

Η Χαμιλτονιανή αποκτά στην προσέγγιση μέσου πεδίου τη γενική μορφή

$$\mathcal{H}^{MF} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\dagger \left[\rho_{x(y)} \left(\tau_{z(0)} h_{\tilde{\mathbf{q}}, \nu}^{\tilde{\nu}} + \tau_{y(x)} \tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}^{\mathbf{q}, \nu} \right) \cdot (\sigma_0, \tilde{\sigma}) \right] \Psi_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}, \quad (2.112)$$

όπου έχουμε εισάγει τον σπινόρα $\Psi_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}^\dagger = \left(\psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}, s'}^\dagger, \psi_{-\mathbf{k}, s}, \psi_{-\mathbf{k}, s'}, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'}^\dagger, \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, s}, \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}, s'} \right)$. Η παραπάνω Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου περιέχει $15N^2$ μέσα πεδία, όπως ορίζονται από την Εξ. 2.111, ισάριθμα αυτών που παρουσιάστηκαν στην αντίστοιχη Χαμιλτονιανή στον χώρο των θέσεων. Στην περίπτωση αυτή όμως τα ορθογώνια μεταξύ τους πεδία $\Phi^{\mathbf{q}}$ για κάθε κυματόνισμα διαμόρφωσης \mathbf{q} είναι καλά ορισμένα. Συνεπώς μπορούμε να προεπιλέξουμε ποια από τα παραπάνω πεδία μπορούν εν δυνάμει να εμφανιστούν στο σύστημα. Η προεπιλογή του συνόλου των πεδίων που είναι δαθέσιμα στο σύστημα μειώνει ανάλογα την πληροφορία που προκύπτει από την επίλυση της Εξ. 2.113 και επομένως την αντίστοιχη υπολογιστική ισχύ. Συγκεκριμένα στην παρούσα διατριβή, στις (001) ετεροδομές θα μελετήσουμε τον ανταγωνισμό μεταξύ ομοιόμορφων $\mathbf{q} = 0$ πεδίων και πεδίων διαμορφωμένων κατά $\mathbf{q} = \mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Επομένως, η παραπάνω Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου Εξ. 2.32 απλοποιείται ως εξής

$$\mathcal{H}^{MF} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \left[\left(\tau_{z(0)} [\rho_{z(0)} \tilde{h}_{\mathbf{k}}^{\nu} + \rho_{x(y)} h_{\tilde{\mathbf{q}}, \nu}^{\tilde{\nu}}] + \tau_{y(x)} [\rho_{z(0)} \tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}^{\nu} + \rho_{x(y)} \tilde{\Delta}_{\mathbf{k}}^{\mathbf{Q}, \nu}] \right) \cdot (\sigma_0, \tilde{\sigma}) \right] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (2.113)$$

όπου τώρα $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \left(\psi_{\mathbf{k}, s}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}, s'}^\dagger, \psi_{-\mathbf{k}, s}, \psi_{-\mathbf{k}, s'}, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, s}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}, s'}^\dagger, \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}, s}, \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}, s'} \right)$. Για κάθε ορμή \mathbf{k} ισχύει $H_{\mathbf{k}} \in SU(8) \subset GL(8)$, καθώς ισχύει $\det H_{\mathbf{k}} = e^{i\phi}|_{\phi=0} = 1$ ή ισοδύναμα $Tr\{H_{\mathbf{k}}\} = 0$. Οι 63 γεννήτορες της $su(8)$ άλγεβρας μπορούν να εκφραστούν ως γινόμενα μητρώων Pauli που δρουν στον χώρο του σπιν, Nambu και μεταφοράς ορμής. Επομένως, η Χαμιλτονιανή για κάθε ορμή \mathbf{k} έχει τη γενική μορφή $H_{\mathbf{k}} = \sum_{g=1}^{63} h_g \hat{O}_g$ όπου $\hat{O}_g = \rho_u \tau_m \sigma_p$ με τις μήτρες Pauli σ, τ και ρ που δρουν στους χώρους του σπιν, Nambu και μεταφοράς ορμής \mathbf{Q} αντίστοιχα. Η συνολική Χαμιλτονιανή του συστήματος αποτελείται από N υποσυστήματα για κάθε ορμή και συνεπώς περιέχει μόνο $63N$ πεδία, σημαντικά λιγότερα από τα $15N^2$ πεδία που περιέχει η Χαμιλτονιανή του συστήματος στον χώρο των θέσεων. Βεβαίως οι επιτρεπόμενες συναρτήσεις μορφής των πεδίων στον χώρο των ορμών για ένα σύστημα τετραγωνικής συμμετρίας είναι οι συναρτήσεις βάσης των μη-αναγωγίσιμων αναπραστάσεων της ομάδας συμμετρίας C_4 εκφρασμένες στον χώρο των ορμών $f_n(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{x}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} f_n(\mathbf{x})$.

Όπως και για τις προηγούμενες περιπτώσεις διερευνούμε πάλι τη μορφή των επιτρεπόμενων πεδίων που ικανοποιεί τις αντιμεταθετικές ιδιότητες των φερμιονίων σύμφωνα με τις οποίες ισχύει $\tau_x [H_{\mathbf{k}}] \tau_x = -[H_{-\mathbf{k}}]^T$ και την απαίτηση για Χαμιλτονιανή μήτρα Ερμιτιανής μορφής $[H_{\mathbf{k}}] = [H_{\mathbf{k}}]^\dagger$.

Σύμφωνα με τις αντιμεταθετικές ιδιότητες των ηλεκτρονίων προκύπτουν οι παρακάτω συνιστώσες για τα ομοιόμορφα

$$H_{sSC} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [(f_s + f_{sext} + f_d + f_{cc} + f_{ss})(\Delta_{\mathfrak{R}} + i\Delta_{\mathfrak{S}}\tau_z)\tau_y\sigma_y] \Psi_{\mathbf{k}}$$

$$H_{tSC} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [f_{px} + f_{py} + f_{sc} + f_{cs})(\Delta_{\mathfrak{S}} \cdot \tilde{\sigma} + i\tau_z \Delta_{\mathfrak{R}})\tau_x(i\sigma_y) \cdot \tilde{\sigma}] \Psi_{\mathbf{k}},$$

και τα διαμορφωμένα κατά \mathbf{Q} πεδία

$$H_{sSC} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [(f_s + f_{px} + f_{py} + f_{cc} + f_{ss})(\Delta_{\mathfrak{R}} + i\Delta_{\mathfrak{S}}\tau_z)\tau_y\sigma_y] \Psi_{\mathbf{k}}$$

$$H_{tSC} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [f_{sext} + f_d + f_{cs} + f_{sc})(\Delta_{\mathfrak{S}} \cdot \tilde{\sigma} + i\tau_z \Delta_{\mathfrak{R}})\tau_x(i\sigma_y) \cdot \tilde{\sigma}] \Psi_{\mathbf{k}},$$

ενώ η ερμιτιανή μορφή της Χαμιλτονιανής μας περιορίζει σε πραγματικές συναρτήσεις μορφής $f_n(\mathbf{k})$, καθώς $\hat{O}_{\rho,m,S} = \hat{O}_{\rho,m,S}^\dagger$. Οι συνιστώσες $\Delta_{u,m,p}^n$ των μέσων πεδίων προκύπτουν ως εξής

$$\begin{aligned}\Delta_{u,m,p}^n &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}',\delta} V_{\mathbf{k}',\delta}^{m,p} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle \\ V_{\mathbf{k}',\delta}^{x(y),0} &= U + [V_\delta - 3\frac{J_\delta}{4}] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \quad V_{\mathbf{k}',\delta}^{x(y),\mu} = [V_\delta + \frac{J_\delta}{4}] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta}.\end{aligned}\quad (2.114)$$

Παρατηρούμε ότι το δυναμικό για κάθε μέσο πεδίο $V_{\mathbf{k}',\delta}^{m,p}$ δεν εξαρτάται από την αναπαράσταση του ρ στον χώρο μεταφοράς ορμής κατά \mathbf{Q} . Ομοίως προκύπτουν οι παρακάτω επιτρεπτές συνιστώσες για ομοιόμορφα

$$H_{PH} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \left[\rho_{z(0)} [(f_s + f_{sext} + f_d + f_{cc} + f_{ss})\tau_z + (f_{px} + f_{py} + f_{cs} + f_{sc})\tau_0] \tilde{P}^\nu \tilde{\sigma}^\nu \right] \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (2.115)$$

και διαμορφωμένα κατά \mathbf{Q} πεδία

$$H_{PH} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \left[([\rho_x[f_s + f_{cc} + f_{ss}] + \rho_y[f_{px} + f_{py}]]\tau_z + [\rho_y[f_{sext} + f_d] + \rho_x[f_{cs} + f_{sc}]]\tau_0) \tilde{P}^{Q,\nu} \tilde{\sigma}^\nu \right] \Psi_{\mathbf{k}}. \quad (2.116)$$

στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου - οπής, όπου $\tilde{P}^\nu \equiv \{\tau_z P_{sPH}, \mathbf{P}_{tPH}\}$, $\tilde{P}^{Q,\nu} \equiv \{\tau_z P_{sPH}^Q, \mathbf{P}_{tPH}^Q\}$, και $\tilde{\sigma}^\nu \equiv \{-\sigma_0, \tilde{\boldsymbol{\sigma}}\}$, ενώ τα μέσα πεδία προβάλλονται στις παρακάτω συνιστώσες

$$\begin{aligned}P_{u,m,p}^n &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}',\delta} V_{\mathbf{k}',\delta}^{0(Q),m,p} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle \\ V_{\mathbf{k}',\delta}^{0(Q),x(y),0} &= \sum_{\delta} \left(\frac{U}{2} + V_\delta e^{i0,(Q)\cdot\delta} \right) - [V_\delta + 3\frac{J_\delta}{4}] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta} \\ V_{\mathbf{k}',\delta}^{0(Q),x(y),\mu} &= \sum_{\delta} \left(-\frac{U}{2} + \frac{J_\delta}{4} e^{i0,(Q)\cdot\delta} \right) - [V_\delta - \frac{J_\delta}{4}] e^{i\mathbf{k}'\cdot\delta}.\end{aligned}\quad (2.117)$$

Εν γένει το δυναμικό για κάθε πεδίο δε σχετίζεται με την αναπαράσταση ρ στον χώρο μεταφοράς ορμής \mathbf{Q} . Σημειώνουμε όμως ότι τα δυναμικά για τα τοπικά μέσα πεδία εξαρτώνται από το διάνυσμα διαμόρφωσης \mathbf{q} .

Συνοψίζοντας η Χαμιλτονιανή του συστήματος στον χώρο των ορμών έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [H_{\mathbf{k}}] \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_n^{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger f_n(\mathbf{k}) [P_{u,m,p}^n \hat{O}_{u,m,p}^P + \Delta_{u,m,p}^n \hat{O}_{u,m,p}^\Delta] \Psi_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_n^{u,m,p} \Phi_{u,m,p}^n f_n(\mathbf{k}) \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}}.\end{aligned}\quad (2.118)$$

Καθώς $f_n(\mathbf{k}) = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot f_n(\delta)}$ όπου $f_n(\delta)$ αντίστοιχη συνάρτηση μορφής στον χώρο θέσεων, οι αυτοσυνεπείς εξισώσεις των μέσων πεδίων αποκτούν την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned}
\Phi_{u,m,p}^n &= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}',\delta} V_{\mathbf{k}',\delta}^{m,p} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle \\
&= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\delta'} e^{i\mathbf{k}\cdot f_n(\delta')} \sum_{\mathbf{k}',\delta} V_{\mathbf{k}',\delta}^{m,p} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle \\
&= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k}', f_n(\delta)} V_{\mathbf{k}',\delta}^{m,p} \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle \\
&= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k}'} V_n^{m,p} f_n(\mathbf{k}') \langle \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} \Psi_{\mathbf{k}'} \rangle, \tag{2.119}
\end{aligned}$$

με τις παρακάτω εκφράσεις για τα δυναμικά

$$\begin{aligned}
V_n^{m,p} f_n(\mathbf{k}) &= \sum_{f_n(\delta)} V_{\mathbf{k},\delta}^{m,p} \\
V_{\mathbf{k},\delta}^{q,x(y),0} &= \sum_{\delta} \left(\frac{U}{2} + V_{\delta} e^{iq\cdot\delta} \right) - [V_{\delta} + 3\frac{J_{\delta}}{4}] e^{ik\cdot\delta} \quad V_{\mathbf{k},\delta}^{q,x(y),\mu} = \sum_{\delta} \left(-\frac{U}{2} + \frac{J_{\delta}}{4} e^{iq\cdot\delta} \right) - [V_{\delta} - \frac{J_{\delta}}{4}] e^{ik\cdot\delta} \\
V_{\mathbf{k},\delta}^{x(y),0} &= U + [V_{\delta} - 3\frac{J_{\delta}}{4}] e^{ik\cdot\delta} \quad V_{\mathbf{k},\delta}^{x(y),\mu} = [V_{\delta} + \frac{J_{\delta}}{4}] e^{ik\cdot\delta}, \tag{2.120}
\end{aligned}$$

όπου η πρώτη γραμμή ισχύει καθώς λόγω της τετραγωνικής συμμετρίας του συστήματος τα δυναμικά εξαρτώνται μόνο από την απόσταση των πλεγματικών θέσεων $V_{|\delta|}, J_{|\delta|}$. Το ενεργειακό φάσμα και οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος προσδιορίζονται από την παρακάτω εξίσωση ιδιοτιμών

$$[i\omega_n - H_{\mathbf{k}}] \mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = I \quad \text{or} \quad H_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}. \tag{2.121}$$

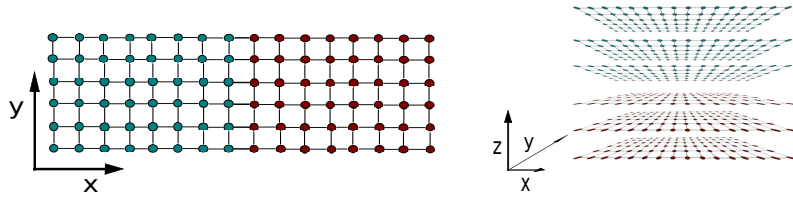
Με βάση τις μήτρες ιδιοκαταστάσεων $U_{\mathbf{k}}$ και ιδιοτιμών $E_{\mathbf{k}}$ ή ισοδύναμα των μητρών Green $\mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ τα μέσα πεδία υπολογίζονται από τις παρακάτω αυτοσυνεπείς εξισώσεις

$$\begin{aligned}
\Phi_{u,m,p}^{q_x,n} &= \frac{1}{4Nm_n\beta} \sum_{\mathbf{k}} f_n(\mathbf{k}) V_n^{m,p} \text{Tr} \{ \hat{O}_{u,m,p} \mathbf{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \} \rightarrow \\
&= \frac{1}{4Nm_n} \sum_{\mathbf{k},r} f_n(\mathbf{k}) V_n^{m,p} \left[U_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{O}_{u,m,p} U_{\mathbf{k}} \right]_{rr} n_F(E_r, \mathbf{k}). \tag{2.122}
\end{aligned}$$

Στην προσέγγιση μέσου πεδίου η Χαμιλτονιανή Εξ. 2.118 επιλύεται αυτοσυνεπώς με τη μέθοδο που παρουσιάστηκε στις προηγούμενες ενότητες η οποία στην περίπτωση αυτή βασίζεται στις Εξ. 2.121 και Εξ. 2.122.

2.8 Περιγραφή συστημάτων διεπαφών

Με βάση τη Χαμιλτονιανή περιγραφή φυσικών συστημάτων στον χώρο των ορμών και στον χώρο των θέσεων μπορούμε να διερευνήσουμε διάφορα είδη ετεροδομών μεταξύ διαφορετικών χβαντικών καταστάσεων τάξης. Η περιγραφή στον χώρο των θέσεων μας παρέχει επιπλέον τη δυνατότητα μελέτης των φαινομένων που αναπτύσσονται στο σύνορο των συστημάτων. Εν συνεχεία παρουσιάζουμε τη γενική περιγραφή των διεπαφών που εξετάστηκαν στην παρούσα διατριβή και συμπληρώνουμε με διάφορα ενδεικτικά παραδείγματα ετεροδομών. Γενικά θεωρούμε συστήματα με εγγενή τετραγωνική συμμετρία τα οποία περιγράφονται σε πλεγματικό χώρο αντίστοιχης συμμετρίας.



Σχήμα 2.1: Δεξιά: Διδιάστατες ετεροδομές όπου η διεπαφή είναι κάθετη σε ένα από τα διανύσματα βάσης του πλέγματος τετραγωνικής συμμετρίας, (100) διεπαφές. β) Τρισδιάστατες ετεροδομές όπου η διεπαφή είναι παράλληλη στα επίπεδα τετραγωνικής συμμετρίας, (001) διεπαφές. Και τα δύο σχήματα αναφέρονται σε ετεροδομές μεταξύ δύο διαφορετικών χημικών καταστάσεων τάξης που σημειώνονται με διαφορετικό χρώμα.

Διεπαφές (100) Για διεπαφές (100) όπου ο άξονας x του συστήματος, που ταυτίζεται με ένα διάνυσμα βάσης του πλέγματος, είναι κάθετος στο επίπεδο διεπαφής μεταξύ δύο διαφορετικών καταστάσεων τάξης (Σχ. 2.1α), η Χαμιλτονιανή αποκτά την παρακάτω γενική μορφή.

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [H_{ij}] \Psi_j = \sum_{i,j} \Psi^\dagger [H_R + H_L + H_c] \Psi$$

$$H = \sum_{i,j} \sum_{q,m,p,n} \Psi_i^\dagger [\Phi_{m,p}^{q,n,L} e^{-iq \cdot i} f_n(\mathbf{x}) \Theta(\mathbf{i}) \hat{O}_{m,p} + \Phi_{m,p}^{q,n,R} e^{-iq \cdot i} f_n(\mathbf{x}) \Theta(-\mathbf{i}) \hat{O}_{m,p} + H_{i,j,c}] \Psi_j. \quad (2.123)$$

όπου $\Theta(\mathbf{i})$ η συνάρτηση Heaviside. Με H_c σημειώνουμε τη Χαμιλτονιανή σύζευξης των δύο περιοχών οι οποίες περιγράφονται από τις Χαμιλτονιανές H_L και H_R . Τα πεδία $\Phi_{m,p}^{q,n}$ που εμπεριέχονται στη Χαμιλτονιανή αναφέρονται, είτε σε σταθερά, είτε σε μέσα πεδία που δημιουργούνται λόγω των αλληλεπιδράσεων των σωματιδίων του συστήματος και τα οποία υπολογίζονται αυτοσυνεπώς. Η παραπάνω Χαμιλτονιανή εύκολα επεκτείνεται για την περιγραφή πολλαπλών διεπαφών (100).

Όπως προαναφέραμε στην περίπτωση αυτή μπορούμε να θεωρήσουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες για την παράλληλη προς το επίπεδο της διεπαφής διεύθυνση y . Στην περίπτωση αυτή είναι καταλληλότερη η περιγραφή του συστήματος στον χώρο θέσεων x - ορμών k_y . Στον χώρο αυτό η Χαμιλτονιανή έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij, k_y} \Psi_{i, k_y}^\dagger [H_{ij, k_y}] \Psi_{j, k_y} = \frac{1}{2} \Psi^\dagger [H_R + H_L + H_c] \Psi$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ij, q_x, k_y}^{m,p,u,n} \Psi_{i, k_y}^\dagger [\Phi_{u,m,p}^{q_x, n, L} e^{-iq_x \cdot i} f_n(ij, k_y) \Theta(i) \hat{O}_{u,m,p} + \Phi_{u,m,p}^{q_x, n, R} e^{-iq_x \cdot i} f_n(ij, k_y) \Theta(-i) \hat{O}_{u,m,p} + H_{ij, k_y, c}] \Psi_{j, k_y}, \quad (2.124)$$

όπου θεωρήσαμε μόνο πεδία με διαμόρφωση κατά τα διανύσματα $q_y = 0$ και $q_y = \pi$. Για τη διερεύνηση διεπαφών μεταξύ καταστάσεων τάξης με διαφορετική χωρική διαμόρφωση q_y καταλληλότερη είναι γενικά η περιγραφή του συστήματος στον χώρο των θέσεων.

Σημειώνουμε ότι με μικρές τροποποιήσεις της παραπάνω γενικής μορφής της Χαμιλτονιανής, τόσο στον χώρο των θέσεων, όσο και στον χώρο των θέσεων-ορμών μπορούμε να περιγράψουμε και διεπαφές (010) και (110).

Παρακάτω παρουσιάζουμε δύο παραδείγματα (100) διεπαφών τα οποία και θα αναλύσουμε εκτενέστερα στα πλαίσια της παρούσας εργασίας.

(100) Διεπαφές κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν SDW/CDW Στη συγκεκριμένη περίπτωση θεωρούμε (100) διεπαφές μεταξύ μιας αντισιδηρομαγνητικής φάσης (SDW) και

ενός κύματος πυκνότητας φορτίου (CDW). Τα τρία τμήματα της Χαμιλτονιανής του συστήματος έχουν την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned}
H_L &= H_{SDW} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [(t_L f_{sext} + t'_L f_{cc} + \mu_L f_s) \tau_z + (h_{z,L} + M_z^Q e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}}) f_s \tau_z \sigma_z] \Theta(\mathbf{i}) \Psi_j \\
H_R &= H_{CDW} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [(t_R f_{sext} + t'_R f_{cc} + \mu_R f_s + N^Q e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}} f_s) \tau_z + h_{z,R} f_s \tau_z \sigma_z] \Theta(-\mathbf{i}) \Psi_j \\
H_c &= \frac{1}{2} \Psi_i^\dagger [t_{\langle L,R \rangle} + t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle} \tau_z] \Psi_j.
\end{aligned} \tag{2.125}$$

Η σύζευξη των δύο περιοχών επιτυγχάνεται μέσω όρων μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτονικών $\langle L, R \rangle$ και αμέσως επόμενων κοντινότερων γειτονικών $\langle\langle L, R \rangle\rangle$ πλεγματικών σημείων που ανήκουν σε διαφορετικές περιοχές. Οι αυτοσυνεπείς εξισώσεις των μέσων πεδίων που επεισέρχονται, έχουν την παρακάτω μορφή όπως αυτή προκύπτει από τη γενική Εξ. 2.66

$$\begin{aligned}
N^Q &= \frac{1}{2N} \sum_{i,j,p} \left[U_{p,i}^\dagger [e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}} V_{N,i} f_s \tau_z]_{i,j} U_{j,p} \right]_{pp} n_F(E_p) \\
M_z^Q &= \frac{1}{2N} \sum_{i,j,p} \left[U_{p,i}^\dagger [e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}} V_{M_z,i} f_s \tau_z \sigma_z]_{i,j} U_{j,p} \right]_{pp} n_F(E_p),
\end{aligned} \tag{2.126}$$

όπου τα δυναμικά αλληλεπίδρασης για κάθε μέσο πεδίο έχουν τη μορφή

$$V_{N,i} = \frac{U_i}{2} + \sum_j [V_{\langle i,j \rangle} + V_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}] \quad V_{M_z,i} = -\frac{U_i}{2} + \sum_j \left[\frac{J_{\langle i,j \rangle}}{4} + \frac{J_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}}{4} \right]. \tag{2.127}$$

Για περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά τον y -άξονα προκύπτει η Χαμιλτονιανή στον χώρο θέσεων-ορμών

$$\begin{aligned}
H_{SDW} &= \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [t_L (\delta_{j,i\pm 1} + 2 \cos k_y \rho_z) \tau_z + (t'_L f_{cc} + \mu_L f_s) \tau_z + (h_{z,L} + M_z^{Q_y} e^{-i\pi \cdot i} \rho_x) f_s \tau_z \sigma_z] \Theta(i) \Psi_{j,k_y} \\
H_{CDW} &= \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [t_R (\delta_{j,i\pm 1} + 2 \cos k_y \rho_z) \tau_z + (t'_R f_{cc} + \mu_R f_s + N^{Q_y} e^{-i\pi \cdot i} f_s \rho_x) \tau_z + h_{z,R} f_s \tau_z \sigma_z] \Theta(i) \Psi_{j,k_y} \\
H_c &= \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [\delta_{j,i\pm 1} (t_{\langle L,R \rangle} + 2t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle} \cos k_y \rho_z) \tau_z] \Psi_{j,k_y}.
\end{aligned} \tag{2.128}$$

(100) Διεπαφές μη-συμβατικού υπεραγωγού συμμετρίας d /σιδηρομαγνήτη Παρουσιάζουμε επίσης μια (100) διεπαφή μεταξύ ενός μη-συμβατικού υπεραγωγού συμμετρίας d και ενός σιδηρομαγνήτη, d /FM. Στον χώρο των θέσεων η Χαμιλτονιανή περιγραφή του συστήματος έχει τη μορφή

$$\begin{aligned}
H_L &= H_F = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [(t_L f_{sext} + t'_L f_{cc} + \mu_L f_s) \tau_z + (h_{z,L} + F_z) f_s \tau_z \sigma_z] \Theta(\mathbf{i}) \Psi_j \\
H_R &= H_d = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [(t_R f_{sext} + t'_R f_{cc} + \mu_R f_s) \tau_z + h_{z,R} f_s \tau_z \sigma_z + \Delta f_d \tau_y \sigma_y] \Theta(-\mathbf{i}) \Psi_j \\
H_c &= \frac{1}{2} \Psi_i^\dagger [(t_{\langle L,R \rangle} + t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle} \tau_z + \lambda_{SO} f_{py} \sigma_x - \lambda_{SO} f_{px} \tau_z \sigma_y)] \Psi_j,
\end{aligned} \tag{2.129}$$

όπου στη Χαμιλτονιανή σύζευξης έχουμε συμπεριλάβει επίσης ένα όρο αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς τύπου Rashba. Βασιζόμενοι στην ίδια εξίσωση μπορούμε να περιγράψουμε διεπαφές (010) μεταξύ των ίδιων φάσεων, θεωρώντας απλά ότι το μη-συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο έχει φάση π . Πιο ενδιαφέρον είναι ότι με μικρές τροποποιήσεις στην παραπάνω Χαμιλτονιανή μπορούμε επίσης να περιγράψουμε διεπαφές (110) μεταξύ των δύο αυτών χβαντικών καταστάσεων τάξης. Συγκεκριμένα για τις (110) διεπαφές d/FM προκύπτει

$$\begin{aligned}
H_L = H_F &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \left[\frac{t_L}{2} f_{cc} + \frac{t'_L}{2} f'_{sext} + \mu_L f_s \right] \tau_z + (h_{z,L} + F_z) f_s \tau_z \sigma_z \Theta(i) \Psi_j \\
H_R = H_d &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \left[\left(\frac{t_R}{2} f_{cc} + \frac{t'_R}{2} f'_{sext} + \mu_R f_s \right) \tau_z + h_{z,R} f_s \tau_z \sigma_z + \frac{1}{2} \Delta f_{ss} \tau_y \sigma_y \right] \Psi_i \\
H_c &= \frac{1}{2} \Psi_i^\dagger t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle} \tau_z \Psi_i,
\end{aligned} \tag{2.130}$$

στον χώρο των θέσεων. Στην παραπάνω Χαμιλτονιανή έχουν αλλάξει οι κινητικοί όροι κάθε περιοχής καθώς στην περίπτωση αυτή δε θεωρούμε όρους μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων αλλά αντίστοιχους με τους προηγούμενους όρους μεταπήδησης μεταξύ αμέσως επόμενων κοντινότερων γειτόνων και πλεγματικών σημείων που συνδέονται μέσω των διανυσμάτων $\mathbf{j} - \mathbf{i} = (\pm 2, 0)$ και $\mathbf{j} - \mathbf{i} = (0, \pm 2)$ και αντιστοιχούν στη συνάρτηση μορφής f'_{sext} . Τέλος, θεωρούμε μόνο τους όρους σύζευξης $t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle}$ των περιοχών αν και εύκολα μπορούμε να εισάγουμε επιπλέον κινητικούς όρους σύζευξης. Για το μη συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο έχουμε θεωρήσει αντί της συνάρτησης μορφής f_d τη συνάρτηση f_{ss} . Στην ουσία το σύστημα έχει τροποποιηθεί μέσω ενός μετασχηματισμού στροφής κατά $\pi/4$.

Για περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά την παράλληλη προς τη διεπαφή διεύθυνση η Χαμιλτονιανή μπορεί να πάρει και την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned}
H_L = H_F &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[t_L (\delta_{j,i\pm 1} + 2 \cos k_y \rho_z) \tau_z + (t'_L f_{cc} + \mu_L f_s) \tau_z + (h_{z,L} + F_z) f_s \tau_z \sigma_z \right] \Theta(i) \Psi_{j,k_y} \\
H_R = H_d &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[t_R (\delta_{j,i\pm 1} + 2 \cos k_y \rho_z) \tau_z + (t'_R f_{cc} + \mu_R f_s) \tau_z + h_{z,R} f_s \tau_z \sigma_z \right. \\
&\quad \left. + \Delta (\delta_{j,i\pm 1} \rho_z - 2 \cos k_y) \tau_y \sigma_y \right] \Theta(i) \Psi_{j,k_y} \\
H_c &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[\delta_{j,i\pm 1} (t_{\langle L,R \rangle} + 2t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle} \cos k_y \rho_z) \tau_z \right] \Psi_{j,k_y}
\end{aligned} \tag{2.131}$$

για (100) διεπαφές, ενώ αντίστοιχα για τις (110) διεπαφές προκύπτει

$$\begin{aligned}
H_L = H_F &= \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[\frac{t_L}{2} f_{cc} \tau_z + \left(\frac{t'_L}{2} (\delta_{j,i\pm 2} + \cos 2k_y \rho_z) + \mu_L f_s \right) \tau_z + (h_{z,L} + F_z) f_s \tau_z \sigma_z \right] \Theta(i) \Psi_{j,k_y} \\
H_R = H_d &= \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[\frac{t_R}{2} f_{cc} \tau_z + \left(\frac{t'_R}{2} (\delta_{j,i\pm 2} + \cos 2k_y \rho_z) + \mu_R f_s \right) \tau_z + h_{z,R} f_s \tau_z \sigma_z + \Delta f_{ss} \tau_y \sigma_y \right] \Theta(i) \Psi_{j,k_y} \\
H_c &= \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger \left[\delta_{j,i\pm 1} (t_{\langle L,R \rangle} + 2t'_{\langle\langle L,R \rangle\rangle} \cos k_y \rho_z) \tau_z \right] \Psi_{j,k_y}.
\end{aligned} \tag{2.132}$$

Διεπαφές (001) Εν συνεχεία παρουσιάζουμε τρισδιάστατες ετεροδομές όπου η διεπαφή μεταξύ των διαφορετικών κβαντικών καταστάσεων τάξης είναι παράλληλη προς τα πλεγματικά επίπεδα, διεπαφές (001) (Σχ. 2.1β). Η γενική μορφή μιας Χαμιλτονιανής που περιγράφει διεπαφές (001) μεταξύ δύο κβαντικών καταστάσεων τάξης έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j,l} \Psi_{i,l}^\dagger [H_{ij,l,l'}] \Psi_{j,l'} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [H_l + H_{l'}] \Psi_j$$

$$H = \sum_{i,j,l} \sum_{q,m,p,n} \Psi_i^\dagger [\Phi_{m,p,l}^{q,n} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \Theta(l) \hat{O}_{m,p}^{q,n} + \Phi_{m,p,l}^{q,n} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{i}} f_n(\mathbf{x}) \Theta(-l) \hat{O}_{m,p}^{q,n} + H_{\langle l,l' \rangle}] \Psi_j. \quad (2.133)$$

όπου ο δείκτης l αντιστοιχεί στα στρώματα της ετεροδομής, ενώ με $H_{\langle l,l' \rangle}$ σημειώνουμε τους όρους σύζευξης των στρωμάτων. Στην περίπτωση αυτή μπορούμε να θεωρήσουμε περιοδικές συνθήκες παράλληλα στο επίπεδο της διεπαφής και να επιλύσουμε το πρόβλημα στον χώρο των ορμών μέσω της παρακάτω γενικής Χαμιλτονιανής

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},l} \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger [H_{\mathbf{k},l,l'}] \Psi_{\mathbf{k},l'} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [H_l + H_{l'}] \Psi_{\mathbf{k}} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},l} \sum_{m,p,n} \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger [\Phi_{m,p,l}^n f_n(\mathbf{k}) \Theta(l) \hat{O}_{m,p}^n + \Phi_{m,p,l}^n f_n(\mathbf{k}) \Theta(-l) \hat{O}_{m,p}^n + H_{\langle l,l' \rangle}] \Psi_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (2.134)$$

Στην παρούσα εργασία θεωρούμε ότι η παραπάνω Χαμιλτονιανή αναφέρεται στον σπίνορα

$$\Psi_{\mathbf{k},\mathbf{Q}}^\dagger = \left(\psi_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, \psi_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, \psi_{-\mathbf{k},\uparrow}, \psi_{-\mathbf{k},\downarrow}, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger, \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}, \psi_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow} \right), \quad (2.135)$$

και επομένως τα πεδία Φ σε κάθε επίπεδο είναι, είτε ομοιομόρφα, είτε διαμορφωμένα κατά $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

(001) Διεπαφές κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν SDW/CDW Ενδεικτικά παρουσιάζουμε παρακάτω τη Χαμιλτονιανή περιγραφή μιας (001) διεπαφής SDW/CDW

$$\begin{aligned} H_{SDW} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,l} \Psi_{i,l}^\dagger \left[\{ (t^{sdw} f_{sext} + t'^{sdw} f_{cc} + \mu^{sdw} f_s) \tau_z + (h_z^{sdw} + M_z^{\mathbf{Q}} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}}) f_s \tau_z \sigma_z \} \delta_{l,l'} \right. \\ \left. + (t_{l,l'}^{sdw} f_s + t'_{l,l'}^{sdw} f_{sext}) \delta_{l',l,\pm 1} \right] \Psi_{j,l'} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_{CDW} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,l} \Psi_{i,l}^\dagger \left[\{ (t^{cdw} f_{sext} + t'^{cdw} f_{cc} + \mu^{cdw} f_s + N^{\mathbf{Q}} e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{i}} f_s) \tau_z + h_z^{cdw} f_s \tau_z \sigma_z \} \delta_{l,l'} \right. \\ \left. + (t_{l,l'}^{cdw} f_s + t'_{l,l'}^{cdw} f_{sext}) \delta_{l',l,\pm 1} \right] \Psi_{j,l'} \end{aligned}$$

$$H_{\langle l,l' \rangle} = (t_{\langle l,l' \rangle} f_s + t'_{\langle l,l' \rangle} f_{sext}) \tau_z$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j,l} \Psi_{i,l}^\dagger [H_{SDW} \Theta(l) + H_{CDW} \Theta(-l) + H_{\langle l,l' \rangle}] \Psi_{j,l'}, \quad (2.136)$$

όπου ως όρους σύζευξης μεταξύ των στρωμάτων θεωρήσαμε μόνο τους διαστρωματικούς όρους μεταπήδησης μεταξύ της ίδιας πλεγματικής θέσης $t_{l,l'} f_s$ και κοντινότερων γειτονικών πλεγματικών θέσεων $t'_{l,l'} f_{sext}$. Προφανώς εύκολα μπορούμε να προσθέσουμε επιπλέον όρους σύζευξης.

Όπως προαναφέραμε για τις παραπάνω διεπαφές μπορούμε να θεωρήσουμε περιοδικές συνθηκές συνθήκες στο επίπεδο της διεπαφής. Η καταλληλότερη περιγραφή του συστήματος είναι στην περίπτωση αυτή η περιγραφή στον χώρο των ορμών. Στον χώρο αυτό η παραπάνω Χαμιλτονιανή έχει την ακόλουθη μορφή

$$H_{SDW} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, l} \Psi_{\mathbf{k}, l}^\dagger \left[\{ (t^{sdw} f_{sext} \rho_z + t'^{sdw} f_{cc} + \mu^{sdw} f_s) \tau_z + (h_z^{sdw} + M_z^Q \rho_x) f_s \tau_z \sigma_z \} \delta_{l, l'} + (t_{l, l'}^{sdw} f_s + t'_{l, l'}{}^{sdw} f_{sext} \rho_z) \delta_{l', l, \pm 1} \right] \Psi_{\mathbf{k}, l'}$$

$$H_{CDW} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, l} \Psi_{\mathbf{k}, l}^\dagger \left[\{ (t^{cdw} f_{sext} + t'^{cdw} f_{cc} + \mu^{cdw} f_s + N^Q e^{-i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{i}} f_s) \tau_z + h_z^{cdw} f_s \tau_z \sigma_z \} \delta_{l, l'} + (t_{l, l'}^{cdw} f_s + t'_{l, l'}{}^{cdw} f_{sext} \rho_z) \delta_{l', l, \pm 1} \right] \Psi_{\mathbf{k}, l'}$$

$$H_{<l, l'>} = (t_{<l, l'>} f_s + t'_{<l, l'>} f_{sext} \rho_z) \tau_z$$

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, l} \Psi_{\mathbf{k}, l}^\dagger [H_{SDW} \Theta(l) + H_{CDW} \Theta(-l) + H_{<l, l'>}] \Psi_{\mathbf{k}, l'}. \quad (2.137)$$

Βεβαίως μπορούμε να θεωρήσουμε περιοδικές συνθηκές μόνο κατά μία εκ των δύο διευθύνσεων του επιπέδου οπότε και το σύστημα περιγράφεται καλύτερα στον χώρο θέσεων x - ορμών k_y . Τέλος, σημειώνουμε ότι η περιγραφή πολυστρωματικών συστημάτων ισοδυναμεί με την περιγραφή συστημάτων πολλών τροχιακών.

Κλείνοντας, στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάσαμε την μέθοδο βάσει της οποίας μελετήσαμε συστήματα ετεροδομών μεταξύ διαφορετικών χβανιτικών καταστάσεων τάξης. Η μέθοδος που παρουσιάσαμε βασίζεται στο πλεγματικό μοντέλο Hubbard απλοποιημένο μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου. Τέλος, σημειώνουμε ότι συστήματα ετεροδομών έχουν μελετηθεί και από πολλές άλλες ερευνητικές ομάδες χρησιμοποιώντας, είτε πλεγματικά, είτε συνεχή μοντέλα [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47].

Κεφάλαιο 3

Επαγόμενα πεδία από συνύπαρξη διαφορετικών κβαντικών καταστάσεων τάξης

3.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζουμε τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων [48] και καταδεικνύουμε την εγκυρότητά του, τόσο σε ομοιογενή συστήματα, όσο και σε ετεροδομές μεταξύ διαφορετικών κβαντικών καταστάσεων τάξης. Σύμφωνα με τον συγκεκριμένο κανόνα κάθε πεδίο ισοδυναμεί με ένα γινόμενο τριών τουλάχιστον πεδίων. Σημειώνουμε όμως ότι το αντίθετο δεν ισχύει, καθώς ένα γινόμενο τριών πεδίων δεν αντιστοιχεί πάντοτε σε ένα ανεξάρτητο πεδίο.

Θεωρούμε αρχικά πεδία που δρουν στον χώρο Fock που περιλαμβάνει διάφορους βαθμούς ελευθερίας όπως σπιν, ορμή, τροχιακή κατάσταση κ.α.. Συγκεκριμένα διακρίνουμε μεταξύ των συνεχών (διακριτών) βαθμών ελευθερίας που σχηματίζουν ομάδες τύπου $U(\infty)(U(N))$ όπως είναι η ορμή, και σε ισο-σπιν βαθμούς ελευθερίας που οργανώνονται σε ομάδες ισομορφικές της $SU(2)$. Ένα τέτοιο πεδίο \mathcal{A} μπορεί να εκφρασθεί στην παρακάτω γενική μορφή

$$\mathcal{A} = \hat{A}f_A \quad (3.1)$$

όπου \hat{A} είναι η μήτρα σπινორιακής αναπαράστασης του πεδίου που δρα στους ισο-σπιν βαθμούς ελευθερίας, οι οποίοι συνολικά σχηματίζουν χώρους της μορφής $SU(2^n)$ όπου n ο αριθμός των συγκεκριμένων βαθμών ελευθερίας, ενώ οι συναρτήσεις f_A δρουν πάνω στους συνεχείς βαθμούς ελευθερίας της μορφής $U(\infty)$. Ο κανόνας των επαγόμενων πεδίων εκφρασμένος αρχικά στη μορφή [48]

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} = \pm I, \quad (3.2)$$

μπορεί να γενικευθεί στην παρακάτω έκφραση

$$\int f_A f_B f_C f_D \text{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D}\} = \pm 1 \quad (3.3)$$

θεωρώντας κανονικοποιημένες μήτρες και συναρτήσεις. Η παραπάνω εξίσωση πληρότητας αποκτά την παρακάτω μορφή για διακριτούς χώρους $U(N)$

$$\text{Tr}\{[f_A\hat{A}][f_B\hat{B}][f_C\hat{C}][f_D\hat{D}]\} = \pm 1, \quad (3.4)$$

όπου οι συνεχείς συναρτήσεις f μετατρέπονται σε $N \times N$ πίνακες. Χρησιμοποιώντας την ορθοκανονική ιδιότητα των πεδίων $Tr\{[f_R \hat{R}][f_{R'} \hat{R}']^\dagger\} = \delta_{R,R'}$ οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι κάθε ένα από τα τέσσερα πεδία αποτελεί ισοδύναμη έκφραση του γινομένου των υπόλοιπων τριών

$$[D] = \hat{D}f_D = \pm[C][B][A], \quad (3.5)$$

όπου έχουμε εισάγει τη συνολική αναπαράσταση $[A] = f_A \hat{A}$ κάθε πεδίου για την οποία ισχύει $[A]^\dagger = [A]$. Σημειώνουμε ότι λόγω των γενικών ιδιοτήτων των πεδίων που δρουν σε φερμιόνια οι παραπάνω σχέσεις ορθοκανονικότητας Εξ.3.3 ή Εξ.3.4 δεν μπορούν να ικανοποιηθούν από τρία πεδία. Συγκεκριμένα, οι αναπαραστάσεις των πεδίων πρέπει να ικανοποιούν τις παρακάτω σχέσεις

$$\tau_x[A]\tau_x = -[A]^T \quad [A] = [A]^\dagger \rightarrow \tau_x[A]\tau_x = -[A]^*, \quad (3.6)$$

όπου $[A] = f_A \hat{A}$ η συνολική αναπαράσταση του πεδίου και τ_x η μήτρα Pauli που δρα στον χώρο Nambu. Σύμφωνα με τη σχέση Εξ. 3.6, για τρία πεδία με τις παραπάνω ιδιότητες ισχύει

$$Tr\{[A][B][C]\} = -Tr\{([A]^*[B]^*[C]^*)\} = -Tr\{([A][B][C])\}^* \in \mathfrak{S}. \quad (3.7)$$

Αντιθέτως για τέσσερα πεδία προκύπτει

$$Tr\{[A][B][C][D]\} = Tr\{([A][B][C][D])\}^* \in \mathfrak{R}. \quad (3.8)$$

Ο παραπάνω κανόνας έχει σημαντικές εφαρμογές καθώς μας δείχνει τον δρόμο για τη δημιουργία ενεργών πεδίων με σημαντικές ιδιότητες, τα οποία όμως δεν εμφανίζονται συχνά σε φυσικά συστήματα. Ενδεικτικά παραθέτουμε διάφορες περιπτώσεις εφαρμογής του κανόνα με ενδιαφέροντα αποτελέσματα, όπως είναι η δημιουργία ενός πεδίου Zeeman από τη συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν (με το ίδιο κυματόνισμα διαμόρφωσης) παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής, σημαντικό αποτέλεσμα στα πλαίσια του φαινομένου της κολοσσιαίας μαγνητοαντίστασης [49, 50], καθώς και η δημιουργία π - triplet υπεραγωγίων πεδίων από τον συνδυασμό d - wave πεδίων ζεύξης με αντισιδηρομαγνητικά πεδία και ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής [51, 52, 53, 54]. Σημειώνουμε ότι οι διάφορες προτάσεις που παρουσιάστηκαν στο εισαγωγικό κεφάλαιο της παρούσας διατριβής και αφορούν τη δημιουργία ενεργών υπεραγωγίων πεδίων p συμμετρίας, εμπίπτουν στο πεδίο εφαρμογής του κανόνα και επιβεβαιώνουν την εγκυρότητα του.

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε εφαρμογές του κανόνα επαγόμενων πεδίων σε συγκεκριμένες περιπτώσεις. Αρχικά δείχνουμε πως ένα νηματικό πεδίο επάγεται, όταν υπεραγωγία πεδία s_{\pm} και d - wave συμμετρίας συνυπάρχουν στο εσωτερικό ενός συστήματος και εν συνεχεία, παρουσιάζουμε πως ενεργά p υπεραγωγία πεδία μπορούν να δημιουργηθούν σε διεπαφές συμβατικού υπεραγωγού/τοπολογικού μονωτή και συμβατικού υπεραγωγού/ημιαγωγού.

3.2 Πεδία επαγόμενα σε ομοιογενή συστήματα

3.2.1 Νηματική υπεραγωγιμότητα στα οξυπνικτίδια του σιδήρου

Το 2008, ανακαλύφθηκε μια νέα κλάση υλικών υψηλής υπεραγωγιμης θερμοκρασίας οι Fe-ούχοι υπεραγωγοί ($FeBS$). Μέσα σε δύο μόνο μήνες, η εντατική έρευνα στα υλικά αυτά οδήγησε στην αύξηση της κρίσιμης θερμοκρασίας κατά 30K, από 26K ($LaFeAsO$) σε 55K ($SmFeAs_{1-x}F_x$). Όμως, η ραγδαία αύξηση στην κρίσιμη υπεραγωγίμη θερμοκρασία της νέας αυτής ομάδας υπεραγωγίων υλικών, η οποία σήμερα έχει ως μέγιστο τους 65K, δεν συνοδεύτηκε και από αντίστοιχη επιτυχία στην κατανόηση του μηχανισμού δημιουργίας της υπεραγωγιμης φάσης. Μάλιστα, ακόμα δεν έχει προσδιοριστεί ξεκάθαρα ούτε η συμμετρία του υπεραγωγίμου ενεργειακού χάσματος.

Φαίνεται πως στους *FeBS* η συμμετρία του χάσματος δεν εμφανίζει την παγκοσμιότητα που χαρακτηρίζει το υπεραγωγίμο χάσμα στα οξειδία του χαλκού (cuprates), την άλλη ομάδα υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας, δυσκολεύοντας έτσι τις σχετικές θεωρητικές προσπάθειες. Η πολυπλοκότητα των *FeBS* υπεραγωγών μπορεί εν μέρει να αποδοθεί στον πολυτροχιακό χαρακτήρα της επιφάνειας Fermi στα υλικά αυτά. Γενικά, η επιφάνεια Fermi των *FeBS* αποτελείται από δύο επιφάνειες τύπου οπής και δύο επιφάνειες τύπου ηλεκτρονίου των οποίων τα κέντρα στον αντίστροφο χώρο των κυματανυσμάτων απέχουν ακριβώς κατά $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, και πιο συγκεκριμένα τοποθετούνται γύρω από τα σημεία $\Gamma = (0, 0)$ και $M = (\pi, \pi)$ της πρώτης ζώνης Brillouin αντίστοιχα. Παρόλ' αυτά οι ζώνες ηλεκτρονίου και οπής δεν παρουσιάζουν καλή προσαρμογή καθώς έχουν εν γένει διαφορετικά σχήματα.

Σε μια σειρά από αυτά τα υλικά όπως τα $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$, $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ και $\text{K}_x\text{Fe}_{2-x}\text{Se}_2$ υπάρχουν πειραματικές ενδείξεις για μη συμβατική υπεραγωγιμότητα χωρίς σημεία μηδενισμού του χάσματος [55] και με αλλαγή προσήμου του υπεραγωγίμου πεδίου μεταξύ των επιφανειών Fermi τύπου ηλεκτρονίου και τύπου οπής [56]. Αντίθετα, για τα KFe_2As_2 , LiFeP , LaOFeP , $\text{BaFe}(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ και $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ru}_x\text{As}_2$, πειράματα που περιλαμβάνουν πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό (NMP), ηλεκτρονική φασματοσκοπία σάρωσης (STM), μετρήσεις θερμικής αγωγιμότητας και βάνθους εισχώρησης, καταδεικνύουν την ύπαρξη σημείων μηδενισμού του υπεραγωγίμου ενεργειακού χάσματος [57]. Τα παραπάνω πειραματικά αποτελέσματα καταδεικνύουν ότι η συμμετρία του υπεραγωγίμου ενεργειακού χάσματος στους *FeBS* υπεραγωγούς είναι εύθραυστη και εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό και από άλλες παραμέτρους. Μάλιστα, προσφάτες εργασίες έδειξαν την πιθανότητα μεταβάσεων συμμετρίας [60, 61, 62, 63, 65] ανεξάρτητα από τον μηχανισμό της υπεραγωγιμότητας. Σημειώνουμε ότι οι μεταβάσεις συμμετρίας του υπεραγωγίμου χάσματος αποτελούν ένα ιδιαίτερο χαρακτηριστικό του υπεραγωγίμου μηχανισμού με βάση την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων-φωονίων μικρής μεταφοράς ορμής (small-q electron-phonon interaction) [60, 61], καθώς στην προσέγγιση αυτή το υπεραγωγίμο χάσμα για κάθε ορμή εμφανίζεται σχεδόν ανεξάρτητο από τη μορφή του στην υπόλοιπη επιφάνεια Fermi (momentum decoupling property) [66]. Συγκεκριμένα, οι s_{\pm} και d συμμετρίες του υπεραγωγίμου χάσματος ευνοούνται από τη γενική τοπολογία της επιφάνειας Fermi των *FeBS* υπεραγωγών. Η υπεραγωγίμη φάση s_{\pm} αντιστοιχεί σε ενεργειακό χάσμα χωρίς σημεία μηδενισμού και σε πεδίο που αλλάζει πρόσημο στις επιφάνειες Fermi διαφορετικού τύπου, ενώ η υπεραγωγίμη φάση d εμφανίζει σημεία μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος και αλλάζει πρόσημο στους μετασχηματισμούς στροφής κατά 90° . Ο ανταγωνισμός μεταξύ αυτών των δύο φάσεων θεωρείται μια πιθανή εξήγηση για τα αντικρουόμενα πειραματικά αποτελέσματα που προκύπτουν όσον αφορά τη συμμετρία του υπεραγωγίμου χάσματος στους *FeBS*. Σημειώνουμε, ότι σε περίπτωση που επικρατούσε μια εκ των συμμετριών s , s_{\pm} ή d για την υπεραγωγίμη παράμετρο τάξης, τα πειραματικά δεδομένα θα έπρεπε να συμφωνούν ως προς την απουσία (s , s_{\pm}) ή παρουσία (d) σημείων μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος.

Μια χαρακτηριστική ιδιότητα των *FeBS* υπεραγωγών που τους διακρίνει από τα οξειδία του χαλκού είναι η εμφάνιση νηματικής τάξης κοντά σε περιοχές ηλεκτρονικής αστάθειας ως προς τη δημιουργία μαγνητικής, υπεραγωγίμης ή τροχιακής τάξης. Τα κυριότερα σενάρια για τη δημιουργία της νηματικής τάξης βασίζονται, είτε σε δομικές παραμορφώσεις λόγω δράσης φωονίων [67], είτε στην εμφάνιση τροχιακής τάξης μεταξύ των τροχιακών d_{xz} και d_{yz} του σιδήρου [68] ή τέλος στη δημιουργία φάσεων μαγνητικής τάξης όπου τα σπιν εμφανίζουν αντισιδηρομαγνητική τάξη μόνο ως προς ένα κρυσταλλογραφικό άξονα (stripe) [69, 70]. Όμως πολλά πρόσφατα πειράματα καταδεικνύουν ότι η νηματική τάξη στα υλικά αυτά προέρχεται πιθανότατα από ηλεκτρονιακές συσχετίσεις παρά από πλεγματικές παραμορφώσεις προκρίνοντας τους δύο τελευταίους μηχανισμούς. Επιπλέον λόγω της εγγύτητας της νηματικής φάσης με αντισιδηρομαγνητικές αστάθειες προκρίνεται η θεωρία βάσει της οποίας η νηματική φάση οδηγείται από μαγνητικές διακυμάνσεις που σταθεροποιούν νηματικά κύματα πυκνότητας σπιν [71, 72].

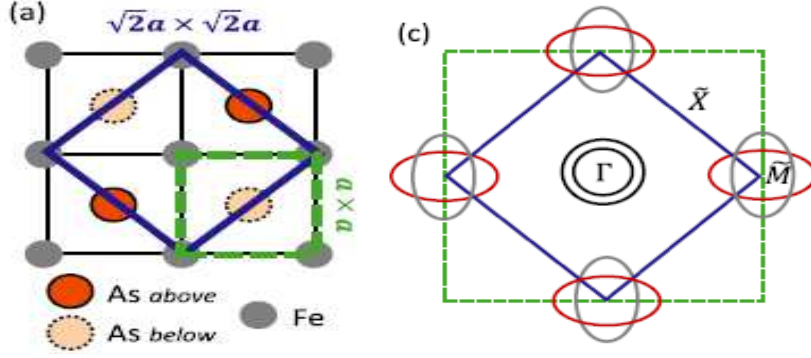
Νηματικές ηλεκτρονιακές φάσεις έχουν παρατηρηθεί όμως και στο iron selenide (FeSe), έναν από τους πιο απλούς *FeBS* υπεραγωγούς με κρίσιμη θερμοκρασία $T_c \sim 9\text{K}$, όπου πιθανότατα η υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται λόγω αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίων-φωονίων [74]. Μετρήσεις αγωγιμότητας σήραγγος [75] σε κρυσταλλικά υμένα FeSe , ανέδειξαν την ύπαρξη νηματικής τάξης η

οποία δεν μπορεί να αποδοθεί στις μικρές σχετικά νηματικές πλεγματικές παραμορφώσεις. Επομένως και στα υλικά αυτά η νηματική συμπεριφορά θεωρείται ότι προέρχεται από ηλεκτρονιακές συσχετίσεις. Όμως, στο FeSe δεν εμφανίζονται φάσεις κυμάτων πυκνότητας σπιν [76], καθιστώντας έτσι απίθανο το σενάριο οι σχετικές νηματικές φάσεις να εμφανίζονται λόγω μαγνητικών διακυμάνσεων. Για τον λόγο αυτό διάφορες ερευνητικές ομάδες προκρίνουν θεωρίες που βασίζονται στην εμφάνιση τάξης φορτίου [77, 78].

Όπως και για τα υπόλοιπα υλικά της συγκεκριμένη ομάδας, τα πειραματικά αποτελέσματα σχετικά με τη συμμετρία του υπεραγωγίμου χάσματος στο FeSe είναι αντιφατικά. Μετρήσεις STM αποκαλύπτουν την παρουσία γραμμών μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος στη νηματική υπεραγωγίμη φάση [75], σε συμφωνία με προηγούμενα αποτελέσματα από μετρήσεις NMR [79]. Αντίθετα μετρήσεις θερμικής αγωγιμότητας [80] και ειδικής θερμότητας [81] καταδεικνύουν ένα υπεραγωγίμο χάσμα χωρίς σημεία μηδενισμού. Βασιζόμενοι στον ανταγωνισμό των s_{\pm} και d συμμετριών ως πιθανή εξήγηση για τα αντικρουόμενα πειραματικά αποτελέσματα σε σχέση με το υπεραγωγίμο χάσμα, προτείνουμε ότι οι νηματικές ηλεκτρονιακές ιδιότητες στο FeSe και γενικά στους *FeBS* υπεραγωγούς οφείλονται στη δημιουργία $s_{\pm} + d$ μικτών φάσεων, είτε στο κανάλι υπεραγωγιμότητας, είτε στο κανάλι των κυμάτων πυκνότητας φορτίου. Παρακάτω παρουσιάζουμε αναλυτικά τη διερεύνηση για την πιθανή συνύπαρξη των s_{\pm} και d συμμετριών στο κανάλι της υπεραγωγιμότητας.

Αριθμητικά αποτελέσματα Το βασικό κρυσταλλογραφικό στοιχείο των *FeBS* είναι το επίπεδο FeAs, όπου τα άτομα As μπορούν να αντικατασταθούν από άτομα P, Se ή Te. Το επίπεδο FeAs είναι μία υπέρθεση από ένα τετράγωνο $a \times a$ από ιόντα Fe και ένα τετράγωνο διαστάσεων $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$ από ιόντα As περιστραμμένο κατά $\pi/4$ σε σχέση με το επίπεδο των ιόντων Fe. Η καθοριστική όμως ιδιότητα του As επιπέδου είναι ότι τα ιόντα As εναλλάσσονται πάνω και κάτω από το επίπεδο του Fe. Για τον λόγο αυτό, η ελάχιστη μοναδιαία κυψελίδα του FeAs επιπέδου περιλαμβάνει δύο ιόντα σιδήρου. Στην περίπτωση που τα ιόντα As είχαν σταθερή απόσταση από τα ιόντα σιδήρου η αντίστοιχη μοναδιαία κυψελίδα θα περιείχε ένα ιόν Fe. Οι ζώνες Brillouin που αντιστοιχούν σε κάθε μία από τις παραπάνω μοναδιαίες κυψελίδες σχετίζονται με το διάνυσμα αναδίπλωσης $\mathbf{Q} = (\pi/a, \pi/a)$, αφού η ζώνη Brillouin (BZ) με $\mathbf{k} \in (\pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{\pi}{a})$ αντιστοιχεί στη μοναδιαία κυψελίδα ενός Fe ιόντος, ενώ η αναδιπλωμένη ζώνη Brillouin (Folded Brillouin Zone, FBZ) με $\mathbf{k} \in (\pm\frac{\sqrt{2}\pi}{2a}, \pm\frac{\sqrt{2}\pi}{2a})$ αντιστοιχεί στην άλλη περίπτωση. Τα περισσότερα πειραματικά αποτελέσματα και οι ενεργειακές ζώνες που προκύπτουν από τη θεωρία συναρτησιακού πυκνότητας (DFT) αναφέρονται στην FBZ των δύο ιόντων Fe ανά μοναδιαία κυψελίδα, η οποία είναι και η κρυσταλλογραφικά σωστή. Συνεπώς στη μελέτη μας που παρουσιάζουμε παρακάτω χρησιμοποιήσαμε ένα απλοποιημένο μοντέλο ενεργειακών ζωνών που αναφέρεται στην αναδιπλωμένη ζώνη FBZ. Για την αποφυγή παρανοήσεων σημειώνουμε ότι πολλές πειραματικές αλλά και θεωρητικές μελέτες αναφέρονται στη ζώνη Brillouin που αντιστοιχεί σε μοναδιαίες κυψελίδες με ένα ιόν Fe. Σε κάθε περίπτωση όμως τα γενικά χαρακτηριστικά της ηλεκτρονιακής δομής των *FeBS* υπεραγωγίμων υλικών βασίζονται στην ύπαρξη δύο ενεργειακών ζωνών τύπου οπής, οι οποίες τέμνουν το επίπεδο Fermi κοντά στο σημείο Γ [$\mathbf{k} = (0, 0)$] και είναι καλά διαχωρισμένες από δύο ενεργειακές ζώνες τύπου ηλεκτρονίου που τέμνουν το επίπεδο Fermi κοντά στις γωνίες M [$\mathbf{k} = (\pm\frac{\sqrt{2}\pi}{2a}, \pm\frac{\sqrt{2}\pi}{2a})$] της FBZ (Σχ. 3.1).

Για τη μελέτη μας, εισάγουμε ένα μινιμαλιστικό μοντέλο για την ηλεκτρονιακή δομή των *FeBS* που αποτελείται από δύο ενεργειακές ζώνες και συγκεκριμένα μια ζώνη τύπου οπής με επιφάνεια Fermi γύρω από το σημείο $\Gamma(0,0)$ και μια ζώνη τύπου ηλεκτρονίου με επιφάνεια Fermi γύρω από το σημείο $M(\pi, \pi)$. Οι ενεργειακές ζώνες οπής και ηλεκτρονίου περιγράφονται από τις σχέσεις ενεργειακής διασποράς $\epsilon_e(\mathbf{k}) = \gamma(\mathbf{k}) - \delta(\mathbf{k}) + C - \mu$ και $\epsilon_h(\mathbf{k}) = \gamma(\mathbf{k}) + \delta(\mathbf{k}) - C - \mu$ αντίστοιχα. Στις παραπάνω σχέσεις ο κινητικός όρος $\gamma(\mathbf{k}) = t(\cos k_x + \cos k_y)$ αντιστοιχεί σε μεταπήδηση ηλεκτρονίων σε κοντινότερους πλεγματικούς γείτονες, ενώ ο όρος $\delta(\mathbf{k}) = t' \cos k_x \cos k_y$ αντιστοιχεί στους αμέσως επόμενους κοντινότερους γείτονες. Επιπλέον θεωρούμε μια παράμετρο C που διαχωρίζει τις δύο ενεργειακές ζώνες και ένα όρο χημικού δυναμικού μ , ενώ έχουμε επίσης θεωρήσει $\frac{\sqrt{2}}{2a} = 1$ για λόγους απλότητας. Στις παραπάνω σχέσεις θέτουμε ως σταθερές παραμέτρους $t' = 0.5$ και $C = 2$ σε μονάδες του ολοκληρώματος t . Το παραπάνω μοντέλο επιδεικνύει



Σχήμα 3.1: αριστερά) Πλέγμα $FeAs$ όπου σημειώνονται τα άτομα As πάνω και κάτω από το επίπεδο Fe . Η διακεκομμένη πράσινη και η μπλε γραμμή σημειώνουν τις μοναδιαίες κυψελίδες με ένα και δύο άτομα Fe , αντίστοιχα. δεξιά) Η επιφάνεια Fermi στην αναδιπλωμένη ζώνη Brillouin η οποία σημειώνεται με την μπλε γραμμή και αντιστοιχεί στη μοναδιαία κυψελίδα δύο ατόμων Fe . Αναπαράγεται από [64].

τα βασικά χαρακτηριστικά της ηλεκτρονιακής δομής των συγκεκριμένων υλικών, καθώς αντιστοιχεί σε καλά διαχωρισμένες επιφάνειες Fermi τύπου οπής και ηλεκτρονίου των οποίων τα κέντρα στον αντίστροφο χώρο συνδέονται με το διάνυσμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Σημειώνουμε ότι η προσέγγιση της μίας ζώνης για κάθε τύπο είναι ικανοποιητική, καθώς οι δύο επιφάνειες τύπου οπής είναι παρόμοιες σε μέγεθος και σχήμα ιδιότητα που ισχύει σε σχετικά μικρότερο βαθμό και για τις δύο επιφάνειες τύπου ηλεκτρονίου. Παρόλο που στο συγκεκριμένο μοντέλο για $\mu = 0$ προκύπτει τέλεια συναρμογή των δύο επιφανειών, $\varepsilon_e(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = -\varepsilon_h(\mathbf{k})$, θεωρούμε ότι είναι επαρκές για την ανάδειξη του ιδιαίτερου ανταγωνισμού μεταξύ των διάφορων συμμετρών του υπεραγωγίμου χάσματος. Επισημαίνουμε επίσης ότι η ιδέα την αυθόρμητης δημιουργίας νηματικών υπεραγωγίμων φάσεων που προτείνουμε με βάση το παραπάνω μοντέλο είναι συμβατή και με άλλα πιο πολύπλοκα μοντέλα που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία [82]. Μάλιστα στο μοντέλο μας θεωρούμε γενικές μορφές διαχωρίσιμων υπεραγωγίμων δυναμικών τα οποία δεν συνδέονται με κάποιο συγκεκριμένο μηχανισμό ζεύξης ηλεκτρονίων, έτσι ώστε η ανάλυσή μας να είναι συμβατή σε κάθε περίπτωση για ένα ευρύ φάσμα υλικών της συγκεκριμένης κλάσης. Με βάση τις παραπάνω υποθέσεις η Χαμιλτονιανή εξίσωση του μοντέλου μας αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[\varepsilon_e(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \varepsilon_h(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}, \sigma} \right] \\
&- \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} + d_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}, \downarrow} d_{\mathbf{k}, \uparrow} \right] \\
&- \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left[c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}, \downarrow} d_{\mathbf{k}, \uparrow} + d_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger d_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} \right] \\
\mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left[\varepsilon_e(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + \varepsilon_h(\mathbf{k}) d_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}, \sigma} \right] - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \widehat{\mathcal{D}}_{\mathbf{k}}^\dagger \widehat{\mathcal{D}}_{\mathbf{k}'}, \quad (3.9)
\end{aligned}$$

όπου $c_{\mathbf{k}, \sigma}^{(\dagger)}$ και $d_{\mathbf{k}, \sigma}^{(\dagger)}$ οι τελεστές καταστροφής (δημιουργίας) για τη ζώνη ηλεκτρονίου $\varepsilon_e(\mathbf{k})$ και οπής $\varepsilon_h(\mathbf{k})$ αντίστοιχα, με πόλωση σπιν $\sigma = \uparrow, \downarrow$, ενώ με N σημειώνουμε το πλήθος των πλεγματικών σημείων. Ο συγκεκριμένος τύπος αλληλεπίδρασης, σύμφωνα με τον οποίο οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ίδιων και διαφορετικών ζωνών είναι ισοδύναμες, μας επιτρέπει την εισαγωγή του τελεστή ζεύξης $\widehat{\mathcal{D}}_{\mathbf{k}} \equiv c_{-\mathbf{k}, \downarrow} c_{\mathbf{k}, \uparrow} + d_{-\mathbf{k}, \downarrow} d_{\mathbf{k}, \uparrow}$, ενώ η υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης $\Delta(\mathbf{k})$ προκύπτει ίδια για τις δύο επιφάνειες και επομένως μπορεί να οριστεί ως ακολούθως

$$\Delta(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \langle \widehat{\mathcal{D}}_{\mathbf{k}'} \rangle. \quad (3.10)$$

Η παράμετρος τάξης $\Delta(\mathbf{k}) = \sum_n \Delta_n f_n(\mathbf{k})$ αναλύεται στις συναρτήσεις βάσης $f_n(\mathbf{k})$ των μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων (IRs) της σχετικής ομάδας τετραγωνική συμμετρίας που εμφανίζεται στη μεταλλική (κανονική) φάση των υλικών αυτών και η οποία για διδιάστατα συστήματα είναι η C_4 . Συγκεκριμένα στην παρούσα ανάλυση συμπεριλάβαμε τις συναρτήσεις $f_s(\mathbf{k}) = 1$ (A_1) (ισοτροπική), $f_{s\pm}(\mathbf{k}) = \cos k_x + \cos k_y$ (A_1) και $f_d(\mathbf{k}) = \cos k_x - \cos k_y$ (B_1) και $f_{s'}(\mathbf{k}) = 2 \cos k_x \cos k_y$ (A_1), $f_{d'}(\mathbf{k}) = 2 \sin k_x \sin k_y$ (B_2). Όλες οι παραπάνω συναρτήσεις είναι συμμετρικές ως προς τη χωρική αντιστροφή και συνεπώς είναι κατάλληλες για singlet intraband υπεραγωγίμες φάσεις. Ο ανταγωνισμός μεταξύ των διάφορων υπεραγωγίμων φάσεων μελετήθηκε στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου σύμφωνα με την οποία η Εξ. 3.9 αποκτά την απλή μορφή $\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}}^\dagger H_{\mathbf{k}} \hat{\Psi}_{\mathbf{k}}$ με

$$H_{\mathbf{k}} = (\gamma(\mathbf{k}) - \mu) \tau_3 + \delta(\mathbf{k}) \tau_3 \rho_3 + \Delta_{\Re}(\mathbf{k}) \tau_1 + \Delta_{\Im}(\mathbf{k}) (\cos(\phi) \tau_1 + \sin(\phi) \tau_2) - h_z, \quad (3.11)$$

όπου έχουμε εισάγει τον σπινόρα $\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, d_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\downarrow}, d_{-\mathbf{k},\downarrow})$ και τις μήτρες Pauli $\boldsymbol{\tau}$ και $\boldsymbol{\rho}$ που δρουν στους χώρους σωματιδίου-οπής και ενεργειακών ζωνών αντίστοιχα. Επιπλέον, θεωρούμε ότι η σχετική φάση μεταξύ των υπεραγωγίμων πεδίων διαφορετικής συμμετρίας μπορεί να αποκτήσει μόνο τις οριακές τιμές $\phi = 0$ και $\phi = \pi/2$ που αντιστοιχούν σε φάσεις που διατηρούν και παραβιάζουν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου αντίστοιχα. Τέλος συμπεριλαμβάνουμε επίσης ένα πεδίο Zeeman, h_z . Στα πλαίσια της προσέγγισης μέσου πεδίου, τα υπεραγωγίμα πεδία προκύπτουν από τις παρακάτω αυτοσυνεπείς εξισώσεις

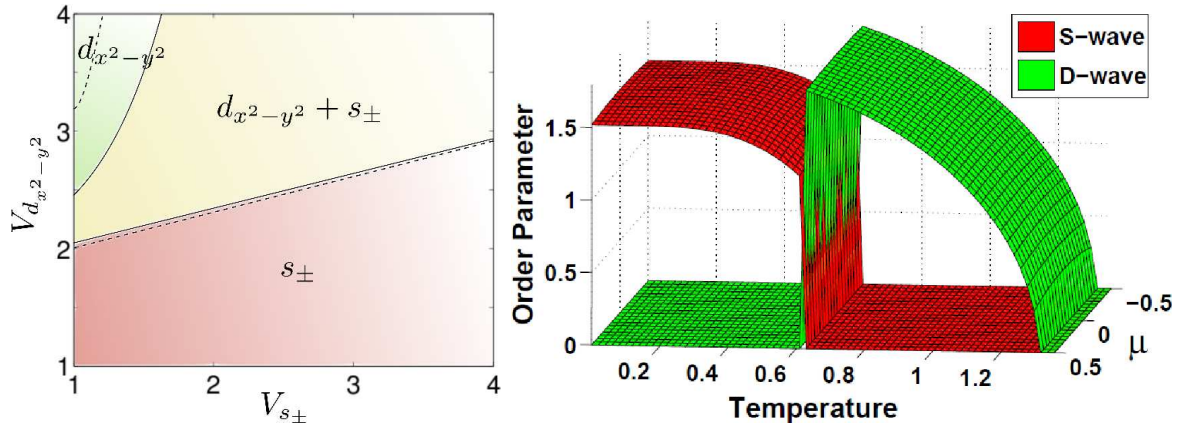
$$\Delta_i(\mathbf{k}) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_i f_i(\mathbf{k}), f_i(\mathbf{k}') \langle \hat{D}_{\mathbf{k}'} \rangle = -\frac{1}{N} V_i f_i(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{k}',n} f_i(\mathbf{k}') [U_{\mathbf{k}'} \tau_{1(2)} U_{\mathbf{k}'}]_n n_F(E_{n,\mathbf{k}'}), \quad (3.12)$$

όπου ο δείκτης i αναφέρεται στις συναρτήσεις μορφής, $n_F(E_{n,\mathbf{k}'}) = [1 - e^{\beta E_{\mathbf{k}'}}]^{-1}$ είναι η κατανομή Fermi, $\tau_1(\tau_2)$ οι μήτρες που αντιστοιχούν σε πραγματικά (φανταστικά) υπεραγωγίμα πεδία, ενώ $E_{\mathbf{k}}$ και $U_{\mathbf{k}}$ οι μήτρες που αντιστοιχούν στις ιδιοενέργειες και τα ιδιοδιανύσματα που ικανοποιούν την παρακάτω σχέση ιδιοτιμών $H_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}$.

Για τις συγκεκριμένες συναρτήσεις μορφής, η πιο απλή μορφή των νηματικών υπεραγωγίμων φάσεων αντιστοιχεί σε ανάμιξη συναρτήσεων βάσης των A_1 και B_1 ή B_2 μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων, όπως είναι οι $S + d_{x^2-y^2}$ και $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ φάσεις. Βεβαίως, πιο πολύπλοκες φάσεις όπως οι $S + S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$, $iS + S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ και $S + iS_{\pm} + d_{x^2-y^2}$, είναι επίσης πιθανές νηματικές φάσεις. Σημειώνουμε όμως ότι σε όλες τις περιπτώσεις η τετραγωνική συμμετρία C_4 της μεταλλικής φάσης του συστήματος υποβαθμίζεται στην ορθορομβική C_2 , μόνο εφόσον τα υπεραγωγίμα πεδία κλειδώσουν σε φάση $\phi \neq \pi/2$. Στην περίπτωση που η σχετική φάση των υπεραγωγίμων πεδίων είναι $\pi/2$, η υπεραγωγίμη φάση παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου \mathcal{T} , αλλά όχι την τετραγωνική C_4 .

Αρχικά διερευνήσαμε τον ανταγωνισμό μεταξύ της ισοτροπικής S και της $d_{x^2-y^2}(d)$ φάσης. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα, οι δύο συγκεκριμένες φάσεις εμφανίζονται ισχυρά ανταγωνιστικές και δεν συνυπάρχουν για καμία τιμή των αντίστοιχων δυναμικών. Ενδιαφέρον παρουσιάζουν τα αποτελέσματα για δυναμικά $V_S < V_d < 1.5V_S$, όπου παρατηρείται μετάβαση πρώτης τάξης από την d στην S υπεραγωγίμη φάση καθώς μειώνεται η θερμοκρασία (Σχ. 3.2β). Αντίθετα η φάση S_{\pm} , η οποία υποδεικνύεται από πολλά πειράματα ως η πιο πιθανή φάση για τους $FeBS$, συνυπάρχει με τη d φάση για μεγάλο εύρος τιμών των αντίστοιχων ενεργών δυναμικών (Σχ. 3.2α). Μάλιστα όπως επεξηγούμε παρακάτω, η νηματική φάση $S_{\pm} + d$ μπορεί να αντιστοιχεί σε ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων με ή χωρίς σημεία μηδενισμού.

Από τα παραπάνω αποτελέσματα συμπεραίνουμε ότι στους $FeBS$, ή γενικά σε υλικά με τη συγκεκριμένη τοπολογία επιφάνειας Fermi, μπορούν να εμφανιστούν νηματικές υπεραγωγίμες φάσεις για την S_{\pm} αλλά όχι την S συμμετρία. Με τον ίδιο τρόπο προκύπτουν και οι μικτές υπεραγωγίμες φάσεις $S_{\pm} + d_{xy}$ ($S_{\pm} + d'$) (Σχ. 3.2β) που επίσης παραβιάζουν την τετραγωνική C_4 συμμετρία.



Σχήμα 3.2: α) Διάγραμμα φάσης συναρτήσει των ενεργών δυναμικών για τις υπεραγωγίμες φάσεις S_{\pm} και d συμμετρίας για θερμοκρασία $T = 0$. Οι συνεχείς γραμμές αντιστοιχούν σε χημικό δυναμικό $\mu=0.05$, ενώ οι διακεκομμένες γραμμές σε $\mu=0.4$. Παρατηρούμε και στις δύο περιπτώσεις τρεις διακριτές περιοχές S_{\pm} , $S_{\pm} + d$ και d , ενώ η νηματική φάση $S_{\pm} + d$ εμφανίζεται για μια ευρεία περιοχή του διαγράμματος φάσης. Μάλιστα η περιοχή αυτή επεκτείνεται σε βάρος της φάσης d καθώς αυξάνεται το χημικό δυναμικό. Ανάλογο διάγραμμα φάσης παρατηρείται και για τον ανταγωνισμό μεταξύ των φάσεων S_{\pm} και d_{xy} , όπου πάλι εμφανίζεται η νηματική φάση $S_{\pm} + d_{xy}$. β) Ενδεικτική μετάβαση πρώτης τάξης από την S (κόκκινο χρώμα) στην d (πράσινο χρώμα) υπεραγωγίμη φάση καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία. Η μετάβαση αυτή παρατηρείται για διάφορες τιμές του χημικού δυναμικού μ , όταν ισχύει $V_S < V_d < 1.5V_S$ για τα δυναμικά αλληλεπίδρασης. Υπολογισμοί της ελεύθερης ενέργειας επιβεβαιώνουν τη μετάβαση αυτή. Η νηματική $S + d$ δεν εμφανίζεται.

Επίσης πιθανή είναι και η εμφάνιση των $S' + d$ και $S' + d'$ φάσεων καθώς η S' συμμετρία ταυτίζεται με την S_{\pm} μέσω στροφής κατά $\pi/4$. Στους πίνακες 3.1 και 3.2 παρουσιάζονται η επαγόμενη νηματική τάξη για κάθε μία από τις παραπάνω μίξες φάσεις.

Καθώς στο μοντέλο μας όλα τα ενεργά δυναμικά και οι σχέσεις ενεργειακής διασποράς διατηρούν τη C_4 συμμετρία, η τετραγωνική συμμετρία παραβιάζεται αυθόρμητα λόγω της συνύπαρξης των S_{\pm} και d ή εν γένει των κατάλληλων υπεραγωγίμων πεδίων. Η υποβάθμιση της τετραγωνικής συμμετρίας του συστήματος αντικατοπτρίζεται στο αντίστοιχο ενεργειακό φάσμα που προκύπτει από την παρακάτω σχέση

$$E_{s,l}(\mathbf{k}) = s\sqrt{[\varepsilon_l(\mathbf{k})]^2 + \Delta(\mathbf{k})^* \Delta(\mathbf{k})} - h_z, \quad (3.13)$$

όπου $s = \pm$, $l = e, h$ και $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_1 f_1(\mathbf{k}) + e^{i\phi} \Delta_2 f_2(\mathbf{k})$. Στη μεταλλική φάση για $\Delta(\mathbf{k}) = 0$ παρατηρούμε την C_4 συμμετρία του φάσματος καθώς αυτό παραμένει αναλλοίωτο σε στροφές κατά $\pi/4$ αφού $\varepsilon_l(k_x, k_y) = \varepsilon_l(-k_y, k_x) = \varepsilon_l(-k_x, -k_y) = \varepsilon_l(k_y, -k_x)$. Το ίδιο ισχύει και για τις καθαρές υπεραγωγίμες φάσεις, καθώς κάθε συνάρτηση μορφής $f_i(\mathbf{k}) f_i^*(\mathbf{k})$ παραμένει αμετάβλητη σε $\pi/4$ στροφές. Αντίθετα, στις νηματικές φάσεις όπως την $S_{\pm} + d$, το ενεργειακό φάσμα αποκτά τη μορφή $E_{s,l}(\mathbf{k}) = s\sqrt{[\varepsilon_l(\mathbf{k})]^2 + [(\Delta_{S_{\pm}} + \Delta_d) \cos(k_x) + (\Delta_{S_{\pm}} - \Delta_d) \cos(k_y)]^2} - h_z$, η οποία όπως παρατηρούμε διατηρεί μόνο την $E_{s,l}(k_x, k_y) = E_{s,l}(-k_x, -k_y)$ συμμετρία καθώς δεν παραμένει αναλλοίωτη στην εναλλαγή $k_x \leftrightarrow k_y$. Για σχετική φάση $\phi = \pi/2$ όμως η C_4 συμμετρία διατηρείται, καθώς το ενεργειακό φάσμα στην περίπτωση αυτή προκύπτει από τη σχέση $E_{s,l}(\mathbf{k}) = s\sqrt{[\varepsilon_l(\mathbf{k})]^2 + (\Delta_{S_{\pm}}^2 + \Delta_d^2)(\cos^2(k_x) + \cos^2(k_y)) + (\Delta_{S_{\pm}}^2 - \Delta_d^2) \cos(k_x) \cos(k_y)} - h_z$. Με παρόμοιο τρόπο η υποβάθμιση της C_4 συμμετρίας σε C_2 αντικατοπτρίζεται στο ενεργειακό φάσμα των υπόλοιπων νηματικών φάσεων που προαναφέρθηκαν.

Εδώ πρέπει να σημειώσουμε ότι η παραμόρφωση του ενεργειακού φάσματος δεν έχει την ίδια μορφή σε όλες τις προαναφερθείσες νηματικές φάσεις. Έτσι στην περίπτωση της $S_{\pm} + d$ φάσης η επαγόμενη νηματική παράμετρος τάξης $f_{\text{nem}}(\mathbf{k}) = f_d(\mathbf{k})$ αντιστοιχεί σε ορθορομβική παραμόρφωση του ενεργειακού φάσματος όταν αυτό αναφέρεται στην αναδιπλωμένη ζώνη Brillouin, ενώ στη μη αναδιπλωμένη ζώνη Brillouin αντιστοιχεί σε μία διατμητική ή διαγώνια παραμόρφωση. Το ακριβώς

αντίθετο ισχύει για τη νηματική φάση $S_{\pm} + d'$. Γενικά, συμπεραίνουμε ότι μικτές υπεραγωγίμες φάσεις με συναρτήσεις μορφής από τις A_1 και B_2 μη-αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις αντιστοιχούν σε διαγώνια παραμόρφωση στη FBZ και ορθορομβική στην BZ, ενώ το αντίθετο ισχύει για τις μικτές φάσεις με συναρτήσεις μορφής που ανήκουν στις A_1 και B_1 αναπαραστάσεις. Τέλος, σημειώνουμε ότι η νηματική παράμετρος τάξης έχει κοινό πρόσημο και στις δύο ενεργειακές ζώνες στην περίπτωση των $S_{\pm} + \dots$ μικτών φάσεων, ενώ αντίθετα αλλαγή προσήμου της νηματικής τάξης παρατηρείται για τις $S' + \dots$ μικτές φάσεις. Τα συμπεράσματα αυτά είναι σε πλήρη συμφωνία με τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων ο οποίος προβλέπει την εμφάνιση της κατάλληλης σε κάθε περίπτωση νηματικής τάξης όπως παρουσιάζεται στους Πιν. 3.1 και 3.2.

		$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	C_4	$t_{\mathbf{Q}}$	ρ_1			$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	C_4	$t_{\mathbf{Q}}$	ρ_1
S_{\pm} Κινητικός όρος	$t\tau_3 f_{sext}$	+	+	-	+	S_{\pm} Κινητικός όρος	$t\tau_3 f_{sext}$	+	+	-	+
$S_{\pm} SC$	$\Delta_{S_{\pm}} \tau_1 f_{sext}$	-	+	-	+	$S_{\pm} SC$	$\Delta_{S_{\pm}} \tau_1 f_{sext}$	-	+	-	+
$d SC$	$\Delta_d \tau_1 f_d$	-	-	-	+	$d' SC$	$\Delta_d \tau_1 f_{ss}$	-	-	+	+
d Κινητικός όρος	$N_d \tau_3 f_d$	+	-	-	+	d' Κινητικός όρος	$N_d \tau_3 f_{ss}$	+	-	+	+

Πίνακας 3.1: αριστερά) Ο d νηματικός κινητικός όρος που επάγεται στη μικτή $S_{\pm} + d$ υπεραγωγίμη φάση λόγω της παρουσίας του κοινού κινητικού όρου S_{\pm} των δύο ενεργειακών ζωνών. Παρουσιάζουμε τις ιδιότητες κάθε πεδίου ως προς τον συγκεκριμένο μετασχηματισμό της συμμετρίας βαθμίδας $U(1)$, της στροφής κατά γωνία $\pi/4$ (C_4), της μεταφοράς ορμής \mathbf{Q} ($t_{\mathbf{Q}}$) και της εναλλαγής ενεργειακών ζωνών (ρ_1). Οποιοδήποτε γινόμενο τριών από τα παραπάνω πεδία έχει τις ιδιότητες μετασχηματισμού του τέταρτου πεδίου και συνεπώς τα πεδία αυτά σχηματίζουν τετράδα συζευγμένων πεδίων. Σημειώνουμε ότι ο νηματικός όρος d επάγεται στη μικτή $S_{\pm} + d$ υπεραγωγίμη φάση εκτός αν η σχετική φάση των δύο υπεραγωγίμων πεδίων είναι $\delta\phi = \pi/2$. Επίσης ο επαγόμενος νηματικός όρος είναι κοινός και για τις δύο ενεργειακές ζώνες. δεξιά) Οι παραπάνω παρατηρήσεις ισχύουν και για τον d' νηματικό όρο που επάγεται στην $S_{\pm} + d'$ φάση στην περίπτωση που $\delta\phi \neq \pi/2$. Σημειώνουμε τέλος τις συναρτήσεις μορφής των πεδίων $f_{sext} = (\cos(k_x) + \cos(k_y))$, $f_d = (\cos(k_x) - \cos(k_y))$ και $f_{ss} = \sin(k_x) \sin(k_y)$.

Όπως προαναφέραμε για τους $FeBS$ υπάρχουν αντιφατικά πειραματικά αποτελέσματα σχετικά με την ύπαρξη ή όχι σημείων μηδενισμού του υπεραγωγίμου ενεργειακού χάσματος. Γενικά σύμφωνα με το μοντέλο που χρησιμοποιήσαμε, η ενεργειακή ζώνη l θα εμφανίζει τέτοια σημεία μηδενισμού (κομβικά σημεία) αν υπάρχουν σημεία \mathbf{k} του αντίστροφου χώρου για τα οποία ικανοποιούνται ταυτόχρονα οι σχέσεις $\epsilon_l(\mathbf{k}) = 0$ και $\Delta(\mathbf{k}) = 0$. Στην παρακάτω διερεύνηση για κομβικά σημεία στο ενεργειακό φάσμα θεωρούμε $|\mu| < 0.5$, καθώς για μεγαλύτερες τιμές του χημικού δυναμικού μια εκ των δύο επιφανειών Fermi εξαφανίζεται. Σημειώνουμε ότι στο μοντέλο μας οι καθαρές υπεραγωγίμες φάσεις d και d' εμφανίζουν πάντα σημεία μηδενισμού, σε αντίθεση με τις καθαρές S, S_{\pm} και S' φάσεις για τις οποίες το ενεργειακό χάσμα είναι παντού μη-μηδενικό. Στην περίπτωση όμως των μικτών φάσεων με $\phi = 0$, είναι δυνατή η εμφάνιση σημείων μηδενισμού του χάσματος για συγκεκριμένους συνδυασμούς των τιμών των υπεραγωγίμων πεδίων Δ και του χημικού δυναμικού μ . Έτσι, οι συγκεκριμένες φάσεις χαρακτηρίζονται από την εμφάνιση σημείων μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος τα οποία είναι ευαίσθητα στην μεταβολή των παραμέτρων του συστήματος, όπως το χημικό δυναμικό ή η θερμοκρασία. Για τον λόγο αυτό θεωρούμε τις

		$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	C_4	$t_{\mathbf{Q}}$	ρ_1			$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	C_4	$t_{\mathbf{Q}}$	ρ_1
S' Κινητικός όρος	$t'\tau_3 \rho_3 f_{cc}$	+	+	+	-	S' Κινητικός όρος	$t'\tau_3 \rho_3 f_{cc}$	+	+	+	-
$S' SC$	$\Delta_{S'} \tau_1 f_{cc}$	-	+	+	+	$S' SC$	$\Delta_{S'} \tau_1 f_{cc}$	-	+	+	+
$d SC$	$\Delta_d \tau_1 f_d$	-	-	-	+	$d' SC$	$\Delta_d \tau_1 f_{ss}$	-	-	+	+
d Κινητικός όρος	$N_d \tau_3 f_d$	+	-	-	-	d' Κινητικός όρος	$N_d \tau_3 \rho_3 f_{ss}$	+	-	+	-

Πίνακας 3.2: αριστερά) Η d νηματική παράμετρος τάξης που επάγεται στη μικτή $S' + d$ υπεραγωγίμη φάση λόγω της παρουσίας του κινητικού όρου S' των δύο ενεργειακών ζωνών. Επειδή ο κινητικός όρος S' είναι αντισυμμετρικός στην εναλλαγή των ενεργειακών ζωνών ρ_1 , η επαγόμενη νηματική παράμετρος τάξης έχει αντίθετο πρόσημο για τις δύο ενεργειακές ζώνες του συστήματος σε αντίθεση με τη νηματική παράμετρο τάξης που παρουσιάστηκε στον Πιν. 3.1. δεξιά) Η αντίστοιχη, αντισυμμετρική στην εναλλαγή των ενεργειακών ζωνών, νηματική παράμετρος τάξης d' που επάγεται στην $S' + d'$ φάση στην περίπτωση που $\delta\phi \neq \pi/2$. Σημειώνουμε ότι έχουμε ορίσει τη συνάρτηση μορφής $f_{cc} = \cos(k_x) \cos(k_y)$.

συγκεκριμένες φάσεις ως τις πιο πιθανές για τα συγκεκριμένα υλικά.

Συγκεκριμένα διερευνούμε την εμφάνιση σημείων μηδενισμού στη μιχτή νηματική φάση $S_{\pm} + d$ με συνολικό υπεραγωγίμο πεδίο της μορφής $\Delta(\mathbf{k}) = \Delta_{s_{\pm}}(\cos k_x + \cos k_y) + \Delta_d(\cos k_x - \cos k_y)$. Από τη διερεύνηση αυτή, που έγινε σύμφωνα με τη σχέση Εξ. 3.13, προκύπτουν οι παρακάτω περιπτώσεις.

- Σημεία μηδενισμού και στις δύο ενεργειακές ζώνες: $|\Delta_d| \geq \frac{10+4|\mu|}{2-4|\mu|} |\Delta_{s_{\pm}}|$,
- Σημεία μηδενισμού στην ενεργειακή ζώνη τύπου ηλεκτρονίου (οπής) $\mu > 0$ ($\mu < 0$): $\frac{10+4|\mu|}{2-4|\mu|} |\Delta_{s_{\pm}}| > |\Delta_d| \geq \frac{10-4|\mu|}{2+4|\mu|} |\Delta_{s_{\pm}}|$
- Απουσία σημείων μηδενισμού : $\frac{10-4|\mu|}{2+4|\mu|} |\Delta_{s_{\pm}}| > |\Delta_d|$.

Οι συντεταγμένες των σημείων μηδενισμού στον αντίστροφο χώρο προσδιορίζονται από τις παρακάτω σχέσεις

$$\begin{aligned} \cos k_x &= \pm \frac{-2|\Delta_d| + \sqrt{(2\Delta_d)^2 + 2(2 \pm \mu)(\Delta_d^2 - \Delta_{s_{\pm}}^2)}}{|\Delta_{s_{\pm}} + \Delta_d|} \\ \cos k_y &= \pm \frac{-2|\Delta_d| + \sqrt{(2\Delta_d)^2 + 2(2 \pm \mu)(\Delta_d^2 - \Delta_{s_{\pm}}^2)}}{|\Delta_{s_{\pm}} - \Delta_d|}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

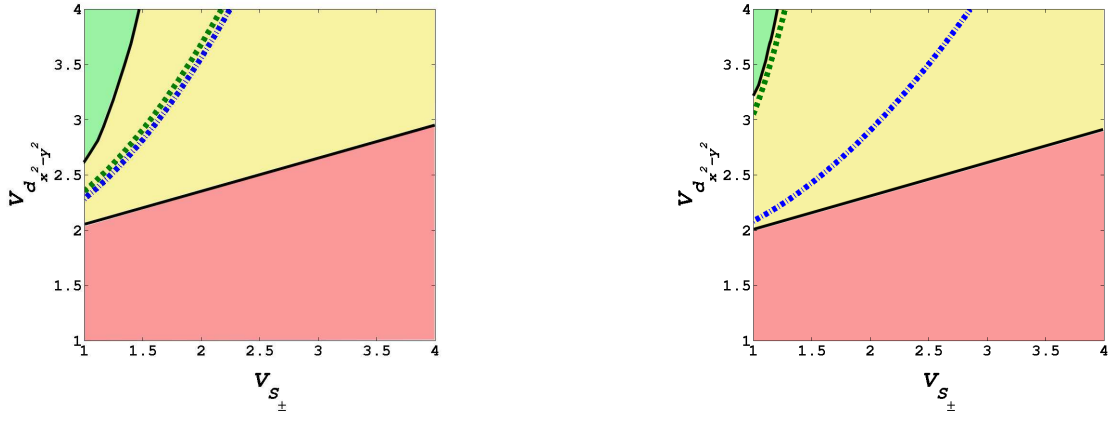
όπου τα $+(-)$ αντιστοιχούν στη ζώνη οπής(ηλεκτρονίου). Παρατηρούμε ότι $\cos k_x \neq \cos k_y$ όπως προβλέπεται από την υποβάθμιση της τετραγωνικής συμμετρίας $C_4 \rightarrow C_2$ στη νηματική υπεραγωγίμη $S_{\pm} + d$ φάση. Οι ίδιες συνθήκες ισχύουν και για τη νηματική φάση $S_{\pm} + d'$ καθώς η d' συνάρτηση μορφής είναι ίδια με την d ύστερα από στροφή κατά $\pi/4$, ενώ η S_{\pm} συνάρτηση μορφής παραμένει αμετάβλητη κατά τον μετασχηματισμό αυτό. Όμως αυτή η διαφορά των d και d' συμμετριών του υπεραγωγίμου χάσματος οδηγεί και στη στροφή κατά $\pi/4$ των θέσεων των σημείων μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος. Ομοίως για τις νηματικές φάσεις της γενική μορφής $S' + \dots$, οι συνθήκες παραμένουν οι ίδιες, καθώς η S' συνάρτηση μορφής ταυτίζεται με την S_{\pm} ύστερα από στροφή κατά $\pi/4$. Όμως στην περίπτωση αυτή, οι θέσεις των συγκεκριμένων σημείων προκύπτουν από την εναλλαγή $k_x \leftrightarrow k_y$ στις παραπάνω εκφράσεις.

Τέλος, σημειώνουμε ότι οι μιχτές υπεραγωγίμες φάσεις με $\phi = \pi/2$ οι οποίες παραβιάζουν τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου αντιστοιχούν πάντα σε ενεργειακό φάσμα χωρίς σημεία μηδενισμού καθώς στην περίπτωση αυτή η συνθήκη μηδενισμού είναι $\varepsilon_l(\mathbf{k}) = 0$, $\Delta_1(\mathbf{k}) = 0$ και $\Delta_2(\mathbf{k}) = 0$, η οποία δε μπορεί να ικανοποιηθεί ποτέ για τις συγκεκριμένες συναρτήσεις μορφής και $|\mu| < 0.5$.

3.2.2 Διερεύνηση ενεργειακής σταθεροποίησης των νηματικών έναντι των μη-νηματικών μιχτών καταστάσεων

Στην προηγούμενη ενότητα παρουσιάσαμε πώς η νηματική τάξη μπορεί να εμφανιστεί λόγω της συνύπαρξης υπεραγωγίμων πεδίων με σχετική φάση $\phi = 0$. Παρατηρούμε όμως ότι για τις ίδιες συναρτήσεις μορφής των υπεραγωγίμων πεδίων είναι δυνατή η συνύπαρξη σε σχετική φάση $\phi = \pi/2$ που αντιστοιχεί σε φάσεις που παραβιάζουν την \mathcal{T} αλλά όχι τη C_4 . Μάλιστα αποδεικνύεται ότι οι φάσεις αυτές αντιστοιχούν σε οριακά χαμηλότερη ελεύθερη ενέργεια του συστήματος σε σχέση με τις αντίστοιχες νηματικές. Για τον λόγο αυτό παρακάτω εξετάζουμε πιο διεξοδικά τον ανταγωνισμό μεταξύ αυτών των φάσεων και στα πλαίσια της θεωρίας Landau. Σημειώνουμε πάντως πώς νηματική τάξη προκύπτει εν γένει για συνύπαρξη των παραπάνω υπεραγωγίμων φάσεων σε σχετική φάση $\phi \neq \pi/2$ και συνεπώς μια πιο ακριβής ανάλυση θα έπρεπε να συμπεριλάβει τη σχετική φάση των υπεραγωγίμων πεδίων σαν μια εξίσου σημαντική μεταβλητή του συστήματος.

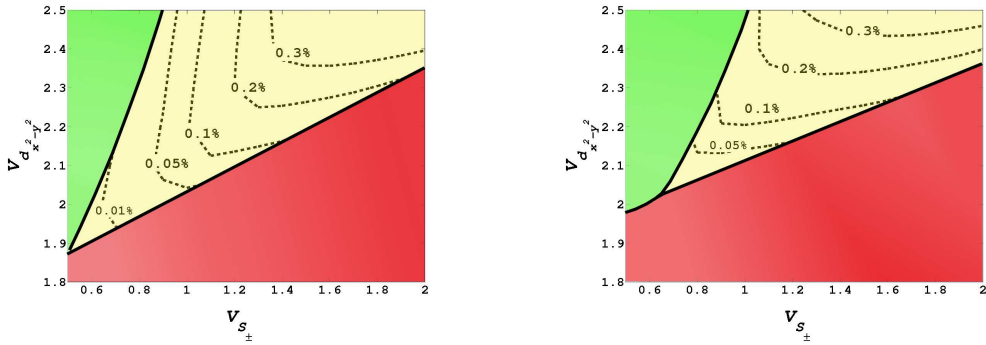
Η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας του συστήματος που περιγράφεται από τη Χαμιλτονιανή Εξ. 3.11 προκύπτει από την παρακάτω σχέση



Σχήμα 3.3: Τα διαγράμματα φάσης που παρουσιάστηκαν στο Σχ. 3.2 για $T = B = 0$ και χημικό δυναμικό α) $\mu = 0.05$ και β) $\mu = 0.4$. Οι κλειστές γραμμές σημειώνουν την περιοχή του διαγράμματος που εμφανίζεται η νηματική $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ φάση. Η πράσινη διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στο όριο πάνω από το οποίο στη νηματική $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ φάση εμφανίζονται σημεία μηδενισμού της ενέργειας διέγερσης και στις δύο ζώνες του συστήματος, ενώ με μπλε διακεκομμένη γραμμή σημειώνεται το όριο όπου μόνο η ζώνη τύπου-ηλεκτρονίου εμφανίζει σημεία μηδενισμού.

$$\mathcal{F} = \sum_m \frac{|\Delta_m|^2}{V_m} - \frac{T}{N} \sum_{n,\mathbf{k}} \ln [1 + e^{-E_n(\mathbf{k})/T}] = \sum_m \frac{|\Delta_m|^2}{V_m} - \frac{T}{N} \sum_{n,\mathbf{k}} \ln [e^{-E_n(\mathbf{k})/T} n_F^{-1}(E_n(\mathbf{k}))] \quad (3.15)$$

όπου εισάγαμε τις ιδιοενέργειες του συστήματος που προκύπτουν από $H_{\mathbf{k}}U_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k})U_n(\mathbf{k})$. Υπολογίζοντας την ελεύθερη ενέργεια και για τις δύο μικτές $S_{\pm} + d$ φάσεις, για $\phi = \pi/2$ όπου παραβιάζεται \mathcal{T} και για τη νηματική $\phi = 0$, παρατηρούμε ότι η διαφορά τους είναι σχετικά μικρή ειδικά για την περιοχή δυναμικών $V_d \leq 2.5$ και $V_{s_{\pm}} \leq 2$ όπου οι δύο φάσεις εμφανίζονται σχεδόν ως εκφυλισμένες. Πράγματι, ακόμα και για $T = 0$ όπου η διαφορά της ελεύθερης ενέργειας μεγιστοποιείται, η σχετική διαφορά μεταξύ των συγκεκριμένων φάσεων είναι αμελητέα και συγκεκριμένα χαμηλότερη από 0.3% για δυναμικά $V_d \leq 2.5$ και $V_{s_{\pm}} \leq 2$ Σχ. 3.4.



Σχήμα 3.4: Τμήμα των διαγραμμάτων φάσης που παρουσιάστηκαν στο Σχ. 3.2 για μικρές τιμές των αντίστοιχων ενεργών δυναμικών. Οι διακεκομμένες γραμμές παρουσιάζουν τη σχετική διαφορά της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος μεταξύ της νηματικής $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ και της $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ υπεραγωγίσιμης φάσης, ως ποσοστό της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος στη δεύτερη φάση. Παρατηρούμε ότι η διαφορά γίνεται αμελητέα καθώς μειώνονται οι τιμές των ενεργών δυναμικών καθιστώντας τις δύο φάσεις σχεδόν ενεργειακά εκφυλισμένες. Τα διαγράμματα αντιστοιχούν σε χημικό δυναμικό $\mu = 0.05$ (αριστερά) και $\mu = 0.4$ (δεξιά).

Συνεχίζουμε την ανάλυσή μας χρησιμοποιώντας το ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας κοντά στην κρίσιμη υπεραγωγίσιμη θερμοκρασία κατά τη θεωρία Landau. Διακρίνουμε δύο περιπτώσεις όπου οι κρίσιμες θερμοκρασίες κάθε υπεραγωγίσιμης φάσης ξεχωριστά, διαφέρουν σημαντικά, ή βρίσκονται πάρα πολύ κοντά.

Αρχικά διερευνούμε την πρώτη περίπτωση όπου η υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης Δ_2 και συνεπώς η νηματική τάξη, εμφανίζονται σε θερμοκρασία T_c^* , μικρότερη από την αντίστοιχη T_c για την επικρατούσα υπεραγωγίμη παράμετρο Δ_1 . Το ανάπτυγμα Landau της ελεύθερης ενέργειας κοντά στην T_c^* θερμοκρασία έχει την παρακάτω μορφή.

$$\mathcal{F} - \mathcal{F}_{\Delta_1} = \sum_{j=\Re, \Im} \left[\alpha_j \frac{(\Delta_2^j)^2}{2} + \beta_j \frac{(\Delta_2^j)^4}{4} \right], \quad (3.16)$$

όπου θεωρήσαμε και τις δύο οριακές περιπτώσεις για τη σχετική φάση των δύο παραμέτρων $\phi = 0$ και $\phi = \pi/2$. Οι συντελεστές $\alpha = -\left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \Delta_2^2} \right|_{\Delta_2=0}$ για κάθε περίπτωση προκύπτουν από τις παρακάτω εκφράσεις

$$\alpha_{\Re} = \frac{2}{V_2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, l} \left[\left[\frac{\Delta_1 f_1(\mathbf{k}) f_2(\mathbf{k})}{E_l^1(\mathbf{k})} \right]^2 \left\{ \frac{sn_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]}{E_l^1(\mathbf{k})} - n'_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]} \right\} - s \frac{[f_2(\mathbf{k})]^2 n_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]}{E_l^1(\mathbf{k})} \right], \quad (3.17)$$

$$\alpha_{\Im} = \frac{2}{V_2} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, l} \frac{s [f_2(\mathbf{k})]^2 n_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]}{E_l^1(\mathbf{k})}, \quad (3.18)$$

$$\delta\alpha = \alpha_{\Re} - \alpha_{\Im} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, l} \left[\frac{\Delta_1 f_1(\mathbf{k}) f_2(\mathbf{k})}{E_l^1(\mathbf{k})} \right]^2 \left\{ \frac{sn_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]}{E_l^1(\mathbf{k})} - n'_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]} \right\}, \quad (3.19)$$

όπου $E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k}) = s\sqrt{[\varepsilon_l(\mathbf{k})]^2 + [\Delta_1(\mathbf{k})]^2} - \mathcal{B} = sE_l^1(\mathbf{k}) - \mathcal{B}$, ενώ οι ιδιοενέργειες για πεπερασμένη Δ_2 είναι της μορφής $E_{s,l}^B(\mathbf{k}) = s\sqrt{[\varepsilon_l(\mathbf{k})]^2 + [\Delta_1(\mathbf{k}) + \Delta_2(\mathbf{k})][\Delta_1(\mathbf{k}) + \Delta_2(\mathbf{k})]^*} - \mathcal{B}$. Όπως αναμένεται για $\Delta_1 = 0$ οι δύο εκφράσεις ταυτίζονται και $\delta\alpha = 0$. Εισάγουμε τις γενικευμένες επιδεικτικότητες $\chi_{\Re, \Im} \equiv 1/V_2 - \alpha_{\Re, \Im}/2$ για τις οποίες ισχύει $\chi_{\Re} = \chi_{\Im} - \delta\alpha/2$, με $\delta\alpha = \alpha_{\Re} - \alpha_{\Im}$. Για $\delta\alpha < 0$, η κρίσιμη θερμοκρασία $T_{c,2}^{\Re}$ για τη νηματική SC φάση είναι υψηλότερη από την αντίστοιχη $T_{c,2}^{\Im}$ για την υπεραγωγίμη φάση που παραβιάζει την \mathcal{T} , και επομένως σταθεροποιείται ενεργειακά η πρώτη. Στην αντίθετη περίπτωση $\delta\alpha > 0$ προκύπτει $T_{c,2}^{\Re} < T_{c,2}^{\Im}$ και ευνοείται η υπεραγωγίμη φάση που παραβιάζει την \mathcal{T} . Σημειώνουμε ότι ισχύει $n'_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})] = \frac{\partial n_F}{\partial E} < 0$ και $\sum_s sn_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})] < 0 \forall \mathbf{k}, l$ και επομένως το πρόσημο της διαφοράς $\delta\alpha$ καθορίζεται από τη συνολική διαφορά των συγκεκριμένων όρων. Καθώς για $T < \Delta_1$ ισχύει $n'_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})] \rightarrow 0$ παρατηρούμε ότι στο συγκεκριμένο όριο προκύπτει $\delta\alpha > 0$, οπότε και επικρατεί η υπεραγωγίμη φάση τετραγωνικής συμμετρίας.

Τα παραπάνω αποτελέσματα τροποποιούνται αν λάβουμε υπόψη μας τα επαγόμενα στην περίπτωση $\phi = 0$ νηματικά φαινόμενα. Σημειώνουμε ότι για $\phi = \pi/2$, δεν υπεισέρχονται επιπλέον επαγόμενα πεδία όπως προβλέπεται από τον κανόνα που διατυπώσαμε παραπάνω. Το φάσμα ιδιοενεργειών αποκτά τη μορφή $E_{s,l}^B(\mathbf{k}) = s\sqrt{[\varepsilon_l(\mathbf{k}) + P f_{nem}(\mathbf{k})]^2 + [\Delta_1(\mathbf{k}) + \Delta_2(\mathbf{k})][\Delta_1(\mathbf{k}) + \Delta_2(\mathbf{k})]^*} - \mathcal{B}$ παρουσία των πεδίων Δ_2 και P (νηματικό πεδίο) και το ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας τροποποιείται αντίστοιχα,

$$\mathcal{F}_{\mathcal{N}} = \sum_{j=\Re, \Im} \left[\alpha_j \frac{(\Delta_2^j)^2}{2} + \beta_j \frac{(\Delta_2^j)^4}{4} \right] + \frac{\mathcal{N}^2}{2\chi_{nem}} - \lambda \Delta_2^{\Re} \frac{\mathcal{N}}{\chi_{nem}}, \quad (3.20)$$

όπου έχουμε εισάγει τη νηματική παράμετρο τάξης \mathcal{N} (συζηγή του νηματικού πεδίου P), τον συντελεστή σύζευξης λ

$$\lambda = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \Delta_2^{\Re} \partial P} \right|_{\Delta_2^{\Re}=0, P=0} = \frac{\Delta_1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, l} \frac{\varepsilon_l(\mathbf{k}) f_2(\mathbf{k}) f_{nem}(\mathbf{k}) f_1(\mathbf{k})}{[E_l^1(\mathbf{k})]^2} \left\{ n'_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})] - s \frac{n_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]}{E_l^1(\mathbf{k})} \right\} \quad (3.21)$$

και τη νηματική επιδεκτικότητα χ_{nem} υπολογισμένη για $T = T_{c,2}$ και $\Delta_2 = 0$

$$\chi_{\text{nem}} = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial P^2} \right|_{P=0} = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, l} f_{\text{nem}}^2(\mathbf{k}) \left\{ \left[\frac{\varepsilon_l(\mathbf{k})}{E_l^1(\mathbf{k})} \right]^2 n'_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})] + s \left[\frac{\Delta_1(\mathbf{k})}{E_l^1(\mathbf{k})} \right]^2 \frac{n_F[E_{s,l}^{1,B}(\mathbf{k})]}{E_l^1(\mathbf{k})} \right\} \quad (3.22)$$

Σημειώνουμε ότι η εισαγωγή των δύο όρων που σχετίζονται με τη νηματική τάξη \mathcal{N} , υπαγορεύεται από τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων, καθώς η παράμετρος αυτή θα εμφανιστεί υποχρεωτικά παρουσία των δύο υπεραγωγίων φάσεων που ανήκουν σε διαφορετικές αναπαραστάσεις της C_4 ομάδας και για τις οποίες $\phi = 0$. Παρατηρούμε ότι ο συντελεστής σύζευξης $\lambda(\Delta_1, \varepsilon_l(\mathbf{k}))$ είναι μια αντισυμμετρική ως προς Δ_1 και $\varepsilon_l(\mathbf{k})$ συνάρτηση, με ανάπτυγμα της μορφής $\lambda(\Delta_1, \varepsilon_l(\mathbf{k})) = \sum_{n,m} C_{n,m} \Delta_1^{2n+1} \varepsilon_l(\mathbf{k})^{2m+1}$ και επομένως είναι μη μηδενικός μόνο για $\Delta_1 \neq 0$ και $\sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_l(\mathbf{k}) f_1(\mathbf{k}) \neq 0$. Επιπροσθέτως, ισχύει $\lambda = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \Delta_2^{\Re} \partial P} \right|_{\Delta_2^{\Im}=0, P=0} = 0$, καταδεικνύοντας τη σύζευξη με τη νηματική τάξη μόνο στη $\phi = 0$ υπεραγωγίμη φάση. Συγκεκριμένα ο όρος $\gamma(\mathbf{k}) \mathcal{N}(\Delta_1 \Delta_2^* + \Delta_1^* \Delta_2)$, υπεισέρχεται στο ανάπτυγμα Landau ως ένας βαθμωτός ως προς τους μετασχηματισμούς συμμετρίας του συστήματος όρος. Ελαχιστοποιώντας την παραπάνω έκφραση Εξ. 3.20 ως προς \mathcal{N} υπολογίζουμε την επαγόμενη παράμετρο νηματικής τάξης ως $\mathcal{N}_{\text{ind}} = \lambda \Delta_2^R$ λόγω της παρουσίας της παραμέτρου Δ_2^R . Αντικαθιστώντας την \mathcal{N}_{ind} στην Εξ. 3.20 προκύπτει

$$\mathcal{F}_{\mathcal{N}} = \left(\alpha_{\Re} - \frac{\lambda^2}{\chi_{\text{nem}}} \right) \frac{(\Delta_2^{\Re})^2}{2} + \alpha_{\Im} \frac{(\Delta_2^{\Im})^2}{2} + \sum_{j=\Re, \Im} \beta_j \frac{(\Delta_2^j)^4}{4}. \quad (3.23)$$

Επομένως η επαγόμενη νηματική τάξη οδηγεί στην ενίσχυση της επιδεκτικότητας της Δ_2^{\Re} φάσης ή ισοδύναμα στην αύξηση της αντίστοιχης κρίσιμης θερμοκρασίας T_c^{\Re} . Αν ισχύει $\lambda^2/\chi_{\text{nem}} > \alpha_{\Re} - \alpha_{\Im}$, τότε $\delta\alpha < 0$ και η κρίσιμη θερμοκρασία της νηματικής φάσης γίνεται υψηλότερη της αντίστοιχης υπεραγωγίμης φάσης που παραβιάζει την \mathcal{T} . Στο Σχ.3.5 παρουσιάζουμε ακριβώς μια τέτοια περίπτωση όπου η νηματική φάση επικρατεί.

Με τον ίδιο τρόπο διερευνούμε και τη δεύτερη περίπτωση όπου οι κρίσιμες θερμοκρασίες για τις δύο υπεραγωγίμες φάσεις σχεδόν ταυτίζονται. Θεωρώντας κοινή κρίσιμη θερμοκρασία T_c το ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας αποκτά την παρακάτω μορφή

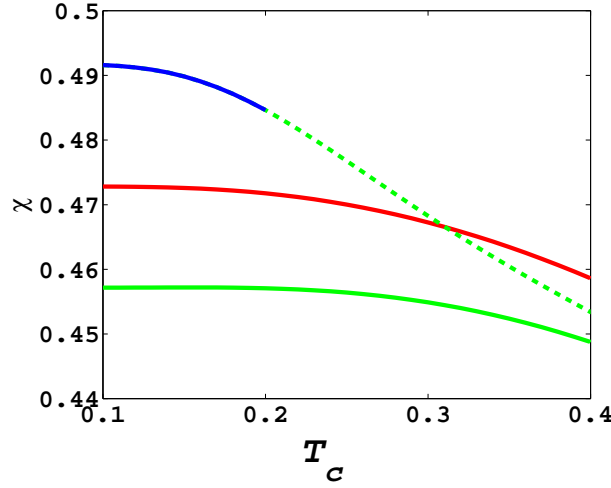
$$\mathcal{F} = \sum_{m=1,2} \left(\alpha_m \frac{|\Delta_m|^2}{2} + \beta_m \frac{|\Delta_m|^4}{4} \right) + [c + g \cos(2\varphi)] \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{2}, \quad (3.24)$$

όπου τώρα $\Delta_m = |\Delta_m| e^{i\varphi_m}$ και $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$. Οι συντελεστές $\beta_m = S_{mm}$, $c = 2S_{12}$ και $g = S_{12} = c/2$ προκύπτουν από την παρακάτω γενική σχέση

$$S_{ab} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, l} \frac{[f_a(\mathbf{k}) f_b(\mathbf{k})]^2}{\varepsilon_l(\mathbf{k})} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_l(\mathbf{k})} \frac{n_F[\varepsilon_l(\mathbf{k}) - \mathcal{B}] - n_F[-\varepsilon_l(\mathbf{k}) - \mathcal{B}]}{2\varepsilon_l(\mathbf{k})} \Bigg|_{T=T_c}. \quad (3.25)$$

Διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

- $|c - g|/\sqrt{\beta_1 \beta_2} < 1$ οι δύο παράμετροι τάξης μπορούν να συνυπάρξουν για $\varphi = \pi/2$, που αντιστοιχεί στη φάση που παραβιάζει την \mathcal{T} .
- $|c + g|/\sqrt{\beta_1 \beta_2} < 1$ οι δύο παράμετροι τάξης μπορούν να συνυπάρξουν για $\varphi = 0$, που αντιστοιχεί στη νηματική φάση με $C_4 \rightarrow C_2$.
- $g > 0$ ($g < 0$), η ευνοούμενη υπεραγωγίμη φάση είναι η τετραγωνικής συμμετρίας (νηματική).



Σχήμα 3.5: Στην υπεραγώγιμη φάση με $\Delta_{s\pm} = 0.5$, η επιδεικτικότητα του συστήματος για την υπεραγώγιμη φάση d σε σχετική φάση $\varphi = 0$ (πράσινη γραμμή) και $\varphi = \pi/2$ (κόκκινη γραμμή). Η πράσινη διακεκομμένη γραμμή αντιστοιχεί στην αντίστοιχη επιδεικτικότητα $\tilde{\chi}_{\mathfrak{R}} = \chi_{\mathfrak{R}} + \lambda^2/(2\chi_{\text{nem}})$ όπου συμπεριλαμβάνεται η τροποποίηση της ενεργειακής δομής του συστήματος λόγω παρουσίας των νηματικών διακυμάνσεων. Για $V_{s\pm} = 1.45$ η κρίσιμη θερμοκρασία για τη φάση S_{\pm} είναι $T_c^{s\pm} = 0.415$ και για $T < 0.2$ η παράμετρος τάξης αποκτά την τιμή $\Delta_{s\pm} = 0.5$ η οποία παραμένει σταθερή μέχρι $T = 0$. Για $V_d \simeq 2.05$ (που αντιστοιχεί στην επιδεικτικότητα $\tilde{\chi}_{\mathfrak{R}}^d \simeq 0.485$ που σημειώνεται με μπλε γραμμή) η νηματική φάση $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ σταθεροποιείται τουλάχιστον για θερμοκρασίες κοντά στην $T_c^{\mathfrak{R}} \leq 0.2$ λόγω της παρουσίας των νηματικών διακυμάνσεων.

Στην προσέγγιση αυτή τα σημαντικότερα αποτελέσματα που προέκυψαν για τις περιπτώσεις ανταγωνισμού $S - d_{x^2-y^2}$ και $S_{\pm} - d_{x^2-y^2}$ παρουσιάζονται περιληπτικά παρακάτω:

- $S - d_{x^2-y^2}$: για δυναμικά $V_m \leq 4$, προκύπτει $0.4 \leq |c - g|/\sqrt{\beta_1\beta_2} \leq 0.63$ (επομένως η συνύπαρξη $S + id_{x^2-y^2}$ είναι δυνατή) και $1 < |c + g|/\sqrt{\beta_1\beta_2}$ (επομένως η συνύπαρξη $S + d_{x^2-y^2}$ δεν είναι δυνατή).
- $S_{\pm} - d_{x^2-y^2}$: για δυναμικά $2 \leq V_d \leq 4$ και $0.6 \leq V_{s\pm} \leq 4$ προκύπτει $0.12 \leq |c - g|/\sqrt{\beta_1\beta_2} < 0.33$ (η συνύπαρξη $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ είναι δυνατή) και $|c + g|/\sqrt{\beta_1\beta_2} < 1$ (επομένως η συνύπαρξη $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ είναι επίσης δυνατή) (Σχ. 3.6).

Στη συνέχεια διερευνούμε πως αλλάζουν τα παραπάνω αποτελέσματα όταν συμπεριληφθούν τα επαγόμενα νηματικά φαινόμενα όπως εισήχθησαν και στην προηγούμενη περίπτωση. Το ανάπτυγμα της ελεύθερης ενέργειας στην περίπτωση αυτή παίρνει τη μορφή

$$\mathcal{F}_{\mathcal{N}} = \sum_{m=1,2} \left(\alpha_m \frac{|\Delta_m|^2}{2} + \beta_m \frac{|\Delta_m|^4}{4} \right) + [c + g \cos(2\varphi)] \frac{|\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2}{2} + \frac{\mathcal{N}^2}{2\chi_{\text{nem}}} - \lambda |\Delta_1| |\Delta_2| \frac{\mathcal{N}}{\chi_{\text{nem}}} \cos \varphi, \quad (3.26)$$

όπου η νηματική επιδεικτικότητα έχει την αντίστοιχη έκφραση για τη μεταλλική φάση

$$\chi_{\text{nem}} = -(1/N) \sum_{\mathbf{k}, s, l} f_{\text{nem}}^2(\mathbf{k}) n'_F[-\mathcal{B} + s\varepsilon_l(\mathbf{k})], \quad (3.27)$$

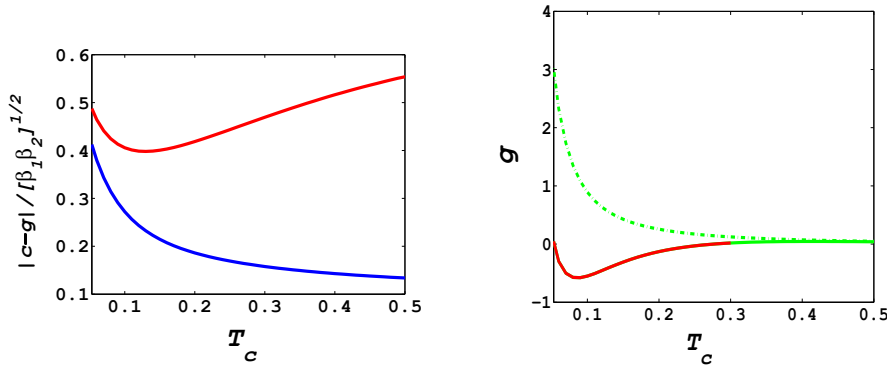
ενώ η σταθερά σύζευξης λ υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση

$$\lambda = \left. \frac{\partial J}{\partial (\Delta_1 \Delta_2^*)} \right|_{\Delta_1 = \Delta_2^* = 0} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, l} \frac{f_2(\mathbf{k}) f_{\text{nem}}(\mathbf{k}) f_1(\mathbf{k})}{\varepsilon_l(\mathbf{k})} \left\{ n'_F[-\mathcal{B} + s\varepsilon_l(\mathbf{k})] - s \frac{n_F[-\mathcal{B} + s\varepsilon_l(\mathbf{k})]}{\varepsilon_l(\mathbf{k})} \right\}. \quad (3.28)$$

Η επαγόμενη νηματική τάξη προκύπτει $\mathcal{N}_{\text{ind}}^{BS} = \lambda |\Delta_1| |\Delta_2| \cos(\varphi)$ και συνεπώς η διορθωμένη έκφραση για την ελεύθερη ενέργεια έχει τη μορφή

$$\mathcal{F}_N = \sum_{m=1,2} (\alpha_m |\Delta_m|^2/2 + \beta_m |\Delta_m|^4/4) + [\tilde{c} + \tilde{g} \cos(2\varphi)] |\Delta_1|^2 |\Delta_2|^2/2, \quad (3.29)$$

με $\tilde{c} = c - \lambda^2/(2\chi_{\text{nem}})$ και $\tilde{g} = g - \lambda^2/(2\chi_{\text{nem}})$, όπου λ και χ_{nem} υπολογίζονται για $T = T_c$. Αν $|\tilde{c} - \tilde{g}|/\sqrt{\beta_1\beta_2} < 1$, οι δύο παράμετροι τάξης μπορούν να συνυπάρξουν με $\varphi = \pi/2$, δημιουργώντας μια υπεραγωγίμη φάση που παραβιάζει την \mathcal{T} . Καθώς $|\tilde{c} - \tilde{g}| = |c - g|$, η διόρθωση της ελεύθερης ενέργειας λόγω παρουσίας νηματικών διακυμάνσεων δεν τροποποιεί τα προηγούμενα αποτελέσματα. Αν $|\tilde{c} + \tilde{g}|/\sqrt{\beta_1\beta_2} = |c + g - \lambda^2/\chi_{\text{nem}}|/\sqrt{\beta_1\beta_2} < 1$, οι δύο παράμετροι τάξης μπορούν να συνυπάρξουν με $\varphi = 0$ δημιουργώντας μια νηματική υπεραγωγίμη φάση. Για $\tilde{g} > 0$ ($\tilde{g} < 0$) η ευνοούμενη φάση είναι η τετραγωνικής συμμετρίας (νηματική). Παρουσία νηματικών διακυμάνσεων διαπιστώνουμε ότι η νηματική φάση επικρατεί αυτής με τετραγωνική συμμετρία για ενδιάμεσες τιμές της σταθεράς σύζευξης [83], καθώς μόνο στην περίπτωση αυτή προκύπτει $\tilde{g} < 0$ και $|\tilde{c} + \tilde{g}|/\sqrt{\beta_1\beta_2} < 1$ ταυτόχρονα. Στα πλαίσια της μικροσκοπικής μας θεωρίας μπορέσαμε να ταυτοποιήσουμε το εύρος των δυναμικών για το οποίο η σταθερά σύζευξης λ επαρκεί για την εμφάνιση και την ενεργειακή σταθεροποίηση της νηματικής φάσης $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ (Σχ. 3.6).



Σχήμα 3.6: Ανάπτυγμα Landau της ελεύθερης ενέργειας θεωρώντας κοινή κρίσιμη θερμοκρασία για τις συμμετρίες $d_{x^2-y^2}, S_{\pm}$ και S των υπεραγωγίμων φάσεων. (α) Ο κανονικοποιημένος όρος $|c - g|/\sqrt{\beta_1\beta_2}$ για τις $S + id_{x^2-y^2}$ (κόκκινο χρώμα) και $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ (μπλε χρώμα) υπεραγωγίμες φάσεις συναρτήσει της κρίσιμης θερμοκρασίας T_c . Ο όρος αυτός παραμένει πάντα μικρότερος του 1 και συνεπώς οι $S + id_{x^2-y^2}$ και $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ φάσεις είναι και οι δύο επιτρεπτές για δυναμικά που αντιστοιχούν σε κοινή κρίσιμη θερμοκρασία T_c για τις συγκεκριμένες συμμετρίες. Για $g > 0$ (που ισχύει πάντα απουσία των νηματικών διακυμάνσεων) προκύπτει $|c + g|/\sqrt{\beta_1\beta_2} = 3|c - g|/\sqrt{\beta_1\beta_2}$. Συνεπώς η $S + d_{x^2-y^2}$ φάση με κοινή T_c δεν επιτρέπεται ποτέ, ενώ η $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ επιτρέπεται για $1.97 \leq V_d \leq 4$ και $0.6 \leq V_{S_{\pm}} \leq 4$, αλλά δεν ευνοείται σε σχέση με την $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ φάση καθώς $g > 0$. (β) Ο όρος g για την S_{\pm} και $d_{x^2-y^2}$ με (πράσινη γραμμή) και χωρίς (πράσινη διακεκομμένη γραμμή) την παρουσία νηματικών διακυμάνσεων. Παρουσία των νηματικών διακυμάνσεων προκύπτει $\tilde{g} < 0$ (κόκκινη γραμμή) για κοινή $0.05 < T_c < 0.28$ κρίσιμη θερμοκρασία και η νηματική φάση $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ ευνοείται (και επιτρέπεται επίσης καθώς $|\tilde{c} + \tilde{g}|/\sqrt{\beta_1\beta_2} < 1$) σε σχέση με την $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$. Για τιμές των ενεργών δυναμικών $1.96 \leq V_d \leq 2.06$ και $0.65 \leq V_{S_{\pm}} \leq 1.19$ υπάρχουν πάντα συνδυασμοί δυναμικών που οδηγούν σε κοινή κρίσιμη θερμοκρασία $0.05 < T_c < 0.28$.

3.2.3 Νηματικά κύματα πυκνότητας φορτίου

Παρακάτω συζητάμε στα πλαίσια του παραπάνω μοντέλου για τους $FeBS$, την περίπτωση συνύπαρξης κυμάτων πυκνότητας που αναφέρονται στην ίδια ενεργειακή ζώνη (intraband) η οποία επίσης μπορεί να οδηγήσει την εμφάνιση νηματικής τάξης. Σημειώνουμε ότι το μοντέλο μας λόγω της τέλει συναρμογής των δύο επιφανειών Fermi για $\mu = 0$ ευνοεί την εμφάνιση διαζωνικών (interband) κυμάτων πυκνότητας. Όμως τα σχετικά πειραματικά δεδομένα καταδεικνύουν μόνο ασθενή παρουσία της συναρμογής αυτής και δεδομένου ότι σε συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων τα κύματα πυκνότητας μπορούν να εμφανιστούν ακόμα και απουσία σχετικής συναρμογής, θεωρούμε την παρακάτω μελέτη σχετική με τη φυσική των συγκεκριμένων υλικών.

Για τη μελέτη ανταγωνισμού κυμάτων πυκνότητας εισάγουμε αρχικά τον παρακάτω σπινόρα $\widehat{\Psi}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger, d_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger)$. Συγκεκριμένα για κύματα πυκνότητας φορτίου (CDWs) θεωρούμε τους όρους $\sum_\sigma W(\mathbf{k}) [c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + d_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}]$ και $\sum_\sigma W(\mathbf{k})^* [c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k},\sigma}]$, ενώ για κύματα πυκνότητας σπιν (SDWs) με πόλωση στον άξονα z θεωρούμε τους όρους $\sum_\sigma M(\mathbf{k}) \sigma [c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + d_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}]$ και $\sum_\sigma M(\mathbf{k})^* \sigma [c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + d_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger d_{\mathbf{k},\sigma}]$. Καθώς το κυματόνυσμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ είναι το μισό του εύρους της ζώνης Brillouin, ισχύουν οι παρακάτω σημαντικές σχέσεις $W(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = W^*(\mathbf{k})$ και $M(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) = M^*(\mathbf{k})$ για τις αντίστοιχες παραμέτρους τάξης. Στην περίπτωση των κυμάτων πυκνότητας η ταξινόμηση των παραμέτρων τάξης ως προς τη μεταφορά ορμής $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$ είναι ουσιαστική για τη διερεύνηση σχετικών νηματικών φάσεων, καθώς παράμετροι συμμετρικές στη μεταφορά $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$ είναι πραγματικές, ενώ οι αντισυμμετρικές είναι φανταστικές. Στην περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή έχει τη μορφή

$$\widehat{H}_\sigma(\mathbf{k}) = \gamma(\mathbf{k})\kappa_3 + \delta(\mathbf{k})\rho_3 - \mu + W_{\mathfrak{R}}(\mathbf{k})\kappa_1 - W_{\mathfrak{S}}(\mathbf{k})\kappa_2 + \sigma [-\mathcal{B} + M_{\mathfrak{R}}(\mathbf{k})\kappa_1 - M_{\mathfrak{S}}(\mathbf{k})\kappa_2] \quad (3.30)$$

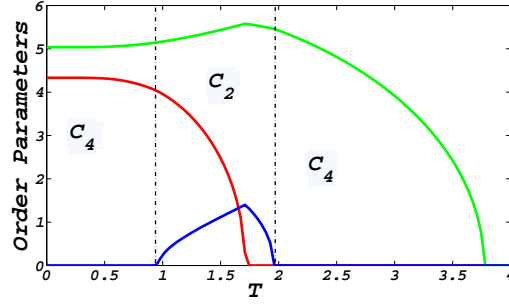
όπου οι μήτρες $\boldsymbol{\kappa}$ δρουν στον χώρο $\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}$. Οι παράμετροι τάξης $W_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}(\mathbf{k}) = \sum_n W_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}^n f_{+(-)}^n(\mathbf{k})$ και $M_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}(\mathbf{k}) = \sum_n M_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}^n f_{+(-)}^n(\mathbf{k})$ αποτελούνται γενικά από συνιστώσες με συναρτήσεις βάσης $f_{\pm}^n(\mathbf{k})$ της ομάδας C_4 με $f_{+}^n(\mathbf{k}) = f_{+}^n(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ και $f_{-}^n(\mathbf{k}) = -f_{-}^n(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$. Η πυκνότητα ελεύθερης ενέργειας του συστήματος προκύπτει από την έκφραση

$$\mathcal{F}_{eh} = \sum_{n,m} \frac{|W_m^n|^2}{V_m^{n,W}} + \frac{|M_m^n|^2}{V_m^{n,M}} - \frac{1}{N\beta} \sum_{\mathbf{k}, \pm, \pm, \sigma} \ln \left(1 + e^{-\beta E_{\pm, \pm, \sigma}^B(\mathbf{k})} \right), \quad (3.31)$$

όπου $E_{\pm, \pm, \sigma}^B(\mathbf{k}) = -\sigma\mathcal{B} - \mu \pm \delta(\mathbf{k}) \pm \sqrt{\gamma(\mathbf{k})^2 + [W_{\mathfrak{R}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathfrak{R}}(\mathbf{k})]^2 + [W_{\mathfrak{S}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathfrak{S}}(\mathbf{k})]^2}$ και $m = \mathfrak{R}, \mathfrak{S}$. Ελαχιστοποιώντας την ελεύθερη ενέργεια ως προς τις παραμέτρους τάξης προκύπτουν οι αντίστοιχες αυτοσυνεπείς εξισώσεις για τις SDW παραμέτρους τάξης

$$M_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}^n = \frac{V_m^{n,M}}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, \pm, \pm} \mp \frac{f_{+(-)}^n(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} n_F[E_{\pm, \pm, \sigma}^B(\mathbf{k})] \sum_{n'} \left[f_{+(-)}^{n'}(\mathbf{k}) M_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}^{n'} + \sigma f_{+(-)}^{n'}(\mathbf{k}) W_{\mathfrak{R}(\mathfrak{S})}^{n'} \right], \quad (3.32)$$

όπου $E_\sigma(\mathbf{k}) = \sqrt{\gamma(\mathbf{k})^2 + [W_{\mathfrak{R}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathfrak{R}}(\mathbf{k})]^2 + [W_{\mathfrak{S}}(\mathbf{k}) + \sigma M_{\mathfrak{S}}(\mathbf{k})]^2}$. Οι αυτοσυνεπείς εξισώσεις για τις παραμέτρους των κυμάτων πυκνότητας φορτίου προκύπτουν από τις παραπάνω με την εναλλαγή $M \leftrightarrow W$. Από τη σχέση για το ενεργειακό φάσμα του συστήματος παρατηρούμε ότι η συνύπαρξη παραμέτρων τάξης με διαφορετική ως προς τη μεταφορά ορμής $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$ συμμετρία, δεν παραβιάζουν την τετραγωνική συμμετρία, όπως οι υπεραγώγιμες παράμετροι τάξης με $\varphi = \pi/2$. Επομένως νηματική τάξη εμφανίζεται μόνο για τις $S_{\pm} + d, S' + d'$ και όχι για τις $S_{\pm} + d', S' + d$ μικτές φάσεις κυμάτων πυκνότητας. Τα παραπάνω αποτελέσματα σχετικά με την εμφάνιση της νηματικής τάξης μπορούν να εξαχθούν κατευθείαν και από τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων Πιν.3.3. Επιλύοντας τις παραπάνω αυτοσυνεπείς εξισώσεις για τα κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν προκύπτει το παρακάτω διάγραμμα φάσης Σχ. 3.7, όπου καθώς μειώνεται η θερμοκρασία η τετραγωνική συμμετρία αρχικά υποβαθμίζεται σε ορθορομβική, ενώ εν συνεχεία επανεμφανίζεται. Σημειώνουμε ότι σε σχετικά πρόσφατο πείραμα διάθλασης νετρονίων και ακτίνων X [73], ανιχνεύθηκε η ανάκτηση της τετραγωνικής συμμετρίας καθώς μειώνεται η θερμοκρασία. Τέλος, από τη σχέση Εξ. 3.31 είναι προφανές ότι τα αποτελέσματα για τα κύματα πυκνότητας φορτίου είναι ίδια με εκείνα των κυμάτων πυκνότητας σπιν.



Σχήμα 3.7: Μεταβάσεις μεταξύ φάσεων κυμάτων πυκνότητας σπιν με τετραγωνική C_4 και ορθορομβική C_2 συμμετρία για $V_d = 4$, $V_s = V_{s_{\pm}} = 3$ και $\mu = \mathcal{B} = 0$. Για υψηλές θερμοκρασίες σταθεροποιείται κύμα πυκνότητας σπιν $d_{x^2-y^2}$ (d -SDW) συμμετρίας (πράσινη γραμμή). Για $T \simeq 2$ εμφανίζεται κύμα πυκνότητας σπιν S_{\pm} (S_{\pm} -SDW) συμμετρίας (μπλε γραμμή) σε συνύπαρξη με την κυρίαρχη φάση d -SDW. Καθώς και οι δύο συγκεκριμένες παράμετροι τάξης είναι αντισυμμετρικές στην μεταφορά ορμής $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$, η τετραγωνική C_4 συμμετρία υποβαθμίζεται στην ορθορομβική C_2 . Για χαμηλότερες θερμοκρασίες ένα συμβατικό κύμα πυκνότητας σπιν (S -SDW) (κόκκινη γραμμή) εμφανίζεται δημιουργώντας τη φάση $S + i(S_{\pm} + d_{x^2-y^2})$. Περαιτέρω μείωση της θερμοκρασίας ($T \simeq 1$) οδηγεί στον μηδενισμό της SDW παραμέτρου τάξης S_{\pm} και συνεπώς το σύστημα μεταβαίνει στην $S + id_{x^2-y^2}$ φάση και ανακτά την τετραγωνική συμμετρία C_4 , καθώς το συμβατικό SDW είναι συμμετρικό ως προς τον μετασχηματισμό $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} + \mathbf{Q}$. Το ίδιο διάγραμμα φάσης προκύπτει και για κύματα πυκνότητας φορτίου με αντίστοιχες συμμετρίες.

		C_4	$t_{\mathbf{Q}}$	ρ_1			C_4	$t_{\mathbf{Q}}$	ρ_1
S_{\pm} Κινητικός όρος	$t\kappa_3\tau_3f_{sect}$	+	-	+	S_{\pm} Κινητικός όρος	$t\kappa_3\tau_3f_{sect}$	+	-	+
S_{\pm} DW	$M_{S_{\pm}}\kappa_2\sigma_3f_{sect}$	+	-	+	S_{\pm} DW	$M_{S_{\pm}}\kappa_2\sigma_3f_{sect}$	+	-	+
d DW	$M_d\kappa_2\sigma_3f_d$	-	-	+	d' DW	$M_{d'}\kappa_1\sigma_3f_{ss}$	-	+	+
d Κινητικός όρος	$N_d\kappa_3\tau_3f_d$	-	-	+	d' Κινητικός όρος	$N_{d'}\tau_3f_{ss}$	-	+	+

Πίνακας 3.3: αριστερά) Ο d νηματικός κινητικός όρος που επάγεται στη μικτή $S_{\pm} + d$ φάση κύματος πυκνότητας σπιν (φορτίου) λόγω της παρουσίας του κοινού κινητικού όρου S_{\pm} των δύο ενεργειακών ζωνών. Παρουσιάζουμε τις ιδιότητες κάθε πεδίου ως προς τους μετασχηματισμούς στροφής κατά γωνία $\pi/4$ (C_4), μεταφοράς ορμής \mathbf{Q} ($t_{\mathbf{Q}}$) και εναλλαγής ενεργειακών ζωνών (ρ_1). Οποιοδήποτε γινόμενο τριών από τα παραπάνω πεδία έχει τις ιδιότητες μετασχηματισμού του τέταρτου πεδίου και συνεπώς τα πεδία αυτά σχηματίζουν τετράδα συζευγμένων πεδίων. Σημειώνουμε ότι ο επαγόμενος νηματικός όρος είναι κοινός και για τις δύο ενεργειακές ζώνες. δεξιά) Οι παραπάνω παρατηρήσεις ισχύουν και για τον d' νηματικό όρο που επάγεται στην $S_{\pm} + d'$ φάση κύματος πυκνότητας σπιν(φορτίου).

3.3 Πεδία επαγόμενα σε διεπαφές ετεροδομών.

3.3.1 π -τριπλετ υπεραγωγίμο πεδίο επαγόμενο σε ετεροδομές αντισιδηρομαγνήτη/ d -wave υπεραγωγού

Στη συγκεκριμένη παράγραφο θεωρούμε ετεροδομές μεταξύ μη-συμβατικών υπεραγωγών και πιο συγκεκριμένα υπεραγωγών $d_{x^2-y^2}$ συμμετρίας, όπως τα οξειδία του χαλκού, και υλικών που εμφανίζουν αντισιδηρομαγνητική τάξη. Λόγω της ανισοτροπίας του υπεραγωγίμου χάσματος στους συγκεκριμένους υπεραγωγούς, αναμένουμε ότι οι ιδιότητες των διεπαφών στις συγκεκριμένες ετεροδομές θα εξαρτώνται από τον σχετικό κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό των δύο υλικών.

Για τη μελέτη των ετεροδομών αυτών χρησιμοποιούμε για κάθε μια από τις δύο περιοχές την παρακάτω γενική Χαμιλτονιανή που περιλαμβάνει τις απαραίτητες αλληλεπιδράσεις για την εμφάνιση των συγκεκριμένων καταστάσεων τάξης

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle ij \rangle, s} t \psi_{i,s}^{\dagger} \psi_{j,s} + \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle, s} t' \psi_{i,s}^{\dagger} \psi_{j,s} + \sum_{i,s} U \psi_{i,s}^{\dagger} \psi_{i,s} \psi_{i,s}^{\dagger} \psi_{i,s} + \sum_{ij} \sum_{ss'} V_{ij} \psi_{i,s}^{\dagger} \psi_{i,s} \psi_{j,s'}^{\dagger} \psi_{j,s'}, \quad (3.33)$$

όπου $\psi_{i,s}^{\dagger}$ είναι οι τελεστές δημιουργίας φερμιονίου στην πλεγματική θέση i με πόλωση σπιν s . Σημειώνουμε ότι τα αποτελέσματά μας σχετικά με την επαγωγή ενεργών πεδίων στις διεπαφές, δεν

εξαρτώνται από συγκεκριμένες επιλογές των δυναμικών αλληλεπίδρασης. Επομένως για λόγους απλότητας θεωρούμε μόνο ένα τοπικό ελκτικό δυναμικό U , για την αντισιδηρομαγνητική περιοχή, και ένα απωστικό δυναμικό μεταξύ των άμεσα γειτονικών πλεγματικών σημείων V , για την υπεραγωγίμη φάση, αγνοώντας ως περιττό ένα πιθανό δυναμικό εναλλαγής σπιν J .

Αρχικά θεωρούμε το διάνυσμα βάσης a του πλέγματος παράλληλο της διεύθυνσης x , κάθετης στη διεπιφάνεια της ετεροδομής. Η συγκεκριμένη διεπαφή είναι τύπου [100] και μας επιτρέπει να θεωρήσουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά τον άξονα y παράλληλο στη διεπαφή. Για τους λόγους που αναφέρουμε στο δεύτερο κεφάλαιο της διατριβής, στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι καταλληλότερο να εκφράσουμε το σύστημά μας στον χώρο των x θέσεων- k_y ορμών. Αυτό επιτυγχάνεται εφαρμόζοντας στην παραπάνω Χαμιλτονιανή τον κατάλληλο μετασχηματισμό Fourier από τον χώρο θέσεων κατά τον y άξονα στον χώρο των αντίστοιχων k_y ορμών. Ο μετασχηματισμός αυτός διενεργείται μέσω της παρακάτω αντικατάστασης των μονοσωματιδιακών τελεστών

$$\psi_{i_x, i_y, s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k_y=1}^{N_y} e^{-ik_y i_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger, \quad \psi_{i_x, i_y, s} = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{k_y=1}^{N_y} e^{ik_y i_y} \psi_{i_x, k_y, s}, \quad (3.34)$$

και καταλήγει στην παρακάτω Χαμιλτονιανή εξίσωση

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{ij, k, s} [t(\delta_{i, j \pm 1} + \cos k \delta_{i, j}) + t' \delta_{i, j \pm 1} \cos k] \psi_{i, k, s}^\dagger \psi_{j, k, s} \\ & + \sum_{i, k, k', q, s} U_i \psi_{i, k, s}^\dagger \psi_{i, k+q, s} \psi_{i, k', s'}^\dagger \psi_{i, k'-q, s'} + \sum_{ij, \delta, k, k', q, s, s'} V_{ij} e^{iq\delta} \psi_{i, k, s}^\dagger \psi_{i, k+q, s} \psi_{j, k', s'}^\dagger \psi_{j, k'-q, s'} \end{aligned} \quad (3.35)$$

όπου παραλείψαμε τους δείκτες x και y και εισάγαμε το διάνυσμα μεταφοράς ορμής q , ενώ $\delta = j_y - i_y$. Θέλοντας να μελετήσουμε διεπαφές αντισιδηρομαγνητή/ d υπεραγωγού, εφαρμόζουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου θεωρώντας πεπερασμένα μόνο τα σχετικά τοπικά μέσα πεδία Δ του d υπεραγωγού και M^z της μαγνήτισης κατά τον z άξονα σπιν. Έτσι, καταλήγουμε στην παρακάτω Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \sum_{ij, k, s} \Psi_{i, k}^\dagger [[t(\delta_{i, j \pm 1} + 2 \cos k \delta_{i, j} \rho_z) + t' \delta_{i, j \pm 1} \cos k \rho_z] \tau_z \\ & + M_i^z \rho_x \tau_z \sigma_z + \Delta_i (\delta_{i, j \pm 1} - 2 \cos k \delta_{i, j} \rho_z) \tau_y \sigma_y] \Psi_{j, k}, \end{aligned} \quad (3.36)$$

όπου $\Psi_{i, k}^\dagger = (\psi_{i, k, \uparrow}^\dagger, \psi_{i, k, \downarrow}^\dagger, \psi_{i, -k, \uparrow}, \psi_{i, -k, \downarrow}, \psi_{i, k+Q, \uparrow}, \psi_{i, k+Q, \downarrow}, \psi_{i, -k+Q, \uparrow}, \psi_{i, -k+Q, \downarrow})$ ο σπινόρας και ρ , τ και σ , οι μήτρες Pauli που δρουν στους χώρους $(k, k+Q)$, Nambu και σπιν αντίστοιχα. Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας για την τοπική μαγνήτιση και το τοπικό υπεραγωγίμο πεδίο έχουν την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} M_i^z = & -\frac{1}{N_y} \sum_{j, k} \frac{U_i}{2} \langle \Psi_{i, k}^\dagger [\rho_x \tau_z \sigma_z \delta_{i, j}] \Psi_{j, k} \rangle, \\ \Delta_i = & \frac{1}{4N_y} \sum_{j, k} V_i \langle \Psi_{i, k}^\dagger [\tau_y \sigma_y \delta_{i, j \pm 1} - 2 \cos k \rho_z \tau_y \sigma_y \delta_{i, j}] \Psi_{j, k} \rangle. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Με βάση την Εξ. 3.36 μπορούμε να μοντελοποιήσουμε τις [100] διεπαφές μεταξύ ενός $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγού και μιας αντισιδηρομαγνητικής φάσης θεωρώντας $U_i = U\Theta(i - i_c)$ και $V_i = V\Theta(i_c - i)$ για τα δυναμικά αλληλεπίδρασης, όπου $\Theta(x)$ η συνάρτηση Heaviside και i_c η τελευταία πλεγματική θέση της αντισιδηρομαγνητικής περιοχής. Για τη μελέτη των συγκεκριμένων διεπαφών πρέπει

επιλέγουμε τις κατάλληλες αρχικές τιμές για τη μαγνήτιση $M_i^z = (-1)^i M^{z,Q}$, οι οποίες αντιστοιχούν στην αντισιδηρομαγνητική φάση, ενώ για την υπεραγωγίμη περιοχή θεωρούμε ως αρχικές τιμές $\Delta_i = \Delta$ που αντιστοιχούν σε μια ομοιογενή υπεραγωγίμη φάση. Σημειώνουμε ότι για τη μελέτη των επαγόμενων πεδίων στη διεπαφή δεν είναι απαραίτητη η αυτοσυνεπής επίλυση της Εξ. 3.36 αλλά αρκεί να θεωρήσουμε σταθερές τιμές για τα πεδία $M^{z,Q}$ και Δ (σαν να είναι εξωτερικώς επιβαλλόμενα πεδία). Η αυτοσυνεπής επίλυση του παραπάνω συστήματος γίνεται για λόγους πληρότητας και την απαίτηση για μια σχετικά πιο ρεαλιστική διερεύνηση. Σε κάθε περίπτωση το ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος προκύπτει από την επίλυση της παρακάτω εξίσωσης ιδιοτιμών

$$H_k U_{n,k} = E_{n,k} U_{n,k}$$

$$H_k = [t(\delta_{i,j\pm 1} + 2 \cos k \delta_{i,j} \rho_z) + t' \delta_{i,j\pm 1} \cos k \rho_z] \tau_z + M_i^z \rho_x \tau_z \sigma_z + \Delta_i (\delta_{i,j\pm 1} - 2 \cos k \delta_{i,j} \rho_z) \tau_y \sigma_y. \quad (3.38)$$

Με την εισαγωγή των μητρών για τις ιδιοενέργειες $E_{n,k}$ και τις ιδιοκαταστάσεις $U_{n,k}$ του συστήματος, οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας παίρνουν τη μορφή

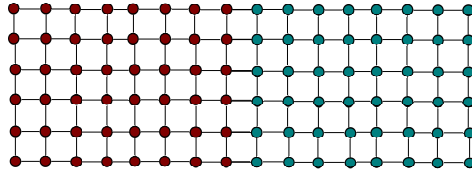
$$\begin{aligned} M_i^z &= -\frac{U_i}{2N_y} \sum_k \left[\hat{U}_k^\dagger [\rho_x \tau_z \sigma_z \delta_{i,j}] \hat{U}_k \right]_{nn} n_F(E_{n,k}), \\ \Delta_i &= \frac{V_i}{4N_y} \sum_k \left[\hat{U}_k^\dagger [\tau_y \sigma_y \delta_{i,j\pm 1} - 2 \cos k \rho_z \tau_y \sigma_y \delta_{i,j}] \hat{U}_k \right]_{nn} n_F(E_{n,k}), \end{aligned} \quad (3.39)$$

όπου $n_F(E_{n,k}) = [1 + e^{\beta E_{n,k}}]^{-1}$ η κατανομή Fermi. Οι δύο περιοχές, αντισιδηρομαγνητική και υπεραγωγίμη, συνδέονται μέσω απλών κινητικών όρων

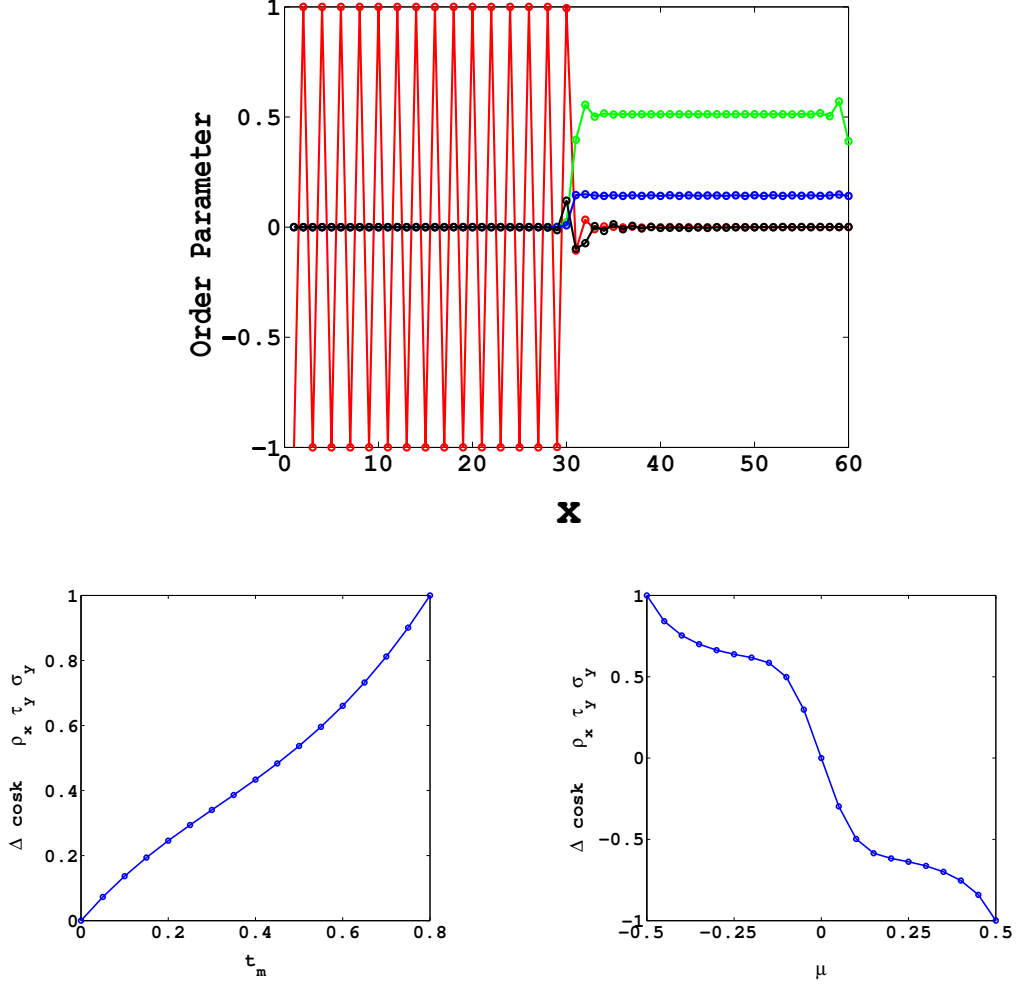
$$H_k^{int} = [t_c (\delta_{i,j+1} + 2 \cos k \delta_{i,j} \rho_z) + t'_c \delta_{i,j+1} \cos k \rho_z] \tau_z + H.c. . \quad (3.40)$$

Όπως έχουμε προαναφέρει, στην παρούσα εργασία μελετάμε διδιάστατα συστήματα που έχουν τετραγωνική C_4 συμμετρία. Σε ετεροδομές όμως όπου το επίπεδο διεπαφής είναι κάθετο στο επίπεδο του συστήματος, όπως οι διεπαφές [100] και [110], η τετραγωνική συμμετρία C_4 υποβαθμίζεται στην ορθορομβική C_2 . Επομένως στην περίπτωση αυτή είναι καταλληλότερη η ανάλυση των πεδίων σε συναρτήσεις βάσης των μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της ορθορομβικής ομάδας συμμετρίας C_2 . Παρόλ αυτά, στο εσωτερικό κάθε περιοχής, σε απόσταση από τη διεπαφή μεγαλύτερη από το μήκος συνάφειας της αντίστοιχης παραμέτρου τάξης, η τετραγωνική συμμετρία αναμένεται να αποτελεί καλή προσέγγιση. Για τον λόγο αυτό συνεχίζουμε την ανάλυσή μας βάσει των συναρτήσεων βάσης των μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της C_4 ομάδας αναμένοντας όμως ότι στις διεπαφές θα εμφανίζονται υπερθέσεις των συναρτήσεων αυτών οι οποίες θα αντιστοιχούν σε συναρτήσεις βάσης των μη-αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της ομάδας C_2 . Για παράδειγμα στη διεπαφή $d_{x^2-y^2}/AFM$ αναμένεται η εμφάνιση υπεραγωγίμων συσχετίσεων s_{\pm} συμμετρίας λόγω της υποβάθμισης $C_4 \rightarrow C_2$ της συμμετρίας του συστήματος.

Σύμφωνα με τον κανόνα επαγόμενων πεδίων, στις διεπαφές $d_{x^2-y^2}/AFM$ αναμένεται η εμφάνιση ενός π - *triplet* πεδίου για πεπερασμένες τιμές του χημικού δυναμικού μ (Πιν. 3.4). Το π - *triplet* πεδίο είναι ένα υπεραγωγίμο πεδίο $d_{x^2-y^2}$ συμμετρίας διαμορφωμένο κατά $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, το οποίο λόγω των αντιμεταθετικών ιδιοτήτων των φερμιονίων αποκτά *triplet* χαρακτήρα. Το ίδιο ισχύει και για το αντίστοιχο μονοδιάστατο πεδίο με διαμόρφωση $\mathbf{Q} = \pi$, ενώ το διδιάστατο πεδίο με διαμόρφωση κατά $q = (0, \pi)$ ή $q = (\pi, 0)$ έχει τόσο *singlet* όσο και *triplet* συνιστώσες. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το ενεργό πεδίο που εμφανίζεται στη διεπαφή είναι ένα υπεραγωγίμο π - *triplet* πεδίο ζεύξης της μορφής $\Delta_t \cos k \rho_y \tau_y \sigma_x$, λόγω της συνύπαρξης των πεδίων $M \rho_x \tau_z \sigma_z$,



Σχήμα 3.8: Σχηματική αναπαράσταση του πλεγματού μοντέλου τετραγωνικής συμμετρίας για ετεροδομή όπου το διάνυσμα βάσης του πλέγματος είναι κάθετο στο επίπεδο της διεπαφής, διεπαφή (100). Με κόκκινο και μπλε χρώμα σημειώνονται τα πλεγματοειδή σημεία που ανήκουν σε διαφορετικές περιοχές.

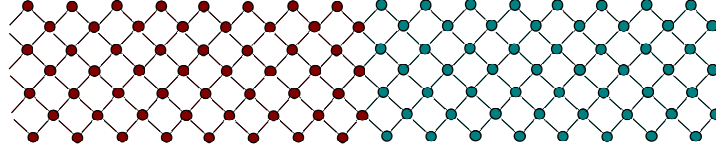


Σχήμα 3.9: Διεπαφή (100) σε ετεροδομή $d_{x^2-y^2}/AFM$ με $\Delta = 2$ για το υπεραγωγίμο πεδίο και $M^z = 4$ για το αντισιδηρομαγνητικό κύμα πυκνότητας σπιν. α) Η αντισιδηρομαγνητική (κόκκινο χρώμα) και η υπεραγωγίμη $d_{x^2-y^2}$ παράμετρος τάξης (πράσινο χρώμα) καθώς και η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής (μπλε χρώμα) σε ετεροδομή με χημικό δυναμικό $\mu = 0.4$ και $t_m = 1$. Με μαύρο χρώμα σημειώνονται οι συζυγείς του επαγόμενου υπεραγωγίμου πεδίου $\Delta_t \cos k \rho_y \tau_y \sigma_x$ συσχετίσεις. Παρατηρούμε ότι το πεδίο εμφανίζεται μόνο στη διεπαφή όπου συνυπάρχουν το αντισιδηρομαγνητικό και το υπεραγωγίμο πεδίο παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής. Η υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης $\Delta_t \cos k \rho_y \tau_y \sigma_x$ συναρτηθεί β) του όρου ζεύξης t_m των δύο περιοχών με $\mu = 0.4$ και γ) του χημικού δυναμικού μ για $t_m = 1$. Παρατηρούμε ότι η παράμετρος τάξης αποκτά πεπερασμένες τιμές μόνο για $t_m \neq 0$ και $\mu \neq 0$, όπως προβλέπεται από τον κανόνα επαγόμενων πεδίων.

$\Delta \cos k \rho_z \tau_y \sigma_y$ και $\mu \tau_z$ (Πιν. 3.4). Η συγκεκριμένη τετράδα πεδίων μπορεί να θεωρηθεί ως το μονοδιάστατο ανάλογο της υπεραγωγίμης φάσης που εμφανίζεται παρουσία μαγνητικού πεδίου στο $CeCoIn_5$ [51, 52, 54].

Στη συνέχεια θεωρούμε διεπαφές AFM/d παρουσία ενός πεδίου Zeeman $h_x \tau_z \sigma_x$ κάθετο προς την πόλωση του αντισιδηρομαγνήτη. Το πεδίο αυτό οδηγεί στην εμφάνιση ενός διαμορφωμένου κατά Q πεδίου ζεύξης π -triplet μεταξύ ηλεκτρονίων ίδιου σπιν, της μορφής $\rho_y \tau_y \cos(k_y)$ (Πιν. 3.4α).

Όπως παρατηρούμε στο Σχ.3.8, η υπεραγωγίμη φάση π – *triplet* εμφανίζεται μόνο στην περιοχή όπου συνυπάρχει ο αντισιδηρομαγνητισμός με την υπεραγωγίμη φάση $d_{x^2-y^2}$, επιβεβαιώνοντας και στην περίπτωση αυτή τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων.



Σχήμα 3.10: Σχηματική αναπαράσταση του πλεγματού μοντέλου τετραγωνικής συμμετρίας για ετεροδομή όπου το διάνυσμα βάσης του πλέγματος σχηματίζει γωνία $\pi/4$ με το επίπεδο της διεπαφής, διεπαφή (110). Με κόκκινο και μπλε χρώμα σημειώνονται τα πλεγματού σημεία που ανήκουν σε διαφορετικές περιοχές.

Τέλος, για λόγους πληρότητας μελετήσαμε και διεπαφές $d_{x^2-y^2}/AFM$ όπου το διάνυσμα βάσης του τετραγωνικού πλέγματος σχηματίζει γωνία $\pi/4$ με το επίπεδο της διεπαφής (Σχ. 3.10). Για τις συγκεκριμένες (110) διεπαφές $d_{x^2-y^2}/AFM$ η Χαμιλτονιανή Εξ. 3.36 που περιγράφει το σύστημα τροποποιείται ως εξής.

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij,k,s} \Psi_{i,k}^\dagger \left[[t' (\delta_{i,j\pm 2} + 2 \cos 2k\delta_{i,j}\rho_z) + t\delta_{i,j\pm 1} \cos k\rho_z] \tau_z + M_i^z \rho_x \tau_z \sigma_z \pm \Delta_i \sin k\delta_{i,j\pm 1}\rho_z \tau_y \sigma_y \right] \Psi_{j,k}, \quad (3.41)$$

ενώ αντίστοιχα τροποποιείται και η Χαμιλτονιανή σύζευξης των δύο περιοχών

$$H_k^{int} = [t'_c (\delta_{i,j+2} + 2 \cos 2k\delta_{i,j}\rho_z) + t_c \delta_{i,j+1} \cos k\rho_z] \tau_z + H.c.. \quad (3.42)$$

Για τα δυναμικά αλληλεπίδρασης θεωρούμε και σε αυτήν την περίπτωση ότι ισχύει $U_i = U\Theta(i - i_c)$ και $V_i = V\Theta(i_c - i)$, όπου $\Theta(x)$ η συνάρτηση Heaviside και i_c η τελευταία πλεγματού θέση της αντισιδηρομαγνητικής περιοχής. Για τον αυτοσυνεπή υπολογισμό των παραμέτρων τάξης επιλύουμε την εξίσωση ιδιοτιμών Εξ. 3.38 επαναληπτικά και υπολογίζουμε τα μέσα πεδία από τις παρακάτω εξισώσεις

$$M_i^z = -\frac{U_i}{2N_y} \sum_k \left[\hat{U}_k^\dagger [\rho_x \tau_z \sigma_z \delta_{i,j}] \hat{U}_k \right]_{nn} n_F(E_{n,k}),$$

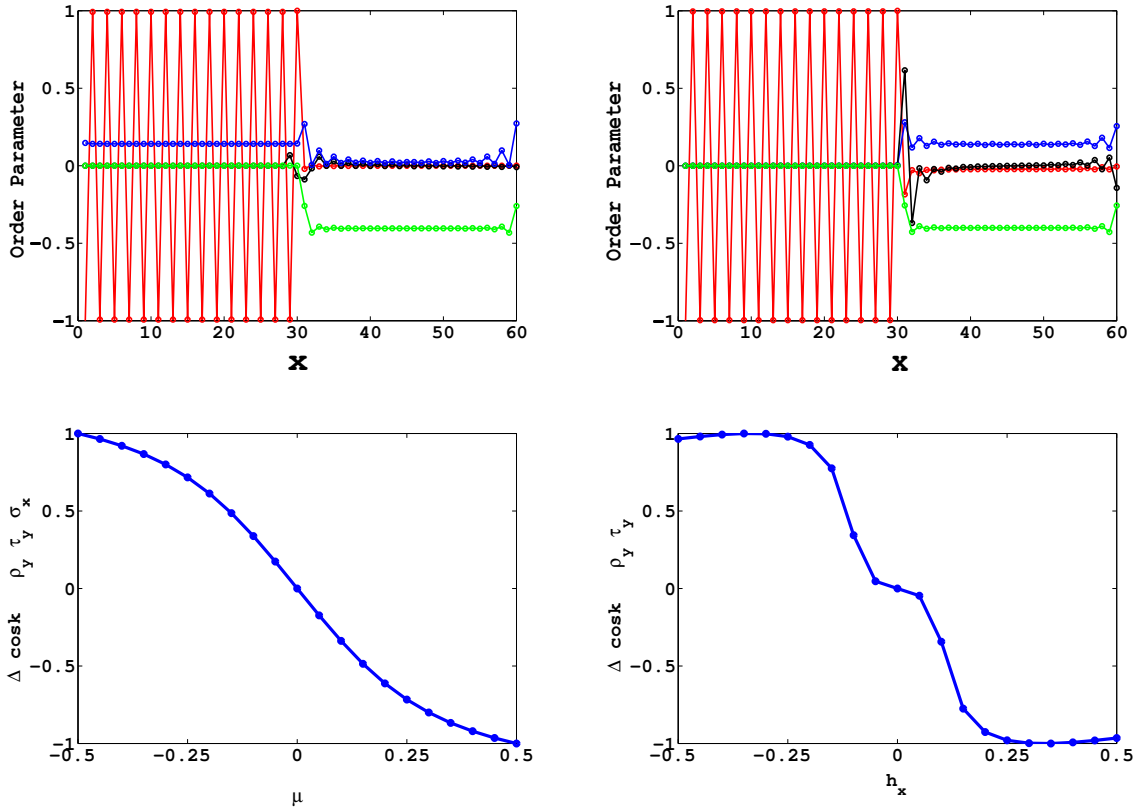
$$\Delta_i = \pm \frac{V_i}{4N_y} \sum_k \left[\hat{U}_k^\dagger [\sin k\delta_{i,j\pm 1}\rho_z \tau_y \sigma_y] \hat{U}_k \right]_{nn} n_F(E_{n,k}). \quad (3.43)$$

Τα αποτελέσματα που προκύπτουν και για τις δύο παραπάνω περιπτώσεις είναι ανάλογα με τα αντίστοιχα αποτελέσματα για τις διεπαφές (100). Στην περίπτωση αυτή όμως η μορφή του επαγόμενου υπεραγωγίμου πεδίου π – *triplet* είναι $\pm \sin(k)\delta_{i,j\pm 1}\rho_y \tau_y \sigma_x$ παρουσία του χημικού δυναμικού μ , και $\pm \sin(k)\delta_{i,j\pm 1}\rho_y \tau_y$ παρουσία του πεδίου Zeeman h_x . Από το Σχ. 3.11 παρατηρούμε ότι και στην περίπτωση αυτή επιβεβαιώνεται όπως αναμενόταν ο κανόνας των επαγόμενων πεδίων.

Τέλος, σημειώνουμε ότι τα αποτελέσματα που παρουσιάσαμε παραπάνω για τις διεπαφές $d_{x^2-y^2}/AFM$ είναι σε πλήρη συμφωνία με προηγούμενες μελέτες [84, 85], όπου όμως δεν είχε ταυτοποιηθεί η επαγωγή του π – *triplet* υπεραγωγίμου πεδίου ούτε και ο σχετικός μηχανισμός δημιουργίας του. Επίσης τα αποτελέσματα είναι αντίστοιχα αυτών που παρουσιάστηκαν στη διδακτορική διατριβή του κ. Απέρη [51, 52, 53] για την υπεραγωγίμη φάση του $CeCoIn_5$ παρουσία υψηλών μαγνητικών πεδίων.

		$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	$\tau_z\sigma_z$	t_Q	t_{iy}			$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	$\tau_z\sigma_z$	t_Q	t_{iy}
μ	$\mu\tau_z$	+	+	+	+	h_x	$h_x\tau_z\sigma_x$	+	+	+	+
SDW	$M_{z,Q}\rho_x\tau_z\sigma_z$	+	+	+	-	SDW	$M_{z,Q}\rho_x\tau_z\sigma_z$	+	+	+	-
d SC	$d\rho_z\tau_y\sigma_y \cos k$	-	+	-	+	d SC	$d\rho_z\tau_y\sigma_y(\cos k)$	-	-	-	+
π - triplet SC	$\Pi^{z,Q}\rho_y\tau_y\sigma_x \cos k$	-	+	-	-	π - triplet SC	$\Pi^{y,Q}\rho_y\tau_y(\cos k)$	-	-	-	-

Πίνακας 3.4: Οι δύο τετράδες πεδίων που σχετίζονται με τις διεπαφές $d_{x^2-y^2}/AFM$. α) Το υπεραγωγίμο πεδίο d συμμετρίας, το αντισιδηρομαγνητικό πεδίο $M_{z,Q}$, το χημικό δυναμικό μ και το πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων διαφορετικού σπιν π - triplet συνιστούν τετράδα συζευγμένων πεδίων. Σημειώνουμε τον μετασχηματισμό κάθε πεδίου ως προς ένα μετασχηματισμό βαθμίδας $U(1)$, μεταφορά ορμής Q και μεταφορά t_{iy} του πλέγματος κατά το διάλυσμα βάσης κατά τον y άξονα. Με $-$ ($+$) σημειώνουμε την (αντί-)συμμετρική συμπεριφορά κάθε πεδίου ως προς τον αντίστοιχο μετασχηματισμό συμμετρίας. Παρατηρούμε ότι οι ιδιότητες μετασχηματισμού οποιουδήποτε γινομένου τριών από τα παραπάνω πεδία ταυτίζονται με αυτές του τέταρτου πεδίου. β) Τα ίδια ισχύουν και για την τετράδα συζευγμένων πεδίων που περιλαμβάνει το πεδίο ζεύξης d συμμετρίας, το αντισιδηρομαγνητικό πεδίο $M_{z,Q}$, το πεδίο Zeeman h_x και το πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν π -triplet.



Σχήμα 3.11: Διεπαφή (110) σε ετεροδομή $d_{x^2-y^2}/AFM$ με $\Delta = 2$ για το υπεραγωγίμο πεδίο και $M^z = 4$ για το αντισιδηρομαγνητικό κύμα πυκνότητας σπιν. Η αντισιδηρομαγνητική (κόκκινο χρώμα) και η υπεραγωγίμη d παράμετρος τάξης (πράσινο χρώμα) καθώς και η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής (μπλε χρώμα) σε ετεροδομή με α) χημικό δυναμικό $\mu = 0.4$ και $t_m = 1$ και β) πεδίο Zeeman $h_x = 0.4$ και $t_m = 1$. Με μαύρο χρώμα σημειώνονται τα επαγόμενα στη διεπαφή υπεραγωγίμα πεδία $\Delta_t \pm \sin(k)\delta_{i,j\pm 1}\rho_y\tau_y\sigma_x$ και $\Delta_t \pm \sin(k)\delta_{i,j\pm 1}\rho_y\tau_y$ για τις περιπτώσεις α) και β) αντίστοιχα. Οι κανονικοποιημένες επαγόμενες συσχετίσεις γ) $\Delta_t \pm \sin(k)\delta_{i,j\pm 1}\rho_y\tau_y\sigma_x$ και δ) $\Delta_t \pm \sin(k)\delta_{i,j\pm 1}\rho_y\tau_y$ συναρτήσεως του χημικού δυναμικού μ και του πεδίου Zeeman h_x αντίστοιχα. Παρατηρούμε ότι τα αποτελέσματα σχετικά με τα επαγόμενα σε κάθε περίπτωση πεδία, είναι τα ίδια με αυτά που παρουσιάστηκαν για τις διεπαφές (100).

3.3.2 Επαγωγή υπεραγωγίμων πεδίων p συμμετρίας σε ετεροδομές τοπολογικού μονωτή-συμβατικού υπεραγωγού TI/SC .

Στην παρούσα ενότητα διερευνούμε ετεροδομές τοπολογικού μονωτή-υπεραγωγού (TI/SC) και δείχνουμε πως πεδία ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν εμφανίζονται στις συγκεκριμένες διεπαφές.

		$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	\mathcal{T}	I			$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	\mathcal{T}	I
Ρεύμα σπιν	$t_{so}\sigma_3 \sin(k_y)$	+	+	-	Ρεύμα σπιν	$t_{so}\sigma_3 \sin(k_y)$	+	+	-
S SC	$\Delta\tau_2\sigma_2$	-	+	+	S SC	$\Delta\tau_2\sigma_2$	-	+	+
h_x πεδίο Zeeman	$h_x\tau_3\sigma_1$	+	-	+	μ χημικό δυναμικό	$\mu\tau_3$	+	+	+
p SC	$\Delta_p\tau_1 \sin(k_y)$	-	-	-	p SC	$\Delta_p\tau_1\sigma_1 \sin(k_y)$	-	+	-

Πίνακας 3.5: Οι δύο τετράδες πεδίων που σχετίζονται με τις διεπαφές τοπολογικού μονωτή-συμβατικού υπεραγωγού TI/SC . Σημειώνουμε τον μετασχηματισμό κάθε πεδίου ως προς τον μετασχηματισμό βαθμίδας $U(1)$, την αντιστροφή του χρόνου \mathcal{T} και την αντιστροφή του χώρου I . Με $-$ ($+$) σημειώνουμε την (αντί-)συμμετρική συμπεριφορά κάθε πεδίου ως προς τον αντίστοιχο μετασχηματισμό συμμετρίας. Η συνύπαρξη ρεύματος σπιν και του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου Δ στη διεπαφή TI/SC επάγει τα πεδία ζεύξης ηλεκτρονίων α) $\Delta_p\tau_1 \sin(k_y)$ και β) $\Delta_p\tau_1\sigma_1 \sin(k_y)$, παρουσία πεδίου Zeeman h_x και χημικού δυναμικού αντίστοιχα.

Σημειώνουμε ότι στις ετεροδομές αυτές όπως έχει προταθεί τα επαγόμενα υπεραγωγίμα πεδία έχουν τοπολογικό μη τετριμμένο χαρακτήρα και μπορούν να υποστηρίξουν δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας [163, 164, 165].

Οι τοπολογικοί μονωτές είναι τοπολογικά μη-τετριμμένα μονωτικά συστήματα τα οποία διατηρούν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Τα συγκεκριμένα συστήματα ενώ χαρακτηρίζονται από μονωτική συμπεριφορά στο εσωτερικό, εμφανίζουν περιττό αριθμό καταστάσεων Dirac στο σύνορό τους. Σημειώνουμε ότι όλα τα φυσικά συστήματα που διατηρούν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου ταξινομούνται σε δύο τοπολογικές κλάσεις βάσει της τοπολογικής παραμέτρου \mathbb{Z}_2 που αντιστοιχεί στην παρουσία περιπλών ή άρτιων ζευγών Kramer εντοπισμένων στο σύνορο του συστήματος και αντιστοιχούν σε τοπολογικά (μη-)τετριμμένη φάση στο εσωτερικό του συστήματος. Καθώς οι τοπολογικοί μονωτές διατηρούν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου οι εντοπισμένες στο σύνορο του συστήματος καταστάσεις είναι ελικοειδείς, δηλαδή καταστάσεις με αντίθετη πόλωση του σπιν που διαδίδονται σε αντίθετη κατεύθυνση, οδηγώντας στην εμφάνιση ρεύματος σπιν [86, 87, 88].

Διδιάστατα συστήματα τοπολογικών μονωτών έχουν πειραματικά επιβεβαιωθεί ότι εμφανίζονται σε $HdTe/CdTe$ πηγάδια δυναμικού. Οι τοπολογικές ιδιότητες των συστημάτων αυτών αποδίδονται κυρίως στην παρουσία ισχυρών αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς στον Hg και στην αντιστροφή της ηλεκτρονικής του δομής. Για τον λόγο αυτό, η τοπολογική μετάβαση φάσης στα $HdTe/CdTe$ πηγάδια δυναμικού πραγματοποιείται στην κρίσιμη τιμή d_c του πάχους του πηγαδιού για την οποία το ενεργειακό χάσμα κλείνει. Για $d_{QW} > d_c$ οι ενεργειακές ζώνες του συστήματος αντιστρέφονται και η αντίστοιχη κατάσταση αποκτά μη-τετριμμένο τοπολογικό χαρακτήρα.

Οι ενεργειακές ζώνες δέσμιων καταστάσεων των συγκεκριμένων πηγαδιών δυναμικού μπορούν να περιγραφούν από το μοντέλο Bernevig-Hughes-Zhang [208] που αντιστοιχεί στην παρακάτω Χαμιλτονιανή

$$H_{BHZ} = \sum_{i,s,\alpha} \mu_\alpha n_{is\alpha} + \sum_{\langle i,j \rangle, s, \alpha, \beta} \psi_{is\alpha}^\dagger [\hat{t}(\delta)]_{\alpha\beta} \psi_{js\beta}, \quad (3.44)$$

με

$$\hat{t}_s(\pm x) = \begin{pmatrix} t_+ & \pm i s t_{so} \\ \pm i s t_{so} & t_- \end{pmatrix}, \quad \hat{t}_s(\pm y) = \begin{pmatrix} t_+ & \pm t_{so} \\ \mp t_{so} & t_- \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

όπου ο δείκτης i αναφέρεται στα πλεγματικά σημεία, ο δείκτης $\alpha = \pm$ στις ενεργειακές ζώνες, ενώ ο s στην πόλωση του σπιν. Εισάγοντας τον 4-διάστατο σπινόρα $\Psi_i^\dagger = (\psi_{i,+,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,+,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,-,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,-,\downarrow}^\dagger)$ και τις μήτρες Pauli $\boldsymbol{\rho}$ και $\boldsymbol{\sigma}$ που δρουν στους χώρους των ενεργειακών ζωνών και του σπιν αντίστοιχα, η παραπάνω Χαμιλτονιανή αποκτά την παρακάτω μορφή

$$H_{i,j,BHZ} = \frac{1}{2}(\mu_\pm \delta_{i,j} + t_\pm \delta_{i,j\pm 1})(\rho_3 \pm \rho_0) + t_{so}(\pm i \delta_{i_x, j_x \pm 1} \rho_1 \sigma_3 + \pm i \delta_{i_y, j_y \pm 1} \rho_2). \quad (3.46)$$

Σημειώνουμε ότι ο τοπολογικά μη-τετριμμένος χαρακτήρας της παραπάνω Χαμιλτονιανής πηγάζει από τον αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιας t_{SO} . Βάσει του συγκεκριμένου μοντέλου η ενεργός Χαμιλτονιανή στο σύνορο του διδιάστατου συστήματος έχει την παρακάτω μορφή

$$H_{edge} = t_{SO} \sin(k) \sigma_z, \quad (3.47)$$

όπου k είναι η συνιστώσα της ορμής παράλληλη προς το σύνορο. Η παραπάνω Χαμιλτονιανή συνόρου αναφέρεται σε ελικοειδείς καταστάσεις Dirac και αντιστοιχεί στις ενεργειακές ζώνες που σημειώνονται με κόκκινο χρώμα στο ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος όπως παρουσιάζεται στο Σχ. 3.12. Σημειώνουμε ότι το συγκεκριμένο ενεργειακό φάσμα αντιστοιχεί στο σύστημα Εξ.3.46 με μη-περιοδικές συνοριακές συνθήκες μόνο κατά τον άξονα y . Οι καταστάσεις που περιγράφονται από την Εξ. 3.47 εντοπίζονται στο σύνορο του συστήματος. Επομένως στο εσωτερικό του συστήματος το ενεργειακό φάσμα χαρακτηρίζεται από χάσμα στο οποίο και αποδίδεται η μονωτική του συμπεριφορά. Για περιοδικές συνοριακές συνθήκες οι συνοριακές καταστάσεις που παρουσιάζονται με κόκκινο χρώμα εξαφανίζονται υποδεικνύοντας τη συσχέτιση τους με τον τοπολογικά μη-τετριμμένο χαρακτήρα του συστήματος. Σημειώνουμε ότι για μη-περιοδικές συνοριακές συνθήκες και στις δύο διευθύνσεις οι συνοριακές καταστάσεις ισοδυναμούν με την εμφάνιση ρεύματος σπιν στο σύνορο του συστήματος όπως παρουσιάζεται στο Σχ. 3.12.

Εν συνεχεία θεωρούμε μια διεπαφή (100) ενός τοπολογικού μονωτή που περιγράφεται από την Εξ.3.44 και ενός συμβατικού υπεραγωγού που περιγράφεται από την εξίσωση

$$H_{SC} = \sum_{i,s} \mu_{SC} n_{is} + \sum_{\langle i,j \rangle, s} t_{SC} \psi_{is}^\dagger \psi_{js} + \sum_{i,s} \Delta \psi_{is}^\dagger \psi_{is'}^\dagger + H.c.. \quad (3.48)$$

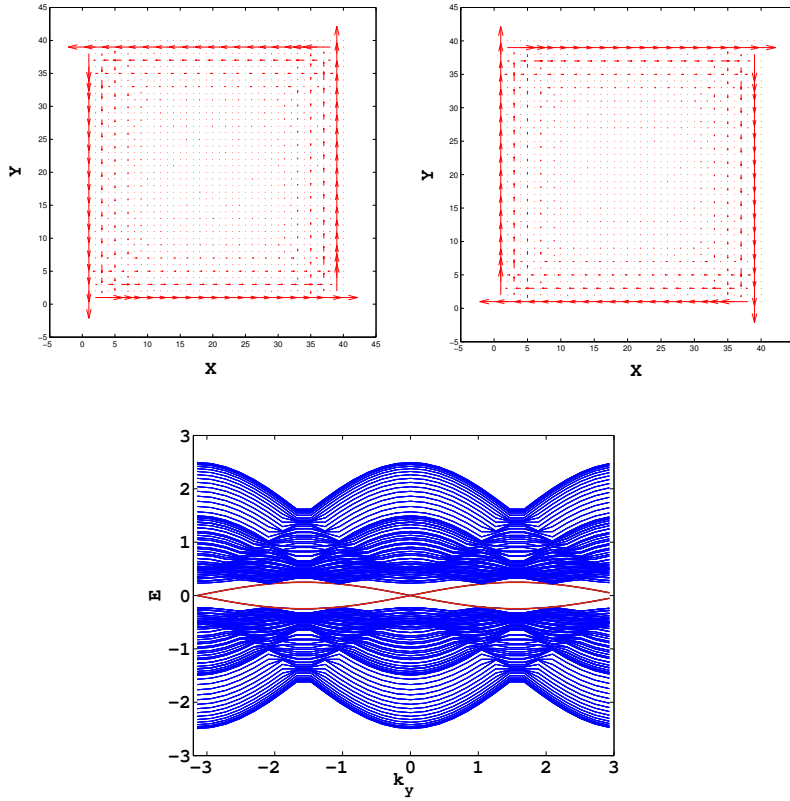
Θεωρώντας περιοδικές συνθήκες στην παράλληλη προς τη διεπαφή διεύθυνση η Χαμιλτονιανή της ετεροδομής αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} H_{TI/SC} &= \frac{1}{2} \sum_{ij,k} \Psi_{i,k}^\dagger \left[\hat{H}_{TI} \Theta(i) + \hat{H}_{SC} \Theta(-i) + \hat{H}_c \right] \Psi_{j,k} \\ \hat{H}_{TI} &= \frac{1}{2} [(\mu_\pm + 2t_\pm \cos k) \delta_{i,j} + t_\pm \delta_{i,j \pm 1}] \tau_3 (\rho_3 \pm \rho_0) + t_{SO} (\pm i \delta_{i,j \pm 1} \rho_1 \sigma_3 + 2 \sin k \rho_2) \\ \hat{H}_{SC} &= (\mu_{SC} + 2t_{SC} \cos k) \delta_{i,j} + t_{SC} \delta_{i,j \pm 1} \tau_3 + \Delta \delta_{i,j} \tau_2 \sigma_2 \\ \hat{H}_c &= t_c \delta_{\langle i,j \rangle_{int}} \tau_3, \end{aligned} \quad (3.49)$$

όπου $\Psi_{i,k}^\dagger = \left(\psi_{i,k,+,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,k,+,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,k,-,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,k,-,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,-k,+,\uparrow}, \psi_{i,-k,+,\downarrow}, \psi_{i,-k,-,\uparrow}, \psi_{i,-k,-,\downarrow} \right)$ ο σπίνορας και τ, ρ, σ οι μήτρες Pauli που δρουν στους χώρους Nambu, ενεργειακών ζωνών και σπιν αντίστοιχα.

Γενικά στο παραπάνω μοντέλο θεωρήσαμε σταθερές τις παραμέτρους $t_\pm = \pm t$, $\mu_\pm = \pm \mu$, $t_{SO} = 0.25t$ και $t_{SC} = t$. Η σύζευξη των δύο περιοχών γίνεται μέσω των όρων μεταπήδησης που περιέχονται στην H_c , όπου ο όρος $\delta_{\langle i,j \rangle_{int}}$ αναφέρεται στους κοντινότερους γείτονες μεταξύ των δύο περιοχών. Σημειώνουμε ότι για τον συμβατικό υπεραγωγό έχουμε εισάγει δύο εκφυλισμένες ενεργειακές ζώνες για να υπάρχει αντιστοιχία με το σύστημα του τοπολογικού μονωτή. Καθώς οι ενεργειακές αυτές ζώνες συνδέονται με τον ίδιο τρόπο και με τις δύο ζώνες του τοπολογικού μονωτή, αλλά δε συνδέονται μεταξύ τους, στην πραγματικότητα η παραπάνω Εξ. 3.49 αντιστοιχεί σε δύο πανομοιότυπα συστήματα ενός τοπολογικού μονωτή BHZ και ενός υπεραγωγού μίας ενεργειακής ζώνης. Συνεπώς η εισαγωγή δύο ενεργειακών ζωνών για τον υπεραγωγό δεν έχει καμία φυσική σημασία και γίνεται απλά για υπολογιστικούς λόγους.

Στην παραπάνω εξίσωση προσθέτουμε τη Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στα πεδία του χημικού δυναμικού (τάση πύλης) μ και Zeeman h_x που εφαρμόζονται ομοιόμορφα στο σύστημα.

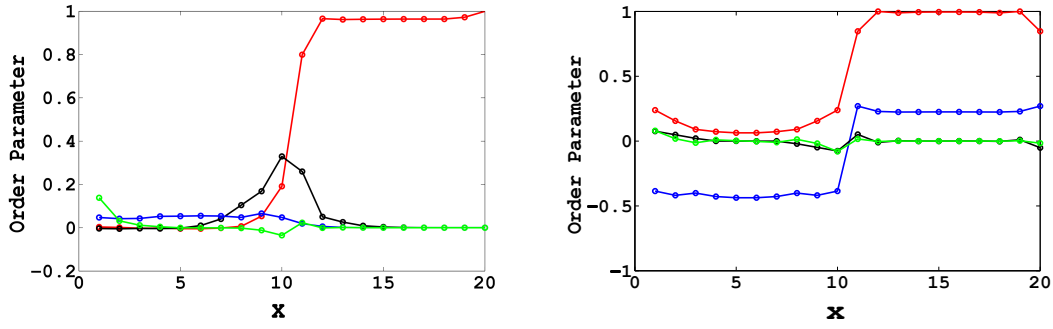


Σχήμα 3.12: α) Το ρεύμα που εμφανίζεται στο σύνορο διδιάστατου συστήματος τοπολογικού μονωτή που περιγράφεται από την Εξ. 3.44 του μοντέλου Bernevig-Hughes-Zhang για πόλωση του σπιν \uparrow (αριστερά) και \downarrow (δεξιά). Παρατηρούμε την αντίθετη φορά των ρευμάτων για αντίθετη πόλωση του σπιν όπως προβλέπεται για συστήματα που διατηρούν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Επομένως στο σύνορο των τοπολογικών μονωτών εμφανίζονται ρεύματα σπιν και όχι φορτίου. β) Το ενεργειακό φάσμα μονοδωματιδιακών διεγέρσεων του ίδιου συστήματος. Παρατηρούμε τις ενεργειακές ζώνες Dirac (κόκκινο χρώμα) που αντιστοιχούν σε καταστάσεις εντοπισμένες στο σύνορο του συστήματος. Για χαμηλές ενέργειες παρατηρούμε τη γραμμική (σχετικιστική) διασπορά των συγκεκριμένων καταστάσεων.

$$\hat{H}_f = (\mu + h_x \sigma_x) \delta_{i,j} \tau_3 \quad (3.50)$$

Στο Σχ. 3.13 παρουσιάζουμε ενδεικτικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την επίλυση της Εξ. 3.49 για διάφορες τιμές των πεδίων μ και h_x . Συγκεκριμένα το Σχ. 3.13α αντιστοιχεί σε πεπερασμένη τιμή μόνο για το πεδίο Zeeman h_x ενώ έχουμε θεωρήσει μη-περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά τον άξονα x . Παρατηρούμε ότι ρεύμα σπιν εμφανίζεται κατά τον y άξονα, ενώ στη διεπαφή εμφανίζεται το πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν $\Delta_p \tau_1 \sin(k_y)$ όπως προβλέπεται από τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων (Πιν. 3.5). Το συγκεκριμένο υπεραγωγίμο πεδίο εμφανίζεται μόνο στην περιοχή της διεπαφής όπου συνυπάρχουν το ρεύμα σπιν και το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο. Η συγκεκριμένη διεπαφή έχει προταθεί ως κατάλληλη για την εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας, καθώς το επαγόμενο λόγω της εφαρμογής του h_x υπεραγωγίμο πεδίο $\Delta_p \tau_1 \sin(k_y)$ έχει τοπολογικά μη-τετριμμένο χαρακτήρα.

Στο Σχ. 3.13β) παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα για πεπερασμένο πεδίο μ απουσία του πεδίου Zeeman. Στην περίπτωση αυτή μάλιστα έχουμε θεωρήσει περιοδικές συνθήκες κατά τον x άξονα επομένως το σύστημα αντιστοιχεί σε μια ετεροδομή $SC/TI/SC$ με δύο (100) διεπαφές TI/SC . Ο κανόνας των επαγόμενων πεδίων επιβεβαιώνεται και στην περίπτωση αυτή όπου στις διεπαφές επάγεται το πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων διαφορετικού σπιν $\Delta_p \tau_1 \sigma_1 \sin(k_y)$. Σημειώνουμε ότι στο εσωτερικό του τοπολογικού μονωτή όπου δεν εμφανίζεται το ρεύμα σπιν δεν παρατηρούμε και το επαγόμενο υπεραγωγίμο πεδίο ζεύξης.



Σχήμα 3.13: Διεπαφή(100) τοπολογικού μονωτή-συμβατικού υπεραγωγού. α) Το ρεύμα σπιν (πράσινο χρώμα), το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο (κόκκινο χρώμα) και η μαγνήτιση που επάγεται από το πεδίο Zeeman h_x (μπλε χρώμα). Παρατηρούμε την επαγωγή του πεδίου ζεύξης ηλεκτρονίων $\Delta_p \tau_1 \sin(k_y)$ (μαύρο χρώμα) ίδιου σπιν μόνο στη διεπαφή όπου συνυπάρχουν τα παραπάνω τρία πεδία. β) Η επαγωγή του πεδίου ζεύξης ηλεκτρονίων $\Delta_p \tau_1 \sigma_1 \sin(k_y)$ διαφορετικού σπιν (μαύρο χρώμα), στη διεπαφή όπου το ρεύμα σπιν και το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο συνυπάρχουν παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής (μπλε χρώμα) λόγω της εφαρμογής χημικού δυναμικού μ .

3.3.3 Επαγωγή υπεραγωγίμων πεδίων p συμμετρίας σε ετεροδομές ημιαγωγού-συμβατικού υπεραγωγού SM/SC .

Εν συνεχεία εξετάζουμε πώς ο κανόνας των επαγόμενων πεδίων σχετίζεται με την πρόταση για τη δημιουργία τοπολογικής υπεραγωγίμης φάσης σε διεπαφές ημιαγωγών με συμβατικούς υπεραγωγούς [166, 167, 168, 169, 170, 171, 172, 173]. Σύμφωνα με τη συγκεκριμένη πρόταση, απαραίτητο χαρακτηριστικό των ημιαγωγών που είναι κατάλληλοι για την εμφάνιση τοπολογικής υπεραγωγίμότητας στις συγκεκριμένες ετεροδομές είναι η παρουσία ισχυρών αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς.

Σύμφωνα με τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων η συνύπαρξη αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς a , με συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ , παρουσία ενός πεδίου Zeeman h_z (κάθετο στο επίπεδο των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς) ή ενός χημικού δυναμικού μ , οδηγεί στην εμφάνιση ελικοειδών υπεραγωγίμων πεδίων Δ_p . Μάλιστα, όπως παρουσιάζεται στον Πιν. 3.6 όπου συγκεκριμένα έχουμε θεωρήσει αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς τύπου Rashba, τα πεδία h_z και μ επάγουν υπεραγωγίμα πεδία με αντίθετη ελικότητα. Συγκεκριμένα επάγονται τα πεδία $\Delta_p^+ [\tau_1 \sin(k_y) - \tau_2 \sigma_3 \sin(k_x)]$ και $\Delta_p^- [\tau_1 \sigma_3 \sin(k_y) - \tau_2 \sin(k_x)]$ αντίστοιχα. Σημειώνουμε ότι το ίδιο ισχύει για αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς τύπου Dresselhaus με τη μόνη διαφορά ότι αντιστρέφεται σε κάθε περίπτωση η ελικότητα του επαγόμενου υπεραγωγίμου πεδίου. Η επαγωγή των πεδίων αυτών οδηγεί στην εμφάνιση ρεύματος σπιν στο σύνορο της διεπαφής αλλά όχι ρεύματος φορτίου σε περίπτωση που, είτε $h_z = 0$, ή $\mu = 0$ (Σχ. 3.14). Για $h_z \mu \neq 0$ εμφανίζονται και οι δύο ελικότητες, με αποτέλεσμα την εμφάνιση και ρεύματος φορτίου στο σύνορο των συγκεκριμένων επαφών. Μάλιστα, για συγκεκριμένες τιμές των πεδίων h_z και μ όπου το επίπεδο Fermi τέμνει μόνο ενεργειακές ζώνες ηλεκτρονίων με συγκεκριμένη πόλωση του σπιν, προκύπτει μια υπεραγωγίμη φάση που ισοδυναμεί σε ισόποση υπέρθεση των δύο φάσεων με αντίθετη ελικότητα $|\Delta_p^+| = |\Delta_p^-|$. Η συγκεκριμένη φάση είναι μια χειρική υπεραγωγίμη φάση ηλεκτρονίων ίδιου σπιν ή ισοδύναμα ηλεκτρονίων χωρίς σπιν. Αυτή η χειρική υπεραγωγίμη φάση παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου και συγκεκριμένα ανήκει στην τοπολογική κλάση D η οποία σε διδιάστατα συστήματα χαρακτηρίζεται από αχέραιο τοπολογικό αναλλοίωτο. Σε στροβίλους που δημιουργούνται στη συγκεκριμένη φάση αναμένεται η εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας [161, 163, 166].

Για την επιβεβαίωση των όσων προβλέπονται από τον κανόνα επαγόμενων πεδίων επιλύσαμε αριθμητικά διεπαφές (001) που αποτελούνται από ένα επίπεδο ημιαγωγού με αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς τύπου Rashba και ένα επίπεδο συμβατικού υπεραγωγού. Οι διεπαφές αυτές περιγράφονται από την παρακάτω γενική Χαμιλτονιανή

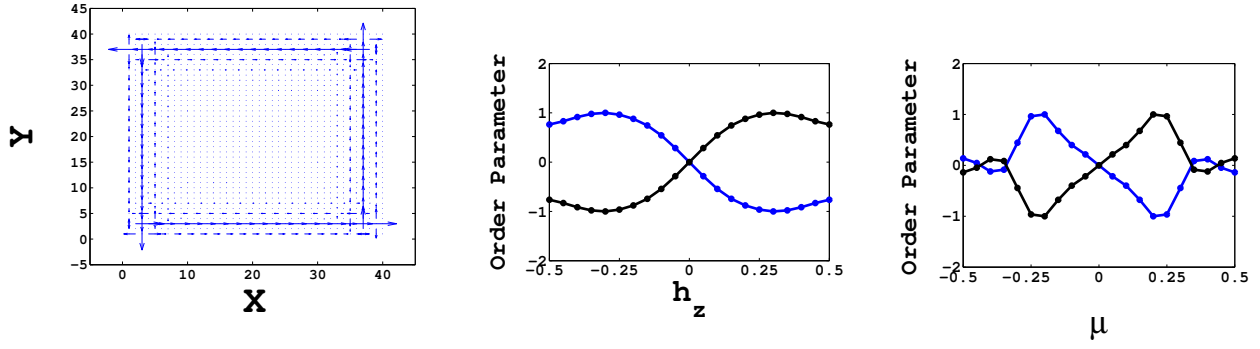
		$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	\mathcal{T}	I
SOC	$t_{so} [\sigma_1 \sin(k_y) - \tau_3 \sigma_2 \sin(k_x)]$	+	+	-
S SC	$\Delta \tau_2 \sigma_2$	-	+	+
h_x πεδίο Zeeman	$h_z \tau_3 \sigma_3$	+	-	+
p SC	$\Delta_p^+ [\tau_1 \sin(k_y) - \tau_2 \sigma_3 \sin(k_x)]$	-	-	-
		$c \rightarrow e^{i\pi/2}c$	\mathcal{T}	I
SOC	$t_{so} [\sigma_1 \sin(k_y) - \tau_3 \sigma_2 \sin(k_x)]$	+	+	-
S SC	$\Delta \tau_2 \sigma_2$	-	+	+
h_x πεδίο Zeeman	$\mu \tau_3$	+	-	+
p SC	$\Delta_p^- [\tau_1 \sigma_3 \sin(k_y) - \tau_2 \sin(k_x)]$	-	-	-

Πίνακας 3.6: Οι δύο τετράδες πεδίων που σχετίζονται με τις διεπαφές ημιαγωγού-συμβατικού υπεραγωγού, SM/SC . Σημειώνουμε τον μετασχηματισμό κάθε πεδίου ως προς τον συγκεκριμένο μετασχηματισμό βαθμίδας $U(1)$ ($c \rightarrow e^{i\pi/2}c$), την αντιστροφή του χρόνου \mathcal{T} και την αντιστροφή του χώρου I . Με $-$ ($+$) σημειώνουμε την (αντί-)συμμετρική συμπεριφορά κάθε πεδίου ως προς τον αντίστοιχο μετασχηματισμό συμμετρίας. Παρατηρούμε ότι οι ιδιότητες μετασχηματισμού οποιουδήποτε γινομένου τριών από τα παραπάνω πεδία ταυτίζονται με αυτές του τέταρτου πεδίου. Η συνύπαρξη αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς τύπου Rashba και του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου Δ στη διεπαφή SM/SC επάγει τα ελικοειδή πεδία ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν α) $\Delta_p^+ [\tau_1 \sin(k_y) - \tau_2 \sigma_3 \sin(k_x)]$ και β) $\Delta_p^- [\tau_1 \sigma_3 \sin(k_y) - \tau_2 \sin(k_x)]$, παρουσία πεδίου Zeeman h_z και χημικού δυναμικού μ αντίστοιχα. Τα υπεραγωγίμα πεδία που επάγονται στις παραπάνω περιπτώσεις έχουν ανάποδη μεταξύ τους ελικότητα. Συνεπώς στην ταυτόχρονη παρουσία h_z και μ η ισοδύναμη υπέρθεση των δύο αυτών πεδίων $|\Delta_p^+| = |\Delta_p^-|$ οδηγεί στην εμφάνιση χειρικής υπεραγωγιμότητας μεταξύ ηλεκτρονίων για μια πόλωση του σπιν, η επονομαζόμενη και υπεραγωγιμότητα ηλεκτρονίων χωρίς σπιν, η οποία έχει τοπολογικά μη-τετριμμένο χαρακτήρα.

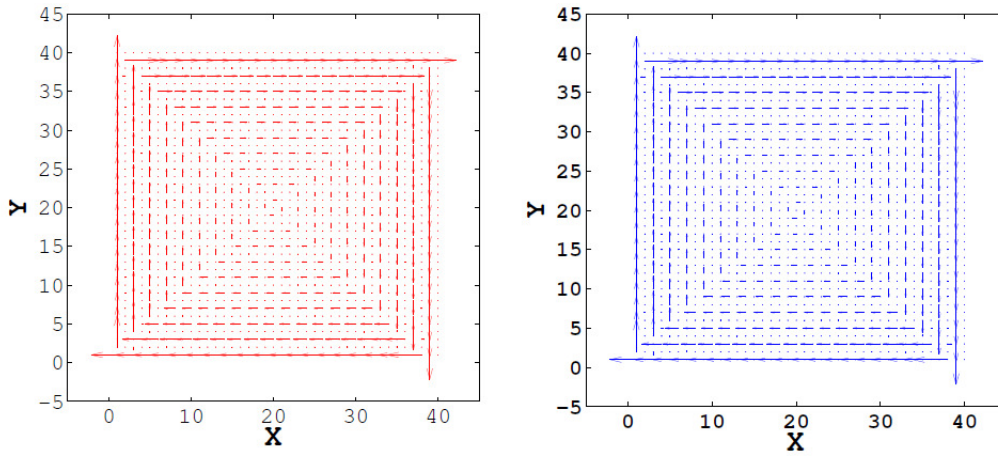
$$\begin{aligned}
H_{TI/SC} &= \frac{1}{2} \sum_{ij,l,l'} \Psi_{i,l}^\dagger \left[\hat{H}_{SM} + \hat{H}_{SC} + \hat{H}_c \right] \Psi_{j,l'} \\
\hat{H}_{SM} &= (\mu_{SM} \delta_{i,j} + t_{SM} \delta_{i,j \pm 1}) \tau_3 + ia_R (\delta_{i_x, j_x \pm 1} \tau_3 \sigma_2 + \delta_{i_y, j_y \pm 1} \sigma_1) \\
\hat{H}_{SC} &= (\mu_{SC} \delta_{i,j} + t_{SC} \delta_{i,j \pm 1}) \tau_3 + \Delta \delta_{i,j} \tau_2 \sigma_2, \quad \hat{H}_c = t_c \delta_{i,j} \delta_{l,l' \pm 1} \tau_3, \quad (3.51)
\end{aligned}$$

όπου έχουμε εισάγει τον σπίνορα $\Psi_{i,l}^\dagger = (\psi_{i,l,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,l,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,l,\uparrow}, \psi_{i,l,\downarrow})$ και τις μήτρες Pauli $\boldsymbol{\tau}$ και $\boldsymbol{\sigma}$ που δρουν στους χώρους Nambu και σπιν αντίστοιχα. Ο δείκτης l αναφέρεται στα δύο στρώματα που αποτελούν το σύστημα, το στρώμα του ημιαγωγού και το στρώμα του υπεραγωγού. Γενικά θεωρούμε $t_{SM} = t_{SC} = t$ και $\mu_{SM} = \mu_{SC} = \mu$. Το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο διαρρέει στο επίπεδο του ημιαγωγού λόγω του φαινομένου εγγύτητας όπου και η συνύπαρξη του με τις αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς a_R επάγει, παρουσία του πεδίου Zeeman $h_z \tau_3 \sigma_3$ ή του χημικού δυναμικού μ , το ελικοειδές υπεραγωγίμο πεδίο Δ_p^+ και Δ_p^- αντίστοιχα. Στο Σχ. 3.14 β) που αντιστοιχεί σε $\mu = 0$ παρατηρούμε πως το υπεραγωγίμο πεδίο Δ_p^+ επάγεται μόνο για πεπερασμένες τιμές του πεδίου Zeeman h_z . Παρατηρούμε επίσης την αντισυμμετρία του επαγόμενου πεδίου ως προς $h_z = 0$ όπως αναμένεται από τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων. Ομοίως από το Σχ. 3.14 γ) για $h_z = 0$ παρατηρούμε την επαγωγή του υπεραγωγίμου πεδίου Δ_p^- μόνο για πεπερασμένες τιμές του χημικού δυναμικού μ . Και στη περίπτωση αυτή, παρατηρούμε την αναμενόμενη αντισυμμετρία ως προς $\mu = 0$.

Παρουσία του πεδίου Zeeman h_z , οι διεπαφές (001) ημιαγωγού-συμβατικού υπεραγωγού παραβιάζουν την συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και επομένως ανήκουν στην κλάση D. Διδιάστατα συστήματα στη συγκεκριμένη κλάση είναι τοπολογικά μη-τετριμμένα και μπορούν να υποστηρίξουν καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας. Συγκεκριμένα, δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας εμφανίζονται σε στρόβιλους που δημιουργούνται λόγω της παρουσίας μαγνητικής ροής στη χειρική υπεραγωγίμη φάση [166]. Επιπλέον οι ίδιες καταστάσεις μπορούν να εμφανιστούν και στα άκρα οιονει-μονοδιάστατων τετοιων φάσεων [224, 225, 226]. Στα ίδια συμπεράσματα καταλήγουμε αν ακόμα και στην περίπτωση $h_z = 0$ θεωρώντας όμως ένα πεπερασμένο χημικό δυναμικό. Στη περίπτωση αυτή, το σύστημα διατηρεί τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και



Σχήμα 3.14: Διεπαφή(001) ημιαγωγού-συμβατικού υπεραγωγού. α) Το ρεύμα σπιν που εμφανίζεται στη διεπαφή παρουσία του πεδίου Zeeman $h_z \neq 0$ για $\mu = 0$, λόγω της επαγωγής της ελικοειδούς υπεραγωγίμης φάσης Δ_p^+ . Επειδή $\mu = 0$, το ρεύμα φορτίου είναι μηδέν και μόνο το ρεύμα σπιν έχει πεπερασμένη τιμή. Οι ελικοειδείς υπεραγωγίμες φάσεις Δ_p^+ [$\tau_1 \sin(k_y) - \tau_2 \sigma_3 \sin(k_x)$](μπλε) και Δ_p^- [$\tau_1 \sigma_3 \sin(k_y) - \tau_2 \sin(k_x)$](μαύρο) που επάγονται στη διεπαφή SM/SC συναρτήσει β) του πεδίου Zeeman h_z και γ) του χημικού δυναμικού μ αντίστοιχα. Η ελικότητα του επαγόμενου υπεραγωγίμου πεδίου δεν εξαρτάται από το πρόσημο των πεδίων h_z και μ αλλά από τις αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχίας.



Σχήμα 3.15: Τα ρεύματα φορτίου (αριστερά) και σπιν (δεξιά) που επάγονται στη διεπαφή (001) ημιαγωγού-συμβατικού υπεραγωγού για $h_z = \mu = 3$. Επειδή $h_z + \mu > 4t$ το επίπεδο Fermi του συστήματος τέμνει μόνο ενεργειακές ζώνες για ηλεκτρόνια με σπιν \downarrow , ενώ οι ενεργειακές ζώνες για σπιν \uparrow είναι κενές. Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση αυτή τα ρεύματα φορτίου και σπιν είναι ίσα όπως αναμένεται για τη χειρική *spinless* υπεραγωγίμη φάση που δημιουργείται στη διεπαφή λόγω ζεύξης των ηλεκτρονίων με σπιν \downarrow .

ανήκει στην κλάση DIII. Διδιάστατα συστήματα στην κλάση DIII επιδέχονται τοπολογικό αναλλοίωτο τύπου \mathbb{Z}_2 και συνεπώς μπορούν να εμφανίσουν καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας με τον τρόπο που περιγράφηκε παραπάνω. Συνεπώς, καταλήγουμε ότι σε διεπαφές ημιαγωγών-συμβατικών υπεραγωγών, δηλαδή σε ετεροδομές με υλικά που εμφανίζονται στη φύση, μπορούμε μέσω της εφαρμογής ενός πεδίου Zeeman ή μίας τάσης πύλης, να δημιουργήσουμε μη-τετριμμένες τοπολογικά ιδιοκαταστάσεις. Η προσέγγιση αυτή επιβεβαιώνεται και μάλιστα επεξηγείται καλύτερα στα πλαίσια του κανόνα επαγόμενων πεδίων.

Κεφάλαιο 4

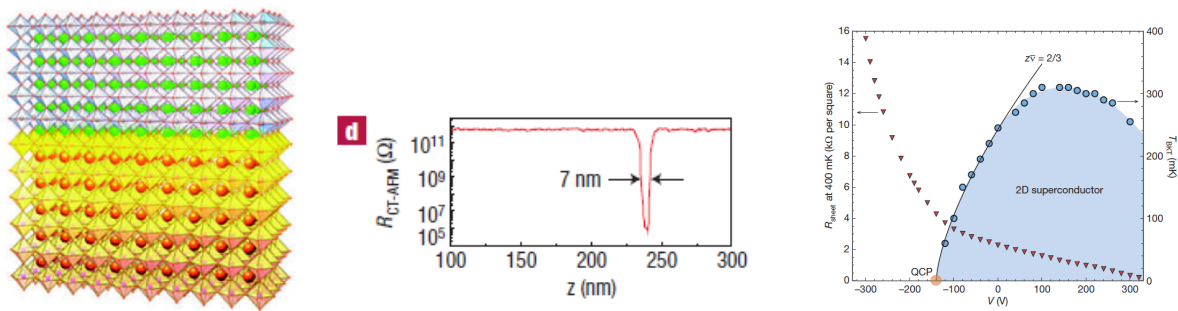
Ετεροδομές μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν

4.1 Εισαγωγή-Ετεροδομές οξειδίων των μετάλλων μετάβασης

Τα οξείδια μετάλλων μετάβασης αποτελούν μια από τις πιο ενδιαφέρουσες κλάσεις στερεών και επιδεικνύουν ιδιαίτερες ηλεκτρονικές ιδιότητες. Στα υλικά αυτά, οι ισχυρές ηλεκτρονιακές συσχετίσεις οδηγούν στην εμφάνιση φάσεων όπως τα κύματα πυκνότητας φορτίου [$K_{0.3}MoO_3$], σιδηρομαγνητισμό [CrO_2 , $La_{0.5}Sr_{0.5}MnO_3$], αντισιδηρομαγνητισμό [NiO , $LaCrO_3$, $LaTiO_3$], φερροηλεκτρισμό [$BaTiO_3$, $KNbO_3$], φερροελαστικότητα [$Gd_2(MoO_4)_3$] και υπεραγωγιμότητα [$YBa_2Cu_3O_{6.8}$, $La_{2-x}Sr_xCuO_4$].

Παρόλο που οι φάσεις αυτές και ο μηχανισμός δημιουργίας τους δεν έχουν κατανοηθεί πλήρως, τα τελευταία χρόνια η έρευνα έχει επικεντρωθεί στη μελέτη διεπαφών των οξειδίων μετάλλων μετάβασης που επιδεικνύουν τις ίδιες ή και ακόμα πιο ενδιαφέρουσες ηλεκτρονικές ιδιότητες. Η έρευνα στο συγκεκριμένο πεδίο, έλαβε μεγάλη ώθηση ύστερα από την ανακάλυψη της εμφάνισης αερίου ελεύθερων ηλεκτρονίων στις διεπαφές $LaTiO_3/SrTiO_3$ (LTO/STO) και $LaAlO_3/SrTiO_3$ (LAO/STO) [99]. Σημειώνουμε ότι τα οξείδια $LaAlO_3$ (LAO), $LaTiO_3$ (LTO) και $SrTiO_3$ (STO) εμφανίζουν μονωτική συμπεριφορά. Συγκεκριμένα, τα $LaAlO_3$ και $SrTiO_3$ θεωρούνται απλοί μονωτές ζώνης, ενώ το $LaTiO_3$ θεωρείται μονωτής Mott καθώς η μονωτική του φάση χαρακτηρίζεται επίσης από την εμφάνιση αντισιδηρομαγνητικής τάξης. Οι παραπάνω διεπαφές όμως εμφανίζουν μεταλλική [92, 93], μαγνητική [100] και υπεραγώγιμη [103, 104] συμπεριφορά διδιάστατου χαρακτήρα όπως επίσης και αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς τύπου Rashba [108]. Αν και η φύση της υπεραγωγιμότητας στις διεπαφές αυτές δεν έχει μέχρι σήμερα διευκρινιστεί, πειραματικά αποτελέσματα καταδεικνύουν την παρουσία μαγνητισμού και αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς στην υπεραγώγιμη φάση που ευνοούν τη δημιουργία triplet υπεραγώγιμων πεδίων με ιδιαίτερες τοπολογικές ιδιότητες, όπως η χειρική υπεραγωγιμότητα. Ακόμα πιο σημαντικό, είναι ότι οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των διεπαφών μπορούν να ρυθμιστούν μέσω της εφαρμογής τάσεων ή μαγνητικών πεδίων [109, 110], καθιστώντας έτσι τις συγκεκριμένες διεπαφές ιδανικές για εφαρμογές σε τρανζίστορ επίδρασης πεδίου [126, 127], αισθητήρες [128], νανοφωτοανιχνευτές [129], θερμοηλεκτρικές συσκευές [130, 131], κυψέλες ηλιακής ενέργειας [132, 133] και συσκευές σπιντρονικής [97]. Τα τελευταία χρόνια έχουν διερευνηθεί πολλές άλλες διεπαφές, όπως η $GdTiO_3/SrTiO_3$ [134], η $LaVO_3/SrTiO_3$ [135], η $LaVO_3/SrVO_3$ [136] και $LaGaO_3/SrTiO_3$ [137], οι οποίες παρουσιάζουν παρόμοιες ιδιότητες. Σημειώνουμε, ότι σχεδόν σε όλες τις παραπάνω ετεροδομές, το οξείδιο $SrTiO_3$ αποτελεί την κοινή συνιστώσα, καθώς αποτελεί ένα από τα καλύτερα υποστρώματα για την ανάπτυξη επιταξιακών δομών.

Παρά την εντατική έρευνα, μέχρι σήμερα δεν έχει διευκρινιστεί ο μηχανισμός που οδηγεί στην εμφάνιση του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων στις διεπαφές αυτές. Το βασικό σενάριο που έχει διατυπωθεί για το συγκεκριμένο φαινόμενο, είναι αυτό της ηλεκτρονιακής επανακατασκευής το



Σχήμα 4.1: α) Η αγώγιμη διεπαφή $LaAlO_3/SrTiO_3$ που δημιουργήθηκε από επιταξία $LaAlO_3$ πάνω σε στρώμα TiO_2 του οξειδίου $SrTiO_3$ ([96]). β) Το προφίλ ηλεκτρικής αντίστασης στη διεπαφή $LaAlO_3/SrTiO_3$ που καταδεικνύει ότι το αέριο ηλεκτρονίων παραμένει εντοπισμένο στη διεπαφή ([92]). γ) Η κρίσιμη θερμοκρασία T_{BKT} (δεξιός άξονας, μπλε σημεία) συναρτήσε της εφαρμοζόμενης ηλεκτρικής τάσης για την υπεραγώγιμη φάση που εμφανίζεται στη διεπαφή $LaAlO_3/SrTiO_3$. Στο ίδιο διάγραμμα παρουσιάζεται και η ηλεκτρική αντίσταση στη μεταλλική φάση της διεπαφής συναρτήσε της εφαρμοζόμενης τάσης, για θερμοκρασία 400μK (αριστερός άξονας, κόκκινα τρίγωνα). ([110])

οποίο βασίζεται στην ιδέα της πολικής καταστροφής (polar catastrophe). Σύμφωνα με την προσέγγιση αυτή, η εμφάνιση του αερίου ηλεκτρονίων αποδίδεται στην ασυνέχεια της πόλωσης στις διεπαφές LAO/STO μεταξύ των πολωμένων (001) ατομικών επιπέδων του LAO και των μη πολωμένων (001) επιπέδων του STO . Ο μηχανισμός αυτός εξηγεί ικανοποιητικά το κρίσιμο πάχος (4 μοναδιαίες κυψελίδες) για το LAO [138], πάνω από το οποίο εμφανίζεται η αγώγιμη διεπαφή. Όμως πολλές άλλες πειραματικές παρατηρήσεις, όπως η απουσία ηλεκτρικού πεδίου μέσα στο οξειδίο LAO κάτω από το κρίσιμο πάχος και η απουσία αγωγιμότητας σε δείγματα που αναπτύχθηκαν σε υψηλές μερικές πιέσεις οξυγόνου, δε μπορούν να εξηγηθούν βάσει του συγκεκριμένου μηχανισμού. Άλλοι μηχανισμοί όπως το ντοπάρισμα μέσω κενών οξυγόνου και η ανάμειξη κατιόντων στη διεπαφή, εξηγούν μερικές μόνο από τις πειραματικές παρατηρήσεις για τις συγκεκριμένες διεπαφές.

Παρακινούμενοι από την έρευνα στις διεπαφές οξειδίων μετάλλων μετάβασης, στην παρούσα ενότητα παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διερεύνηση διεπαφών (100) και (001) μεταξύ μονωτών Mott και πιο συγκεκριμένα μεταξύ συστημάτων που εμφανίζουν κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν. Σημειώνουμε ότι τα $LaTiO_3$ και $LaVO_3$ είναι μονωτές Mott που επιδεικνύουν αντισιδηρομαγνητική τάξη κάτω από την κρίσιμη θερμοκρασία Néel, η οποία και για τα δύο αυτά οξείδια είναι περίπου $T_N = 150K$. Όπως παρουσιάζουμε παρακάτω, οι διεπαφές μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν εμφανίζουν ηλεκτρονιακές φάσεις παρόμοιες με αυτές που παρατηρούνται στις διεπαφές των οξειδίων μετάλλων μετάβασης ($LAO/STO, LTO/STO$). Πιο συγκεκριμένα, δείχνουμε ότι στις διεπαφές SDW/CDW εμφανίζονται ημι-μεταλλικές ή μονωτικές σιδηρομαγνητικές φάσεις, ενώ η μετάβαση στις φάσεις αυτές, μπορεί να ρυθμιστεί μέσω της εφαρμογής ηλεκτρικών τάσεων ή πεδίων Zeeman. Επιπλέον όπως παρουσιάζουμε παρακάτω, στη διεπαφή των συγκεκριμένων φάσεων μπορεί να εμφανιστεί χειρική υπεραγωγιμότητα $p_x + ip_y$.

Οι παραπάνω ιδιότητες των ετεροδομών SDW/CDW προκύπτουν καθώς η συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν οδηγεί στην εμφάνιση διαφορετικών ενεργειακών χασμάτων για τις ενεργειακές ζώνες που αντιστοιχούν σε αντίθετες πολώσεις του σπιν. Έτσι, για τις ενεργειακές ζώνες που αντιστοιχούν σε μια εκ των δύο συνιστωσών του σπιν, το ενεργειακό χάσμα μπορεί να μηδενιστεί για σχετικά μικρές τιμές του χημικού δυναμικού ή ενός πεδίου Zeeman, οι οποίες δεν επηρεάζουν τις κυρίαρχες παραμέτρους τάξης. Λόγω αυτής της ανισότητας μεταξύ των ενεργειακών χασμάτων, η συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν έχει προταθεί για την επεξήγηση της κολοσσιαίας μαγνητοαντίστασης (CMR) η οποία έχει παρατηρηθεί σε μαγγανίτες [49, 50].

4.2 Διεπαφές (100) SDW/CDW

4.2.1 Μαθηματική περιγραφή των διεπαφών (100) SDW/CDW

Στην παρούσα ενότητα μελετάμε ετεροδομές μεταξύ διδιάστατων επιπέδων που εμφανίζουν τάξη κύματος πυκνότητας φορτίου (CDW) και σπιν (SDW). Συγκεκριμένα, μελετάμε ετεροδομές όπου το επίπεδο διεπαφής είναι κάθετο στον άξονα x ο οποίος αποτελεί και διάνυσμα βάσης του πλέγματος τετραγωνικής συμμετρίας, δηλαδή διεπαφές (100) SDW/CDW. Για τον σκοπό αυτό χρησιμοποιούμε το παρακάτω μοντέλο Hubbard μίας ενεργειακής ζώνης

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \sum_{s,s'} \varepsilon \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'} - 2 \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}_i + \sum_{i,j} V n_i n_j + \sum_{i,j} J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j. \quad (4.1)$$

Για λόγους απλότητας θεωρούμε $\varepsilon = (\mu \delta_{i,j} + t_{\langle i,j \rangle} + t'_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}) \delta_{s,s'} + s h_z$ για την ενεργειακή διασπορά της ζώνης, όπου μ το χημικό δυναμικό, $t_{\langle i,j \rangle}$ και $t'_{\langle\langle i,j \rangle\rangle}$ τα ολοκλήρωματα μεταφοράς μεταξύ κοντινότερων και αμέσως επόμενων κοντινότερων γειτόνων αντίστοιχα και \mathbf{h} το πεδίο Zeeman.

Για τις συγκεκριμένες ετεροδομές, η γενική Χαμιλτονιανή Εξ. 4.1 αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= H_R + H_L + H_c \\ H_{R(L)} &= -t_{R(L)} \sum_{\langle ij \rangle, s} (\psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s} + h.c.) + \mu_{R(L)} \sum_i n_i + 2 \sum_i \mathbf{h}_{R(L)} \cdot \mathbf{S}_i \\ &+ U_{R(L)} \sum_{i,s} n_{i,s} n_{i,s'} + V_{R(L)} \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + J_{R(L)} \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j \\ H_c &= -t_c \sum_{\langle lm \rangle, s} (\psi_{l,s}^\dagger \psi_{m,s} + h.c.) - t'_c \sum_{\langle\langle lm \rangle\rangle, s} (\psi_{l,s}^\dagger \psi_{m,s} + h.c.), \end{aligned} \quad (4.2)$$

όπου ο δείκτης $R(L)$ αναφέρεται στη δεξιά (αριστερή) περιοχή αντίστοιχα, ενώ θεωρήσαμε σημειακές αλληλεπιδράσεις, αλλά και αλληλεπιδράσεις μεταξύ κοντινότερων γειτονικών πλεγματικών θέσεων $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$. Τα δυναμικά U , V και J (αλληλεπίδραση εναλλαγής), αποκτούν σε κάθε περιοχή τιμές κατάλληλες για την εμφάνιση της αντίστοιχης CDW ή SDW φάσης. Οι δύο περιοχές επικοινωνούν μέσω των ακόλουθων όρων μεταπήδησης σε κοντινότερους $-t_c \sum_{\langle l,m \rangle, s} \psi_{l,s}^\dagger \psi_{m,s} + h.c.$ και αμέσως κοντινότερους $-t'_c \sum_{\langle\langle l,m \rangle\rangle, s} \psi_{l,s}^\dagger \psi_{m,s} + h.c.$ γείτονες, όπου $l(m)$ αντιστοιχούν στα συνοριακά πλεγματικά σημεία κάθε περιοχής, στη διεπαφή των δύο συστημάτων. Καθώς δε μας ενδιαφέρουν τα φαινόμενα που εμφανίζονται στο εξωτερικό σύνορο των περιοχών, θεωρούμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά τη διεύθυνση της διεπαφής και εφαρμόζουμε τον αντίστοιχο μετασχηματισμό Fourier εισάγοντας τους παρακάτω τελεστές $\psi_{i,k_y,s}^{(\dagger)} = \frac{1}{\sqrt{N_y}} \sum_{i_y} e^{(-)ik_y i_y} \psi_{i,s}^{(\dagger)}$ καταστροφής (δημιουργίας) για σωματίδια με σπιν s , στην πλεγματική θέση $i_x \equiv i$ ως προς την κάθετη στη διεπαφή διεύθυνση και ορμή k_y παράλληλα προς το επίπεδο της διεπαφής. Η Χαμιλτονιανή για κάθε περιοχή αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2} \sum_{ij, k_y, s} -t [\cos(k_y) \delta_{ij} + \delta_{j, i \pm 1}] \psi_{i, k_y, s}^\dagger \psi_{j, k_y, s} + h.c. \\ &+ \mu \sum_i n_{i,0} + 2 \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}_{i,0} + U \sum_{i, q_y} n_{i, \uparrow, q_y} n_{i, \downarrow, -q_y} \\ &+ V \sum_{\langle ij \rangle, q_y} n_{i, q_y} n_{j, -q_y} + V \cos(q_y) \sum_{i, q_y} n_{i, q_y} n_{i, -q_y} \\ &+ J \sum_{\langle ij \rangle, q_y} \mathbf{S}_{i, q_y} \cdot \mathbf{S}_{j, -q_y} + J \cos(q_y) \sum_{i, q_y} \mathbf{S}_{i, q_y} \cdot \mathbf{S}_{i, -q_y}, \end{aligned} \quad (4.3)$$

όπου $n_{i,\pm q_y} = \frac{1}{N_y} \sum_{k_y,s} \psi_{i,k_y\pm q_y,s}^\dagger \psi_{i,k_y,s}$ και $\mathbf{S}_{i,\pm q_y} = \frac{1}{2N_y} \sum_{k_y,s} \psi_{i,k_y\pm q_y,s}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \psi_{i,k_y,s'}$ οι τελεστές τοπικής πυκνότητας φορτίου και σπιν αντίστοιχα με διαμόρφωση q_y κατά τον άξονα y . Για ευκολία έχουμε παραλείψει τον δείκτη περιοχής. Η σύζευξη των δύο περιοχών επιτυγχάνεται μέσω των παρακάτω κινητικών όρων

$$H_c = \sum_{k_y,s} -[t_c + t'_c \cos(k_y)] \psi_{l,k_y,s}^\dagger \psi_{m,k_y,s} + h.c. . \quad (4.4)$$

Γραμμικοποιούμε την Εξ. 4.3 μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου. Καθώς θέλουμε να διερευνήσουμε διεπαφές CDW/SDW, θεωρούμε μόνο τα τοπικά μέσα πεδία φορτίου και σπιν με διαμόρφωση κατά $q_y = 0$ και $q_y = Q_y = \pi$, και η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -t \sum_{ij,k_y,s} [\cos(k_y) \delta_{ij} + \delta_{j,i\pm 1}] \psi_{i,k_y,s}^\dagger \psi_{j,k_y,s} \\ & + \sum_i \left[(\mu + U/2 + 2V) \langle n_i \rangle + \sum_j V \langle n_j \rangle \delta_{j,i\pm 1} \right] n_i \\ & + \sum_i \left[(\mathbf{h} - U/2 + \frac{J}{2}) \langle \mathbf{m}_i \rangle + \sum_j \frac{J}{4} \langle \mathbf{m}_j \rangle \delta_{j,i\pm 1} \right] \mathbf{m}_i \\ & + \sum_i \left[(U/2 - 2V) \langle n_{i,Q_y} \rangle + \sum_j V \langle n_{j,Q_y} \rangle \delta_{j,i\pm 1} \right] n_{i,Q_y} \\ & + \sum_i \left[(-U/2 - \frac{J}{2}) \langle \mathbf{m}_{i,Q_y} \rangle + \sum_j \frac{J}{4} \langle \mathbf{m}_{j,Q_y} \rangle \delta_{j,i\pm 1} \right] \mathbf{m}_{i,Q_y} , \end{aligned} \quad (4.5)$$

όπου οι όροι σε αγκύλες $\langle \rangle$ αντιστοιχούν σε θερμοδυναμικές μέσες τιμές των αντίστοιχων τελεστών, ενώ $\mathbf{S}_{i,(Q_y)} = \frac{1}{2} \mathbf{m}_{i,(Q_y)}$. Εισάγοντας τον 4-διάστατο σπίνορα $\Psi_{i,k_y}^\dagger = (\psi_{i,k_y,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,k_y,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,k_y+Q_y,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,k_y+Q_y,\downarrow}^\dagger)$ και τις μήτρες Pauli, ρ και σ , που δρουν στον χώρο των ορμών και του σπιν αντίστοιχα, η Εξ. 4.5 αποκτά την παρακάτω συμπαγή μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{ij,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger H_{ij}(k_y) \Psi_{j,k_y} \\ H_{ij}(k_y) = & (\xi_{ij} + \xi_c) \rho_z + N_i + M_i \sigma_z + N_{i,Q_y} \rho_x + M_{i,Q_y} \rho_x \sigma_z \end{aligned} \quad (4.6)$$

με

$$\begin{aligned} \xi_{ij} = & -t[\cos(k_y) \delta_{ij} + \delta_{j,i\pm 1}] \\ \xi_c = & -[t_c + t'_c \cos(k_y)] \delta_{i,m} \delta_{j,l} \\ N_i = & \mu + [(U/2 + 2V) \langle n_i \rangle + V \langle n_j \rangle \delta_{j,i\pm 1}] \\ M_i = & \mathbf{h} + [(-U/2 + \frac{J}{2}) \langle \mathbf{m}_i \rangle + \frac{J}{4} \langle \mathbf{m}_j \rangle \delta_{j,i\pm 1}] \\ N_{i,Q_y} = & [(U/2 - 2V) \langle n_{i,Q_y} \rangle + V \langle n_{j,Q_y} \rangle \delta_{j,i\pm 1}] \\ M_{i,Q_y} = & [(-U/2 - \frac{J}{2}) \langle \mathbf{m}_{i,Q_y} \rangle + \frac{J}{4} \langle \mathbf{m}_{j,Q_y} \rangle \delta_{j,i\pm 1}] , \end{aligned} \quad (4.7)$$

όπου ξ_{ij} οι κινητικοί όροι κάθε περιοχής και ξ_c οι αντίστοιχοι όροι σύζευξης, ενώ N_i, M_i τα τοπικά ομοιόμορφα κατά τον y -άξονα πεδία συζυγή της πυκνότητας φορτίου και σπιν αντίστοιχα και $N_{i,Q_y},$

M_{i,Q_y} τα αντίστοιχα πεδία με διαμόρφωση κατά $Q_y = \pi$. Διαγωνοποιούμε τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου λύνοντας την παρακάτω εξίσωση ιδιοτιμών

$$\sum_j H_{ij}(k_y)U_{j,n}(k_y) = E_n(k_y)U_{j,n}(k_y). \quad (4.8)$$

Με τις ιδιοενέργειες $E_n(k_y)$ και τις αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις $U_{j,n}(k_y)$ για κάθε ορμή k_y , υπολογίζουμε τις τοπικές πυκνότητες φορτίου και σπιν βάσει των παρακάτω εξισώσεων

$$\begin{aligned} n_i &= \frac{1}{N_y} \sum_{k_y} \langle \Psi_{i,k_y}^\dagger \Psi_{i,k_y} \rangle = \frac{1}{4N_y} \sum_{k_y,p} [U^\dagger(k_y)[\delta_{i,j}]U(k_y)]_{nn} n_F(E_n) \\ \mathbf{m}_i &= \frac{1}{N_y} \sum_{k_y} \langle \Psi_{i,k_y}^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_{i,k_y} \rangle = \frac{1}{4N_y} \sum_{k_y,p} [U^\dagger(k_y)[\boldsymbol{\sigma}\delta_{i,j}]U(k_y)]_{nn} n_F(E_n) \\ n_{i,Q_y} &= \frac{1}{N_y} \sum_{k_y} \langle \Psi_{i,k_y}^\dagger \rho_x \Psi_{i,k_y} \rangle = \frac{1}{4N_y} \sum_{k_y,p} [U^\dagger(k_y)[\rho_x\delta_{i,j}]U(k_y)]_{nn} n_F(E_n) \\ \mathbf{m}_{i,Q_y} &= \frac{1}{N_y} \sum_{k_y} \langle \Psi_{i,k_y}^\dagger \rho_x \boldsymbol{\sigma} \Psi_{i,k_y} \rangle = \frac{1}{4N_y} \sum_{k_y,p} [U^\dagger(k_y)[\rho_x\boldsymbol{\sigma}\delta_{i,j}]U(k_y)]_{nn} n_F(E_n), \end{aligned} \quad (4.9)$$

όπου έχουμε εισάγει τη συνάρτηση $n_F(x) = [1 + e^{\beta x}]^{-1}$ της κατανομής Fermi. Χρησιμοποιώντας τις Εξ. 4.6, 4.8 και 4.9 καθορίζουμε αυτοσυνεπώς τη διαμόρφωση της πυκνότητας φορτίου και σπιν του συστήματος. Τα μέσα πεδία πυκνότητας φορτίου και σπιν καθορίζονται από τις αντίστοιχες θερμοδυναμικές μέσες τιμές Εξ. 4.9, μέσω των παρακάτω εξισώσεων

$$\begin{aligned} N &= \frac{1}{N_x} \left(\frac{U}{2} + 4V \right) \sum_i n_i, \quad \mathbf{M} = \frac{1}{N_x} \left(-\frac{U}{2} + J \right) \sum_i \mathbf{m}_i \\ N_{\mathbf{Q}} &= \frac{1}{N_x} \left(\frac{U}{2} - 4V \right) \sum_i e^{iQ_x} n_{i,Q_y}, \quad \mathbf{M}_{\mathbf{Q}} = \frac{1}{N_x} \left(-\frac{U}{2} - J \right) \sum_i e^{iQ_x} \mathbf{m}_{i,Q_y}, \end{aligned} \quad (4.10)$$

όπου $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ και έχουμε εισάγει τα δυναμικά κάθε μέσου πεδίου όπως αυτά προκύπτουν από τα δυναμικά αλληλεπίδρασης των φορέων του συστήματος.

Για την ανάλυση των ιδιοτήτων των (100) SDW/CDW διεπαφών, υπολογίζουμε την τοπική πυκνότητα καταστάσεων (LDOS), που στον συγκεκριμένο φορμαλισμό με περιοδικές συνοριακές συνθήκες αντιστοιχεί σε μία γραμμή i του πλέγματος. Η LDOS υπολογίζεται βάσει των ιδιοενεργειών $E_n(k_y)$ και των ιδιοκαταστάσεων $U_{i,n}(k_y)$ της Χαμιλτονιανής Εξ. 4.6, μέσω της παρακάτω σχέσης

$$D_{i,s}(\epsilon) = \frac{1}{N_y\pi} \sum_{k_y,n} \left[\frac{1}{2} U_{i,n}(k_y)^\dagger [\rho_0(\sigma_0 + s\sigma_z)] U_{i,n}(k_y) \frac{\Gamma^2}{[\epsilon - E_n(k_y)]^2 + \Gamma^2} \right], \quad (4.11)$$

όπου $D_{i,s}$, η πυκνότητα καταστάσεων που αντιστοιχεί στην πλεγματική γραμμή i και πόλωση του σπιν s , ενώ η σταθερά $\Gamma = 0.01$ αντιστοιχεί στον χρόνο ζωής των οιονεί-σωματιδίων. Στην περίπτωση που θεωρούμε ανοικτές συνοριακές συνθήκες και προς τις δύο διευθύνσεις του συστήματος, η τοπική πυκνότητα καταστάσεων αναφέρεται σε κάθε πλεγματική θέση και προκύπτει από την παρακάτω σχέση

$$D_{i,s}(\epsilon) = \frac{1}{\pi} \sum_n \left[\frac{1}{2} U_{i,n}^\dagger [\rho_0(\sigma_0 + s\sigma_z)] U_{i,n} \frac{\Gamma^2}{[\epsilon - E_n]^2 + \Gamma^2} \right], \quad (4.12)$$

όπου οι ιδιοενέργειες E_n και οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις U προκύπτουν από την εξίσωση ιδιοτιμών $H_{i,j}U_{j,n} = E_n U_{j,n}$ για τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου που προκύπτει από την Εξ. 4.2.

Επιπλέον, για τις (100) SDW/CDW διεπαφές με περιοδικές συνοριακές συνθήκες μπορούμε να υπολογίσουμε την τοπική αγωγιμότητα συνεχούς ρεύματος (dc), $\sigma_{yy,q_x}(i, q_y)$, στη παράλληλη προς το επίπεδο της διεπαφής διεύθυνση. Ο ταυιστής αγωγιμότητας στον χώρο θέσεων ορίζεται από την παρακάτω σχέση

$$j_\mu(\mathbf{i}) = \sum_j \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{i}, \mathbf{j}) E_\nu(\mathbf{j}). \quad (4.13)$$

Για συστήματα με μεταφορική συμμετρία κατά τον άξονα y προκύπτει η ισοδύναμη σχέση

$$j_\mu(i, q_y) = \sum_j \sigma_{\mu\nu}(i, j, q_y) E_\nu(j, q_y). \quad (4.14)$$

Θεωρώντας το ακόλουθο ανάπτυγμα $E_\nu(j, q_y) = \sum_{q_x} e^{ijq_x} E_\nu(q_x, q_y)$ για το ηλεκτρικό πεδίο, μπορούμε να ορίσουμε την τοπική dc αγωγιμότητα

$$j_\mu(i, q_y) = \frac{1}{N_x} \sum_{q_x} E_\nu(q_x, q_y) \sum_j \sigma_{\mu\nu}(i, j, q_y) e^{ijq_x} = \sum_{q_x} E_\nu(q_x, q_y) \sigma_{\mu\nu, q_x}(i, q_y), \quad (4.15)$$

όπου N_x οι πλεγματικές θέσεις κατά τον άξονα x . Στην προσέγγιση γραμμικής απόκρισης, ο ταυιστής παραμαγνητικής αγωγιμότητας προκύπτει από τη συνάρτηση Matsubara των συσχετίσεων ρεύματος-ρεύματος ως εξής,

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu, q_x}(i, q_y) &= \frac{1}{N_x} \sum_j \sigma_{\mu\nu}(i, j, q_y) e^{ijq_x} = \sum_j \Pi_{\mu\nu}(i, q_y, iq_n) e^{ijq_x} \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_j e^{ijq_x} \langle j^\mu(i, q_y, iq_n) j^\nu(j, -q_y, -iq_n) \rangle. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Για τον σκοπό αυτό πρέπει να ορίσουμε τον τελεστή ρεύματος κατά τον y άξονα παράλληλο στο επίπεδο της διεπαφής. Ο τελεστής ρεύματος ορίζεται με τη βοήθεια του αντίστοιχου τοπικού τελεστή πυκνότητας, ο οποίος στον χώρο θέσεων-ορμής, $x - k_y$, αποκτά την παρακάτω μορφή $\rho_{i, q_y} = \sum_{k_y} \Psi_{i, k_y}^\dagger \Psi_{i, k_y + q_y}$ και της αντίστοιχης εξίσωσης συνέχειας $\partial_t \rho_{i, q_y} = \frac{i}{\hbar} [\sum_{k_y} H_{ij, k_y}, \rho_{i, q_y}]$.

Στην προσέγγιση $q_y \rightarrow 0$, ο αντίστοιχος τελεστής ρεύματος αποκτά τη μορφή

$$j(i, q_y) = \sum_{k_y} \Psi_{i, k_y}^\dagger \frac{\partial H_{k_y}}{\partial k_y} \Psi_{i, k_y + q_y} = t \sum_{k_y} \Psi_{i, k_y}^\dagger \sin(k_y) \Psi_{i, k_y + q_y}, \quad (4.17)$$

όπου στο τελευταίο τμήμα της εξίσωσης θεωρήσαμε ότι η Χαμιλτονιανή περιλαμβάνει μόνο όρους μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων. Η αντίστοιχη τοπική αγωγιμότητα προκύπτει χρησιμοποιώντας τις συσχετίσεις ρεύματος-ρεύματος, οι οποίες και ορίζονται βάσει της σχέσης

$$\Pi_{yy}(i, q_y, iq_n) = -\frac{1}{\beta} \langle j_y(i, q_y, iq_n) j_y(j, -q_y, -iq_n) \rangle \quad (4.18)$$

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα Wick για συστήματα μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων, προκύπτει η παρακάτω έκφραση

$$\Pi_{yy}(i, q_y, iq_n) = -t^2 \sum_{k_y, l'} \sum_{i\omega_n} [M_A]_{i, l'} [M_B]_{j, l'} G(k_y, l', i\omega_n) G(k_y + q_y, l, i\omega_n + iq_n), \quad (4.19)$$

όπου $[M_A]_{i, l'} = U_{l, i}(k_y) \sin(k_y) U_{i, l'}(k_y)^\dagger$, $[M_B]_{j, l'} = U_{l', j}(k_y) \sin(k_y + q_y) U_{j, l}(k_y)^\dagger$. Μέσω αναλυτικής συνέχειας $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ προκύπτει

$$\Re \Pi_{yy}(i, q_y, \omega) = -t^2 \sum_{k_y, l'} [M_A]_{i, l'} [M_B]_{j, l'} \frac{n_F(E_{k_y, l}) - n_F(E_{k_y + q_y, l'})}{\omega - E_{k_y, l} + E_{k_y + q_y, l'}}$$

$$\Im \Pi_{yy}(i, q_y, \omega) = -\pi \sum_{k_y, l'} [M_A]_{i, l'} [M_B]_{j, l'} (n_F(E_{k_y, l}) - n_F(E_{k_y + q_y, l'})) \delta(\omega - E_{k_y, l} + E_{k_y + q_y, l'}).$$

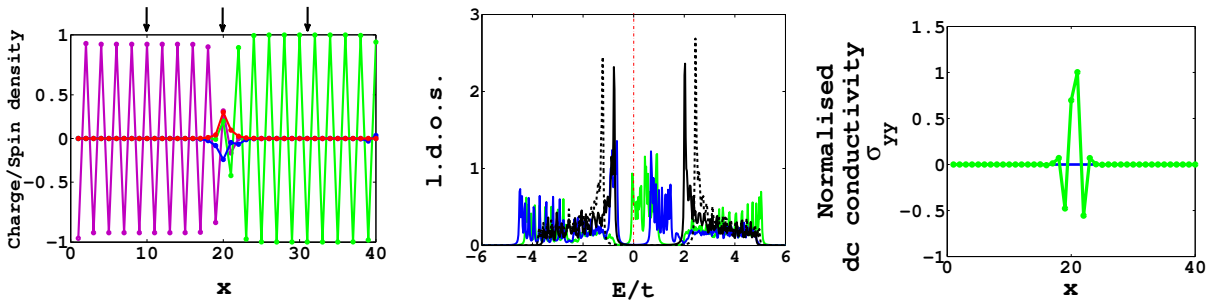
Όπως παρουσιάζεται και στο Υπόμνημα A, η dc αγωγιμότητα διασποράς προκύπτει από το μιγαδικό κομμάτι του ταυστή συσχέτισης ρευμάτων. Επομένως καταλήγουμε στην παρακάτω εξίσωση για την αγωγιμότητα $q_y = 0$

$$\sigma_{yy, q_x} = \sum_j e^{ijq_x} \beta \sum_{k_y, l} [M_A]_{i, l} [M_B]_{j, l} n_F(E_{k_y, l}) [1 - n_F(E_{k_y, l})], \quad (4.20)$$

ενώ συγκεκριμένα για την αγωγιμότητα με $q_x = 0$ προκύπτει

$$\sigma_{yy} = \beta \sum_{j, k_y, l} [M_A]_{i, l} [M_B]_{j, l} n_F(E_{k_y, l}) [1 - n_F(E_{k_y, l})]. \quad (4.21)$$

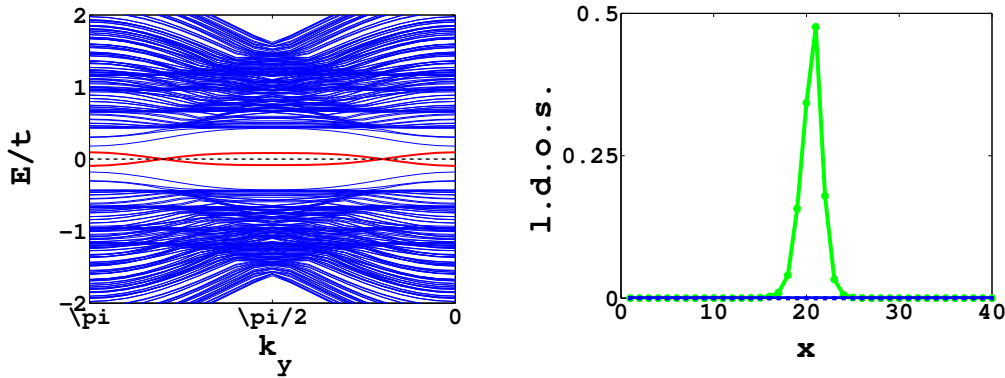
4.2.2 Επίλυση του συστήματος διεπαφών (100) SDW/CDW



Σχήμα 4.2: α) Διεπαφή (100) SDW/CDW μήκους $L = 40$ και $U = 2$ στην περιοχή SDW (αριστερά), $V = 0.6$ στην περιοχή CDW (δεξιά) και χημικό δυναμικό $\mu = 0.3$. Κάθε περιοχή έχει μήκος $L_{SDW} = L_{CDW} = 20$ και επομένως η διεπαφή βρίσκεται μεταξύ των πλεγματικών γραμμών $x = 20$ και $x = 21$. Οι δύο περιοχές συζεύγονται μέσω του όρου μεταπήδησης $t_m = 1$. Ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής $n_i - 1$ (μπλε γραμμή) και μαγνήτιση m_i^z (κόκκινη γραμμή) επάγονται στην περιοχή όπου τα κύματα πυκνότητας φορτίου n_{i, Q_y} (πράσινη γραμμή) και σπιν m_{i, Q_y}^z (μωβ γραμμή) συνυπάρχουν. β) Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων ($LDOS$), για τις πλεγματικές γραμμές $x = 10$ (εσωτερικό περιοχής SDW, μαύρη γραμμή), $x = 30$ (εσωτερικό CDW περιοχής, μαύρη διακεκομμένη γραμμή) και $x = 20$ (διεπαφή στην πλευρά SDW). Στο εσωτερικό κάθε περιοχής η $LDOS$ για κάθε πόλωση του σπιν ταυτίζεται, ενώ αντίστοιχα στη διεπαφή διαχωρίζεται, καθώς για διεγέρσεις με σπιν \uparrow (πράσινη γραμμή) εμφανίζεται επιφάνεια Fermi, ενώ αντίθετα για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow (μπλε γραμμή) παραμένει ένα ενεργειακό χάσμα. γ) Η dc αγωγιμότητα σ_{yy} κατά τη διεύθυνση της διεπαφής κανονικοποιημένη στη μέγιστη τιμή της. Παρατηρούμε ότι η αγωγιμότητα είναι πεπερασμένη μόνο για φορείς με σπιν \uparrow και μόνο στην περιοχή της διεπαφής.

Εν συνεχεία παρουσιάζουμε ενδεικτικά αποτελέσματα για διεπαφές (100) SDW/CDW σε συστήματα με ολικό μήκος $L = 40$. Η διεπαφή διαμορφώνεται μεταξύ της γραμμής $x = 20$ της SDW

περιοχής και της γραμμής $x = 21$ στην CDW περιοχή. Η φάση SDW σταθεροποιείται μέσω ενός απωστικού δυναμικού U , ενώ η φάση CDW μέσω ενός απωστικού δυναμικού V μεταξύ κοντινότερων γειτονικών πλεγματικών θέσεων. Στην αριθμητική αυτοσυνεπή διαδικασία αφαιρέσαμε τις σταθερές $\mu_S = U$ και $\mu_C = 4V$ για την SDW και CDW περιοχή αντίστοιχα, ώστε το χημικό δυναμικό $\mu = 0$ να αντιστοιχεί σε πυκνότητα φορέων $n = 1$ ή ισοδύναμα σε ημικατελιημένες ενεργειακές ζώνες. Στην προσέγγιση αυτή το επίπεδο Fermi των δύο περιοχών ταυτίζεται. Σημειώνουμε όμως ότι στη γραμμή $x = 21$ της διεπαφής στην CDW περιοχή, εμφανίζεται ένας όρος ενεργού χημικού δυναμικού μεγέθους $3V$, λόγω των αλληλεπιδράσεων μεταξύ κοντινότερων γειτόνων. Συγκεκριμένα στο Σχ. 4.2, παρουσιάζουμε τυπικά αποτελέσματα για διεπαφή (100) SDW/CDW με $U = 2$ για την SDW περιοχή, $V = 0.6$ για την περιοχή CDW και ένα ομοιόμορφο χημικό δυναμικό $\mu = 0.3$. Σύμφωνα με την Εξ. 4.10, τα συγκεκριμένα δυναμικά αλληλεπίδρασης αντιστοιχούν στα δυναμικά $V_M = V_{M_Q} = -V_N = -V_{N_Q} = -1$ για την SDW περιοχή και στα $V_M = V_{M_Q} = 0$, $V_N = -V_{N_Q} = 1.2$ για την CDW περιοχή. Παρατηρούμε ότι οι τοπικές πυκνότητες (συσχετίσεις) φορτίου n_{i,Q_y} και σπιν m_{i,Q_y}^z , συνυπάρχουν στις γειτονικές της διεπαφής πλεγματικές γραμμές ($x = 18 - 23$) όπου εμφανίζεται επίσης ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής. Στην ίδια περιοχή επάγεται επίσης μαγνήτιση m^z , παρόλο που στο σύστημα δεν εφαρμόζεται εξωτερικά το συζυγές πεδίο Zeeman. Η επαγόμενη στη διεπαφή μαγνήτιση, αποτελεί άμηση συνέπεια του κανόνα των επαγόμενων πεδίων, σύμφωνα με τον οποίο ο συνδυασμός κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν με ίδιο κυματόνισμα διαμόρφωσης και παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής, ισοδυναμεί με το αντίστοιχο μαγνητικό πεδίο. Σημειώνουμε, ότι βάσει της σύζευξης των συγκεκριμένων πεδίων έχειδειχθεί ότι κύματα πυκνότητας σπιν μπορούν να επαχθούν με την εφαρμογή ενός πεδίου Zeeman σε ένα κύμα πυκνότητας φορτίου [139]. Επομένως, για $\mu \neq 0$, στην παραπάνω διεπαφή (100) SDW/CDW και συγκεκριμένα στην περιοχή συνύπαρξης των κυμάτων πυκνότητας, επάγεται ένα μαγνητικό πεδίο που αλληλεπιδρά μόνο με το σπιν των ηλεκτρονίων.



Σχήμα 4.3: Για την διεπαφή του Σχ. 4.2: α) Οι ενεργειακές υποζώνες του συστήματος στην ανηγμένη ζώνη Brillouin $[-\pi - 0)$, για τις παράλληλες προς τη διεύθυνση της διεπαφής συνιστώσες της ορμής k_y . Το ενεργειακό φάσμα είναι συμμετρικό ως προς το επίπεδο Fermi λόγω της επίλυσης του συστήματος στον χώρο Nambu με εγγενή συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής. Όλες οι ενεργειακές υποζώνες εμφανίζουν ενεργειακό χάσμα εκτός από μια που σημειώνεται με κόκκινο χρώμα, η οποία και βρίσκεται εξ' ολοκλήρου εντός του ενεργειακού χάσματος του συστήματος. β) Η πυκνότητα σωματιδίων, $\sum_n |\Psi_n|^2$, για τις ιδιοκαταστάσεις της ζώνης χαμηλής ενέργειας. Οι συγκεκριμένες διεγέρσεις αντιστοιχούν μόνο σε πόλωση του σπιν \downarrow (πράσινη γραμμή) και βρίσκονται εντοπισμένες στη διεπαφή, λόγω του ενεργειακού χάσματος στο εσωτερικό των δύο περιοχών.

Σημειώνουμε, ότι στις συγκεκριμένες ετεροδομές τα κυματανύσματα κατά την κάθετη προς το επίπεδο της διεπαφής διεύθυνση x δεν είναι καλά ορισμένα. Συνεπώς, η συγκεκριμένη περίπτωση διαφοροποιείται σε σχέση με τη συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας διαμόρφωσης κατά Q σε ομογενή συστήματα και η επαγόμενη μαγνήτιση που παρουσιάζεται στο Σχ. 4.2 ερμηνεύεται πιο σωστά με βάση τη συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας διαμορφωμένων κατά $q_y = \pi$ σε συγκεκριμένες πλεγματικές γραμμές i_x κοντά στη διεπαφή. Είναι ο συνδυασμός των πεδίων N_{i,q_y}, M_{i,q_y} και μ που επάγει ένα τοπικό ομοιόμορφο κατά τον y άξονα πεδίο Zeeman.

Βάσει των παραπάνω συλλογισμών και για να αποκτήσουμε καλύτερη φυσική εικόνα της διεπαφής (100) SDW/CDW, θεωρούμε την παρακάτω Χαμιλτονιανή που αναφέρεται στη σύζευξη δύο μονοδιάστατων συστημάτων με τις αντίστοιχες καταστάσεις τάξης

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{r,k} \Psi_{r,k}^\dagger H_{rr'}(k) \Psi_{r',k}$$

$$H_{rr'}(k) = [t_{rr} \cos(k) + t_{rr'}] \rho_z + N_r + M_r \sigma_z + N_{r,Q} \rho_x + M_{r,Q} \rho_x \sigma_z. \quad (4.22)$$

Η παραπάνω Χαμιλτονιανή είναι απλά η Εξ. 4.6, όπου ο δείκτης $r = 1, 2$ περιορίζεται στις δύο πλεγματικές γραμμές που συντελούν τη διεπαφή, ενώ έχουμε παραλείψει τον δείκτη y από τις ορμές. Δυστυχώς οι ιδιοενέργειες της παραπάνω Χαμιλτονιανής δεν έχουν εν γένει αναλυτική μορφή. Στην ειδική περίπτωση όμως όπου τα ομοιόμορφα πεδία είναι ίσα και στα δύο συστήματα, $M_r \rightarrow M$ και $N_r \rightarrow N$, όπως ισχύει με καλή προσέγγιση για τα αποτελέσματα του συνολικού συστήματος στη διεπαφή, προκύπτει το παρακάτω ενεργειακό φάσμα

$$E_{s,p,l}(k) = sM + N + p \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{2t^2 \cos^2 k + \sum_r (N_{r,Q} + sM_{r,Q})^2 + 2t_m^2 + l\sqrt{B_s}}$$

$$B_s = ([N_{1,Q} - M_{1,Q}] + s[N_{2,Q} - M_{2,Q}])^2 ([N_{1,Q} + M_{1,Q}] + s[N_{2,Q} + M_{2,Q}])^2$$

$$+ 4(4t^2 \cos^2 k + (\sum_r N_{r,Q} + s \sum_r M_{r,Q})^2) t_m^2,$$

όπου ο δείκτης $s = (+, -)$ αναφέρεται στην πόλωση του σπιν (\uparrow, \downarrow), ενώ οι δείκτες $p = (+, -)$ και $l = (+, -)$ στις ορμές $(k, k + Q)$ και τις πλεγματικές γραμμές $(1, 2)$ αντίστοιχα, με την τελευταία αντιστοίχιση να είναι ακριβής μόνο όταν τα κύματα πυκνότητας και η σύζευξη μεταξύ των γραμμών μηδενίζονται. Σημειώνουμε ότι τα πεδία M και N περιλαμβάνουν και τα εξωτερικώς εφαρμοζόμενα πεδία Zeeman και το χημικό δυναμικό (τάσης πύλης).

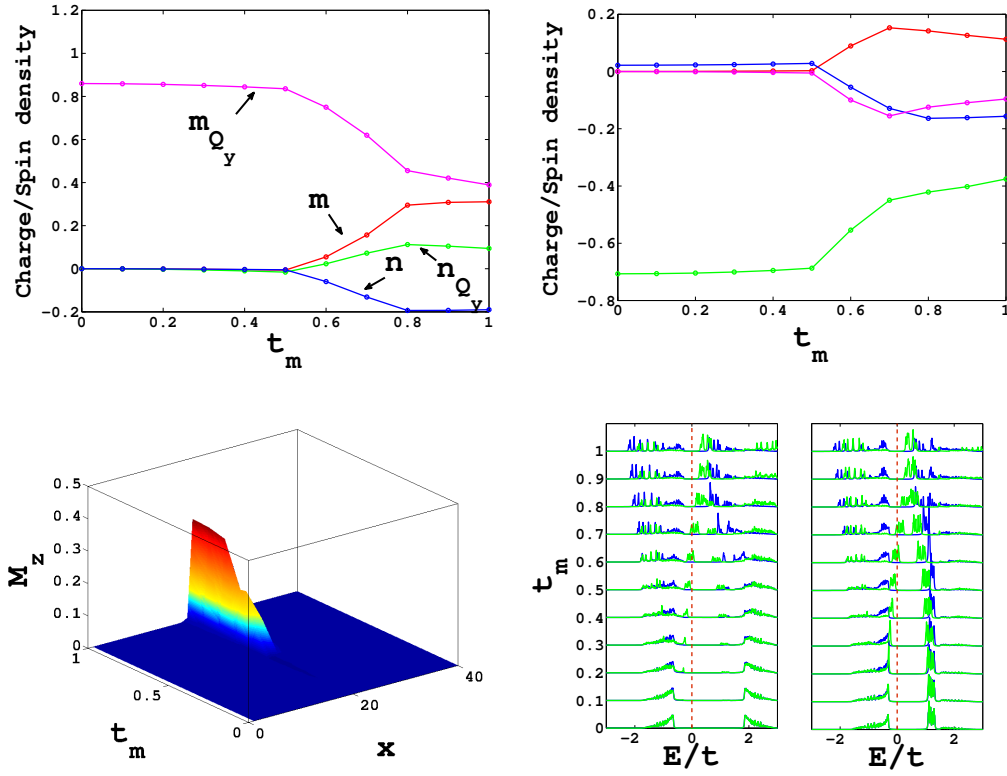
Αρχικά εξετάζουμε τη διεπαφή SDW/CDW με $M = N = 0$, $M_{2,Q} = 0$, $N_{1,Q} = 0$ και $N_{2,Q} = M_{1,Q}$. Στην ειδική αυτή περίπτωση οι ιδιοενέργειες του συστήματος προκύπτουν από την παρακάτω σχέση

$$E_{\uparrow,p,l}(k) = p \sqrt{(t \cos k + lt_m)^2 + M_{1,Q}^2} \quad E_{\downarrow,p,l}(k) = lt_m + p \sqrt{t^2 \cos^2 k + M_{1,Q}^2}. \quad (4.23)$$

Παρατηρούμε ότι ο εκφυλισμός των ενεργειακών ζωνών για τις δύο πολώσεις του σπιν αίρεται μέσω του όρου σύζευξης t_m . Στη συγκεκριμένη περίπτωση, ο όρος σύζευξης t_m δρα ως χημικό δυναμικό για τα οιονεί-σωματίδια με σπιν \downarrow . Αντίθετα, για τα οιονεί-σωματίδια με σπιν \uparrow ο ίδιος όρος επιδρά μόνο στον κινητικό όρο της μεταλλικής φάσης. Συνεπώς, το ενεργειακό χάσμα για τα οιονεί-σωματίδια με σπιν \downarrow μειώνεται $\Delta E = 2(M_{1,Q} - t_m)$, ενώ για τα οιονεί-σωματίδια με σπιν \uparrow παραμένει αμετάβλητο, $\Delta E = 2M_{1,Q}$. Σημειώνουμε ότι παρόλο που ο όρος σύζευξης t_m δρα ως χημικό δυναμικό, δεν επάγει ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής στο σύστημα. Αυτό προκύπτει από τις ακόλουθες σχέσεις $E_{\uparrow,+l}(k) = -E_{\uparrow,-l}(k)$ και $E_{\downarrow,p,l}(k) = -E_{\downarrow,p',l}(k)$ για τις ιδιοενέργειες του συστήματος. Επομένως το φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος παραμένει συμμετρικό ως προς το επίπεδο Fermi.

Εν συνεχεία, θεωρούμε την ειδική περίπτωση όπου τα συζυγή προς τα κύματα πυκνότητας πεδία λαμβάνουν ίδιες τιμές σε όλο το σύστημα $M_{2,Q} = M_{1,Q} = M_Q$, $N_{1,Q} = N_{2,Q} = N_Q$. Η περίπτωση αυτή αποτελεί καλή προσέγγιση για την περίπτωση που εξετάστηκε για το συνολικό σύστημα και παρουσιάζεται στο Σχ. 4.2. Στην περίπτωση αυτή το ενεργειακό φάσμα του συστήματος έχει την παρακάτω μορφή

$$E_{s,p,l}(k) = sM + N + lt_m + p \sqrt{t^2 \cos^2(k) + (N_Q + sM_Q)^2}, \quad (4.24)$$



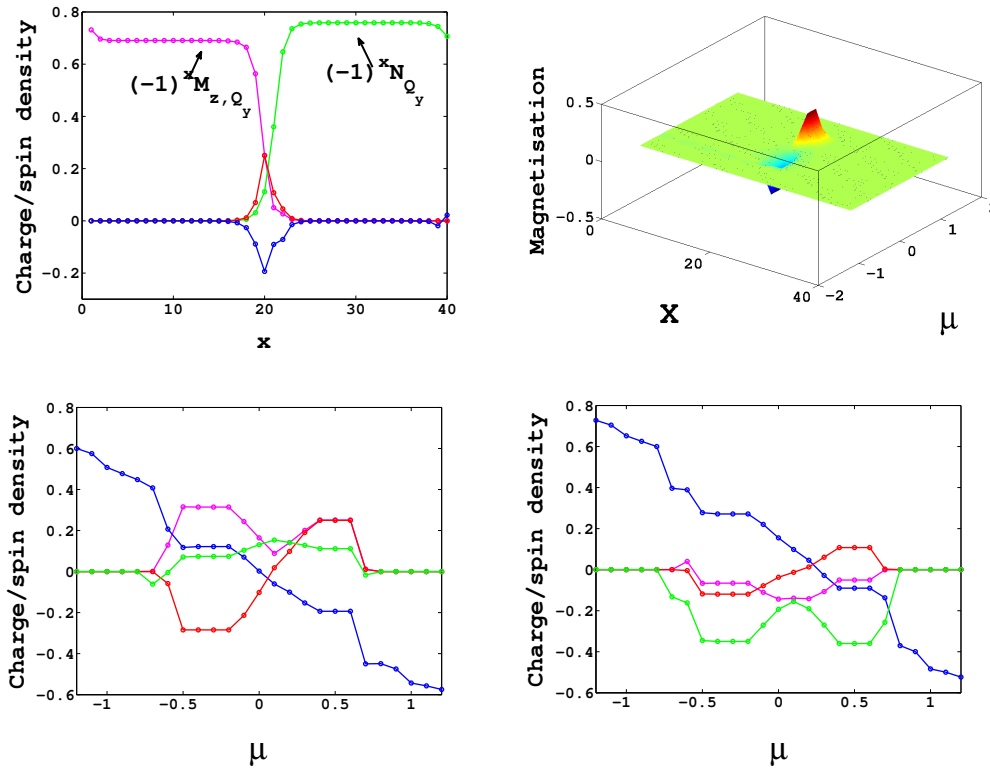
Σχήμα 4.4: Διεπαφή SDW ($U = 2$) και CDW ($V = 0.6$) για σύστημα 40×20 με χημικό δυναμικό $\mu = 0.6$ και για τις δύο περιοχές. Οι τοπικές πυκνότητες n_{i,Q_y} (πράσινη γραμμή), m_{i,Q_y}^z (μωβ γραμμή), n_i (μπλε γραμμή) και m_i^z (κόκκινη γραμμή), στις γραμμές της διεπαφής α) $x = 20$ (περιοχή SDW) και β) $x = 21$ (περιοχή CDW), συναρτήσει της σύζευξης t_m μεταξύ των δύο περιοχών. Παρατηρούμε ότι για $t_m > 0.5$, οι συσχετίσεις των κυμάτων πυκνότητας αναμειγνύονται και στις δύο πλευρές της διεπαφής, ενώ ταυτόχρονα επάγεται ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής και μαγνήτιση. Από το σχήμα β), παρατηρούμε ότι παρόλο που η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής εμφανίζεται στην περιοχή CDW ακόμα και για $t_m < 0.5$, η μαγνήτιση m_z επάγεται μόνο για $t_m > 0.5$ οπότε και εμφανίζονται και οι αντισιδηρομαγνητικές συσχετίσεις λόγω του φαινομένου εγγύτητας, επιδεικνύοντας έτσι ξεκάθαρα την ισχύ του κανόνα των επαγόμενων πεδίων. γ) Το προφίλ της μαγνήτισης m_i^z καθώς αυξάνεται ο όρος σύζευξης t_m . Παρατηρούμε ότι η επαγόμενη μαγνήτιση παραμένει πάντα εντοπισμένη στη γειτονική περιοχή της διεπαφής. δ) Η LDOS στις πλεγματικές γραμμές $x = 20$ (αριστερά) και $x = 21$ (δεξιά) καθώς αυξάνεται ο όρος σύζευξης t_m (σημειώνεται στον άξονα y του σχήματος). Για $t_m = 0.5 - 0.7$, πεπερασμένη πυκνότητα καταστάσεων εμφανίζεται στο επίπεδο Fermi μόνο για διεγέρσεις με σπιν \downarrow (πρασινό χρώμα), καταδεικνύοντας έτσι την εμφάνιση της ημι-μεταλλικής φάσης.

ενώ ο όρος σύζευξης t_m δρα ως χημικό δυναμικό και για τις δύο πόλωσεις του σπιν, αίροντας έτσι των εκφυλισμό των ενεργειακών ζωνών του μη-συζευγμένου συστήματος. Το σημαντικό όμως είναι ότι οι ενεργειακές ζώνες για κάθε πόλωση του σπιν διαχωρίζονται ακόμα και για $M = 0$ λόγω της συνύπαρξης των N_Q και M_Q . Συγκεκριμένα από την Εξ. 4.24 παρατηρούμε ότι για $N_Q \sim M_Q$ το ενεργειακό χάσμα για τα ιονεί-σωματίδια με σπιν \uparrow είναι πολύ μικρό. Τα χαμηλής ενέργειας αυτά σωματίδια παγιδεύονται στη διεπαφή, λόγω του ενεργειακού χάσματος στο εσωτερικό των περιοχών του πλήρους συστήματος. Αντίθετα για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow , το ενεργειακό χάσμα αυξάνεται σε σχέση ακόμα και με το ενεργειακό χάσμα των ομοιογενών περιοχών. Επομένως οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις διαδίδονται μακριά από τη διεπαφή στο εσωτερικό των ομοιογενών περιοχών. Ο παραπάνω συλλογισμός είναι μια εναλλακτική προσέγγιση για την εμφάνιση της εντοπισμένης μαγνήτισης στις διεπαφές (100) SDW/CDW (Σχ. 4.2).

Ο διαχωρισμός των ενεργειακών ζωνών για κάθε πόλωση του σπιν ευθύνεται για πολλές ενδιαφέρουσες ιδιότητες των διεπαφών SDW/CDW. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, όπου $N_Q = M_Q$, το ενεργειακό χάσμα για τις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις με σπιν \downarrow μηδενίζεται ή ισοδύναμα εμφανίζεται μια ημι-μεταλλική φάση. Η συγκεκριμένη κατάσταση μπορεί να εμφανιστεί και για $N_Q \neq M_Q$

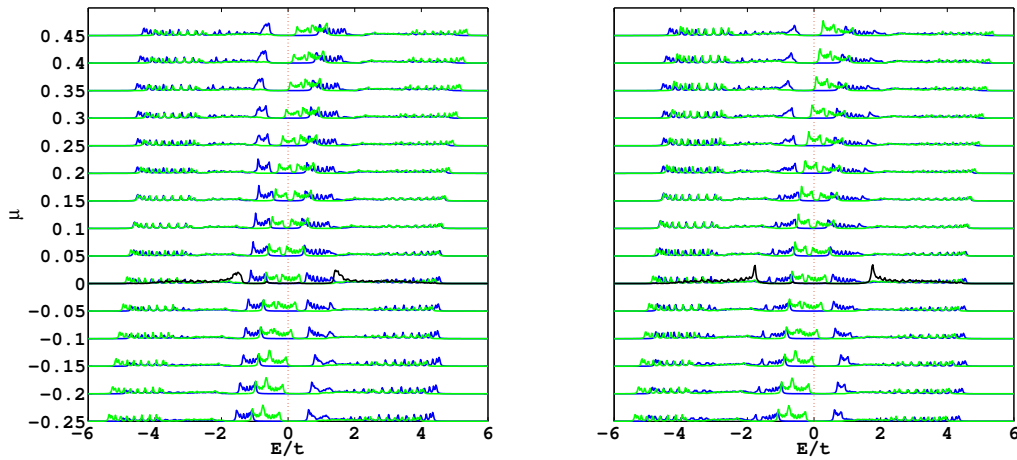
μέσω ενός ενεργού χημικού δυναμικού $\mu_{s,l}$ οδηγώτας στην περίπτωση αυτή σε μια σιδηρομαγνητική ημι-μεταλλική φάση. Με αυτόν τον τρόπο, οι ιδιότητες του συστήματος μπορούν να ρυθμιστούν μέσω της εφαρμογής ενός χημικού δυναμικού ή ενός πεδίου Zeeman. Βάσει της συγκεκριμένης παρατήρησης η συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας SDW και CDW σε ομοιογενή συστήματα έχει προταθεί για το φαινόμενο της κολοσσιαίας μαγνητοαντίστασης (CMR) [49, 50]. Παρακάτω δείχνουμε ότι το ίδιο φαινόμενο μπορεί να παρατηρηθεί και σε διεπαφές SDW/CDW.

Επιπλέον, για σημαντική σύζευξη t_m μεταξύ των δύο περιοχών μόνο μία ενεργειακή ζώνη τέμνει το επίπεδο Fermi για μεγάλο εύρος των πεδίων M και N ή ισοδύναμα των εξωτερικώς εφαρμοζόμενων πεδίων μ (χημικό δυναμικό ή τάση πύλης) και h_z (μαγνητικό πεδίο Zeeman). Όταν επιπρόσθετα ο όρος t_m γίνεται συγκρίσιμος με το ολοκλήρωμα μεταφοράς σε κοντινότερους γείτονες t το οποίο και καθορίζει το εύρος των ενεργειακών ζωνών των ομοιογενών συστημάτων, η ενεργειακή ζώνη διεπαφής διαχωρίζεται από το υπόλοιπο φάσμα του συστήματος (Σχ. 4.3). Με τον τρόπο αυτό προκύπτει ένα μονοδιάστατο σύστημα φορέων με συγκεκριμένη πόλωση του σπιν (που ισοδυναμεί με σύστημα φορέων χωρίς σπιν), το οποίο μάλιστα προστατεύεται από το μητρικό διδιάστατο σύστημα μέσω ενός ενεργειακού χάσματος. Σημειώνουμε ότι μονοδιάστατα μεταλλικά συστήματα φερμιονίων χωρίς σπιν είναι ιδανικά για την εμφάνιση τοπολογικής υπεραγωγιμότητας και δέσμιων καταστάσεων Majorana. Αυτή είναι ακόμα μία σημαντική ιδιότητα των διεπαφών (100) SDW/CDW .



Σχήμα 4.5: Διεπαφή (100) SDW/CDW με $U = 2$ (SDW περιοχή) και $V = 0.6$ (CDW περιοχή). Η σύζευξη μεταξύ των δύο περιοχών επιτυγχάνεται μέσω ενός όρου μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτονικών πλεγματοικών σημείων $t_m = 1$. α) Οι τοπικές πυκνότητες (συσχετίσεις) $|n_{i,Q_y}|$ (πράσινη γραμμή), $|m_{i,Q_y}^z|$ (μωβ γραμμή), n_i (μπλε γραμμή) και m_i^z (κόκκινη γραμμή), για $\mu = 0.6$. Η επαγόμενη μαγνήτιση m^z και η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής εντοπίζονται στη διεπαφή. β) Από το προφίλ της επαγόμενης μαγνήτισης συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ , παρατηρούμε ότι παραμένει εντοπισμένη στη διεπαφή για κάθε τιμή του μ . Οι τοπικές πυκνότητες φορτίου και σπιν για γ) $x = 20$ (SDW περιοχή) και δ) $x = 21$ (CDW περιοχή), συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ . Η πόλωση της επαγόμενης μαγνήτισης εξαρτάται από το χημικό δυναμικό μ . Επομένως μπορούμε να ρυθμίσουμε την πόλωση της επαγόμενης μαγνήτισης μέσω της εφαρμογής τάσεως πύλης. Σημειώνουμε την ασυμμετρία της επαγόμενης μαγνήτισης ως προς το χημικό δυναμικό λόγω του ενεργού χημικού δυναμικού που επάγεται στη διεπαφή από τις αλληλεπιδράσεις $V = 0.6$ μεταξύ γειτονικών πλεγματοικών σημείων στην περιοχή CDW .

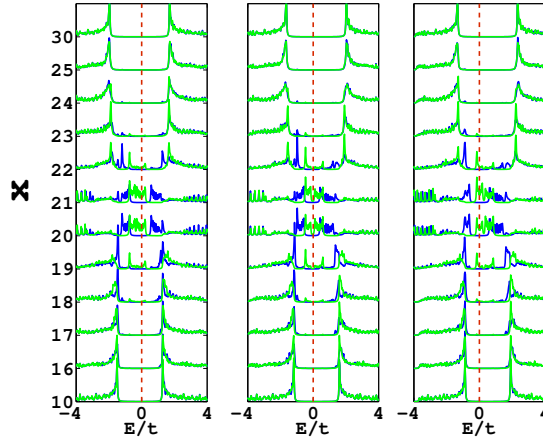
Στο Σχ. 4.4, παρουσιάζουμε τις πυκνότητες φορτίου και σπιν σε διεπαφή (100) SDW/CDW συναρτήσει του όρου σύζευξης των δύο περιοχών t_m . Παρατηρούμε την επαγωγή μαγνήτισης m^z και ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής $1 - n$ για τιμές του όρου t_m μεγαλύτερες από μια κρίσιμη τιμή $t_{c,m}$. Σημειώνουμε όμως, ότι η παραπάνω παρατήρηση δεν ισχύει και για το επαγόμενο πεδίο Zeeman. Πράγματι, το χημικό δυναμικό καθώς και τα πεδία N_{i,Q_y} και M_{i,Q_y} είναι σταθερά στις περιοχές CDW και SDW αντίστοιχα. Καθώς αυξάνεται η σύζευξη t_m μεταξύ των δύο περιοχών παρατηρούμε τη βαθμιαία αύξηση των πεδίων N_{i,Q_y} και M_{i,Q_y} στις περιοχές SDW και CDW αντίστοιχα. Το συμπέρασμα αυτό προκύπτει από την τοπική πυκνότητα καταστάσεων για τις πλεγματικές γραμμές $x = 20$ και $x = 21$ της διεπαφής όπου παρατηρούμε ότι οι ενεργειακές ζώνες για τις δύο πολώσεις του σπιν διαχωρίζονται σταδιακά με αύξηση της σύζευξης t_m . Επομένως και το επαγόμενο πεδίο Zeeman επίσης αυξάνεται βαθμιαία καθώς αυξάνεται η σύζευξη t_m . Αντίθετα είναι η αντίστοιχη μαγνητική επιδεικτικότητα που αυξάνεται απότομα στη διεπαφή καθώς η σύζευξη υπερβαίνει την κρίσιμη τιμή $t_{c,m}$, οδηγώντας έτσι στην απότομη εμφάνιση της επαγόμενης μαγνήτισης.



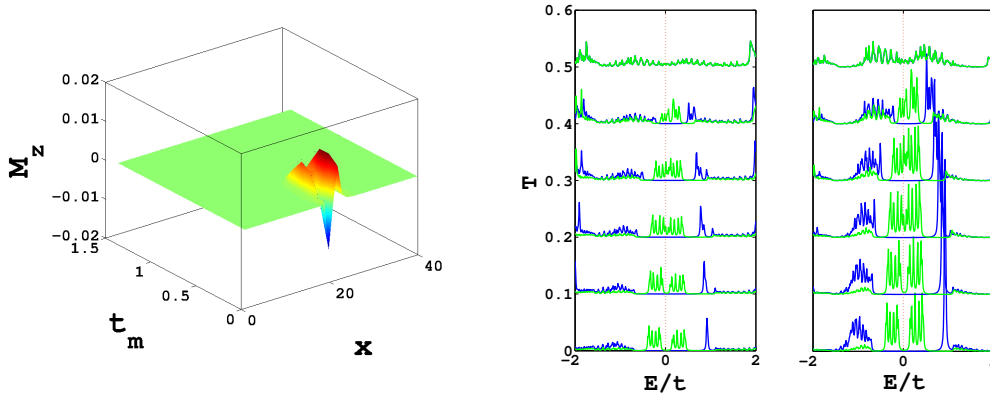
Σχήμα 4.6: Διεπαφή SDW ($U = 2$) και CDW ($V = 0.6$). Η LDOS στις πλεγματικές γραμμές δεξιά) $x=20$, αριστερά) $x=21$ ως προς το χημικό δυναμικό μ . Παρατηρούμε ότι για $\mu = -0.2 - 0.4$ (με εξαίρεση $\mu = 0.1 - 0.15$) εμφανίζεται επιφάνεια Fermi μόνο για διεγέρσεις με σπιν \uparrow . Επομένως ρυθμίζοντας το χημικό δυναμικό μέσω εφαρμογής τάσεων πύλης παρατηρούμε μια μετάβαση από την ημι-μεταλλική φάση στη μονωτική. Με μαύρο χρώμα παρουσιάζουμε την τοπική πυκνότητα καταστάσεων όταν οι δύο περιοχές είναι ασύζευκτες.

Παρακάτω διερευνούμε πώς η μαγνήτιση που επάγεται στις διεπαφές (100) SDW/CDW, σχετίζεται με το χημικό δυναμικό μ το οποίο μπορεί να ρυθμιστεί μέσω μίας εξωτερικά εφαρμοζόμενης τάσης πύλης. Στο Σχ. 4.5, παρουσιάζουμε τις πυκνότητες σπιν και φορτίου στη διεπαφή συναρτήσει του χημικού δυναμικού, για σταθερά σύζευξης $t_m = 1$. Οι υπόλοιπες παράμετροι, όπως το μέγεθος του συστήματος και τα δυναμικά αλληλεπίδρασης, παραμένουν ίδιες με αυτές των προηγούμενων περιπτώσεων. Παρατηρούμε ότι καθώς μεταβάλλεται το χημικό δυναμικό του συστήματος η πόλωση της επαγόμενης μαγνήτισης αντιστρέφεται. Επιπλέον, το μέγεθος της επαγόμενης μαγνήτισης αυξάνεται μέχρι μίας τιμής κορεσμού η οποία και διατηρείται για ένα εύρος του χημικού δυναμικού μ . Παρατηρούμε επίσης ότι η επαγόμενη μαγνήτιση παραμένει καλά εντοπισμένη στη διεπαφή των δύο περιοχών για όλες τις τιμές του χημικού δυναμικού όπως παρουσιάζεται στο Σχ. 4.5 β). Από την τοπική πυκνότητα καταστάσεων που παρουσιάζεται στο Σχ. 4.6, παρατηρούμε ότι $\frac{\partial m^z}{\partial \mu} \neq 0$ μόνο για την ημι-μεταλλική φάση. Παρατηρούμε ακόμα ότι η σιδηρομαγνητική ημι-μεταλλική φάση (FHM) περιορίζεται στην περιοχή της διεπαφής (Σχ. 4.7) όπως προκύπτει από τον υπολογισμό της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων, ενώ για τιμές του χημικού δυναμικού μ όπου $\frac{\partial m^z}{\partial \mu} = 0$ εμφανίζεται μια σιδηρομαγνητική μονωτική (FI) φάση επίσης περιορισμένη στη διεπαφή. Σε κάθε περίπτωση συμπεραίνουμε ότι το μέγεθος και η πόλωση της επαγόμενης μαγνήτισης καθώς και οι ιδιότητες της διεπαφής, μπορούν να ρυθμιστούν με την εφαρμογή μίας τάσης πύλης ή

χημικού ντοπαρίσματος που αντιστοιχούν σε όρους χημικού δυναμικού.



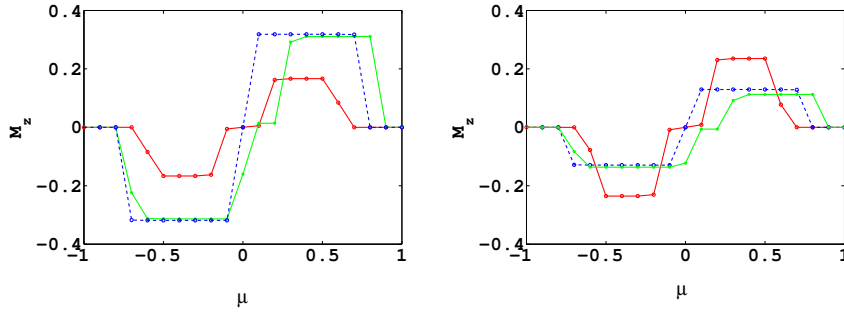
Σχήμα 4.7: α) Διεπαφή (100) SDW/CDW μήκους $L = 40$ και $U = 2$ για την περιοχή SDW ($x=1-20$), $V = 0.6$ για την CDW περιοχή ($x=21-40$). Κάθε περιοχή έχει μήκος $L_{SDW} = L_{CDW} = 20$ και επομένως η διεπαφή βρίσκεται μεταξύ των πλεγματικών γραμμών $x = 20$ και $x = 21$. Οι δύο περιοχές συζεύγονται μέσω του όρου μεταπήδησης $t_m = 1$, ενώ το χημικό δυναμικό και για τις δύο περιοχές έχει την τιμή α) $\mu = -0.05$, β) $\mu = 0.1$ και γ) $\mu = 0.25$. Στο εσωτερικό κάθε περιοχής η LDOS για κάθε πόλωση του σπιν ταυτίζεται, ενώ αντίστοιχα διαχωρίζεται στη διεπαφή καθώς για διεγέρσεις με σπιν \uparrow (πράσινη γραμμή) εμφανίζεται επιφάνεια Fermi, ενώ αντίθετα για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow (μπλε γραμμή) παραμένει ένα ενεργειακό χάσμα.



Σχήμα 4.8: Αποτελέσματα ετεροδομής διαστάσεων 40×20 με διεπαφή (100) μεταξύ περιοχής SDW ($U = 2$) και περιοχής CDW ($V = 0.6$) και χημικό δυναμικό $\mu = 0.2$, συναρτήσει της θερμοκρασίας. α) Παρατηρούμε την αλλαγή πόλωσης της επαγόμενης μαγνήτισης M_z καθώς μεταβάλλεται η θερμοκρασία. β) Η LDOS στις θέσεις $x = 20$ (αριστερά) και $x = 21$ (δεξιά) συναρτήσει της θερμοκρασίας. Για $T > 0.2$ το ενεργειακό χάσμα για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow μηδενίζεται (πράσινη γραμμή) και μια ημι-μεταλλική φάση σταθεροποιείται μέχρι $T = 0.5$, όπου και καταστρέφεται η φάση CDW.

Όπως προαναφέραμε, η συγκεκριμένη επιλογή του σημειακού δυναμικού αλληλεπίδρασης U συνεισφέρει σε ένα ελκτικό δυναμικό στο κανάλι της ομοιόμορφης μαγνήτισης μόνο στην περιοχή SDW. Επιπλέον το ίδιο δυναμικό αλληλεπίδρασης συνεισφέρει σε ένα απωστικό δυναμικό V_{N_Q} για τα κύματα πυκνότητα φορτίου στην SDW περιοχή εμποδίζοντας έτσι την εισχώρηση του αντίστοιχου πεδίου λόγω του φαινομένου εγγύτητας. Συνεπώς ο συγκεκριμένος συνδυασμός των δυναμικών αλληλεπίδρασης οδηγεί σε σχετικά τριτομμένα διαγράμματα φάσης σε σχέση με το εφαρμοζόμενο πεδίο Zeeman, καθώς η μετάβαση σε μια συμβατική σιδηρομαγνητική φάση είναι γενικά ενεργειακά πιο ευσταθής από τη μίκτη $CDW + SDW + FM$ φάση.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει επίσης η μεταβολή της επαγόμενης στη διεπαφή μαγνήτισης συναρτήσει της θερμοκρασίας. Όπως παρουσιάζεται στο Σχ. 4.8, η επαγόμενη μαγνήτιση αλλάζει πόλωση



Σχήμα 4.9: Διεπαφή SDW ($U = 1$) και CDW ($V = 0.3$). Σύγκριση των αποτελεσμάτων των διαφορετικών προσεγγίσεων για τα δυναμικά των μέσων πεδίων. Η μαγνήτιση M_z στις θέσεις $x = 20$ (αριστερά) και $x = 21$ (δεξιά) συναρτήσεσι του χημικού δυναμικού μ . Η κόκκινη γραμμή αντιστοιχεί στο μοντέλο Hubbard, με δυναμικά $U_N = U + 4V$ και $U_M = -U + 4J$ για το κανάλι της ομοιόμορφης πυκνότητας φορτίου και σπιν αντίστοιχα. Η μπλε γραμμή αντιστοιχεί στην προσέγγιση $U_N = 0$, ενώ η πράσινη στην προσέγγιση $U_N = U_M = 0$. Στις δύο τελευταίες περιπτώσεις, παρατηρούμε τη συμμετρία των αποτελεσμάτων ως προς $\mu = 0$, λόγω απουσίας του όρου ενεργού χημικού δυναμικού που επάγεται στη διεπαφή εξαιτίας της αλληλεπίδρασης V .

καθώς μεταβάλλουμε τη θερμοκρασία. Επίσης, με αύξηση της θερμοκρασίας παρατηρείται μια μετάβαση από μονωτική σε μια ημι-μεταλλική φάση καθώς το ενεργειακό χάσμα για ενεργειακές ζώνες που αντιστοιχούν σε μια συγκεκριμένη πόλωση του σπιν είναι σημαντικά μικρότερο από το αντίστοιχο ενεργειακό χάσμα για τους φορείς με αντίθετη πόλωση του σπιν.

Τέλος, σημειώνουμε ότι τα παραπάνω αποτελέσματα είναι ποιοτικά ανεξάρτητα από το μοντέλο που χρησιμοποιούμε για τη μελέτη των ετεροδομών SDW/CDW . Έτσι, η σύζευξη μεταξύ της πυκνότητας φορτίου και σπιν, η επαγωγή μαγνήτισης και ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής καθώς και οι μεταβάσεις σε ημι-μεταλλικές ή μονωτικές σιδηρομαγνητικές φάσεις παρατηρούνται ανεξάρτητα από την επιλογή των δυναμικών για κάθε μέσο πεδίο. Ενδεικτικά στο Σχ. 4.9 παρουσιάζουμε την επαγόμενη μαγνήτιση συναρτήσεσι του χημικού δυναμικού για τιμές των δυναμικών των μέσων πεδίων οι οποίες δεν προκύπτουν από το μοντέλο Hubbard.

4.2.3 Η p -wave υπεραγώγιμη φάση σε διεπαφές (100) SDW/CDW

Σύμφωνα με τα παραπάνω αποτελέσματα, η αλληλεπίδραση μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν οδηγεί στην εμφάνιση μιας ημι-μεταλλικής φάσης στη διεπαφή των δύο μονωτικών αυτών καταστάσεων. Καθώς η συνύπαρξη των δύο πεδίων συμβαίνει κυρίως στη διεπιφάνεια των δύο περιοχών, για να περιγράψουμε τις ενεργειακές ζώνες της διεπαφής χρησιμοποιήσαμε τη Χαμιλτονιανή Εξ. 4.22. Όπως αναφέραμε και προηγουμένως, για σταθερά σύζευξης συγκρίσιμη με τον κινητικό όρο των δύο περιοχών αναμένουμε για ένα εύρος τιμών του χημικού δυναμικού μόνο μία ενεργειακή ζώνη να τέμνει το επίπεδο Fermi του συστήματος. Η ενεργειακή αυτή ζώνη αντιστοιχεί σε διεγέρσεις με συγκεκριμένη πόλωση του σπιν. Ακριβώς αυτή είναι η περίπτωση που παρουσιάζεται στο Σχ. 4.3, όπου η ενεργειακή ζώνη για μονοσωματιδιακές διεγέρσεις με σπιν \downarrow τέμνει το επίπεδο Fermi, ενώ επιπλέον είναι διαχωρισμένη από το υπόλοιπο ενεργειακό φάσμα. Η συγκεκριμένη ενεργειακή ζώνη αντιστοιχεί σε ιδιοκαταστάσεις του συστήματος εντοπισμένες στη διεπαφή, λόγω του ενεργειακού χάσματος στο εσωτερικό των δύο μονωτικών περιοχών και περιγράφεται από την παρακάτω μονοδιάστατη ενεργό Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{k_y} \Psi_k^\dagger [m + t \cos k_y \rho_z + W \rho_x] \Psi_{k_y}, \quad (4.25)$$

όπου $\Psi_{k_y}^\dagger = \begin{pmatrix} c_k^\dagger & c_{k+Q}^\dagger \end{pmatrix}$, $W = N_Q - M_Q$ το συνολικό πεδίο από την ανάμειξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν στη διεπαφή και m ένας όρος χημικού δυναμικού που συμπεριλαμβάνει τα

επαγόμενα στη διεπαφή ομοιόμορφα πεδία σπιν και φορτίου και το ενεργό χημικό δυναμικό λόγω σύζευξης των δύο περιοχών. Οι ιδιοενέργειες της συγκεκριμένης Χαμιλτονιανής προκύπτουν από την παρακάτω σχέση

$$E(k) = m + p\sqrt{t^2 \cos 2k} + t^2 + W^2. \quad (4.26)$$

Η Χαμιλτονιανή Εξ. 4.25 περιγράφει ένα μονοδιάστατο σύστημα ηλεκτρονίων με συγκεκριμένη πόλωση του σπιν ή ισοδύναμα ηλεκτρόνια χωρίς τον βαθμό ελευθερίας του σπιν. Το σύστημα αυτό είναι ιδανικό για την εμφάνιση τοπολογικών υπεραγωγίων φάσεων και συνεπώς δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας. Σημειώνουμε ότι το σύστημα χαρακτηρίζεται μονοδιάστατο, άσχετα με την περιοχή που εκτείνονται οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις της ετεροδομής, καθώς ο διαστατικός του χαρακτήρας καθορίζεται από τις μεταβλητές του συστήματος όπου στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι μόνο η ορμή παράλληλα προς τη διεπαφή.

Βάσει του παραπάνω συλλογισμού, διερευνούμε την εμφάνιση triplet υπεραγωγίων φάσεων p συμμετρίας στη διεπαφή ετεροδομών SDW/CDW θεωρώντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ κοντινότερων γειτόνων στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής. Σημειώνουμε ότι ενώ εν γένει η παρουσία ενός τέτοιου δυναμικού είναι πιθανή και για τις δύο περιοχές, η θεώρηση αυτή είναι πιο ρεαλιστική για την περιοχή του κυμάτος πυκνότητας σπιν SDW. Πράγματι, το διάγραμμα φάσης των οξειδίων του χαλκού και πιο συγκεκριμένα αυτό των υπεραγωγών υψηλής θερμοκρασίας, παρουσιάζει μια μετάβαση από την αντισιδηρομαγνητική στη μη-συμβατική υπεραγωγίμη φάση καθώς το επίπεδο Fermi αποκλίνει από το επίπεδο συμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής.

Για να συμπεριλάβουμε τα πεδία ζεύξης ηλεκτρονίων στη Χαμιλτονιανή του συστήματος πρέπει να επεκτείνουμε τον σπινόρα στον χώρο ηλεκτρονίου-οπής ή Nambu και επομένως η Εξ. 4.6 τροποποιείται ως εξής

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{ij, k_y} \Psi_{i, k_y}^{N, \dagger} H_{ij}(k_y) \Psi_{j, k_y}^N$$

$$H_{ij}(k_y) = \tau_z [(\xi_{ij} + \xi_c)\rho_z + N_i + M_i\sigma_z + N_{i, Q_y}\rho_x + M_{i, Q_y}\rho_x\sigma_z] \pm i\Delta_i\delta_{j, i\pm 1} \sin(k_y)\tau_x\rho_z\sigma_z \quad (4.27)$$

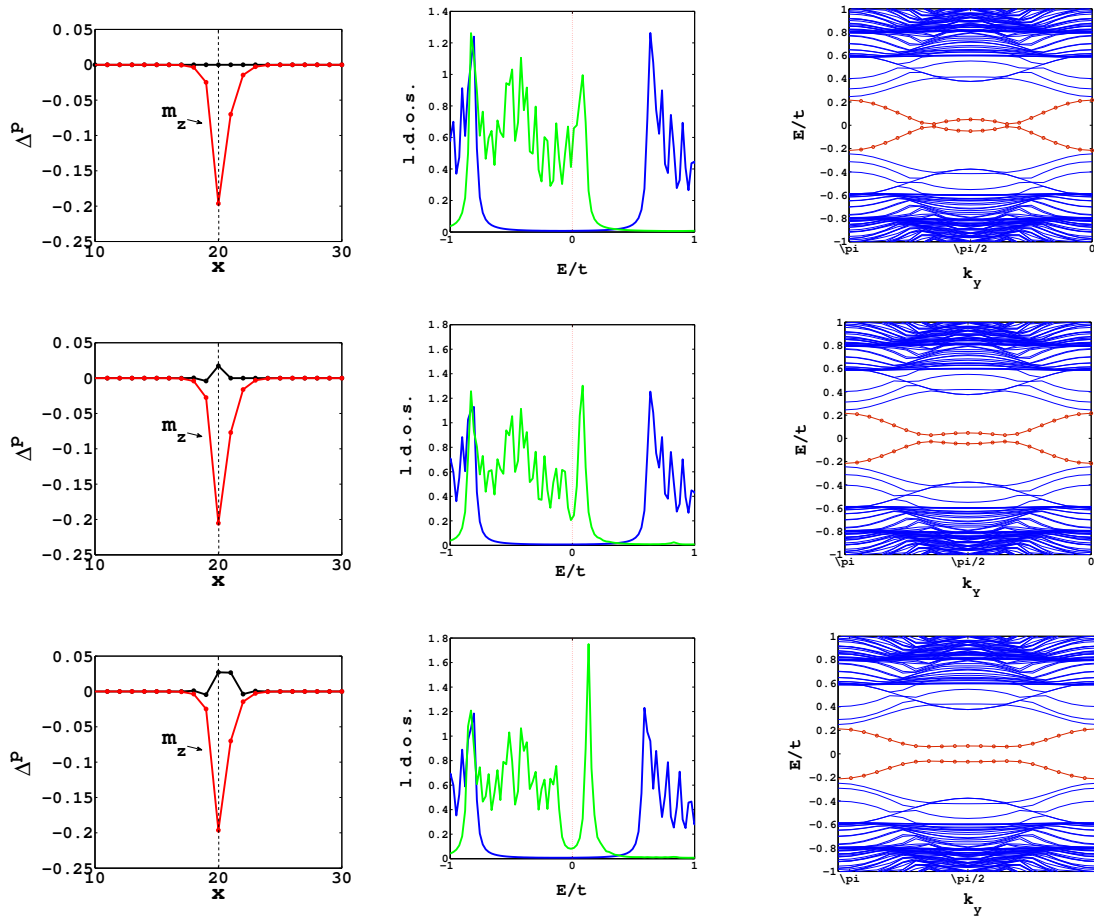
Ο νέος σπινόρας ορίζεται ως $\Psi_{i, k_y}^{N, \dagger} = (\Psi_{i, k_y}, \Psi_{i, -k_y}^\dagger)$, ενώ επιπλέον έχουμε εισάγει τις μήτρες Pauli τ που δρουν στον χώρο Nambu. Το αντισυμμετρικό στην αντιστροφή του χώρου πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν $\Delta \sin(k_y)\tau_x\rho_z\sigma_z$ κατά μήκος της διεύθυνσης που είναι παράλληλη στο επίπεδο της διεπαφής, υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση αυτοσυνέπειας

$$\begin{aligned} \Delta_i &= V \frac{1}{N_y} \sum_{k_y} \sin(k_y) \langle \Psi_{i, k_y}^{N, \dagger} \tau_x \rho_z \sigma_z \Psi_{i, k_y}^N \rangle \\ &= \frac{1}{8N_y} \sum_{k_y} \sin(k_y) [U^\dagger(k_y) [\tau_x \rho_z \sigma_z] U(k_y)]_{nn} n_F(E_n), \end{aligned} \quad (4.28)$$

ενώ οι αυτοσυνεπείς εξισώσεις για τα υπόλοιπα πεδία τροποποιούνται αναλόγως στα πλαίσια του νέου σπινόρα

$$\begin{aligned} n &= \frac{V_n}{8N} \sum_{i, k_y, p} [U^\dagger(k_y) [\delta_{i,j} \tau_z] U(k_y)]_{nn} n_F(E_n), & \mathbf{m} &= \frac{V_S}{8N} \sum_{i, k_y} [U^\dagger(k_y) [\tau_z \boldsymbol{\sigma} \delta_{i,j}] U(k_y)]_{nn} n_F(E_n) \\ n_Q &= \frac{V_Q}{8N} \sum_{i, k_y} e^{iQx} [U^\dagger(k_y) [\tau_z \rho_x \delta_{i,j}] U(k_y)]_{nn} n_F(E_n), & \mathbf{m}_{i, Q} &= \frac{V_S}{8N} \sum_{i, k_y} e^{iQx} [U^\dagger(k_y) [\tau_z \rho_x \boldsymbol{\sigma} \delta_{i,j}] U(k_y)]_{nn} n_F(E_n). \end{aligned}$$

Στο Σχ. 4.10, παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από επίλυση του συστήματος της ετεροδομής θεωρώντας ένα πεπερασμένο δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων, είτε μόνο στην περιοχή SDW, είτε και στις δύο περιοχές. Παρατηρούμε ότι πράγματι, η



Σχήμα 4.10: Διεπαφή (100) SDW/CDW με $U = 2$ (SDW περιοχή), $V = 0.6$ (CDW περιοχή) και ομοιόμορφο χημικό δυναμικό $\mu = -0.1$. Οι δύο περιοχές συνδέονται μέσω του όρου $t_m = 1$. αριστερά) Το προφίλ της επαγόμενης μαγνήτισης m^z (κόκκινη γραμμή) και του πεδίου ζεύξης ιδίου σπιν, $\Delta \sin(k_y) \rho_z \tau_x \sigma_z$ (μπλε γραμμή). μέση) Η LDOS στις θέσεις $x = 20$. δεξιά) Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων. Τα σχήματα αντιστοιχούν σε διαφορετικές τιμές του δυναμικού στο κανάλι του υπεραγωγίμου μέσου πεδίου και συγκεκριμένα $V = 0$ (πάνω), $V = 1.5$ μόνο στην περιοχή SDW (μέση) και $V = 2$ και στις δύο περιοχές (κάτω). Παρατηρούμε το μικρό ενεργειακό χάσμα που εμφανίζεται στη ζώνη διεγέρσεων χαμηλών ενεργειών του συστήματος που έχουν πόλωση σπιν \downarrow .

triplet υπεραγωγίμη φάση που παρουσιάσαμε παραπάνω, εμφανίζεται μόνο στη διεπαφή των δύο περιοχών παρόλο που το δυναμικό αλληλεπίδρασης είναι το ίδιο σε όλο το σύστημα (ή σε όλη την περιοχή SDW). Επιπλέον από το Σχ. 4.11, παρατηρούμε ότι η υπεραγωγίμη αυτή φάση εμφανίζεται μόνο όταν η σύζευξη μεταξύ των δύο περιοχών ξεπερνά μία κρίσιμη τιμή, καταδεικνύοντας ότι η εμφάνιση της στα συστήματα αυτά δεν είναι τετριμμένη, αλλά συνδέεται άμεσα με τη συνύπαρξη των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν. Μάλιστα, η εμφάνιση της υπεραγωγίμης φάσης συμπίπτει με την ημι-μεταλλική φάση της διεπαφής όπως αναμέναμε. Στο Σχ. 4.10, παρατηρούμε ότι η ενεργειακή ζώνη διεπαφής παρουσιάζει ένα ενεργειακό χάσμα για τις παραμέτρους του συστήματος που εμφανίζεται η υπεραγωγίμη φάση. Προφανώς μόνο οι καταστάσεις της συγκεκριμένης ενεργειακής ζώνης συμμετέχουν στη δημιουργία της υπεραγωγίμης φάσης, αφού μόνο αυτές βρίσκονται κοντά στο επίπεδο Fermi του συστήματος. Καθώς το πεδίο ζεύξης που εμφανίζεται είναι πολύ μικρό σε σχέση με την ενεργειακή κλίμακα των υπόλοιπων πεδίων που σχετίζονται με τα κύματα πυκνότητας, το ενεργειακό φάσμα του συστήματος δεν παρουσιάζει άλλες αλλαγές. Συνεπώς για παραμέτρους που εμφανίζεται η υπεραγωγίμη αυτή φάση η ενεργός Χαμιλτονιανή της διεπαφής Εξ. 4.25 αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\mathcal{H}_{int}^{SC} = \frac{1}{2} \sum_{k_y} \Psi_k^{N,\dagger} [m\tau_z + t\cos k_y \tau_z \rho_z + W\tau_z \rho_x + \Delta_p \sin k_y \tau_x \rho_z] \Psi_{k_y}^N, \quad (4.29)$$

όπου $\Psi_{k_y}^N = (c_k, c_{k+Q}, c_{-k}^\dagger, c_{-k+Q}^\dagger)$, και Δ_p το αντισυμμετρικό στην αντιστροφή του χώρου πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν. Το φάσμα ιδιοενεργειών της συγκεκριμένης Χαμιλτονιανής έχει την ακόλουθη μορφή

$$E(k) = m + p\sqrt{(t^2 \cos^2 k - \Delta^2 \sin^2 k) + W^2}. \quad (4.30)$$

Η Χαμιλτονιανή Εξ. 4.29 (Υπόμνημα Β) ανήκει στην D κλάση συμμετρίας και επιδέχεται ένα \mathbb{Z}_2 τοπολογικό αναλλοίωτο. Το τοπολογικό αναλλοίωτο \mathcal{M} υπολογίζεται από την Pfaffian της Χαμιλτονιανής μήτρας στη βάση Majorana, η οποία προκύπτει από την παρακάτω έκφραση

$$\mathcal{M} = Pf(A(k=0))Pf(A(k=\pi/2)), \quad (4.31)$$

όπου $A = U^\dagger H U$ η Χαμιλτονιανή μήτρα της διεπαφής εκφρασμένη στη βάση Majorana και $U = e^{i\frac{\pi}{4}\tau_y} e^{-i\frac{\pi}{4}\tau_x} e^{i\frac{\pi}{4}}$ η αντίστοιχη μήτρα μετασχηματισμού. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το τοπολογικό αναλλοίωτο υπολογίζεται με βάση την Pfaffian για $k = \pi/2$, λόγω της π περιοδικότητας του φάσματος ιδιοενεργειών. Από την Εξ. 4.29, η έκφραση για το τοπολογικό αναλλοίωτο αποκτά την παρακάτω μορφή

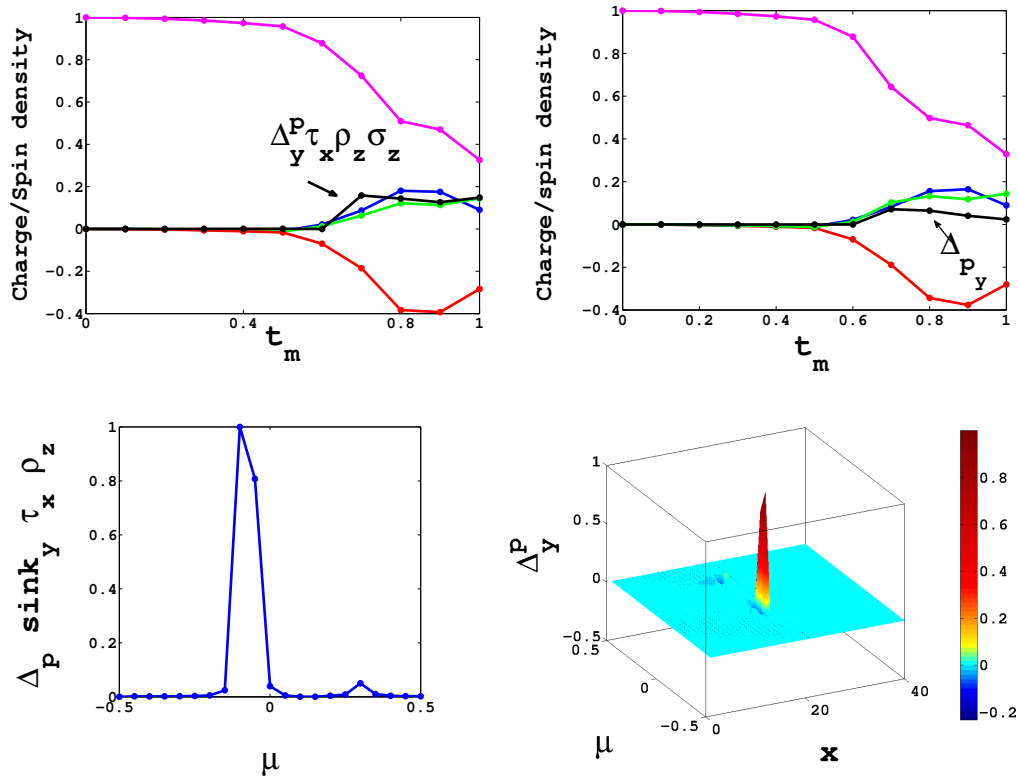
$$\mathcal{M} = (t^2 + W^2 - m^2)(W^2 - m^2)/, \quad (4.32)$$

Η συνθήκη για την εμφάνιση μίας μη τετριμμένης υπεραγωγικής φάσης με $\mathcal{M} = -1$, οδηγεί στο παρακάτω τοπολογικό κριτήριο

$$\sqrt{t^2 + W^2} < |m| < |W|. \quad (4.33)$$

Το παραπάνω τοπολογικό κριτήριο αντιστοιχεί στο εύρος του χημικού δυναμικού για το οποίο η ενεργειακή ζώνη της διεπαφής που αναφέρεται σε συγκεκριμένη πόλωση του σπιν, τέμνει το επίπεδο Fermi του συστήματος.

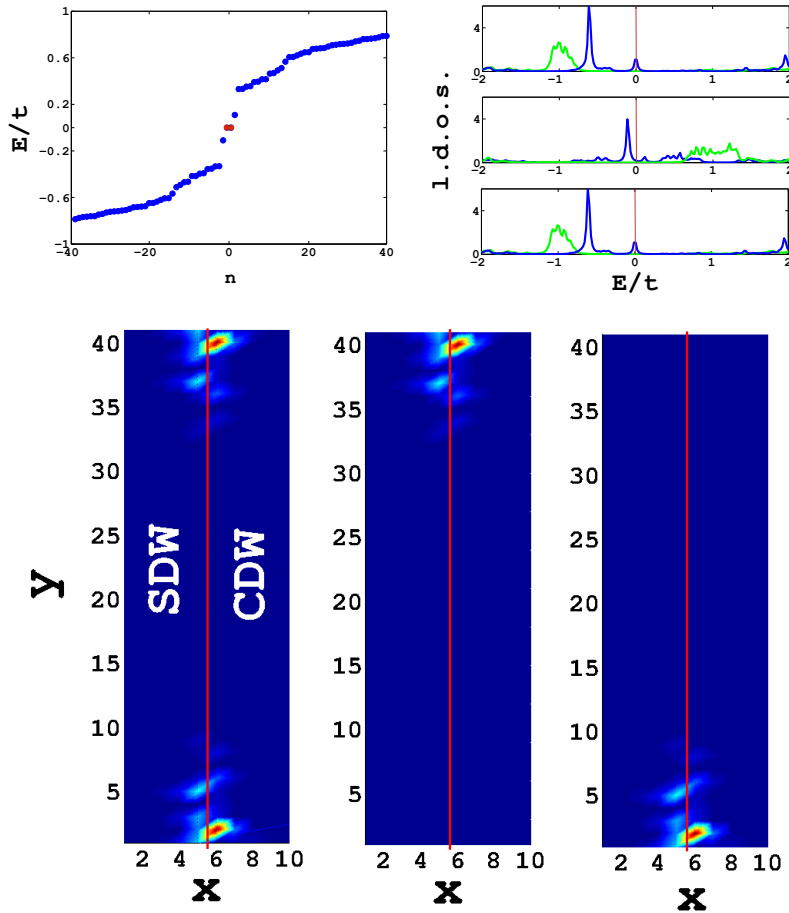
Επομένως αναμένουμε για τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται στο Σχ. 4.10, την εμφάνιση ενός ζεύγους δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας εντοπισμένο στα άκρα της διεπαφής, όταν επιβάλλουμε ανοιχτές συνοριακές συνθήκες και για τη διεύθυνση y . Για να διερευνήσουμε ακριβώς αυτή τη δυνατότητα χρησιμοποιούμε τη Χαμιλτονιανή Εξ.4.2 εκφρασμένη στον χώρο των θέσεων, θεωρώντας επιπλέον ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων το οποίο συνεισφέρει και στο κανάλι της υπεραγωγιμότητας p συμμετρίας. Συγκεκριμένα, για την (100) SDW/CDW διεπαφή με $U = 2$ για την SDW περιοχή και $V = 0.6$ για την CDW περιοχή, θεωρούμε επιπλέον το αντίστοιχο δυναμικό $V = 2$ στο κανάλι αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-οπής και για τις δύο περιοχές. Παρόλο που τα δύο δυναμικά αλληλεπίδρασης κοντινότερων γειτόνων, σε διαφορετικό κανάλι αλληλεπίδρασης το καθένα, δείχνουν αντιφατικά μεταξύ τους, δεν είναι μια αφύσικη επιλογή καθώς εν γένει τα δυναμικά σε κάθε κανάλι αλληλεπίδρασης μπορούν να σχετίζονται με διαφορετικά μποζονικά πεδία και φυσικούς μηχανισμούς. Επιπλέον, η σχετικά μεγάλη τιμή του συγκεκριμένου δυναμικού έγινε για πρακτικούς λόγους, καθώς η εμφάνιση των φερμιονίων Majorana μηδενικής ενέργειας σχετίζεται άμεσα με το υπεραγωγίμο ενεργειακό χάσμα και τις διαστάσεις του συστήματος. Σε περιπτώσεις όπου το υπεραγωγίμο μήκος συνάφειας ξ είναι μικρό σε σχέση με την αντίστοιχη διάσταση L του συστήματος, τα φερμιόνια Majorana που εντοπίζονται σε αντίθετα άκρα αλληλεπιδρούν και συνεπώς αποκτούν πεπερασμένη ενέργεια η οποία εξαρτάται εκθετικά από τον λόγο ξ/L . Καθώς οι υπολογιστικές απαιτήσεις για την επίλυση του συστήματος αυξάνονται ραγδαία με το μέγεθος του συστήματος, επιλέξαμε μια μεγάλη τιμή για το συγκεκριμένο δυναμικό αλληλεπίδρασης, ώστε το υπεραγωγίμο πεδίο που εμφανίζεται να είναι ικανό να περιορίσει τα φερμιόνια Majorana στα άκρα ενός μικρού σχετικά συστήματος. Σημειώνουμε ότι η υπεραγωγίμη φάση εμφανίζεται και για άλλα πολύ μικρότερα δυναμικά, ενώ



Σχήμα 4.11: Διεπαφή (100) SDW/CDW για $U = 2$ (SDW περιοχή), $V = 0.6$ (CDW περιοχή) και ομοιόμορφο χημικό δυναμικό $\mu = -0.1$. Οι τοπικές πυκνότητες n (μπλε γραμμή), m^z (κόκκινη γραμμή), n_Q (πράσινη γραμμή), m_Q^z (μωβ γραμμή) και $\sin(k_y)\rho_z\tau_x\sigma_z$ (μαύρη γραμμή), στη θέση $x = 20$ (διεπαφή στην SDW πλευρά) για α) $V = 1$ και β) $V = 2$ για το δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Οι πυκνότητες παρουσιάζονται κανονικοποιημένες ως προς τη μέγιστη σε κάθε περίπτωση τιμή της m_Q^z . Οι υπεραγωγίμες συσχετίσεις για την περίπτωση $V = 1$ έχουν πολλαπλασιαστεί με 100. γ) Για $V = 2$ και $t_m = 1$, οι υπεραγωγίμες συσχετίσεις στη θέση $x = 20$ συναρτήσε του χημικού δυναμικού, κανονικοποιημένες ως προς τη μέγιστη τιμή. δ) Το προφίλ των υπεραγωγίμων συσχετίσεων συναρτήσε του μ . Σε κάθε περίπτωση η υπεραγωγίμη φάση παραμένει εντοπισμένη στη διεπαφή SDW/CDW, καταδεικνύοντας έτσι την άμεση σύνδεσή της με τη συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν.

θεωρητικά αναμένεται να εμφανιστεί στην ημι-μεταλλική φάση ακόμα και για απειροελάχιστες τιμές του δυναμικού αλληλεπίδρασης. Επίσης, η συγκεκριμένη συμμετρία p του υπεραγωγίμου πεδίου προκύπτει από τις αντιμεταθετικές ιδιότητες των φερμιονίων οι οποίες για ηλεκτρόνια ίδιου σπιν επιτρέπουν μόνο αντισυμμετρικά ως προς την αντιστροφή του χώρου ομοιόμορφα υπεραγωγίμα πεδία. Στην πραγματικότητα το συγκεκριμένο σύστημα ηλεκτρονίων ίδιου σπιν επιτρέπει και την εμφάνιση π -triplet υπεραγωγίμων πεδίων τα οποία όμως δεν υπερिशύχουν των πεδίων συμμετρίας p , όπως προκύπτει από ανάλυση των αντίστοιχων επιδεικτικιοτήτων του συστήματος. Σημειώνουμε ότι τα πεδία αυτά ευνοούνται σε περιπτώσεις όπου η επιφάνεια Fermi εμφανίζει το αντίστοιχο διάλυμα συναρμογής.

Στο Σχ.4.12 παρουσιάζουμε ενδεικτικά τα αποτελέσματα μιας συγκεκριμένης περίπτωσης για μια ετεροδομή διαστάσεων 10×41 όπου $\mu = -0.05$ και $t_m = 1$, θεωρώντας ανοικτές συνοριακές συνθήκες και για τις δύο διευθύνσεις. Στο ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος παρατηρούμε την εμφάνιση ενός ζεύγους ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας που διαχωρίζεται από το υπόλοιπο φάσμα μέσω ενός ενεργειακού χάσματος. Πράγματι, το συγκεκριμένο ζεύγος ιδιοενεργειών αντιστοιχεί σε ιδιοκαταστάσεις εντοπισμένες στα άκρα της διεπαφής.

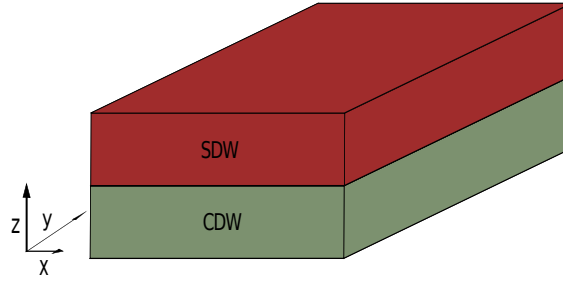


Σχήμα 4.12: α) Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων για ετεροδομές SDW/CDW διαστάσεων 10×41 με $U = 2$ (SDW περιοχή), $V = 0.6$ (CDW περιοχή) και ένα ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης κοντινότερων γειτόνων $V = -2$ στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής και στις δύο περιοχές. Θεωρούμε μη περιοδικές συνοριακές συνθήκες και για τις δύο διευθύνσεις του συστήματος. Παρατηρούμε ότι εμφανίζεται ένα ζεύγος ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας διαχωρισμένο από τις υπόλοιπες διεγέρσεις του συστήματος μέσω ενεργειακού χάσματος $\Delta E \sim 0.25$. β) Η LDOS στην πλεγματική γραμμή $x = 6$ της διεπαφής και $y = 1$ (πάνω), $y = 20$ (μέση) και $y = 41$ (κάτω). Μια κορυφή στη θέση μηδενικής ενέργειας εμφανίζεται στη LDOS των ακραίων σημείων $y = 1$ και $y = 41$ της διεπαφής, μόνο για διεγέρσεις με σπιν \uparrow . Αντίθετα στη μέση της διεπαφής $y = 20$, εμφανίζεται μικρό ενεργειακό χάσμα για τις σπιν \uparrow διεγέρσεις, λόγω του πεδίου ζεύξης ηλεκτρονίων με ίδιο σπιν. Σημειώνουμε ότι σημαντικό ενεργειακό χάσμα εμφανίζεται σε κάθε σημείο για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow . γ) Η κατανομή πιθανότητας, $|\Psi|^2$, των δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας (αριστερά) που εντοπίζονται στα άκρα της διεπαφής. Δεξιά παρουσιάζονται οι ίδιες ιδιοκαταστάσεις εκφρασμένες στη βάση Majorana.

4.3 Διεπαφές (001) SDW/CDW

4.3.1 Μαθηματική περιγραφή των διεπαφών (001) SDW/CDW

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζονται αποτελέσματα για ετεροδομές SDW/CDW μεταξύ στρωμάτων με κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν με (001) διεπαφές. Η σύζευξη των επιπέδων γίνεται γενικά μέσω απλών όρων μεταπήδησης μεταξύ των στρωμάτων. Κάθε στρώμα περιγράφεται από μια ενεργειακή ζώνη με τετραγωνική συμμετρία. Στον χώρο των θέσεων η συνολική Χαμιλτονιανή του συστήματος έχει την παρακάτω μορφή



Σχήμα 4.13: Σχηματική αναπαράσταση διεπαφής (001) μεταξύ υλικών που εμφανίζουν κύματα πυκνότητας φορτίου (CDW) και σπιν (SDW).

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_l H_l + \sum_{l'} H_{l'} \\
H_l &= -t_l \sum_{\langle ij \rangle, s} (\psi_{l,i,s}^\dagger \psi_{l,j,s} + h.c.) + \mu_l \sum_i n_{l,i} + 2 \sum_i \mathbf{h}_l \cdot \mathbf{S}_{l,i} \\
&+ U_l \sum_{i,s} n_{l,i,s} n_{l,i,s'} + V_l \sum_{\langle ij \rangle} n_{l,i} n_{l,j} + J_l \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_{l,i} \cdot \mathbf{S}_{l,j} \\
H_{l'} &= -t_{l'} \sum_{i,s} (\psi_{l',i,s}^\dagger \psi_{l',i,s} + h.c.) - t'_{l'} \sum_{ij,s} (\psi_{l',i,s}^\dagger \psi_{l',j,s} + h.c.), \quad (4.34)
\end{aligned}$$

όπου $\psi_{l,i,s}(\dagger)$ ο τελεστής καταστροφής (δημιουργίας) ηλεκτρονίου με πόλωση σπιν s στην πλεγματική θέση \mathbf{i} και το στρώμα l . Οι όροι μεταπήδησης t_l και οι αντίστοιχες αλληλεπιδράσεις V, J θεωρούνται εν γένει πεπερασμένες μέχρι και για επόμενους κοντινότερους γείτονες. Η σύζευξη μεταξύ των στρωμάτων επιτυγχάνεται μέσω όρων μεταπήδησης που ενώνουν τις ίδιες $t_{l'}$ ή τις αμέσως κοντινότερες γειτονικές πλεγματικές θέσεις $t'_{l'}$ μεταξύ γειτονικών στρωμάτων l και l' . Η παραπάνω Χαμιλτονιανή γραμμικοποιείται μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου. Καθώς στη συγκεκριμένη περίπτωση θέλουμε να μελετήσουμε την αλληλεπίδραση μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν, θεωρούμε μόνο τα μέσα πεδία που σχετίζονται με την τοπική πυκνότητα φορτίου και σπιν,

$$N_{l,i} = U/2 \langle n_{l,i} \rangle + V \sum_{\langle i,j \rangle} \langle n_{l,j} \rangle \quad \mathbf{M}_{l,i} = -U/2 \langle \mathbf{m}_{l,i} \rangle + \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle} \langle \mathbf{m}_{l,j} \rangle. \quad (4.35)$$

Εισάγοντας μόνο τα συγκεκριμένα μέσα πεδία και αγνοώντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διακυμάνσεων τους, η Χαμιλτονιανή για κάθε στρώμα αποκτά την παρακάτω μορφή μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων

$$H_l = -t_l \sum_{\langle ij \rangle, s} (\psi_{l,i,s}^\dagger \psi_{l,j,s} + h.c.) + \sum_i [\mu_l + N_{l,i}] n_{l,i} + \sum_i [\mathbf{h}_l + \mathbf{M}_{l,i}] \cdot \mathbf{m}_{l,i}.$$

Με την εισαγωγή του ακόλουθου σπινόρα $\Psi_{i,l}^\dagger = (\psi_{i,\uparrow,l}^\dagger, \psi_{i,\downarrow,l}^\dagger)$ και των πινάκων Pauli $\boldsymbol{\sigma}$, η Εξ. 4.34 αποκτά την παρακάτω συμπαγή μορφή

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,l'} \Psi_{i,l}^\dagger [[t_{l,\langle ij \rangle} + t'_{l',\langle\langle ij \rangle\rangle} + (\mu_l + N_{l,i} + (\mathbf{h}_l + \mathbf{M}_{l,i}) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \delta_{i,j}] \delta_{l,l'} \\
&+ (t_{l',\langle ij \rangle} + t'_{l',\langle\langle ij \rangle\rangle}) \delta_{l,l \pm 1}] \Psi_{j,l'}.
\end{aligned}$$

Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων E και οι αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις U του συστήματος υπολογίζονται μέσω της παρακάτω εξίσωσης ιδιοτιμών

$$\sum_{\mathbf{r}'} H_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} U_{\mathbf{r}',n} = E_n U_{\mathbf{r},n}, \quad (4.36)$$

όπου $\mathbf{r} = (\mathbf{i}, l)$ οι πλεγματικές συντεταγμένες. Τα μέσα πεδία καθορίζονται αυτοσυνεπώς μέσω των παρακάτω εξισώσεων για την τοπική πυκνότητα φορτίου και σπιν

$$\begin{aligned} \langle n_{l,\mathbf{i}} \rangle &= \frac{1}{N} [U \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} U^\dagger]_{nn} n_F(E_n) \\ \langle \mathbf{m}_{l,\mathbf{i}} \rangle &= \frac{1}{N} [U \delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \boldsymbol{\sigma} U^\dagger]_{nn} n_F(E_n). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Καθώς δε θα ασχοληθούμε με φαινόμενα που αναπτύσσονται στο σύνορο των στρωμάτων της ετεροδομής εφαρμόζουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες στις αντίστοιχες διευθύνσεις. Στην περίπτωση αυτή, η Χαμιλτονιανή Εξ. 4.34 αποκτά την αντίστοιχη συμμετρία μεταφοράς για μετασχηματισμούς μέσα στο επίπεδο των στρωμάτων και συνεπώς είναι χρήσιμο να εφαρμόσουμε τον μετασχηματισμό Fourier από τον χώρο των θέσεων $\mathbf{i} = (i_x, i_y)$ στον συζυγή χώρο των ορμών $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Η Χαμιλτονιανή του συστήματος μέσω του συγκεκριμένου μετασχηματισμού αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},l} \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger [H_l(\mathbf{k}) + H_{l,l'}(\mathbf{k})] \Psi_{\mathbf{k},l'} \\ H_l(\mathbf{k}) &= \gamma(\mathbf{k}, l) \rho_z + \delta(\mathbf{k}, l) + \mu + N_l + [h^z + M_l] \sigma_z + \rho_x [N_l^{\mathbf{Q}} + M_l^{z,\mathbf{Q}} \sigma_z] \\ H_{l,l'}(\mathbf{k}) &= [-t_{l,l'} + t'_{l,l'} (\cos(k_x) + \cos(k_y))] \delta_{l,l' \pm 1}, \end{aligned} \quad (4.38)$$

όπου έχουμε εισάγει τον σπίνορα

$$\Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger = \left(\psi_{\mathbf{k},\uparrow,l}^\dagger, \psi_{\mathbf{k},\downarrow,l}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow,l}^\dagger, \psi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow,l}^\dagger \right) \quad (4.39)$$

για κάθε στρώμα l , με $\psi_{\mathbf{k},s,l}^\dagger$ τον τελεστή δημιουργίας ηλεκτρονίου με πολωση σπιν s και ορμή \mathbf{k} . Έχουμε επίσης εισάγει τους πίνακες Pauli, $\boldsymbol{\rho}$ και $\boldsymbol{\sigma}$, που δρουν στον χώρο μεταφοράς ορμής \mathbf{Q} και σπιν αντίστοιχα. Επιπλέον, οι συναρτήσεις $\gamma(\mathbf{k}) = -2t_l \cos(k_x) + \cos(k_y)$ και $\delta(\mathbf{k}) = -2t'_l \cos(k_x) \cos(k_y)$ σχετίζονται με την ενεργειακή διασπορά της ζώνης για κάθε στρώμα, οι όροι μ και h^z αντιστοιχούν στο χημικό δυναμικό και το πεδίο Zeeman, ενώ $t'_{l,l'}$ είναι ο όρος μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτονικών πλεγματικών σημείων σε γειτονικά στρώματα, $l' = l \pm 1$. Οι αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων έχουν ενσωματωθεί στα παρακάτω μέσα πεδία ή παραμέτρους τάξης

$$\begin{aligned} N_l &= V_{N,l} n_l = V_{N,l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k},l} \rangle & M_l^z &= V_{M,l} m_l^z = V_{M,l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger \sigma_z \Psi_{\mathbf{k},l} \rangle \\ N_l^{\mathbf{Q}} &= V_{N_{\mathbf{Q}},l} n_{\mathbf{Q},l} = V_{N_{\mathbf{Q}},l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger \rho_x \Psi_{\mathbf{k},l} \rangle & M_l^{z,\mathbf{Q}} &= V_{M_{\mathbf{Q}},l} m_{\mathbf{Q},l}^z = V_{M_{\mathbf{Q}},l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger \rho_x \sigma_z \Psi_{\mathbf{k},l} \rangle \end{aligned} \quad (4.40)$$

όπου $n_l(m_l^z)$ και $n_{\mathbf{Q},l}(m_{\mathbf{Q},l}^z)$ η ομοιόμορφη και διαμορφωμένη κατά $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ πυκνότητα φορτίου(μαγνήτισης κατά τον z άξονα στον χώρο σπιν) και $n = n_x n_y$ ο αριθμός των πλεγματικών σημείων για κάθε στρώμα. Τα δυναμικά για κάθε μέσο πεδίο προκύπτουν από τα δυναμικά αλληλεπίδρασης της Χαμιλτονιανής Εξ. 4.34 στον χώρο των θέσεων μέσω των παρακάτω σχέσεων

$$\begin{aligned} V_{N,l} &= \frac{U}{2} + 4V_1 + 4V_2 & V_{M,l} &= -\frac{U}{2} + J_1 + J_2 \\ V_{N_{\mathbf{Q}},l} &= \frac{U}{2} - 4V_1 + 4V_2 & V_{M_{\mathbf{Q}},l} &= -\frac{U}{2} - J_1 + J_2, \end{aligned} \quad (4.41)$$

όπου U , V_1, J_1 και V_2, J_2 τα δυναμικά αλληλεπίδρασης μεταξύ του ίδιου σημείου, των κοντινότερων και των αμέσως επόμενων κοντινότερων πλεγματικών θέσεων αντίστοιχα. Βάσει του συγκεκριμένου μοντέλου και των παραπάνω εξισώσεων, τα δυναμικά για κάθε μέσο πεδίο σχετίζονται μεταξύ τους μέσω των δυναμικών αλληλεπίδρασης. Σημειώνουμε όμως ότι εν γένει τα δυναμικά για κάθε μέσο πεδίο μπορούν να αποκτήσουν ανεξάρτητες μεταξύ τους τιμές, καθώς μπορούν να σχετίζονται με διαφορετικούς μικροσκοπικούς μηχανισμούς. Οι πυκνότητες φορτίου και σπιν υπολογίζονται μέσω των παρακάτω εξισώσεων αυτοσυνέπειας

$$\langle n_l \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [U(\mathbf{k}) \delta_{l,l} U^\dagger(\mathbf{k})]_{nn} n_F(E_n(\mathbf{k})), \quad \langle m_l^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [U(\mathbf{k}) \delta_{l,l} \sigma_z U^\dagger(\mathbf{k})]_{nn} n_F(E_n(\mathbf{k}))$$

$$\langle n_l^Q \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [U(\mathbf{k}) \delta_{l,l} \rho_x U^\dagger(\mathbf{k})]_{nn} n_F(E_n(\mathbf{k})), \quad \text{quad} \langle m_l^{z,Q} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [U(\mathbf{k}) \delta_{l,l} \rho_x \sigma_z U^\dagger(\mathbf{k})]_{nn} n_F(E_n(\mathbf{k})), \quad (4.42)$$

όπου n ο δείκτης ιδιοενεργειών του συστήματος, $U(\mathbf{k}, N_l, M_l^z, N_l^Q, M_l^{z,Q}) \equiv U(\mathbf{k})$ η μοναδιαία μήτρα του μετασχηματισμού που διαγωνοποιεί τη Χαμιλτονιανή $U(\mathbf{k})H(\mathbf{k})U^\dagger(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})$ για κάθε ορμή \mathbf{k} , ενώ $E(\mathbf{k})$ η μήτρα των αντίστοιχων ιδιοτιμών.

Για την ανάλυση των αποτελεσμάτων μας υπολογίζουμε επίσης την πυκνότητα καταστάσεων (DOS) για κάθε στρώμα. Η πυκνότητα καταστάσεων για κάθε πόλωση του σπιν προκύπτει από την παρακάτω εξίσωση

$$D_{l,s}(\epsilon) = \frac{1}{4n} \sum_{n,\mathbf{k}} U(\mathbf{k})^\dagger \hat{P}_{l,s} U(\mathbf{k}) \frac{\Gamma}{[E_n(\mathbf{k}) - \epsilon]^2 + \Gamma^2}, \quad (4.43)$$

όπου $\hat{P}_{l,s} = [\delta_{l,l}] (\hat{\sigma}_0 + s \hat{\sigma}_3)$ ο τελεστής προβολής σε κάθε στρώμα l και σπιν s , με $[\delta_{l,l}]$ την ταυτότική μήτρα $n_L \times n_L$ διαστάσεων που δρα στον χώρο των στρωμάτων, ενώ έχουμε επιλέξει $\Gamma = 0.01t$ για τον χρόνο ζωής των οιονεί-σωματιδίων. Επιπλέον υπολογίζουμε την παράλληλη προς το επίπεδο της διεπαφής dc αγωγιμότητα στην προσέγγιση γραμμικής απόκρισης μέσω της σχέσης Kubo. Όπως παρουσιάζεται και αναλυτικότερα στο Υπόμνημα Α', ο αντίστοιχος τελεστής ρεύματος για κάθε στρώμα προκύπτει από τη σχέση συνέχειας του ηλεκτρικού φορτίου και αποκτά την παρακάτω μορφή

$$j^{\parallel}(\mathbf{q}, l, t) = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger \hat{N}_r \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},l}, \quad (4.44)$$

όπου \hat{N}_r ο τελεστής της τοπικής πυκνότητας φορτίου. Η αγωγιμότητα στο επίπεδο των στρωμάτων ορίζεται βάσει της παρακάτω εξίσωσης

$$j(\mathbf{q}, z)^\mu = \int dz' \sigma(\mathbf{q}, z, z')^{\mu,\nu} E(\mathbf{q}, z')^\nu, \quad (4.45)$$

όπου z οι συντεταγμένες στην κάθετη και $\mu(\nu) = x, y$ στην παράλληλη προς το επίπεδο της διεπαφής διεύθυνση. Για ένα ομοιόμορφο κατά την κάθετη διάσταση z ηλεκτρικό πεδίο, μπορούμε να ορίσουμε την αντίστοιχη αγωγιμότητα στο επίπεδο των στρωμάτων μέσω της σχέσης

$$\sigma(\mathbf{q}, z)^{\mu,\nu} = \int dz' \sigma(\mathbf{q}, z, z')^{\mu,\nu} \rightarrow \sigma(\mathbf{q}, l)^{\mu,\nu} = \sum_{l'} \sigma(\mathbf{q}, l, l')^{\mu,\nu}, \quad (4.46)$$

όπου η δεύτερη γραμμή αντιστοιχεί στο διακριτό όριο για τη διάσταση z . Καθώς το σύστημά μας έχει την τετραγωνική συμμετρία ισχύει $\sigma^{xx} = \sigma^{yy}$. Βάσει της Χαμιλτονιανής Εξ. 4.38 προκύπτει ο τελεστής ρεύματος για τη διεύθυνση του άξονα x , $j_x(\mathbf{q}, l) \propto \sin k_x \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k},l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},l}$. Η έκφραση

για την ομοιόμορφη αγωγιμότητα σ_i^{xx} για κάθε στρώμα, προκύπτει από το φανταστικό μέρος του ταυστή συσχέτισης ρεύματος-ρεύματος $\Pi^{xx}(l, l', \mathbf{q}, t' - t) = -i\theta(t - t') \langle [j_x(\mathbf{q}, l, t), j_x(-\mathbf{q}, l, t')] \rangle$, στο όριο $\mathbf{q} = \omega = 0$

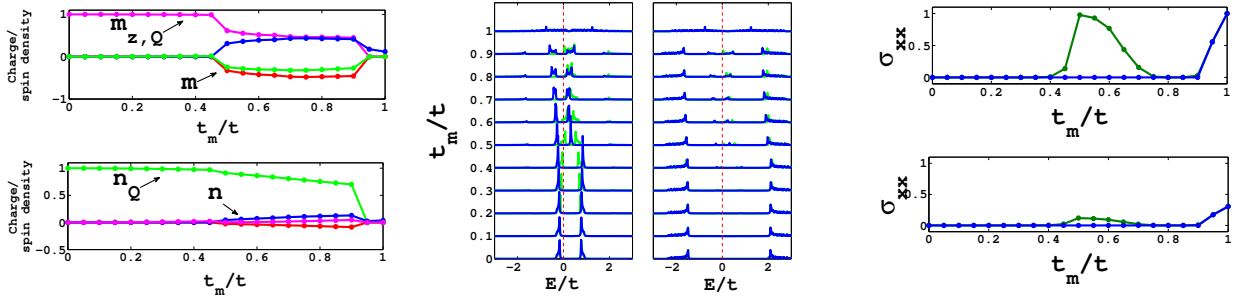
$$\sigma_i^{xx} \propto \sum_{l', \mathbf{k}, n} \sin^2 k_x a_{nn}^l a_{nn}^{l'} n_F(E_{\mathbf{k}, n}) [1 - n_F(E_{\mathbf{k}, n})], \quad (4.47)$$

όπου $a^l = U(\mathbf{k})^\dagger [\delta_{l, l'}] U(\mathbf{k})$ και $n_F(E_{\mathbf{k}, n}) = [1 + e^{\beta E_{\mathbf{k}, n}}]^{-1}$ η κατανομή Fermi-Dirac και n ο δείκτης των ενεργειακών υποζωνών. Με ανάλογο τρόπο προκύπτει η αγωγιμότητα στο επίπεδο των στρωμάτων για κάθε πόλωση του σπιν

$$\sigma_{l, s}^{xx} \propto \sum_{l', \mathbf{k}, n} \sin^2 k_x a_{nn}^{l, s} a_{nn}^{l', s} n_F(E_{\mathbf{k}, n}) [1 - n_F(E_{\mathbf{k}, n})], \quad (4.48)$$

όπου $a^{l, s} = U(\mathbf{k})^\dagger [\delta_{l, l'} (\sigma_0 + s\sigma_z)] U(\mathbf{k})$. Σημειώνουμε ότι καθώς η γενική Χαμιλτονιανή Εξ. 4.38 έχει μπλοκ διαγώνια μορφή στον χώρο του σπιν ή ισοδύναμα η πόλωση του σπιν αποτελεί καλό κβαντικό αριθμό, ισχύει $a_{nn}^{l, s} a_{nn}^{l', s'} = 0$.

4.3.2 Ετεροδομές SDW/CDW δύο στρωμάτων



Σχήμα 4.14: Διεπαφή (001) μεταξύ δύο στρωμάτων στις κβαντικές καταστάσεις τάξης κύματος πυκνότητας σπιν SDW (πάνω στρώμα) και φορτίου CDW (κάτω στρώμα). Θεωρήσαμε απωστικό δυναμικό $U = 10t_S$ με $t_S = 0.1$ για το στρώμα SDW και ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων $V = t_C$, όπου $t_C = 0.5$ το ολοκλήρωμα μεταφορά μεταξύ κοντινότερων γειτόνων για το στρώμα CDW. α) Οι συσχετίσεις $m^{z, Q}$ (μωβ χρώμα) και n^Q (πράσινο χρώμα) για τα κύματα πυκνότητας σπιν και φορτίου αντίστοιχα, η ομοιόμορφη μαγνήτιση m^z (κόκκινο χρώμα) και η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής $1 - n$ (μπλε χρώμα), συναρτήσε το όρου σύζευξης t_m για $\mu = 0.15$ και $t'_m = 0$. Για τιμές σύζευξης μεγαλύτερες από μια κρίσιμη τιμή εμφανίζονται ταυτόχρονα η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής και η μαγνήτιση. Το βαθμωτό δυναμικό μ σε συνδυασμό με τα πεδία $M^{z, Q}$ και N^Q επάγει ένα πεδίο Zeeman, h_z , με αποτέλεσμα την εμφάνιση μαγνήτισης όταν η μαγνητική επιδεκτικότητα του συστήματος αποκτά πεπερασμένη τιμή. Από β) την πυκνότητα καταστάσεων για πόλωση σπιν \uparrow (μπλε γραμμή) και \downarrow (πράσινη γραμμή) και γ) την ομοιόμορφη dc αγωγιμότητα στη διεύθυνση του επιπέδου διεπαφής, όπου σπιν \uparrow (μπλε γραμμή) και \downarrow (μαύρη γραμμή), παρατηρούμε την εμφάνιση μιας σιδηρομαγνητικής ημι-μεταλλικής ή μονωτικής φάσης.

Αρχικά διερευνούμε τις ιδιότητες μιας (001) διεπαφής SDW/CDW βασιζόμενοι στο πιο απλό μοντέλο δύο στρωμάτων, ένα στην κατάσταση κύματος πυκνότητας φορτίου και ένα στην κατάσταση κύματος πυκνότητας σπιν. Στο μοντέλο αυτό τα δύο στρώματα συζεύγονται μέσω όρων μεταπήδησης στην ίδια πλεγματική θέση μεταξύ γειτονικών στρωμάτων. Το παραπάνω μοντέλο περιγράφεται από την ακόλουθη γενική Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [\boldsymbol{\mu} + \delta_{\mathbf{k}} + s h_z \sigma_z + N^Q (\kappa_0 - \kappa_z) \rho_x + M^Q (\kappa_0 + \kappa_z) \rho_x \sigma_z + t_m \kappa_x + t'_m [\cos(k_x) + \cos(k_y)] \kappa_x \tau_z] \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (4.49)$$

όπου $\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (\Psi_{\mathbf{k},+}^{\dagger}, \Psi_{\mathbf{k},-}^{\dagger})$ με $\Psi_{\mathbf{k},+(-)}$, ο σπινόρας για κάθε στρώμα και κ οι μήτρες Pauli που δρουν στον χώρο των στρωμάτων. Το ενεργειακό φάσμα του συστήματος για $t'_m = 0$ έχει την παρακάτω μορφή

$$E_{s,m,p}(\mathbf{k}) = -sh_z + \mu + \delta_k + m \frac{\sqrt{2(\gamma_k^2 + t_m^2) + [N^{\mathbf{Q}}]^2 + [M^{\mathbf{Q}}]^2 + p\sqrt{B}}}{\sqrt{2}}$$

$$B = [[N^{\mathbf{Q}}]^2 - [M^{\mathbf{Q}}]^2]^2 + 4(4\gamma_k^2 + [N^{\mathbf{Q}} - sM^{\mathbf{Q}}]^2)t_m^2, \quad (4.50)$$

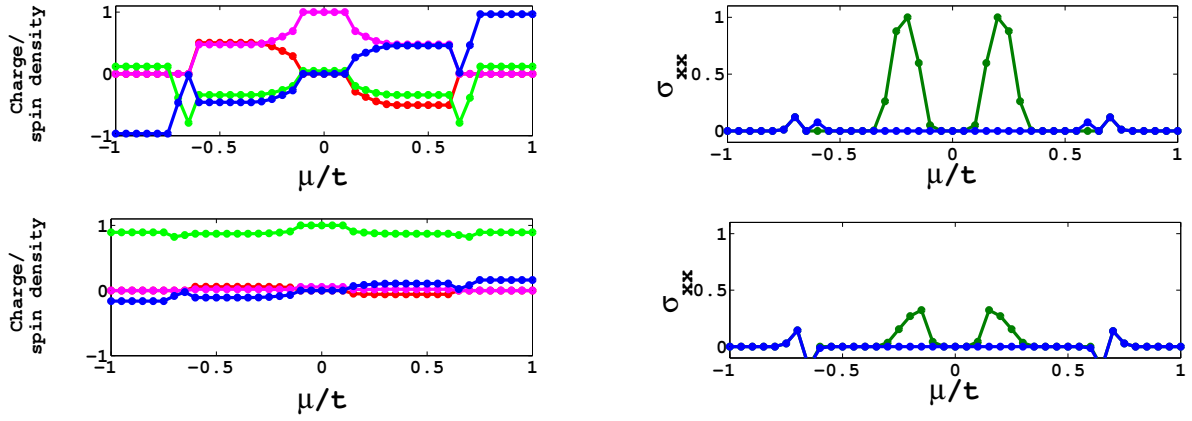
όπου $s = +(-)$ για πόλωση του σπιν πάνω(κάτω), $m = +(-)$ για $\mathbf{k}(\mathbf{k}+\mathbf{Q})$, όταν $M^{\mathbf{Q}} = M^{\mathbf{Q}} = 0$ και $p = +(-)$ για το στρώμα SDW (CDW), όταν $t_m = 0$. Καθώς για $t'_m \neq 0$ οι ιδιοενέργειες του συστήματος δεν έχουν εν γένει αναλυτική μορφή, για να αναγνώρισουμε τις συνέπειες της σύζευξης των δύο καταστάσεων θεωρούμε αρχικά το όριο $N^{\mathbf{Q}} = M^{\mathbf{Q}}$ και $\mu = h_z = 0$. Στην περίπτωση αυτή, οι ιδιοενέργειες του συστήματος προκύπτουν από την παρακάτω εξίσωση

$$E_{+,m,\pm}(\mathbf{k}) = m\sqrt{(\gamma_k \pm t_m)^2 + [N^{\mathbf{Q}}]^2} \quad E_{-,m,\pm}(\mathbf{k}) = m[\sqrt{(\gamma_k^2 + N^{\mathbf{Q}})^2 \pm t_m}]. \quad (4.51)$$

Παρατηρούμε ότι το ενεργειακό χάσμα για τις δύο πολώσεις του σπιν διαχωρίζεται για $t_m \neq 0$ ως συνέπεια της συνύπαρξης των δύο καταστάσεων τάξης. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, το ενεργειακό χάσμα για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow μειώνεται κατά τον όρο σύζευξης t_m , ενώ για διεγέρσεις με σπιν \uparrow το ενεργειακό χάσμα παραμένει αμετάβλητο. Επομένως, ο διαχωρισμός του ενεργειακού χάσματος για κάθε πόλωση του σπιν που παρατηρούμε στη μικτή $SDW + CDW$ φάση για συστήματα ενός στρώματος, επεκτείνεται όπως αναμενόταν και στις (001) διεπαφές μεταξύ των συγκεκριμένων καταστάσεων. Παρατηρούμε ότι απουσία κινητικών όρων, δηλαδή $\gamma_{\mathbf{k}} = 0$ για τη συγκεκριμένη περίπτωση, σύμφωνα με την Εξ. 4.51 οι ιδιοενέργειες $E_{+,m,\pm}$ αντιστοιχούν στον υβριδισμό δύο εκφυλισμένων καταστάσεων, ενώ οι ιδιοενέργειες $E_{-,m,\pm}$ προκύπτουν από τον υβριδισμό καταστάσεων αντίθετης ενέργειας. Συγκεκριμένα στις διεπαφές SDW/CDW τα παραπάνω ζεύγη ιδιοενεργειών αντιστοιχούν σε αντίθετες πολώσεις του σπιν, οι $E_{+,m,\pm}$ για σπιν \uparrow , ενώ οι $E_{-,m,\pm}$ σπιν \downarrow . Σημειώνουμε ότι η σύζευξη μεταξύ των στρωμάτων συμβαίνει μέσω καταστάσεων με ίδια πόλωση του σπιν. Πράγματι στη συγκεκριμένη περίπτωση, η τοπική πυκνότητα του σπιν \uparrow στο στρώμα SDW είναι σε φάση με την πυκνότητα φορτίου στο στρώμα CDW και συνεπώς για $N^{\mathbf{Q}} \sim M^{\mathbf{Q}}$ η σύζευξη μεταξύ των στρωμάτων παρομοιάζει σε κάθε πλεγματοτική θέση τον υβριδισμό εκφυλισμένων καταστάσεων. Οι κινητικοί όροι διασποράς $\gamma_{\mathbf{k}}$ απλά τροποποιούν τη σύζευξη των καταστάσεων αυτών συναρτήσει της ορμής στο επίπεδο της διεπαφής. Αντίθετα, η πυκνότητα σπιν \downarrow στο στρώμα SDW είναι σε φάση π σε σχέση με την πυκνότητα φορτίου στο στρώμα CDW επομένως τοπικά ο υβριδισμός γίνεται μέσω καταστάσεων με αντίθετη ενέργεια. Οι κινητικοί όροι στην περίπτωση αυτή απλά οδηγούν στη διασπορά των συγκεκριμένων ιδιοενεργειών. Προφανώς οι ενεργειακές ζώνες για κάθε πόλωση του σπιν εναλλάσσονται στην περίπτωση $N^{\mathbf{Q}} = -M^{\mathbf{Q}}$ ή ισοδύναμα τα κύματα πυκνότητας είναι σε σχετική φάση π . Σύμφωνα με την παραπάνω προσέγγιση, αναμένουμε οι παραπάνω ενεργειακές ζώνες να εναλλάσσουν πολώσεις του σπιν αν αντί για ένα όρο ζεύξης μεταξύ ίδιων πλεγματοτικών θέσεων στο επίπεδο θεωρήσουμε όρους ζεύξης μεταξύ των κοντινότερων γειτονικών σημείων σε γειτονικά στρώματα. Πράγματι, οι ιδιοενέργειες στις δύο αυτές περιπτώσεις συνδέονται μέσω των παρακάτω σχέσεων

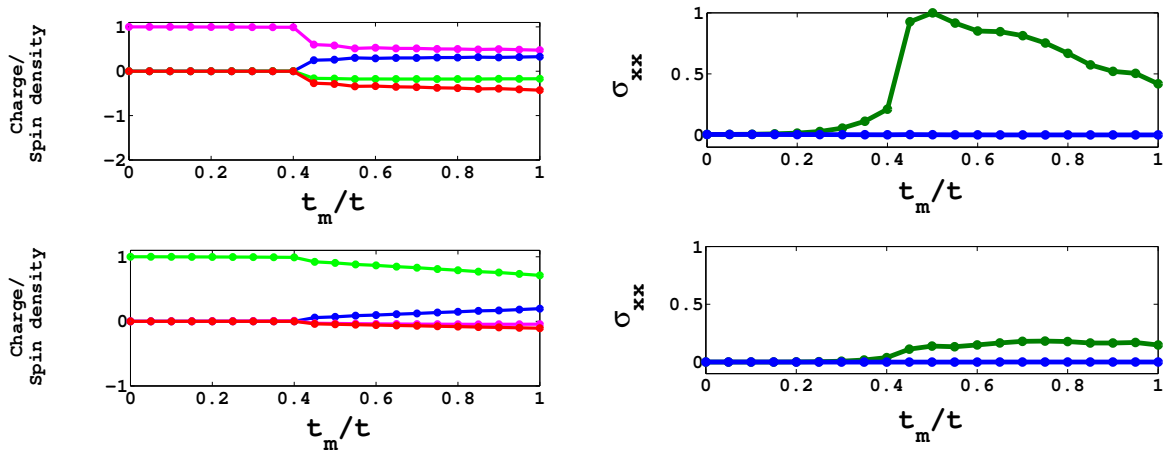
$$E_{s,m,p}(\mathbf{k}, t_m \neq 0, t'_m = 0) = E_{s',m,p}(\mathbf{k}, t_m = 0, t'_m \neq 0) \quad (4.52)$$

Στην περίπτωση που και οι δύο παραπάνω όροι ζεύξης είναι παρόν στο σύστημα αναμένουμε το ενεργειακό χάσμα να μεταβληθεί και για τις δύο πολώσεις του σπιν. Παρακάτω παρουσιάζουμε πως ο διαχωρισμός του ενεργειακού χάσματος για κάθε πόλωση του σπιν ευθύνεται για την εμφάνιση φαινομένων ιδιαίτερου ενδιαφέροντος στις διεπαφές (001) SDW/CDW.



Σχήμα 4.15: αριστερά) Τα διαγράμματα φάσης όπου παρουσιάζονται οι συσχετίσεις n_l (μπλε γραμμή), m_l^z (κόκκινη γραμμή), n_l^Q (πράσινη γραμμή), $m_l^{z,Q}$ (μωβ γραμμή) και δεξιά) η dc αγωγιμότητα στο επίπεδο της διεπαφής, συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ για την περίπτωση του Σχ.4.14 με $t_m = 0.35$ και $t'_m = 0$. Παρατηρούμε τη συμμετρία του διαγράμματος ως προς $\mu = 0$. Για $|\mu| = 0.1$ παρατηρούμε μια μετάβαση από μονωτή Mott σε ημι-μεταλλικό σιδηρομαγνήτη (MI-FHM), ενώ για $|\mu| = 0.3$ μια μετάβαση από μονωτή Mott, σε μονωτικό σιδηρομαγνήτη(MI-FI). Η πόλωση της επαγόμενης μαγνήτισης μπορεί να ελεγχθεί μέσω της εφαρμογής τάσης πύλης που ρυθμίζει το μ .

Επιπλέον παρατηρούμε ότι για τις ιδιοενέργειες του συστήματος ισχύει $E_{s,\pm,p}(\mathbf{k}, \mu + \delta_k) = -E_{s,\mp,p}(\mathbf{k}, -(\mu + \delta_k))$ και $E_{s,\pm,p}(\mathbf{k}, h_z) = -E_{s,\mp,p}(\mathbf{k}, -h_z)$ για $h_z(\mu + \delta_k) = 0$ και $t_m t'_m = 0$ και επομένως οι πυκνότητες φορτίου και σπιν, είναι στην περίπτωση αυτή συμμετρικές ως προς το χημικό δυναμικό και το πεδίο Zeeman. Επίσης, λόγω των σχέσεων $E_{+,\pm,p}(\mathbf{k}, \mu + \delta_k) = -E_{+,\mp,p}(\mathbf{k}, h_z)$ και $E_{-,\pm,p}(\mathbf{k}, \mu + \delta_k) = E_{-,\pm,p}(\mathbf{k}, h_z)$ για $\mu + \delta_k = h_z$, τα διαγράμματα φάσης ως προς $\mu + \delta_k$ και h_z είναι ταυτόσημα όταν $(\mu + \delta_k)h_z = 0$. Σημειώνουμε ότι οι παραπάνω συμμετρίες δεν ισχύουν όταν και οι δύο όροι σύζευξης t_m και t'_m είναι πεπερασμένοι.



Σχήμα 4.16: Διεπαφή (001) SDW (πάνω στρώμα)/CDW (κάτω στρώμα) δύο στρωμάτων με $U = 6t_s$ (SDW) και $V = t_C$ (CDW) όπου $t_s = t_C = 0.5$ για τους κινητικούς όρους κάθε στρώματος. Αυξάνοντας τη σύζευξη t_m των δύο στρωμάτων παρατηρούμε την ανάμειξη των κυμάτων πυκνότητας φορτίου (πράσινο χρώμα) και σπιν (μωβ χρώμα) και την εμφάνιση ομοιόμορφης μαγνήτισης (κόκκινο χρώμα) ταυτόχρονα με ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής (μπλε χρώμα). Καθώς αυξάνεται η σύζευξη των δύο στρωμάτων, παρατηρούμε μια μετάβαση FHM-FI στη διεπαφή. Τα αποτελέσματα είναι ποιοτικά ίδια με αυτά της περίπτωσης που παρουσιάστηκε στο Σχ. 4.14.

Εν συνεχεία παρουσιάζουμε ενδεικτικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την αριθμητική επίλυση του συστήματος για συγκεκριμένες περιπτώσεις, τα οποία επιβεβαιώνουν τις παραπάνω παρατηρήσεις και αποκαλύπτουν τις ενδιαφέρουσες ιδιότητες των (001) SDW/CDW διεπαφών. Οι

φάσεις κύματος πυκνότητας φορτίου και σπιν εμφανίζουν γενικά μεγάλη κρίσιμη θερμοκρασία και τα αντίστοιχα ενεργειακά χάσματα ΔE του φάσματος μονοσωματιδιακών διεγέρσεων είναι γενικά συγκρίσιμα με το εύρος, $W = 8t$, των ενεργειακών ζωνών του συστήματος στην κανονική φάση. Για τον λόγο αυτό επιλέξαμε δυναμικά αλληλεπίδρασης συγκρίσιμα ή μεγαλύτερα από το ολοκλήρωμα μεταφοράς μεταξύ κοντινότερων γειτονικών σημείων στο ίδιο επίπεδο. Συγκεκριμένα παρουσιάζουμε τις παρακάτω δύο περιπτώσεις

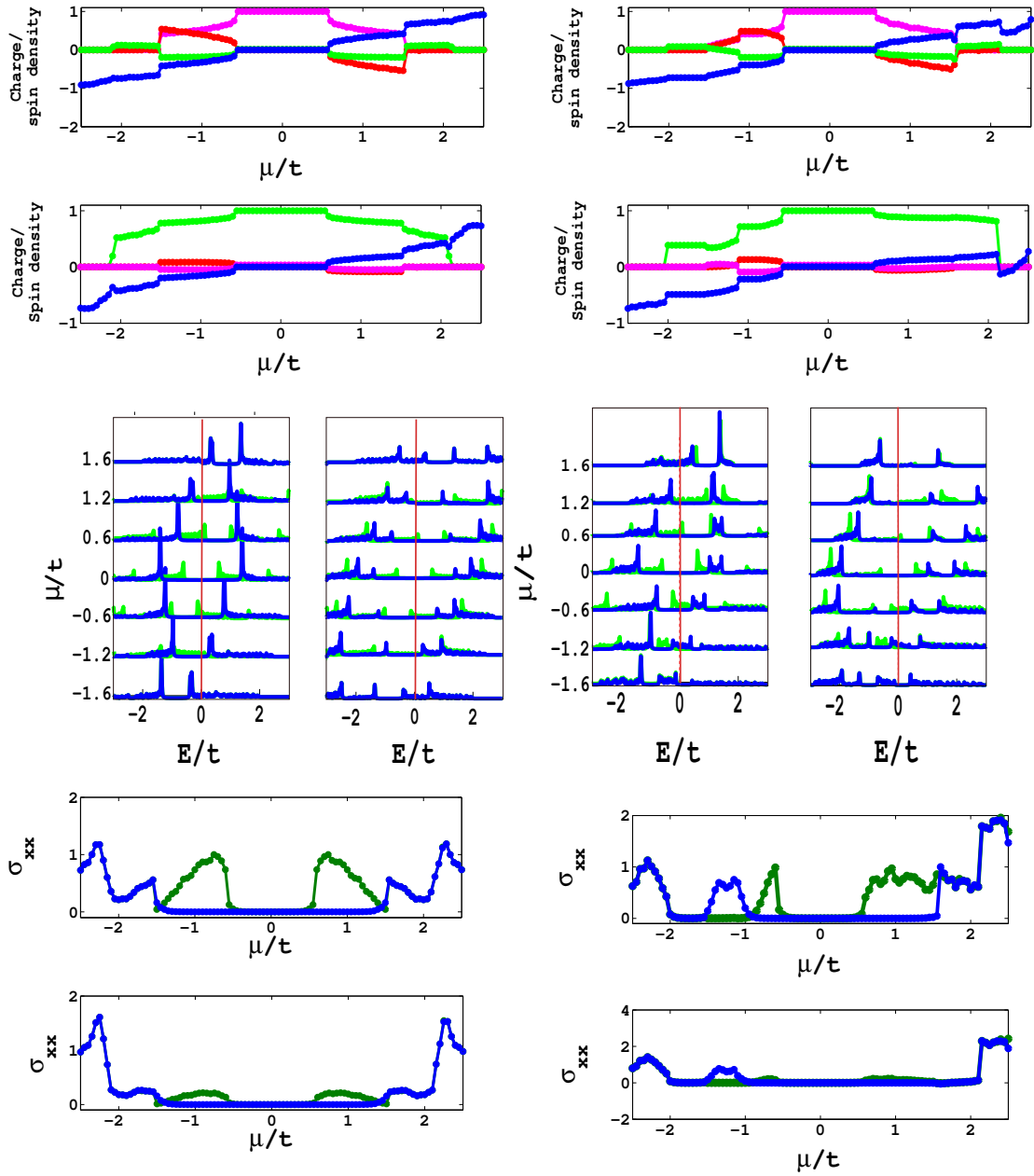
- $U = 10t_S$ ($\Delta E/W \sim 1.1$) για το στρώμα SDW και $V = t_C$ ($\Delta E/W \sim 0.9$) για το στρώμα CDW με $t_C/t_S = 5$
- $U = 6t_S$ ($\Delta E/W \sim 0.6$) για το στρώμα SDW και $V = t_C$ για το στρώμα CDW με $t_C = t_S = t$,

όπου ο λόγος ενεργειακού χάσματος ως προς το εύρος των ενεργειακών ζωνών $\Delta E/W$ αντιστοιχεί για μέση πυκνότητα φορτίου $n = 1$. Στην πρώτη περίπτωση το εύρος της ενεργειακής ζώνης του στρώματος SDW είναι σημαντικά μικρότερο του αντίστοιχου για το στρώμα CDW και μικρότερο ακόμα και από το αντίστοιχο ενεργειακό χάσμα. Σημειώνουμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις προκύπτει ένα απωστικό δυναμικό στο κανάλι της ομοιόμορφης πυκνότητας φορτίου το οποίο επιδρά ως ένας όρος χημικού δυναμικού (Εξ. 4.41). Για να ταυτίσουμε την τιμή $\mu = 0$ με την πυκνότητα σωματιδίων $n = 1$ ορίζουμε ως χημικό δυναμικό τον όρο $\mu'_i = \mu + V_i$, όπου έχουμε αφαιρέσει το συγκεκριμένο απωστικό δυναμικό. Με τον τρόπο αυτό το επίπεδο Fermi είναι το ίδιο και για τα δύο στρώματα αν και ποιοτικά ίδια αποτελέσματα παρατηρούνται και στην αντίθετη περίπτωση. Και στις δύο παραπάνω επιλογές τα δυναμικά αλληλεπίδρασης αντιστοιχούν σε ελκτικό (απωστικό) δυναμικό για διαμορφωμένη (ομοιόμορφη) πυκνότητα για το κανάλι σπιν(φορτίου) στο στρώμα SDW και ελκτικό (απωστικό) δυναμικό για διαμορφωμένη (ομοιόμορφη) πυκνότητα φορτίου στο στρώμα CDW. Τέλος, σε κάθε περίπτωση το δυναμικό στο κανάλι της ομοιόμορφης μαγνήτισης είναι ελκτικό και ίσο με αυτό του κύματος πυκνότητας σπιν μόνο στο στρώμα SDW. Τα παραπάνω συνοψίζονται στις ακόλουθες σχέσεις που προκύπτουν από την Εξ. 4.41

$$\begin{aligned} V_N = V_{N_Q} = -V_M = -V_{M_Q} = U/2 \quad (SDWlayer) \\ V_N = -V_{N_Q} = 4V, \quad V_M = V_{M_Q} = 0 \quad (CDWlayer). \end{aligned} \quad (4.53)$$

Συγκεκριμένα, για την πρώτη περίπτωση στο Σχ. 4.14 που αντιστοιχεί σε χημικό δυναμικό $\mu = 1.5t_S$ παρατηρούμε ότι καθώς αυξάνεται η σύζευξη μεταξύ των στρωμάτων, το ενεργειακό χάσμα για τις δύο πολώσεις του σπιν διαχωρίζεται και για σύζευξη ισχυρότερη από μια κρίσιμη τιμή, $t_m > 0.6$, εμφανίζεται μια επιφάνεια Fermi μόνο για τις διεγέρσεις του συστήματος με σπιν \uparrow . Η συγκεκριμένη μετάβαση συνοδεύεται και από την εμφάνιση μαγνήτισης. Συνεπώς, καθώς η σύζευξη t_m μεταξύ των στρωμάτων αυξάνεται, παρατηρούμε μια μετάβαση από τη μονωτική φάση Mott (MI) σε μια σιδηρομαγνητική ημιμεταλλική φάση (FHM). Η μετάβαση αυτή επιβεβαιώνεται και από την dc αγωγιμότητα στο επίπεδο της διεπαφής. Περαιτέρω αύξηση της σύζευξης των δύο στρωμάτων καταστρέφει την τάξη κυμάτων πυκνότητας και το σύστημα μεταβαίνει στην κανονική κατάσταση. Για $\mu = 3t_S$ παρατηρούμε επίσης μια μετάβαση από την ημι-μεταλλική φάση σε μια σιδηρομαγνητική μονωτική φάση (FI) για $t_m \sim 0.75$.

Ακόμα πιο ενδιαφέρον είναι ότι οι συγκεκριμένες μεταβάσεις παρατηρούνται καθώς μεταβάλλεται το χημικό δυναμικό, το οποίο μπορεί να ρυθμιστεί μέσω εφαρμογής τάσεων πύλης στη διεπαφή. Από το Σχ. 4.17, το οποίο αντιστοιχεί σε σύζευξη $t_m = 0.4$ μεταξύ των στρωμάτων, παρατηρούμε μια MI-FHM μετάβαση για $|\mu| \sim t_S$. Επιπλέον, παρατηρούμε τη συμμετρία του διαγράμματος φάσης ως προς $\mu = 0$ και συγκεκριμένα παρατηρούμε ότι ισχύει $M_z(\mu) = -M_z(-\mu)$ για την επαγόμενη μαγνήτιση. Ενώ η πόλωση της μαγνήτισης αλλάζει, η εμφανιζόμενη σε κάθε περίπτωση επιφάνεια Fermi σχετίζεται μόνο με διεγέρσεις με πόλωση του σπιν \uparrow . Συνεπώς, η αλλαγή της πόλωσης της μαγνήτισης δεν αντιστοιχεί σε αλλαγή της πόλωσης του σπιν των διεγέρσεων χαμηλής ενέργειας του συστήματος.



Σχήμα 4.17: Το διάγραμμα φάσης ως προς μ για την περίπτωση που παρουσιάστηκε στο Σχ. 4.16 και σύζευξη μεταξύ ίδιων πλεγματικών θέσεων σε διαδοχικά στρώματα $t_m = 0.4$, ενώ επιπλέον θεωρούμε $t'_m = 0$ (αριστερά) και $t'_m = 0.2$ (δεξιά) για διαστρωματική σύζευξη μεταξύ κοντινότερων γειτόνων. Και στην περίπτωση αυτή τα αποτελέσματα παραμένουν ποιότητα τα ίδια με αυτά που παρουσιάστηκαν για την περίπτωση του Σχ. 4.15. Για $t'_m = 0$ παρατηρούμε την αναμενόμενη συμμετρία των αποτελεσμάτων ως προς $\mu = 0$, ενώ αντίθετα για $t'_m = 0.2$ η ασυμμετρία των αποτελεσμάτων ως προς $\mu = 0$ παρουσιάζεται, τόσο στην DOS, όσο και στην dc αγωγιμότητα. Ιδιαίτερα σημαντικό είναι ότι στη δεύτερη περίπτωση όπου $t'_m = 0.4$, παρατηρούμε ότι μεταβάλλοντας το χημικό δυναμικό μπορούμε να αντιστρέψουμε την πόλωση του σπιν των διεγέρσεων χαμηλής ενέργειας του συστήματος. Λόγω της συγκεκριμένης ιδιότητας, οι ετεροδομές SDW/CDW αναμένεται να έχουν σημαντικές εφαρμογές στη σπιντρονική.

Αξιοσημείωτο είναι όμως ότι τέτοιες μεταβάσεις μεταξύ ημιμεταλλικών φάσεων, των οποίων η επιφάνεια Fermi αναφέρεται σε διεγέρσεις με αντίθετη πόλωση του σπιν, παρατηρούνται καθώς μεταβάλλουμε το χημικό δυναμικό, αν επιπλέον η σύζευξη των στρωμάτων γίνεται με όρους μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων. Στην περίπτωση αυτή βέβαια το διάγραμμα φάσης ως προς το χημικό δυναμικό δεν παρουσιάζει κάποια συμμετρία (Σχ. 4.17). Σημειώνουμε ότι οι μεταβάσεις αυτές μπορούν να βρουν ενδιαφέρουσες εφαρμογές στην τεχνολογία σπιντρονικής.

Στις παραπάνω περιπτώσεις του μοντέλου Hubbard το δυναμικό αλληλεπίδρασης στην ίδια

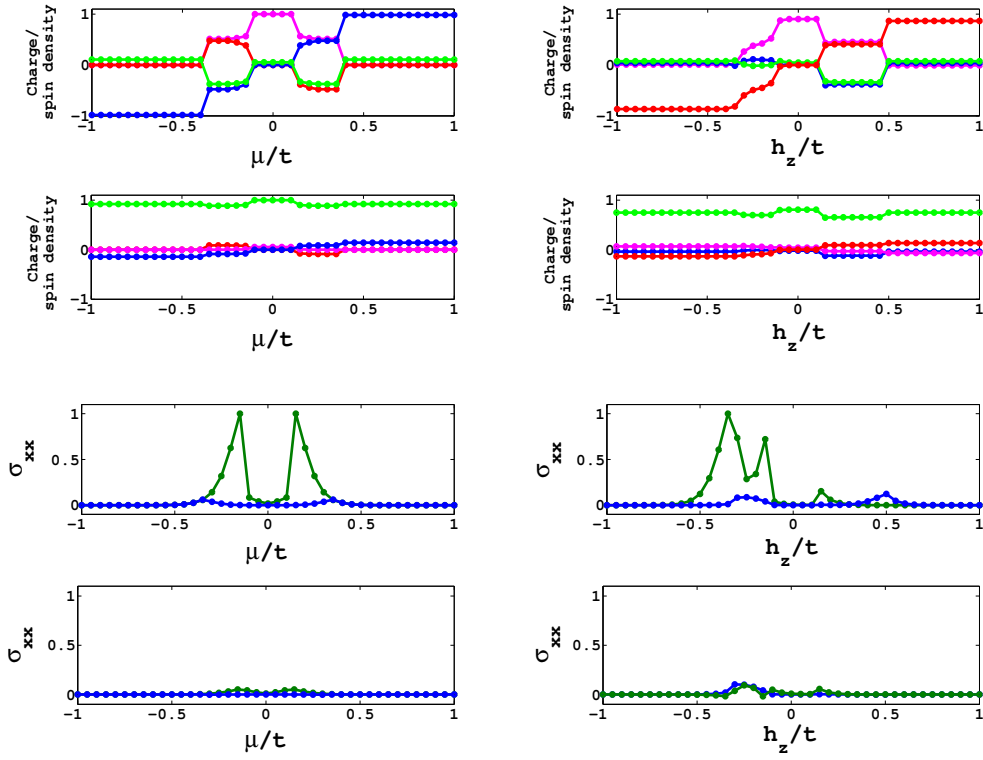
πλεγματική θέση στο στρώμα SDW αντιστοιχεί σε ένα ελκτικό δυναμικό για τη σιδηρομαγνητική φάση και σε ένα απωστικό δυναμικό για τα πεδία στο κανάλι πυκνότητας φορτίου. Ανάλογα, η αλληλεπίδραση κοντινότερων γειτόνων που θεωρήθηκε για το στρώμα CDW αντιστοιχεί σε ένα απωστικό δυναμικό για την ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής αλλά δε σχετίζεται καθόλου με το κανάλι της πυκνότητας σπιν. Σημειώνουμε ότι εξετάσαμε επίσης περιπτώσεις του μοντέλου Hubbard για τις οποίες τα δυναμικά αλληλεπίδρασης οδηγούν σύμφωνα με την Εξ. 4.41 σε απωστικά δυναμικά για την ομοιόμορφη πυκνότητα τόσο του φορτίου όσο και του σπιν, σε ελκτικά όμως δυναμικά για τα κύματα πυκνότητας. Στις περιπτώσεις αυτές θεωρήσαμε πεπερασμένες τιμές για το δυναμικό J που σχετίζεται με αλληλεπιδράσεις εναλλαγής σπιν μεταξύ κοντινότερων γειτόνων. Σημειώνουμε ότι τα αποτελέσματα και σε αυτές τις περιπτώσεις είναι ποιοτικά ίδια με αυτά που παρουσιάστηκαν παραπάνω.

Στις προηγούμενες παραγράφους η ανάλυσή μας βασίστηκε στο εκτεταμένο μοντέλο Hubbard θεωρώντας συγκεκριμένες τιμές για τα δυναμικά αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων. Στην παρούσα παράγραφο, επιβεβαιώνουμε ότι οι ιδιότητες των (001) SDW/CDW ετεροδομών ως προς τα επαγόμενα στην διεπαφή πεδία, είναι ανεξάρτητες του συγκεκριμένου μοντέλου και αποτελούν ιδιότητες που προκύπτουν λόγω της φύσης των συγκεκριμένων καταστάσεων τάξης. Για τον λόγο αυτό διερευνούμε SDW/CDW διεπαφές θεωρώντας δυναμικά των μέσω πεδίων που δε συνδέονται μέσω των σχέσεων Εξ. 4.41 και μάλιστα είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους. Αρχικά εξετάζουμε ένα μινιμαλιστικό μοντέλο στο οποίο πεπερασμένα δυναμικά θεωρούνται μόνο για τα κύματα πυκνότητας σπιν (φορτίου) $m^{z,Q}(n^Q)$ μόνο στο στρώμα SDW (CDW). Το μοντέλο αυτό αντιστοιχεί στη Χαμιλτοιανή Εξ. 4.49 για την οποία έχουμε ήδη παρουσιάσει κάποια αποτελέσματα για την ειδική περίπτωση όπου $N^Q \sim M^{z,Q}$. Στο Σχ. 4.18 παρουσιάζουμε ενδεικτικά αποτελέσματα που προέκυψαν στη συγκεκριμένη απλοποιημένη προσέγγιση. Σημειώνουμε ότι και στην προσέγγιση αυτή, τα αποτελέσματα για την αγωγιμότητα για κάθε πόλωση του σπιν στο επίπεδο της διεπαφής, επιβεβαιώνουν τις μεταβάσεις MI-FHM και FHM-FI που παρατηρήθηκαν με βάση το μοντέλο Hubbard, καταδεικνύοντας έτσι ότι οι μεταβάσεις αυτές αποτελούν γενικά χαρακτηριστικά των συγκεκριμένων διεπαφών. Σημειώνουμε όμως ότι στα συγκεκριμένα αποτελέσματα δεν παρατηρούμε την αλλαγή της πόλωσης των διεγέρσεων χαμηλής ενέργειας καθώς μεταβάλλεται το μ ή το h_z , όπως παρατηρήθηκε στα αποτελέσματα του μοντέλου Hubbard. Συνεπώς η συγκεκριμένη μετάβαση ίσως εξαρτάται από τα δυναμικά στο κανάλι της ομοιόμορφης πυκνότητας φορτίου και σπιν.

4.3.3 Ετεροδομές SDW/CDW πολλαπλών στρωμάτων

Στην προηγούμενη ενότητα παρουσιάσαμε τις ιδιότητες των (001) SDW/CDW διεπαφών θεωρώντας τη σύζευξη μεταξύ μόνο δύο στρωμάτων στις αντίστοιχες καταστάσεις τάξης. Όμως σε ρεαλιστικές πειραματικές διατάξεις οι συγκεκριμένες ετεροδομές αποτελούνται από πολλαπλά στρώματα για κάθε μια από τις παραπάνω κβαντικές καταστάσεις τάξης. Για τον λόγο αυτό διερευνήσαμε SDW/CDW ετεροδομές που αποτελούνται από περισσότερα των δύο στρώματα. Τα συστήματα πολλαπλών στρωμάτων μας δίνουν τη δυνατότητα να διερευνήσουμε επίσης σε ποιο βαθμό οι ιδιότητες των (001) SDW/CDW διεπαφών εισχωρούν στο εσωτερικό κάθε κατάστασης. Γενικά εξετάσαμε τις περιπτώσεις της προηγούμενης ενότητας όπου στα πλαίσια του μοντέλου Hubbard θεωρήσαμε ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης U στην ίδια πλεγματική θέση για το στρώμα SDW και ένα δυναμικό αλληλεπίδρασης V μεταξύ κοντινότερων γειτόνων για το στρώμα CDW. Παρακάτω παρουσιάζουμε ενδεικτικά τη δεύτερη περίπτωση όπου $U = 6t$ για την περιοχή SDW και $V_1 = 4t$ για την CDW με $t_C = t_S = t$. Για τους όρους σύζευξης $t_{S,m}(t_{C,m})$ μεταξύ των στρωμάτων της περιοχής SDW (CDW) θεωρήσαμε $t_{S,m}/t_S = 0.5(t_{C,m}/t_C = 0.5)$.

Από το Σχ. 4.20 παρατηρούμε ότι η επαγόμενη μαγνήτιση παραμένει εντοπισμένη στη διεπιφάνεια ακόμα και για υψηλές τιμές του χημικού δυναμικού για τις οποίες η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής εκτείνεται σε όλη την φάση SDW. Ανάλογα εντοπισμένη στη διεπιφάνεια παραμένει και η ημι-μεταλλική φάση παρόλο που για κρίσιμες για τις αντισιδηρομαγνητικές συσχετίσεις τιμές του χημικού δυναμικού, όλη η φάση SDW γίνεται μεταλλική. Συνεπώς παρατηρούμε ότι και σε αυτήν

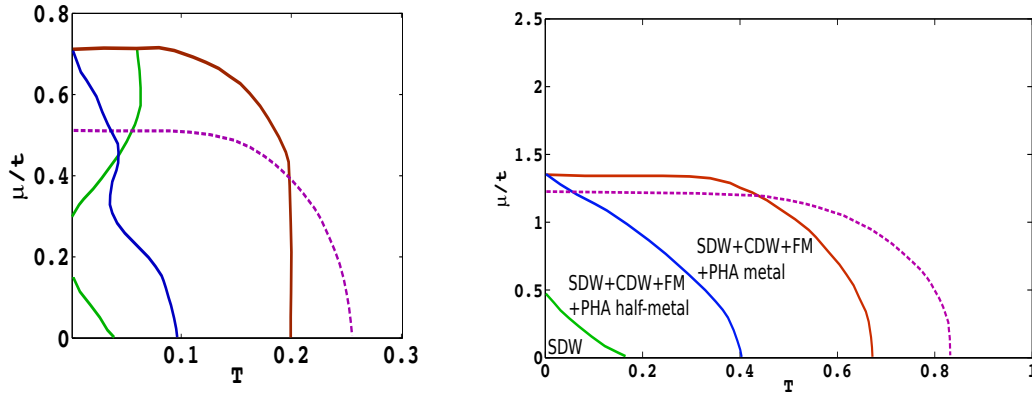


Σχήμα 4.18: Διαγράμματα φάσης ως προς το α) χημικό δυναμικό για $t'_m = 0$ και β) το πεδίο Zeeman h_z για $t'_m = 0.4$, που αναφέρονται στη διεπαφή SDW/CDW για την περίπτωση που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.14 -4.15, αλλά για πεπερασμένα δυναμικά μόνο για τα μέσα πεδία N^Q και $M^{z,Q}$ στα στρώματα CDW και SDW αντίστοιχα. Στην προσέγγιση αυτή αναδεικνύεται καλύτερα ο κανόνας επαγόμενων πεδίων, σύμφωνα με τον οποίο η συνύπαρξη των πεδίων μ , N^Q και $M^{z,Q}$ επάγει ένα πεδίο Zeeman h_z , ενώ ανάλογα η συνύπαρξη των πεδίων h_z , N^Q και $M^{z,Q}$ επάγει ένα βαθμωτό δυναμικό μ .

την περίπτωση στις ετεροδομές SDW/CDW η συνύπαρξη των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν οδηγεί στην εμφάνιση μιας σιδηρομαγνητικής ημι-μεταλλικής φάσης εντοπισμένης στη (001) διεπαφή των δύο περιοχών. Σημειώνουμε ότι η συγκεκριμένη φάση επάγεται για κατάλληλες τιμές του χημικού δυναμικού το οποίο μπορεί να ρυθμιστεί μέσω εφαρμογής τάσεων πύλης. Τα αποτελέσματα αυτά καταδεικνύουν ότι οι διεπαφές (001) SDW/CDW παρουσιάζουν ανάλογες ιδιότητες με τις ετεροδομές οξειδίων των μετάλλων μετάβασης και συνεπώς ενδέχεται να σχετίζονται με τον μηχανισμό δημιουργίας του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων που παρατηρείται στις συγκεκριμένες διεπαφές.

Επιπλέον, είναι αξιοσημείωτο ότι το στρώμα της διεπαφής που ανήκει στην περιοχή SDW φάσης συνεχίζει να εμφανίζει αντισιδηρομαγνητικές συσχετίσεις ακόμα και όταν η αντισιδηρομαγνητική φάση έχει εξαφανιστεί από το εσωτερικό της συγκεκριμένης περιοχής (Σχ. 4.21). Η παρατήρηση αυτή έρχεται σε συμφωνία με τα αποτελέσματα για τις ετεροδομές δύο στρωμάτων που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα όπου παρατηρήθηκε ότι η αντισιδηρομαγνητική φάση διατηρείται για μεγαλύτερες τιμές του χημικού δυναμικού όταν είναι σε σύζευξη με το στρώμα CDW λόγω της σύζευξης των πεδίων μέσω της σιδηρομαγνητικής φάσης (Σχ. 4.19). Για τους ίδιους λόγους στις διεπαφές αυτές παρατηρούμε και αύξηση του κρίσιμου πεδίου Zeeman για την SDW φάση. Εν γένει η αύξηση των κρίσιμων τιμών του χημικού δυναμικού μ και πεδίου Zeeman h_z στις διεπαφές αυτές αφορά το κύμα πυκνότητας με το μικρότερο ενεργειακό χάσμα.

Συνοψίζοντας, παρατηρούμε ότι σε ετεροδομές SDW/CDW, για κατάλληλες τιμές του χημικού δυναμικού ή του πεδίου Zeeman εμφανίζεται μια ημι-μεταλλική φάση εντοπισμένη στη διεπαφή (001). Η συγκεκριμένη φάση αποτελεί το ιδανικό περιβάλλον για την εμφάνιση υπεραγωγιμότητας p - wave συμμετρίας μεταξύ ηλεκτρονίων ίδιου σπιν, η οποία στις δύο χωρικές διαστάσεις έχει τοπολογικά μη τετριμμένο χαρακτήρα. Για τον λόγο αυτό στην επόμενη ενότητα εξετάζουμε την εμφάνιση της συγκεκριμένης υπεραγωγίμης φάσης σε ετεροδομές SDW/CDW με ανάλογο τρόπο



Σχήμα 4.19: Το διάγραμμα φάσης $\mu - T$ για την SDW φάση σε διεπαφή SDW/CDW με τις παραμέτρους της περίπτωσης που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.14-4.15 (αριστερό διάγραμμα) και αυτής που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.16-4.17 (δεξιό διάγραμμα). Η (μωβ) κόκκινη γραμμή σε κάθε περίπτωση αντιστοιχεί στην κρίσιμη θερμοκρασία των αντισιδηρομαγνητικών συσχετίσεων στο πάνω στρώμα όταν αυτό (δεν) συνδέεται με το CDW στρώμα. Λόγω της σύζευξης με το CDW στρώμα, οι αντισιδηρομαγνητικές συσχετίσεις διατηρούνται για μεγαλύτερες τιμές του χημικού δυναμικού μέσω της μικτής φάσης $SDW + CDW + FM + PHA$. Αντίθετα για τον ίδιο λόγο, η κρίσιμη θερμοκρασία T_N , για την αντισιδηρομαγνητική φάση, μειώνεται σε συμφωνία με το μειωμένο ενεργειακό χάσμα που προκύπτει λόγω της σύζευξης με το στρώμα CDW. Η πράσινη (μπλε) γραμμή αντιστοιχεί στα όρια της μη μηδενικής αγωγιμότητας φορέων με σπιν πάνω (κάτω). Για την πρώτη περίπτωση παρατηρούμε μια μονωτική σιδηρομαγνητική φάση (FI) για $\mu \sim 0.3 - 0.7$ και $T < 0.05$ και αλλαγή της πόλωσης του σπιν των φορέων χαμηλής ενέργειας καθώς αυξάνεται το χημικό δυναμικό μ για $0 < T < 0.05$. Στη δεύτερη περίπτωση παρατηρούμε μια μετάβαση FHM-FM καθώς αυξάνεται το χημικό δυναμικό μ ή η θερμοκρασία T .

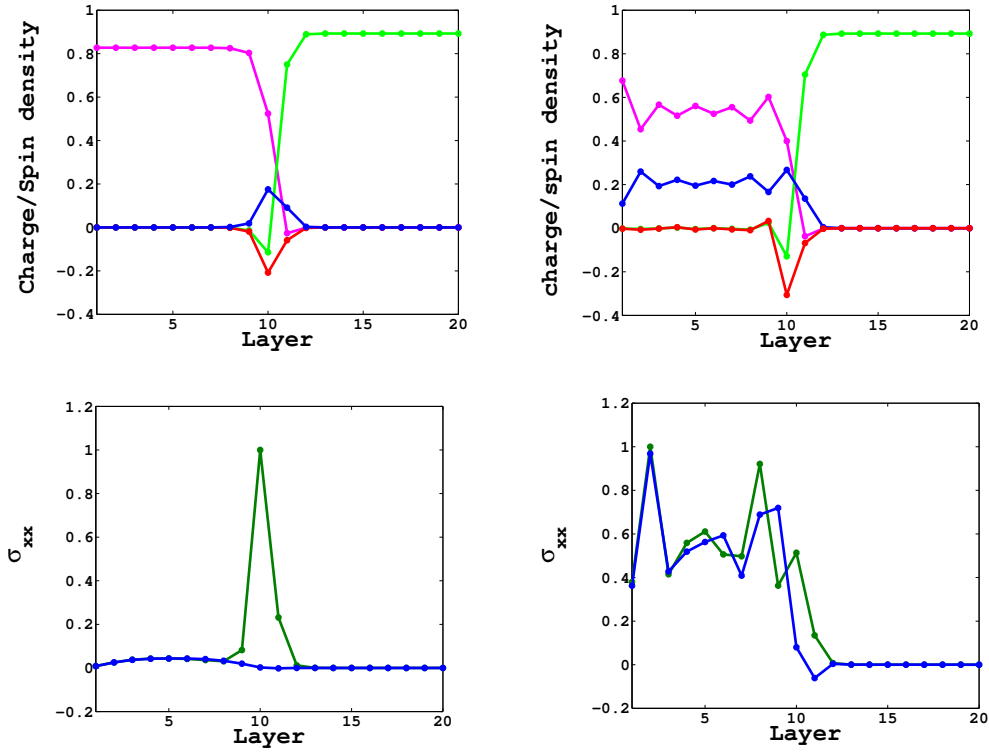
με αυτόν που παρουσιάστηκε για τις (100) SDW/CDW διεπαφές.

4.3.4 Η χειρική $p - wave$ υπεραγώγιμη φάση σε διεπαφές (001) SDW/CDW

Όπως προαναφέραμε η ημι-μεταλλική φάση που εμφανίζεται στις ετεροδομές SDW/CDW αποτελεί το ιδανικό περιβάλλον για τη δημιουργία τοπολογικών υπεραγώγιμων φάσεων. Σε αναλογία με τις (100) SDW/CDW διεπαφές παρατηρούμε ότι σε πολλές περιπτώσεις η ημι-μεταλλική φάση που εμφανίζεται στις (001) SDW/CDW διεπαφές σχετίζεται με μία διδιάστατη ενεργειακή ζώνη οιονείσωματιδίων με συγκεκριμένη πόλωση σπιν που τέμνει το επίπεδο Fermi. Σύμφωνα με την Εξ.4.51, αναμένουμε ότι η συγκεκριμένη μορφή του ενεργειακού φάσματος διεγέρσεων χαμηλής ενέργειας του συστήματος εμφανίζεται για σχετικά ισχυρή σύζευξη t_m των στρωμάτων της διεπαφής. Πράγματι, στο Σχ. 4.22 που αντιστοιχεί στην πρώτη περίπτωση της προηγούμενης ενότητας (μοντέλο Hubbard), παρουσιάζουμε την ενεργειακή ζώνη διεγέρσεων χαμηλών ενεργειών με πόλωση σπιν \downarrow του συστήματος για $\mu = 0.15$. Στη συγκεκριμένη περίπτωση, η διδιάστατη αυτή ενεργειακή ζώνη περιγράφεται από την παρακάτω ενεργό Χαμιλτονιανή εξίσωση για ηλεκτρόνια χωρίς σπιν.

$$\mathcal{H}_{int} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} [\mu' + \gamma'(\mathbf{k})\rho_z + \delta'(\mathbf{k}, l)] \psi_{\mathbf{k}}, \quad (4.54)$$

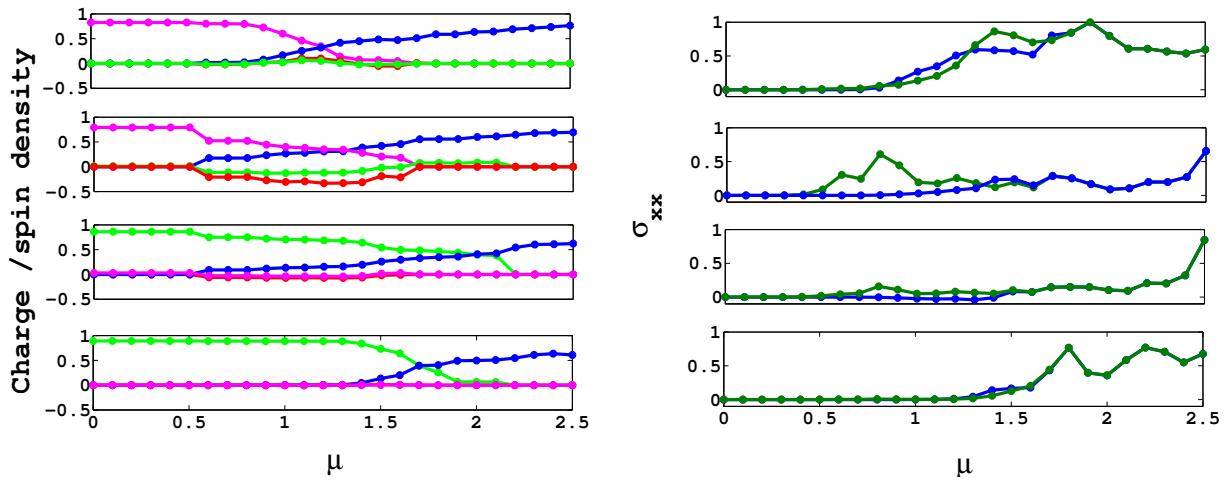
όπου $\psi_{\mathbf{k}}(\dagger)$ ο τελεστής καταστροφής(δημιουργίας) για ηλεκτρόνια με ορμή \mathbf{k} , ενώ με γ' , δ' αναπαριστούμε τους κινητικούς όρους διασποράς της ενεργειακής ζώνης που εν γένει διαφέρουν από τους αντίστοιχους για κάθε μια από τις περιοχές των κυμάτων πυκνότητας και μ' ένας όρος ενεργού χημικού δυναμικού. Η παραπάνω Χαμιλτονιανή αποτελεί το ιδανικό σύστημα για την εμφάνιση τοπολογικής υπεραγωγιμότητας p συμμετρίας, η οποία μπορεί να υποστηρίξει ακέραιο αριθμό δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας.



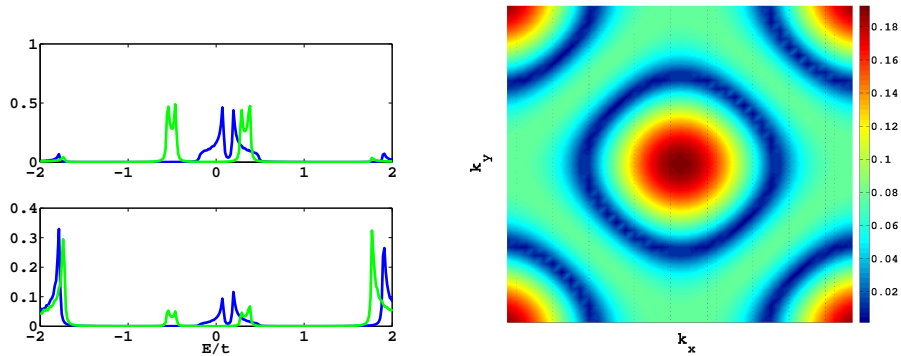
Σχήμα 4.20: Διεπαφή (001) SDW/CDW για τις παραμέτρους της περίπτωσης που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.16 και 4.17 και $t'_m = 0$. Κάθε μία από τις περιοχές SDW και CDW αποτελούνται από 10 στρώματα τα οποία συνδέονται μέσω διαστρωματικών όρων μεταπήδησης μεταξύ ίδιων σημείων για τους οποίους ισχύει $t_{S,m}/t_S = t_{C,m}/t_C = 0.5$. Τα σχήματα που βρίσκονται αριστερά αντιστοιχούν σε χημικό δυναμικό $\mu = 0.7$, ενώ αυτά που βρίσκονται δεξιά σε $\mu = 1$. Για $\mu = 0.7$ παρατηρούμε ότι η μαγνήτιση και η σιδηρομαγνητική ημι-μεταλλική φάση παραμένουν εντοπισμένες στη διεπιφάνεια, ενώ το εσωτερικό των δύο περιοχών παραμένει μονωτικό. Για $\mu = 1$, ενώ η μαγνήτιση παραμένει εντοπισμένη στη διεπιφάνεια, η SDW περιοχή γίνεται μεταλλική. Σημειώνουμε όμως ότι στη διεπαφή η dc αγωγιμότητα για φορείς με σπιν (\uparrow) είναι σημαντικά μεγαλύτερη από την αντίστοιχη για φορείς με σπιν (\downarrow).

Για τον λόγο αυτό επιλύουμε τις παραπάνω περιπτώσεις για τις ετεροδομές SDW/CDW θεωρώντας επιπλέον στην Εξ. 4.34 ένα ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων στο κανάλι αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής για το στρώμα SDW. Παρόλο που εν γένει θα μπορούσαμε να θεωρήσουμε το ίδιο δυναμικό και για το στρώμα CDW, δεν εξετάζουμε την περίπτωση αυτή καθώς συνήθως θεωρούμε ότι η φάση κύματος πυκνότητας φορτίου σταθεροποιείται από ένα απωστικό δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων.

Το ελκτικό δυναμικό V στην Εξ. 4.34 συμμετέχει επίσης στο κανάλι της υπεραγωγιμότητας με συμμετρία d και s_{\pm} με τον ίδιο τρόπο που συμμετέχει στο κανάλι της triplet υπεραγωγιμότητας p συμμετρίας. Καθώς όμως η επιφάνεια Fermi της διεπαφής σχετίζεται με διεγέρσεις συγκεκριμένης πόλωσης του σπιν που περιγράφονται από την ενεργό Χαμιλτονιανή Εξ. 4.54, μόνο η εμφάνιση triplet υπεραγωγιμότητας ζεύγους ηλεκτρονίων με ίδιο σπιν είναι δυνατή. Επιπλέον, θεωρούμε ότι το σύστημα προτιμά την εμφάνιση υπεραγωγιμότητας p συμμετρίας καθώς η επίσης επιτρεπτή π - triplet υπεραγωγιμότητα δεν ευνοείται από την τοπολογία της επιφάνειας Fermi, που στις περισσότερες περιπτώσεις δεν εμφανίζει συναρμογή κατά το διάνυσμα \mathbf{Q} . Ο παραπάνω ισχυρισμός επιβεβαιώνεται και από υπολογισμούς της επιδεκτικότητας του συστήματος για την κάθε υπεραγωγίμη φάση. Επιπλέον, λόγω της τετραγωνικής συμμετρίας του συστήματος αναμένουμε $p_x = p_y$, ενώ επίσης θεωρούμε ότι η χειρική υπεραγωγίμη φάση $p_x + ip_y$ θα ευνοείται σε σχέση με τη φάση $p_x + p_y$, όπου τα υπεραγωγίμη πεδία σε κάθε διεύθυνση είναι σε φάση, καθώς στη δεύτερη περίπτωση εμφανίζονται σημεία μηδενισμού του ενεργειακού χάσματος στο φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων. Αυτό επιβεβαιώνεται και από την αριθμητική επίλυση του συστήματος για τις δύο αυτές περιπτώσεις όπου η χειρική φάση εμφανίζει μεγαλύτερη κρίσιμη θερμοκρασία.

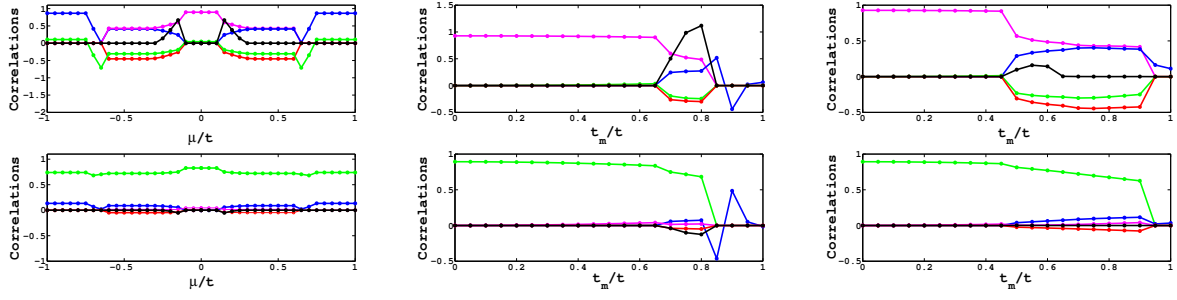


Σχήμα 4.21: Για την περίπτωση που παρουσιάστηκε στο Σχ. 4.20 οι πυκνότητες φορτίου και σπιν (αριστερά) και η ομοιόμορφη *dc* αγωγιμότητα παράλληλα στο επίπεδο της διεπαφής (δεξιά) συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ . Παρουσιάζονται τα αποτελέσματα μόνο για τα 4 (από τα συνολικά 10) στρώματα που βρίσκονται δίπλα στη διεπαφή με τα δύο πάνω στρώματα να βρίσκονται στην SDW περιοχή ενώ τα δύο κάτω στρώματα στην CDW περιοχή. Παρατηρούμε ότι τα διαγράμματα φάσης για το δεύτερο και τρίτο στρώμα είναι ποιοτικά ίδια με αυτά που παρουσιάστηκαν στα Σχ. 4.16 και 4.17 τα οποία αντιστοιχούν για ένα σύστημα με τις ίδιες παραμέτρους αλλά αποτελείται από μόνο 2 στρώματα. Στην περίπτωση των πολλαπλών στρωμάτων παρατηρούμε ότι οι αντισιδηρομαγνητικές συσχετίσεις στο στρώμα διεπαφής της SDW περιοχής παραμένουν πεπερασμένες παρόλο που έχουν εξαφανιστεί από το εσωτερικό της SDW περιοχής. Το αποτέλεσμα αυτό οφείλεται στη σύζευξη μεταξύ των τεσσάρων πεδίων μ , N^Q , M^z, Q , h_z και έρχεται σε συμφωνία με τα διαγράμματα φάσης $\mu - T$ που παρουσιάστηκαν στο Σχ. 4.19.

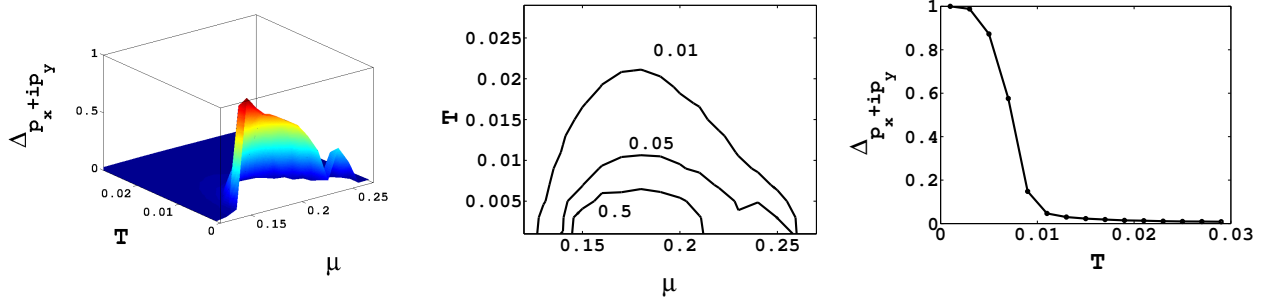


Σχήμα 4.22: (αριστερά) Η πυκνότητα καταστάσεων για τη διεπαφή που αντιστοιχεί στην περίπτωση που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.14-4.15 για $\mu = 0.15$. Παρατηρούμε ότι η πυκνότητα καταστάσεων στο επίπεδο Fermi $E/t = 0$ είναι πεπερασμένη μόνο για πόλωση του σπιν \uparrow (μπλε γραμμή), ενώ ένα σημαντικό ενεργειακό χάσμα εμφανίζεται για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow (πράσινη γραμμή). δεξιά) Η ενεργειακή ζώνη με τις χαμηλότερες ιδιοενέργειες του συστήματος οι οποίες αντιστοιχούν σε ιδιοκαταστάσεις με σπιν \downarrow . Η επιφάνεια Fermi σημειώνεται με βαθύ μπλε χρώμα. Λόγω απουσίας επιφάνειας Fermi για τις διεγέρσεις με σπιν \downarrow , η ημι-μεταλλική φάση της διεπαφής επιτρέπει μόνο την εμφάνιση υπεραγωγιμότητας με ζεύγη ηλεκτρονίων ίδιου σπιν. Η τοπολογική υπεραγωγίμη φάση p -wave συμμετρίας ευνοείται σε σχέση με την π -triplet, καθώς η επιφάνεια Fermi δεν εμφανίζει συναρμογή κατά το διάνυσμα Q .

Επομένως, παρακάτω παρουσιάζουμε τις περιπτώσεις όπου το δυναμικό αλληλεπίδρασης V επιδρά μόνο στο κανάλι της χειρικής υπεραγωγιμότητας $p_x + ip_y$. Η ενεργός Χαμιλτονιανή στον χώρο ορμών αποκτά στην περίπτωση αυτή την παρακάτω μορφή



Σχήμα 4.23: α) Το διάγραμμα φάσης ως προς μ για την περίπτωση της διεπαφής (001) SDW/CDW δύο στρωμάτων που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.14-4.15, αλλά επιπλέον με ένα δυναμικό $V_p = V_{SDW}$ για την p υπεραγωγίμη φάση μόνο στο στρώμα SDW. Παρατηρούμε την εμφάνιση της χειρικής υπεραγωγιμότητας $p_x + ip_y$ (μαύρη γραμμή) μόνο στην ημι-μεταλλική φάση όπου συνυπάρχει με τον μαγνητισμό. Η ίδια διεπαφή καθώς αυξάνεται η σταθερά σύζευξης t_m για β) $\mu = 0.15$ και γ) $\mu = 0.3$. Πάλι η χειρική υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται μόνο όταν η σύζευξη είναι επαρκής για την εμφάνιση της ημι-μεταλλικής φάσης στη διεπαφή. Τα παραπάνω αποτελέσματα καταδεικνύουν ότι η χειρική υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται στο σύστημα λόγω της συνύπαρξης των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν.



Σχήμα 4.24: α) και β) Το διάγραμμα φάσης μ - T για τη χειρική υπεραγωγιμότητα $p_x + ip_y$ ηλεκτρονίων ίδιου σπιν. Οι παράμετροι του συστήματος είναι ίδιες με αυτές της περίπτωσης της διεπαφής (001) SDW/CDW δύο στρωμάτων που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.14-4.15, αλλά επιπλέον με ένα δυναμικό $V_p = V_{SDW}$ για την p υπεραγωγίμη φάση μόνο στο στρώμα SDW. Οι υπεραγωγίμες συσχετίσεις είναι κανονικοποιημένες ως προς τη μέγιστη τιμή τους. γ) Για $\mu = 0.18$ οι κανονικοποιημένες υπεραγωγίμες συσχετίσεις συναρτήσει της θερμοκρασίας. Παρατηρούμε τη διατήρηση ενός μικρού υπεραγωγίμου πεδίου για ένα σχετικά μεγάλο εύρος θερμοκρασιών. Στην περιοχή αυτή η εξάρτηση της υπεραγωγίμης παραμέτρου τάξης από τη θερμοκρασία εμφανίζεται διαφοροποιημένη σε σχέση με όσα προβλέπονται από τη θεωρία BCS.

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, l} \Psi_{\mathbf{k}, l}^{N, \dagger} [\tau_z [H_l(\mathbf{k}) + H_{l, l'}(\mathbf{k})] + \tau_x H_{l, sc}(\mathbf{k})] \Psi_{\mathbf{k}, l}^N$$

$$H_l(\mathbf{k}) = \gamma(\mathbf{k}, l) \rho_z + \delta(\mathbf{k}, l) + \mu + N_l + [h^z + M_l] \sigma_z + \rho_x [N_l^Q + M_l^{z, Q} \sigma_z]$$

$$H_{l, sc}(\mathbf{k}) = \Delta_{l, p} [\sin(k_x) - i \sin(k_y) \tau_z]$$

$$H_{l, l'}(\mathbf{k}) = [-t_{l, l'} + t'_{l, l'} (\cos(k_x) + \cos(k_y))] \delta_{l, l' \pm 1}, \quad (4.55)$$

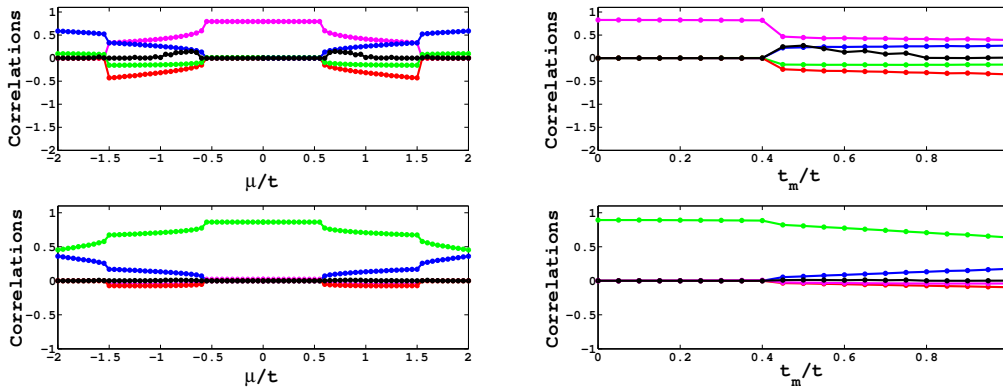
όπου έχουμε εισάγει τον σπινόρα $\Psi_{\mathbf{k}, l}^{N, \dagger} = (\Psi_{\mathbf{k}, l}^\dagger, \Psi_{-\mathbf{k}, l})$. Το πεδίο ζεύξης $\Delta_{l, p}$ υπολογίζεται αυτοσυνεπώς μέσω της παρακάτω εξίσωσης

$$\Delta_{l, p} = V_{l, p} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k}, l}^{N, \dagger} [(\sin(k_x) \tau_x + \sin(k_y) \tau_y) \rho_z \sigma_z] \Psi_{\mathbf{k}, l}^N \rangle, \quad (4.56)$$

όπου το δυναμικό για την υπεραγωγίμη παράμετρο τάξης p συμμετρίας προκύπτει άμεσα από το δυναμικό αλληλεπίδρασης $V_{l, p} = V_1$. Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας Εξ.4.40 για τις πυκνότητες φορτίου και σπιν τροποποιούνται αναλόγως

$$\begin{aligned}
N_l &= V_{N,l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^{N,\dagger} \tau_z \Psi_{\mathbf{k},l}^N \rangle & M_l^z &= V_{M,l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^{N,\dagger} \tau_z \sigma_z \Psi_{\mathbf{k},l}^N \rangle \\
N_l^Q &= V_{N_Q,l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^{N,\dagger} \tau_z \rho_x \Psi_{\mathbf{k},l}^N \rangle & M_l^{z,Q} &= V_{M_Q,l} \frac{1}{n} \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k},l}^{N,\dagger} \tau_z \rho_x \sigma_z \Psi_{\mathbf{k},l}^N \rangle \quad (4.57)
\end{aligned}$$

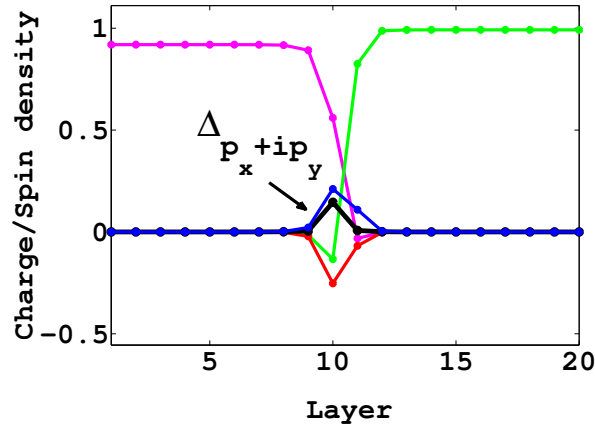
Διερευνήσαμε τις περιπτώσεις που παρουσιάστηκαν στην προηγούμενη ενότητα θεωρώντας επιπλέον $V_{l,p} = V_{M_Q,l}$. Η συγκεκριμένη επιλογή ενός σχετικά υψηλού δυναμικού αλληλεπίδρασης έγινε για να αντισταθμίσουμε τη χαμηλή πυκνότητα καταστάσεων στην επιφάνεια Fermi, λόγω της χαμηλής σχετικά ανάλυσης του πλέγματος στον χώρο των ορμών. Υπενθυμίζουμε ότι οι υπολογιστικές απαιτήσεις για την επίλυση της Εξ.4.55 αυξάνονται ραγδαία με την αύξηση της ανάλυσης του πλέγματος. Άλλωστε θεωρητικά η υπεραγωγιμότητα στα ημι-μεταλλικά αυτά συστήματα αναμένεται για αυθαίρετα μικρές τιμές του σχετικού δυναμικού. Επιπλέον, σημειώνουμε ότι αντισιδηρομαγνητικές φάσεις εμφανίζονται στα οξειδία του χαλκού και στα πνικτίδια του σιδήρου τα οποία για επαρκή ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής μεταβαίνουν σε υπεραγωγίμες φάσεις συμμετρίας d και s_{\pm} αντίστοιχα. Ο ανταγωνισμός του αντισιδηρομαγνητισμού και των υπεραγωγίμων φάσεων στα υλικά αυτά, σχετίζεται κυρίως με την τοπολογία της επιφάνειας Fermi και όχι μόνο με το σχετικό μέγεθος των αντίστοιχων δυναμικών. Επομένως η παραπάνω επιλογή δυναμικών δεν είναι τόσο αφύσικη. Επιπλέον τα ίδια ποιοτικά αποτελέσματα προκύπτουν και για μικρότερες τιμές του δυναμικού της υπεραγωγίμης φάσης $V_{l,p} < V_{M_Q,l}$.



Σχήμα 4.25: Διάγραμμα φάσης ως προς α) μ και t_m με β) $\mu = 1$ για τη διεπαφή SDW/CDW που παρουσιάστηκε στα Σχ. 4.16-4.17, αλλά επιπλέον με ένα δυναμικό $V_p = V_{SDW}$ για την p υπεραγωγίμη φάση μόνο στο στρώμα SDW. Και στην περίπτωση αυτή η χειρική υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται μόνο στην ημι-μεταλλική φάση.

Όπως παρουσιάζεται στα Σχ. 4.23 και 4.25, και στις δύο περιπτώσεις η χειρική $p_x + ip_y$ υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται μόνο στην ημι-μεταλλική φάση όπου και συνυπάρχει με την επαγόμενη μαγνήτιση. Είναι αξιοσημείωτο ότι η υπεραγωγιμότητα στις ετεροδομές SDW/CDW εμφανίζεται μόνο όταν η σύζευξη των δύο στρωμάτων ξεπερνά μια κρίσιμη τιμή. Επομένως διαπιστώνουμε ότι η συνύπαρξη δύο μονωτικών φάσεων μπορεί να δημιουργήσει τις συνθήκες για την εμφάνιση χειρικής υπεραγωγιμότητας, που εν γένει εμφανίζεται σπάνια σε φυσικά συστήματα λόγω του περιορισμού από ανταγωνιστικές singlet υπεραγωγίμες φάσεις. Σημειώνουμε ότι η διδιάστατη χειρική υπεραγωγίμη φάση, όπως αυτή που προκύπτει στις συγκεκριμένες ετεροδομές, ανήκει στην D κλάση συμμετρίας και εμφανίζει δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας στους πυρήνες στροβίλων που εμφανίζονται παρουσία μαγνητικού πεδίου.

Τέλος, επιλύοντας τις παραπάνω περιπτώσεις για πιο ρεαλιστικά συστήματα με περισσότερα στρώματα για τις φάσεις κυμάτων πυκνότητας, παρατηρούμε ότι η χειρική υπεραγωγιμότητα παραμένει εντοπισμένη στη διεπαφή των δύο καταστάσεων τάξης. Η παρατήρηση αυτή αναδεικνύει επίσης τη σύνδεση της συγκεκριμένης υπεραγωγίμης φάσης με την ημι-μεταλλική φάση που δη-



Σχήμα 4.26: Η διεπαφή (001) SDW/CDW για σύστημα 20 στρωμάτων και διαστρωματικούς όρους μεταπήδησης στην ίδια πλεγματική θέση $t_{m,\perp} = 0.5t$. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι ίδιες με αυτές των περιπτώσεων που παρουσιάστηκαν στα Σχ. 4.23 με $\mu = 0.15$. Παρουσιάζονται οι συσχετίσεις $m^z \cdot Q$ (μωβ χρώμα) και n^Q (πράσινο χρώμα) για τα κύματα πυκνότητας spin και φορτίου αντίστοιχα, η ομοιόμορφη μαγνήτιση m^z (κόκκινο χρώμα) και η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής $1-n$ (μπλε χρώμα) καθώς και η χειρική υπεραγωγιμότητα $p_x + ip_y$ (μαύρη γραμμή). Παρατηρούμε ότι η χειρική υπεραγωγίμη φάση ηλεκτρονίων ίδιου spin εμφανίζεται εντοπισμένη στη διεπαφή όπου και συνυπάρχει με τη σιδηρομαγνητική ημι-μεταλλική φάση, παρόλο που το δυναμικό $V_{l,p}$ στο αντίστοιχο κανάλι υπεραγωγιμότητας είναι το ίδιο σε όλη την περιοχή SDW.

μιουργείται στις συγκεκριμένες διεπαφές και έρχεται σε συμφωνία με την υπεραγωγίμη φάση που εμφανίζεται εντοπισμένη στις διεπαφές ετεροδομών οξειδίων μετάλλων μετάβασης.

Κεφάλαιο 5

Δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας σε ετεροδομές Σιδηρομαγνήτη/Υπεραγωγού

5.1 Εισαγωγή

5.1.1 Η τοπολογία στη φυσική στερεάς κατάστασης

Η τοπολογία αρχικά εφαρμόστηκε στη φυσική στερεάς κατάστασης με σκοπό την ταξινόμηση ατελειών σε καταστάσεις τάξης [142, 143, 144]. Σύμφωνα με τη συγκεκριμένη προσέγγιση, χωρικές διαμορφώσεις της παραμέτρου τάξης οι οποίες ενώνονται μέσω απείρως διαφορίσιμων μετασχηματισμών θεωρούνται τοπολογικά ισοδύναμες και εμπίπτουν στην ίδια τοπολογική κλάση η οποία χαρακτηρίζεται από ένα τοπολογικό αναλλοίωτο. Αναλυτικότερα τα συστήματα σε μια κατάσταση τάξης έχουν εκφυλισμένες θεμελιώδεις καταστάσεις οι οποίες αποτελούν τη θεμελιώδη πολλαπλότητα R του συστήματος. Γενικά αν G είναι η ομάδα συμμετρίας του συστήματος χωρίς τάξη και $H \subset G$ η εναπομένουσα συμμετρία του συστήματος στην κατάσταση τάξης, τότε η πολλαπλότητα της θεμελιώδους κατάστασης είναι ο χώρος πηλίκο $R = G/H$. Για παράδειγμα σε έναν συμβατικό υπεραγωγό, η πολλαπλότητα θεμελιώδους κατάστασης είναι ο χώρος $U(1)$, καθώς παράμετροι τάξης με διαφορετική μιγαδική φάση είναι ισοδύναμες. Γενικά η χωρική διαμόρφωση της παραμέτρου τάξης σε ένα κλειστό βρόχο X στον χώρο των θέσεων ορίζει μία αντιστοιχία $X \rightarrow R$. Έτσι, οι διαμορφώσεις της παραμέτρου τάξης ή ισοδύναμα οι παραπάνω αντιστοιχίες γύρω από ατέλεια συν-διάστασης D , ταξινομούνται από την αντίστοιχη ομάδα ομοτυπίας $\pi_{D-1}(R)$ της R πολλαπλότητας. Η συν-διάσταση D της ατέλειας προκύπτει από την σχέση $D = d - m$, όπου d η διάσταση του συστήματος και m η διάσταση της ατέλειας [144].

Αργότερα, η τοπολογική προσέγγιση επεκτάθηκε στην ταξινόμηση των φερμιονικών θεμελιωδών καταστάσεων ή κενών (vacua) η οποία σχετίζεται με το ενεργειακό φάσμα του συστήματος. Το βασικότερο αποτέλεσμα αυτής της προσέγγισης είναι η ανάδειξη συστημάτων τα οποία επειδή εμπίπτουν στην ίδια τοπολογική κλάση εκδηλώνουν πανομοιότυπες ιδιότητες στις χαμηλές ενέργειες, παρόλο που μπορεί να προέρχονται από τελείως διαφορετικές μικροσκοπικές θεωρίες. Για φερμιονικά συστήματα $3 + 1$ διαστάσεων, υπάρχουν μόνο 2 τοπολογικές κλάσεις ή κλάσεις παγκοσμιότητας οι οποίες καταδεικνύουν μη τετριμμένη τοπολογία, οι θεμελιώδεις καταστάσεις με ενεργειακό χάσμα και αυτές όπου χαρακτηρίζονται από την εμφάνιση διδιάστατης επιφάνειας Fermi. Η ταξινόμηση αυτή των φερμιονικών συστημάτων γίνεται μέσω του διαδότη, συνάρτηση G (Green function), των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος. Στην περίπτωση του χώρου ορμών σε αντιστοιχία με όσα προαναφέραμε, ουσιαστικά θεωρούμε ως ατέλεια την επιφάνεια Fermi. Γενικά σε φερμιονικά συστήματα $d + 1$ διαστάσεων με επιφάνεια Fermi διάστασης l η οποία αντιστοιχεί σε περιττή συν-διάσταση $D = d - l$, μπορούμε να ορίσουμε ως τοπολογικό αναλλοίωτο το ολοκλήρωμα $N_D = \text{ctr} \int_{\sigma_D} dS (\mathcal{G} \partial_{p_\mu} \mathcal{G}^{-1})^D$ πάνω σε επιφάνεια σ_D που περικλείει την επιφάνεια, όπου c σταθερά κανονικοποίησης και $(\mathcal{G} \partial_{p_\mu} \mathcal{G}^{-1})^D$. Σημειώνουμε ότι στην πε-

ρίπτωση άρτιων συνδιαστάσεων $D = d - l$ δεν ορίζεται τοπολογικό αναλλοίωτο. Γί αυτό τα φερμιονικά συστήματα (3+1) διαστάσεων με επιφάνειες Fermi μίας διάστασης (γραμμές) είναι τοπολογικά τετριμμένα. Σε μερικές περιπτώσεις η επιφάνεια Fermi του συστήματος, ενώ δεν είναι ευσταθής σε γενικούς απείρους μετασχηματισμούς (τοπολογική ευστάθεια), παρουσιάζει ευστάθεια μόνο ως προς παραμορφώσεις που δεν παραβιάζουν κάποια συμμετρία P του συστήματος. Τα συστήματα αυτά θεωρούμε ότι εμφανίζουν μη τετριμμένη τοπολογία προστατευόμενη από τη συμμετρία P και ορίζουμε αντίστοιχα το τροποποιημένο τοπολογικό αναλλοίωτο $N_D(P) = \text{ctr} \left(P \int_{\sigma_D} dS (\mathcal{G} \partial_{p_\mu} \mathcal{G}^{-1})^D \right)$.

Με διαστατική μείωση μπορούμε να ορίσουμε τοπολογικά αναλλοίωτα για συστήματα διάστασης $(d + 1)$ χωρίς επιφάνεια Fermi με παρόμοιο τρόπο που ορίζουμε για συστήματα διάστασης $D + 1$ με σημεία Fermi όπου $D = d + 1$. Με τη μέθοδο αυτή το τοπολογικό αναλλοίωτο αποκτά τη μορφή $\tilde{N}_{(d+1)} = \text{ctr} \left(\int_{\sigma_{(d+1)}} dS (\mathcal{G} \partial_{p_\mu} \mathcal{G}^{-1})^{(d+1)} \right)$. όπου στην περίπτωση αυτή το ολοκλήρωμα ορίζεται σε όλο τον $(d + 1)$ χώρο. Μέσω της αντίστροφης προσέγγισης μπορούν να περιγραφούν οι τοπολογικές χβαντικές μεταβάσεις ως προς παράμετρο M , συστημάτων χωρίς επιφάνεια Fermi θεωρώντας την παράμετρο M ως μία επιπλέον διάσταση του συστήματος. Η τοπολογική χβαντική μετάβαση λαμβάνει χώρα για κάποια κρίσιμη τιμή της παραμέτρου M_c για την οποία το σύστημα αποκτά επιφάνεια Fermi οπότε και το τοπολογικό αναλλοίωτο \tilde{N}_{d+1} δεν είναι καλά ορισμένο. Εναλλακτικά όμως το κρίσιμο σημείο (p_F^{d+1}, M_c) μπορεί να θεωρηθεί ως σημείο Fermi του $D + 1$ -διάστατου (\mathbf{p}, M) χώρου με καλά ορισμένο τοπολογικό φορτίο N_D το οποίο και ισούται με τη διαφορά του τοπολογικού αναλλοίωτου μεταξύ των φάσεων που διαχωρίζονται από το κρίσιμο σημείο, $N_D = \tilde{N}_{d+1,1} - \tilde{N}_{d+1,2}$ [145].

Η τελευταία προσέγγιση είναι ανάλογη του θεωρήματος δείκτη το οποίο διατυπώνει ότι το πλήθος ν των φερμιονικών καταστάσεων μηδενικής ενέργειας που εντοπίζονται στο D -διάστατο σύνορο ενός συστήματος διάσταση $d = D + 1$ χωρίς επιφάνεια Fermi, ισούται με τη διαφορά του τοπολογικού αναλλοίωτου μεταξύ των περιοχών που διαχωρίζονται από το σύνορο. Ουσιαστικά ο δείκτης ν είναι το τοπολογικό φορτίο N_D , των φερμιονικών καταστάσεων μηδενικής ενέργειας του συνόρου, υπολογισμένο στο χώρο που περιλαμβάνει και τις κάθετες προς το σύνορο διαστάσεις [146, 147].

5.1.2 Ταξινόμηση φυσικών συστημάτων βάσει συμμετρίας

Στην παρούσα ενότητα διερευνούμε τις προστατευόμενες από κάποια συμμετρία τοπολογικές φάσεις συστημάτων χωρίς επιφάνεια Fermi. Τέτοια συστήματα σε τοπολογικά μη-τετριμμένες καταστάσεις δεν μπορούν να μετασχηματιστούν σε τοπολογικά τετριμμένους μονωτές χωρίς να παραβιαστεί η συγκεκριμένη συμμετρία. Αρχικό σημείο της συγκεκριμένης διερεύνησης είναι η ταξινόμηση της Χαμιλτονιανής έκφρασης που περιγράφει τη δυναμική του κάθε συστήματος. Η ταξινόμηση με βάση μοναδιαίες συμμετρίες στερείται νοήματος καθώς στην περίπτωση αυτή η Χαμιλτονιανή μπορεί πάντα να αναχθεί σε υποσυστήματα που χαρακτηρίζονται από ιδιότιμες της συμμετρίας και στα οποία ο συγκεκριμένος μετασχηματισμός δεν μπορεί πλέον να οριστεί. Επομένως η παραπάνω ταξινόμηση της Χαμιλτονιανής ενός συστήματος μπορεί να βασιστεί μόνο σε γενικότερες συνθήκες που απορρέουν από τις αντι-μοναδιαίες συμμετρίες της αντιστροφής του χρόνου και της συζυγίας φορτίου [147, 148, 149, 150, 151, 152, 153]. Συγκεκριμένα, θεωρώντας μια γενική μορφή της Χαμιλτονιανής στον χώρο των θέσεων $\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j$, όπου Ψ_i^\dagger ένας αυθαίρετος σπίνορας στη θέση \mathbf{i} ο οποίος περιλαμβάνει διάφορους βαθμούς ελευθερίας του συστήματος, ο μετασχηματισμός αντιστροφής χρόνου \mathcal{T} οδηγεί στη σχέση $U_T^\dagger H_{i,j}^* U_T = H_{i,j}$, ενώ η συζυγία φορτίου \mathcal{C} στην $U_C^\dagger H_{i,j}^* U_C = -H_{i,j}$, όπου U_T και U_C τα μοναδιαία μέρη των τελεστών αντιστροφής χρόνου και συζυγίας φορτίου αντίστοιχα. Οι συγκεκριμένες συμμετρίες είναι αντι-μοναδιαίες καθώς $\mathcal{T}i\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{C}i\mathcal{C}^{-1} = -i$. Το γινόμενο όμως των αντίστοιχων τελεστών είναι ένας μοναδιαίος τελεστής ο οποίος ορίζει τη συμμετρία χειριρότητας $\mathcal{S} = \mathcal{T} \cdot \mathcal{C}$. Παρουσία της χειρικής συμμετρίας, ο τελεστής αυτός αντιμετωπίζεται με τον Χαμιλτονιανό τελεστή του συστήματος και για το λόγο αυτό διαφοροποιείται από τις υπόλοιπες μοναδιαίες συμμετρίες. Έτσι, παρουσία της χειρικής συμμετρίας ισοδυναμεί με

Cartan Label	\mathcal{T}	\mathcal{C}	\mathcal{S}	0	1	2	3	4	5	6	7
A (unitary)	0	0	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0
AIII (chiral unitary)	0	0	1	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}	0	\mathbb{Z}
AI (orthogonal)	1	0	0	\mathbb{Z}	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2
BDI (chiral orthogonal)	1	1	1	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2
D (BdG)	0	1	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
DIII (BdG)	-1	1	1	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
AII (symplectic)	-1	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0	0
CII (chiral symplectic)	-1	-1	1	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0	0
C (BdG)	0	-1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}	0
CI (BdG)	1	-1	1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}_2	\mathbb{Z}

Πίνακας 5.1: Οι δέκα κλάσεις συμμετρίας όπως ορίζονται από τους μετασχηματισμούς συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου, συζυγίας φορτίου και χειρικής συμμετρίας. Οι συμμετρίες που παραβιάζει το σύστημα σημειώνονται με 0, ενώ με ± 1 σημειώνουμε τις συμμετρίες του συστήματος και το τετράγωνο του αντίστοιχου τελεστή. Οι στήλες 0-7 παρουσιάζουν το αντίστοιχο για κάθε κλάση συμμετρίας τοπολογικό αναλλοίωτο, για συστήματα με τον αντίστοιχο αριθμό χωρικών διαστάσεων.

$$U_S^\dagger H_{i,j} U_S = -H_{i,j}, \text{ όπου } U_S^\dagger = U_C^\dagger U_T^\dagger.$$

Βάσει των παραπάνω οι Χαμιλτονιανοί τελεστές ταξινομούνται σε 10 κλάσεις. Σχετικά με τις δύο αντιμοναδιαίες συμμετρίες, το σύστημα μπορεί, είτε να μην έχει μια συγκεκριμένη συμμετρία (καταδεικνύεται με τον δείκτη 0 στη στήλη του αντίστοιχου τελεστή), είτε να την έχει με το τετράγωνο όμως του αντίστοιχου τελεστή να είναι ίσο με 1 ή -1 . Για 8 από τις 9 προκύπτουσες με τον τρόπο αυτό κλάσεις η συμπεριφορά του τελεστή χειρικής συμμετρίας είναι προκαθορισμένη. Η παρουσία της χειρικής συμμετρίας δεν είναι προκαθορισμένη, παρά μόνο για τη λιγότερο συμμετρική τάξη όπου και η συμμετρία αντιστροφής χρόνου και η συμμετρία συζυγίας φορτίου απουσιάζουν. Έτσι τελικά προκύπτουν 10 κλάσεις συμμετρίας οι οποίες και παρουσιάζονται στον Πίνακα 5.1. Παρακάτω περιγράφουμε πιο εκτενώς τις κλάσεις *A*, *AII* για Χαμιλτονιανές τύπου Dirac και *D*, *BDI*, *DII* για Χαμιλτονιανές τύπου BdG καθώς παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον στα συστήματα στερεάς κατάστασης.

Τα συστήματα της κλάσης *A* παραβιάζουν και τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου και της συζυγίας φορτίου. Συνεπώς όπως εξηγήσαμε και στην προηγούμενη ενότητα τα συστήματα αυτά επιδέχονται ακέραιοι τοπολογικού αναλλοίωτου \mathbb{Z} μόνο για άρτιο αριθμό διαστάσεων. Χαρακτηριστικό παράδειγμα συστήματος που ανήκει στην κλάση *A* είναι το διδιάστατο σύστημα χβαντικής κατάστασης Hall. Στο σύνορο των συστημάτων αυτών με το τετριμμένο κενό εντοπίζονται ακέραιοι αριθμός χειρικών ενεργειακών ζωνών χωρίς ενεργειακό χάσμα των οποίων ο αριθμός για κάθε πόλωση του σπιν ισούται με το τοπολογικό αναλλοίωτο του συστήματος. Για τον λόγο αυτό η αγωγιμότητα Hall προκύπτει χβαντισμένη στη μορφή $\sigma_H = C e^2 / \hbar$, όπου C ισούται με το τοπολογικό αναλλοίωτο ή (αναλλοίωτο TKNN) του συστήματος το οποίο προκύπτει από την παρακάτω ολοκλήρωση σε όλη την πρώτη ζώνη Brillouin $C = \frac{1}{2\pi} \int_{T^2} d^2 k \Omega(\mathbf{k})$ της καμπυλότητας Berry $\Omega(\mathbf{k}) = \epsilon^{ij} \partial_i A_j(\mathbf{k})$, όπου $A_i(\mathbf{k}) = i \sum \langle u_n(\mathbf{k}) | \partial_i | u_n(\mathbf{k}) \rangle$ το αντίστοιχο διανυσματικό δυναμικό και $|u_n(\mathbf{k})\rangle$ το περιοδικό κομμάτι των ιδιοκαταστάσεων Bloch. Στην ίδια κατηγορία εμπίπτουν και τα χειρικά κυματα πυκνότητας $d + id_{xy}$, τα οποία και εμφανίζουν χβαντισμένη αγωγιμότητα Hall με την ίδια συμπεριφορά [209, 210, 211, 212].

Τα συστήματα της κλάσης *AII* διατηρούν μόνο τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου όπως αυτή εκφράζεται μέσω τελεστή για τον οποίο ισχύει $\mathcal{T}^2 = -1$. Στην κλάση αυτή εμπίπτουν οι τοπολογικοί μονωτές δύο και τριών χωρικών διαστάσεων. Στα συστήματα αυτά, η τοπολογική κατάσταση προστατεύεται από τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου ή αντίστροφα καταστρέφεται όταν στο σύστημα εισαχθούν όροι αλληλεπίδρασης που παραβιάζουν τη συγκεκριμένη συμμετρία. Το τοπολογικό αναλλοίωτο για συστήματα 2 και 3 χωρικών διαστάσεων που ανήκουν στη συγκεκριμένη κλάση ανήκει στην ομάδα \mathbb{Z}_2 , δηλαδή ισοδυναμεί με το υπόλοιπο διαίρεσης ακεραίου με

το 2. Έτσι, στα συστήματα αυτά, σύμφωνα με το θεώρημα δείκτη μόνο μια (για κάθε πόλωση του σπιν) κατάσταση μηδενικής ενέργειας εντοπισμένη στο σύνορό του με τοπολογικά τετριμμένες περιοχές είναι τοπολογικά ευσταθής. Πράγματι οι τοπολογικοί μονωτές, ενώ έχουν μονωτική συμπεριφορά στο εσωτερικό τους, στο σύνορό του με το κενό εμφανίζονται ελικοειδείς ενεργειακές ζώνες με επιφάνεια Fermi. Για τον λόγο αυτό τα συστήματα αυτά ονομάζονται και σπιν χβαντικοί μονωτές Hall οι οποίοι εμφανίζουν ρεύματα σπιν εντοπισμένα στο σύνορό τους. Η χβαντική σπιν αγωγιμότητα Hall στα συστήματα αυτά είναι της μορφής $\sigma_H = C2e^2/\hbar$, όπου ο συντελεστής C ισούται με το τοπολογικό αναλλοίωτο του συστήματος [146].

Οι κλάσεις BDI , D και $DIII$ αναφέρονται σε συστήματα όπου εμφανίζονται ζεύγη φερμιονίων και συνεπώς περιγράφονται από Χαμιλτονιανές τύπου BdG. Στα συστήματα αυτά είναι εγγενής η συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής και συνεπώς η συμμετρία συζυγίας φορτίου είναι πάντα παρούσα με $C^2 = 1$ για τον αντίστοιχο τελεστή. Στην πραγματικότητα οι κλάσεις D και $DIII$ είναι το BdG ανάλογο των κλάσεων A και AII αντίστοιχα που σχετίζονται με διεγέρσεις τύπου Dirac. Η αναλογία αυτή είναι πιο ακριβής για συστήματα δύο διαστάσεων, όπου συστήματα στις κλάσεις D και $DIII$ υποστηρίζουν στο σύνορο τους \mathbb{Z} (χειρικές) και \mathbb{Z}_2 (ελικοειδείς) καταστάσεις, σε αντιστοχία με εκείνες των κλάσεων A και AII , οι οποίες όμως στη συγκεκριμένη περίπτωση λόγω της συμμετρίας σωματιδίου-αντισωματιδίου είναι τύπου Majorana και όχι Dirac. Τα συστήματα στην BDI κλάση ικανοποιούν τη συνθήκη σχετική με τη γενικευμένη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου όπου για τον αντίστοιχο τελεστή ισχύει $\mathcal{T}^2 = 1$. Τα συστήματα στην κλάση BDI παρουσιάζουν επίσης τη χειρική συμμετρία που εφαρμόζεται από τον αντίστοιχο τελεστή. Για τον λόγο αυτό η συγκεκριμένη κλάση ονομάζεται και κλάση χειρικής συμμετρίας.

Λόγω της παρουσίας της συμμετρίας σωματιδίου-αντισωματιδίου, στα συστήματα που ανήκουν στις κλάσεις BDI , D και $DIII$ οι εντοπισμένες καταστάσεις που εμφανίζονται στα σύνορα τοπολογικών καταστάσεων των συστημάτων αυτών με τοπολογικά τετριμμένες περιοχές είναι τύπου Majorana. Συγκεκριμένα οι καταστάσεις αυτές που έχουν μηδενική ενέργεια αποτελούν αντισωματίδια του εαυτού τους και συνεπώς αποτελούν δέσμιες καταστάσεις Majorana. Οι δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας διαχωρίζονται από τις υπόλοιπες μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος μέσω ενός πεπερασμένου ενεργειακού χάσματος και λόγω των μοναδικών ιδιοτήτων τους, θεωρείται ότι μπορούν να οδηγήσουν στην πραγματοποίηση τοπολογικών χβαντικών υπολογιστών. Για τον λόγο αυτό οι δέσμιες αυτές καταστάσεις επεξηγούνται περαιτέρω στην παρακάτω ενότητα.

5.1.3 Δέσμιες καταστάσεις Majorana

Ως σωματίδια Majorana (MFs) ορίζουμε τα σωματίδια τα οποία αποτελούν τα αντισωματίδια του εαυτού τους. Ενώ αρχικά είχαν προσδιοριστεί ως θεμελιώδη σωματίδια, τα τελευταία χρόνια διεξάγεται εντατική έρευνα για τον εντοπισμό τους ως επαγόμενες μονοσωματιδιακές διεγέρσεις σε συστήματα πολλών σωματιδίων. Κίνητρο για τη συγκεκριμένη έρευνα αποτελούν οι μοναδικές ιδιότητες των συγκεκριμένων σωματιδίων οι οποίες τα καθιστούν ιδανικά για τη δημιουργία τοπολογικών χβαντικών υπολογιστών. Μία εκ των μοναδικών ιδιοτήτων των συγκεκριμένων σωματιδίων είναι η μη-Αβελιανή στατιστική εναλλαγής που επιδεικνύουν σε διδιάστατα συστήματα [160, 161, 168]. Στην πραγματικότητα πρόκειται για μη-Αβελιανά ανιόνια τα οποία αντιστοιχούν σε μισά φερμιόνια υπό την έννοια ότι χρειάζονται δύο τέτοια σωματίδια για τη δημιουργία συμβατικών φερμιονικών καταστάσεων. Η θεμελιώδης κατάσταση ενός συστήματος με N το πλήθος ζευγάρια Majorana μηδενικής ενέργειας παρουσιάζει έναν 2^N εκφυλισμό. Έτσι, οι χβαντικές καταστάσεις που χαρακτηρίζονται από τον αριθμό κατάληψης των φερμιονικών καταστάσεων που δημιουργούνται από τα N ζευγάρια Majorana αποτελούν τη βάση μιας πολλαπλότητας της θεμελιώδους κατάστασης διάστασης 2^N . Η μη-Αβελιανή στατιστική των MFs μας δίνει τη δυνατότητα να μετασχηματίσουμε την αρχική χβαντική κατάσταση σε μια τελείως διαφορετική κατάσταση του συγκεκριμένου χώρου μέσω της εναλλαγής οποιουδήποτε ζεύγους από τα παραπάνω σωματίδια. Με τον τρόπο αυτό, η εναλλαγή των συγκεκριμένων σωματιδίων επιτρέπει μια ανεκτή σε σφάλματα επεξεργασία της χβαντικής πληροφορίας [158].

Μαθηματικά κάθε συμβατική φερμιονική κατάσταση μπορεί να αναλυθεί σε δύο ανιόνια Majorana. Συνεπώς, η ανάλυση αυτή αποκτά φυσική σημασία μόνο για ισχυρώς απεντοπισμένες φερμιονικές καταστάσεις για τις οποίες οι δύο συνιστώσες Majorana δεν επικοινωνούν, ή σε περιπτώσεις που η αλληλεπίδραση μεταξύ των ιδιοκαταστάσεων Majorana απαγορεύεται λόγω κάποιας συμμετρίας του συστήματος. Ο χωρικός αυτός απεντοπισμός που χαρακτηρίζει τις συγκεκριμένες δέσμιες καταστάσεις, είναι ο λόγος που τις καθιστά ευσταθείς ως προς τοπικές διαταραχές του συστήματος και συνεπώς ιδανικές για την αποθήκευση κβαντικής πληροφορίας.

Στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης τα φερμιόνια Majorana αναπαριστώνται μέσω αυτοσυζυγών τελεστών $\gamma = \gamma^\dagger$. Καθώς τα συμβατικά φερμιόνια χαρακτηρίζονται από ηλεκτρικό φορτίο, είναι φυσικά διακριτά από τα αντισωματίδιά τους και συνεπώς για τους αντίστοιχους τελεστές ισχύει $c \neq c^\dagger$. Η παρατήρηση αυτή μας δείχνει τον δρόμο για τη δημιουργία φερμιονίων Majorana στα συστήματα συμπυκνωμένης ύλης ως διεγέρσεων οι οποίες δεν μπορούν να χαρακτηριστούν από συγκεκριμένο ηλεκτρικό φορτίο. Η έννοια του ηλεκτρικού φορτίου δεν ορίζεται καλώς σε συστήματα που παραβιάζουν τη συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ της κβαντικής φάσης, της συζυγούς στην πυκνότητα σωματιδίων μεταβλητής. Οι μονοσωματιδιακές διεγέρσεις στα συστήματα αυτά είναι συναφείς υπερθέσεις καταστάσεων ηλεκτρονίου και οπής. Για τους παραπάνω λόγους η εμφάνιση φερμιονίων Majorana αναμένεται σε συστήματα που παραβιάζουν τη $U(1)$ συμμετρία και έχουν ιδιοκαταστάσεις μηδενικής ενέργειας οι οποίες δεν χαρακτηρίζονται από ηλεκτρικό φορτίο.

Τέτοια συστήματα είναι οι υπεραγωγοί με ζεύγη ηλεκτρονίων ίδιου σπιν εκ των οποίων η πιο απλή μορφή είναι οι υπεραγωγοί p - wave συμμετρίας. Πράγματι οι ιδιοτελεστές των συγκεκριμένων συστημάτων είναι της γενικής μορφής $f = u c_\sigma^\dagger + v^* c_\sigma$, όπου $\sigma = \uparrow, \downarrow$ αναφέρεται στην πόλωση του σπιν. Οι ιδιοκαταστάσεις μηδενικής ενέργειας στα συστήματα αυτά είναι ισόποσες υπερθέσεις καταστάσεων ηλεκτρονίου και οπής και συνεπώς είναι ηλεκτρικά ουδέτερες. Συνεπώς οι καταστάσεις αυτές είναι δέσμιες καταστάσεις Majorana. Ένα συζυγές ζευγάρι ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας που αντιστοιχεί στους τελεστές f^\dagger και f μπορεί να αναχθεί σε ζεύγος καταστάσεων Majorana με αντίστοιχους τελεστές $\gamma_1 = f^\dagger + f$, $\gamma_2 = i(f^\dagger - f)$ οι οποίοι έχουν την ιδιότητα $\gamma_{1(2)} = \gamma_{1(2)}^\dagger$ [159]. Επιπλέον, οι υπεραγωγοί p συμμετρίας αποτελούν τοπολογικά μη-τετριμμένες φάσεις και συνεπώς οι δέσμιες καταστάσεις μηδενικής ενέργειας στο σύνορό τους είναι τοπολογικά προστατευμένες. Συνεπώς, οι υπεραγωγοί p με ζεύξη ηλεκτρονίων ίδιου σπιν αποτελούν τα ιδανικά συστήματα για τη δημιουργία δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας [160, 161]. Δυστυχώς όμως υπεραγωγοί p συμμετρίας δεν απαντώνται συχνά σε φυσικά συστήματα. Συγκεκριμένα η υπεραγωγιμότητα p συμμετρίας έχει προταθεί θεωρητικά ότι εμφανίζεται στο Sr_2RuO_4 [7] και στις $\nu = 5/2$ κλασματικές κβαντικές καταστάσεις Hall [157], ενώ πειραματικά έχει επιβεβαιωθεί μόνο στην υπέρρευστη φάση ${}^3He - A$ του υγρού ήλιου [140, 141].

Οι μοναδικές ιδιότητες των φερμιονίων Majorana αλλά και η σπανιότητα της υπεραγωγιμότητας p συμμετρίας σε φυσικά συστήματα, πυροδότησε την έρευνα για τη δημιουργία ενεργών p υπεραγωγίων πεδίων. Όπως αναφέραμε και στο εισαγωγικό κεφάλαιο της παρούσας διατριβής η προσπάθεια αυτή έχει μέχρι σήμερα αποδόσει πολυάριθμες προτάσεις για φυσικά συστήματα στα οποία επάγεται τοπολογική υπεραγωγιμότητα p συμμετρίας και στα οποία προβλέπεται η εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας.

Υπενθυμίζουμε ότι πρόσφατα πειράματα παρουσιάζουν ενθαρρυντικά αποτελέσματα προς την κατεύθυνση δημιουργίας τέτοιων καταστάσεων. Συγκεκριμένα, ισχυρές ενδείξεις για την παρουσία τέτοιων καταστάσεων εμφανίστηκαν σε πειράματα ετεροδομών ημιαγωγού/υπεραγωγού [213, 216, 214, 218], σε σιδηρομαγνητικές ατομικές αλυσίδες πάνω σε υπόστρωμα συμβατικού υπεραγωγού Pb [219] και σε στροβίλους σε διεπαφές υπεραγωγού/τοπολογικού μονωτή [220]. Μεταξύ των παραπάνω, ως πιο άμεση και έγκυρη θεωρείται η παρατήρηση των δέσμιων καταστάσεων Majorana μέσω μικροσκοπίας σάρωσης σήραγγος (scanning tunneling microscopy) στις σιδηρομαγνητικές ατομικές αλυσίδες, καθώς η πειραματική αυτή μέθοδος προσέφερε εκτός από τη δυνατότητα προσδιορισμού της μηδενικής ενέργειας των συγκεκριμένων καταστάσεων και την ανίχνευση της ισχυρά απεντοπισμένης δομής τους.

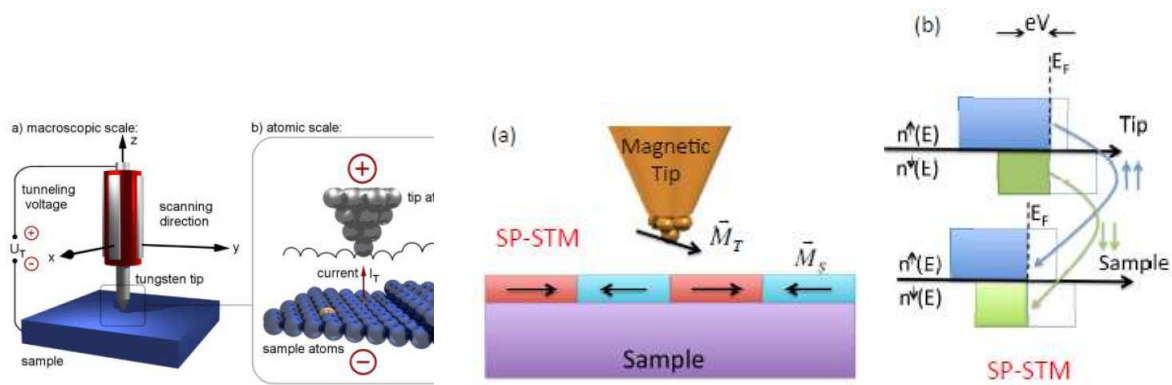
5.1.4 Αλυσίδες ατόμων σιδήρου πάνω σε συμβατικό υπεραγωγό μολύβδου: Πείραμα

Σε ένα πολύ πρόσφατο πείραμα όπου σιδηρομαγνητικές αλυσίδες ατόμων σιδήρου (Fe) εναποτέθηκαν πάνω σε συμβατικό υπεραγωγό μολύβδου (Pb), οι ερευνητές υποστηρίζουν ότι ανίχνευσαν δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας [219]. Οι συγκεκριμένες δέσμιες καταστάσεις παρατηρήθηκαν εντοπισμένες στις άκρες των σιδηρομαγνητικών ατομικών αλυσίδων μέσω μέτρησεων μικροσκοπίας σάρωσης σήραγγος (STM). Για τον λόγο αυτό στη συνέχεια παραθέτουμε κάποια γενικά στοιχεία της συγκεκριμένης πειραματικής μεθόδου.

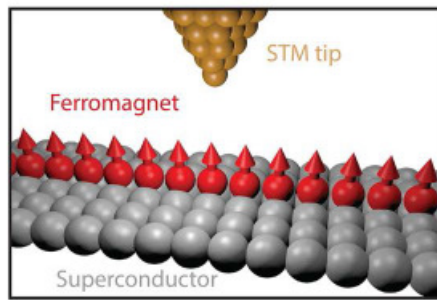
Η μέθοδος STM εφευρέθηκε το 1981 από τους Gerd Binnig και Heinrich Rohrer και αμέσως αναγνωρίστηκε ως ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο για την κατανόηση φαινομένων της φυσικής στερεάς κατάστασης. Λόγω της υψηλής χωρικής ανάλυσης η μέθοδος STM επέτρεψε για πρώτη φορά την οπτικοποίηση νανοδομών σε ατομικό επίπεδο. Η εξέλιξη της μεθόδου στα χρόνια που ακολούθησαν οδήγησε τη δυνατότητα του προσδιορισμού της τοπικής ηλεκτρονιακής δομής σε διάφορα νανοδομήματα και τη διαχείριση ατόμων, ανοίγοντας τον δρόμο για την ανάπτυξη καινοτόμων εφαρμογών. Επιπλέον, η ανακάλυψη της σπιν-πολωμένης μεθόδου STM (SP-STM) έδωσε τη δυνατότητα για την ανίχνευση των μαγνητικών ιδιοτήτων των υλικών και οδήγησε στην ταυτοποίηση πολλών νέων μαγνητικών φάσεων.

Η αρχή λειτουργίας της μεθόδου βασίζεται στο κβαντομηχανικό φαινόμενο σήραγγος κατά το οποίο τα ηλεκτρόνια μπορούν να διαπερνούν φράγματα δυναμικού αντίθετα με τις προβλέψεις της κλασικής θεωρίας. Το πιο σημαντικό στοιχείο ενός μικροσκοπίου σάρωσης σήραγγος είναι η ακίδα ανίχνευσης, η οποία είναι προσκολλημένη σε μια πιεζοηλεκτρική συσκευή οδήγησης για τη ρύθμιση της απόστασής της από την επιφάνεια του προς εξέταση δείγματος. Επιπρόσθετα ηλεκτρονικά συστήματα χρησιμοποιούνται για την καταγραφή των μετρήσεων και την ελαχιστοποίηση του θορύβου. Εκμεταλλευόμενοι το φαινόμενο σήραγγος μεταξύ της ακίδας και του δείγματος, μπορούμε να χαρτογραφήσουμε την επιφάνειά του και να μετρήσουμε τοπικά τις ηλεκτρονικές ιδιότητές της. Σύμφωνα με τους νόμους της κβαντομηχανικής τα ηλεκτρόνια μπορούν να διαπεράσουν το φράγμα δυναμικού που δημιουργείται μεταξύ της ακίδας και της επιφάνειας του δείγματος. Έτσι, κατά την εφαρμογή κατάλληλης τάσης V μεταξύ των δύο αυτών ηλεκτροδίων (ακίδας και δείγματος) το φαινόμενο σήραγγος οδηγεί στην εμφάνιση ρεύματος φορτίου I το οποίο και μετράται από τη συσκευή. Οι μοναδικές δυνατότητες του μικροσκοπίου σάρωσης σήραγγος οφείλονται κυρίως στην εκθετική εξάρτηση του ρεύματος σήραγγος I από την απόσταση d που χωρίζει την ακίδα από το δείγμα. Συγκεκριμένα, το ρεύμα σήραγγος προκύπτει από την παρακάτω έκφραση $I = CeV^{-2} \frac{\sqrt{2m\Phi}}{\hbar} d$, όπου Φ αντιστοιχεί στο φράγμα δυναμικού ή ισοδύναμα στο απαιτούμενο έργο εξαγωγής ενός ηλεκτρονίου από το δείγμα. Για παράδειγμα θεωρώντας μια τυπική τιμή $\Phi \sim 4eV$ για μεταλλικά υλικά, μια αύξηση της απόστασης d κατά $0.1nm$ οδηγεί σε μείωση του ρεύματος σήραγγος κατά μία τάξη μεγέθους. Μετρώντας τη διαφορική αγωγιμότητα dI/dV μπορούμε να προσδιορίσουμε την τοπική πυκνότητα καταστάσεων ($LDOS$) του δείγματος. Σύμφωνα με τη θεωρία Bardeen για το φαινόμενο σήραγγος η διαφορική αγωγιμότητα είναι ανάλογη της πυκνότητας καταστάσεων της ακίδας και του δείγματος $dI/dV \propto n_T(E_F)n_S(E_F + eV)$. Σημειώνουμε ότι διάφορα μοντέλα έχουν αναπτυχθεί, με πιο γνωστό το μοντέλο Tersoff-Hamann, για τον προσδιορισμό της πυκνότητας καταστάσεων n_T της ακίδας, η γνώση της οποίας απαιτείται για τον προσδιορισμό της πυκνότητας καταστάσεων n_S του δείγματος. Με παρόμοιο τρόπο η μέθοδος SP-STM μας δίνει τη δυνατότητα προσδιορισμού του μαγνητικού χαρακτήρα του δείγματος μετρώντας την εξάρτηση του ρεύματος σήραγγος από τον προσανατολισμό της μαγνήτισης της ακίδας. Τέλος, εκμεταλλευόμενοι το φαινόμενο ανισοτροπίας μαγνητοαντίστασης σήραγγος (TAMR), μπορούμε να ανιχνεύσουμε την παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς στο δείγμα [222].

Το πείραμα το οποίο περιγράφουμε στην παρούσα ενότητα και αφορά άτομα Fe που εναποτέθηκαν στην επιφάνεια συμβατικού υπεραγωγού Pb, βασίστηκε σε αντίστοιχη θεωρητική πρόταση που προέβλεπε τη δημιουργία τοπολογικών υπεραγωγικών φάσεων σε σιδηρομαγνητικές αλυσίδες σε εγγύτητα με συμβατικό υπεραγωγό παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς [189]. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιώντας τη μέθοδο STM οι ερευνητές στο συγκεκριμένο πείραμα προσπάθησαν



Σχήμα 5.1: αριστερά) Μικροσκοπία σήραγγος σάρωσης (STM) : Εφαρμόζοντας τάση μεταξύ της ακίδας και του δείγματος εμφανίζονται ρεύματα λόγω του κβαντομηχανικού φαινομένου σήραγγος. Συγκεκριμένα για εφαρμογή αρνητικής τάσης στο δείγμα, ηλεκτρόνια από τις κατειλημμένες καταστάσεις στην επιφάνεια του δείγματος μεταπηδούν σε ελεύθερες καταστάσεις της ακίδας. Κρατώντας το ρεύμα σήραγγος σταθερό καθώς η ακίδα σαρώνει το δείγμα, προσδιορίζεται η τοπογραφία της επιφάνειας του δείγματος, ενώ για σταθερό ύψος της ακίδας καθορίζεται η τοπική πυκνότητα καταστάσεων του δείγματος μετρώντας τη διαφορική αγωγιμότητα συναρτήσει της εφαρμοζόμενης τάσης. μέση) Σπιν-πολωμένη μικροσκοπία σήραγγος σάρωσης (SP-STM) όπως παρουσιάζεται σχηματικά. δεξιά) Παρουσιάζεται η πυκνότητα καταστάσεων για κάθε σπιν για το δείγμα και την ακίδα. Λόγω διατήρησης του σπιν, ηλεκτρόνια με σπιν \uparrow μεταπηδούν σε ελεύθερες καταστάσεις του δείγματος με το ίδιο σπιν. Το ίδιο ισχύει και για ηλεκτρόνια με σπιν \downarrow . Από μετρήσεις της διαφορικής αγωγιμότητας σε σχέση με ένα εφαρμοζόμενο μαγνητικό πεδίο προσδιορίζεται ο μαγνητικός χαρακτήρας του δείγματος λόγω του φαινομένου μαγνητοαντίστασης σήραγγος (TMR) [222].

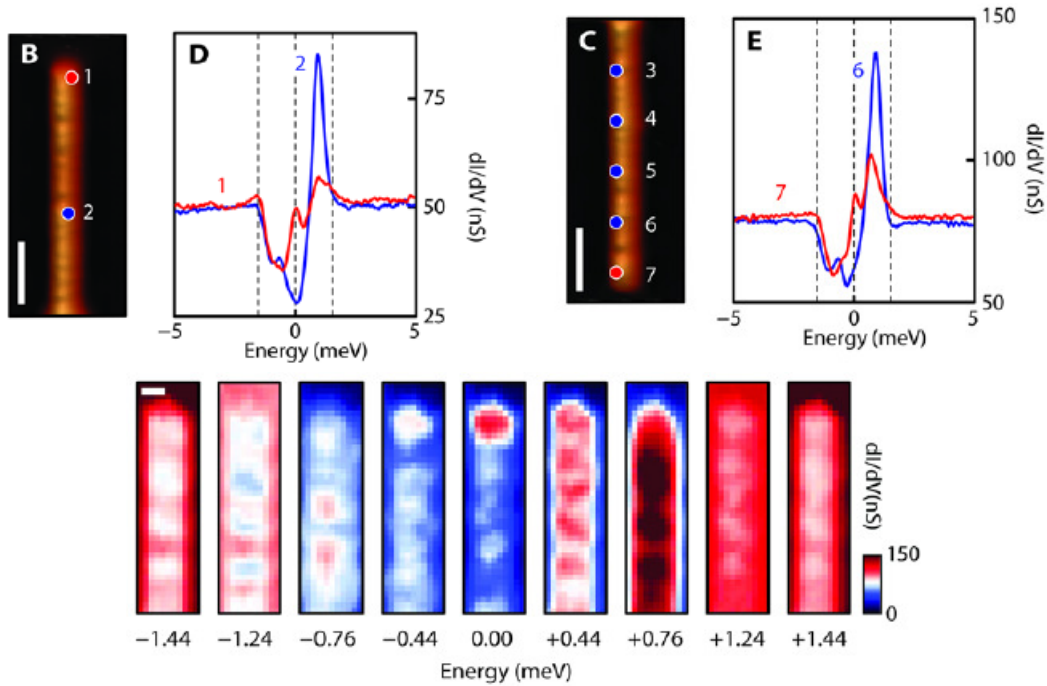


Σχήμα 5.2: Σχηματική αναπαράσταση της θεωρητικής πρότασης για τη δημιουργία και ανίχνευση δέσμιων καταστάσεων Majorana : σιδηρομαγνητική ατομική αλυσίδα τοποθετείται στην επιφάνεια ενός υπεραγωγού με ισχυρές αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς και μελετάται με τη μέθοδο STM [219].

να εξακριβώσουν τη δημιουργία σιδηρομαγνητικής φάσης στις ατομικές αλυσίδες, την παρουσία σύζευξης σπιν-τροχιάς στην επιφάνεια του Pb υπεραγωγού, την επαγωγή ενός υπεραγωγίου ενεργειακού χάσματος στο εσωτερικό των ατομικών αλυσίδων και την εμφάνιση κορυφών μηδενικής τάσης στο φάσμα αγωγιμότητας στις άκρες των ατομικών αλυσίδων λόγω της παρουσίας των δέσμιων καταστάσεων Majorana.

Αρχικώς η δημιουργία ατομικών αλυσίδων Fe μέγιστου μήκους 500\AA πάνω στην (110) επιφάνεια του Pb ταυτοποιήθηκε μέσω εικόνων STM. Όπως προκύπτει από την ανάλυση των σχετικών μετρήσεων και επιβεβαιώνεται από σχετικούς υπολογισμούς της θεωρίας συναρτησιακού πυκνότητας DFT οι δομές σιδήρου που σχηματίζονται αποτελούνται από τρία στρώματα σε διαμόρφωση zig-zag μερικώς ενσωματωμένα στο στρώμα Pb. Ο σιδηρομαγνητισμός στις ατομικές αλυσίδες ταυτοποιήθηκε μέσω SP-STM μετρήσεων της αγωγιμότητας σήραγγος dI/dV για τάση $V = 30\text{mV}$ συναρτήσει μαγνητικού πεδίου κάθετο στην επιφάνεια του δείγματος. Οι σχετικές μετρήσεις πάνω στις ατομικές αλυσίδες εμφάνισαν βρόχους υστέρησης, χαρακτηριστικές του φαινομένου σήραγγος μεταξύ δύο σιδηρομαγνητών και οι οποίες σχετίζονται με την αλλαγή του προσανατολισμού της μαγνήτισης στην ακίδα χρωμίου Cr λόγω του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Όπως προκύπτει από τις μετρήσεις αυτές η μαγνήτιση των αλυσίδων σιδήρου είναι κάθετη

στην επιφάνεια του υπεραγωγού. Από υπολογισμούς DFT για τη συγκεκριμένη διαμόρφωση των ατόμων Fe, η εκτιμώμενη ενέργεια εναλλαγής είναι περίπου $2.4eV$. Η συγκεκριμένη ισχυρή αλληλεπίδραση αντιστοιχεί σε μια πλήρως κατειλημμένη ενεργειακή ζώνη με την επιφάνεια Fermi να δημιουργείται στη ζώνη των μειοψηφικών σπιν. Οι ίδιες μετρήσεις στην επιφάνεια του υπεραγωγού εμφανίζουν συμμετρικά ως προς το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο φάσματα χωρίς βρόχους υστέρησης επιβεβαιώνοντας την απουσία μαγνήτισης στον υπεραγωγό. Παρουσιάζεται όμως και σε αυτές μια συσχέτιση της αγωγιμότητας με τη μαγνήτιση της αλυσίδας, γεγονός το οποίο οι ερευνητές ερμηνεύουν ως ένδειξη για την παρουσία ισχυρών αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς στην επιφάνεια του υπεραγωγού Pb, καθώς ανάλογες καμπύλες μαγνητοαντίστασης σήραγγος έχουν αναφερθεί σε αντίστοιχες μετρήσεις σε ημιαγωγούς [214].



Σχήμα 5.3: πάνω) Η τοπογραφία του πάνω (B) και κάτω (C) άκρου της αλυσίδας Fe και οι θέσεις στις οποίες αντιστοιχούν τα φάσματα που παρουσιάζονται στα σχήματα D και E αντίστοιχα. Όλες οι μετρήσεις διεξήχθησαν σε θερμοκρασία $T = 1.4K$. Η κορυφή μηδενικής τάσης παρατηρείται μόνο στα ακραία σημεία που σημειώνονται με κόκκινο. Στα υπόλοιπα σημεία η τοπική πυκνότητα καταστάσεων παρουσιάζει το υπεραγωγίμο χάσμα ($\sim 300\mu eV$) που επάγεται στις αλυσίδες και την παρουσία καταστάσεων Yu-Shiba-Rusinov με ενέργεια μικρότερη από το υπεραγωγίμο ενεργειακό χάσμα του Pb ($\sim 1.4meV$). κάτω) Ενεργειακή και χωρική ανάλυση της αγωγιμότητας των αλυσίδων κοντά στα άκρα τους. Στα άκρα των αλυσίδων παρουσιάζεται ενισχυμένη αγωγιμότητα για μηδενική τάση καταδεικνύοντας την παρουσία εντοπισμένων καταστάσεων μηδενικής ενέργειας. Για $E = 0.44meV$ και $E = 0.77meV$ παρατηρούμε τις καταστάσεις Yu-Shiba-Rusinov που εκτείνονται σε ολόκληρη την αλυσίδα. Οι δέσιμες καταστάσεις μηδενικής ενέργειας εντοπίζονται περίπου $15-20\text{\AA}$ μακριά από τα άκρα των αλυσίδων [219].

Από τα STM φάσματα στην επιφάνεια του Pb, το συμβατικό υπεραγωγίμο ενεργειακό χάσμα εκτιμήθηκε περίπου στα $\Delta_s = 1.36meV$. Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων στο μέσο των ατομικών αλυσίδων ανέδειξε την παρουσία καταστάσεων Yu-Shiba-Rusinov σε ενέργειες περίπου $\pm 1meV$. Επιπλέον μέσω των ίδιων μετρήσεων το υπεραγωγίμο χάσμα πάνω στις αλυσίδες εκτιμήθηκε στα $200 - 300\mu eV$. Καθώς προσεγγίζουμε τα άκρα των ατομικών αλυσίδων τα αντίστοιχα φάσματα STM που αποτυπώνουν την τοπική πυκνότητα καταστάσεων, εμφανίζουν επιπλέον μια κορυφή αγωγιμότητας για μηδενική τάση, zero-bias conductance peak (ZBCP), η οποία γίνεται πιο εμφανής σε απόσταση περίπου $15-20\text{\AA}$ από το άκρα (Σχ. 5.3). Σημειώνουμε ότι οι παραπάνω μετρήσεις διεξήχθησαν σε θερμοκρασία $T = 1.4K$, τόσο με μεταλλικές, όσο και με υπεραγωγίμες αλυσίδες για καλύτερη ενεργειακή ανάλυση.

Καθώς σύμφωνα με τις μετρήσεις επιβεβαιώνεται η παρουσία όλων των προαπαιτούμενων της

θεωρητικής πρότασης πάνω στην οποία βασίσθηκε το εν λόγω πείραμα, η ZBCP στα φάσματα διαφορικής αγωγιμότητας κοντά στα άκρα των ατομικών αλυσίδων μπορεί να ερμηνευθεί ως η πρώτη άμεση παρατήρηση των δέσμιων καταστάσεων Majorana. Με στόχο να αποκλείσουν τη συσχέτιση της συγκεκριμένης ZBCP με άλλα φαινόμενα όπως το φαινόμενο Kondo, οι ερευνητές επιβεβαίωσαν την εξαφάνιση της ZBCP από τα φάσματα αγωγιμότητας όταν η υπεραγωγιμότητα στην επιφάνεια του Pb καταστρέφεται. Μάλιστα θεωρούν ότι η μικρή τιμή της αγωγιμότητας μηδενικής τάσης $\simeq 1.3 \times 10^{-4} e^2/h$ σε σχέση με την προβλεπόμενη από τη θεωρία τιμή $2e^2/h$ είναι αναμενόμενη για τις συνθήκες του συγκεκριμένου πειράματος, όπου η ενέργεια σύζευξης μεταξύ της αλυσίδας και των καταστάσεων Majorana στα άκρα των αλυσίδων είναι μικρή σε σχέση με τη θερμική ενέργεια για θερμοκρασίες $T = 1.4K$ [223].

Παρόλο που η παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς αναμένεται στην επιφάνεια του Pb, το μέγεθος της αλληλεπίδρασης δεν προσδιορίζεται από τις μετρήσεις του συγκεκριμένου πειράματος. Σημειώνουμε ότι οι σχετικές θεωρητικές προτάσεις για σιδηρομαγνητικές ατομικές αλυσίδες απαιτούν την παρουσία ισχυρής αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς για την εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana στα συγκεκριμένα συστήματα. Εναλλακτικές προτάσεις προβλέπουν την εμφάνιση καταστάσεων Majorana απουσία εγγενούς αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς στην περίπτωση που οι ατομικές αλυσίδες βρίσκονται, είτε σε μια ελικοειδή μαγνητική φάση [177], είτε σε μια αντισιδηρομαγνητική παρουσία όμως υπερρρευμάτων [196]. Όμως η δημιουργία της σιδηρομαγνητικής φάσης στις ατομικές αλυσίδες του συγκεκριμένου πειράματος όπως προκύπτει από τις σχετικές μετρήσεις θεωρείται σχεδόν αδιαμφισβήτητη.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις μας οδήγησαν στη διατύπωση και διερεύνηση μιας διαφορετικής πρότασης για τη δημιουργία τοπολογικής υπεραγωγιμότητας στη συγκεκριμένη πειραματική διάταξη. Σύμφωνα με την προσέγγισή μας η εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana στα άκρα σιδηρομαγνητικών συστημάτων σε εγγύτητα με συμβατικό υπεραγωγό μπορεί να αποδοθεί στην εμφάνιση υπερρρευμάτων και συνιστώσων του μαγνητικού πεδίου των αλυσίδων μέσα στο επίπεδο του υπεραγωγού. Στην επόμενη ενότητα επεξηγούμε αρχικά εκτενώς τον μηχανισμό αυτό και εν συνεχεία προτείνουμε άλλες ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού οι οποίες σύμφωνα με τον μηχανισμό μας μπορούν να υποστηρίξουν δέσμιες καταστάσεις Majorana.

5.2 Καταστάσεις Majorana σε ετεροδομές Σιδηρομαγνήτη/Υπεραγωγού.

Παρακάτω παρουσιάζουμε έναν νέο μηχανισμό για την επαγωγή τοπολογικής p – $wave$ υπεραγωγιμότητας σε σιδηρομαγνητικά συστήματα συζευγμένα με συμβατικό υπεραγωγό. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα που θα παρουσιάσουμε παρακάτω, η αλληλεπίδραση μεταξύ μαγνητικών πεδίων και ρευμάτων φορτίου παρουσία ενός συμβατικού υπεραγωγού, επάγει τοπολογική p – $wave$ υπεραγωγιμότητα ακόμα και απουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς. Αρχικά εξετάζουμε τον μηχανισμό σε συστήματα που αποτελούνται από μονοδιάστατους ή οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες εμβαπτισμένους σε συμβατικούς υπεραγωγούς. Τα συστήματα αυτά είναι παρόμοια με αυτό του πειράματος που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα. Όπως θα δείξουμε παρακάτω όμως, βάσει του ίδιου μηχανισμού, τοπολογική υπεραγωγιμότητα και φερμιόνια Majorana μπορούν να επαχθούν και σε ετεροδομές που αποτελούνται από σιδηρομαγνητικά και υπεραγωγικά στρώματα με την εφαρμογή πεδίων Zeeman και υπερρευμάτων.

Στην περίπτωση των σιδηρομαγνητών που είναι εμβαπτισμένοι στον υπεραγωγό, βασικό ρόλο παίζει το μαγνητικό πεδίο που δημιουργείται από τον σιδηρομαγνήτη, του οποίου τη μαγνητική θεωρούμε ότι είναι κάθετη στην επιφάνεια του υπεραγωγού. Το πεδίο συζεύγνυται ηλεκτρομαγνητικά με τα τροχιακά των ηλεκτρονίων και επάγει ρεύματα τα οποία ρέουν γύρω από τον σιδηρομαγνήτη θωρακίζοντας τον υπεραγωγό από την αντίστοιχη μαγνητική ροή. Επιπλέον, η στροφή του μαγνητικού πεδίου καθώς απομακρυνόμαστε από τον σιδηρομαγνήτη συνεισφέρει σε συνιστώσες του πεδίου παράλληλες με την επιφάνεια του υπεραγωγού. Λόγω της συμμετρίας της πειραματικής διάταξης, οι επίπεδες αυτές συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου είναι αντισυμμετρικές

ως προς τον άξονα συμμετρίας του σιδηρομαγνήτη. Το παράλληλο στο επίπεδο του υπεραγωγού μαγνητικό αυτό πεδίο δεν αποσβένεται από τα επαγόμενα ρεύματα θωράκισης και συνεπώς δρα στο εσωτερικό του υπεραγωγού ως πεδίο Zeeman, πεδίο που δρα μόνο στην πόλωση του σπιν των ηλεκτρονίων. Σημειώνουμε ότι η επίδραση του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από νανοδομές μαγνητικών ατόμων τοποθετημένων πάνω ή μέσα σε υπεραγωγίμα στρώματα, έχει διερευνηθεί σε παλαιότερες εργασίες στα πλαίσια της δημιουργίας στροβίλων στο υπεραγωγίμο στρώμα [230, 231, 232, 233, 234, 235, 236]. Δυστυχώς μέχρι σήμερα δεν υπάρχει αντίστοιχη μελέτη του μαγνητικού πεδίου που δημιουργείται από μαγνητικές αλυσίδες.

Παρόλα αυτά μπορούμε να κάνουμε την παρακάτω ποιοτική ανάλυση βασιζόμενοι σε κάποιες πραγματικές παραμέτρους του πειράματος όπως έχουν υπολογιστεί και όπως παρουσιάζονται στο σχετικό άρθρο [219]. Ο μόλυβδος είναι ένας συμβατικός υπεραγωγός, δηλαδή συμμετρίας s -wave, με υπεραγωγίμο χάσμα ίσο με $\Delta \simeq 1.4meV$ και συνεπώς κρίσιμη θερμοκρασία $T_c \simeq 7.2K$, όπως προβλέπεται και από τη θεωρία BCS, σύμφωνα με την οποία $\Delta \simeq 1.75kT_c$, όπου $k = 1.4 \times 10^{-23} J/K$, η σταθερά Boltzmann. Το μήκος συνάφειας του Pb υπεραγωγού είναι $\xi_0 \simeq 80nm$ ή ισοδύναμα $\xi_0 \simeq 160a$ εκφρασμένο στην σταθερά πλέγματος a του Pb, όπως προκύπτει και από την σχέση $\xi_0 = \hbar v_F / \pi \Delta \simeq t / \Delta$, όπου $v_F = \hbar k_F / m^*$, η ταχύτητα Fermi, ενώ $m^* = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$, η ενεργός μάζα των φορέων του συστήματος. Σημειώνουμε ότι στην προσέγγιση ισχυρού δεσμού για την ενέργεια μεταπήδησης κοντινότερων γειτόνων ισχύει $t = \frac{\hbar^2}{2m^* a^2}$. Το μήκος εισχώρησης μαγνητικού πεδίου του Pb είναι $\lambda_0 \simeq 40nm$, οπότε και $\kappa = 1/2 < \frac{1}{\sqrt{2}}$ με αποτέλεσμα ο Pb να είναι υπεραγωγός τύπου I . Σημειώνουμε όμως, ότι λεπτά στρώματα Pb συμπεριφέρονται ως υπεραγωγοί τύπου II , επιτρέποντας έτσι την εισχώρηση μαγνητικής ροής, λόγω της δημιουργίας στροβίλων. Το κρίσιμο μαγνητικό πεδίο για τον Pb υπεραγωγό είναι $B_c \simeq 10^{-1} T$, όμως για μαγνητικά πεδία που εφαρμόζονται κάθετα στην μικρή διάσταση του υπεραγωγού, το κρίσιμο μαγνητικό πεδίο μπορεί να φτάσει μέχρι και $B'_c = 10T$. Αντίστοιχα, το κρίσιμο υπερρεύμα, ή καλύτερα η κρίσιμη ταχύτητα των φορέων, δίνεται από την σχέση $v_c = \Delta / \hbar k_F = \hbar / \pi m^* \xi_0$.

Για τον σίδηρο σημειώνουμε ότι η μαγνητική ροπή των ατόμων είναι προσεγγιστικά διπλάσια της μαγνητικής ροπής του Bohr, $\mu_B = 10^{-23} Am^2 = 10^{-4} eV/T$, δηλαδή $\mu_{Fe} \simeq 2\mu_B$. Το μαγνητικό πεδίο που δημιουργεί ένα άτομο Fe σε σφαιρικές συντεταγμένες, δίνεται από τις σχέσεις $B_r = 2|\mu_{Fe}| \mu_0 \frac{\cos(\theta)}{4\pi r^3}$ και $B_\theta = |\mu_{Fe}| \mu_0 \frac{\sin(\theta)}{4\pi r^3}$, όπου $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} Tm/A$ η μαγνητική διαπερατότητα του κενού. Το μαγνητικό αυτό πεδίο μπορεί να προκύψει από ένα διανυσματικό δυναμικό της μορφής $A_\phi = \frac{\sin(\theta)}{r^2} 10^{-3} Tnm$. Για μία αλυσίδα ατομών Fe, το μαγνητικό πεδίο στο επίπεδο που περιέχει την αλυσίδα και σε απόσταση x μικρή σε σχέση με το μήκος της, δίνεται από την σχέση $B_z = |\mu_{Fe}| \mu_0 \frac{\sin(\theta)}{2\pi x^3} \simeq \frac{10^3}{3x^3} T$, όπου στην δεύτερη ισότητα η απόσταση x εκφράζεται σε nm , ενώ το διανυσματικό πεδίο προκύπτει $A_y \simeq \frac{10^2}{x^2} Tnm$.

Σύμφωνα με την προσέγγισή μας το μαγνητικό αυτό πεδίο, δημιουργεί ρεύματα θωράκισης και επίπεδες συνιστώσες που δρουν στον υπεραγωγό ως ενεργά πεδία Zeeman. Το υπερρεύμα σε έναν υπεραγωγό προκύπτει γενικά από τη σχέση $\mathbf{J} = 2e\Delta^2(\hbar\nabla\phi - 2e\mathbf{A})$, όπου $\phi(r)$ η φάση του υπεραγωγίμου πεδίου $\Delta(r) = |\Delta|e^{i\phi(r)}$. Το διαμαγνητικό ρεύμα προκύπτει από τη σχέση $\mathbf{J}_d = -4e^2\mathbf{A}$, όταν το \mathbf{A} θεωρείται σταθερό στον χώρο. Σε ένα πλεγματο μοντέλο και στην προσέγγιση ισχυρού δεσμού, το ρεύμα θωράκισης εισάγεται μέσω του διανυσματικού δυναμικού και της φάσης Peierls, ϕ_P , μέσω της αντικατάστασης $t \rightarrow te^{-i\phi_P}$, όπου $\phi_P = \frac{\pi}{\phi_0} \int \mathbf{A} dr$, με $\Phi_0 = \frac{h}{2e} = 10^3 Tnm^2$ το χβάντο της μαγνητικής ροής σε υπεραγωγούς. Από τα παραπάνω προκύπτει η κρίσιμη τιμή του μαγνητικού δυναμικού, $\mathbf{A}_c = \frac{\Phi_0}{\pi\xi_0}$ και η αντίστοιχη φάση Peierls, $\phi_P < \Delta/t\pi$. Επίσης σύμφωνα με τα παραπάνω, θεωρώντας ότι τα άτομα Pb απέχουν περίπου 2\AA από τα άτομα της αλυσίδας Fe [219], το διανυσματικό δυναμικό στο σημείο αυτό είναι περίπου $\mathbf{A} = 0.05 Tnm$ και συνεπώς η φάση Peierls, $\phi_P \simeq 3 \times 10^{-4}$ ή $J/t = 10^{-4}$, όπου το J είναι ο όρος ρεύματος που εισάγουμε παρακάτω. Για τις επίπεδες συνιστώσες h_x του μαγνητικού πεδίου μπορούμε να θέσουμε $h_x \simeq 0.5 \times 10^{-4}$, θεωρώντας ότι στο επίπεδο του υπεραγωγού $\theta = \pi/3$. Γενικά θεωρήσαμε ότι $t = 1eV$, για την ενέργεια μεταπήδησης μεταξύ κοντινότερων γειτόνων στον Pb. Τέλος, για το υπεραγωγίμο πεδίο Δ του Pb θα έπρεπε να θεωρήσουμε $\Delta/t = 0.001$. Ισοδύναμα μπορούμε να κανονικοποιήσουμε το διαμαγνητικό ρεύμα J και τις επίπεδες συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου

h_x , ως προς το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο, οπότε προκύπτει $J = 0.1\Delta$ και $h_x = 0.05\Delta$.

Δυστυχώς για τις τιμές αυτές το πλεγματοτικό μοντέλο που χρησιμοποιούμε παρακάτω δεν μπορεί να δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα καθώς το επαγόμενο υπεραγωγίμο πεδίο p συμμετρίας είναι της τάξης $\Delta^p/t = 0.0001$, και συνεπώς απαιτείται αλυσίδα μήκους περίπου 1000 πλεγματοτικών σημείων για την παρατήρηση μηδενικών καταστάσεων Majorana. Για τον λόγο αυτό, επιλέγουμε σχετικά μεγάλη τιμή για το υπεραγωγίμο πεδίο κρατώντας όμως τις σχέσεις για το διαμαγνητικό ρεύμα $J = 0.1\Delta$ και το μαγνητικό πεδίο $h_x = 0.05\Delta$, τουλάχιστον για την περίπτωση των μονοδιάστατων αλυσίδων.

Παρακάτω παρουσιάζουμε ότι τα επαγόμενα υπερρεύματα και οι επίπεδες συνιστώσες Zeeman του μαγνητικού πεδίου αρκούν για την εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana στα άκρα των σιδηρομαγνητικών συστημάτων. Το βασικό χαρακτηριστικό του συγκεκριμένου μηχανισμού είναι ότι δεν απαιτεί την εγγενή παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς για την εμφάνιση τοπολογικής υπεραγωγιμότητας. Αντίθετα, είναι ο συνδυασμός του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου, με τα επαγόμενα ρεύματα θωράχισης και τις συνιστώσες Zeeman, που ισοδυναμεί με ένα p υπεραγωγίμο πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν. Το πεδίο αυτό επάγεται λόγω εγγύτητας στους σιδηρομαγνήτες και οδηγεί στην εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana στα άκρα τους.

Όπως προαναφέραμε ο μηχανισμός αυτός εκτός από το συγκεκριμένο φυσικό σύστημα του πειράματος μπορεί να εφαρμοστεί σε γενικότερες ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού διαφορετικής γεωμετρίας. Στις ετεροδομές αυτές το υπερρεύμα, ή ισοδύναμα ένα ηλεκτρικό πεδίο, και το πεδίο Zeeman μπορούν να εφαρμοστούν εξωτερικά με ελεγχόμενο τρόπο.

Η επαγωγή ενός p υπεραγωγίμου πεδίου ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν, λόγω της συνύπαρξης ενός συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου με πεδία Zeeman και ρεύματα (ηλεκτρικά πεδία), προβλέπεται από τον κανόνα επαγωγής πεδίων [48], σύμφωνα με τον οποίο τα πεδία οργανώνονται σε τετράδες συνύπαρξης όταν ικανοποιείται η παρακάτω συνθήκη

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C}\hat{D} = I. \quad (5.1)$$

όπου \hat{A} , \hat{B} , \hat{C} και \hat{D} είναι οι σπινωριακή αναπαράσταση των πεδίων. Σύμφωνα με τον συγκεκριμένο κανόνα η συνύπαρξη τριών πεδίων ισοδυναμεί με ένα τέταρτο πεδίο για το οποίο ικανοποιείται η σχέση Εξ.5.1.

Εν συνεχεία παρουσιάζουμε πως ο συγκεκριμένος κανόνας εφαρμόζεται στην περίπτωση του συγκεκριμένου μηχανισμού που προτείνουμε. Για τον λόγο αυτό αναπαριστούμε τα σχετικά πεδία στον σπινόρα $\Psi(\mathbf{k})^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\uparrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow})$. Τα διανυσματικά υπεραγωγίμο πεδία καθορίζονται όχι μόνο από τη μιγαδική παράμετρο τάξης, αλλά και από το διάνυσμά τους στον $SO(3)$ χώρο του σπιν. Το ίδιο ισχύει και για τα πεδία Zeeman. Για τον λόγο αυτό εισάγουμε για τα πεδία αυτά το διάνυσμα \mathbf{d} στον χώρο του σπιν. Παρατηρούμε ότι πράγματι για τις αναπαραστάσεις των συγκεκριμένων πεδίων ισχύει

$$\Delta J(\mathbf{d}_h \cdot \mathbf{h})(\mathbf{d}_p \cdot \mathbf{p}) \rightarrow (\tau_y \sigma_y)(I)(\tau_z \mathbf{d}_h \cdot \tilde{\sigma})(\tau_x \mathbf{d}_p \cdot \tilde{\sigma}) = I, \quad (5.2)$$

όπου $\boldsymbol{\tau}$ και $\boldsymbol{\sigma}$ οι μήτρες Pauli που δρουν στον χώρο Nambu και σπιν αντίστοιχα, και $\tilde{\sigma} = (\sigma_x, \tau_z \sigma_y, \sigma_z)$. Η παραπάνω σχέση ισχύει μόνο για $\mathbf{d}_h = \mathbf{d}_p$, επομένως το πεδίο Zeeman και το υπεραγωγίμο πεδίο p χαρακτηρίζονται από το ίδιο διάνυσμα \mathbf{d} στον χώρο σπιν. Η συσχέτιση των παραπάνω πεδίων και πιο συγκεκριμένα η επαγωγή του υπεραγωγίμου πεδίου \mathbf{p} όταν τα πεδία J , \mathbf{h} και Δ συνυπάρχουν, μπορεί να ερμηνευθεί επίσης στα πλαίσια των ιδιοτήτων που χαρακτηρίζουν κάθε πεδίο ως προς μετασχηματισμούς συμμετρίας του συστήματος. Παρακάτω αναφέρουμε ενδεικτικά τις ιδιότητες των πεδίων αυτών για τις συμμετρίες αντιστροφής χώρου \mathcal{I} , αντιστροφής χρόνου \mathcal{T} και την $\mathcal{S} = \mathcal{II}$. Τα διανυσματικά υπεραγωγίμο πεδία $\tau_x \mathbf{d}_p \cdot \tilde{\sigma}$ μετασχηματίζονται αντισυμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό αντιστροφής χώρου \mathcal{I} και συμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό αντιστροφής χρόνου \mathcal{T} και συνεπώς αντισυμμετρικά ως προς τον μετασχηματισμό $\mathcal{R} = \mathcal{IT}$. Αντίθετα το ισοτροπικό υπεραγωγίμο πεδίο μετασχηματίζεται συμμετρικά και ως προς

τους δύο αυτούς μετασχηματισμούς συμμετρίας. Επομένως για την επαγωγή ενός τέτοιου υπεραγωγίου πεδίου παρουσία του ιστροπικού πεδίου ζεύξης, απαιτείται το σπάσιμο των συμμετριών \mathcal{I} και \mathcal{R} . Η εφαρμογή ενός ηλεκτρικού πεδίου ή ισοδύναμα η παρουσία ενός ρεύματος J πράγματι σπάει τη συμμετρία \mathcal{I} , διατηρεί όμως τη συμμετρία \mathcal{R} . Συνεπώς απαιτείται και η παρουσία ενός πεδίου που σπάει τη συμμετρία \mathcal{R} , όπως είναι τα πεδία Zeeman. Έτσι, ο συνδυασμός του ηλεκτρικού πεδίου J , του πεδίου Zeeman h και του ιστροπικού υπεραγωγού Δ , ισοδυναμεί ως προς τις συγκεκριμένες συμμετρίες με ένα διανυσματικό υπεραγωγίο πεδίο p . Σημειώνουμε ότι η παρουσία ενός συμβατικού υπεραγωγίου πεδίου Δ είναι απαραίτητη καθώς σπάει τη συμμετρία βαθμίδας $U(1)$, όπως και το υπεραγωγίο πεδίο p . Οι ιδιότητες των συγκεκριμένων πεδίων ως προς τους συγκεκριμένους μετασχηματισμούς συμμετρίας μπορούν να εκφραστούν στον φορμαλισμό του παραπάνω σπίνορα $\Psi(\mathbf{k})^\dagger$. Οι τελεστές των παραπάνω συμμετριών μετασχηματίζουν τον Χαμιλτονιανό τελεστή \hat{H} και γενικά οποιαδήποτε σπινωριακή αναπαράσταση \hat{D} κατά τον ακόλουθο τρόπο

$$\begin{aligned}\mathcal{I}: & H(\mathbf{k}) \rightarrow H(-\mathbf{k}) = -\tau_x H^T(\mathbf{k}) \tau_x \\ \mathcal{T}: & H(\mathbf{k}) \rightarrow \sigma_y H^*(-\mathbf{k}) \sigma_y = -\tau_x \sigma_y H(\mathbf{k}) \tau_x \sigma_y \\ \mathcal{R}: & H(\mathbf{k}) \rightarrow \sigma_y H^*(\mathbf{k}) \sigma_y.\end{aligned}\tag{5.3}$$

Οι ιδιότητες μετασχηματισμού των συγκεκριμένων πεδίων προκύπτουν άμεσα από τις αντιμεταθετικές ιδιότητες των πινάκων Pauli.

Quartet A	Αναπαράσταση	\mathcal{I}	\mathcal{T}	\mathcal{R}	$\psi \rightarrow e^{i\pi/2}\psi$
ηλεκτρικό πεδίο ή ρεύμα J	$\sin \mathbf{k}$	-	-	+	+
πεδίο Zeeman h	$\tau_z \mathbf{d} \cdot \tilde{\sigma}$	+	-	-	+
συμβατικός SC Δ	$\tau_y \sigma_y$	+	+	+	-
triplet SC p	$\sin \mathbf{k} \tau_x \mathbf{d} \cdot \tilde{\sigma}$	-	+	-	-

Πίνακας 5.2: Η τετράδα πεδίων, πάνω στην οποία βασίζεται ο μηχανισμός που προτείνουμε για την εμφάνιση τοπολογικής υπεραγωγικής φάσης σε ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού, αποτελείται από το ρεύμα (ηλεκτρικό πεδίο) J , το πεδίο Zeeman h , το ιστροπικό υπεραγωγίο πεδίο Δ και το υπεραγωγίο πεδίο p -wave συμμετρίας. Η σύζευξη μεταξύ των παραπάνω πεδίων μπορεί να κατανοηθεί στα πλαίσια των μετασχηματισμών συμμετρίας, όπως ο μετασχηματισμός αντιστροφής του χώρου \mathcal{I} , αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} , ο μετασχηματισμός $\mathcal{R} = \mathcal{IT}$ και ο μετασχηματισμός βαθμίδας $\psi \rightarrow e^{i\pi/2}\psi$. Οποιαδήποτε υποομάδα τριών πεδίων αποκτά ως γινόμενο τις ιδιότητες μετασχηματισμού του τέταρτου. Οι αναπαραστάσεις των πεδίων αναφέρονται στον σπίνορα $\Psi(\mathbf{k})^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\uparrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow})$. Το γινόμενο των αναπαραστάσεων των πεδίων ισούται με την αναπαράσταση του στοιχείου ταυτότητας. Η ιδιότητα αυτή είναι ανεξάρτητη της μορφής του σπίνορα.

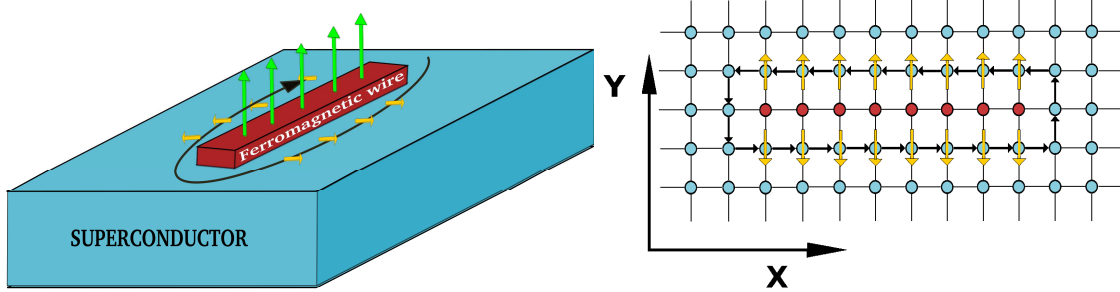
Από τον πίνακα 5.2 παρατηρούμε ότι οι ιδιότητες ενός πεδίου ως προς μια συμμετρία καθορίζονται από το γινόμενο των ιδιοτήτων των υπολοίπων τριών πεδίων. Η παρατήρηση αυτή γενικεύεται για όλους τους μετασχηματισμούς συμμετρίας του συστήματος και όχι μόνο για αυτούς που παρουσιάζονται στον συγκεκριμένο πίνακα.

Σημειώνουμε ότι όλες οι θεωρητικές προτάσεις για την επαγωγή δέσμιων καταστάσεων Majorana που παρουσιάστηκαν στην εισαγωγή της διατριβής εμπεριέχουν εγγενείς ή επαγόμενες αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς. Αυτό είναι αναμενόμενο, καθώς οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς παραβιάζουν την $SO(3)$ συμμετρία στροφής του σπιν και συνεπώς σε συνδυασμό με ένα ιστροπικό υπεραγωγίο πεδίο που παραβιάζει τη συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ δημιουργούν το κατάλληλο πλαίσιο για τη δημιουργία μονοσωματιδιακών καταστάσεων τύπου Majorana. Αυτή η προσέγγιση ισχύει και στον δικό μας μηχανισμό, καθώς σύμφωνα με τον κανόνα επαγόμενων πεδίων η συνύπαρξη ρεύματος με πεδία Zeeman και βαθμωτά δυναμικά που σπάνε τη συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής ισοδυναμούν με αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς. Τα πεδία αυτά οργανώνονται στην τετράδα που παρουσιάζεται στον Πίνακα 5.3. Παρατηρούμε ότι το βαθμωτό ή χημικό δυναμικό μ μετασχηματίζεται

ως προς τις συμμετρίες που παρουσιάστηκαν παραπάνω όπως το ισοτροπικό υπεραγωγίμο πεδίο. Όμως το πεδίο μ δεν παραβιάζει τη συμμετρία βαθμίδας $U(1)$ και συνεπώς δεν επάγει υπεραγωγίμο πεδία. Ανάλογα παρατηρούμε ότι το υπεραγωγίμο πεδίο p είναι το ανάλογο των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς που παραβιάζει τη $U(1)$ ή ισοδύναμα κλειδώνει τη βαθμίδα του συστήματος.

Quartet B	Αναπαράσταση	\mathcal{I}	\mathcal{T}	\mathcal{R}	$\psi \rightarrow e^{i\pi/2}\psi$
ρεύμα J	$\sin \mathbf{k}$	-	-	+	+
πεδίο Zeeman h	$\tau_z \mathbf{d} \cdot \tilde{\sigma}$	+	-	-	+
χημικό δυναμικό μ	τ_z	+	+	+	+
αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς a	$\sin \mathbf{k} \mathbf{d} \cdot \tilde{\sigma}$	-	+	-	+

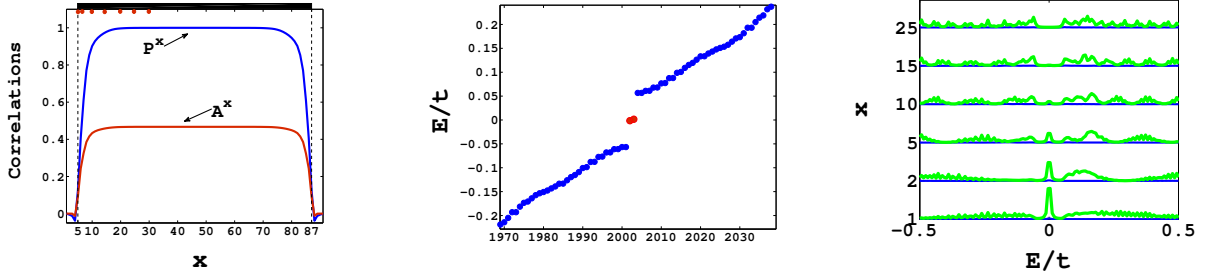
Πίνακας 5.3: Το ρεύμα (ηλεκτρικό πεδίο) J , το πεδίο Zeeman h , το χημικό δυναμικό (ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής) μ και οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς a διαμορφώνουν τετράδα συζευγμένων πεδίων όταν ισχύει $\mathbf{d}_z = \mathbf{d}_{so}$ για τα διανύσματα των h και a στον χώρο του σπιν. Σύμφωνα με την παραπάνω τετράδα πεδίων η εφαρμογή ρεύματος ή ηλεκτρικού πεδίου J παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και ενός πεδίου Zeeman επάγει αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς με την αντίστοιχη χωρική διαμόρφωση. Οι αναπαραστάσεις των πεδίων αναφέρονται στον σπινόρα $\Psi(\mathbf{k})^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\uparrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow})$.



Σχήμα 5.4: α) Μονοδιάστατο σιδηρομαγνητικό σύστημα πάνω σε συμβατικό υπεραγωγό. Η μαγνήτιση του σιδηρομαγνήτη (πράσινα βέλη) θεωρείται κάθετη στην επιφάνεια του υπεραγωγού. Το μαγνητικό πεδίο λόγω της μαγνήτισης του σιδηρομαγνήτη επάγει ρεύμα θωρακίσεως (μαύρα βέλη) στον υπεραγωγό και συνεισφέρει σε ένα πεδίο, που επιδρά μόνο στα σπιν των ηλεκτρονίων ως ενεργό πεδίο Zeeman h_x (κίτρινα βέλη) στο επίπεδο του υπεραγωγού, με αντισυμμετρική ως προς τον άξονα του σιδηρομαγνήτη διαμόρφωση. β) Το πλεγματοειδές μοντέλο που αντιστοιχεί στη Χαμιλτονιανή Εξ. 5.4, όπου τα κόκκινα σημεία αντιστοιχούν στο σιδηρομαγνήτη που είναι ενσωματωμένος στον υπεραγωγό (μπλε σημεία). Με μαύρο χρώμα παρουσιάζεται το επαγόμενο ρεύμα, ενώ με κίτρινα βέλη οι συνιστώσες του πεδίου Zeeman στο επίπεδο του υπεραγωγού.

5.2.1 Μονοδιάστατα σιδηρομαγνητικά συστήματα στην επιφάνεια συμβατικού υπεραγωγού

Στην παρούσα ενότητα παρουσιάζουμε αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διερεύνηση της πρότασής μας στην περίπτωση ενός μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη FM, ο οποίος βρίσκεται ενσωματωμένος σε έναν συμβατικό υπεραγωγό SC όπως παρουσιάζεται στο Σχ. 5.4. Το συγκεκριμένο σύστημα είναι απολύτως σχετικό με αυτό του πειράματος που παρουσιάστηκε παραπάνω. Θεωρούμε επίσης τη μαγνήτιση M του σιδηρομαγνήτη κάθετη στην επιφάνεια του υπεραγωγού. Η μαγνητική αυτή ροή, κάθετη στο επίπεδο του υπεραγωγού, επάγει ρεύμα θωρακίσεως J στο σύνορο του υπεραγωγού με τον σιδηρομαγνήτη. Το ρεύμα αυτό ρέει γύρω από τον σιδηρομαγνήτη με φορά τέτοια ώστε να μηδενίσει τη μαγνητική ροή στο εσωτερικό του υπεραγωγού. Επιπλέον, θεωρούμε ότι η στροφή του μαγνητικού πεδίου καθώς απομακρυνόμαστε από τον σιδηρομαγνήτη δημιουργεί συνιστώσες στο επίπεδο του υπεραγωγού που δρουν ως ενεργά πεδία Zeeman. Τα πεδία αυτά είναι αντισυμμετρικά ως προς τον άξονα του FM και για λόγους απλότητας θεωρούμε μόνο τις συνιστώσες h_x κάθετες στον άξονα αυτό. Το επαγόμενο ρεύμα δεν μπορεί να θωρακίσει τον υπεραγωγό ως προς τα συγκεκριμένα πεδία και συνεπώς αυτά δρουν στο εσωτερικό του υπεραγωγού



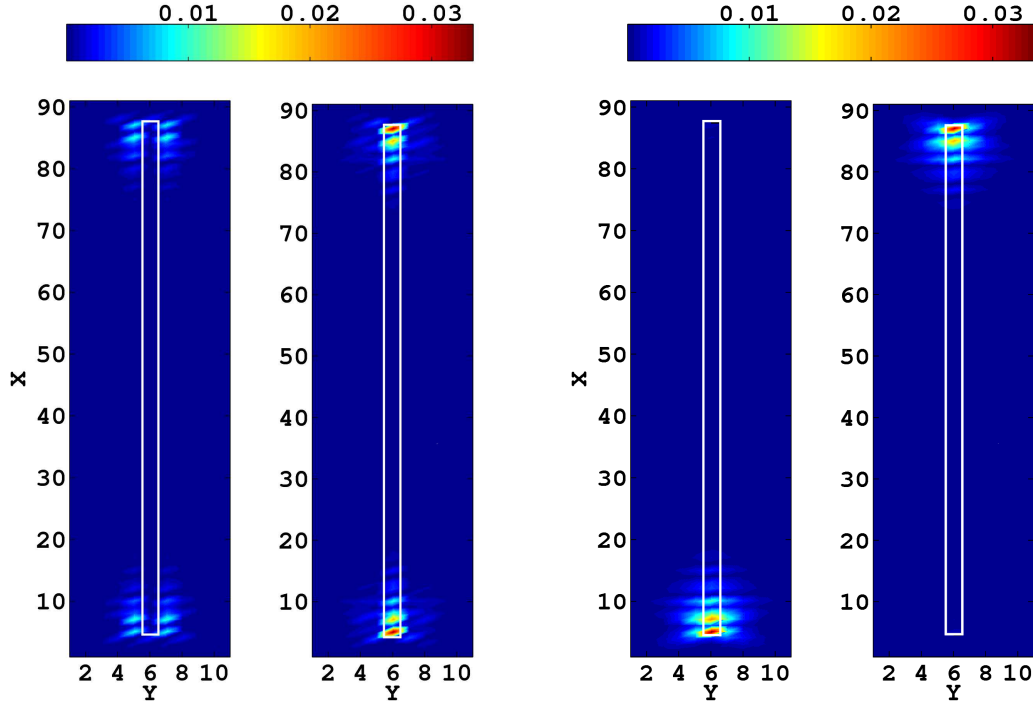
Σχήμα 5.5: Μονοδιάστατος σιδηρομαγνήτης μήκους $L = 83$ πλεγματικών θέσεων ενσωματωμένος σε συμβατικό υπεραγωγό. Το συνολικό σύστημα έχει διαστάσεις 91×11 , ενώ ο σιδηρομαγνήτης τοποθετείται στον κέντρο του συστήματος. Για τον υπεραγωγό επιλέγουμε $\Delta = 1$ και $\mu_{SC} = 0$, ενώ για τον σιδηρομαγνήτη $h_z = 4$ και $\mu_{FM} = 4$. Στο σύνορο του σιδηρομαγνήτη θεωρούμε $|h_x| = 0.4$ και $|J| = 0.2$ (σε μονάδες t). α) Οι επαγόμενες στον σιδηρομαγνήτη συσχετίσεις ζεύγους ηλεκτρονίων με ίδιο σπιν $P^x f_{i,j}^{x,o}$ (μπλε γραμμή) και αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς $A^x f_{i,j}^{x,o}$ (κόκκινη γραμμή). Οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς επάγονται λόγω του χημικού δυναμικού του σιδηρομαγνήτη $\mu_{FM} \neq 0$ που επάγει ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής στο σύνορό του με τον υπεραγωγό. Το μαύρο ορθογώνιο ορίζει τη θέση του σιδηρομαγνήτη. β) Το ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος. Ζεύγος ιδιοκαταστάσεων σχεδόν μηδενικής ενέργειας διαχωρίζονται από το υπόλοιπο φάσμα με ένα ενεργειακό χάσμα $\Delta E \simeq 0.05$. Η πεπερασμένη τιμή της ενέργειας των καταστάσεων αυτών οφείλεται στις πεπερασμένες διαστάσεις του σιδηρομαγνήτη. γ) Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων κατά μήκος του σιδηρομαγνήτη, στις θέσεις που παρουσιάζονται στο πρώτο σχήμα με κόκκινα σημεία. Η κορυφή για $E = 0$ εμφανίζεται μόνο στα άκρα του σιδηρομαγνήτη ($x = 1 - 5$), ενώ ένα υπεραγωγίμο χάσμα $\Delta E \simeq 0.05$ εμφανίζεται στο μέσο του. Η τοπική πυκνότητα καταστάσεων είναι συμμετρική ως προς το κέντρο του σιδηρομαγνήτη, $x = 46$.

που συνορεύει με τον σιδηρομαγνήτη. Η διάταξη των ρευμάτων J και των μαγνητικών πεδίων h_x παρουσιάζεται στο Σχ.5.4. Για την υπεραγωγίμη περιοχή θεωρούμε ένα συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ . Ενώ αρχικά θεωρούμε $\Delta = 0$ για τον σιδηρομαγνήτη, το ιστροπικό υπεραγωγίμο πεδίο επάγεται σε αυτόν μέσω του φαινομένου εγγύτητας (Πιν.5.3). Αγνοώντας λεπτομέρειες μιας πιο ρεαλιστικής ετεροδομής, περιγράφουμε το παραπάνω σύστημα με μια διδιάστατη Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στο πλεγματικό μοντέλο που παρουσιάζεται στο Σχ.5.4. Η Χαμιλτονιανή αυτή έχει την παρακάτω μορφή,

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,s} (t f_{i,j}^e + \mathbf{J}_i \mathbf{g}_{i,j}) \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s} - \sum_i \mu_i \cdot n_i - \sum_i \psi_{i,s} (\mathbf{h}_i \cdot \boldsymbol{\sigma})_{ss'} \psi_{i,s'} + \sum_i \Delta_i \psi_{i,\uparrow}^\dagger \psi_{i,\downarrow}^\dagger + h.c., \quad (5.4)$$

όπου $\psi_{i,s}$ ο τελεστής καταστροφής φερμιονίων στην πλεγματική θέση i με σπιν s , n_i ο τοπικός τελεστής πυκνότητας σωματιδίων, $\boldsymbol{\sigma}$ οι πίνακες Pauli, ενώ μ και \mathbf{h} αντιστοιχούν στο χημικό δυναμικό και το πεδίο Zeeman. Το ολοκλήρωμα μεταφοράς t σχετίζεται με τη συνάρτηση μορφής $f_{i,j}^e = \delta_{j,i\pm x} + \delta_{j,i\pm y}$, όπου \mathbf{x} και \mathbf{y} τα μοναδιαία διανύσματα στους άξονες x και y του πλέγματος. Για απλότητα θεωρούμε τον όρο αυτό σταθερό σε όλο το σύστημα και συνεπώς οι ζώνες ηλεκτρονίων Bloch στον υπεραγωγό και τον σιδηρομαγνήτη χαρακτηρίζονται από το ίδιο ενεργειακό εύρος. Επίσης η προσέγγιση αυτή αντιστοιχεί σε ισχυρή σύζευξη των δύο περιοχών. Τα αποτελέσματά μας όμως δεν διαφοροποιούνται ποιοτικά για πιο ρεαλιστικές επιλογές του συγκεκριμένου κινητικού όρου. Το ρεύμα \mathbf{J} σχετίζεται με το διάνυσμα $\mathbf{g}_{i,j} = (\pm i \delta_{j,i\pm x}, \pm i \delta_{j,i\pm y})$, συναρτήσεων αντισυμμετρικών ως προς τη συμμετρία αντιστοφής του χώρου. Οι συνιστώσες του ρεύματος είναι μη μηδενικές μόνο στα πλεγματικά σημεία του υπεραγωγού που συνορεύουν με τον σιδηρομαγνήτη και αντιστοιχούν σε μια ροή που δημιουργεί την αντίθετη προς αυτή του σιδηρομαγνήτη μαγνητική ροή. Σημειώνουμε ότι γενικά οι άνω δείκτες αντιστοιχούν στον χώρο των θέσεων, ενώ οι κάτω δείκτες στον χώρο του σπιν.

Εισάγοντας τον σπίνορα $\Psi_i^\dagger = (\psi_{i,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,\uparrow}, \psi_{i,\downarrow})$ και τις μήτρες Pauli $\boldsymbol{\tau}$, $\boldsymbol{\sigma}$ που δρουν στον χώρο Nambu και σπιν αντίστοιχα, η Εξ. (5.4) αποκτά την παρακάτω συμπαγή μορφή



Σχήμα 5.6: Για το σύστημα που περιγράψαμε στο Σχ. 5.5 α) Η κυματοσυνάρτηση $|\Psi|^2 \equiv U_{i,n}^* U_{i,n}$ για πόλωση σπιν \uparrow (αριστερά) και \downarrow (δεξιά) του ζεύγους ιδιοκαταστάσεων με τη χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος στην τοπολογική υπεραγώγιμη φάση για $\mu_{FM} = h_z = 4$. Η κυματοσυνάρτηση είναι μια ισόποση υπέρθεση καταστάσεων ηλεκτρονίου και οπής και συνεπώς είναι ίδια και για τις δύο ιδιοκαταστάσεις του ζεύγους μηδενικών ιδιοενεργειών, όπως απαιτείται από τη συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής. β) Η κυματοσυνάρτηση των ίδιων καταστάσεων εκφρασμένη στη βάση Majorana. Στη βάση αυτή παρουσιάζεται καλύτερα ο εντοπισμός ενός φερμιονίου Majorana σε κάθε άκρο του σιδηρομαγνήτη. Η θέση του σιδηρομαγνήτη παρουσιάζεται από το άσπρο ορθογώνιο.

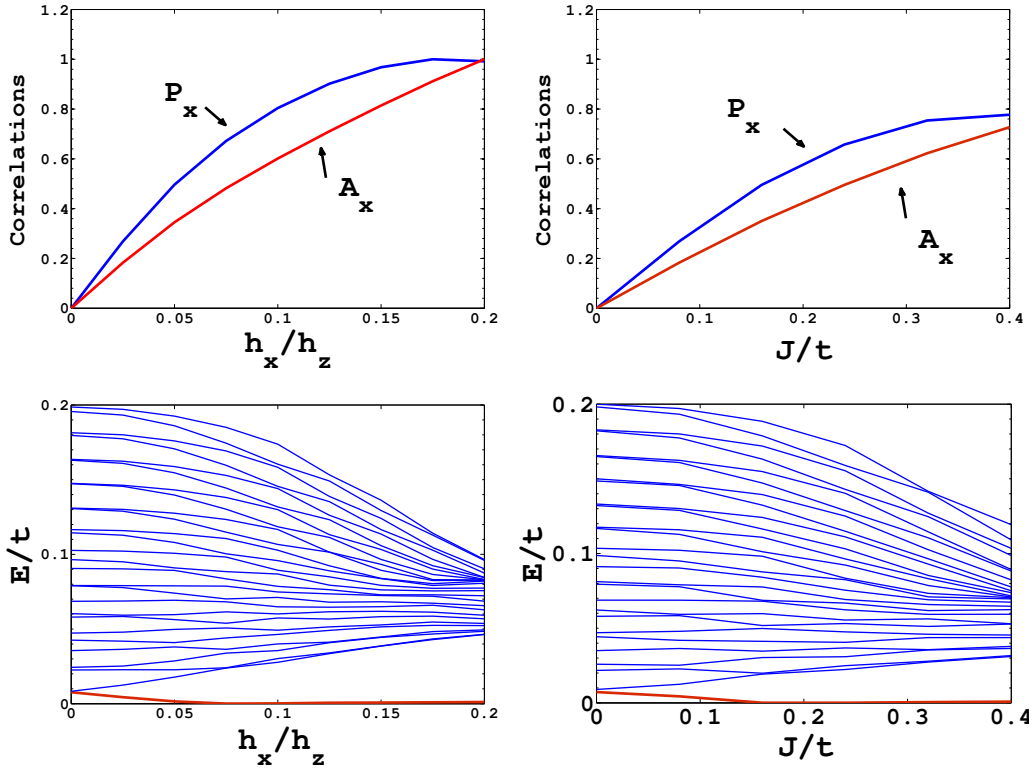
$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger \hat{H}_{i,j} \Psi_j,$$

$$\hat{H}_{i,j} = t f_{i,j}^e \tau_3 + J_i^x f_{i,j}^{x,o} + J_i^y f_{i,j}^{y,o} + (\mu_i \tau_3 - \tau_3 \mathbf{h}_i \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \Delta_i \tau_2 \sigma_2) \delta_{i,j}, \quad (5.5)$$

όπου $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_1, \tau_3 \sigma_2, \sigma_3)$. Διαγωνοποιούμε την παραπάνω Χαμιλτονιανή επιλύοντας τις εξισώσεις Bogoliubov-de Gennes (BdG) $\sum_j \hat{H}_{i,j} U_{j,n} = E_n U_{i,n}$, όπου E_n και $U_{i,n} = (u_{i,n,\uparrow}^*, u_{i,n,\downarrow}^*, v_{i,n,\uparrow}, v_{i,n,\downarrow})$ οι ιδιοενέργειες και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα του συστήματος. Χρησιμοποιώντας τις μήτρες ιδιοενεργειών και ιδιοδιανυσμάτων του συστήματος ή ισοδύναμα τις συναρτήσεις Matsubara στον χώρο των θέσεων οι οποίες ορίζονται μέσω της σχέσης $\sum_{j'} [\delta_{i,j'} i\omega_n - \hat{H}_{i,j'}] \mathbf{G}(j', j; i\omega_n) = \delta_{i,j}$, με $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ τις συχνότητες Matsubara για φερμιόνια, μπορούμε να υπολογίσουμε τις ηλεκτρονιακές συσχετίσεις που αντιστοιχούν σε αναπαράσταση \hat{O} στον $SU(4)$ χώρο Nambu - σπιν. Ο υπολογισμός αυτός γίνεται μέσω των παρακάτω εξισώσεων

$$\langle \Psi_i^\dagger \hat{O} f_{i,j}^r \Psi_j \rangle = \frac{1}{2\beta} \sum_{j, i\omega_n} Tr \{ f_{i,j}^r \hat{O} \mathbf{G}(i, j; i\omega_n) \} = \frac{1}{2} \sum_j [U_{i,n}^\dagger f_{i,j}^r \hat{O} U_{j,n}]_{nn} n_F(E_n), \quad (5.6)$$

όπου $n_F(E_n) = \frac{1}{1+e^{\beta E_n}}$ η κατανομή Fermi και $f_{i,j}^r$ οι συναρτήσεις μορφής των συσχετίσεων στον χώρο των θέσεων, οι οποίες αποτελούν συναρτήσεις βάσης της ομάδας συμμετρίας C_4 του πλέγματος.

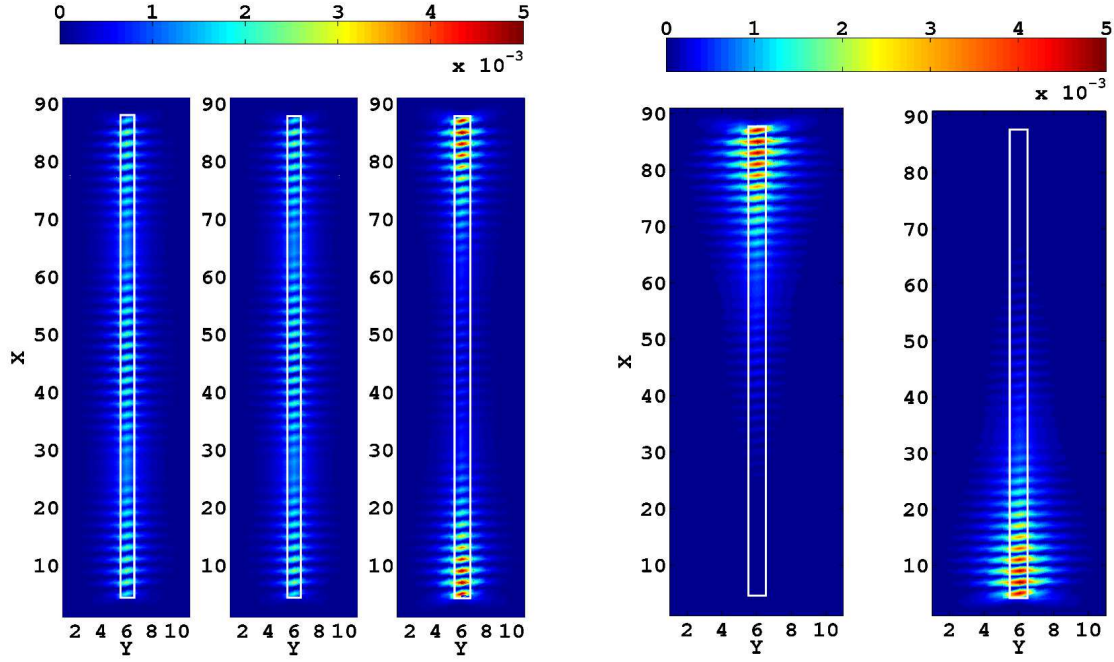


Σχήμα 5.7: Μονοδιάστατο σιδηρομαγνητικό σύστημα μήκους $L = 83$ σε υπεραγωγό διαστάσεων 91×11 . Για τον υπεραγωγό θεωρούμε $\Delta = 1$ και $\mu_{SC} = 0$, ενώ για τον σιδηρομαγνήτη θεωρούμε $h_z = 4$ και $\mu_{FM} = 4$. Για τις συγκεκριμένες παραμέτρους μόνο μία ενεργειακή ζώνη τέμνει το επίπεδο Fermi. Οι επαγόμενες στο μέσο του σιδηρομαγνήτη συσχετίσεις ζεύγους ηλεκτρονίων με ίδιο σπιν P_x (μπλε γραμμή) και αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς A_x (κόκκινη γραμμή) α) για $J = 0.08$ καθώς αυξάνεται το μαγνητικό πεδίο h_x και β) για $h_x = 0.025h_z$ καθώς αυξάνεται το ρεύμα J . Οι συσχετίσεις είναι κανονικοποιημένες στη μέγιστη τιμή για τις P_x . Το υπεραγωγίμο ενεργειακό χάσμα που επάγεται στον σιδηρομαγνήτη για γ) $J = 0.08$ καθώς αυξάνεται το πεδίο h_x και δ) $h_x = 0.025h_z$ καθώς αυξάνεται το ρεύμα J . Επειδή για $h_z = 4$ και $\mu_{FM} = 3.8$ ο σιδηρομαγνήτης είναι σε τοπολογικά μη τετριμμένη φάση, η ελάχιστη ενέργεια διέγερσης του συστήματος (κόκκινη γραμμή) τείνει στο μηδέν καθώς αυξάνεται το υπεραγωγίμο χάσμα. Τα παραπάνω διαγράμματα επιβεβαιώνουν ότι οι καταστάσεις μηδενικής ενέργειας προκύπτουν από την αλληλεπίδραση μαγνητικού πεδίου - ρεύματος.

Όπως επεξηγήσαμε και στην προηγούμενη ενότητα αναμένουμε το ρεύμα θωράκισης J και οι συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου h_x σε συνδυασμό με το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ να επάγουν ένα υπεραγωγίμο πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν της μορφής $\Delta_x^p g_{i,j}^x \tau_1 \sigma_3$ (Πιν. 5.2). Το διάνυσμα $\mathbf{d} = (1, 0, 0)$ του επαγόμενου υπεραγωγίμου πεδίου καθορίζεται και συγκεκριμένα ταυτίζεται με το αντίστοιχο διάνυσμα του πεδίου h_x , ενώ η χωρική του διαμόρφωση $g_{i,j}^x$ ταυτίζεται με αυτήν του ρεύματος κατά τον άξονα του σιδηρομαγνήτη.

Με ανάλογο τρόπο ο συνδυασμός των πεδίων J και h_x με το χημικό δυναμικό του υπεραγωγού μ_{SC} ή γενικότερα με μια ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής στο σύνορο των δύο περιοχών, επάγει αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς της μορφής $\alpha_x g_{i,j}^x \sigma_1$ (Πιν. 5.3). Και στην περίπτωση αυτή το ρεύμα καθορίζει τη χωρική διαμόρφωση των επαγόμενων αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς. Σημειώνουμε ότι οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς επάγονται ακόμα και για $\mu_{SC} = 0$ λόγω της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής που επάγεται στο σύνορο των δύο περιοχών λόγω του χημικού δυναμικού του σιδηρομαγνήτη. Τα πεδία Δ_x^p και a_x , ενώ επάγονται στο εσωτερικό του υπεραγωγού, διαδίδονται και στον σιδηρομαγνήτη λόγω του φαινομένου εγγύτητας.

Παρακάτω παρουσιάζουμε ενδεικτικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την επίλυση της Εξ. 5.5 για ένα διδιάστατο πλεγματοειδές σύστημα SC διαστάσεων 91×11 με ενσωματωμένο μονοδιάστατο σιδηρομαγνήτη μήκους $L = 83$. Για τον υπεραγωγό έχουμε θεωρήσει $\Delta = 1$, $\mu_{SC} = 0$, ενώ για τον σιδηρομαγνήτη θέσαμε $h_z = 4$ και $\mu_{FM} = 3.8$. Επιπλέον θεωρήσαμε $J = 0.1$ και $h_x = 0.2$



Σχήμα 5.8: α) Η κυματοσυνάρτηση $|\Psi|^2$ της ιδιοκατάστασης ελάχιστης ενέργειας για $h_z = 4$ και (αριστερά) $h_x = 0.025h_z$, $|J| = 0$, (μέση) $h_x = 0$, $|J| = 0.08$, (δεξιά) $h_x = 0.025h_z$, $|J| = 0.08$. Δέσιμες καταστάσεις εντοπισμένες στα άκρα του σιδηρομαγνήτη εμφανίζονται μόνο για πεπερασμένες τιμές και για τα δύο πεδία h_x και J . β) Η κυματοσυνάρτηση της ιδιοκατάστασης ελάχιστης ενέργειας στη βάση Majorana για $h_x = 0.025h_z$, $|J| = 0.02$.

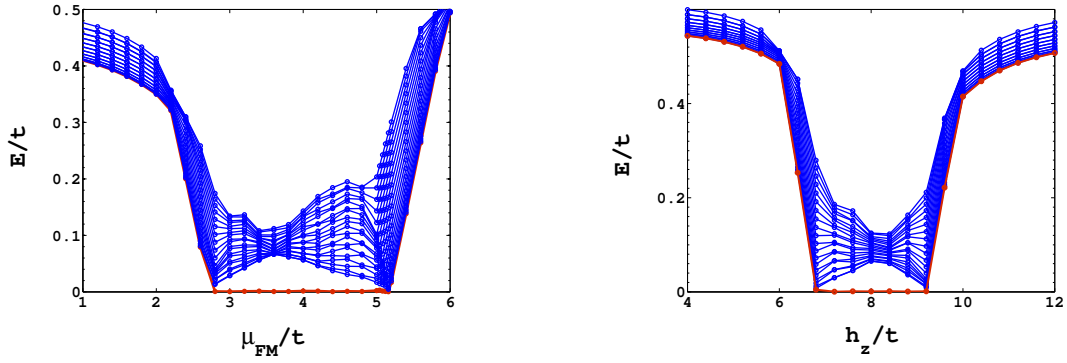
για το επαγόμενο ρεύμα και τις συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου στο σύνορο των δύο περιοχών. Όλες οι παραπάνω τιμές είναι κανονικοποιημένες ως προς το ολοκλήρωμα μεταφοράς t . Για τις παραμέτρους αυτές ο σιδηρομαγνήτης είναι ισχυρά πολωμένος, καθώς η ενεργειακή ζώνη των πλειοψηφικών σπιν είναι πλήρως κατειλημμένη και το επίπεδο Fermi βρίσκεται εντός του εύρους της ενεργειακής ζώνης των μειοψηφικών σπιν.

Όπως παρουσιάζουμε στο Σχ. 5.4 α), πράγματι οι συζυγείς στα πεδία Δ_x^p και a_x ηλεκτρονικές συσχετίσεις P_x και A_x αντίστοιχα, αποκτούν πεπερασμένες τιμές στον σιδηρομαγνήτη μαρτυρώντας την παρουσία των πεδίων αυτών. Αντίθετα, το ρεύμα και το πεδίο h_x μηδενίζονται στον σιδηρομαγνήτη λόγω της αντισυμμετρικής τους ως προς αυτόν διαμόρφωσης. Για να εξακριβώσουμε ότι τα πεδία Δ_x^p και a_x επάγονται λόγω της εμφάνισης του ρεύματος J και του πεδίου h_x επιλύουμε την Εξ. 5.5 για διάφορες τιμές των συγκεκριμένων πεδίων. Παρατηρούμε ότι οι συσχετίσεις P_x και A_x που σχετίζονται με ζεύγη ηλεκτρονίων ίδιου σπιν και αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς αντίστοιχα, εμφανίζονται στον σιδηρομαγνήτη μόνο στην ταυτόχρονη παρουσία του υπερρεύματος J και του μαγνητικού πεδίου h_x (Σχ. 5.5 α) και β). Για $J = 0$ και $h_x = 0$ οι συσχετίσεις P_x , A_x και συνεπώς τα συζυγή τους πεδία απουσιάζουν από το σύστημα.

Χρησιμοποιώντας τις ιδιοενέργειες και τις ιδιοκαταστάσεις του συστήματος μπορούμε να υπολογίσουμε την τοπική πυκνότητα καταστάσεων ($LDOS$) για κάθε πόλωση του σπιν σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση

$$N_{i,s}(\omega) = \frac{1}{\pi} \sum_n \left[|u_{i,s}|^2 \frac{\Gamma^2}{(\omega - E_n)^2 + \Gamma^2} + |v_{i,s}|^2 \frac{\Gamma^2}{(\omega + E_n)^2 + \Gamma^2} \right], \quad (5.7)$$

όπου $\Gamma = 0.01$ είναι μια αυθαίρετη τιμή του χρόνου ζωής των οιονεί-σωματιδίων. Στην $LDOS$ κατα μήκος του σιδηρομαγνήτη για τις παραμέτρους της συγκεκριμένης περίπτωσης, παρατηρούμε την εμφάνιση κορυφών μηδενικής ενέργειας με μέγιστη τιμή στα άκρα. Καθώς προχωράμε στο εσωτερικό του σιδηρομαγνήτη, οι κορυφές αυτές εξαφανίζονται βαθμιαία και στη θέση τους εμφανίζεται ένα ενεργειακό χάσμα (Σχ. 5.5 γ). Συνεπώς οι κορυφές αυτές σχετίζονται με δέσιμες



Σχήμα 5.9: Ενδεικτικό ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων της Χαμιλτονιανής Εξ. 5.5 με $\Delta = 1$ και $\mu_{SC} = 0$ για τον υπεραγωγό, $h_z = 4$ για τον σιδηρομαγνήτη, $|h_x| = 0.4$ και $|J| = 0.2$, συναρτήσει του χημικού δυναμικού του σιδηρομαγνήτη μ_{FM} . Με κόκκινη γραμμή τονίζεται η χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος που καθηλώνεται στο μηδέν στην τοπολογική φάση που εμφανίζεται για $h_z - 1.2t < \mu_{FM} < h_z + 1.2t$. β) Το ενεργειακό φάσμα για τις ίδιες παραμέτρους και $\mu_{FM} = 8$ συναρτήσει του πεδίου h_z (ενέργεια εναλλαγής) του σιδηρομαγνήτη. Η ιδιοκατάσταση μηδενικής ενέργειας (κόκκινο χρώμα) εμφανίζεται για $1.2t - \mu < h_z < 1.2t + \mu$ όπως προβλέπεται από το τοπολογικό κριτήριο ($W = 1$) για $t' = 0.6t$. Τα παραπάνω διαγράμματα αναδεικνύουν την ευστάθεια των καταστάσεων μηδενικής ενέργειας ως προς μεταβολές του χημικού δυναμικού και της ενέργειας εναλλαγής του σιδηρομαγνήτη και, συνεπώς, την τοπολογική τους προέλευση.

καταστάσεις μηδενικής ενέργειας που εντοπίζονται στα άκρα του σιδηρομαγνήτη. Σημειώνουμε ότι η *LDOS* του σιδηρομαγνήτη είναι συμμετρική ως προς το κέντρο του $x = 46$.

Από το ενεργειακό φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος που παρουσιάζεται στο Σχ. 5.9, διακρίνουμε την παρουσία μηδενικών ιδιοενεργειών οι οποίες διαχωρίζονται από το υπόλοιπο φάσμα μέσω ενός ενεργειακού χάσματος το οποίο είναι ίσο με αυτό που παρατηρείται στο εσωτερικό του σιδηρομαγνήτη. Λόγω της εισαγωγής του χώρου Nambu, το ενεργειακό φάσμα είναι συμμετρικό ως προς το επίπεδο Fermi. Αυτή η συμμετρία συνεπώς είναι μια ιδιότητα των υπεραγωγίων συστημάτων και γενικότερα των Χαμιλτονιανών τύπου BdG λόγω της εγγενούς στα συστήματα αυτά συμμετρίας συζυγίας φορτίου. Η συγκεκριμένη συμμετρία εκφράζεται μέσω των παρακάτω σχέσεων

$$\begin{aligned}
U_C^\dagger H^* U_C &= -H \quad \Leftrightarrow \quad U_C^\dagger H^T = -H U_C^\dagger \quad \rightarrow \\
\langle \psi_n | U_C^\dagger H^T &= -\langle \psi_n | H U_C^\dagger \quad \Leftrightarrow \quad \langle \psi_n | U_C^\dagger H^T = -\langle \psi_n | U_C^\dagger E_n \rightarrow \\
H[U_C |\psi_n \rangle]^* &= -E_n [U_C |\psi_n \rangle]^* \quad \Leftrightarrow \quad H \tau_x |\psi_n \rangle^* = -E_n \tau_x |\psi_n \rangle^* \\
H_{i,j} U_{j,n}^* &= E_n U_{i,n}^* \quad \Leftrightarrow \quad H_{i,j} \tau_x U_{j,n}^* = -E_n \tau_x U_{i,n}^*, \quad (5.8)
\end{aligned}$$

όπου $|\psi_n \rangle$ η ιδιοκατάσταση $U_{i,n} = (u_{i,n,\uparrow}^*, u_{i,n,\downarrow}^*, v_{i,n,\uparrow}, v_{i,n,\downarrow})$ του Χαμιλτονιανού τελεστή με ιδιοτιμή E_n και $U_C = \tau_x$ το μοναδιαίο τμήμα του τελεστή συζυγίας φορτίου για τον συγκεκριμένο σπίνορα. Επομένως, για κάθε ιδιοκατάσταση $|\psi_n \rangle$ με ιδιοενέργεια E_n , η κατάσταση $\tau_x |\psi_n \rangle$ είναι επίσης ιδιοκατάσταση του συστήματος με αντίθετη ιδιοενέργεια $-E_n$. Μέσω της μήτρας U των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής Εξ. 5.5, μπορούμε να υπολογίσουμε την πυκνότητα πιθανότητας $|\Psi_i|^2 = U_{n,i}^* U_{i,n}$ σε κάθε πλεγματικό σημείο i , που αντιστοιχεί στην ιδιοκατάσταση ψ_n με ιδιοενέργεια E_n . Όπως διακρίνεται από τη χωρική διαμόρφωση της πυκνότητας πιθανότητας $|\Psi|^2$ (Σχ. 5.6), οι ιδιοκαταστάσεις μηδενικής ενέργειας είναι ισχυρά εντοπισμένες στα άκρα του σιδηρομαγνήτη. Λόγω της παρουσίας του υπεραγωγίου πεδίου Δ_x^p στον σιδηρομαγνήτη οι ιδιοκαταστάσεις αυτές αποτελούν δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας. Το ζεύγος φερμιονίων Majorana που αντιστοιχεί στο ζεύγος ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας της Εξ. 5.5 μπορεί να παρουσιαστεί επίσης εκφράζοντας τις ιδιοκαταστάσεις του συστήματος στη βάση

Majorana $\Gamma_i^\dagger = (\gamma_{i,\uparrow,a}, \gamma_{i,\downarrow,a}, \gamma_{i,\uparrow,b}, \gamma_{i,\downarrow,b})^T$, όπου $\gamma_{i,s,a(b)} = \gamma_{i,s,a(b)}^\dagger$ οι τελεστές Majorana. Η βάση Majorana σχετίζεται με τη βάση Nambu-σπιν με τον ακόλουθο τρόπο

$$\begin{aligned} \gamma_{i,s,a} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{i,s} + \psi_{i,s}^\dagger), & \gamma_{i,s,b} &= -\frac{i}{\sqrt{2}}(\psi_{i,s} - \psi_{i,s}^\dagger) \\ \Gamma_i &= A\Psi_i, & A &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ -i & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & i \end{pmatrix} = e^{i\frac{\pi}{4}\tau_y} e^{-i\frac{\pi}{4}\tau_x} e^{i\frac{\pi}{4}}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Επομένως, οι κυματοσυναρτήσεις Majorana που αντιστοιχούν στο ζεύγος ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας προκύπτουν από τις αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις $U_{n,i}$ μέσω των παρακάτω εκφράσεων

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \gamma_{i,a} \\ \gamma_{i,b} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} (\tau_0 + \tau_z)[U_{i,n} + \tau_x U_{i,n}] \\ (\tau_0 - \tau_z)i[U_{i,n} - \tau_x U_{i,n}] \end{pmatrix} \rightarrow \\ \begin{pmatrix} \gamma_{i,a} \\ \gamma_{i,b} \end{pmatrix} &= [U_{i,n} + \tau_x U_{i,n}], & \begin{pmatrix} \gamma_{i,b} \\ \gamma_{i,a} \end{pmatrix} &= i[U_{i,n} - \tau_x U_{i,n}]. \end{aligned} \quad (5.10)$$

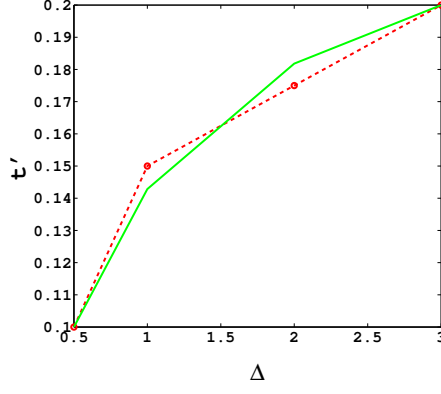
Στο Σχ. 5.6 παρουσιάζουμε τις κυματοσυναρτήσεις μηδενικής ενέργειας εκφρασμένες στην βάση Majorana, $|\gamma_a|^2$ και $|\gamma_b|^2$, για τη συγκεκριμένη περίπτωση. Παρατηρούμε ότι κάθε φερμιόνιο Majorana είναι εντοπισμένο σε ένα άκρο του σιδηρομαγνήτη.

Για να εξακριβώσουμε ότι οι δέσμιες καταστάσεις Majorana εμφανίζονται μόνο στην ταυτόχρονη παρουσία του ρεύματος θωράκισης και του μαγνητικού πεδίου, εξετάσαμε το ενεργειακό φάσμα του συστήματος και τις ιδιοκαταστάσεις ελάχιστης ενέργειας απουσία ενός εκ των δύο πεδίων. Όπως παρουσιάζουμε στα Σχ. 5.7 και 5.8, πράγματι στην περίπτωση αυτή η ιδιοκατάσταση ελάχιστης ιδιοενέργειας αντιστοιχεί σε πεπερασμένη ενέργεια, ενώ η κυματοσυνάρτησή της απλώνεται σε όλο το μήκος του σιδηρομαγνήτη λόγω της απουσίας του υπεραγωγίου πεδίου σε αυτόν. Επιπλέον μόνο για πεπερασμένες τιμές και των δύο συγκεκριμένων πεδίων η ιδιοκατάσταση ελάχιστης ενέργειας αντιστοιχεί σε μια ισόποση υπέρθεση καταστάσεων ηλεκτρονίου και οπής και συνεπώς σε ηλεκτρικά ουδέτερες καταστάσεις. Αυτό είναι μια ακόμη απόδειξη ότι οι δέσμιες καταστάσεις Majorana εμφανίζονται στο σύστημα λόγω του μηχανισμού που προτείνουμε.

Στη συνέχεια παρουσιάζουμε τα αποτελέσματα που προέκυψαν από επίλυση της Εξ. 5.5 για τις ίδιες παραμέτρους του συστήματος καθώς όμως μεταβάλλεται το χημικό δυναμικό του σιδηρομαγνήτη. Όπως φαίνεται και στην Σχ. 5.9 οι ιδιοκαταστάσεις μηδενικής ενέργειας προκύπτουν για ευρύ φάσμα του χημικού δυναμικού και της μαγνήτισης του σιδηρομαγνήτη. Αυτό αποτελεί σημαντική ένδειξη της τοπολογικής προέλευσης των συγκεκριμένων καταστάσεων. Αντίστοιχη ανάλυση έγινε και για πεπερασμένες τιμές του χημικού δυναμικού του υπεραγωγού. Στην περίπτωση αυτή τα ενεργειακά φάσματα χαμηλών ενεργειών του συστήματος εμφανίζουν τα ίδια χαρακτηριστικά μέχρι μια κρίσιμη τιμή του χημικού δυναμικού που μειώνει σημαντικά το συμβατικό υπεραγωγίο πεδίο. Για μικρές τιμές όμως του μ_{SC} η περιοχή του μ_{FM} όπου εμφανίζεται η τοπολογική φάση $\mathcal{W} = 1$ απλά μετατοπίζεται σε σχέση με την αντίστοιχη περιοχή για $\mu_{SC} \neq 0$ κατά μία τιμή η οποία μπορεί να θεωρηθεί ως ένα επιπλέον όρος χημικού δυναμίου μ^* που επάγεται στον σιδηρομαγνήτη από τον υπεραγωγό.

Τα παραπάνω αποτελέσματα για το διδιάστατο αυτό σύστημα μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη - υπεραγωγού μπορούν καλύτερα να ερμηνευθούν μέσω της παρακάτω ενεργής Χαμιλτονιανής για τον μονοδιάστατο σιδηρομαγνήτη

$$\begin{aligned} H_{FM}^{1D,eff} &= \sum_i \Psi_i^\dagger [t' f_{i,j}^{x,e} \tau_3 + \mu_{FM} \tau_3 + h_z \tau_3 \sigma_3 + \Delta' \tau_2 \sigma_2] \delta_{i,j} \\ &+ (\alpha_x \sigma_1 + \Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 + \Im \Delta_y^p \tau_1) f_{i,j}^{x,o} \Psi_j, \end{aligned} \quad (5.11)$$



Σχήμα 5.10: Για σύστημα διαστάσεων 91×11 με ενσωματωμένο σιδηρομαγνήτη μήκους $L = 83$ και $\mu_{SC} = 0$ για τον υπεραγωγό, $h_z = 4$ για τον σιδηρομαγνήτη, $|h_x| = 0.4$ και $|J| = 0.2$, το επανακανονικοποιημένο ολοκλήρωμα μεταφοράς t' του σιδηρομαγνήτη συναρτήσει του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου Δ . Για σταθερά σύζευξης Γ μεταξύ του υπεραγωγού και του σιδηρομαγνήτη το επανακανονικοποιημένο ολοκλήρωμα μεταφοράς προκύπτει από τη σχέση $t' = \frac{\Delta}{\Delta + \Gamma} t$. Η πράσινη γραμμή αντιστοιχεί στην t' για $\Gamma = 0.75$ που προκύπτει από την παραπάνω σχέση.

η οποία περιλαμβάνει τα επαγόμενα πεδία a_x και Δ_x^p . Στην παραπάνω εξίσωση έχουν συμπεριληφθεί επίσης το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ' , που επάγεται στον σιδηρομαγνήτη λόγω του φαινομένου εγγύτητας, και η επανακανονικοποιημένη τιμή του ολοκληρώματος μεταφοράς $t' \leq t$, λόγω της σύζευξης του σιδηρομαγνήτη με τον υπεραγωγό [227]. Επιπλέον, συμπεριλαμβάνουμε το υπεραγωγίμο πεδίο $\mathfrak{S}\Delta_y f_{i,j}^{x,o} \tau_1$ που επάγεται λόγω του πεπερασμένου χημικού δυναμικού μ_{FM} σε συνδυασμό με το ενεργό πεδίο Zeeman h_z του σιδηρομαγνήτη με το υπεραγωγίμο πεδίο Δ_x^p . Τα πεδία αυτά σχηματίζουν την τετράδα που παρουσιάζουμε στον Πιν. 5.4. Η συγκεκριμένη τετράδα πεδίων, έχει διαφορετικά χαρακτηριστικά από τις προηγούμενες δύο που παρουσιάσαμε προηγουμένως, καθώς περιλαμβάνει τρία διανυσματικά πεδία. Τα διανύσματα \mathbf{d} , στον χώρο του σπιν, των τριών συζευγμένων διανυσματικών πεδίων πρέπει να ικανοποιούν την παρακάτω σχέση $\mathbf{d}_h = \mathbf{d}_{\mathfrak{S}p} \times \mathbf{d}_p$, όπου \mathbf{d}_h το διάνυσμα του πεδίου Zeeman και \mathbf{d}_p , $\mathbf{d}_{\mathfrak{S}p}$ τα διανύσματα της πραγματικής και φανταστικής συνιστώσας του υπεραγωγίμου πεδίου p αντίστοιχα.

Quartet C	Αναπαράσταση	\mathcal{I}	\mathcal{T}	\mathcal{R}	$\psi \rightarrow e^{i\pi/2}\psi$
χημικό δυναμικό μ	τ_z	+	+	+	+
πεδίο Zeeman h	$\tau_z \mathbf{d}_h \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$	+	-	-	+
υπεραγωγίμο πεδίο p	$\sin \mathbf{k} \tau_x \mathbf{d}_p \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$	-	+	-	-
υπεραγωγίμο πεδίο $\mathfrak{S}p$	$\sin \mathbf{k} \tau_y \mathbf{d}_{\mathfrak{S}p} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$	-	-	+	-

Πίνακας 5.4: Σύμφωνα με τον κανόνα των επαγόμενων πεδίων ένα triplet υπεραγωγίμο πεδίο συμμετρίας p της μορφής $\sin \mathbf{k} \tau_x \mathbf{d}_p \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ παρουσία ασυμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και πεδίου Zeeman (ασυμμετρία στην πόλωση του σπιν) επάγει ένα επιπλέον triplet υπεραγωγίμο πεδίο της μορφής $\sin \mathbf{k} \tau_y \mathbf{d}_{\mathfrak{S}p} \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$. Για τα διανύσματα των triplet πεδίων στον χώρο του σπιν ισχύει $\mathbf{d}_{\mathfrak{S}p} = \mathbf{d}_p \times \mathbf{d}_h$. Η ιδιότητα αυτή επεκτείνεται σε κάθε τετράδα συζευγμένων πεδίων που περιλαμβάνει τρία triplet πεδία. Για $\Delta_p = \Delta_{\mathfrak{S}p}$ το υπεραγωγίμο πεδίο ισοδυναμεί με ένα πεδίο ζεύξης φορέων χωρίς σπιν. Οι αναπαραστάσεις των πεδίων αναφέρονται στον σπινορα $\Psi(\mathbf{k})^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\uparrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow})$.

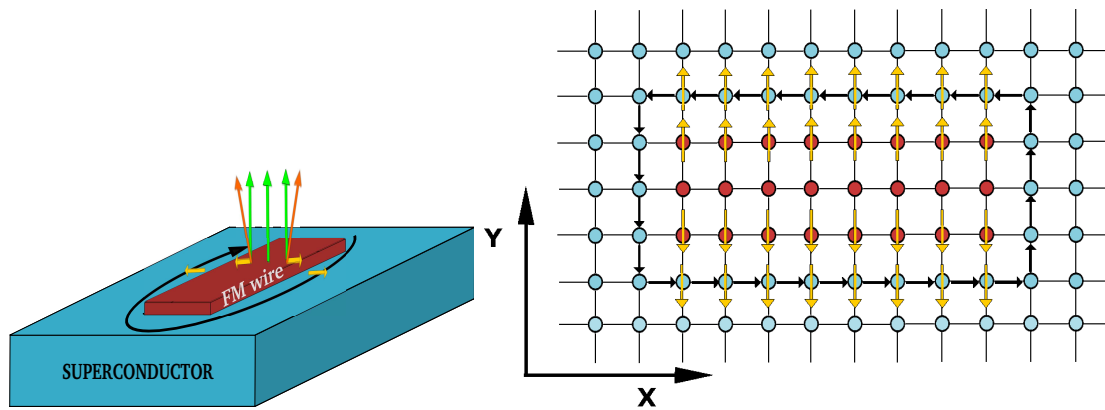
Όπως εξηγείται στο Υπόμνημα Β η παραπάνω ενεργός Χαμιλτονιανή Εξ. 5.11 ανήκει στη χειρική BDI κλάση συμμετρίας και συνεπώς ο μονοδιάστατος σιδηρομαγνήτης βρίσκεται σε τοπολογικά μη-τετριμμένη φάση με τοπολογικό αναλλοίωτο $|\mathcal{W}| = 1$ όταν ικανοποιείται το παρακάτω τοπολογικό κριτήριο

$$|2t' - \sqrt{h_z^2 - \Delta'^2}| < |\mu_{FM}| < |2t' + \sqrt{h_z^2 - \Delta'^2}|. \quad (5.12)$$

Παρατηρούμε ότι για $\mu_{SC} = 0$, η περιοχή του χημικού δυναμικού του σιδηρομαγνήτη για το οποίο εμφανίζονται οι ιδιοκαταστάσεις μηδενικής ενέργειας συμφωνεί με την έκφραση του τοπολογικού κριτηρίου (βλέπε Σχ. 5.9) για $|W| = 1$ τοπολογικές φάσεις, αν θεωρήσουμε κατάλληλες τιμές για τα Δ' και t' . Συγκεκριμένα, το εύρος της σχετικής περιοχής αντιστοιχεί σε επανακανονικοποιημένο ολοκλήρωμα μεταφοράς $t' = 0.6t$. Η επανακανονικοποίηση $t' = Z^{-1}t$ του όρου μεταπήδησης είναι αναμενόμενη, λόγω της σύζευξης του σιδηρομαγνήτη με τον υπεραγωγό, όπου ο παράγοντας επανακανονικοποίησης Z προκύπτει από τη σχέση $Z = 1 + \frac{\Gamma}{\Delta}$, όπου Γ η σταθερά σύζευξης των δύο περιοχών [227, 182]. Στη δική μας ανάλυση ισχύει $\Gamma \simeq t$ που οδηγεί στη σχέση $t' \simeq t \frac{\Delta}{\Delta+1}$. Από τη μεταβολή του εύρους της περιοχής του χημικού δυναμικού για την οποία εμφανίζεται η τοπολογική φάση για διάφορες τιμές του πεδίου Δ του υπεραγωγού παρατηρούμε ότι η επανακανονικοποιημένη τιμή t' πράγματι ακολουθεί σε γενικές γραμμές την παραπάνω σχέση (Σχ. 5.10).

Συνεπώς από την παραπάνω ανάλυση, προκύπτει ότι στη συγκεκριμένη δομή μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού, τα επαγόμενα λόγω του μαγνητικού πεδίου του σιδηρομαγνήτη ρεύματα και ενεργά πεδία Zeeman είναι ικανά για τη σταθεροποίηση μια τοπολογικής υπεραγωγίμης φάσης στον σιδηρομαγνήτη και την εμφάνιση δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας.

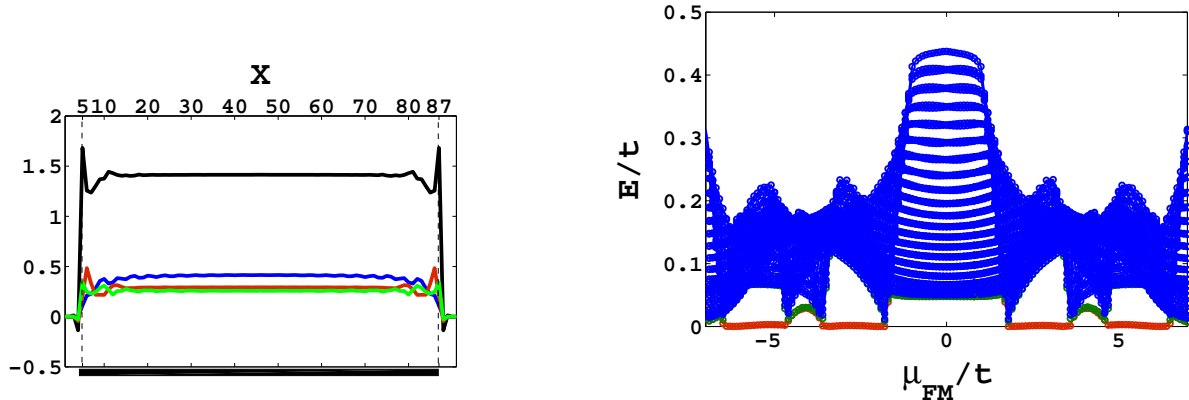
5.2.2 Οιονεί μονοδιάστατοι σιδηρομαγνήτες ενσωματωμένοι σε συμβατικούς υπεραγωγούς



Σχήμα 5.11: αριστερά) Οιονεί-μονοδιάστατος σιδηρομαγνήτης ενσωματωμένος σε συμβατικό υπεραγωγό. Η κύρια συνιστώσα της μαγνήτισης του σιδηρομαγνήτη είναι κάθετη στο επίπεδο του υπεραγωγού (πράσινα διανύσματα). Το μαγνητικό πεδίο του σιδηρομαγνήτη επάγει ρεύμα στον υπεραγωγό (μαύρο βέλος). Η περιστροφή του μαγνητικού πεδίου μακριά από τον σιδηρομαγνήτη αντιστοιχεί σε συνιστώσες μαγνητικού πεδίου, h_x (κίτρινα διανύσματα), στο επίπεδο του συστήματος που δρουν στο εσωτερικό του υπεραγωγού. Σημειώνουμε ότι σε αυτή την περίπτωση, οι συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου στο επίπεδο του υπεραγωγού μπορούν να προέλθουν και από απευθείας στροφή της μαγνήτισης του σιδηρομαγνήτη. δεξιά) Το αντίστοιχο διδιάστατο πλεγματοειδές μοντέλο στο οποίο βασίζεται η Χαμιλτονιανή Εξ. 5.4, για σιδηρομαγνήτη πλάτους $W = 3$ (κόκκινα σημεία) ενσωματωμένο σε συμβατικό υπεραγωγό (μπλε σημεία). Με μαύρο χρώμα παρουσιάζεται το επαγόμενο ρεύμα, ενώ με κίτρινα βέλη οι συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου στο επίπεδο του υπεραγωγού.

Καθώς μονοδιάστατα συστήματα είναι δύσκολο να κατασκευασθούν στην πράξη, διερευνούμε την εφαρμογή του παραπάνω μηχανισμού και σε οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες σε επαφή με συμβατικούς υπεραγωγούς. Στην περίπτωση αυτή η μαγνήτιση του σιδηρομαγνήτη είναι δυνατόν να στρίβει στο επίπεδο του υπεραγωγού με αντισυμμετρικό ως προς τον άξονά του τρόπο. Η στροφή αυτή συνεισφέρει άμεσα σε συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου h_x μέσα στο επίπεδο του υπεραγωγού. Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση η κύρια συνιστώσα της μαγνήτισης του σιδηρομαγνήτη η οποία είναι κάθετη στο επίπεδο του συστήματος επάγει ρεύματα θωράκισης στο σύνορο των δύο περιοχών από τη μεριά του υπεραγωγού. Η γεωμετρία του συστήματος οιονεί-μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού και το αντίστοιχο διδιάστατο πλεγματοειδές μοντέλο παρουσιάζονται στο Σχ. 5.11.

Στην περίπτωση αυτή σημαντικό ρόλο παίζουν τα πεδία που επάγονται στην κάθετη προς τον άξονα του σιδηρομαγνήτη κατεύθυνση. Συγκεκριμένα λόγω της περιστροφής της μαγνήτισης του FM ή εν γένει του συζυγούς μαγνητικού πεδίου γύρω από τον άξονα του σιδηρομαγνήτη επάγονται αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς της μορφής $\alpha_y g_{i,j}^y \tau_3 \sigma_2$ [177]. Όπως παρουσιάζεται στον Πιν. 5.5, οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς της συγκεκριμένης μορφής σε συνδυασμό με το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ και το ενεργό πεδίο Zeeman h_z (χημικό δυναμικό μ_{FM}) του σιδηρομαγνήτη, επάγουν το διανυσματικό υπεραγωγίμο πεδίο p της μορφής $\Im \Delta_x^p g_{i,j}^y \tau_2 \sigma_3$ ($\Delta_y^p g_{i,j}^y \tau_2$). Όπως παρουσιάζεται και στο Υπόμνημα B, οι συγκεκριμένες αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς α_y , το πεδίο h_x και τα επαγόμενα Δ_y^p , $\Im \Delta_x^p$ υπεραγωγίμα πεδία δεν ικανοποιούν τη συνθήκη $\mathbf{d}_{\mathcal{S}p} = \mathbf{d}_\alpha \times \mathbf{d}_h = \mathbf{d}_p \times \mathbf{d}_h$ και επομένως παραβιάζουν τη χειρική συμμετρία, καθώς δεν υπάρχει μοναδιαίος τελεστής που να αντιμετωπίζεται με τον Χαμιλτονιανό τελεστή. Όπως επεξηγείται παρακάτω, το σύστημα στην περίπτωση αυτή περιγράφεται από την ενεργό Χαμιλτονιανή Εξ. 5.13, η οποία παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και συνεπώς ανήκει στην D τοπολογική κλάση. Μονοδιάστατα συστήματα στην κλάση αυτή επιδέχονται τοπολογικά αναλλοίωτα της μορφής \mathbb{Z}_2 . Σύμφωνα με τα επαγόμενα υπεραγωγίμα πεδία, παρατηρούμε ότι η υπεραγωγίμη φάση που επάγεται στον σιδηρομαγνήτη ισοδυναμεί με την υπέρθεση ενός χειρικού υπεραγωγίμου πεδίου ($p_x + ip_y$) με συνιστώσες, τόσο ως προς τον x , $\Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 g_{i,j}^x + \Im \Delta_x^p \tau_2 \sigma_3 g_{i,j}^y$, όσο και ως προς τον y , $\Delta_y^p \tau_2 g_{i,j}^y + \Im \Delta_y^p \tau_1 g_{i,j}^x$, άξονα στον χώρο του σπιν και ενός ελικοειδούς υπεραγωγίου ($p_x \pm ip_y$) με αναπαράσταση $\Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 g_{i,j}^x + \Delta_y^p \tau_2 g_{i,j}^y$. Για $\Delta_x^p = \Delta_y^p = \Im \Delta_x^p = \Im \Delta_y^p$ η ισόποση υπέρθεση του χειρικού και του ελικοειδούς πεδίου ισοδυναμεί με μια υπεραγωγίμη φάση ($p_x + ip_y$) με αναπαράσταση $\Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 g_{i,j}^x + \Delta_y^p \tau_2 g_{i,j}^y$, η οποία σχετίζεται με ηλεκτρόνια με συγκεκριμένη πόλωση του σπιν, η επονομαζόμενη και υπεραγωγίμη φάση χωρίς σπιν.



Σχήμα 5.12: Σιδηρομαγνήτης πλάτους $W = 2$ και μήκους $L = 63$ πλεγματικών θέσεων, ενσωματωμένος σε σύστημα διαστάσεων 71×10 και $\Delta = 1$, $\mu_{SC} = 0$ για τον υπεραγωγό, $h_z = 4$ για τον σιδηρομαγνήτη και $|J| = 0.2$, $|h_x| = 0.4$. Στη συγκεκριμένη περίπτωση θεωρούμε ότι η μαγνήτιση του σιδηρομαγνήτη περιστρέφεται γύρω από τον άξονα του και επομένως το αντίστοιχο πεδίο Zeeman είναι $h_{FM} = h_z \pm h_x$ με $+$ ($-$) για την αριστερή (δεξιά) σειρά του σιδηρομαγνήτη. α) Οι επαγόμενες στον σιδηρομαγνήτη συσχετίσεις ζεύγους ηλεκτρονίων συζυγείς των πεδίων $\Delta_x^p g_{i,j}^x \tau_1 \sigma_3$ (μαύρη γραμμή) και $\Delta_y^p g_{i,j}^y \tau_2$ (μπλε γραμμή) και των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς τύπου Dresselhaus $\alpha_x g_{i,j}^x \sigma_1$ (κόκκινη γραμμή) και $\alpha_y g_{i,j}^y \tau_3 \sigma_2$ (πράσινη γραμμή) για $\mu_{FM} = 3.4$. Οι συσχετίσεις είναι κανονικοποιημένες ως προς τη μέγιστη τιμή για τις συσχετίσεις του πεδίου $\Delta_x^p g_{i,j}^x \tau_1 \sigma_3$ στο μέσο του σιδηρομαγνήτη. β) Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος καθώς μεταβάλλεται το χημικό δυναμικό του σιδηρομαγνήτη. Καθώς $h_z = 4 > 2$ για $\mu_{FM} > 0$ ($\mu_{FM} < 0$) το επίπεδο Fermi βρίσκεται στις ενεργειακές ζώνες των ηλεκτρονίων με σπίν \uparrow (\downarrow). Οι τέσσερις περιοχές για τις οποίες η ελάχιστη ενέργεια του συστήματος είναι μηδέν αντιστοιχούν σε τιμές του χημικού δυναμικού μ_{FM} για το οποίο ο αριθμός των μερικώς κατειλημμένων ενεργειακών ζωνών είναι περιττός.

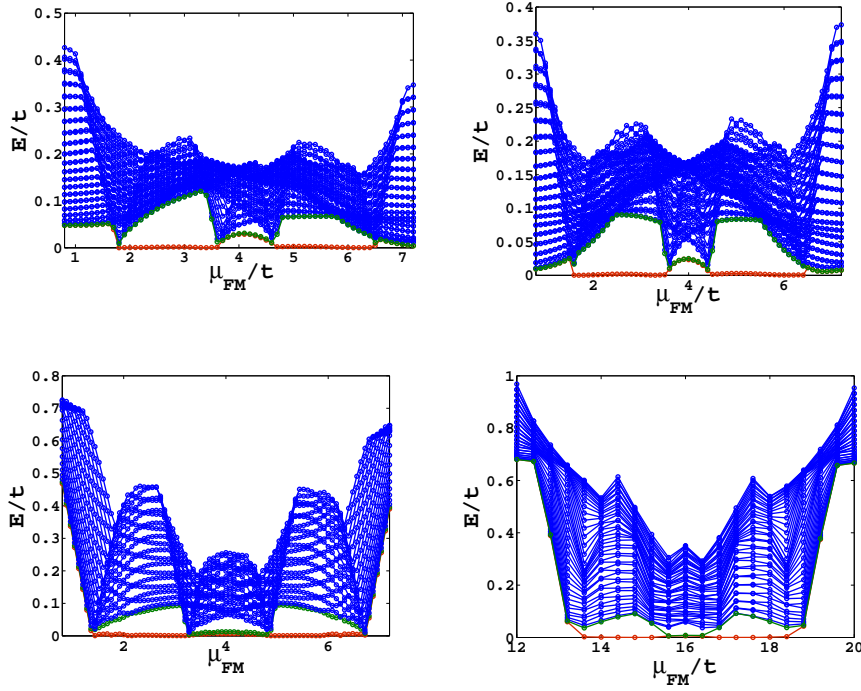
Σημειώνουμε ότι βάσει του κανόνα των επαγόμενων πεδίων, η συνύπαρξη ενός συμβατικού πεδίου Δ με ένα χημικό δυναμικό μ παρουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς a ισοδυναμεί σε ένα ελικοειδές υπεραγωγίμο πεδίο. Αν και στη συγκεκριμένη περίπτωση οι επαγόμενες αλληλεπιδράσεις

σπιν-τροχιάς είναι τύπου Dresselhaus, η παραπάνω παρατήρηση ισχύει ανεξάρτητα από το είδος των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς. Το ελικοειδές υπεραγωγίμο πεδίο δεν παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, κάτι το οποίο ισχύει για κάθε ένα από τα πεδία Δ , μ και a . Παρουσία ενός χημικού δυναμικού η εφαρμογή στο ελικοειδές υπεραγωγίμο πεδίο ενός πεδίου Zeeman h_z που παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου επάγει ένα χειρικό υπεραγωγίμο πεδίο. Αυτός είναι και ο μηχανισμός βάσει του οποίου για κατάλληλες τιμές του χημικού δυναμικού μ_{FM} και του πεδίου Zeeman h_z του σιδηρομαγνήτη επάγεται η τοπολογική υπεραγωγίμη φάση. Η τοπολογική αυτή φάση, η οποία ισοδυναμεί με μια υπεραγωγίμη φάση φερμιονίων όπου τα ζεύγη Cooper αποτελούνται από ηλεκτρόνια με ίδια σπιν συνιστώσα (υπεραγωγίμο πεδίο χωρίς σπιν), παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου και ανήκει στην τοπολογική κλάση D . Οιονεί-μονοδιάστατα συστήματα στην p υπεραγωγίμη φάση φερμιονίων χωρίς σπιν μπορούν να υποστηρίξουν δέσμιες καταστάσεις Majorana στο σύνορό τους [224].

Σε διδιάστατα συστήματα που βρίσκονται, είτε στη χειρική, είτε στην ελικοειδή υπεραγωγίμη φάση p συμμετρίας, εμφανίζονται καταστάσεις με ενέργεια μικρότερη του ενεργειακού χάσματος εντοπισμένες στο σύνορό τους. Οι καταστάσεις αυτές αποσβένονται εκθετικά $\sim e^{1/\xi}$ στο εσωτερικό των συστημάτων αυτών, όπου $\xi \sim \pi u_F / \Delta^p \sim t / \Delta^p$ αντιστοιχεί στο μήκος συνάφειας του υπεραγωγού με u_F την ταχύτητα Fermi και Δ^p το υπεραγωγίμο πεδίο. Εν γένει, σε συστήματα που δεν έχουν την τετραγωνική συμμετρία το υπεραγωγίμο πεδίο δεν είναι ο ίδιο και στους δύο άξονες ενός διδιάστατου συστήματος και επομένως οι συγκεκριμένες εντοπισμένες καταστάσεις αποσβένονται με διαφορετικό ρυθμό στις δύο κατευθύνσεις $1/\xi^d$ με $d = x, y$. Οι εντοπισμένες αυτές καταστάσεις αντιστοιχούν σε ενεργειακές ζώνες που τέμνουν το επίπεδο Fermi όπως προκύπτει από τη μη τετριμμένη τοπολογία των υπεραγωγίμων αυτών φάσεων. Όμως αν μία διάσταση του συστήματος είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με το αντίστοιχο μήκος συνάφειας, οι εντοπισμένες καταστάσεις στις αντίθετες πλευρές του συνόρου αλληλεπιδρούν, οδηγώντας έτσι στην εμφάνιση ενός μικρού ενεργειακού χάσματος στην αντίστοιχη ενεργειακή ζώνη. Το ενεργειακό αυτό χάσμα είναι ανάλογο της ποσότητας $\Delta^{pd} e^{-L_d/\xi_d}$ [224], όπου L_d το μήκος του συστήματος στην αντίστοιχη κατεύθυνση. Οι εντοπισμένες καταστάσεις δεν μπορούν να κυκλοφορήσουν στο σύνορο του συστήματος, λόγω του μικρού ενεργειακού χάσματος και επομένως στο όριο $L_d \leq \xi_d$ το σύστημα συμπεριφέρεται ως οιονεί-μονοδιάστατο κατά την κατεύθυνση d' .

Στη συγκεκριμένη περίπτωση τα οιονεί-μονοδιάστατα υπεραγωγίμα συστήματα παραβιάζουν τη συμμετρία αντιστροφής χρόνου και συνεπώς ανήκουν στην D τοπολογική κλάση η οποία επιδέχεται τοπολογικό αναλλοίωτο τύπου \mathbb{Z}_2 , ή ισοδύναμα μπορούν να υποστηρίξουν μόνο ένα ζεύγος δέσμιων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας. Αυτό συμβαίνει γιατί απουσία της χειρικής συμμετρίας οι μηδενικές καταστάσεις που εντοπίζονται στα άκρα των μονοδιάστατων συστημάτων μπορούν να αλληλεπιδράσουν ανά ζεύγη αποκτώντας πεπερασμένη ενέργεια. Έτσι, στην περίπτωση περιττού αριθμού εντοπισμένων καταστάσεων, μόνο μια δέσμια κατάσταση διατηρεί μηδενική ενέργεια ή ισοδύναμα δέσμιες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας εμφανίζονται μόνο όταν περιττός αριθμός ενεργειακών υποζωνών τέμνει το επίπεδο Fermi. Οι καταστάσεις αυτές παραμένουν εντοπισμένες και διατηρούν τη μηδενική τους ενέργεια, μόνο αν $L_{d'}/\xi_d \gg e^{L_d/\xi_d}$ ή ισοδύναμα $L_{d'} \gg \xi_d + L_d$. Σημειώνουμε ότι το μικρό ενεργειακό χάσμα που διαχωρίζει τα δύο άκρα του οιονεί-μονοδιάστατου συστήματος μειώνεται με τον αριθμό των ενεργειακών υποζωνών N που τέμνουν το επίπεδο Fermi ως Δ^{py} / \sqrt{N} [224, 225, 226]. Σημειώνουμε, ότι το μικρό ενεργειακό χάσμα εκτός από την παρεμπόδιση στην παρατήρηση των καταστάσεων Majorana, σχετίζεται και με τη δυνατότητα επεξεργασίας κβαντικής πληροφορίας μέσω της εναλλαγής των συγκεκριμένων διεγέρσεων [173].

Βάσει των παραπάνω συλλογισμών, επιλύσαμε αριθμητικά την Εξ. 5.5 θεωρώντας οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες που αποτελούνται από περισσότερες από μία σειρά. Στο Σχ. 5.12 παρουσιάζουμε τα πεδία που επάγονται σε ένα σιδηρομαγνήτη μήκους $L = 63$ και πλάτους $W = 2$ ενσωματωμένου σε ένα συμβατικό υπεραγωγό διαστάσεων 71×10 . Θεωρήσαμε $\Delta = 1$, $\mu_{SC} = 0$ για τον υπεραγωγό και $h_z = 4$, $\mu_{FM} = 2.4$, $\Delta = 0$ για τον σιδηρομαγνήτη. Επιπλέον στη συγκεκριμένη περίπτωση, η μαγνήτιση του σιδηρομαγνήτη θεωρούμε ότι περιστρέφεται γύρω από τον άξονα του και συνεπώς το αντίστοιχο πεδίο Zeeman είναι της μορφής $h_{FM} = h_z \pm h_x$ με $+$ ($-$)



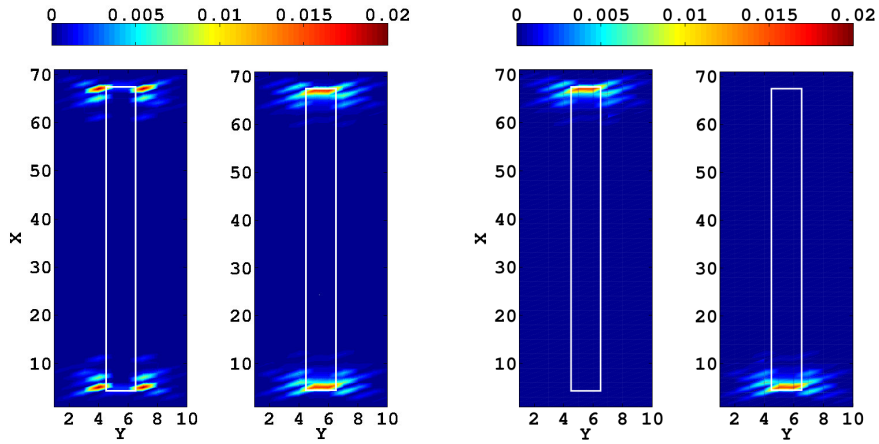
Σχήμα 5.13: Σιδηρομαγνήτης πλάτους $W = 2$ και μήκους $L = 63$ ενσωματωμένος σε υπεραγωγό διαστάσεων 71×10 . Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος συναρτήσκει του χημικού δυναμικού του σιδηρομαγνήτη μ_{FM} για $\mu_{SC} = 0$ για τον υπεραγωγό, $h_z = 4$ για τον σιδηρομαγνήτη και $|J| = 0.2$, $|h_x| = 0.4$. Σε όλες τις περιπτώσεις με εξαίρεση τη β) η μαγνήτιση του σιδηρομαγνήτη περιστρέφεται γύρω από τον άξονα του και επομένως το πεδίο Zeeman στον σιδηρομαγνήτη έχει τη μορφή $h_{FM} = h_z \pm h_x$ με $+$ ($-$) για την αριστερή (δεξιά) σειρά. Συγκεκριμένα έχουμε α) $\Delta = 1$ για το υπεραγωγίμο πεδίο β) για $\Delta = 1$ και ομοιόμορφη μαγνήτιση στον σιδηρομαγνήτη, $h_{FM} = h_z$, γ) για $\Delta = 2$ και δ) για $\Delta = 2$ και $h_z = 16$. Για τις περιπτώσεις γ) και δ) με $\Delta = 2$ η χειρική συμμετρία ή ισοδύναμα η συμμετρία ανάκλασης ως προς τον εγκάρσιο άξονα του σιδηρομαγνήτη διατηρούνται προσεγγιστικά καθώς τα εγκάρσια πεδία a και Δ^P που επάγονται και τα πεδία h_x και J είναι μικρά σε σχέση με τα $\Delta = 2$ και h_z . Στις περιπτώσεις αυτές, οι εντοπισμένες στα άκρα του σιδηρομαγνήτη δέσιμες καταστάσεις παραμένουν καλά διαχωρισμένες από το υπόλοιπο ενεργειακό φάσμα ακόμα για άρτιο αριθμό μερικώς κατειλημμένων υποζωνών.

για την αριστερή(δεξιά) σειρά και $|h_x| = 0.4$. Επίσης θεωρούμε ότι λόγω του μαγνητικού πεδίου του σιδηρομαγνήτη εμφανίζεται στον υπεραγωγό ρεύμα θωράκισης $|J| = 0.2$. Το ρεύμα J και οι συνιστώσες του πεδίου Zeeman h_x εφαρμόζονται στα σημεία του υπεραγωγού που συνορεύουν με τον σιδηρομαγνήτη. Παρατηρούμε ότι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς $k \cdot s$ τύπου Dresselhaus με αναπαράσταση $(\alpha_x g_{i,j}^x \sigma_1 + \alpha_y g_{i,j}^y \tau_3 \sigma_2)$ και ένα χειρικό υπεραγωγίμο πεδίο $(\Delta_x^P g_{i,j}^x \tau_1 \sigma_3 + \Delta_y^P g_{i,j}^y \tau_2)$, επάγονται στον σιδηρομαγνήτη όπως προβλέπεται από τον κανόνα επαγόμενων πεδίων.

Στο ίδιο σχήμα παρουσιάζεται και το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών ενεργειών συναρτήσκει του χημικού δυναμικού μ_{FM} του σιδηρομαγνήτη. Όπως προβλέπεται για συστήματα στην D τοπολογική κλάση, μόνο η χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος καθιλώνεται στο μηδέν για τέσσερις (δύο για κάθε πόλωση του σπιν) μη συνδεδεμένες περιοχές του χημικού δυναμικού που περιγράφονται από τις σχέσεις μ_{FM} , $1.8 < |\mu_{FM}| < 3.6$ και $4.7 < |\mu_{FM}| < 6.5$. Για τιμές του μ_{FM} στις περιοχές αυτές ο αριθμός των υποζωνών που τέμνουν το επίπεδο Fermi είναι περιττός. Στη συγκεκριμένη περίπτωση το πεδίο Zeeman $h_z = 4 > 2$ ισοδυναμεί με το εύρος των ενεργειακών υποζωνών του συστήματος και συνεπώς οι ενεργειακές ζώνες για κάθε πόλωση του σπιν είναι καλά διαχωρισμένες. Γενικά για $h_z > 2$, το ενεργειακό φάσμα χαμηλών ενεργειών για $\mu_{FM} > 0$ ($\mu_{FM} < 0$) αντιστοιχεί σε φερμιόνια με πόλωση σπιν πάνω (κάτω) και τις υποζώνες που σχετίζονται με την αντίθετη πόλωση σπιν κατειλημμένες (κενές). Σημειώνουμε επίσης τη συμμετρία του φάσματος ως προς $\mu_{FM} = 0$. Επιπλέον, μεταξύ των τοπολογικά μη τετριμμένων περιοχών, για $3.6 < |\mu_{FM}| < 4.7$, παρατηρούμε την εμφάνιση δύο ιδιοκαταστάσεων που διαχω-

	Αναπαράσταση	\mathcal{I}	\mathcal{T}	\mathcal{R}		Αναπαράσταση	\mathcal{I}	\mathcal{T}	\mathcal{R}
Quartet D_a					Quartet D_b				
αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς a	$\sin \mathbf{k} \mathbf{d}_a \cdot \tilde{\sigma}$	-	+	-	αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς a	$\sin \mathbf{k} \mathbf{d}_a \cdot \tilde{\sigma}$	-	+	-
πεδίο Zeeman h	$\tau_z \mathbf{d}_h \cdot \tilde{\sigma}$	+	-	-	χημικό δυναμικό μ	τ_z	+	+	+
συμβατικός υπεραγωγός Δ	$\tau_y \sigma_y$	+	+	+	συμβατικός υπεραγωγός Δ	$\tau_y \sigma_y$	+	+	+
triplet υπεραγωγός $\mathcal{S}p$	$\sin \mathbf{k} \tau_y \mathbf{d}_{\mathcal{S}p} \cdot \tilde{\sigma}$	-	-	+	triplet υπεραγωγός p	$\sin \mathbf{k} \tau_x \mathbf{d}_p \cdot \tilde{\sigma}$	-	+	-

Πίνακας 5.5: Οι αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς a , το πεδίο Zeeman h , το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ και το μη-συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο p συμμετρίας σχηματίζουν μια τετράδα συζευγμένων πεδίων. Η σύζευξη των παραπάνω πεδίων μπορεί να κατανοηθεί και μέσω των μετασχηματισμών αντιστροφής του χώρου \mathcal{I} , αντιστροφής του χρόνου \mathcal{T} και του συνδυασμού $\mathcal{R} = \mathcal{I}\mathcal{T}$. Κάθε υποσύνολο τριών από αυτά τα πεδία, ως γινόμενο, έχει τις ιδιότητες μετασχηματισμού του τέταρτου. Για την πρώτη περίπτωση, για τα διανύσματα των triplet πεδίων στον χώρο του σπιν πρέπει να ισχύει $\mathbf{d}_a = \mathbf{d}_h \times \mathbf{d}_{\mathcal{S}p}$, ενώ για τη δεύτερη περίπτωση $\mathbf{d}_a = \mathbf{d}_p$. Η αναπαράσταση των πεδίων αναφέρεται στον σπίνορα $\Psi(\mathbf{k})^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\uparrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow})$.



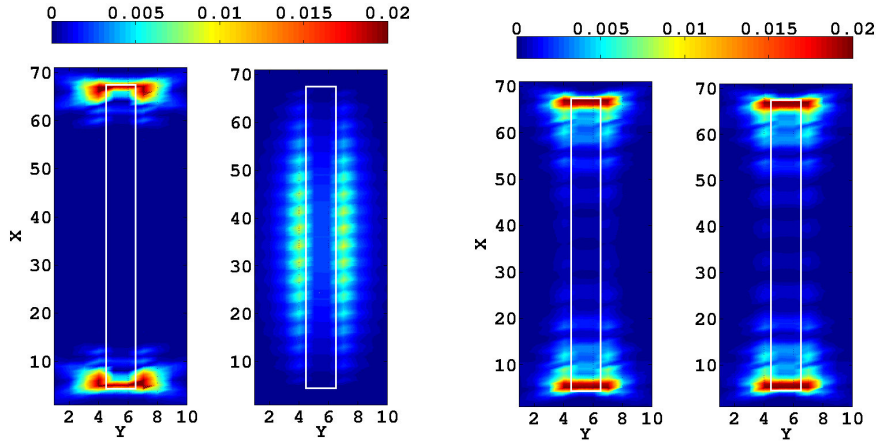
Σχήμα 5.14: Αριστερά) Για την περίπτωση που παρουσιάστηκε στο Σχ. 5.12 η κυματοσυνάρτηση $|\Psi|^2$ που αντιστοιχεί στη χαμηλότερη ενέργεια για $\mu_{FM} = 3.4$. Το αριστερό(δεξί) σχήμα αντιστοιχεί στο τμήμα της κυματοσυνάρτησης με σπιν $\downarrow(\uparrow)$. Σημειώνουμε ότι μέσα στον σιδηρομαγνήτη (άσπρο ορθογώνιο) η κυματοσυνάρτηση έχει πόλωση σπιν αντιπαράλληλη προς τη μαγνήτισή του, ενώ εκτός του σιδηρομαγνήτη η κυματοσυνάρτηση είναι πεπερασμένη και για την αντίθετη πόλωση. δεξιά) Η ίδια ιδιοκατάσταση εκφρασμένη στη βάση Majorana.

ρίζονται από το υπόλοιπο φάσμα και συνεπώς είναι εντοπισμένες, αλλά έχουν πεπερασμένη ενέργεια (Σχ. 5.15). Για τις τιμές αυτές του μ_{FM} και οι δύο υποζώνες για σπιν πάνω τέμνουν το επίπεδο Fermi και επομένως οι δύο καταστάσεις Majorana σε κάθε άκρο του συστήματος αλληλεπιδρούν και δημιουργούν εντοπισμένες φερμιονικές καταστάσεις πεπερασμένης ενέργειας.

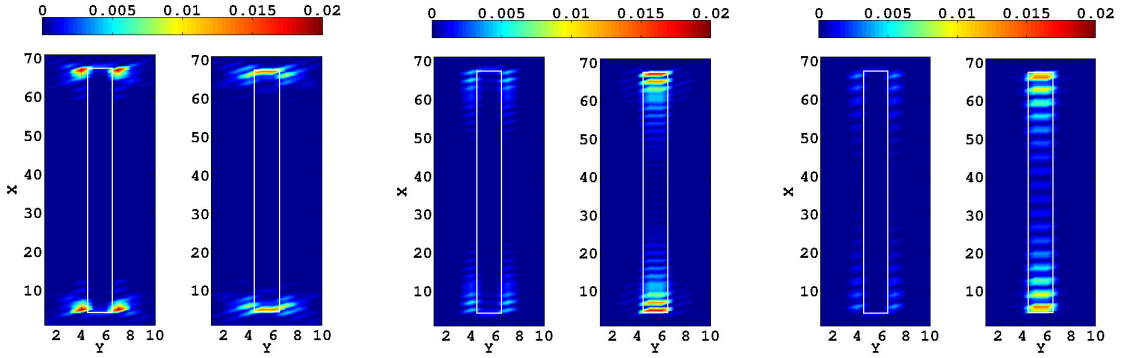
Στο Σχ. 5.14 παρουσιάζουμε την ιδιοκατάσταση που αντιστοιχεί στη χαμηλότερη ενέργεια του συστήματος για $\mu_{FM} = 3.4$ στις βάσεις Nambu και Majorana. Παρατηρούμε ότι η συγκεκριμένη ιδιοκατάσταση αντιστοιχεί σε θετική πόλωση του σπιν και είναι εντοπισμένη μέσα στον σιδηρομαγνήτη. Όμως μέσω του μηχανισμού ανάκλασης Andreev και λόγω της παρουσίας αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς η συγκεκριμένη ιδιοκατάσταση διαρρέει στον συμβατικό υπεραγωγό με αντίθετη πόλωση σπιν.

Κατά τρόπο ανάλογο με αυτόν που προσεγγίσαμε την περίπτωση των μονοδιάστατων σιδηρομαγνητών θεωρούμε και στη συγκεκριμένη περίπτωση την παρακάτω ενεργή Χαμιλτονιανή που περιλαμβάνει τα επαγόμενα πεδία που προαναφέραμε

$$\begin{aligned}
H_{FM}^{q1D,eff} = & \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [t' f_{i,j}^e \tau_3 + (\mu_{FM} \tau_3 + h_z \tau_3 \sigma_3 + h_x \tau_3 \sigma_1 + \Delta' \tau_2 \sigma_2) \delta_{i,jx} \\
& + (\alpha_x \sigma_1 + \Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 + \Im \Delta_y^p \tau_1 + J^x) f_{i,j}^{x,o} + (\alpha_y \tau_3 \sigma_2 + \Delta_y^p \tau_2 + \Im \Delta_x^p \tau_2 \sigma_3 + J^y) f_{i,j}^{y,o}] \Psi_j
\end{aligned} \quad (5.13)$$



Σχήμα 5.15: Οι κυματοσυναρτήσεις για τις ιδιοκαταστάσεις που αντιστοιχούν στις δύο χαμηλότερες ιδιοενέργειες του ενεργειακού φάσματος Σχ. 5.12 για $\mu_{FM} = 3$ (με ενέργειες $E_l = 0.001, E_r = 0.11$) (αριστερά) και $\mu_{FM} = 4$ (με ενέργειες $E_{l,r} = 0.03$) (δεξιά). Για $\mu_{FM} = 3$, μόνο μία ιδιοκατάσταση είναι εντοπισμένη στα άκρα του σιδηρομαγνήτη, ενώ για $\mu_{FM} = 4$ και οι δύο ιδιοκαταστάσεις είναι εντοπισμένες. Στη δεύτερη περίπτωση οι ιδιοκαταστάσεις αλληλεπιδρούν αποκτώντας πεπερασμένη ενέργεια $E = 0.03$ καθώς δεν προστατεύονται από κάποια συμμετρία.



Σχήμα 5.16: Η κυματοσυνάρτηση $|\Psi|^2$ της ιδιοκατάστασης με τη χαμηλότερη ενέργεια για αριστερά) την περίπτωση που αντιστοιχεί στο Σχ. 5.13α) και $\mu_{FM} = 3$ μέση) την περίπτωση που αντιστοιχεί στο Σχ. 5.13γ) και $\mu_{FM} = 3$ και δεξιά) την περίπτωση που αντιστοιχεί στο Σχ. 5.13δ) και $\mu_{FM} = 13.6$. Παρατηρούμε πως η μείωση του υπεραγωγίμου ενεργειακού χάσματος οδηγεί στην επέκταση των δέσιμων καταστάσεων Majorana κατά μήκος του σιδηρομαγνήτη.

Συγκεκριμένα, η παραπάνω ενεργός Χαμιλτονιανή περιλαμβάνει αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς τύπου Dresselhaus και μια υπέρθεση ενός χειρικού και ενός ελικοειδούς υπεραγωγίμου πεδίου συμμετρίας p που επάγονται από τη συνύπαρξη του υπερρεύματος και των συνιστωσών Zeeman h_x στο επίπεδο του συστήματος, με το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο και το Zeeman πεδίο h_z . Έχουμε επιπλέον συμπεριλάβει το υπερέρμα J καθώς και τις συνιστώσες h_x του πεδίου Zeeman που στην περίπτωση αυτή αποκτούν πεπερασμένες τιμές στον σιδηρομαγνήτη όπως επιτρέπεται από τη συμμετρία του συστήματος. Τέλος, για το ολοκλήρωμα μεταφοράς έχουμε θεωρήσει την επανακανονικοποιημένη τιμή t' , λόγω της σύζευξης του σιδηρομαγνήτη με τον υπεραγωγό.

Συνεπώς, απουσία των επαγόμενων πεδίων οι ενεργειακές ζώνες του συστήματος με περιοδικές συνοριακές συνθήκες αποκτούν την παρακάτω μορφή

$$E_{k,\pm,\pm} = \pm h_z \pm \sqrt{[2t'(\cos k_x + \cos k_y) + \mu]^2 + \Delta^2}, \quad (5.14)$$

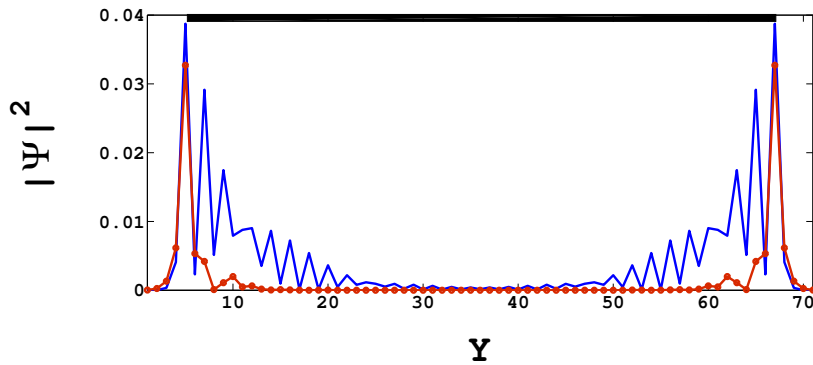
όπου αγνοήσαμε για λόγους απλότητας τις συνιστώσες h_x του πεδίου Zeeman. Ως εγχάρσιες ενεργειακές υποζώνες του οιονεί-μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη θεωρούμε τις ζώνες που αντιστοιχούν σε συγκεκριμένη τιμή της αντίστοιχης συνιστώσας k_y της ορμής (η μικρή διάσταση του

σιδηρομαγνήτη θεωρούμε ότι είναι κατά τον y άξονα). Παρατηρούμε ότι οι ενεργειακές αυτές υποζώνες ισοδυναμούν με αυτή του μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη μετατοπισμένες κατά έναν όρο χημικού δυναμικού $2t' \cos k_y$. Επομένως τα αναμενόμενα τοπολογικά κριτήρια για κάθε υποζώνη του οιονεί-μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη τροποποιούνται αναλόγως

$$|2t' - \sqrt{h_z^2 - \Delta'^2}| < |\mu_{FM} + 2t' \cos k_y| < |2t' + \sqrt{h_z^2 - \Delta'^2}|. \quad (5.15)$$

Υπενθυμίζουμε ότι στην περίπτωση αυτή δέσμιες καταστάσεις Majorana εμφανίζονται όταν το παραπάνω κριτήριο ικανοποιείται για περιττό αριθμό υποζωνών. Με βάση τα παραπάνω κριτήρια συμπεραίνουμε από το Σχ.5.12 ότι η επανακανονικοποιημένη τιμή του ολοκληρώματος μεταφοράς για τη συγκεκριμένη περίπτωση είναι $t' = 0.725t$ και για τις δύο υποζώνες.

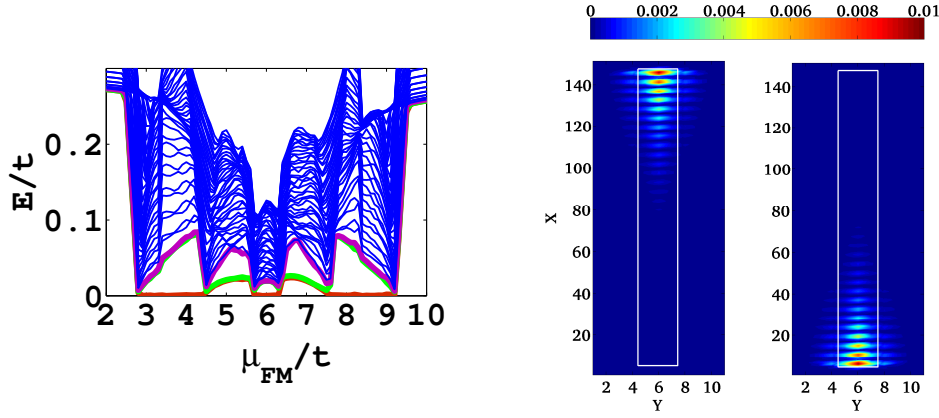
Τέλος, σημειώνουμε ότι μόνο τα πεδία h_x , J και τα επαγόμενα a και p κατά την y κατεύθυνση είναι αντισυμμετρικά ως προς τον άξονα του σιδηρομαγνήτη. Επομένως για μικρές τιμές των h_x και J σε σχέση με το υπεραγωγίμο πεδίο Δ' και το πεδίο Zeeman h_z στον σιδηρομαγνήτη, το σύστημα μπορεί να θεωρηθεί ότι παραβιάζει ελαφρώς τη συμμετρία ανάκλασης ως προς y . Ισοδύναμα όπως αναλύεται και στο Υπόμνημα Β, το σύστημα στην περίπτωση αυτή σχεδόν διατηρεί τη χειρική συμμετρία. Αυτή ακριβώς η προσεγγιστική συμμετρία (χειρική ή ανάκλασης), δεν επιτρέπει την ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ των εντοπισμένων στα άκρα καταστάσεων με αποτέλεσμα οι καταστάσεις αυτές να μην αποκτούν σημαντική ενέργεια και να παραμένουν σαφώς διαχωρισμένες από το υπόλοιπο ενεργειακό χάσμα (Σχ. 5.13).



Σχήμα 5.17: Για $\mu_{FM} = 3$ η κυματοσυνάρτηση της ιδιοκατάστασης με τη χαμηλότερη ενέργεια για το ενεργειακό φάσμα του Σχ. 5.13α) με $\Delta = 1$ (κόκκινο χρώμα) και του Σχ. 5.13γ) με $\Delta = 2$ (μπλε χρώμα) με υπεραγωγίμο χάσμα $\Delta E \simeq 0.11$ και $\Delta E \simeq 0.1$ αντίστοιχα. Σημειώνουμε ότι ενώ το ενεργειακό χάσμα είναι σχεδόν ταυτόσημο και στις δύο περιπτώσεις η κυματοσυνάρτηση που αντιστοιχεί σε $\Delta = 2$ εμφανίζεται πολύ λιγότερο εντοπισμένη. Η διαφορά αυτή οφείλεται στην τιμή του επανακανονικοποιημένου ολοκληρώματος μεταφοράς σε κάθε περίπτωση, και συγκεκριμένα $t' = 0.725t$ και $t' = 0.875t$ για την α) και γ) περίπτωση αντίστοιχα. Συνεπώς στην περίπτωση γ) η κυματοσυνάρτηση είναι πολύ λιγότερο εντοπισμένη, καθώς το μήκος συνάφειας $\xi = t'/\Delta^p$ είναι μεγαλύτερο.

Αναλύσαμε επίσης συστήματα με σιδηρομαγνήτες πλάτους $W = 3$. Τα αποτελέσματα και στην περίπτωση αυτή καταδεικνύουν την εμφάνιση ενός πεδίου ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν που παραβιάζει τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου. Επίσης, όπως αναμένεται η χαμηλότερη ιδιοενέργεια του συστήματος είναι μηδέν όταν περιττός αριθμός των εγκάρσιων ενεργειακών υποζωνών τέμνει το επίπεδο Fermi. Παρατηρούμε ότι το ενεργειακό χάσμα που διαχωρίζει τις καταστάσεις μηδενικής ενέργειας από το υπόλοιπο φάσμα μειώνεται με τον αριθμό των μερικώς κατειλημμένων ζωνών σε ποιοτική συμφωνία με το αποτέλεσμα Δ^{p_y}/\sqrt{N} .

Τέλος, σημειώνουμε ότι σύμφωνα με τις παραπάνω παρατηρήσεις και τη μικρή σε σχέση με το εύρος των ενεργειακών ζωνών του σιδηρομαγνήτη τιμή του επαγόμενου υπεραγωγίμου πεδίου, η αύξηση του πλάτους της σιδηρομαγνητικής περιοχής απαιτεί σημαντική αντίστοιχη αύξηση του μήκους της. Επομένως, η υπολογιστική ισχύς που απαιτείται για την παρατήρηση δέσμιων



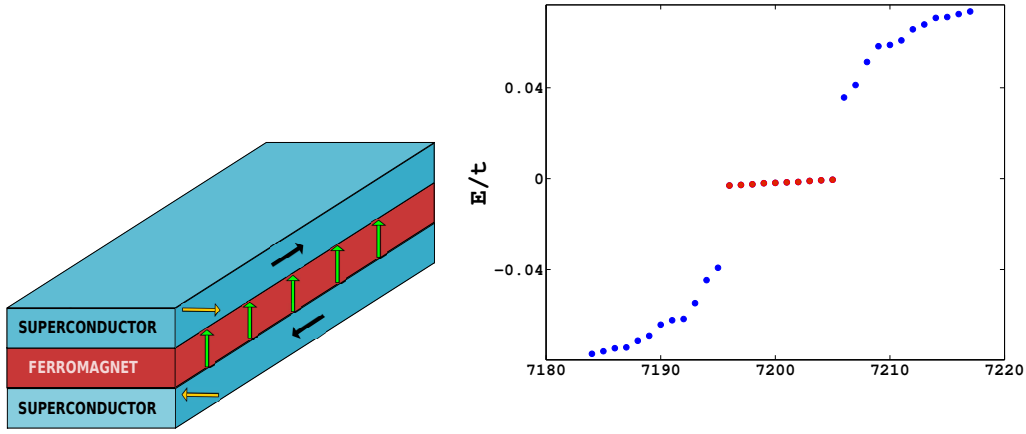
Σχήμα 5.18: Σιδηρομαγνήτης πλάτους $W = 3$ και μήκους $L = 143$ ενσωματωμένος σε υπεραγωγό με $\Delta = 1$ και $\mu_{SC} = 0$. Θεωρούμε ότι η κύρια συνιστώσα μαγνήτισης του σιδηρομαγνήτη αντιστοιχεί σε ένα πεδίο Zeeman $h_z = 6$. Επιπλέον θεωρούμε ότι η μαγνήτιση στρέφεται γύρω από τον άξονα του σιδηρομαγνήτη, οπότε και το συνολικό πεδίο Zeeman έχει τη μορφή $h_{FM} = h_z \pm h_x$ με $+$ ($-$) για την αριστερή (δεξιά) σειρά και $h_{FM} = h_z$ για τη μεσαία. Τέλος, ένα υπερρεύμα $|J| = 0.2$ ρέει στην υπεραγωγίμη περιοχή γύρω από τον σιδηρομαγνήτη. α) Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος συναρτήσκει του χημικού δυναμικού μ_{FM} του σιδηρομαγνήτη. Για $2.8 < \mu_{FM} < 4.5$, $7.5 < \mu_{FM} < 9.2$ και $5.7 < \mu_{FM} < 6.3$ η ελάχιστη ενέργεια (κόκκινη γραμμή) καθηλώνεται στο μηδέν καθώς για τις παραμέτρους αυτές έχουμε περιττό αριθμό μερικώς κατειλημμένων εγχάρσιων ενεργειακών υποζωνών του σιδηρομαγνήτη. Για $4.5 < \mu_{FM} < 5.7$ και $6.3 < \mu_{FM} < 7.5$ τα δύο ζεύγη δέσιμων καταστάσεων που προκύπτουν αλληλεπιδρούν και συνεπώς αποκτούν πεπερασμένη ενέργεια. Από το παραπάνω διάγραμμα και το αντίστοιχο τοπολογικό κριτήριο συμπεραίνουμε ότι το επανακανονικοποιημένο ολοκλήρωμα μεταφοράς λαμβάνει προσεγγιστικά τις τιμές $t' = 0.875t$ για τις δύο ακραίες υποζώνες και $t' = 0.75t$ για τη μεσαία. Επιπλέον, το ενεργειακό χάσμα ως προς το υπόλοιπο φάσμα ιδιοενεργειών είναι μικρότερο όταν 3 υποζώνες είναι μερικώς κατειλημμένες. β) Οι κυματοσυναρτήσεις για τις δέσιμες καταστάσεις μηδενικής ενέργειας για $\mu_{FM} = 3.3$, εκφρασμένες στη βάση Majorana .

καταστάσεων Majorana σε συστήματα όπου ο σιδηρομαγνήτης έχει πλάτος $W > 3$ αυξάνεται σε απαγορευτικό για τις δυνατότητές μας βαθμό. Παρόλο που δεν έχουμε σχετικά αποτελέσματα, αναμένουμε την εμφάνιση δέσιμων καταστάσεων Majorana σύμφωνα με τον μηχανισμό που περιγράψαμε παραπάνω, ακόμα και σε συστήματα με $W > 3$ για τη σιδηρομαγνητική περιοχή.

Συνοψίζοντας, παρουσιάσαμε πως ένα πεδίο ζεύξης ηλεκτρονίων ίδιου σπιν συμμετρίας p επάγεται σε οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες εμβαπτισμένους σε συμβατικό υπεραγωγό λόγω της συνάπαρξης υπερρεύματος J και πεδίων Zeeman στο επίπεδο του συστήματος. Στο όριο $L^y < \xi^y$, τα συστήματα αυτά μπορούν να θεωρηθούν ως οιονεί-μονοδιάστατα και συνεπώς για $L^x \gg \xi^y$, αναμένεται η εμφάνιση ενός ζεύγους δέσιμων καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας εντοπισμένων στα άκρα του σιδηρομαγνήτη, όταν περιττός αριθμός εγχάρσιων ενεργειακών υποζωνών του συστήματος τέμνουν την επιφάνεια Fermi.

5.2.3 Ετεροδομές στρωμάτων υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού

Στη συγκεκριμένη ενότητα παρουσιάζουμε πως τοπολογικές υπεραγωγίμες φάσεις μπορούν να επαχθούν σε ετεροδομές στρωμάτων σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού λόγω της παρουσίας υπερρευμάτων και πεδίων Zeeman. Βασίζόμενοι στα βασικά χαρακτηριστικά των ετεροδομών που παρουσιάσαμε στις προηγούμενες ενότητες, διερευνούμε την εφαρμογή του μηχανισμού που προτείνουμε σε ετεροδομές υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού με διεπαφές τύπου [001]. Όπως παρουσιάζεται στο Σχ. 5.19, στη συγκεκριμένη ετεροδομή θεωρούμε ότι αντιπαράλληλα υπερρεύματα ρέουν στα υπεραγωγίμα στρώματα, όπου επιπλέον ασχούνται πεδία Zeeman (μέσω εγγύτητας με μαγνητικούς μονωτές ή μέσω πηνίων) κάθετα στη μαγνήτιση του σιδηρομαγνητικού στρώματος και σε



Σχήμα 5.19: α) Σχηματική αναπαράσταση ετεροδομής υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη/υπεραγωγού (SC/FM/SC) όπου στις υπεραγωγίμες περιοχές εφαρμόζονται υπερρεύματα (μαύρα διανύσματα) και συνιστώσες πεδίου Zeeman (κίτρινα διανύσματα) κάθετες στη μαγνήτιση του σιδηρομαγνήτη (πράσινα διανύσματα). Η διάταξη των πεδίων αυτών είναι αντισυμμετρική ως προς το κεντρικό επίπεδο του σιδηρομαγνήτη. β) Το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων για σύστημα SC/FM/SC τριών στρωμάτων, όπως προέκυψε από την επίλυση της Εξ. 5.16 με $h_z = 8$ και $\mu_{FM} = 6.4$ για τον σιδηρομαγνήτη, $\Delta = 2$, $|h_x| = 0.8$, $|J^x| = 0.4$ για τα υπεραγωγίμα στρώματα και $t_c = 0.8$ για τη σύζευξη μεταξύ των επιπέδων και μη-περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Παρατηρούμε την εμφάνιση 5 ζευγαριών ιδιοκαταστάσεων με ιδιοενέργεια σχεδόν μηδενική (κόκκινο χρώμα), οι οποίες διαχωρίζονται από το υπόλοιπο φάσμα μέσω ενεργειακού χάσματος $\Delta E \simeq 0.04$. Για $\mu = 6.4$ το τοπολογικό αναλλοίωτο του συστήματος είναι πράγματι $\mathcal{W} = 5$.

αντιπαράλληλη επίσης διάταξη.

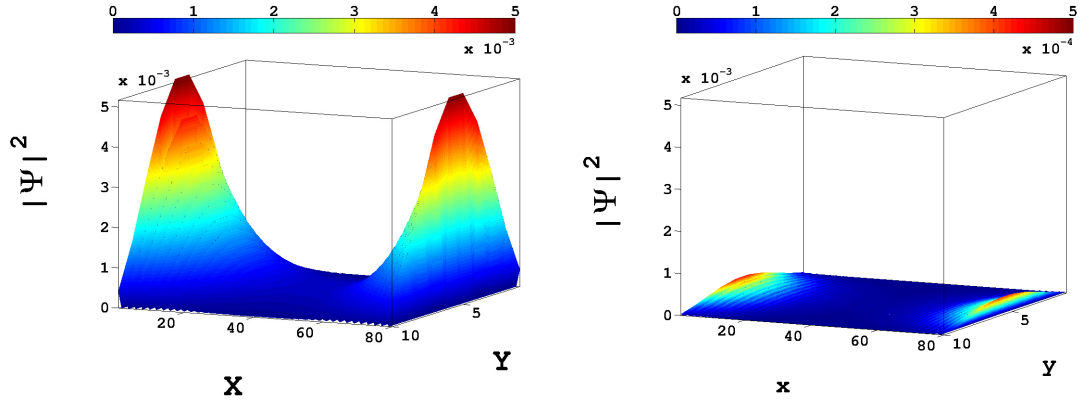
Η μικροσκοπική Χαμιλτονιανή που περιγράφει την παραπάνω διάταξη έχει την παρακάτω γενική μορφή

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{i,l} \left[\mu_l \cdot n_{i,l} - \psi_{i,l,s} (\mathbf{h}_l \cdot \boldsymbol{\sigma})_{ss'} \psi_{i,l,s'} + \Delta_l \psi_{i,l,\uparrow}^\dagger \psi_{i,l,\downarrow}^\dagger + h.c. \right] \\ & + \sum_{i,j,l,s} (t f_{i,j}^e + J f_{i,j}^o) \psi_{i,l,s}^\dagger \psi_{j,l,s} + \sum_{i,l,l',s} t_{l,l'} \psi_{i,l,s}^\dagger \psi_{i,l',s}, \end{aligned} \quad (5.16)$$

όπου l ο δείκτης του κάθε στρώματος. Η παραπάνω εξίσωση είναι της μορφής της Εξ. 5.4 που παρουσιάστηκε στις προηγούμενες ενότητες. Στη συγκεκριμένη περίπτωση προσθέτουμε κινητικούς όρους σύζευξης των στρωμάτων της ετεροδομής $t_{l,l'} \psi_{i,l,s}^\dagger \psi_{i,l',s}$, ενώ παραλείπουμε τον δείκτη πλεγματικής θέσης i από τα πεδία J, μ, \mathbf{h} και Δ τα οποία θεωρούνται ότι είναι ομοιόμορφα σε κάθε στρώμα. Εισάγοντας τον σπινόρα $\Psi_{i,l}^\dagger = (\psi_{i,l,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,l,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,l,\uparrow}, \psi_{i,l,\downarrow})$ για κάθε στρώμα και τις μήτρες Pauli $\boldsymbol{\tau}, \boldsymbol{\sigma}$ που δρουν στον χώρο Nambu και σπιν, η Χαμιλτονιανή Εξ. 5.16 απλοποιείται στην παρακάτω μορφή

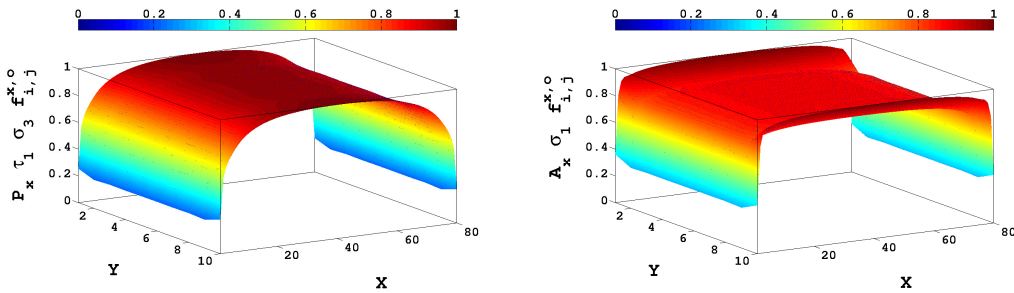
$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \frac{1}{2} \sum_{i,j,l} \Psi_{i,l}^\dagger \hat{H}_{i,j,l} \Psi_{j,l} + \frac{1}{2} \sum_{i,l,l'} \Psi_{i,l}^\dagger \hat{H}_{i,l,l'} \Psi_{i,l'}, \\ \hat{H}_{i,j,l} = & t_l f_{i,j}^e \tau_3 + J_l f_{i,j}^o + (\mu_l \tau_3 - \tau_3 \mathbf{h}_l \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \Delta_l \tau_2 \sigma_2) \delta_{i,j}, \quad \hat{H}_{i,l,l'} = t_{l,l'} \tau_3. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Σύμφωνα με τη διάταξη που παρουσιάζεται στο Σχ. 5.19, το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο είναι πεπερασμένο $\Delta \neq 0$ μόνο στα ακραία υπεραγωγίμα στρώματα, ενώ το πεδίο Zeeman $h_z \tau_3 \sigma_3 \neq 0$ α-σχεύεται μόνο στο σιδηρομαγνητικό επίπεδο. Θεωρούμε ότι το υπερρεύμα στα υπεραγωγίμα στρώματα ρέει κατά τον x -άξονα $J_l^x f_{i,j}^{x,o}$, ενώ επιπλέον ασκούνται τα πεδία Zeeman της μορφής $h_x \tau_3 \sigma_1$ στο επίπεδο των υπεραγωγίμων στρωμάτων. Σημειώνουμε ότι στην περίπτωση αυτή οι αντιπαράλληλες συνιστώσες h_x μπορούν, είτε να πηγάζουν από το μαγνητικό πεδίο του σιδηρομαγνήτη,



Σχήμα 5.20: Για την περίπτωση που παρουσιάστηκε στο Σχ. 5.19, η κυματοσυνάρτηση των ιδιοκαταστάσεων χαμηλότερης ενέργειας α) στο επίπεδο του σιδηρομαγνήτη και β) στα επίπεδα των υπεραγωγών. Σημειώνουμε ότι λόγω συμμετρίας του συστήματος, η κυματοσυνάρτηση στα δύο υπεραγωγία επίπεδα είναι ταυτόσημη. Η κυματοσυνάρτηση στο επίπεδο του σιδηρομαγνήτη αναφέρεται σε πόλωση του σπιν αντιπαράλληλη προς τη μαγνήτιση του, ενώ στα υπεραγωγία επίπεδα αναφέρεται στην αντίθετη πόλωση του σπιν.

είτε να εφαρμόζονται εξωτερικά μέσω μαγνητικών μονωτών ή πηνίων. Κινητικοί όροι σύζευξης της μορφής $t_{i,i'}\tau_3$, που αντιστοιχούν σε όρους μεταπήδησης μεταξύ ίδιων πλεγματικών θέσεων σε γειτονικά στρώματα, θεωρούνται μόνο μεταξύ του σιδηρομαγνήτη και του κάθε υπεραγωγού.

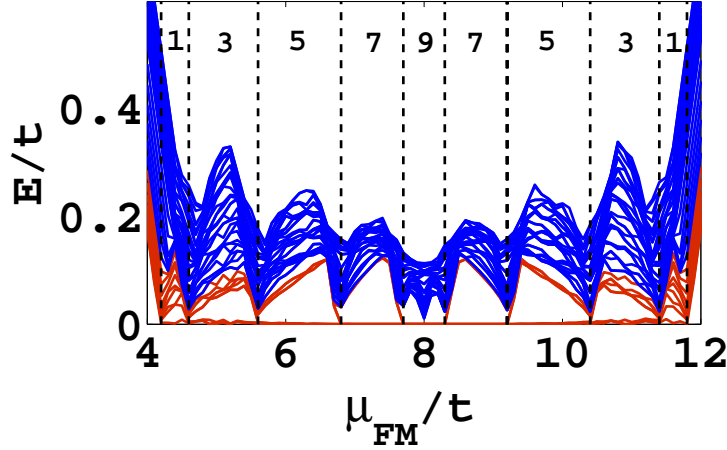


Σχήμα 5.21: Οι επαγόμενες στον σιδηρομαγνήτη συσχετίσεις α) της υπεραγωγίμης φάσης $P_x \tau_1 \sigma_3 f_{i,j}^{x,odd}$ και β) των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς $A_x \sigma_1 f_{i,j}^{x,o}$ για την περίπτωση που παρουσιάστηκε στο Σχ. 5.19. Οι επαγόμενες συσχετίσεις είναι κανονικοποιημένες ως προς τη μέγιστη τιμή τους.

Στο Σχ. 5.19 β), παρουσιάζουμε το ενεργειακό φάσμα μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος όπως προέκυψε από την επίλυση της Εξ. 5.16 για παραμέτρους $\Delta = 2$, $\mu_{SC} = 0$, $|J^x| = 0.2$, $|h_x| = 0.8$ για τα υπεραγωγία στρώματα και $h_z = 8$, $\mu_{FM} = 6.4$ για τον σιδηρομαγνήτη. Τα στρώματα στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι διαστάσεων 120×10 . Παρατηρούμε ότι εμφανίζονται 5 ζεύγη ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας, τα οποία διαχωρίζονται από το υπόλοιπο φάσμα μέσω ενεργειακού χάσματος $\Delta E = 0.04$. Οι ιδιοκαταστάσεις αυτές αποτελούν δέσμιες καταστάσεις εντοπισμένες κυρίως στα άκρα του σιδηρομαγνητικού στρώματος (Σχ. 5.20). Σημειώνουμε ότι και στην περίπτωση αυτή οι δέσμιες καταστάσεις μηδενικής ενέργειας διαρρέουν σε μικρό βαθμό στα υπεραγωγία στρώματα. Μάλιστα, η κυματοσυνάρτηση στα στρώματα αυτά αντιστοιχεί στην αντίθετη πόλωση του σπιν από αυτήν που έχει μέσα στο σιδηρομαγνητικό στρώμα.

Σύμφωνα με τον κανόνα επαγόμενων πεδίων η συνύπαρξη των πεδίων Zeeman h_x και του υπερρεύματος J παρουσία του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου Δ και της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής ισοδυναμεί με ένα πεδίο ζεύξης $\Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 f_{i,j}^{x,o}$ ηλεκτρονίων ίδιου σπιν και αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς $a_x \sigma_1 f_{i,j}^{x,o}$ αντίστοιχα. Τα πεδία αυτά αναμένεται να διαδοθούν στο σιδηρομαγνητικό επίπεδο μέσω του φαινομένου εγγύτητας. Πράγματι, στο Σχ. 5.21 παρουσιάζονται οι συζυγείς

στα παραπάνω πεδία ηλεκτρονιακές συσχετίσεις P_x και A_x , οι οποίες επάγονται στο σιδηρομαγνητικό στρώμα για την περίπτωση που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Οι παρουσία των συγκεκριμένων συσχετίσεων επιβεβαιώνουν την παρουσία των πεδίων Δ_x^p και a_x στον σιδηρομαγνήτη. Σημειώνουμε επίσης ότι το υπεραγωγίμο πεδίο Δ_x^p παρουσία του χημικού δυναμικού μ_{FM} και του πεδίου Zeeman h_z επάγει το πεδίο ζεύξης $\Im\Delta_y^p\tau_1 f_{i,j}^{x,o}$. Έτσι, για κατάλληλες τιμές των μ_{FM} και h_z που ρυθμίζουν το επίπεδο Fermi ώστε ενεργειακές ζώνες μόνο μιας πόλωσης του σπιν να είναι μερικώς κατειλημμένες, προκύπτει η υπεραγωγίμη φάση μεταξύ φορέων χωρίς σπιν όπου $\Delta_x^p = \Im\Delta_y^p$.



Σχήμα 5.22: Ενδεικτικό ενεργειακό φάσμα για ετεροδομή SC/FM/SC τριών στρωμάτων διαστάσεων $N_x = 120$, $N_y = 10$ και περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά τον y άξονα, με $\Delta = 4$, $\mu_{SC} = 0$, $h_z = 8$, $|h_x| = 2$, $|J| = 0.6$ και $t_c = 0.8$, συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ_{FM} του σιδηρομαγνήτη. Με κόκκινο χρώμα σημειώνονται οι ιδιοενέργειες που μηδενίζονται για κάποιες τιμές του μ_{FM} . Οι διακεκομμένες γραμμές σημειώνουν τις τοπολογικές μεταβάσεις φάσεως, ενώ οι αριθμοί αντιστοιχούν στην τιμή του τοπολογικού αναλλοίωτου \mathcal{W} σε κάθε φάση.

Εργαζόμενοι με ανάλογο τρόπο όπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις, στη συνέχεια θεωρούμε την παρακάτω ενεργή Χαμιλτονιανή για τον σιδηρομαγνήτη, η οποία εμπεριέχει τα προαναφερθέντα επαγόμενα πεδία

$$H_{FM}^{2D,eff} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [t' f_{i,j}^e \tau_3 + (\mu_{FM} \tau_3 + h_z \tau_3 \sigma_3 + \Delta' \tau_2 \sigma_2) \delta_{i,j} + (\alpha_x \sigma_1 + \Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 + \Im \Delta_y^p \tau_1) f_{i,j}^{x,o}] \Psi_j. \quad (5.18)$$

Θεωρούμε επίσης μια επανακανονικοποιημένη τιμή $t' \leq t$ για τον κινητικό όρο και το επαγόμενο λόγω του φαινομένου εγγύτητας συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ' . Είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι όλα τα επαγόμενα πεδία έχουν τη διεύθυνση των υπερρευσμάτων που ασκούνται στα υπεραγωγίμα στρώματα. Συνεπώς, ο μόνος εγκάρσιος όρος στην παραπάνω διδιάστατη ενεργή Χαμιλτονιανή Εξ.5.18 είναι ο κινητικός όρος $t' f_{i,j}^e \tau_3$. Επομένως, η εξίσωση Εξ. 5.18 ισοδυναμεί με N_y μονοδιάστατες Χαμιλτονιανές εξισώσεις οι οποίες συζεύγονται μέσω του κινητικού όρου

$$\begin{aligned} H_{FM}^{2D,eff} &= \sum_{i,j,\nu,\nu'} \Psi_{i,\nu}^\dagger [t' f_{i,j}^e \tau_3 + (\mu_{FM} \tau_3 + h_z \tau_3 \sigma_3 + \Delta' \tau_2 \sigma_2) \delta_{i,j} \\ &\quad + (\alpha_x \sigma_1 + \Delta_x^p \tau_1 \sigma_3 + \Im \Delta_y^p \tau_1) f_{i,j}^o + t'_\perp \delta_{\nu,\nu\pm 1} \tau_3] \Psi_{j,\nu'} \\ H_{FM}^{2D,eff} &= \sum_{i,\nu} \Psi_{i,\nu}^\dagger [H_{i,j,\nu}^{1D} + t'_\perp \delta_{\nu,\nu\pm 1} \tau_3] \Psi_{j,\nu'}. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Στην παραπάνω εξίσωση ο δείκτης $\nu \in (1, 2, \dots, N_y)$ αναφέρεται στις σειρές του σιδηρομαγνητικού στρώματος. Επιπλέον εισάγαμε τον σπίνορα $\Psi_{i,\nu}^\dagger = (\psi_{i,\nu,\uparrow}^\dagger, \psi_{i,\nu,\downarrow}^\dagger, \psi_{i,\nu,\uparrow}, \psi_{i,\nu,\downarrow})$ και τις μήτρες Pauli

τ και σ . Οι μονοδιάστατες εξισώσεις $H_{i,j,\nu}^{1D}$ για κάθε σειρά, έχουν την ίδια μορφή με την Εξ. 5.11 και επομένως ανήκουν στη χειρική τοπολογική κλάση BDI η οποία επιδέχεται αχέραιο τοπολογικό αναλλοίωτο \mathbb{Z} . Για μη περιοδικές συνθήκες το σύστημα διατηρεί τη συμμετρία ανάκλασης κατά την εγκάρσια διεύθυνση καθώς οι μονοδιάστατες Χαμιλτονιανές $H_{i,j,\nu}^{1D}$ σχετίζονται μεταξύ τους με τον ακόλουθο τρόπο $H_{i,j,m+1}^{1D} = H_{i,j,N_y-m}^{1D}$, όπου $m \in [0, (N_y - 2)/2]$ για άρτιο N_y και $m \in [0, (N_y - 3)/2]$ για N_y περιττό. Επομένως, ο Χαμιλτονιανός τελεστής μετατίθεται με τον τελεστή ανάκλασης R κατά τον άξονα y

$$R = I^4 \otimes I^x \otimes R^y \quad [H_{FM}^{2D,eff}, R] = 0, \quad (5.20)$$

όπου I^4 η ταυτότική μήτρα διαστάσεων 4×4 στον χώρο Nambu-σπιν, I^x η ταυτότική μήτρα διαστάσεων $N_x \times N_x$ με N_x τα πλεγματικά σημεία στον x άξονα και R^y η $N_y \times N_y$ διαστάσεων μήτρα αντιστροφής των σειρών του σιδηρομαγνήτη,

$$R^y = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.21)$$

Καθώς το εγκάρσιο τμήμα της Χαμιλτονιανής Εξ. 5.18 $H_{\perp} = t'_{\perp} \delta_{\nu,\nu\pm 1} \tau_3$ είναι διαγώνιο στον χώρο Nambu-σπιν-θέσεων κατά τον x άξονα, μπορούμε να διαγωνοποιήσουμε τον συγκεκριμένο πίνακα H_{\perp} αφήνοντας αμετάβλητο το υπόλοιπο τμήμα της Χαμιλτονιανής. Επομένως, στη βάση ιδιοδιανυσμάτων της H_{\perp} , η διδιάστατη ενεργός Χαμιλτονιανή $H_{FM}^{2D,eff}$ αποκτά την παρακάτω μορφή

$$H_{FM}^{2D,eff} = \sum_{i,n} \Psi_{i,n}^{\dagger} [H_{i,j}^{1D} + t'_{\perp} \tau_3 \lambda_n] \Psi_{j,n}, \quad (5.22)$$

όπου λ_n οι ιδιότητες της $N_y \times N_y$ διαστάσεων μήτρας $T = \delta_{\nu,\nu\pm 1}$ με $T(1, N_y) = T(N_y, 1) = 0$, για την περίπτωση μη-περιοδικών συνοριακών συνθηκών. Έτσι, μετασχημάτισαμε τη διδιάστατη ενεργό Χαμιλτονιανή σε N_y αποσυζευγμένα μονοδιάστατα συστήματα, όπου ο αρχικός εγκάρσιος κινητικός όρος ζεύξης δρα ως ένα ενεργό χημικό δυναμικό που αίρει τον εκφυλισμό των εγκάρσιων ενεργειακών ζωνών. Επειδή οι μονοδιάστατες Χαμιλτονιανές $H_{i,j}^{1D} + t'_{\perp} \tau_3 \lambda_n$ ανήκουν στη χειρική τοπολογική κλάση BDI, το ίδιο ισχύει και για τη συνολική διδιάστατη ενεργό Χαμιλτονιανή. Το αχέραιο τοπολογικό αναλλοίωτο του διδιάστατου συστήματος ισούται με το άθροισμα των τοπολογικών αναλλοίωτων $\mathcal{W} = \sum_n \mathcal{W}_n$ των μονοδιάστατων υποσυστημάτων που το αποτελούν. Σημειώνουμε ότι διδιάστατα συστήματα στην κλάση BDI είναι τοπολογικά τετριμμένα. Έτσι στην περίπτωση αυτή, η μη τετριμμένη τοπολογία του συστήματος προκύπτει λόγω της παρουσίας, είτε της μεταφορικής συμμετρίας, είτε της συμμετρίας ανάκλασης.

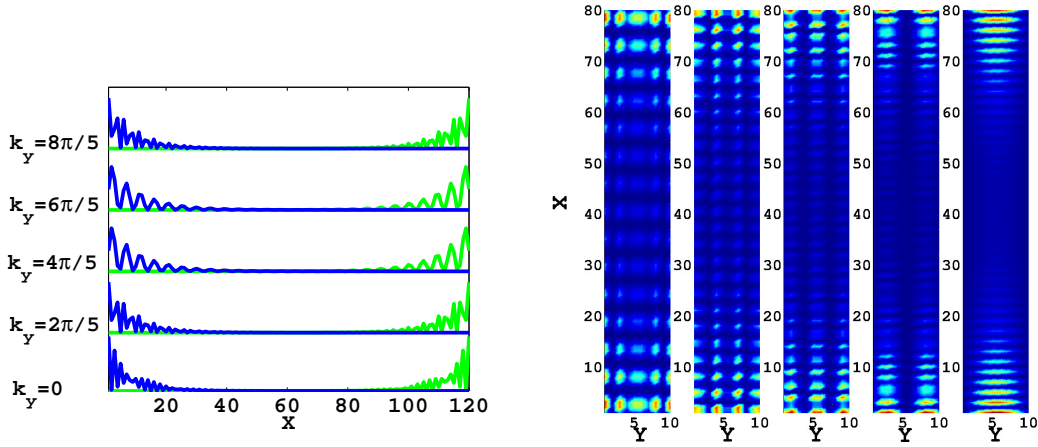
Σύμφωνα με την ανάλυση που παρουσιάστηκε για τα μονοδιάστατα σιδηρομαγνητικά συστήματα, το τοπολογικό κριτήριο για την εμφάνιση της τοπολογικής φάσης $\mathcal{W}_n = 1$ σε κάθε ένα από τα παραπάνω μονοδιάστατα υποσυστήματα έχει τη μορφή

$$|2t' - \sqrt{h_z^2 - \Delta'^2}| < |\mu_{FM} + t'_{\perp} \tau_3 \lambda_n| < |2t' + \sqrt{h_z^2 - \Delta'^2}| \quad (5.23)$$

και αντιστοιχεί στα όρια για τα οποία η αντίστοιχη ενεργειακή ζώνη τέμνει το επίπεδο Fermi.

Η ετεροδομή SC/FM/SC έχει τη συμμετρία ανάκλασης λόγω της συγκεκριμένης κατεύθυνσης των υπερρευμάτων στα υπεραγωγία στρώματα. Είναι η συγκεκριμένη συμμετρία που προστατεύει τα πολλαπλά σε κάθε άκρο φερμιόνια Majorana από τη μεταξύ τους αλληλεπίδραση και τη δημιουργία τετριμμένων φερμιονικών καταστάσεων. Στην περίπτωση αυτή το σύστημα δεν χρειάζεται να είναι οιονεί-μονοδιάστατο. Όμως για ετεροδομές με μεγάλο πλάτος, η κάθε τοπολογική

φάση που αντιστοιχεί σε συγκεκριμένο τοπολογικό αναλλοίωτο θα εκτείνεται σε μικρό εύρος του χημικού δυναμικού μ_{FM} , δημιουργώντας έτσι δυσκολίες στον έλεγχο του αριθμού των φερμιονίων Majorana. Επιπλέον η συμμετρία ανάκλασης παραβιάζεται στην παρουσία ατελειών στο σύστημα. Στην περίπτωση αυτή μόνο ένα ζεύγος καταστάσεων διατηρεί μηδενική ενέργεια. Συνεπώς είναι σημαντική η μελλοντική διερεύνηση του παραπάνω συστήματος παρουσία ατελειών.



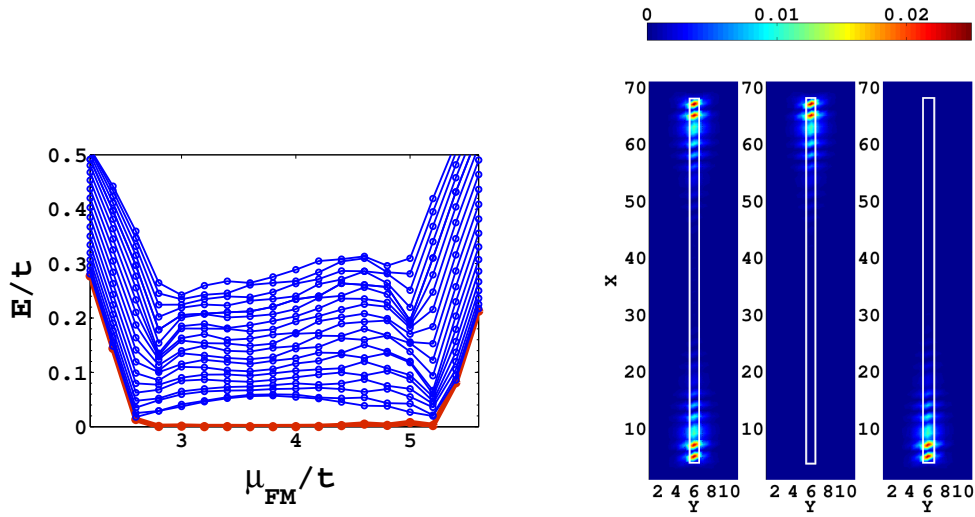
Σχήμα 5.23: Για την περίπτωση της ετεροδομής που παρουσιάστηκε στο Σχ. 5.22 οι πέντε δέσιμες καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας για $\mu_{FM} = 6$ όπου $\mathcal{W} = 5$. β) Για το ίδιο σύστημα με μη περιοδικές συνθήκες κατά τον y άξονα οι αντίστοιχες πέντε δέσιμες καταστάσεις μηδενικής ενέργειας. Παρατηρούμε ότι η χειρική συμμετρία ή ισοδύναμα η συμμετρία ανάκλασης ως προς τον y άξονα διατηρείται και στις δύο περιπτώσεις επιτρέποντας την εμφάνιση πολλαπλών δέσιμων καταστάσεων Majorana με μηδενική ενέργεια.

Με ανάλογο τρόπο διερευνούμε την περίπτωση με περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά την κάθετη προς τη διεύθυνση του ρεύματος διάσταση, όπου το σύστημα αποκτά την αντίστοιχη συμμετρία μεταφοράς. Στην περίπτωση αυτή, η Εξ. 5.19 παίρνει μια μπλοκ διαγώνια μορφή μέσω ενός μετασχηματισμού Fourier από τον χώρο θέσεων y στον χώρο ορμών k_y και συγκεκριμένα αποκτά την παρακάτω μορφή

$$H_{FM}^{eff} = \sum_{i,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger [H_{i,j}^{1D} + t'_\perp \tau_3 \lambda_{k_y}] \Psi_{j,k_y}, \quad (5.24)$$

όπου $\lambda_{k_y} = 2 \cos(k_y)$ οι ιδιότητες της $N_y \times N_y$ μήτρας $T = \delta_{\nu,\nu\pm 1}$ με $T(1, N_y) = T(N_y, 1) = 1$ και $k_y = \frac{2\pi(n-1)}{N_y}$, όπου $n \in (1, 2, \dots, N_y)$. Η τοπολογική ανάλυση παραμένει ίδια με αυτή που παρουσιάσαμε παραπάνω για μη-περιοδικές συνθήκες. Η μόνη διαφορά είναι ότι στη συγκεκριμένη περίπτωση εκτός από $k_y = 0$ (και $k_y = \pi$ όταν N_y άρτιος) οι ιδιότητες λ_n είναι διπλά εκφυλισμένες. Επιπλέον όταν N_y άρτιος οι ιδιότητες είναι συμμετρικές ως προς το μηδέν. Συνεπώς, όταν $\sqrt{h_z^2 - \Delta^2} > 2t'$, για N_y άρτιο το τοπολογικό αναλλοίωτο \mathcal{W} είναι περιττό εκτός από $|\mu - \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}| < 2|(t' - t'_\perp)|$, ενώ για N_y περιττό το τοπολογικό αναλλοίωτο είναι περιττό μόνο για $\mu > 2(t'_\perp - t') + \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}$.

Σημειώνουμε επίσης ότι στην περίπτωση αυτή οι ιδιοτιμές της μήτρας T εμφανίζονται σε ζεύγη $(\lambda, -\lambda)$, ενώ η μηδενική τιμή εμφανίζεται για περιττό αριθμό N_y υποσυστημάτων. Επομένως αναμένουμε τις τοπολογικές φάσεις να εμφανίζονται σε συμμετρικές ως προς $\sqrt{h_z^2 - \Delta^2}$ περιοχές του χημικού δυναμικού του σιδηρομαγνήτη, μ_{FM} . Πράγματι, η συγκεκριμένη συμμετρία παρατηρείται στο Σχ. 5.22, όπου παρουσιάζεται το ενεργειακό φάσμα συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ_{FM} του σιδηρομαγνήτη για ετεροδομή διαστάσεων $N_x = 120$, $N_y = 10$ και περιοδικές συνοριακές συνθήκες κατά τον y άξονα, με $\Delta = 4$, $\mu_{SC} = 0$, $h_z = 8$, $|h_x| = 2$, $|J| = 0.6$ και $t_c = 0.8$. Παρατηρούμε ότι οι κρίσιμες τιμές του χημικού δυναμικού μ_{FM} όπου παρατηρούνται οι τοπολογικές μεταβάσεις, συμπίπτουν με τα όρια των εγκάρσιων ζωνών.



Σχήμα 5.24: α) Το ενεργειακό φάσμα για μονοδιάστατο σιδηρομαγνήτη μήκους $L = 63$ ενσωματωμένο σε υπεραγωγό διαστάσεων 71×11 . Το υπεραγωγίμο πεδίο στην περίπτωση αυτή προσδιορίζεται αυτοσυνεπώς, θεωρώντας ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης στην ίδια πλεγματική θέση $U = -1$ μόνο στην υπεραγωγίμη περιοχή. Οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $\mu_{SC} = 0$, $h_z = 4$, $|h_x| = 0.4$, $|J| = 0.2$. Η ελάχιστη ιδιοενέργεια του συστήματος (κόκκινη γραμμή) που μηδενίζεται για $h_z - 1.2 < \mu_{FM} < h_z + 1.2$ όπως αναμένεται από το τοπολογικό κριτήριο Εξ. 5.12 για επανακανονικοποιημένο ολοκλήρωμα μεταφοράς $t' = 0.6t$. β) Η κυματοσυνάρτηση $|\Psi|^2$ της ιδιοκατάστασης ελάχιστης ενέργειας αριστερά) στη βάση Nambu και δεξιά) στη βάση Majorana για $\mu_{FM} = 4$. Η συγκεκριμένη περίπτωση είναι η ίδια με αυτήν που παρουσιάστηκε στο Σχ. 5.9, όπου η μόνη διαφορά είναι ότι στην περίπτωση εκείνη το υπεραγωγίμο πεδίο είναι σταθερό $\Delta = 1$. Τα αποτελέσματα των δύο προσεγγίσεων είναι ποιοτικά ίδια.

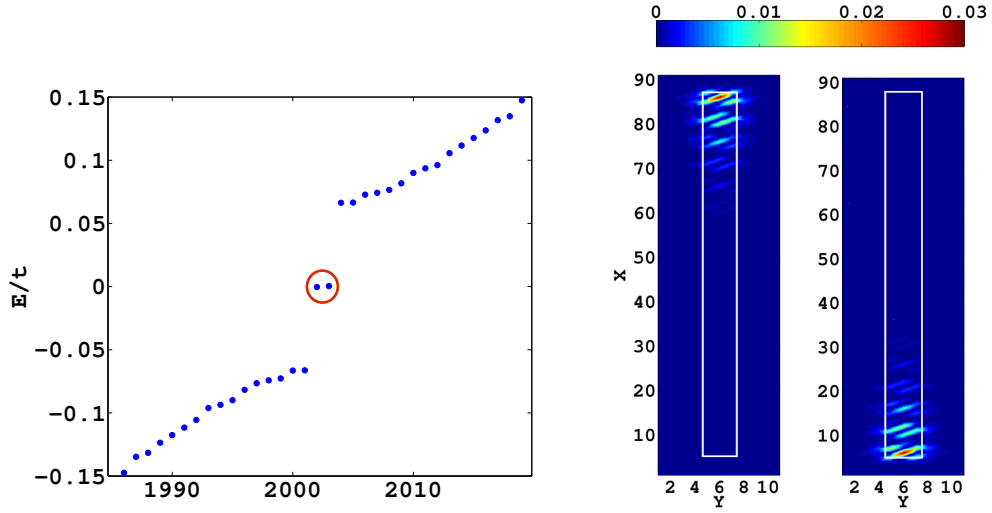
5.2.4 Αποτελέσματα για αυτοσυνεπείς λύσεις του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου.

Στις προηγούμενες ενότητες θεωρήσαμε το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ των υπεραγωγίμων περιοχών σταθερό και επομένως τα αποτελέσματά μας προέκυψαν από την αριθμητική επίλυση της Εξ. 5.4 χωρίς την εφαρμογή της αυτοσυνεπούς επαναληπτικής διαδικασίας. Η προσέγγιση αυτή απαιτεί σημαντικά λιγότερη υπολογιστική ισχύ, ενώ αναδεικνύει τη γενικότερη ισχύ του κανόνα των επαγόμενων πεδίων. Παρολ' αυτά για λόγους πληρότητας διερευνήσαμε την περίπτωση όπου το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο Δ υπολογίζεται αυτοσυνεπώς.

Τα σχετικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται παρακάτω καταδεικνύουν ότι ο μηχανισμός που προτείνουμε ισχύει και στην πιο ρεαλιστική αυτή προσέγγιση όπου λαμβάνεται υπ' όψιν η ανταγωνιστική συμπεριφορά των υπερρευμάτων J και των πεδίων Zeeman h_x με το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο. Στα Σχ. 5.24 και 5.25, παρουσιάζουμε ενδεικτικά αποτελέσματα για μονοδιάστατα και οιονει-μονοδιάστατα σιδηρομαγνητικά συστήματα ενσωματωμένα σε συμβατικούς υπεραγωγούς, όπου το υπεραγωγίμο πεδίο προσδιορίζεται αυτοσυνεπώς Δ μέσω ενός σημειακού ελκτικού δυναμικού αλληλεπίδρασης U . Συμπεριλαμβάνοντας τον συγκεκριμένο όρο αλληλεπίδρασης, η Χαμιλτονιανή Εξ. 5.4 τροποποιείται και αποκτά την παρακάτω μορφή

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,s} (t f_{i,j}^e + J_i^x f_{i,j}^{x,o} + J_i^y f_{i,j}^{y,o}) \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s} - \sum_i \psi_{i,s}^\dagger (\mathbf{h}_i \cdot \boldsymbol{\sigma})_{ss'} \psi_{i,s'} - \sum_i \mu_i \cdot \mathbf{n}_i + \sum_i U_i \psi_{i,\downarrow} \psi_{i,\uparrow} \psi_{i,\uparrow}^\dagger \psi_{i,\downarrow}^\dagger. \quad (5.25)$$

Από την παραπάνω εξίσωση αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων προκύπτει η εξίσωση Εξ. 5.5 που χρησιμοποιήσαμε στις προηγούμενες ενότητες μέσω της προσέγγισης μέσου πεδίου για το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο ζεύξης



Σχήμα 5.25: α) Το ενεργειακό φάσμα για σιδηρομαγνήτη πλάτους $W = 3$ ενσωματωμένο σε συμβατικό υπεραγωγό. Το υπεραγωγίμο πεδίο υπολογίζεται αυτοσυνεπώς μέσω ενός δυναμικού αλληλεπίδρασης $U = -2$, ενώ οι υπόλοιπες παράμετροι του συστήματος είναι $\mu_{SC} = 0$, $|h_x| = 0.8$, $|J| = 0.2$, $h_z = \mu_{FM} = 6$. Το ζεύγος ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας (σημειώνονται με κόκκινο κύκλο) διαχωρίζεται από το υπόλοιπο ενεργειακό φάσμα μέσω ενεργειακού χάσματος $\Delta E \simeq 0.07$. β) Η κυματοσυνάρτηση των ιδιοκαταστάσεων μηδενικής ενέργειας εκφρασμένη στη βάση Majorana. Παρατηρούμε ότι οι δέσμιες αυτές καταστάσεις είναι καλά εντοπισμένες στα άκρα του σιδηρομαγνήτη. Συνεπώς και στην προσέγγιση αυτοσυνεπούς προσδιορισμού του υπεραγωγίου πεδίου Δ , τα αποτελέσματα για οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες είναι ποιοτικά ίδια με εκείνα που προκύπτουν στην προσέγγιση σταθερού υπεραγωγίμου πεδίου.

$$\begin{aligned} \Delta_i &= \frac{1}{2} U_i \sum_j \langle \Psi_i^\dagger [\tau_2 \sigma_2 \delta_{i,j}] \Psi_j \rangle = \frac{1}{2\beta} U_i \sum_{i\omega_n} Tr \{ \tau_2 \sigma_2 \delta_{i,j} \mathbf{G}(i, j; i\omega_n) \} \rightarrow \\ \Delta_i &= \frac{1}{2} U_i \sum_n [\hat{U}^\dagger \tau_2 \sigma_2 \delta_{i,j} \hat{U}]_{nm} n_F(E_n). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Στο Σχ. 5.24, παρουσιάζουμε το διάγραμμα τοπολογικών φάσεων συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ_{FM} ενός μονοδιάστατου σιδηρομαγνήτη, θεωρώντας $U = -1$ μόνο μέσα στην υπεραγωγίμη περιοχή και $\mu_{SC} = 0$, $h_z = 4$, $|h_x| = 0.4$ και $|J| = 0.2$. Αυτή η περίπτωση είναι ανάλογη με αυτή που παρουσιάστηκε στα Σχ. 5.5 και 5.9, όπου είχαμε θεωρήσει το υπεραγωγίμο πεδίο σταθερό με $\Delta = 1$. Παρατηρούμε ότι τα αντίστοιχα διαγράμματα τοπολογικών φάσεων είναι παρόμοια, όπως και η μορφή των κυματοσυναρτήσεων των δέσμιων καταστάσεων μηδενικής ενέργειας. Στο Σχ. 5.25 παρουσιάζουμε το ενεργειακό φάσμα και τις κυματοσυναρτήσεις Majorana για οιονεί-μονοδιάστατους σιδηρομαγνήτες με πλάτος $W = 3$ και μήκος $L = 83$ όπου $|h_x| = 0.8$, $|J| = 0.2$, $\mu_{SC} = 0$ και $h_z = \mu_{FM} = 6$. Το συμβατικό υπεραγωγίμο πεδίο προσδιορίζεται αυτοσυνεπώς θεωρώντας ένα σημειακό ελκτικό δυναμικό αλληλεπίδρασης $U = -2$ μόνο στην υπεραγωγίμη περιοχή.

Τέλος, σημειώνουμε ότι ποιοτικά ίδια αποτελέσματα προέκυψαν και σε αυτοσυνεπείς λύσεις του πεδίου Δ και για τις υπόλοιπες περιπτώσεις όπως αυτή των SC/FM /SC ετεροδομών.

Κεφάλαιο 6

Συμπεράσματα

Κύριος στόχος της παρούσας διατριβής, είναι η μελέτη ετεροδομών μεταξύ διαφορετικών χβαντικών καταστάσεων τάξης και η διερεύνηση των ιδιοτήτων που εμφανίζουν οι διεπαφές των συγκεκριμένων συστημάτων. Στις ετεροδομές, μπορούμε να φέρουμε σε εγγύτητα καταστάσεις τάξης, που συνήθως δε συνυπάρχουν σε ομοιογενή συστήματα, και με τον τρόπο αυτό να δημιουργήσουμε νέες χβαντικές καταστάσεις με ενδιαφέρουσες σε πολλές περιπτώσεις ιδιότητες. Επιπλέον, στα συγκεκριμένα συστήματα μπορούμε να δημιουργήσουμε και συνεπώς να μελετήσουμε τις καταστάσεις αυτές σε χώρους μειωμένων διαστάσεων. Γενικά η μελέτη μας βασίστηκε σε πλεγματοειδή μοντέλα τετραγωνικής συμμετρίας και εξετάσαμε, τόσο διδιάστατες ετεροδομές, όπου η διεπαφή είναι κάθετη σε ένα από τα διανύσματα βάσης του πλέγματος, διεπαφές (100), όσο και τρισδιάστατες ετεροδομές, όπου η διεπαφή είναι παράλληλη στα πλεγματοειδή στρώματα, διεπαφές (001). Η διερεύνηση των συγκεκριμένων συστημάτων έγινε στον χώρο των θέσεων, αλλά και σε μικτούς χώρους θέσεων-ορμών, όπου ο χώρος των ορμών αναφέρεται στις παράλληλες προς τη διεπαφή διαστάσεις για τις οποίες μπορούμε να θεωρήσουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Για την περιγραφή των διάφορων τύπων ετεροδομών που εξετάσαμε, χρησιμοποιήσαμε το εκτεταμένο μοντέλο Hubbard, το οποίο και επιλύσαμε στην προσέγγιση μέσου πεδίου. Η επίλυση των αντίστοιχων εξισώσεων καθώς και εν γένει η μελέτη των συστημάτων αυτών, βασίστηκε σε υπολογιστικά εργαλεία που αναπτύχθηκαν κατά τη διάρκεια της διατριβής. Σημειώνουμε, ότι για την ανάλυση των αποτελεσμάτων μας, αλλά και την πρόβλεψη των καταστάσεων που εμφανίζονται στις διεπαφές των ετεροδομών που εξετάσαμε, βασιστήκαμε στον κανόνα των επαγόμενων πεδίων.

Στο πρώτο μέρος της παρούσας διατριβής και ύστερα από την παρουσίαση του κατάλληλου φορμαλισμού στον οποίο βασίστηκε η ανάλυσή μας, περιγράψαμε ένα νέο μηχανισμό για την εμφάνιση της νηματικής τάξης στα οξυπνικτίδια του σιδήρου. Η εμφάνιση της νηματικής τάξης σχετίζεται με την υποβάθμιση της τετραγωνικής συμμετρίας του φάσματος ηλεκτρονιακών διεγέρσεων στα συστήματα αυτά, σε ορθορομβική. Σύμφωνα με τον μηχανισμό που προτείνουμε, η νηματική τάξη εμφανίζεται λόγω της σταθεροποίησης μικτών υπεραγωγίμων φάσεων. Συγκεκριμένα, βασισμένοι σε ένα απλό μοντέλο δύο ενεργειακών ζωνών που αναπαριστά τη γενική τοπολογία της επιφάνειας Fermi στα υλικά αυτά, παρουσιάσαμε ότι η τετραγωνική συμμετρία μπορεί να υποβαθμιστεί σε ορθορομβική, όταν υπεραγωγίμες φάσεις που αντιστοιχούν σε διαφορετική μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση της ομάδας συμμετρίας C_{4u} , συνυπάρχουν με διαφορά φάσης $\phi = 0$. Σύμφωνα με τα αποτελέσματά μας, πράγματι στα συστήματα αυτά είναι δυνατή η σταθεροποίηση των νηματικών $S_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ και $S_{\pm} + d_{xy}$ υπεραγωγίμων φάσεων, αλλά όχι των $S + d_{x^2-y^2}$ και $S + d_{xy}$. Όμως, όπως κατέδειξαν τα αποτελέσματά μας, οι συγκεκριμένες υπεραγωγίμες παράμετροι τάξης μπορούν να συνυπάρχουν και σε διαφορά φάσης $\phi = \pi/2$, οδηγώντας στην εμφάνιση των μικτών υπεραγωγίμων φάσεων $S_{\pm} + id_{x^2-y^2}$ και $S_{\pm} + id_{xy}$, οι οποίες παραβιάζουν τη συμμετρία αντιστροφής του χρόνου, αλλά όχι την τετραγωνική συμμετρία. Καθώς η διαφορά της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος για τις δύο αυτές μικτές υπεραγωγίμες φάσεις είναι πολύ μικρή, διερευνήσαμε περαιτέρω τον ανταγωνισμό τους, μέσω ενός αναπτύγματος της ελεύθερης ενέργειας κατά Landau. Η ανάλυση αυτή κατέδειξε ότι εν τέλει, είναι οι νηματικές υπεραγωγίμες φάσεις που σταθεροποιούνται, λόγω της σύζευξής τους με τη νηματική παράμετρο τάξης.

Εν συνεχεία, διερευνήσαμε και επιβεβαιώσαμε την ισχύ του κανόνα των επαγόμενων πεδίων σε συστήματα ετεροδομών, εξετάζοντας κάποιες ενδεικτικές περιπτώσεις. Συγκεκριμένα, εξετάσαμε ετεροδομές συμβατικού υπεραγωγού με τοπολογικό μονωτή ή ημιαγωγό που επιδεικνύει αλληλεπιδράσεις σπιν-τροχιάς τύπου Rashba και ετεροδομές μη συμβατικού υπεραγωγού d-wave συμμετρίας με αντισιδηρομαγνήτη, υπό την επίδραση εξωτερικώς επιβαλλόμενων πεδίων Zeeman ή τάσεων πύλης που ρυθμίζουν το χημικό δυναμικό του συστήματος. Στην πρώτη περίπτωση, επιβεβαιώσαμε ότι στη διεπαφή του συστήματος επάγεται ένα υπεραγωγίμο πεδίο p-wave συμμετρίας, λόγω της συνύπαρξης του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου, των αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς και του πεδίου Zeeman ή της παρουσίας ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής. Σημειώνουμε ότι οι συγκεκριμένες ετεροδομές αποτελούν τις βασικότερες θεωρητικές προτάσεις, για τη δημιουργία τοπολογικής p-wave υπεραγωγιμότητας και καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας. Στη δεύτερη περίπτωση, παρουσιάζουμε ότι η συνύπαρξη της μη συμβατικής υπεραγωγιμότητας d-wave συμμετρίας με την αντισιδηρομαγνητική τάξη, επάγει στη διεπαφή του συστήματος ένα π-triplet υπεραγωγίμο πεδίο.

Στο δεύτερο μέρος της διατριβής εξετάσαμε αναλυτικά ετεροδομές μεταξύ κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν, οι οποίες σύμφωνα με τα αποτελέσματά μας εμφανίζουν παρόμοιες ιδιότητες με τις ετεροδομές που αποτελούνται από οξειδία των μετάλλων μετάβασης. Σημειώνουμε ότι η συνύπαρξη κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν με διαμόρφωση κατά το ίδιο κυματόνισμα, οδηγεί στην εμφάνιση διαφορετικού ενεργειακού χάσματος για κάθε συνιστώσα του σπιν, ενώ επιπλέον τα πεδία αυτά είναι συζευγμένα με την ομοιόμορφη κατανομή φορτίου και μαγνήτισης ή ισοδύναμα με όρους χημικού δυναμικού και πεδία Zeeman αντίστοιχα. Όπως προέκυψε από την αριθμητική επίλυση των συγκεκριμένων συστημάτων, η συνύπαρξη των κυμάτων πυκνότητας στη διεπαφή των ετεροδομών αυτών, οδηγεί στην εμφάνιση μαγνήτισης, η πόλωση της οποίας μπορεί να ελεγχθεί μέσω της εφαρμογής τάσεων πύλης που ρυθμίζουν το χημικό δυναμικό του συστήματος. Διαπιστώσαμε επίσης, ότι στα συστήματα αυτά το χημικό δυναμικό επιδρά ως ένα ενεργό πεδίο Zeeman, λόγω ακριβώς της σύζευξης μεταξύ των τεσσάρων αυτών πεδίων. Επιπλέον υπολογίζοντας, τόσο την τοπική πυκνότητα καταστάσεων, όσο και την παράλληλη προς τη διεπαφή ομοιόμορφη αγωγιμότητα συνεχούς ρεύματος μέσω της σχέση Kubo, αναδείξαμε τον ημι-μεταλλικό ή μονωτικό χαρακτήρα της επαγόμενης στη διεπαφή σιδηρομαγνητικής φάσης. Όπως περιγράφουμε στο συγκεκριμένο μέρος της διατριβής, η μεταβολή του χημικού δυναμικού στις ετεροδομές αυτές, μπορεί να οδηγήσει σε αλλαγή της πόλωσης του σπιν των φορέων χαμηλή ενέργειας του συστήματος. Σημειώνουμε ότι σύμφωνα με τα αποτελέσματά μας, η ιδιότητα αυτή η οποία είναι σημαντική σε εφαρμογές σπιντρονικής, παρατηρήθηκε μόνο σε τρισδιάστατες ετεροδομές (001). Τέλος, όπως προέκυψε από την ανάλυση των αποτελεσμάτων μας, τα συστήματα αυτά ευνοούν την εμφάνιση p-wave υπεραγωγιμότητας ιδίου σπιν, καθώς στις περισσότερες περιπτώσεις, το επίπεδο Fermi του συστήματος τέμνεται από μόνο μία ενεργειακή ζώνη η οποία και αντιστοιχεί σε διεγέρσεις με συγκεκριμένη πόλωση του σπιν. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα, επιβεβαίωσαν τη δημιουργία της συγκεκριμένης υπεραγωγίμης φάσης και την εμφάνιση καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας στις διεπαφές των ετεροδομών κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν.

Στο τρίτο και τελευταίο μέρος της διατριβής, εξετάσαμε την επαγωγή p-wave υπεραγωγίμων πεδίων ιδίου σπιν σε ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/συμβατικού υπεραγωγού. Αρχικά διερευνήσαμε την περίπτωση μονοδιάστατων ή οιονεί-μονοδιάστατων σιδηρομαγνητών ενσωματωμένους σε συμβατικούς υπεραγωγούς. Τα συγκεκριμένα συστήματα σχετίζονται άμεσα με πρόσφατο πείραμα, όπου άτομα Fe εναποτέθηκαν πάνω σε υπεραγωγίμο υπόστρωμα Pb. Στο συγκεκριμένο πείραμα, μετρήσεις ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης ανέδειξαν τη δημιουργία οιονεί-μονοδιάστατων σιδηρομαγνητικών αλυσίδων πάνω στο υπεραγωγίμο υπόστρωμα και την παρουσία καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας εντοπισμένων στα άκρα των αλυσίδων αυτών. Σύμφωνα με τη δικιά μας προσέγγιση, τοπολογική p-wave υπεραγωγιμότητα ιδίου σπιν μπορεί να επαχθεί στον σιδηρομαγνήτη, λόγω της συνύπαρξης του συμβατικού υπεραγωγίμου πεδίου με διαμαγνητικά ρεύματα και συνιστώσες του μαγνητικού πεδίου παράλληλες προς την επιφάνεια του υποστρώματος. Τα διαμαγνητικά ρεύματα και οι συγκεκριμένες μαγνητικές συνιστώσες θεωρούμε ότι προκύπτουν από το μαγνητικό πεδίο του σιδηρομαγνήτη. Τα αριθμητικά μας αποτελέσματα επιβεβαίωσαν την εμ-

φάνιση τοπολογικής p -wave υπεραγωγιμότητας ιδίου σπιν και καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας εντοπισμένων στα άκρα του σιδηρομαγνήτη. Η ανάδειξη του τοπολογικού χαρακτήρα των καταστάσεων μηδενικής ενέργειας που εμφανίζονται στα συγκεκριμένα συστήματα έγινε, τόσο μέσω αριθμητικών αποτελεσμάτων, όσο και μέσω της ανάλυσης ενεργών Χαμιλτονιανών που περιγράφουν τον σιδηρομαγνήτη σε κάθε περίπτωση. Τέλος, δείξαμε ότι ο συγκεκριμένος μηχανισμός που προτείνουμε, οδηγεί στην εμφάνιση πολλαπλών καταστάσεων Majorana μηδενικής ενέργειας σε τριστρωματικές ετεροδομές συμβατικού υπεραγωγού/σιδηρομαγνήτη/συμβατικού υπεραγωγού. Στην περίπτωση αυτή, παρουσιάσαμε ότι λόγω της κατευθυντικότητας του υπερρεύματος και των triplet πεδίων που επάγει, το σύστημα διατηρεί τη συμμετρία μεταφοράς ή ανάκλασης για ανοικτές ή κλειστές περιοδικές συνθήκες αντίστοιχα και επομένως μπορεί να υποστηρίξει πολλαπλές καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας. Κλείνοντας, σημειώνουμε πώς μέχρι τη συγγραφή της παρούσας διατριβής, η προσέγγισή μας είναι η μόνη που καταδεικνύει ότι καταστάσεις Majorana μηδενικής ενέργειας μπορούν να εμφανιστούν σε ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/συμβατικού υπεραγωγού, ακόμα και απουσία αλληλεπιδράσεων σπιν-τροχιάς στο υπεραγωγό υπόστρωμα καθώς και η μόνη που λαμβάνει υπ' όψιν την επίδραση των διαμαγνητικών ρευμάτων.

Chapter 7

Linear Response Theory

We consider a system H_0 with an external perturbation H' applied.

$$H(t) = H_0 + H'(t)\theta(t - t_0). \quad (7.1)$$

Then the expectation value of the operator A at times $t > t_0$ in the linear response approximation derives from the Kubo formula

$$\begin{aligned} \delta \langle A(t) \rangle &= \langle A(t) \rangle - \langle A \rangle_0 = \int_{t_0}^{\infty} dt' C_{Ah'}^R(t, t') e^{-\eta(t-t')} \\ C_{Ah'}^R(t, t') &= -i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{A}(t), \hat{H}'(t') \right] \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (7.2)$$

where $\hat{A}(t) = e^{-iH_0 t} A e^{iH_0 t} = A + [e^{-i[H_0, A]t} - 1] e^{iH_0 t}$ the operator A in interaction picture and $C_{Ah'}^R(t, t')$ the **retarded correlation function**. In the limit $t \rightarrow 0$ we get $\frac{\partial A(t)}{\partial t} = i[H_0, A]$. The perturbation Hamiltonian has the following general form

$$H'(t) = \lambda \int_{\mathbf{r}} \mathbf{B} \cdot \mathbf{F}, \quad (7.3)$$

where \mathbf{F} a general vector potential and \mathbf{B} the conjugate to this potential correlations(operator) while λ the coupling constant. Considering that in the equilibrium state $\langle \mathbf{A} \rangle_0 = 0$ the linear response of the system (or the response of the system up to first order of \mathbf{F}) with respect to \mathbf{A} derives from the following equation.

$$\langle A^\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle = \int_{\mathbf{r}'} \int_{t'} -i\theta(t - t') \lambda \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{r}, t), \hat{B}^\beta(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_0 \mathbf{F}^\beta(\mathbf{r}', t') dt' d\mathbf{r}' \quad (7.4)$$

from which we define the retarded general susceptibility of the A^α operator to the \mathbf{F}^β field as

$$\chi_{AB}^{R, \alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{r}, t), \hat{B}^\beta(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_0. \quad (7.5)$$

Since in general $\mathbf{F}^\beta(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{F}^\beta(\mathbf{q}, t)$, we can define the local susceptibility as

$$\begin{aligned} \langle A^\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle &= \int_{\mathbf{r}'} \int_{t'} -i\theta(t - t') \lambda \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{r}, t), \hat{B}^\beta(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_0 \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \mathbf{F}^\beta(\mathbf{q}, t) dt' d\mathbf{r}' \rightarrow \\ \langle A^\alpha(\mathbf{r}, t) \rangle &= \sum_{\mathbf{q}} \int_{t'} \chi_{AB}^{R, \alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t, t') \mathbf{F}^\beta(\mathbf{q}, t) dt' d\mathbf{r}' \\ \chi_{AB}^{R, \alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, t, t') &= -i\theta(t - t') \int_{\mathbf{r}'} \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{r}, t), \hat{B}^\beta(\mathbf{r}', t') \right] \right\rangle_0 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \end{aligned} \quad (7.6)$$

For traslationally invariant systems for which $\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = \chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t, t')$ we get

$$\begin{aligned}
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta} &= \chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t, t') \rightarrow \\
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, t, t') &= \int d\mathbf{r} \chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t, t') e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \\
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, t, t') &= - \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{q}_1 \int d\mathbf{q}_2 i\theta(t-t') \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{q}_1, t), \hat{B}^\beta(\mathbf{q}_2, t') \right] \right\rangle_0 e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\mathbf{q}_1\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}_2\mathbf{r}'} \\
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, t, t') &= -\frac{1}{\mathcal{N}} i\theta(t-t') \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{q}, t), \hat{B}^\beta(-\mathbf{q}, t') \right] \right\rangle_0
\end{aligned} \tag{7.7}$$

where $\mathbf{q} = -\mathbf{q}_2$ since the susceptibility cannot depend on \mathbf{r}' . In the same way we can also define the susceptibility in the frequency domain for systems in the equilibrium

$$\begin{aligned}
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, t, t') &= \chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, t - t') \rightarrow \\
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega+in)t} i\theta(t-t') \left\langle \left[\hat{A}^\alpha(\mathbf{q}, t), \hat{B}^\beta(-\mathbf{q}, t') \right] \right\rangle_0 \\
\chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, \omega) &= \int_0^{\infty} d(t-t') e^{i(\omega+in)(t-t')} \chi_{AB}^{R,\alpha\beta}(\mathbf{q}, t-t')
\end{aligned} \tag{7.8}$$

Applying a Wick rotation $t \rightarrow i\tau$ we can define the Matsubara correlations function for operators \hat{A} and \hat{B} .

$$\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') = - \left\langle T_\tau \left(\hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right) \right\rangle \tag{7.9}$$

where T_τ the time-ordering operator. By definition we get $\mathcal{C}_{AB}(\tau, \tau') = \mathcal{C}_{AB}(\tau - \tau') = \mathcal{C}_{AB}(\tau)$ which converges only for $-\beta < \tau < \beta$. For fermions $\mathcal{C}_{AB}(\tau) = -\mathcal{C}_{AB}(\tau + \beta)$ and thus we get

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) &= \int_0^\beta e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{C}_{AB}(\tau) \\
\mathcal{C}_{AB}(\tau) &= \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n\tau} \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n) \rightarrow_{\tau=0} \left\langle \hat{B} \hat{A} \right\rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} \mathcal{C}_{AB}(i\omega_n)
\end{aligned} \tag{7.10}$$

where $i\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ the Matsubara frequencies for fermions. Therefore, the susceptibilities in the Matsubara frequency domain acquire the form

$$\begin{aligned}
\chi_{AB}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', iq_n) &= - \left\langle T_\tau \hat{A}^\alpha(\mathbf{r}, iq_n) \hat{B}^\beta(\mathbf{r}', -iq_n) \right\rangle_0 \\
\chi_{AB}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{q}, iq_n) &= - \int_{\mathbf{r}'} \left\langle T_\tau \hat{A}^\alpha(\mathbf{r}, iq_n) \hat{B}^\beta(\mathbf{r}', -iq_n) \right\rangle_0 e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}'} \\
\chi_{AB}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, iq_n) &= - \left\langle T_\tau \hat{A}^\alpha(\mathbf{q}, iq_n) \hat{B}^\beta(-\mathbf{q}, -iq_n) \right\rangle_0
\end{aligned} \tag{7.11}$$

In order to calculate the susceptibilities, we utilise the following definition of the single particle Matsubara Green's functions.

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}(\mathbf{r}\sigma\tau, \mathbf{r}'\sigma'\tau') &= - \left\langle T_\tau \left(\Psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \right) \right\rangle \\
&= - \left[\theta(\tau - \tau') \left\langle \Psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \right\rangle - \theta(\tau' - \tau) \left\langle \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', \tau') \Psi_\sigma(\mathbf{r}, \tau) \right\rangle \right]
\end{aligned} \tag{7.12}$$

where $\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau)$ a coordinate space spinor for a system with an arbitrary set σ of internal degrees of freedom. By differentiating the above expression with respect to τ we get the equation of motion for the single particle Matsubara Green's functions, which for **non-interacting** fermions acquires the following form

$$-\partial_{\tau}\mathcal{G}(\mathbf{r}\sigma\tau, \mathbf{r}'\sigma'\tau') - \sum_{\sigma'', \mathbf{r}''} [t_{\sigma, \sigma''} \otimes h(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')] \mathcal{G}(\mathbf{r}\sigma\tau, \mathbf{r}''\sigma''\tau'') = \delta(\tau - \tau')\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta_{\sigma\sigma'}, \quad (7.13)$$

or in matrix form

$$\mathcal{G}(\tau) = [-\partial_{\tau} - t \otimes h]^{-1} \rightarrow \mathcal{G}(i\omega_n) = [i\omega_n - H_0]^{-1}, \quad (7.14)$$

where $H_0 = t \otimes h$ with t and h the Hamiltonian matrix for the σ and coordinate space respectively. Thus for the operator \hat{P} of the general form $\hat{P} = Tr \left\{ \Psi(\mathbf{r})^{\dagger} f^{\hat{P}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathcal{O} \Psi(\mathbf{r}') \right\}$ where \mathcal{O} a representation matrix with dimensions defined by the spinor for the internal degrees of freedom and $f^{\hat{P}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ a coordinate matrix with dimensions defined by the lattice dimensions we get

$$\langle \hat{P} \rangle = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} Tr \left\{ f^{\hat{P}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \mathcal{O} \mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) \right\} \quad (7.15)$$

with $\hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) = [i\omega_n - H_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]^{-1}$. The expression for the Matsubara Green's function in the Hamiltonian eigenbasis is related to the corresponding function in a general basis through

$$\begin{aligned} \hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) &= [i\omega_n - H_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')]^{-1} = [i\omega_n - U^{\dagger} M_0(\mathbf{l}) U]^{-1} = U [i\omega_n - M_0(\mathbf{l})]^{-1} U^{\dagger} \\ \hat{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) &= U \hat{G}(\mathbf{l}, i\omega_n) U^{\dagger} \end{aligned} \quad (7.16)$$

where $H_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = U^{\dagger} M_0(\mathbf{l}) U$ with $M_0(\mathbf{l})$ a diagonal matrix with eigenvalues $E(\mathbf{l})$ corresponding to a set \mathbf{l} of good quantum numbers. For the retarded Matsubara Green's functions we get

$$\hat{G}^R(\mathbf{l}, \omega) = [\omega - E_{\mathbf{l}}]^{-1} - i\pi\delta(\omega - E_{\mathbf{l}}) \quad (7.17)$$

and for the spectral representation we get

$$\hat{G}(\mathbf{l}, i\omega_n) = \int d\omega \frac{A(\mathbf{l}, \omega)}{i\omega_n - \omega}, \quad A(\mathbf{l}, \omega) = -2\Im \hat{G}^R(\mathbf{l}, \omega) \quad (7.18)$$

where $A(\mathbf{l}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - E_{\mathbf{l}})$ the spectral function when $E_{\mathbf{l}}$ is an eigenvalue of the system, while $A(\mathbf{l}, \omega) = 2\frac{1/\tau}{(\omega - E_{\mathbf{l}})^2 + (1/\tau)^2}$ in the general case with $1/\tau = -2\Im \Sigma^R(\mathbf{l}, \omega)$ the \mathbf{l} state lifetime. **From the general Matsubara correlation function we get the retarded(advanced) general susceptibility by analytic continuation** $i q_n \rightarrow \omega + (-)i\delta$. In general the expression Eq. 7.11 for the generalised susceptibility involves products of four field operators and in general is difficult to calculate. However, for **non-interacting** particle systems the above expression is greatly simplified by use of the **Wick's theorem**. In this case the general susceptibility in coordinate space acquires the form

$$\chi_{AB}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau) = \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} [M_A]_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} [M_B]_{\mathbf{l}', \mathbf{l}} \hat{G}(\mathbf{l}, \tau) \hat{G}(\mathbf{l}', -\tau),$$

where $[M_A] = U^\dagger f^{\hat{A}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \mathcal{O}^{\hat{A}} U$, $[M_B] = U^\dagger f^{\hat{B}}(\mathbf{r}', \mathbf{r}''') \mathcal{O}^{\hat{B}} U$ the vertex matrices and $\hat{G}(\mathbf{l}, \tau)$ the propagator for eigenstate \mathbf{l} . Now in the special case of traslation invariant systems \mathbf{l} is a product of momentum and other internal degrees of freedom like spin, band index etc.

$$\begin{aligned} \chi_{A,B}^{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', iq_n) &= \sum_{ik_n} \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} [M_A]_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} [M_B]_{\mathbf{l}', \mathbf{l}} G(\mathbf{l}, ik_n + iq_n) G(\mathbf{l}', ik_n) \rightarrow \\ &= \sum_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} [M_A]_{\mathbf{l}, \mathbf{l}'} [M_B]_{\mathbf{l}', \mathbf{l}} \frac{n_F(E_{\mathbf{l}'}) - n_F(E_{\mathbf{l}})}{iq_n + E_{\mathbf{l}'} - E_{\mathbf{l}}}, \end{aligned} \quad (7.19)$$

For systems traslationally invariant along a subgroup of the dimension of the system the equation for the general susceptibility acquires the following form.

$$\begin{aligned} \chi_{A,B}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, \mathbf{r}, \mathbf{r}', iq_n) &= \sum_{ik_n} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i, ik_n + iq_n) G(\mathbf{k}, j, ik_n) \rightarrow \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i})}{iq_n + E_{\mathbf{k}, j} - E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i}}, \end{aligned} \quad (7.20)$$

where $n_F = [1 + e^{\beta E}]^{-1}$ the Fermi distribution and we used $\sum_{ik_n} \frac{1}{ik_n - E} = n_F(E)$ and $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ for traslation invariant systems and $E_{\mathbf{k}, i}$ the eigenvalues of the equilibrium Hamiltonian $H_0(\mathbf{k})$. With analytic continuation $iq_n \rightarrow q_n + i\delta$ we get the retarded general susceptibility in the frequency space.

$$\Re \chi_{A,B}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i})}{q - E_{\mathbf{k}, j} + E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i}}$$

$$\Im \chi_{A,B}^{\alpha\beta}(\mathbf{q}, q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\pi \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} [n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i})] \delta(q - E_{\mathbf{k}, j} + E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i}) \quad (7.21)$$

We get the same results by introducing the spectral representation Eq. 7.18 of the Matsubara Green's functions in Eq. 7.19 for the generalised susceptibility.

$$\Re \chi_{A,B}^{\alpha\beta} = \mathcal{P} \int d\omega \int d\epsilon \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{q - \omega + \epsilon} \delta(\omega - E_{\mathbf{k}, j}) \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i})$$

$$\Im \chi_{A,B}^{\alpha\beta} = -\pi \int d\omega \int d\epsilon \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} [n_F(\omega) - n_F(\epsilon)] \delta(q - \omega - \epsilon) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}, j}) \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, i}) \quad (7.22)$$

This is the case when $E_{\mathbf{k}, j}$ are the eigenenergies of the system which is the case for a impurity-free traslation invariant system. For a system with impurities a first approximation derives from the substitution of the Dirac spectral functions by Lorentzians $\delta(z) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{z^2 + \Gamma^2}$ where $\Gamma = 1/\tau_{au}$ the quasiparticle life-time.

In the homogeneous $\mathbf{q} \rightarrow 0$ and static $q \rightarrow 0$ limit we get

$$\begin{aligned} \Re \chi_{A,B}^{\alpha\beta} &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k}, i})}{E_{\mathbf{k}, i} - E_{\mathbf{k}, j}} \\ \Im \chi_{A,B}^{\alpha\beta} &= -\pi \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} f^{\hat{A}, \alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{r}) f^{\hat{B}, \beta}(\mathbf{k}, \mathbf{r}') [M_A]_{i,j} [M_B]_{j,i} [n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k}, i})] \delta(E_{\mathbf{k}, j} - E_{\mathbf{k}, i}) = 0 \end{aligned}$$

For fully translationally invariant systems the static homogeneous susceptibility acquires the general form

$$\Re\chi_A^{\alpha\alpha}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k},i,j} f^{\hat{A},\alpha}(\mathbf{k})^2 [M_A]_{i,j} [M_A]_{j,i} \frac{n_F(E_{\mathbf{k},j}) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},i})}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q},i} - E_{\mathbf{k},j}} \quad (7.23)$$

Finally we consider a particular case for the uniform susceptibility where the unitary transformation matrix U and the field A representation matrix are diagonal. For example this is the case for the magnetic susceptibility of a system in a metallic phase. Then

$$\Re\chi_A^{\alpha\alpha}(\mathbf{q} = 0) = \sum_{\mathbf{k},i} f^{\hat{A},\alpha}(\mathbf{k})^2 [M_A]_{i,i}^2 \left. \frac{\partial n_F}{\partial E} \right|_{E=E_{\mathbf{k},i}} = \sum_{\mathbf{k},i} f^{\hat{A},\alpha}(\mathbf{k})^2 [M_A]_{i,i}^2 [1 - n_F(E_{\mathbf{k},i})] n_F(E_{\mathbf{k},i})$$

as

$$\begin{aligned} \lim_{E_{\mathbf{k},i} \rightarrow E_{\mathbf{k},j}} \frac{n_F(E_{\mathbf{k},j}) - n_F(E_{\mathbf{k},i})}{E_{\mathbf{k},j} - E_{\mathbf{k},i}} &= \frac{n_F(E_{\mathbf{k},j}) - n_F(E_{\mathbf{k},j}) + [\partial n_F / \partial E]_{E=E_{\mathbf{k},i}} dE}{E_{\mathbf{k},j} - E_{\mathbf{k},j} + dE} \\ &= \left. \frac{\partial n_F}{\partial E} \right|_{E=E_{\mathbf{k},i}} = [1 - n_F(E_{\mathbf{k},i})] n_F(E_{\mathbf{k},i}), \end{aligned}$$

where $dE = E_{\mathbf{k},j} - E_{\mathbf{k},i}$. Consider also that $n_F(E) = 1 - n_F(-E)$ and $n_F(E)[1 - n_F(E)] = n_F(-E)[1 - n_F(-E)]$.

7.1 Susceptibilities

In this section we present the susceptibilities for translationally invariant systems based on Eq. 7.23. We consider a general multiband system. In the normal state the energy dispersion of a general system acquires the following form.

$$\begin{aligned} \varepsilon_b^{msp}(k) &= m[-sh_z + p\gamma_b(k) + \delta_b(k) + \mu] \\ \varepsilon_b^{ms}(k) &= m[-sh_z + e(k) + \mu], \end{aligned} \quad (7.24)$$

where b is the band index, $s = \pm$, $m = \pm$ refer to the spin and particle-hole space respectively, while $\gamma_b(\mathbf{k}) = -\gamma_b(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ and $\delta_b(\mathbf{k}) = \delta_b(\mathbf{k} + \mathbf{Q})$ corresponding to nearest and next nearest neighbors hopping terms respectively in a lattice with tetragonal symmetry. Finally, μ stands for the chemical potential and h_z for a Zeeman field along the z spin axis.

- $\tau_{y(x)}\sigma_{y(x)}$

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{q}) &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} \frac{n_F[\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k})] - n_F[\varepsilon_b^{m's'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k}) - \varepsilon_b^{m's'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} f(\mathbf{k})^2 \\ \chi(\mathbf{q} = 0) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} m \frac{n_F[-sh_z + m\varepsilon_b(\mathbf{k})]}{\varepsilon_b(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2 \\ \chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} m \frac{n_F[-sh_z + \gamma_b(\mathbf{k}) + m(\delta_b(\mathbf{k}) + \mu)]}{\delta_b(\mathbf{k}) + \mu} f(\mathbf{k})^2 \end{aligned}$$

- $\tau_x(y)\sigma_z(0)$

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{q}) &= -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} \frac{n_F[\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k})] - n_F[\varepsilon_b^{m's}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k}) - \varepsilon_b^{m's}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} f(\mathbf{k})^2 \\ \chi(\mathbf{q} = 0) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} m \frac{n_F[m\varepsilon_b^s(\mathbf{k})]}{\varepsilon_b^s(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2 \\ \chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} m \frac{n_F[\gamma_b(\mathbf{k}) + m(-sh_z + \delta_b(\mathbf{k}) + \mu)]}{-sh_z + \delta_b(\mathbf{k}) + \mu} f(\mathbf{k})^2\end{aligned}\quad (7.25)$$

- $\tau_0(z)\sigma_0(z)$

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{q}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} \frac{n_F[\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k})] - n_F[\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k}) - \varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} f(\mathbf{k})^2 \\ \chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,s,p} p \frac{n_F[-sh_z + \delta_b(\mathbf{k}) + \mu + p\gamma_b(\mathbf{k})]}{\gamma_b(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2\end{aligned}\quad (7.26)$$

- $\tau_0(z)\sigma_x(y)$

$$\begin{aligned}\chi(\mathbf{q}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} \frac{n_F[\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k})] - n_F[\varepsilon_b^{m's'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\varepsilon_b^{ms}(\mathbf{k}) - \varepsilon_b^{m's'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} f(\mathbf{k})^2 \\ \chi(\mathbf{q} = \mathbf{Q}) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,s,p} p \frac{n_F[\delta_b(\mathbf{k}) + \mu + p(\gamma_b(\mathbf{k}) - sh_z)]}{-sh_z + \gamma_b(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2\end{aligned}\quad (7.27)$$

In this section we present the susceptibilities for the same cases based on Eq. 7.23 for a multiband system in a conventional density wave phase. In the case where conventional charge density wave W_c^Q and spin density waves $W_{S_z}^Q$ along the z spin axis coexist the excitations energy spectrum acquires the following form

$$\varepsilon_b^{msp}(\mathbf{k}) = m[-sh_z + p\sqrt{\gamma_b^2(\mathbf{k}) + [W_c^Q + sW_{S_z}^Q]^2} + \delta_b(\mathbf{k}) + \mu], \quad (7.28)$$

where b is the band index, $s = \pm$, $p = \pm$, $m = \pm$ refer to the spin, Q-translation and particle-hole space respectively, while γ_b and δ_b are the even and odd in Q-translation dispersion parts for each band, while μ stands for the chemical potential.

- $\rho_0\tau_y(x)\sigma_y(x)$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} m \frac{n_F[-sh_z + m\varepsilon_b(\mathbf{k})]}{\varepsilon_b(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2 \quad W_{S_z}^Q = 0$$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},b,m,s} m \frac{n_F[-sh_z + m\varepsilon_b(\mathbf{k})]}{\varepsilon_b(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2 \left(1 + p \frac{[W_{S_z}^Q]^2}{\sqrt{[\gamma(\mathbf{k})^2 + [W_{S_z}^Q]^2](\delta(\mathbf{k}) + \mu)^2}} \right) \quad W_c^Q = 0$$

For these condensates the susceptibility doesn't acquire an analytic expression in the general case of W_c^Q and $W_{S_z}^Q$ coexistence. For order parameters with representation $\rho_z\tau_y(x)\sigma_y(x)$ the two expressions for $W_{S_z}^Q \neq 0$ and $W_c^Q \neq 0$ interchange.

- $\rho_{x(y)}\tau_{y(x)}\sigma_{y(x)}$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, b, m, s} m \frac{n_F[-sh_z + \gamma_b(\mathbf{k}) + m(\delta_b(\mathbf{k}) + \mu)]}{\delta_b(\mathbf{k}) + \mu} f(\mathbf{k})^2 \quad W_{S_z}^{\mathbf{Q}} = 0$$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, b, m, s} m \frac{n_F[-sh_z + \gamma_b(\mathbf{k}) + m(\delta_b(\mathbf{k}) + \mu)]}{\delta_b(\mathbf{k}) + \mu} f(\mathbf{k})^2 \left(1 + p \frac{\gamma(\mathbf{k})^2}{\sqrt{[\gamma(\mathbf{k})^2 + [W_{S_z}^{\mathbf{Q}}]^2](\delta(\mathbf{k}) + \mu)^2}} \right) \quad W_c^{\mathbf{Q}} = 0$$

Again for these condensates the susceptibility doesn't acquire an analytic expression in the general case of $W_c^{\mathbf{Q}}$ and $W_{S_z}^{\mathbf{Q}}$ coexistence. The above equation holds for even in \mathbf{Q} translation form factors while for odd form factors the two expressions for $W_{S_z}^{\mathbf{Q}} \neq 0$ and $W_c^{\mathbf{Q}} \neq 0$ interchange.

- $\rho_{0(z)}\tau_{x(y)}\sigma_{z(0)}$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, b, m, s} m \frac{n_F[m\varepsilon_b^s(\mathbf{k})]}{\varepsilon_b^s(\mathbf{k})} f(\mathbf{k})^2 \left(1 + p \frac{(W_c^{\mathbf{Q}} + sW_{S_z}^{\mathbf{Q}})^2}{\sqrt{[\gamma(\mathbf{k})^2 + (W_c^{\mathbf{Q}} + sW_{S_z}^{\mathbf{Q}})^2](\delta(\mathbf{k}) + \mu - sh_z)^2}} \right)$$

- $\rho_{x(y)}\tau_{x(y)}\sigma_{z(0)}$

$$\chi = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, b, m, s} m \frac{n_F[\gamma_b(\mathbf{k}) + m(-sh_z + \delta_b(\mathbf{k}) + \mu)]}{-sh_z + \delta_b(\mathbf{k}) + \mu} f(\mathbf{k})^2 \left(1 + p \frac{\gamma(\mathbf{k})^2}{\sqrt{[\gamma(\mathbf{k})^2 + (W_c^{\mathbf{Q}} + sW_{S_z}^{\mathbf{Q}})^2](\delta(\mathbf{k}) + \mu - sh_z)^2}} \right)$$

7.2 Current operator

In order to calculate the currents in a lattice model we utilise the equation of motion for the charge and spin densities.

$$\partial_t \hat{\rho}_i = \frac{i}{\hbar} [H, \hat{\rho}_i], \quad (7.29)$$

where $\hat{\rho}_i = \Psi_{s,i}^\dagger \Psi_{s,i}$. Next we present the basic commutators which involve in the above equations.

$$\begin{aligned} [\psi_{i,s}^\dagger \psi_{i,s'}, \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'''}] &= \psi_{i,s}^\dagger \psi_{i,s'''} \delta_{s',s''} - \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'} \delta_{s,s'''} \\ [\psi_{i,s}^\dagger \psi_{i,s'}, \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'''}] &= \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'} \delta_{s',s'''} - \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'} \delta_{s,s'''} \\ [\psi_{i,s} \psi_{i,s'}, \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'''}] &= -\psi_{i,s'} \psi_{i,s'''} \delta_{s'',s} + \psi_{i,s} \psi_{i,s'''} \delta_{s',s''} \\ [\psi_{j,s}^\dagger \psi_{i,s'}, \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'''}] &= \psi_{j,s}^\dagger \psi_{i,s'''} \delta_{s',s''}, \quad \mathbf{i} \leftrightarrow \mathbf{j}(-) \\ [\psi_{i,s} \psi_{j,s'}, \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'''}] &= \psi_{i,s'''} \psi_{j,s'} \delta_{s,s''}, \quad \mathbf{i} \leftrightarrow \mathbf{j}(+) \\ [\psi_{j,s}^\dagger \psi_{i,s'}, \psi_{i,s''}^\dagger \psi_{i,s'''}] &= -\psi_{j,s}^\dagger \psi_{i,s'''} \delta_{s',s''}, \quad \mathbf{i} \leftrightarrow \mathbf{j}(+) \end{aligned}$$

The above commutators follow from the anticommutation rules for fermions $\{\psi_{i,s}^\dagger, \psi_{j,s'}^\dagger\} = \{\psi_{i,s}, \psi_{j,s'}\} = 0$, $\{\psi_{i,s}^\dagger, \psi_{j,s'}\} = \delta_{i,j}\delta_{s,s'}$. Any permutation over spin indices leave the commutators unchanged. For the particle density $n = \sum_s \psi_{i,s}^\dagger \psi_{i,s}$ particularly we get

$$\begin{aligned}
\langle \partial_t \hat{\rho}_i \rangle &= \sum_{j,s} \Phi_{P,i,j} (\langle \psi_{j,s}^\dagger \psi_{i,s} \rangle - \langle \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s} \rangle) + \Phi_{P,i,j}^{s,s'} (\langle \psi_{j,s}^\dagger \psi_{i,s'} \rangle - \langle \psi_{i,s}^\dagger \psi_{j,s'} \rangle) \\
&+ \sum_s \Phi_{\Delta,i}^{*,s's} \langle \psi_{i,s} \psi_{i,s'} \rangle - \Phi_{\Delta,i}^{ss'} \langle \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{i,s}^\dagger \rangle \\
&+ \sum_{i,s,s'} \Phi_{\Delta,i,j}^{*,s's} \langle \psi_{i,s} \psi_{j,s'} \rangle + \Phi_{\Delta,j,i}^{*,s's} \langle \psi_{j,s} \psi_{i,s'} \rangle - \Phi_{\Delta,i,j}^{ss'} \langle \psi_{j,s'}^\dagger \psi_{i,s}^\dagger \rangle - \Phi_{\Delta,j,i}^{ss'} \langle \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{j,s}^\dagger \rangle
\end{aligned} \tag{7.30}$$

where Φ are the conjugate fields included in the Hamiltonian. From the continuity equation we have

$$\langle \partial_t \hat{\rho}_i \rangle = \langle \nabla_i \cdot \mathbf{J} \rangle + \langle S_i \rangle \tag{7.31}$$

where \mathbf{J} the particle current and S_i particle sources by definition. We identify from the above equation the following terms as the particle sources.

$$\begin{aligned}
\langle S_i \rangle &= \sum_s \Phi_{\Delta,i}^{*,s's} \langle \psi_{i,s} \psi_{i,s'} \rangle - \Phi_{\Delta,i}^{ss'} \langle \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{i,s}^\dagger \rangle \\
&+ \sum_{j,s,s'} \Phi_{\Delta,i,j}^{*,s's} \langle \psi_{i,s} \psi_{j,s'} \rangle + \Phi_{\Delta,j,i}^{*,s's} \langle \psi_{j,s} \psi_{i,s'} \rangle - \Phi_{\Delta,i,j}^{ss'} \langle \psi_{j,s'}^\dagger \psi_{i,s}^\dagger \rangle - \Phi_{\Delta,j,i}^{ss'} \langle \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{j,s}^\dagger \rangle \rightarrow \\
&= 2i \sum_j \Im \left[\Phi_{\Delta,i,j} \Delta_{i,j}^\dagger \right],
\end{aligned} \tag{7.32}$$

In a self-consistent procedure the sources are limited from the convergence criteria $\langle VC \sum_j \Im \Delta_{i,j} \rangle$, where V the corresponding potential and C the convergence limit since $\Phi_{\Delta,i,j} = V(\Delta_{i,j}^\dagger - C)$.

We define the following current operator in the $\mathbf{i} - \mathbf{j} = \mathbf{d}$ bond.

$$\mathbf{J}_{i,i+\mathbf{d}} = \sum_{s,s'} \Phi_{P,i,j}^{s,s'} (\langle \psi_{i+\mathbf{d},s}^\dagger \psi_{i,s'} \rangle - \langle \psi_{i,s'}^\dagger \psi_{i+\mathbf{d},s} \rangle) = 2i \sum_{s,s'} \Phi_{P,i,j}^{s,s'} \Im \langle \psi_{i+\mathbf{d},s}^\dagger \psi_{i,s'} \rangle \tag{7.33}$$

In the case where \mathbf{d} coincides only with the basis vectors of the lattice, the current divergence gets the form

$$\langle \nabla_i \cdot \mathbf{J} \rangle = \sum_n \frac{1}{2} (\mathbf{J}_{i,i+\mathbf{d}_n} - \mathbf{J}_{i,i-\mathbf{d}_n}) \tag{7.34}$$

where \mathbf{d}_n the basis vectors of the lattice with $|\mathbf{d}_n| = 1$. The above identification complies with Eq. 7.30. We may also define as local current the following term

$$\mathbf{J}_{\mathbf{d},i} = \frac{1}{2} (\mathbf{J}_{i,i+\mathbf{d}} + \mathbf{J}_{i,i-\mathbf{d}}) \tag{7.35}$$

For a translationally invariant system along particular dimensions described by the following general Hamiltonian

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} \Psi_{\mathbf{k}, \mathbf{i}}^\dagger H_{\mathbf{k}, \mathbf{i}, \mathbf{j}} \Psi_{\mathbf{k}, \mathbf{j}} \quad (7.36)$$

the continuity equation acquires the form

$$i\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}^\parallel(\mathbf{q}, \mathbf{i}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}^\perp + m(\mathbf{q}, \mathbf{i}, t) = \partial_t \rho(\mathbf{q}, \mathbf{i}, t) \quad (7.37)$$

where $\mathbf{j}^\parallel(\mathbf{q}, \mathbf{i}, t)$ is the local current operator for currents parallel to dimensions with translational symmetry while $\mathbf{j}_{\mathbf{i}, \mathbf{j}}^\perp$ is the operator for the current perpendicular to these dimensions. From $i\partial_t \rho = [\rho, H]$ and $\rho(\mathbf{q}, \mathbf{i}) = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}, \mathbf{i}}^\dagger \mathcal{O}_\rho \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{i}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$ we get

$$\partial_t \rho_{\mathbf{q}, \mathbf{i}} = - \sum_{\mathbf{k}} i \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \{ \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}} H_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - H_{\mathbf{k}} \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}} \} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (7.38)$$

where $\mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}}$ the particle density operator and we have dropped the coordinate indices from the spinor and the Hamiltonian in the same way we hide the spin indexes. We leave the coordinate index in the density operator in order to denote that it corresponds to the local density operator. For $\mathbf{q} \rightarrow 0$

$$\partial_t \rho_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger [\mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}}, H_{\mathbf{k}}] \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - i\mathbf{q} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}} \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (7.39)$$

Therefore the current operator acquires the form

$$\mathbf{j}^\parallel(\mathbf{q}, \mathbf{i}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{i}} \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (7.40)$$

7.3 Conductivity

The conductivity tensor $\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t')$ is defined as

$$J_\mu(\mathbf{r}, t) = \int dt' \int d\mathbf{r}' \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') E_\nu(\mathbf{r}'t'), \quad (7.41)$$

where $J_\mu(\mathbf{r}, t)$, $E_\nu(\mathbf{r}'t')$ are the local current and electric field respectively. For system in equilibrium conductivity depends only on time differences and therefore we can transform Eq. 7.41 to the frequency domain.

$$J_\mu(\mathbf{r}, \omega) = \int d\mathbf{r}' \sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) E_\nu(\mathbf{r}', \omega), \quad (7.42)$$

Since the electric field derives from the electromagnetic potential according to the following equation $E_\nu = \frac{\partial A}{\partial t}$ which transform to $E_\mu(\omega) = i\omega A_\mu(\omega)$ in the frequency domain the linear response formula for conductivity acquires the following form.

$$\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{ie^2}{\omega} \Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) + \frac{e^2 n(\mathbf{r})}{\omega m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{\mu\nu} \quad (7.43)$$

where $\Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ is the retarded current-current correlation function defined as

$$\Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') = -i\theta(t - t') \langle [J_\mu(\mathbf{r}, t), J_\nu(\mathbf{r}', t')] \rangle_0 \quad (7.44)$$

in the time domain while in the frequency domain we get

$$\Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int_{t'}^{\infty} e^{i\omega t} e^{-\eta(t-t')} \Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t - t') dt \quad (7.45)$$

The paramagnetic dissipative conductivity derives from the retarded current-current correlation function Eq. 7.43

$$\Re\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \frac{e^2}{\omega} \Im \Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \quad (7.46)$$

The retarded current-current correlation tensor derives from the following Matsubara function

$$\Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) = -i\theta(t - t') \frac{4\pi}{c^2} \langle T_r J_\mu(\mathbf{r}, i\omega_n), J_\nu(\mathbf{r}', -i\omega_n) \rangle_0 \quad (7.47)$$

where T_r is the time ordering operator, by analytic continuation $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$.

$$\Pi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega + i\delta) = -\frac{4\pi}{c^2} [\Re \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega + i\delta) + i\Im \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega + i\delta)]$$

For systems which are translationally invariant along some dimensions of the system, the correlation tensor depends only in coordinates differences and therefore we define the tensor in the corresponding momentum domain

$$\Pi_{\mu\nu}^R(\mathbf{q}, \mathbf{r}, \mathbf{r}', i\omega_n) = -i\theta(t - t') \frac{4\pi}{c^2} \langle T_r J_\mu(\mathbf{q}, \mathbf{r}, i\omega_n), J_\nu(-\mathbf{q}, \mathbf{r}', -i\omega_n) \rangle_0 \quad (7.48)$$

Introducing the local current operator along the translation invariant dimensions of the system as presented in the previous section we get the following expression for the current-current correlations Matsubara function

$$\begin{aligned} \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{r}', \mathbf{r}, iq_n) &= -\frac{1}{\beta} \langle J_\mu^\parallel(\mathbf{q}, \mathbf{r}, iq_n) J_\nu^\parallel(-\mathbf{q}, \mathbf{r}', -iq_n) \rangle \\ \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{r}', \mathbf{r}, iq_n) &= \frac{1}{\beta} \langle \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', i\omega_n, i\omega'_n} \Psi_{\mathbf{k}, i\omega_n}^\dagger \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{r}} \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k_\mu} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, i\omega_n+iq_n} \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, i\omega'_n+iq_n}^\dagger \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{r}'} \frac{\partial H_{\mathbf{k}'}}{\partial k'_\nu} \Psi_{\mathbf{k}', i\omega'_n} \rangle \\ \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{r}', \mathbf{r}, iq_n) &= - \sum_{\mathbf{k}, i, j} \sum_{i\omega_n} [M_A]_{ij} [M_B]_{ji} G(\mathbf{k}, j, i\omega_n) G(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i, i\omega_n + iq_n) \end{aligned} \quad (7.49)$$

with $[M_{A, \mathbf{r}}] = U \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{r}} \frac{\partial H_{\mathbf{k}}}{\partial k_\nu} U^\dagger$, $[M_{B, \mathbf{r}'}] = U \mathcal{O}_{\rho, \mathbf{r}'} \frac{\partial H_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}}{\partial k_\nu} U^\dagger$. By analytic continuation $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$ we get

$$\begin{aligned} \Re \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{q} = 0, \mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= - \sum_{\mathbf{k}, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, j})}{\omega - E_{\mathbf{k}, j} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, j}} \\ \Im \Pi_{\mu\nu}(\mathbf{q} = 0, \mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) &= -\pi \sum_{\mathbf{k}, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} (n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, j})) \delta(\omega - E_{\mathbf{k}, j} + E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, j}) \end{aligned} \quad (7.50)$$

The uniform dc-conductivity corresponding to the limit

$$\Re\sigma_{\mu\nu}(\mathbf{q} = 0, \mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{e^2}{\omega} \Im\Pi^R(\mathbf{q}, \mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \quad (7.51)$$

derives from the following equation

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu} &= -\pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}, j}) - n_F(E_{\mathbf{k}, j} + \omega)}{\omega} \\ \sigma_{\mu\nu} &= \pi \sum_{\mathbf{k}, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} \frac{\partial n_F(E_{\mathbf{k}, j})}{\partial E_{\mathbf{k}, j}} \\ \sigma_{\mu\nu} &= \pi\beta \sum_{\mathbf{k}, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} n_F(E_{\mathbf{k}, j}) [1 - n_F(E_{\mathbf{k}, j})] \end{aligned} \quad (7.52)$$

In the case of a system with impurities, we get

$$\Im\Pi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\pi \int d\epsilon \sum_{\mathbf{k}, i, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} (n_F(\omega) - n_F(\omega + \epsilon)) \frac{\Gamma}{(\epsilon - E_{\mathbf{k}, i})^2 + \Gamma^2} \frac{\Gamma}{(\omega + \epsilon - E_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, j})^2 + \Gamma^2} \quad (7.53)$$

and for the uniform optical conductivity we get

$$\sigma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = -\pi \int d\epsilon \sum_{\mathbf{k}, j} [M_{A, \mathbf{r}}]_{ij} [M_{B, \mathbf{r}'}]_{ji} \frac{n_F(\omega) - n_F(\omega + \epsilon)}{\omega} \frac{\Gamma}{(\epsilon - E_{\mathbf{k}, i})^2 + \Gamma^2} \frac{\Gamma}{(\omega + \epsilon - E_{\mathbf{k}, j})^2 + \Gamma^2}, \quad (7.54)$$

with $\Gamma = 1/\tau$.

Chapter 8

Topological Invariants

8.1 Hamiltonian classification

We review the topological criteria for 1D Bogoliubov-de Gennes Hamiltonians. Hamiltonians are classified in symmetry classes according to their transformation upon time-reversal and particle-hole symmetry transformations. In coordinate space the classification criteria are expressed in the following form

$$U_T^\dagger H_{i,j}^* U_T = H_{i,j} \quad U_C^\dagger H_{i,j}^* U_C = -H_{i,j} \quad (8.1)$$

where U_T^\dagger and U_C^\dagger are the unitary parts of the anti-unitary time-reversal \mathcal{T} and charge conjugation \mathcal{C} symmetry operations with $\mathcal{T}i\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{C}\mathcal{C}^{-1} = -i$ the anti-unitary time-reversal and charge-conjugation symmetry operators. In momentum space the reality conditions Eq. 8.1 acquire the following form

$$\mathcal{T}H(k)\mathcal{T}^{-1} = H(-k) \quad \mathcal{C}H(k)\mathcal{C}^{-1} = -H(-k) \quad (8.2)$$

Moreover the unitary chiral symmetry operation \mathcal{S} is defined as $\mathcal{S} = \mathcal{T}\mathcal{C}$ and Hamiltonians acquire the chiral symmetry if

$$U_S^\dagger H_{i,j} U_S = -H_{i,j} \quad \mathcal{S}H(k)\mathcal{S}^{-1} = -H(k) \quad (8.3)$$

with $U_S = U_T U_C$. BdG Hamiltonians acquire by construction the particle-hole symmetry with $\mathcal{C}^2 = I$ therefore they are classified by the time-reversal symmetry in the three symmetry classes presented in Tab/ 8.1.

8.2 BDI chiral orthogonal class

We consider 1D translationally invariant systems. Hamiltonians in the chiral symmetry class don't acquire the ordinary time-reversal symmetry for which $\mathcal{T}^2 = -I$. However, they satisfy the condition $\mathcal{T}H(k)\mathcal{T}^{-1} = H(-k)$ with $\mathcal{T}^2 = I$. Therefore they acquire the chiral symmetry $\mathcal{S}H(k)\mathcal{S}^{-1} = -H(k)$. In the eigenbasis of the chiral symmetry operator $H(k)$ acquires a block diagonal form

$$\mathcal{H}'(k) = U_s H(k) U_s^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{A}(k) \\ \mathcal{A}(k)^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

where U_s the unitary operator which diagonalises the chiral symmetry operator. The determinant $\text{Det}\mathcal{A}(k)$ of the matrix $\mathcal{A}(k)$ is a complex number which becomes zero only for such

Cartan Label	\mathcal{T}	\mathcal{C}	\mathcal{S}	Hamiltonian	1
BDI (chiral orthogonal)	1	1	1	$O(N+M)/O(N) \times O(M)$	\mathbb{Z}
D (BDG)	0	1	0	$SO(2N)$	\mathbb{Z}_2
DIII (BDG)	-1	1	1	$SO(2N)/U(N)$	\mathbb{Z}_2

Table 8.1: The three symmetry classes of Bogoliubov-de Gennes Hamiltonians defined by the time-reversal, charge conjugation and chiral symmetry operations. When the system doesn't acquire a particular symmetry this is indicated by a 0 in the corresponding column, while by ± 1 we indicate the present symmetries of the system and the result of the square of the corresponding symmetry operator. The "Hamiltonian" column shows the corresponding group to which the time-evolution operator e^{iHt} belongs to. In the 1 column is presented the corresponding for each symmetry class topological invariant for one dimensional systems.

parameters, for which the quasi-particle energy spectrum $E(k)$ is not fully gapped. Therefore, for fully gapped systems we can define the unimodular function

$$z(k) = \text{Det}\mathcal{A}(k)/|\text{Det}\mathcal{A}(k)| \quad (8.5)$$

which realises a mapping from the S^1 momentum space to the S^1 space of unimodular complex numbers $z(k)$. The fundamental homotopy group $\pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$ is compatible with the topological invariant for 1D systems in the BDI symmetry class. Therefore we define as topological invariant the winding number of the $z(k)$ function [228]

$$\mathcal{W} = \frac{-i}{2\pi} \int_{k=0}^{k=2\pi} \frac{dz(k)}{z(k)} = \frac{1}{2\pi} \int_{k=0}^{k=2\pi} d\theta(k), \quad (8.6)$$

where $\exp[i\theta(k)] = \text{Det}(A(k))/|\text{Det}(A(k))| \in U(1)$. Equivalently we get

$$z(k) = \frac{1}{|\text{Det}(A(k))|} [\Re \text{Det}(A(k)) + i \Im \text{Det}(A(k))], \quad \theta(k) = \tan^{-1} \left[\frac{\Im \text{Det}(A(k))}{\Re \text{Det}(A(k))} \right] \quad (8.7)$$

Finally, we remark that because $z(-k) = z^*(k)$ we also get

$$\mathcal{W} = \frac{1}{\pi} \int_{k=0}^{k=\pi} d\theta(k). \quad (8.8)$$

We demonstrate the above method in the calculation of the topological invariant of the following Hamiltonian expressed in the spin-dependent Nambu spinor $\Psi_k = (c_{k,\uparrow}, c_{k,\downarrow}, c_{-k,\downarrow}^\dagger, c_{-k,\uparrow}^\dagger)^T$ and the Pauli matrices ($\boldsymbol{\tau}$) for the particle-hole and ($\boldsymbol{\sigma}$) for the spin space

$$\mathcal{H} = \sum_k \Psi_k^\dagger [(2t \cos k + \mu)\tau_3 + h\tau_3 \mathbf{d}_h \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}} + \Delta\tau_2\sigma_2 + \sin k(p\tau_1 i\sigma_2 \mathbf{d}_p + \Im p\tau_2 i\sigma_2 \mathbf{d}_{\Im p} + \alpha \mathbf{d}_\alpha) \cdot \tilde{\boldsymbol{\sigma}}] \Psi_k, \quad (8.9)$$

where $\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_1, \tau_3\sigma_2, \sigma_3)$, h a Zeeman field with vector \mathbf{d}_h in spin space, Δ a local SC field, μ and t the chemical potential and the nearest neighbors hopping term respectively, p and $\Im p$ triplet nearest neighbors odd in inversion SC fields with a relative phase $\phi = \pi/2$ and a SOC interactions. Hamiltonian Eq. 8.9 belongs to the BDI symmetry class when $\mathbf{d}_{\Im p} = \mathbf{d}_h \times \mathbf{d}_\alpha = \mathbf{d}_h \times \mathbf{d}_p$ and $\mathbf{d}_p = \mathbf{d}_\alpha$. In this case the reality conditions are satisfied for $\mathcal{C} = \tau_1 \mathcal{K}$ with $\mathcal{C}^2 = I$ and $\mathcal{T} = i\tau_3 \mathbf{d}_p \cdot i\sigma_2 \tilde{\boldsymbol{\sigma}} \mathcal{K}$ with $\mathcal{T}^2 = I$. In addition, a unitary chiral symmetry operator $\mathcal{S} = \mathcal{T} \cdot \mathcal{C} = \tau_2 \mathbf{d}_p \cdot i\sigma_2 \tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ anticommutes with the Hamiltonian. Thus, the system belongs to the

BDI symmetry class and is characterised by an integer \mathbb{Z} topological invariant. We demonstrate the calculations for $\mathbf{d}_h = (0, 0, 1)$, $\mathbf{d}_p = \mathbf{d}_a = (1, 0, 0)$ and $\mathbf{d}_{\mathfrak{S}p} = (0, 1, 0)$.

$$\mathcal{H} = \sum_k \Psi_k^\dagger [(2t \cos k + \mu)\tau_3 + h\tau_3\sigma_3 + \Delta\tau_2\sigma_2 + \sin k(p\tau_1\sigma_3 + \mathfrak{S}p\tau_2 + \alpha\sigma_1)] \Psi_k, \quad (8.10)$$

The time-reversal operator in the particular case is $\mathcal{T}' = i\tau_z\sigma_z\mathcal{K}$ while the chiral symmetry operator acquires the form $\mathcal{S} = \mathcal{T} \cdot \mathcal{C} = i\tau_z\sigma_z\mathcal{K}i\tau_x\mathcal{K} = \tau_y\sigma_z$. The unitary matrix $U_s = i[\tau_1 + i\tau_2 - \tau_3]\sigma_2 + [\tau_1 - i\tau_2 + \tau_3]\sigma_1$ diagonalises the chiral symmetry operator with

$$U_s^\dagger \mathcal{S} U_s = \tau_z\sigma_z \quad (8.11)$$

and leads to

$$\mathcal{H}'(k) = U_s H(k) U_s^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \mathcal{A}(k) \\ \mathcal{A}(k)^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad (8.12)$$

where

$$\mathcal{A}(k) = [h^z + i\mathfrak{S}P^y \sin k]\sigma_3 - [2t \cos k + \mu + ip_x \sin k] + [a_x \sin k + i\Delta]\sigma_1. \quad (8.13)$$

and

$$\begin{aligned} \Re Det(A(k)) &= [\Delta^2 + (2t \cos k + \mu)^2 - (h_z)^2 + ([\mathfrak{S}p_y]^2 - \alpha_x^2 - p_x^2) \sin^2 k] \\ \Im Det(A(k)) &= 2[\Delta\alpha_x + h_z\mathfrak{S}p_y + (2t\cos k + \mu)p_x] \sin k. \end{aligned} \quad (8.14)$$

The quasi-particle eigenenergy spectrum of the particular Hamiltonian derives from the following equation

$$E(k) = \pm \sqrt{h_z^2 + \Delta^2 + [2t \cos(k) + \mu]^2 + [p_x^2 + a_x^2 + \mathfrak{S}p_y^2] \sin^2(k) + \pm 2\sqrt{B}} \quad (8.15)$$

with

$$B = [\Delta p_x + (2t \cos(k) + \mu)a_x]^2 \sin^2(k) + [\mathfrak{S}p_y p_x \sin^2(k) + (2t \cos(k) + \mu)h_z]^2 + [\mathfrak{S}p_y a_x \sin^2(k) - \Delta h_z]^2.$$

Topological phase transitions occur when Fermi points with non-zero topological charge emerge in the eigenenergy spectrum of the system. At this topological critical point, the winding number characterising the bulk system is ill-defined, since $|Det(A(k))| = 0$. Within each topological phase, $\theta(k)$ is a continuous function of momentum k . Therefore, the maximum possible value of the winding number relates to the number n of roots $\Im Det(A(k))$ within the interval $[0, 2\pi)$, $\max|\mathcal{W}| = n/2$. Notice that, because $\Im Det(A(k)) = -\Im Det(A(-k))$ number n is always even. In the particular case, the condition $\Im Det(A(k)) = 0$ leads to the following cases.

First, we consider the case $[\Delta\alpha_x + h_z\mathfrak{S}p_y + (2t\cos k + \mu)p_x] \neq 0$ for every k . This leads to the following condition for the fields of the system $|(h_z\mathfrak{S}p_y + \Delta\alpha_x + \mu p_x)/(2tp_x)| > 1$. In this case $\Im Det(A(k)) = 0$ only for $k = 0, \pi$ and therefore the maximum absolute value of the winding number is $|\mathcal{W}| = 1$. The absolute value of the winding number is determined by the value of the complex number $z(k)$ at the particle-hole symmetric points in the Brillouin zone $k = 0, \pi$, $|\mathcal{W}| = \frac{1}{2} [1 - z(k=0)z(k=\pi)]$ or equivalently $\frac{z(k=\pi)}{z(k=0)} = e^{i\pi\mathcal{W}} = (-1)^\mathcal{W}$ [167]. According to this relation the topological criterion for the $|\mathcal{W}| = 1$ phase to be realised becomes

$[\Delta^2 + (2t + \mu)^2 - h_z^2] [\Delta^2 + (2t - \mu)^2 - h_z^2] < 0$, which results to the following condition for the chemical potential

$$|2t - \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}| < |\mu| < |2t + \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}| \quad (8.16)$$

or equivalently for the Zeeman field $\sqrt{\Delta^2 + (2t + \mu)^2} > |h_z| > \sqrt{\Delta^2 + (2t - \mu)^2}$. The topological phase transition occurs for $\Delta^2 + (2t + (-)\mu)^2 - h_z^2 = 0$ for which $|Det(A(k=0, (\pi)))| = 0$ and the eigenenergy spectrum of the system exhibits a Fermi point with non-zero topological charge at $k = 0(\pi)$. With respect to the chemical potential the topological critical point occurs for $|\mu| = |2t \pm \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}|$.

The other case includes the configuration of the fields for which $[\Delta\alpha_x + h_z\mathfrak{S}p_y + (2t\cos k + \mu)p_x] = 0$ for a particular inversion symmetric pair of momenta $(k^*, -k^*)$. This is possible only when

$$|(h_z\mathfrak{S}p_y + \Delta\alpha_x + \mu p_x)/(2tp_x)| < 1. \quad (8.17)$$

As a result in this case equation $\mathfrak{S}Det(A(k)) = 0$ has four roots, $k = 0, k = \pi, k^* = \pm\cos^{-1}\left(\frac{h_z\mathfrak{S}p_y + \Delta\alpha_x + \mu p_x}{2tp_x}\right)$ and the maximum value of the topological invariant is $|\mathcal{W}| = 2$. In order to understand the difference from the previous case we can consider the limit $\mathfrak{S}p_y \simeq p_x$ and $a_x \rightarrow 0$, where the condition for $|\mathcal{W}| = 2$ becomes $|\mu| < |h_z - 2t|$ which is the condition for both spin bands to be occupied. However, since for $|2t - \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}| < |\mu| < |2t + \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}|$, $\Re Det(A(k=0))\Re Det(A(k=\pi)) < 0$, it is straightforward that $|\mathcal{W}| = 1$ within these limits even in this case. Thus, a $|\mathcal{W}| = 2$ topological phase can be realised only for $|2t - \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}| > |\mu|$ or $|\mu| > |2t + \sqrt{h_z^2 - \Delta^2}|$ since only then we get $\Re Det(A(k=0))\Re Det(A(k=k^*)) < 0$ and $\Re Det(A(k=k^*))\Re Det(A(k=\pi)) < 0$. Moreover, we have the condition $\partial\mathfrak{S}Det(A(k))/\partial k|_{k=k^*} = -4tp_x \sin^2 k^* < 0$, which is always satisfied for $tp_x > 0$ [160].

Hamiltonian term	Representation	$\mathcal{C}\hat{D}\mathcal{C}^{-1}$	$\mathcal{T}\hat{D}\mathcal{T}^{-1}$	$\mathcal{T}'\hat{D}\mathcal{T}'^{-1}$	$\mathcal{S}\hat{D}\mathcal{S}^{-1}$
		$\mathcal{C} = \tau_x\mathcal{K}$	$\mathcal{T} = i\sigma_y\mathcal{K}$	$\mathcal{T}' = i\tau_z\sigma_z\mathcal{K}$	$\mathcal{S} = \mathcal{C}\mathcal{T}' = \tau_y\sigma_z$
chemical potential μ	$\delta_{i,j}\tau_z$	-	+	+	-
Zeeman field h	$\delta_{i,j}\tau_z\sigma_z$	-	-	+	-
transfer integral t'	$f_{i,j}^e\tau_z$	-	+	+	-
on-site pairing field Δ	$\delta_{i,j}\tau_y\sigma_y$	-	+	+	-
spin-orbit coupling a_x	$f_{i,j}^o\sigma_x$	-	+	+	-
triplet pairing field p	$f_{i,j}^o\tau_x\sigma_z$	-	+	+	-
triplet pairing field $\mathfrak{S}p$	$f_{i,j}^o\tau_x$	-	-	+	-

Table 8.2: The transformation of the terms of Hamiltonian Eq. 8.10 under the ordinary time-reversal symmetry \mathcal{T} , time-reversal \mathcal{T}' , charge-conjugation \mathcal{C} and chiral \mathcal{S} symmetry operations. Reality conditions Eq. 8.1 are satisfied only for \mathcal{T}' but not \mathcal{T} while Hamiltonian anticommutes with the chiral operator \mathcal{S} and therefore belongs to the BDI chiral symmetry class.

8.3 D symmetry class

We present the topological invariant for one-dimensional systems in the D symmetry class. Hamiltonians classified in the D symmetry class possess only the particle-hole symmetry and are topologically characterised by a Z_2 topological invariant (one dimensional systems). Considering the following general Hamiltonian in Nambu space which by construction provided the particle-hole symmetry.

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j \quad (8.18)$$

where $\Psi_j = \begin{pmatrix} \psi_j & \psi_j^\dagger \end{pmatrix}$ the spinless Nambu spinor. We introduce the Majorana basis

$$\gamma_{i,R} = \psi_i^\dagger + \psi_i \quad \gamma_{i,I} = i(\psi_i^\dagger - \psi_i) \quad (8.19)$$

where $\gamma_{i,R}$ and $\gamma_{i,I}$ are Majorana operators which stand for the real and imaginary part of complex Dirac fermion respectively. The Majorana operators satisfy the algebra

$$\gamma_{i,a}^\dagger = \gamma_{i,a} \quad \gamma_{i,a}, \gamma_{j,b} = 2\delta_{a,b}\delta_{i,j} \quad (8.20)$$

with $a = R, I$. The Nambu and Majorana spinors are connected through the unitary transformation

$$\Gamma_i = U\Psi_i \quad U = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix} \quad (8.21)$$

Applying the Majorana transformation to the Nambu space Hamiltonian yields

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger H_{i,j} \Psi_j = i \sum_{i,j} \Gamma_i^T A_{i,j} \Gamma_j \quad (8.22)$$

where $iA_{i,j} = UH_{i,j}U^\dagger$ is a real antisymmetric matrix with complex eigenvalues $\pm e_\lambda$, $e_\lambda > 0$ and which can be brought into the following Jordan form by a real orthogonal transformation W .

$$A_J = WAW^T = \text{diag}_\lambda \begin{pmatrix} 0 & e_\lambda \\ -e_\lambda & 0 \end{pmatrix} \quad (8.23)$$

The topological invariant for the particular Hamiltonians is then defined as

$$\mathcal{M} = \text{sgn}\{Pf(A)\} = \text{sgn}\{\det(W)\} \quad (8.24)$$

where $Pf(A)$ stands for the Pfaffian of the antisymmetric matrix A . The second equality derives from the property

$$Pf(A_J) = Pf(WAW^T) = Pf(A)\det(W) = \Pi_\lambda e_\lambda > 0 \quad (8.25)$$

The Pfaffian of an antisymmetric matrix is defined using the totally antisymmetric tensor ϵ as

$$Pf(A) = \frac{1}{2^n n!} \epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n} A_{i_1, i_2} A_{i_3, i_4} \dots A_{i_{2n-1}, i_{2n}} \quad (8.26)$$

The same procedure also holds for Hamiltonians in momentum space for translationally invariant systems. However, the analysis in momentum space reveals the crucial role of the inversion symmetric momenta $k = 0$ and $k = \pi$, since the definition of the topological invariant involves only these points.

$$\begin{aligned} \mathcal{M} &= \text{sgn}\{Pf(\tilde{A}(0))Pf(\tilde{A}(\pi))\} \\ \mathcal{M} &= \Pi_k \tilde{W}(k) = \Pi_{k=-k} \tilde{W}(k) = \det(\tilde{W}(0))\det(\tilde{W}(\pi)) \end{aligned} \quad (8.27)$$

where $\tilde{A}(k)$ is the Majorana representation of the momentum space Hamiltonian and $\tilde{W}(k)$ the corresponding real orthogonal transformation matrix. Since $\tilde{W}(k)$ is a unitary matrix $\det \tilde{W}(k) = e^{i\phi_k}$ is a continuous function of momentum the topological invariant can be defined

$$\mathcal{M} = (-1)^{(\phi_0 - \phi_\pi)/\pi} \quad (8.28)$$

with the phase change corresponding to a winding number over the half Brillouin zone

$$\Delta\phi = \phi_0 - \phi_\pi = i \int_0^\pi [\partial_k [\log(\det(\tilde{W}(k)))] dk] \quad (8.29)$$

Therefore, the topological invariant for 1D Hamiltonians in D symmetry class corresponds to the phase winding between the two real points of the Fourier transform of the orthogonal transformation that brings the antisymmetric Majorana representation matrix of the mean-field Hamiltonian into its Jordan normal form. The system is in a topological non-trivial phase for $\mathcal{M} = -1$ while it is topologically trivial for $\mathcal{M} = 1$.

We demonstrate the method presented above in the following Hamiltonian in momentum space for electrons with singlet conventional Δ pairing under an externally applied Zeeman field h_x and an electric field E .

$$\mathcal{H} = \sum_k \Psi_k^\dagger [(2t \cos k + \mu)\tau_3 + \Delta\tau_2\sigma_2 + E \sin k] \Psi_k^\dagger, \quad (8.30)$$

where $\Psi_k = \begin{pmatrix} \psi_{k,\uparrow} & \psi_{k,\downarrow} & \psi_{-k,\uparrow}^\dagger & \psi_{-k,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}$. Transforming into the Majorana basis leads to

$$\tilde{A}(k) = i[E \sin k + (2t \cos k + \mu)\tau_2 + \Delta\tau_1\sigma_2] + h_x\tau_2\sigma_2 \quad (8.31)$$

Matrix $\tilde{A}(k)$ is real antisymmetric for the inversion symmetric momenta $k = 0$ and $k = \pi$ with Pfaffian

$$\begin{aligned} Pf(\tilde{A}(0)) &= (2t + \mu)^2 + \Delta^2 - h_x^2 \\ Pf(\tilde{A}(\pi)) &= (-2t + \mu)^2 + \Delta^2 - h_x^2 \end{aligned} \quad (8.32)$$

Therefore, the topological invariant \mathcal{M} follows from the expression

$$\mathcal{M} = \text{sgn}\{[(2t + \mu)^2 + \Delta^2 - h_x^2][(-2t + \mu)^2 + \Delta^2 - h_x^2]\} \quad (8.33)$$

which, according to the condition $\mathcal{M} = -1$ for topologically non-trivial phases, yields the following topological criteria for the chemical potential

$$2t - \sqrt{h_x^2 - \Delta^2} < |\mu| < 2t + \sqrt{h_x^2 - \Delta^2} \quad (8.34)$$

The topological criterion corresponds to a single spin band being partially occupied.

According to the quartet rule for fields coupling in Eq. 8.30, an odd in inversion pairing field $\sin k\tau_1\sigma_3$ and spin-orbit coupling interactions $a \sin k\sigma_1$ are induced due to the coupling of the Zeeman field $h_x\tau_3\sigma_1$ and the electric field $E \sin k$ with the conventional pairing field $\Delta\tau_2\sigma_2$ and the chemical potential $\mu\tau_3$ respectively. The induced fields don't alter the symmetry class of Hamiltonian Eq. 8.30 which derives from the general Eq. 8.9 for $\mathbf{d}_h = (1, 0, 0)$, $\mathbf{d}_p = (1, 0, 0)$ and $\mathbf{d}_a = (1, 0, 0)$ while $\mathbf{d}_{\mathfrak{S}p} = 0$. Notice that since $\mathbf{d}_\alpha \neq \mathbf{d}_h \times \mathbf{d}_p$, Eq. 8.30 breaks the chiral

Hamiltonian term		$\mathcal{C}\hat{D}\mathcal{C}^{-1}$	$\mathcal{T}\hat{D}\mathcal{T}^{-1}$
	Representation	$\mathcal{C} = \tau_x\mathcal{K}$	$\mathcal{T} = i\sigma_y\mathcal{K}$
chemical potential μ	τ_z	—	+
Zeeman field h_x	$\tau_z\sigma_x$	—	—
transfer integral t	$\cos k\tau_z$	—	+
on-site pairing field Δ	$\tau_y\sigma_y$	—	+
electric field E	$\sin k$	+	+

Table 8.3: The transformation of the terms of Hamiltonian Eq. 8.30 under the ordinary time-reversal symmetry \mathcal{T} and charge-conjugation \mathcal{C} . Notice that the Zeeman field h_x and the electric field E don't meet the condition for time-reversal symmetry. Finally there is no unitary operator which anticommutes with all the terms of the Hamiltonian indicating the absence of chiral symmetry. Therefore Hamiltonian Eq. 8.30 belongs to the D symmetry class.

symmetry and, therefore, belongs to D symmetry class. Moreover matrix $\tilde{A}(k)$ acquires now the form

$$\tilde{A}(k) = i[E \sin k + p \sin k \tau_3 \sigma_3 + a \sin k \sigma_1 + (2t \cos k + \mu)\tau_2 + \Delta \tau_1 \sigma_2] + h_x \tau_2 \sigma_2. \quad (8.35)$$

However, the Pfaffian at the inversion symmetric momenta and therefore the topological criteria don't change.

8.4 DIII symmetry class

In order to complete this analysis, we present the topological invariant for one dimensional Hamiltonians classified in the *DIII* symmetry class. Hamiltonians in this symmetry class acquire both particle-hole and time-reversal symmetry. This is expressed

$$U_T H^*(-k) U_T^\dagger = H(k) \quad U_C H^*(-k) U_C^\dagger = -H(k) \quad (8.36)$$

Hamiltonian then acquires the chiral symmetry

$$U_S^\dagger H^*(k) U_S = -H(k) \quad (8.37)$$

with $U_S = iU_T U_C$. Therefore, the Hamiltonian acquires a block-diagonal form in the basis of the chiral symmetry matrix

$$\tilde{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & D(k) \\ D^\dagger(k) & 0 \end{pmatrix} \quad (8.38)$$

Due to the chiral symmetry the eigenvalues of the Hamiltonian have the form $\pm\lambda_n$ with $\lambda_n > 0$ for fully gapped systems and the corresponding eigenfunction of $\tilde{H}(k)$ acquires the following form

$$|\Psi(k), n, \pm \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} u_n \\ \pm D^\dagger(k) u_n / \lambda_n \end{pmatrix} \quad (8.39)$$

where u_n are the normalised eigenfunctions of the DD^\dagger matrix. Based on these eigenfunctions we can define the flat band Hamiltonian of the $H(k)$ as

$$Q(k) = \begin{pmatrix} 0 & q(k) \\ q^\dagger(k) & 0 \end{pmatrix} = \sum_n \begin{pmatrix} 0 & u_n u_n^\dagger \frac{D(k)}{\lambda_n} \\ u_n u_n^\dagger \frac{D(k)^\dagger}{\lambda_n} & 0 \end{pmatrix} \quad (8.40)$$

Then, the topological invariant is defined as

$$\mathcal{M} = \frac{Pf(Tq(k=0))}{Pf(Tq(k=\pi))} e^{-1/2\Delta\phi} \quad \Delta\phi = \int_0^\pi dk Tr[q(k)\partial_k q(k)] \quad (8.41)$$

where T the unitary part time-reversal operator [229].

Bibliography

- [1] H. Kamerlingh Onnes, Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden Nos. **119**, 120 (1911).
- [2] W. Meissner and R. Ochsenfeld, Naturwissenschaften **21**, 787 (1933).
- [3] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, J. Exptl. Theoret. Phys. (USSR), **20**, 1064 (1950).
- [4] L.N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [5] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [6] L.P.Gor'kov, Sov. Phys. JETP **34**, 505 (1958).
- [7] A.J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **47**, 331 (1975).
- [8] J.F. Annett, Adv. Phys. **39**, 83 (1990).
- [9] H. Frölich, Phys. Rev. **79**, 845 (1950).
- [10] P. G. de Gennes, Rev. Mod. Phys. **36**, 225.
- [11] B.D. Josephson, Phys. Lett. **1**, 251 (1962), B. D. Josephson, Rev. Mod. Phys. **46**, 251 (1974), P. W. Anderson and J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. **10** 230 (1963).
- [12] A. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **46**, 1823, Sov. Phys. JETP **19**, 1228 (1964).
- [13] P. G. de Gennes and D. Saint-James, Phys. Lett. **4**, 151 (1963).
- [14] A. I. Buzdin, Rev. Mod. Phys. **77**, 935 (2005).
- [15] F.S. Bergeret, A.F.Volkov and K.B. Efetov, Rev. Mod. Phys. **77**, 1321 (2005).
- [16] W. L. McMillan, Phys. Rev. **175**, 559 (1968).
- [17] G. Eilenberger, Z.Phys. **214**, 195–213 (1968).
- [18] A.I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **28**, 1200–1205 (1965).
- [19] L. Usadel, Phys. Rev. Lett. **25**, 507–509 (1970).
- [20] G. Deutscher and P. G. de Gennes, “Proximity effects,” in Superconductivity, edited by R. D. Parks Dekker, New York, pp. 1005–1034 (1969).
- [21] G. Deutscher, Rev. Mod. Phys. **77**, 109 (2005).
- [22] Satoshi Kashiwaya and Yukio Tanaka, Rep. Prog. Phys. **63**, 1641 (2000)., T. Löfwander, V. S. Shumeiko and G. Wendin Supercond, Sci. Technol. **14**, 53-77 (2001).
- [23] Manfred Sigrist and Kazuo Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- [24] A. A. Golubov, M. Yu. Kupriyanov, and E. Ilichev, Rev. Mod. Phys. **76**, 411–469 (2004).

- [25] C. W. J. Beenakker, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1337 (2008).
- [26] W.E. Pickett, *Tight Binding Method: Linear Combination of Atomic Orbitals*, lecture notes (2006).
- [27] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, W.A. Benjamin, New York, (1964).
- [28] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd Ed. Dover Publications (2004).
- [29] V.P Mineev and K.V. Samokhin, *Introduction to Unconventional Superconductivity*, Gordon and Breach, Amsterdam, (1999).
- [30] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction*, Oxford University Press, Oxford, (2004).
- [31] Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics (Physics of Solids and Liquids)*, 3rd ed. Springer (2000).
- [32] A. Altland and B.D. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press (2006).
- [33] 'The Hubbard model', World Scientific (1991).
- [34] Hal Tasaki, arXiv:9512169 (1995).
- [35] L. Covaci and F. Marsiglio, *Phys. Rev. B* **73**, 014503 (2006).
- [36] Jian-Xin Zhu and C. S. Ting, *Phys. Rev. B* **61**, 1456 (2000).
- [37] Y. Tanuma, K. Kuroki, Y. Tanaka, and S. Kashiwaya, *Phys. Rev. B* **64**, 214510 (2001).
- [38] A. V. Burmistrova, I. A. Devyatov, Alexander A. Golubov, Keiji Yada, Yukio Tanaka, arXiv:1210.1479 (2012).
- [39] Kazuhiro Kuboki and Hidenori Takahashi, *Phys. Rev. B* **70**, 214524 (2004).
- [40] Klaus Halterman and Oriol T. Valls, *Phys. Rev. B*, **65**, 014509 (2001).
- [41] P. M. R. Brydon, Dirk Manske, M. Sigrist, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 103714 (2008).
- [42] Brian M. Andersen, I. V. Bobkova, P. J. Hirschfeld, and Yu. S. Barash, *Phys. Rev. B* **72**, 184510 (2005).
- [43] Jacob Linder, Takehito Yokoyama, Asle Sudbø, and Matthias Eschrig, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 107008 (2009).
- [44] Paola Gentile Mario Cuoco Alfonso Romano Canio Noce Dirk Manske, and P. M. R. Brydon, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 097003 (2013).
- [45] Damien Terrade, Paola Gentile, Mario Cuoco, Dirk Manske, *Phys. Rev. B* **88**, 054516 (2013).
- [46] F. S. Bergeret, A. F. Volkov, and K. B. Efetov, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4096 (2001).
- [47] So Takei, Benjamin M. Fregoso, Victor Galitski, and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **87**, 014504 (2013).
- [48] G. Varelogiannis, arXiv:1305.2976
- [49] G. Varelogiannis, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 117201 (2003).

- [50] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).
- [51] A. Aperis, G. Varelogiannis, and P. B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. **104**, 216403 (2010).
- [52] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, J. Phys.: Conf. Ser. **150**, 042007 (2009).
- [53] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή, ‘Μελέτη ανομοιογενών ηλεκτρονικών καταστάσεων σε υλικά ισχυρά συσχετισμένων φορέων.’ (2012).
- [54] Y. Yanase and M. Sigrist, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 094219 (2011).
- [55] H. Ding *et al.*, Europhys. Lett. **83**, 47001 (2008); K. Terashima *et al.*, Proc. Natl. Acad. Sci. **106**, 7330 (2009); Y. Zhang *et al.*, Nature Mater. **10**, 273 (2011).
- [56] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes and M.H. Du, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008); V. Stanev, J. Kang and Z. Tesanovic, Phys. Rev. B **78**, 184509 (2008); A.V. Chubukov, D.V. Efremov and I. Eremin, Phys. Rev. B **78**, 134512 (2008).
- [57] J. D. Fletcher *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 147001 (2009); J. K. Dong *et al.*, Phys. Rev. Lett. **104**, 087005 (2010); Y. Nakai *et al.*, Phys. Rev. B **81**, 020503 (2010); M. Yamashita *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 060507(R) (2011); Y. Zhang *et al.*, Nature Physics **8**, 371-375 (2012); X. Qiu *et al.*, Physical Review X **2**, 011010 (2012).
- [58] G. Varelogiannis and E. N. Economou, Europhys. Lett. **42** 313 (1998).
- [59] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **88**, 117005 (2002).
- [60] A. Aperis, P. Kotetes, G. Varelogiannis and P. M. Oppeneer, Phys. Rev. B **83**, 092505 (2011).
- [61] A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1303.2231
- [62] R. Thomale, C. Platt, W. Hanke and B.A. Bernevig, Phys. Rev. Lett. **106**, 187003 (2011); R. Thomale *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 117001 (2011).
- [63] S. Maiti *et al.*, Phys. Rev. B **84**, 224505 (2011).
- [64] A. A. Kordyuk, Low Temp. Phys. **38**, 888 (2012).
- [65] R.M. Fernandes and A.J. Millis, Phys. Rev. Lett. **110**, 117004 (2013).
- [66] G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **57**, 13743 (1998); P. M. Openeer and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **68**, 214512 (2003).
- [67] M. G. Kim, R. M. Fernandes, A. Kreyssig, J. W. Kim, A. Thaler, S. L. Bud’ko, P. C. Canfield, R. J. McQueeney, J. Schmalian, and A. I. Goldman, Phys. Rev. B **83**, 134522 (2011).
- [68] M. Yi *et al.*, PNAS **108**, 6878 (2011).
- [69] S. Kasahara, H.J. Shi, K. Hashimoto, S. Tonegawa, Y. Mizukami, T. Shibauchi, K. Sugimoto, T. Fukuda, T. Terashima, A. H. Nevidomskyy, and Y. Matsuda, Nature **486**, 382 (2012).
- [70] M. Fu, D. A. Torchetti, T. Imai, F. L. Ning, J.-Q. Yan, and A. S. Sefat, Phys. Rev. Lett. **109**, 247001 (2012).
- [71] J.-H. Chu *et al.*, Science **337**, 710 (2012).

- [72] R. M. Fernandes, A. V. Chubukov and J. Schmalian, *Nature Physics* **10**, 97–104 (2014).
- [73] Sevda Avci *et al.*, *Nature Communications* **5**, 3845 (2014).
- [74] R. Khasanov *et al.*, *New J. Phys.* **12**, 073024 (2010).
- [75] Can-Li Song *et al.*, *Science* **332**, 1410 (2011).
- [76] T.M. McQueen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 057002 (2009).
- [77] W. Lv and P. Phillips, *Phys. Rev. B* **84**, 174512 (2011).
- [78] V. Stanev and P.B. Littlewood, *Phys. Rev. B* **87**, 161122 (2013).
- [79] H. Kotegawa *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 113703 (2008).
- [80] J.K. Dong *et al.*, *Phys. Rev. B* **80**, 024518 (2009).
- [81] J.Y. Lin *et al.*, *Phys. Rev. B* **84**, 220507(R) (2011).
- [82] M. Daghofer, A. Nicholson, A. Moreo and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **81**, 014511 (2010).
- [83] R.M. Fernandes and A.J. Millis, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 127001 (2013).
- [84] Kazuhiro Kuboki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **68**, 3150 (1999).
- [85] Kazuhiro Kuboki, *Physica B* 284-288, **505** (2000).
- [86] X. L. Qi, Y. S. Wu, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **74**, 085308 (2006).
- [87] X. L. Qi, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 086802. (2008).
- [88] X. L. Qi, and S. C. Zhang, *Phys. Today* **63**, 33. (2010).
- [89] C. N. R. Rao, *Annual Review of Physical Chemistry* Vol. 40: 291-326 (1989).
- [90] N. F. Mott, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 677 (1968).
- [91] Masatoshi Imada, Atsushi Fujimori and Yoshinori Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998), V. Dobrosavljevic, arXiv:1112.6166 (2011).
- [92] M. Basletic, J.-L. Maurice, C. Carretero, G. Herranz, O. Copie, M. Bibes, E. Jacquet, K. Bouzehouane, S. Fusil and A. Bartelemy, *Nat. Phys.* **7**, 621 (2008).
- [93] A. Annadi *et al.*, *Nat. Commun.* **4**, 1838 (2013).
- [94] Harold Y. Hwang, *Science* **313**, 1895 (2006).
- [95] N. C. Bristowe, Philippe Ghosez, P. B. Littlewood and Emilio Artacho, *J. Phys.: Condens. Matter* **26**, 143201 (2014).
- [96] D. G. Schlom and J. Mannhart, *Nat. Mat.* **10**, 168 (2011).
- [97] J. Mannhart and D. G. Schlom, *Science* **327**, 1607 (2010).
- [98] Joseph A. Sulpizio, S. Ilani, P. Irvin and J. Levy, *Annu. Rev. Mater. Res.* **44**, 18.1–18.33 (2014).
- [99] A. Ohtomo, D. A. Muller, J. L. Grazul, and H. Y. Hwang, *Nature* **419**, 380 (2002), A. Ohtomo and H. Y. Hwang, *Nature* **427**, 423 (2004).

- [100] A. Brinkman, M. Huijben, M. van Zalk, J. Huijben, U. Zeitler, J. C. Maan, W. G. van der Wiel, G. Rijnders, D. H. A. Blank, and H. Hilgenkamp, *Nat. Mater.* **6**, 493 (2007).
- [101] Lu Li, C. Richter, J. Mannhart and R. C. Ashoori, *Nature Physics*, **7**, 762–766 (2011).
- [102] J. A. Bert, B. Kalisky, C. Bell, M. Kim, Y. Hikita, H. Y. Hwang, and K. A. Moler, *Nat. Phys.* **7**, 767 (2011).
- [103] L. Li, C. Richter, J. Mannhart, and R. C. Ashoori, *Nat. Phys.* **7**, 762 (2011).
- [104] N. Reyren, S. Thiel, A. D. Caviglia, L. F. Kourkoutis, G. Hammerl, C. Richter, C. W. Schneider, T. Kopp, A.-S. Retschi, D. Jaccard et al., *Science* **317**, 1196 (2007).
- [105] S. Gariglio, N. Reyren, A. D. Caviglia and J.-M. Triscone, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 164213 (2009)
- [106] J. Biscaras, N. Bergeal, A. Kushwaha, T. Wolf, A. Rastogi, R. C. Budhani, and J. Lesueur, *Nat. Commun.* **1**, 89 (2010).
- [107] Ariando, X. Wang, G. Baskaran, Z. Q. Liu, J. Huijben, J. B. Yi, A. Annadi, A. R. Barman, A. Rusydi, S. Dhar *et al.*, *Nat. Commun.* **2**, 188 (2011).
- [108] A. D. Caviglia, M. Gabay, S. Gariglio, N. Reyren, C. Cancellieri, and J.-M. Triscone, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 126803 (2010).
- [109] S. Thiel, G. Hammerl, A. Schmehl, C. W. Schneider, and J. Mannhart, *Science* **313**, 1942 (2006).
- [110] A. D. Caviglia, S. Gariglio, N. Reyren, D. Jaccard, T. Schneider, M. Gabay, S. Thiel, G. Hammerl, J. Mannhart, and J. M. Triscone, *Nature (London)* **456**, 624 (2008).
- [111] H. W. Jang, D. A. Felker, C. W. Bark, Y. Wang, M. K. Niranjana, C. T. Nelson, Y. Zhang, D. Su, C. M. Folkman, S. H. Baek *et al.*, *Science* **331**, 886 (2011).
- [112] M. L. Reinle-Schmitt, *et al.*, *Nat. Commun.* **3**, 932 (2012).
- [113] M. Ben Shalom, M. Sachs, D. Rakhmilevitch, A. Palevski, and Y. Dagan, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 126802 (2010).
- [114] M. M. Mehta, D. A. Dikin, C. W. Bark, S. Ryu, C. M. Folkman, C. B. Eom, and V. Chandrasekhar, *Phys. Rev. B* **90**, 100506(R) (2014).
- [115] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [116] C. Cancellieri, N. Reyren, S. Gariglio, A. D. Caviglia, A. Fete, and J.-M. Triscone, *Europhys. Lett.* **91**, 17004 (2010).
- [117] S. Okamoto and A. J. Millis, *Nature* **428**, 630 (2004).
- [118] S. Okamoto and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **70**, 075101 (2004).
- [119] S. Okamoto and A. J. Millis, *Phys. Rev. B* **72**, 235108 (2005).
- [120] I. Gonzalez, S. Okamoto, S. Yunoki, A. Moreo and E. Dagotto, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 264002 (2008).
- [121] S. S. Kancharla and E. Dagotto, *Phys. Rev. B* **74**, 195427 (2006).
- [122] S. S. Kancharla and S. Okamoto, *Phys. Rev. B* **75**, 193103 (2007).

- [123] G. Gruner, *Density waves in solids*, Frontiers in Physics Vol. **89**, Addison-Welsey publishing company (1994).
- [124] E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988);
- [125] G. Gruner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
- [126] C. Cen, S. Thiel, G. Hammerl, C. W. Schneider, K. E. Andersen, C. S. Hellberg, J. Mannhart, and J. Levy, Nature materials. **7**, 298 (2008)
- [127] C. Cen, S. Thiel, J. Mannhart, and J. Levy, Science. **323**, 1026 (2009)
- [128] Xie Y., Hikita Y., Bell C. and Hwang H., Nature Commun. **2**, 494 (2011).
- [129] Irvin P., Ma Y., Bogorin D., Cen C., Bark C., Folkman C., Eom C. and Levy J., Nature Photon. **4**, 849–52 (2010)
- [130] Pallecchi I., Codda M., d’Aglia E. G., Marre D., Caviglia A., Reyren N., Gariglio S. and Triscone J. M., Phys. Rev. B **81**, 085414 (2010).
- [131] Filippetti A., Delugas P., Verstraete M. Pallecchi I., Gadaleta A., Marr’e D., Li D., Gariglio S. and Fiorentini V., Phys. Rev. B **86**, 195301 (2012).
- [132] Assmann E., Blaha P., Laskowski R., Held K., Okamoto S. and Sangiovanni G. Phys. Rev. Lett. **110**, 078701 (2013).
- [133] Liang H. *et al.* Sci. Rep. **3**, 1975 (2013).
- [134] P. Moetakef, T. A. Cain, D. G. Ouellette, J. Y. Zhang, D. O. Klenov, A. Janotti, C. G. Van de Walle, S. Rajan, S. J. Allen, and S. Stemmer, Appl. Phys. Lett. **99**, 232116 (2011).
- [135] Y. Hotta, T. Susaki, and H. Y. Hwang, Phys. Rev. Lett. **99**, 236805 (2007).
- [136] U. Lüders, W. C. Sheets, A. David, W. Prellier, and R. Fresard, Phys. Rev. B **80**, 241102 (2009).
- [137] P. Perna, *et al.*, Appl. Phys. Lett. **97**, 152111 (2010).
- [138] B. Kalisky *et al.*, Nat. Commun. **3**, 922 (2012).
- [139] A. Aperis *et al.*, EPL **83**, 67008 (2008).
- [140] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yoshida, S. Nishizaki, T. Fujita, J.G. Bednorz and F. Lichtenberg, Nature **372**, 532 (1994).
- [141] T. M. Rice and M. Sigrist, J. Phys.: Condens. Matter **7**, L643 (1995).
- [142] N. D. Mermin, J. Math. Phys. **19**, 1457 (1978).
- [143] N.D. Mermin, Rev. Mod. Phys. **51**, 591 (1979).
- [144] Jerrey C.Y. Teo and C.L. Kane, Phys. Rev. B **82**, 115120 (2010).
- [145] G. E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Oxford Science Publications (2003).
- [146] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang, Rev. Mod. Phys. **83**, 1057 (2011).
- [147] A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki and A. W. W. Ludwig Phys. Rev. B **78**, 195125 (2008).

- [148] Alexander Altland and Martin R. Zirnbauer Phys. Rev. B **55**, 1142 (1996).
- [149] Schnyder A P, Ryu S, Furusaki A, and Ludwig A W W AIP Conf. Proc. 1134 **10** (2009).
- [150] A. Yu Kitaev, AIP Conf. Proc. 1134, **22** (2009).
- [151] S. Ryu, A. Schnyder, A. Furusaki, and A. W. W. Ludwig, New J. Phys. **12**, 065010 (2010).
- [152] Ching-Kai Chiu, Hong Yao and Shinsei Ryu, Phys. Rev. B **88** 075142 (2013).
- [153] C.T. Hsieh,¹ T. Morimoto, and S. Ryu Phys.Rev. B **90**, 245111 (2014).
- [154] K. von Klitzing, G. Dorda and M. Pepper, Phys. Rev. Lett. **45**, 494 (1980).
- [155] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. Den Nus, Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).
- [156] H. L. Stormer, D. C. Tsui, and A. C. Gossard, Rev. Mod. Phys. **71**, S298 (1999).
- [157] G. Moore and N. Read, Nuclear Physics B360, 362-396 (1991).
- [158] J. Alicea, Y. Oreg, G. Refael, F. von Oppen, and M.P.A. Fisher, Nature Physics, **7**, 412 (2011).
- [159] J. Alicea, Rep. Prog. Phys. **75**, 076501 (2012).
- [160] A. Y. Kitaev, Phys.Ups. **44**, 131 (2001).
- [161] D. A. Ivanov, Phys. Rev. Lett. **86**, 268 (2001).
- [162] M. Wimmer, A. R. Akhmerov, M.V. Medvedyeva, J. Tworzydo, and C.W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. **105**, 046803 (2010)
- [163] L.Fu and C.L. Kane, Phys. Rev. Lett. **100**, 096407 (2008).
- [164] Jacob Linder, Yukio Tanaka, Takehito Yokoyama, Asle Sudb, and Naoto Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **104**, 067001 (2010)
- [165] Tudor D. Stanescu, Jay D. Sau, Roman M. Lutchyn, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **81**, 241310(R) (2010).
- [166] R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **105**, 077001 (2010).
- [167] J.D. Sau, R.M. Lutchyn, S. Tewari, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **104**, 040502 (2010).
- [168] J. Alicea, Phys. Rev. B **81**, 125318 (2010).
- [169] Jay D. Sau, Roman M. Lutchyn, Sumanta Tewari and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **82**, 094522 (2010).
- [170] Jay D. Sau, Sumanta Tewari, Roman M. Lutchyn, Tudor D. Stanescu and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **82**, 214509 (2010).
- [171] Tudor D. Stanescu, Roman M. Lutchyn, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **84**, 144522 (2011).
- [172] Sumanta Tewari¹ and Jay D. Sau, Phys. Rev. Lett. **109**, 150408 (2012).

- [173] S. Tewari, T. D. Stanescu, J.D. Sau, and S. Das Sarma Phys. Rev. B **86**, 024504 (2012).
- [174] Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **105**, 177002 (2010).
- [175] Eran Sela, Alexander Altland, and Achim Rosch, Phys. Rev. B **84**, 085114 (2011).
- [176] T.-P. Choy, J. M. Edge, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. B **84**, 195442 (2011).
- [177] Morten Kjaergaard, Konrad Wolms, and Karsten Flensberg Phys. Rev. B **85**, 020503(r) (2012).
- [178] I. Martin and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B **85**, 144505 (2012).
- [179] Jian Li, Hua Chen, Ilya K. Drozdov, A. Yazdani, B. Andrei Bernevig, and A. H. MacDonald, Phys. Rev. B **90**, 235433 (2014).
- [180] P. M. R. Brydon, S. Das Sarma, Hoi-Yin Hui, and Jay D. Sau Phys. Rev. B **91**, 064505 (2015).
- [181] Hoi-Yin Hui, P. M. R. Brydon, Jay D. Sau, S. Tewari, S. Das Sarma arXiv:1407.7519 (2014).
- [182] S. Das Sarma, Hoi-Yin Hui, P. M. R. Brydon, Jay D. Sau, New J. Phys. **17**, 075001 (2015).
- [183] Andreas Heimes, Daniel Mendler and Panagiotis Kotetes, New J. Phys. **17**, 023051 (2015).
- [184] So Takei and Victor Galitski Phys. Rev. B **86**, 054521 (2012).
- [185] Eugene Dumitrescu, Brenden Roberts, Sumanta Tewari, Jay D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **91**, 094505 (2015).
- [186] Yuan-Ming Lu and Ziqiang Wang, Phys. Rev. Lett. **110**, 096403 (2013)
- [187] Bernd Braunecker and Pascal Simon, Phys. Rev. Lett. **111**, 147202 (2013).
- [188] Jelena Klinovaja, Peter Stano, Ali Yazdani, and Daniel Loss, Phys. Rev. Lett. **111**, 186805 (2013).
- [189] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, B. A. Bernevig, and Ali Yazdani, Phys. Rev. B **88**, 020407(R) (2013).
- [190] Sho Nakosai, Yukio Tanaka, and Naoto Nagaosa, Phys. Rev. B **88** 180503(R) (2013).
- [191] Kim Poyhonen, Alex Weststrom, Joel Röntynen, and Teemu Ojanen, Phys. Rev. B **89**, 115109 (2014).
- [192] Falko Pientka, Leonid I. Glazman, and Felix von Oppen, Phys. Rev. B **89**, 180505(R) (2014).
- [193] Younghyun Kim, Meng Cheng, Bela Bauer, Roman M. Lutchyn, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **90**, 060401(R) (2014).
- [194] Falko Pientka, Leonid I. Glazman, and Felix von Oppen, Phys. Rev. B **88**, 155420 (2013).
- [195] Joel Röntynen and Teemu Ojanen, Phys. Rev. B **90**, 180503(R) (2014).
- [196] A. Heimes, P. Kotetes, and G. Schön Phys. Rev. B **90**, 060507(R) (2014).

- [197] Mathias Duckheim and Piet W. Brouwer, Phys. Rev. B **83**, 054513 (2011).
- [198] Shusa Deng, Lorenza Viola, and Gerardo Ortiz, Phys. Rev. Lett. **108**, 036803
- [199] Chris L. M. Wong and K. T. Law, Phys. Rev. B **86**, 184516 (2012).
- [200] Chris L. M. Wong, Jie Liu, K. T. Law, and Patrick A. Lee, Phys. Rev. B **88**, 060504(R) (2013).
- [201] Sho Nakosai, Jan Carl Budich, Yukio Tanaka, Bjorn Trauzettel, and Naoto Nagaosa, Phys. Rev. Lett. **110**, 117002 (2013)
- [202] Fan Zhang, C. L. Kane, and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. **111**, 056402 (2013).
- [203] E. Dumitrescu and Sumanta Tewari, Phys. Rev. B **88**, 220505(R) (2013).
- [204] Chuanwei Zhang, Sumanta Tewari, Roman M. Lutchyn, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **101**, 160401 (2008).
- [205] Masatoshi Sato, Yoshiro Takahashi, and Satoshi Fujimoto, Phys. Rev. Lett. **103**, 020401 (2008).
- [206] Liang Jiang, Takuya Kitagawa, Jason Alicea, A. R. Akhmerov, David Pekker, Gil Refae, J. Ignacio Cirac, Eugene Demler, Mikhail D. Lukin, and Peter Zoller, Phys. Rev. Lett. **106**, 220402 (2011).
- [207] Suk Bum Chung, Hai-Jun Zhang, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, Phys. Rev. B **84**, 060510 (2011).
- [208] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, S.C. Zhang, Science **314**, 1757 (2006).
- [209] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **104**, 106404 (2010).
- [210] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **78**, 220509(R) (2008).
- [211] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **80**, 212401 (2009).
- [212] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, 'Τοπολογικά κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν σε μη συμβατικούς υπεραγωγούς.' (2012).
- [213] V.Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers and L. P. Kouwenhoven, Science **336**, 1003 (2012).
- [214] M. T. Deng, C. L. Yu, G. Y. Huang, M. Larsson, P. Caroff, H. Q. Xu, Nano Lett. **12**, 6414 (2012).
- [215] L. P. Rokhinson, X. Liu, J. K. Furdyna, Nature Physics **8**, 795 (2012).
- [216] A. Das, Y. Ronen, Y. Most, Y. Oreg, M. Heiblum, H. Shtrikman, Nat. Phys. **8**, 887895 (2012).
- [217] H. O. H. Churchill, V. Fatemi, K. Grove-Rasmussen, M. T. Deng, P. Caro, H. Q. Xu, and C. M. Marcus, Phys. Rev. B **87**, 241401(R) (2013).
- [218] A. D. K. Finck, D. J. Van Harlingen, P. K. Mohseni, K. Jung, X. Li, Phys. Rev. Lett. **110**, 126406 (2013).
- [219] S. Nadj-Perge, I. K. Drozdov, J. Li, H. Chen, S. Jeon, J. Seo, A. H. MacDonald, B. Andrei Bernevig, and Ali Yazdani, Science **346**, 602 (2014).

- [220] Jin-Peng Xu et al., Phys. Rev. Lett. **114**, 017001 (2015).
- [221] T. Yokoyama, Y. Tanaka, and J. Inoue and Shou-Cheng Zhang, Phys. Rev. B **72**, 220504 (2005)
- [222] G. Binnig, C. F. Quate, and C. Gerber, Phys. Rev. Lett. **56**, 930–933 (1986), J. Tersoff and D. R. Hamann, Phys. Rev. B **31**, 805 (1985), H. J. Güntherodt and R. Wiesendanger, Scanning tunneling microscopy I (Springer-Verlag, Berlin, 1994), C. Lounis, arXiv:1404.0961 (2014).
- [223] K. T. Law, Patrick A. Lee, and T. K. Ng, Phys. Rev. Lett. **103**, 237001 (2009).
- [224] A. C. Potter and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **105**, 227003 (2010).
- [225] Andrew C. Potter and Patrick A. Lee, Phys. Rev. B **83**, 094525 (2011).
- [226] Andrew C. Potter and Patrick A. Lee, Phys. Rev. B **83**, 184520 (2011).
- [227] Y. Peng, F. Pientka, L. I. Glazman, and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **114**, 106801 (2015)
- [228] S. Tewari and J.D. Sau, Phys. Rev. Lett. **109**, 150408 (2012).
- [229] Jan Carl Budich and Eddy Ardonne, Phys. Rev. B **88**, 134523 (2013).
- [230] Y. T. Xing, H. Micklitz, E. Baggio-Saitovitch, and T. G. Rappoport, Phys. Rev. B **80**, 224505 (2009).
- [231] Y. T. Xing, H. Micklitz, T. G. Rappoport, M. V. Milosevic, I. G. Solorzano-Naranjo, and E. Baggio-Saitovitch, Phys. Rev. B **78**, 224524 (2008).
- [232] M. M. Doria, A. R. de C. Romaguera, M. V. Milosevic, and F. M. Peeters, Eur. Phys. Lett. **79**, 47006 (2007).
- [233] I. K. Marmoros, A. Matulis, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **53**, 2677 (1996).
- [234] M. Lange, M. J. Van Bael, Y. Bruynseraede, and V. V. Moshchalkov, Phys. Rev. Lett. **90**, 197006 (2003).
- [235] A. Yu. Aladyshkin, A. V. Silhanek, W. Gillijns, V. V. Moshchalkov, Superconductor Science and Technology **22**, 053001 (2009).
- [236] I. F. Lyuksyutov and V. L. Pokrovsky, Adv. Phys. **54**, 67 (2005).