



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΦΥΣΙΚΗΣ

Καταστάσεις Τάξης σε δισδιάστατες ετεροδομές
για τη Σπιντρονική

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΤΟΥ

ΗΛΙΑ ΠΑΠΑΘΑΝΑΣΙΟΥ

Επιβλέπων: Γεώργιος Βαρελογιάννης
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούλιος 2018

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα Αν. Καθηγητή, κύριο Γεώργιο Βαρελογιάννη για τη δυνατότητα που μου προσέφερε να εκπονήσω το θέμα της διπλωματικής μου μαζί του καθώς και για τη βοήθεια του στην περάτωση της. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου και τη γυναίκα μου για τη στήριξη, την οποία απολαμβάνω εκ μέρους τους, όλα αυτά τα χρόνια των σπουδών μου. Ιδιαίτερα χρήσιμη ήταν και η βοήθεια του dr. Λιβανά ο οποίος μου παρείχε κομμάτια από τον κώδικα της δικιάς του διατριβής καθώς και χρήσιμες συμβουλές και κατευθυντήριες γραμμές. Τέλος θα ήταν παράλειψη αν δεν ευχαριστούσα και τους καθηγητές του διατμηματικού μεταπτυχιακού προγράμματος Μικροσυστήματα και Νανοδιατάξεις για τον ζήλο με τον οποίο εκπληρώνουν τις ακαδημαϊκές τους υποχρεώσεις σε αυτή τη δύσκολη συγκυρία.

Περίληψη

Η σπιντρονική είναι η τεχνολογία η οποία χρησιμοποιεί το spin των ηλεκτρονίων για την επεξεργασία της πληροφορίας και την αποθήκευσή της. Αντικείμενο της μεταπτυχιακής εργασίας αυτής είναι η μοντελοποίηση ετεροδομών ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων που εμπλέκουν κβαντικές καταστάσεις τάξεως. Πιο συγκεκριμένα θα δοθεί ιδιαίτερη έμφαση σε κβαντικές καταστάσεις τάξεων όπως οι καταστάσεις κυμάτων πυκνότητας φορτίου και πυκνότητας spin. Οι συγκεκριμένες καταστάσεις εμπλέκονται στις βασικές διατάξεις της σπιντρονικής. Η μεταπτυχιακή εργασία αυτή θα βασιστεί στη μέθοδο του μέσου πεδίου εφαρμοσμένη πάνω σε ένα εκτεταμένο πρότυπο Hubbard δύο διαστάσεων προσαρμοσμένη έτσι ώστε μόνο η μια διάσταση να είναι στον πραγματικό χώρο ενώ η άλλη βρίσκεται στο χώρο των ορμών. Αυτό το γεγονός κάνει τους υπολογισμούς λιγότερο απαιτητικούς υπολογιστικά και δεν χάνει σε πληροφορία σε σχέση με τη μέθοδο όπου όλες οι διαστάσεις είναι στον πραγματικό χώρο.

Abstract

Spintronics is a new technology that uses the spin of electron to process and store information. Subject of this thesis is the modelisation of heterostructures of strongly correlated systems involving quantum order states. Especially emphasis will be given to specific quantum order states such as charge density wave and spin density waves. These quantum order states are involved in the basic spintronic devices. This thesis is based on a mean field approximation on an extended two-dimensional Hubbard Model such that only one dimension is on real space whereas the other dimension is on momentum space. This fact makes computation more efficient without losing any information compared with the fully real space calculations.

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	1
Περίληψη	3
Abstract	5
Περιεχόμενα	8
1 Εισαγωγή - Βασικές Διατάξεις Σπιντρονικής	9
1.1 Νόμος του Moore και προβλήματα στην κλασική ηλεκτρονική	9
1.2 Βασικές Διατάξεις Σπιντρονικής	11
1.2.1 Βαλβίδες Σπιν	11
1.2.2 Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας	13
1.2.3 Σύγκριση της Μαγνητοαντίστασης Σήραγγας με τη Γιγαντιαία Μαγνητοαντίσταση	14
1.3 Σπιν Τρανζιστορ και Ψευδο-σπιν Τρανζιστορ	15
1.3.1 Σπιν Τρανζιστορ	15
1.3.2 Ψευδο-σπιν Τρανζιστορ	18
1.4 Αντισηδηρομαγνητική Σπιντρονική	19
1.4.1 Μη σχετικιστικά φαινόμενα σπιντρονικής	22
1.4.2 Ανισοτροπική Μαγνητοαντίσταση	22
1.4.3 Μεταγωγή χρησιμοποιώντας την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς	23
1.4.4 Το φαινόμενο σπιν Hall στους αντισηδηρομαγνήτες	23
1.5 Υπάρχουσες εμπορικές εφαρμογές: MRAM	24
2 Βασικός Φορμαλισμός και επίλυση διατάξεων Σπιντρονικής με κβαντικές καταστάσεις τάξεως	27
2.1 Φορμαλισμός Δεύτερης Κβάντωσης	27
2.2 Στοιχεία Στατιστικής Φυσικής	31
2.3 Γενικό μοντέλο Χαμιλτονιανής σε στερεό σώμα	32
2.3.1 Διάφορα μοντέλα προσέγγισης Χαμιλτονιανής	33
2.4 Καταστάσεις Τάξεως	35

2.5	Κύματα πυκνότητας Φορτίου και Σπιν	36
2.5.1	Κύματα Πυκνότητας Φορτίου	36
2.5.2	Κύματα Πυκνότητας Σπιν	38
2.6	Συστήματα Ισχυρά συσχετισμένων Ηλεκτρονίων	39
2.7	Hubbard Model	40
2.8	Extended Hubbard Model	42
2.8.1	Extended Hubbard Model στον χώρο θέσεων	42
2.8.2	Extended Hubbard Model στον μικτό χώρο θέσεων - ορμών	45
2.9	Προσέγγιση μέσου πεδίου	46
2.9.1	Προσέγγιση μέσου πεδίου στον πραγματικό χώρο	48
2.9.2	Προσέγγιση μέσου πεδίου στον μικτό χώρο θέσεων-ορμών	48
2.10	Σπινორιακός Φορμαλισμός κατά Nambu	49
2.10.1	Σπινორιακός Φορμαλισμός κατά Nambu στο χώρο θέσεων	49
2.10.2	Σπινორιακός Φορμαλισμός κατά Nambu στο μικτό χώρο θέσεων-ορμών	50
3	Μέθοδος Υπολογισμού	53
3.1	Φορμαλισμός Bogoliubov - de Gennes	53
3.2	Συστήματα Ετεροδομών	56
3.2.1	Διαδικασία επίλυσης	57
3.3	Παραδείγματα Ετεροδομών που εμπλέκονται στη Σπιντρονική	58
3.3.1	Ετεροδομές Σιδηρομαγνήτη/Μονωτη/Σιδηρομαγνήτη	58
3.3.2	Ετεροδομές Αντισιδηρομαγνήτη/Μονωτή/Αντισιδηρομαγνήτη	62
3.3.3	Συμπέρασμα	67
	Βιβλιογραφία	69

Κεφάλαιο 1

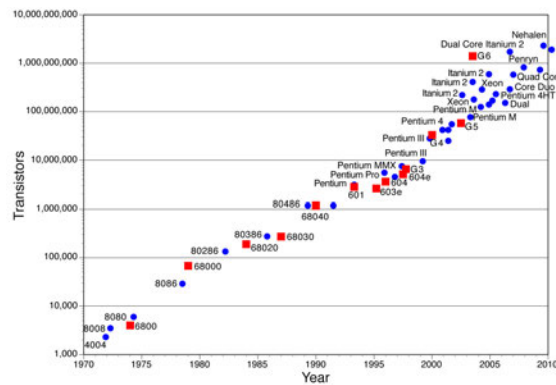
Εισαγωγή - Βασικές Διατάξεις Σπιντρονικής

1.1 Νόμος του Moore και προβλήματα στην κλασσική ηλεκτρονική

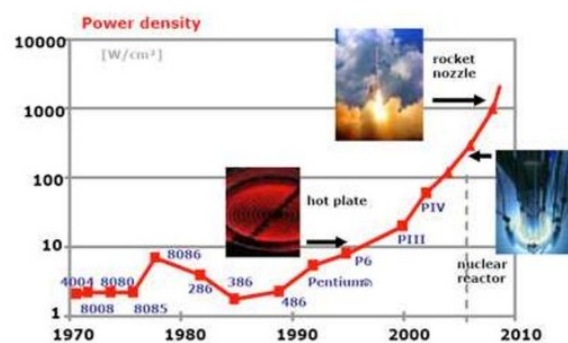
Τα τελευταία 60 χρόνια η ηλεκτρονική με τον ένα ή με τον άλλο τρόπο έχει διατελέσει σημαίνοντα ρόλο στην ζωή του σύγχρονου ανθρώπου και του έχει δώσει δυνατότητες ανήκουστες πριν από την εφεύρεση της. Είναι αρκετό να παραθέσει κανείς μερικά επιτυχημένα παραδείγματα εφαρμογών για να καταλάβει πόσο πολύ έχει επηρεάσει την καθημερινότητα μας. Τέτοια παραδείγματα είναι: οι υπολογιστές, τα ενσωματωμένα συστήματα, οι ενισχυτές αλλά και όλες αυτές οι υπηρεσίες που βασίζονται επάνω στο υλισμικό (hardware) για να υπάρξουν. Όπως λ.χ. το ίντερνετ και πάσης φύσεως δίκτυα όπως το ίντερνετ των συσκευών (Internet of Things, IOT) που τόσο άλλαξαν και αλλάζουν την ζωή μας. Ακόμα και η διαχείριση της ηλεκτρικής ενέργειας θα ήταν πολύ διαφορετική και δυσκολότερη αν δεν υπήρχαν οι ημιαγωγοί. Διατάξεις σαν τα θυρίστωρ, τα IGBT και τα Mosfet ισχύος θα ήταν ανύπαρκτες αφήνοντας μας με λίγες επιλογές για τη διαχείριση των υψηλών τάσεων και ρευμάτων. Νωρίς στην δεκαετία του 1960 ο συνιδρυτής της εταιρίας κατασκευής επεξεργαστών Intel, Gordon Moore προέβει σε μια τρομερή διατύπωση η οποία αργότερα θα ονομαζόταν νόμος του Moore. Η πρόβλεψη του ήταν ότι τα τρανζίστορ σε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα θα διπλασιάζονται κάθε δύο χρόνια!

Αυτή η πρόβλεψη έμοιαζε να επιβεβαιώνεται με τα χρόνια μέχρι τα τέλη της προηγούμενης χιλιετίας όπου τα προβλήματα άρχισαν να εμφανίζονται. Αυτά είχαν να κάνουν κυρίως με τις μεγάλες θερμοκρασίες οι οποίες αναπτυσσόταν μέσα στους επεξεργαστές κάτι που δεν ήταν δυνατόν να διαχειριστεί κανένα φυσιολογικό σύστημα ψύξης. Η λύση τελικά που τελικά ακολουθήθηκε ήταν η αρχιτεκτονική πολλών πυρήνων και η εκτέλεση υπολογισμών εν παραλλήλω.

Παρόλα αυτά λόγω της όλο και αυξανόμενης ολοκλήρωσης και της συνεπαγόμενης με αυτή μείωσης του μήκους καναλιού διάφορα άλλα προβλήματα έχουν παρουσιαστεί. Λόγω της



Σχήμα 1.1: Ο νόμος του Moore: Σε διάστημα μικρότερο των δύο ετών, ο αριθμός των τρανζίστορ ανά επιφάνεια θα διπλασιάζεται



Σχήμα 1.2: Η εκπεμπόμενη θερμότητα μέχρι τα τέλη της προηγούμενης χιλιετίας και οι προβλέψεις για τις απώλειες σε ενέργεια αν συνεχιζόταν το μοντέλο αυτό της αρχιτεκτονικής.

σμίχρυνσης των διαστάσεων των τρανζίστορ παρατηρούνται προβλήματα όπως αύξηση του παρασιτικού ρεύματος αποκοπής, αύξηση του παρασιτικού ρεύματος στις διεπαφές, αυξημένες διαφορές ανά παρτίδα (process variation). Επίσης το μήκος καναλιού στα τρανζίστορ έχει φτάσει να είναι συγκρίσιμο με την ακτίνα του Bohr θέτοντας το νόμο του Moore εν αμφιβόλω. Εκτός από τα παραπάνω όμως επίσης σημαντικό είναι το θέμα της μνήμης στην ηλεκτρονική καθώς η δυνατότητα να έχουμε ενσωματωμένη τη μνήμη στη λογική είναι περιορισμένη λόγω των διαφορετικών διαδικασιών που χρησιμοποιούνται για την υλοποίηση λογικών κυκλωμάτων και κυκλωμάτων μνήμης. Οπότε η μνήμη που είναι πιο κοντά στη λογική τήνει να είναι πιο ακριβή και λιγότερο πυκνή σε σχέση με αυτή που βρίσκεται μακρύτερα από τον επεξεργαστή και είναι πιο πυκνή. Η μνήμη που είναι δε πιο κοντά στην λογική δυστυχώς είναι πτητική και θα πρέπει συνεχώς να ανανεώνεται έτσι ώστε να μην χάνεται η πληροφορία. Γεγονός που σημαίνει μεγαλύτερη κατανάλωση ενέργειας και συνάμα υποχρέωση για καλύτερη απαγωγή της θερμότητας.

Δεδομένων των παραπάνω μια μνήμη βασισμένη στην σπιντρονική θα μπορούσε να είναι η εναλλακτική. Μια μνήμη δηλαδή που χρησιμοποιεί το βαθμό ελευθερίας του σπιν και όχι το φορτίο του ηλεκτρονίου για να αποθηκεύσει την πληροφορία. Οι μνήμες αυτές παρου-

σιάζουν πληθώρα προτερημάτων. Πιο συγκεκριμένα μια μνήμη βασισμένη στη σπιντρονική είναι μη πτητική και πιο εύκολα ενσωματωμένη με τη λογική που πιθανότατα θα την επιτελεί η ηλεκτρονική, θα έχει υψηλούς χρόνους διαβάσματος (read times) και γραψίματος (write times) καθώς και χαμηλότερη κατανάλωση ενέργειας. Αναφερόμαστε μάλιστα περισσότερο στην εκτέλεση της λειτουργίας της μνήμης και όχι της λογικής από την σπιντρονική γιατί εκεί υπήρξαν τα πιο ελπιδοφόρα αποτελέσματα, χωρίς αυτό να σημαίνει ότι αργότερα δε θα έχουμε το ίδιο ενθαρρυντικά αποτελέσματα και στο τομέα της λογικής. Ένα επιπλέον επιθυμητό χαρακτηριστικό αυτής της μνήμης είναι η ανθεκτικότητα της σε ακτινοβολία (Radiation Hardened) και σε υψηλές θερμοκρασίες .

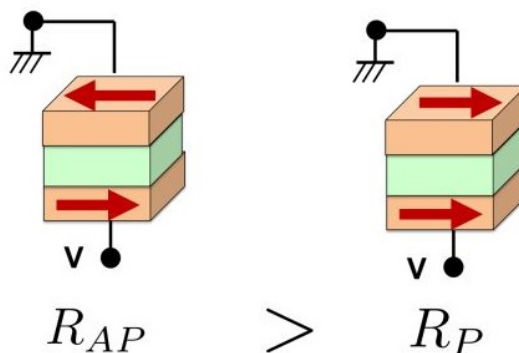
1.2 Βασικές Διατάξεις Σπιντρονικής

1.2.1 Βαλβίδες Σπιν

Οι βαλβίδες σπιν (spin valves) βασίζονται στο φαινόμενο της γιγάντιας μαγνητοαντίστασης που ανακαλύφθηκε ανεξάρτητα από τους Albert Fert και Peter Grünberg οι οποίοι κέρδισαν και το βραβείο Νόμπελ για αυτή τους την ανακάλυψη το 2017. Το φαινόμενο το οποίο παρατήρησαν ήταν μια μεγάλη αλλαγή στην αντίσταση όταν η μαγνήτιση σιδηρομαγνητικών διεπαφών άλλαζε από παράλληλη σε αντιπαράλληλη^{1.3}. Η διαφορά στην αντίσταση δίνεται από τη σχέση:

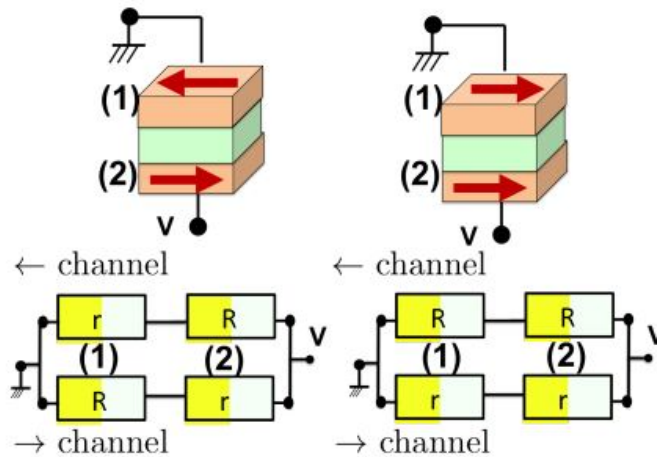
$$GMR \equiv \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} \quad (1.1)$$

όπου R_{AP} η αντίσταση όταν η μαγνήτιση είναι αντιπαράλληλη στα δύο σιδηρομαγνητικά στρώματα και R_P η αντίσταση όταν η μαγνήτιση είναι παράλληλη στα δυο σιδηρομαγνητικά στρώματα. Η αλλαγή της αντίστασης που προκαλούνταν από αυτό το φαινόμενο ήταν της τάξης του 80% το οποίο κατά την εποχή της ανακάλυψης του φαινομένου θεωρούνταν πολύ υψηλό εξού και ο όρος 'γιγαντιαία'.



Σχήμα 1.3: Σχηματική αναπαράσταση του φαινομένου της γιγάντιας μαγνητοαντίστασης. Δυο σιδηρομαγνητικά στρώματα διαχωρισμένα από ένα μη μαγνητικό μεταλλικό στρώμα. Η αντίσταση της συσκευής εξαρτάται από τον προσανατολισμό των μαγνητών. Ο αντιπαράλληλος προσανατολισμός έχει μεγαλύτερη αντίσταση από τον παράλληλο [3].

Οι βάσεις για τη θεωρητική εξήγηση του φαινομένου της γιγαντίας μαγνητοαντίστασης τοποθετείται πίσω στο 1936 και συγκεκριμένα στον Neville Mott[4]. Ο Mott έδειξε ότι η αγωγιμότητα στους σιδηρομαγνήτες μπορεί να χωριστεί σε δύο είδη. Το ένα αφορά τους φορείς πλειονότητας στο μαγνήτη και το άλλο αφορά τους φορείς μειονότητας για χαμηλές θερμοκρασίες, όταν τα μαγνόνια στο μαγνήτη είναι παγωμένα έτσι ώστε να οι σχεδόν δεν ανακατεύουν τις δυο αυτές αγωγιμότητες[14]. Ο τρόπος αυτός του χειρισμού των spin-up και spin-down καταστάσεων έγινε γνωστός σαν μοντέλο των 2 ρευμάτων. Αργότερα το μοντέλο των δύο ρευμάτων αναλύθηκε και επεκτάθηκε από τους Valert και Fert στην έρευνα τους για το φαινόμενο της γιγαντιαίας μαγνητοαντίστασης.



Σχήμα 1.4: Το μοντέλο δύο ρευμάτων για τις βαλβίδες σπιν: Η παρατήρηση ότι οι φορείς μειονότητας και πλειονότητας θα έχουν διαφορετική αντίσταση. Το κανάλι (\rightarrow) αφορά την αγωγιμότητα των σπιν πλειονότητας και το κανάλι (\leftarrow) τα σπιν μειονότητας.

Χρήσιμο είναι για την ανάλυση της βαλβίδας σπιν και του φαινομένου της γιγαντιαίας μαγνητοαντίστασης το ισοδύναμο κύκλωμα του σχήματος (1.4). Το ισοδύναμο αυτό κύκλωμα προκύπτει με την απλή παραδοχή ότι οι δύο φορείς των διαφορετικών κατευθύνσεων του σπιν έχουν διαφορετικές αγωγιμότητες ανάλογα με την κατεύθυνση της μαγνήτισης στο άλλο στρώμα του σιδηρομαγνήτη. Από το απλό ισοδύναμο κύκλωμα του σχήματος (1.4) προκύπτει ότι:

$$R_P = \frac{2rR}{R+r} \qquad R_{AP} = \frac{R+r}{2} \qquad (1.2)$$

χρησιμοποιώντας τις παραπάνω σχέσεις η σχέση για τη μεταβολή της GMR, που είχε οριστεί προηγουμένως ως $GMR = \frac{R_{AP}-R_P}{R_P}$ μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$GMR = \frac{(R-r)^2}{4rR} \qquad (1.3)$$

Μπορεί να οριστεί μια καινούρια ποσότητα, η πόλωση της διεπιφάνειας η οποία ποσοτικοποιεί τη διαφορά μεταξύ R και r , σαν $P \equiv \frac{R-r}{R+r}$, οπότε η GMR μπορεί να οριστεί σαν.

$$GMR = \frac{P^2}{1 - P^2} \quad (1.4)$$

Από την εξίσωση (1.4) φαίνεται ότι αυξάνοντας την επιλεξιμότητα των φορέων του σπιν (P), πράγμα το οποίο μπορεί να συμβεί λόγω χάρη χρησιμοποιώντας ημιμεταλικούς μαγνήτες που δέχονται μόνο φορείς ενός είδους σπιν ($P = 1$), η GMR μπορεί να μεταβληθεί απεριόριστα. Μέσω αυτής της απλής ανάλυσης που μας παρέχει το μοντέλο δύο ρευμάτων για το φαινόμενο της γιγάντιας μαγνητοαντίστασης έχουν ερμηνεύσει πλήθος ερευνητικών αποτελεσμάτων και οι βασικοί του παράμετροι (όπως το P) εξηγούν ικανοποιητικά αυτά τα αποτελέσματα.

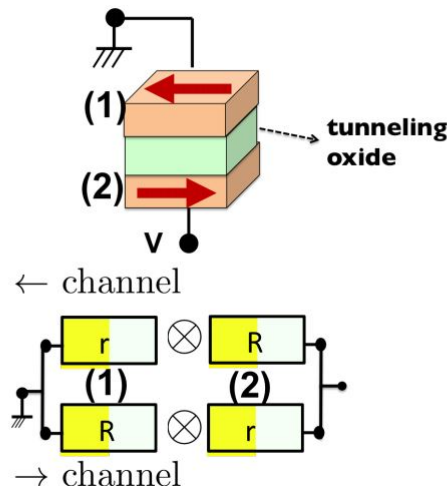
1.2.2 Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας

Οι Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας (Magnetic Tunnel Junction) ή εν συντομία MTJ, αποτελούν αντικείμενο εκτενέστατης μελέτης και παραγωγής για τις εταιρίες οι οποίες δραστηριοποιούνται στον τομέα της σπιντρονικής. Πιο συγκεκριμένα η τεχνολογία Magnetic Random Access Memory (MRAM) έχει σαν βάση της, τις MTJ και φιλοδοξεί σταδιακά να αντικαταστήσει τις τεχνολογίες και DRAM και SRAM εγκαθιδρύοντας τη θέση της σαν γενική μνήμη. Ενώ τα πρώτα αποτελέσματα για τις MTJ δεν ήταν τόσο ενθαρρυντικά σε σχέση με τα αντίστοιχα για τις βαλβίδες σπιν, δυο παράγοντες διαδραμάτισαν πρωτεύοντα ρόλο έτσι ώστε να θεωρούνται σήμερα το μέλλον στην σπιντρονική.

- **Η υψηλή μαγνητοαντίσταση σήραγγας** Οι Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας είχαν μελετηθεί πολύ πριν ανακαλυφθεί το φαινόμενο της γιγαντιαίας μαγνητοαντίστασης στις βαλβίδες σπιν. Το 1975, ο Γάλλος φυσικός Julliere μέτρησε την αγωγιμότητα Μαγνητικών Διεπαφών Σήραγγας Fe-Ge-Co. Παρατήρησε μια αλλαγή στη μαγνητοαντίσταση της τάξης του 26% σε αυτές τις διατάξεις. Επίσης ο Julliere εισήγαγε και μια φορμουλα για τον υπολογισμό της Μαγνητοαντίστασης σήραγγας (TMR) η οποία χρησιμοποιείται ακόμα. Παρόλα αυτά οι MTJ παραγκωνίστηκαν με την ανακάλυψη της γιγάντιας μαγνητοαντίστασης το 1988. Επανήλθαν στο προσκήνιο της επιστημονικής κοινότητας όταν το 2004 διεπαφές βασισμένες σε οξειδία του MgO (όπως το Fe-MgO-Fe) παρατηρήθηκε αλλαγή στη μαγνητοαντίσταση της τάξεως του 180% από τον Parkin και άλλους, οι οποίοι ακολούθησαν μια θεωρητική ανάλυση των Butler et al. οι οποίοι προέβλεψαν ότι αν χρησιμοποιηθούν διεπαφές βασισμένες στο MgO η μαγνητοαντίσταση σήραγγας θα αυξανόταν κατά πολλές τάξεις μεγέθους. Οι τιμές τις μαγνητοαντίστασης που μπορούν να επιτευχθούν σήμερα στις Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας είναι τις τάξεως του 600%.
- **Η ανακάλυψη της ροπής μεταφοράς σπιν** Μία ακόμα ανακάλυψη η οποία επηρέασε την ανάπτυξη των Μαγνητικών Διεπαφών Σήραγγας (καθώς και των βαλβίδων σπιν) ήταν η ροπή μεταφοράς σπιν. Η εφαρμογή που βρήκε αυτό το φαινόμενο στις MTJ βασίζεται στο γεγονός ότι ένα ρεύμα με πόλωση σπιν μπορεί να αντιστρέψει τη μαγνήτιση ενός αρκετά λεπτού σιδηρομαγνητικού στρώματος[19]. Μια σειρά πειραμάτων τα επόμενα χρόνια επιβεβαίωσαν τις θεωρητικές προβλέψεις [10, 8].

1.2.3 Σύγκριση της Μαγνητοαντίστασης Σήραγγας με τη Γιγαντιαία Μαγνητοαντίσταση

Οι Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας έχουν πολλά κοινά με τις βαλβίδες σπιν όπου το ρεύμα ρέει παράλληλα στο επίπεδο. Η ειδοποιός διαφορά είναι το ενδιάμεσο στρώμα όπου στις Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας είναι οξειδίο ενώ στις βαλβίδες σπιν είναι μη-μαγνητικό αγώγιμο υλικό. Έτσι η προκύπτουσα αντίσταση στις Μαγνητικές Διεπαφές Σήραγγας είναι τις τάξεως των $\text{k}\Omega$ ενώ στις βαλβίδες σπιν είναι τις τάξεως των Ω . Μπορούμε λοιπόν να χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο δύο ρευμάτων που χρησιμοποιήθηκε στις βαλβίδες σπιν για να μοντελοποιήσουμε τις διεπαφές μαγνητοαντίστασης σήραγγας και να αναλύσουμε τις διαφορές τους με τις βαλβίδες σπιν.



Σχήμα 1.5: Η υπόθεση ότι η αντίσταση σειράς των δύο αντιστάσεων δίνεται από τον πολλαπλασιασμό τους ($R_{12} = KR \times r$) αντί για την πρόσθεση τους οδηγεί στο σωστό αποτέλεσμα για την μαγνητοαντίσταση σήραγγας της MTJ. [3, 5]

Αν αντί να θεωρήσουμε ότι η αντίσταση σειράς στο ίδιο κανάλι δεν δίνεται από την άθροιση των δυο αντιστάσεων ($R_{12} = R + r$) αλλά από τον πολλαπλασιασμό των δυο αντιστάσεων (δηλαδή $R_{12} = KR \times r$ με K έναν παράγοντα κανονικοποίησης) όπως στο σχήμα(1.5), τότε καταλήγουμε στους τύπους που κατέληξε και ο Julliere για αυτές τις διατάξεις. Υπολογίζοντας λοιπόν το R_P και το R_{AP} λαμβάνοντας υπόψιν τα παραπάνω.

$$R_P = \frac{KR^2r^2}{R^2 + r^2} \quad R_{AP} = \frac{KRr}{2} \quad (1.5)$$

Η σχέση για την TMR προκύπτει έτσι:

$$TMR = \frac{R_{AP} - R_P}{R_P} = \frac{(R - r)^2}{2Rr} \quad (1.6)$$

Ορίζοντας αναλόγως με την περίπτωση των βαλβίδων σπιν την πόλωση ως $P \equiv \frac{R-r}{R+r}$ μπορούμε να το αντικαταστήσουμε στην εξίσωση(1.6) και να καταλήξουμε στην:

$$TMR = \frac{2P^2}{1 - P^2} \quad (1.7)$$

που είναι η σχέση που πρότεινε ο Julliere το 1975. Σημειώνεται ότι η εξίσωση (1.7) πολλαπλασιάζεται επί 2 σε σχέση με την αντίστοιχη σχέση (1.4) για τη γιγαντιαία μαγνητοαντίσταση. Διαισθητικά αυτό σημαίνει ότι η μεταφορά των ηλεκτρονίων δεν είναι ένα φαινόμενο διάχυσης όπως στις βαλβίδες σπίν αλλά ένα φαινόμενο σήραγγας όπου προστίθενται δυο αντιστάσεις με μήκος (l_1), αντίσταση $R = e^{l_1}$ και μήκος (l_2), αντίσταση $R = e^{l_2}$. Οπότε η συνολική αντίσταση είναι.

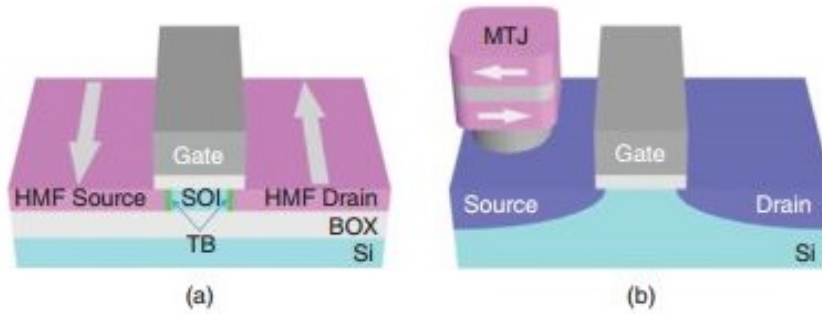
$$R = e^{l_1+l_2} = \underbrace{e^{l_1}}_{R_1} \underbrace{e^{l_2}}_{R_2} \quad (1.8)$$

1.3 Σπιν Τρανζίστορ και Ψευδο-σπιν Τρανζίστορ

Το σπιν τρανζίστορ ανήκει σε μια νέα οικογένεια ηλεκτρονικών συσκευών οι οποίες φιλοδοξούν να ενώσουν τις συνήθεις ιδιότητες ενός τρανζίστορ με αυτές μιας συσκευής που βασίζεται στην μαγνητοαντίσταση και στο σπιν. Ακολουθώντας την πρώτη πρόταση για το σπιν τρανζίστορ των Datta και Das[6] και του Johnson[9], προτάθηκε μια μεγάλη γκάμα σπιν τρανζίστορ βασισμένα σε διάφορες λειτουργικές αρχές. Ένας τομέας που είναι ιδιαίτερα ελκυστικός για εφαρμογές του σπιν τρανζίστορ είναι η ολοκληρωμένη ηλεκτρονική και η τεχνολογία συμπληρωματικού μετάλλου οξειδίου (cmos). Δεδομένου ότι η ικανότητα επεκτασιμότητας και ολοκλήρωσης είναι απαραίτητη για τα ολοκληρωμένα κυκλώματα που χρησιμοποιούν σπιν τρανζίστορ κατά τρόπο ανάλογο με τα ολοκληρωμένα κυκλώματα τύπου FET, τα σπιν τρανζίστορ θα πρέπει να διατηρήσουν τις δυο αυτές ιδιότητες των υφιστάμενων ολοκληρωμένων κυκλωμάτων. Συγκεκριμένα σπιν τρανζίστορ που βασίζονται σε CMOS διατάξεις, τα οποία ονομάζονται spin-functional MOSFETs, αναμένεται να γίνουν τα δομικά κύτταρα για χαμηλής κατανάλωσης ολοκληρωμένα κυκλώματα. Τα spin-functional MOSFETs χωρίζονται σε δύο κατηγορίες, τα σπιν MOSFET και τα ψευδο-σπιν MOSFET. Το σπιν τρανζίστορ είναι σπιν-τρανζίστορ πεδίου το οποίο έχει πηγή και υποδοχή από σιδηρομαγνήτη, το ψευδοσπιν MOSFET είναι ένα κύκλωμα το οποίο αναπαράγει τη λειτουργία του σπιν-τρανζίστορ χρησιμοποιώντας ένα συνηθισμένο MOSFET και μια μαγνητική διεπαφή σήραγγας (MTJ).

1.3.1 Σπιν Τρανζίστορ

Η βασική δομή του σπιν MOSFET αποτελείται από έναν MOS πυκνωτή και μια πηγή(S) και μια υποδοχή(D) από σιδηρομαγνήτη. Τα σπιν τρανζίστορ μπορούν να κατηγοριοποιηθούν από τη δομή της πηγής και της υποδοχής (S/D). Στο σχήμα(1.6) φαίνεται μια υλοποίηση του σπιν MOSFET. Ένας σιδηρομαγνήτης με υψηλή πόλωση σπιν χρησιμοποιείται για τις περιοχές τις πηγής και της υποδοχής (S/D) για να δημιουργήσει το σπιν-πολωμένο ρεύμα στο κανάλι. Ο σιδηρομαγνήτης (S/D) πρέπει να έχει την κατάλληλη αντίσταση επαφής έτσι ώστε να μην υφίσταται το πρόβλημα της ασυμμετρίας αγωγιμότητας[17]. Επίσης ο σιδηρομαγνήτης (S/D) δεν πρέπει μόνο να λειτουργεί σαν ηλεκτρική επαφή για την κατάσταση αγωγής (on state) αλλά θα πρέπει να λειτουργεί και σαν επαφή αποκοπής (blocking contact) για τα ρεύματα διαρροής κατά την αποκοπή (off-state). Την θέση της επαφής αποκοπής μπορεί να λάβει ένα λεπτό κανάλι πυριτίου-σε-μονωτή (SOI) όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.6(b).



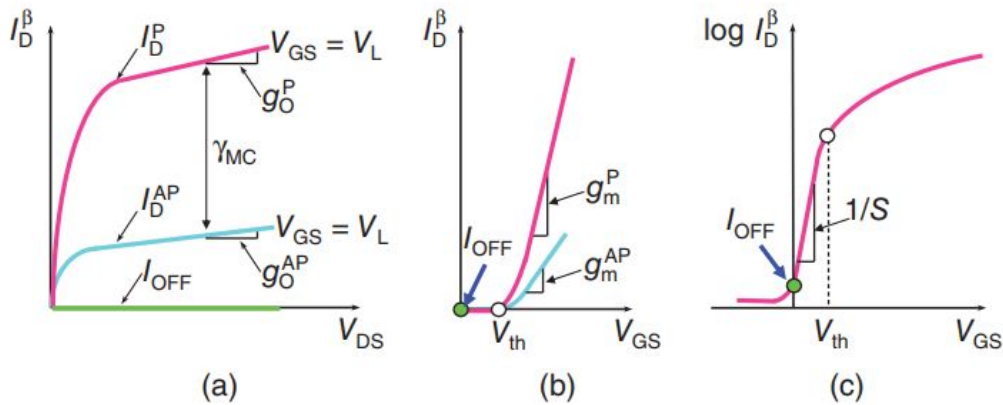
Σχήμα 1.6: (a) Δομή της διάταξης του σπιν-MOSFET, η οποία αποτελείται από μια διάταξη MOSFET σε συνδυασμό με ημιμεταλλικούς σιδηρομαγνήτες για πύλη και υποδοχή. (b) Σχηματική παρουσίαση ενός ψεύδο-σπιν MOSFET. Η μαγνητική διεπαφή σήραγγας δεν χρειάζεται να δημιουργηθεί ακριβώς από πάνω από την περιοχή της πυγής του MOSFET, θα μπορούσε να υλοποιηθεί σε πολυεπίπεδα διασυνδεδεμένα στρώματα.[1]

Ημιμεταλλικοί σιδηρομαγνήτες όπως τα κράματα full-Heusler, είναι οι πιο υποσχόμενες ενώσεις για την δημιουργία ενός σιδηρομαγνήτη με υψηλή πόλωση σπιν (HSP-FM). Οι ημιμεταλλικοί σιδηρομαγνήτες μπορούν θεωρητικά να έχουν πόλωση σπιν μέχρι και 100% στην ενέργεια Fermi. Στην πραγματικότητα ο ημιμεταλλικός χαρακτήρας τους υποβαθμίζεται λόγω ατελειών και της επίδρασης της επαφής διασύνδεσης. Παρόλα αυτά έχει παρατηρηθεί πόλωση σπιν μεγαλύτερη του 90%[18]), η οποία και είναι επαρκής για τη λειτουργία των σπιν τρανζίστορ.

Οι διεπαφές Schottky μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη δημιουργία του σιδηρομαγνήτη (S/D) του σπιν MOSFET, χρησιμοποιώντας σιδηρομαγνήτη με υψηλή πόλωση σπιν. Η λειτουργία του τρανζίστορ μπορεί να πραγματοποιηθεί με τον έλεγχο του μήκους του φραγμού Schottky μεταβάλλοντας την τάση στην πύλη. Ο έλεγχος του ύψους του φραγμού Schottky (της αντίστασης επαφής) είναι απαραίτητος για την εξάλειψη του φαινομένου της ασυμμετρίας αγωγιμότητας. Επίσης στη διεπαφή HSP-FM/Si θα εμφανιστεί το φαινόμενο pinning της επιφάνειας Fermi το οποίο θα δημιουργήσει μια υψηλή αντίσταση επαφής. Οπότε η αντίσταση επαφής της διεπαφής S/D θα πρέπει να μειωθεί σε ένα σημαντικό επίπεδο έτσι ώστε να μην παρατηρηθεί το φαινόμενο της ασυμμετρίας αγωγιμότητας. Διεπαφές σήραγγας οι οποίες χρησιμοποιούν ένα πολύ λεπτό μονωτικό στρώμα μπορεί να χρησιμοποιηθούν ώστε να αποφευχθεί το φαινόμενο του pinning της επιφάνειας Fermi.

Τα σπιν τρανζίστορ έχουν σχεδιαστεί για να δημιουργήσουν δύο σταθερές καταστάσεις σχετικής μαγνήτισης μεταξύ της πηγής και της υποδοχής, το ρεύμα αγωγής (on current) μπορεί να μεταβληθεί από αυτές τις καταστάσεις σχετικής μαγνήτισης. Στο σχήμα (1.7) φαίνονται τα ιδανικά χαρακτηριστικά εξόδου του σπιν τρανζίστορ, όπου I_D^P και I_D^{AP} τα ρεύματα υποδοχής για παράλληλη και αντιπαράλληλη σχετική μαγνήτιση αντίστοιχα. Τα ρεύματα εξόδου είναι διαφορετικά για την παράλληλη και την αντιπαράλληλη σχετική μαγνήτιση ακόμα και όταν οι συνθήκες πόλωσης είναι οι ίδιες.

Η διαγωγιμότητα g_m^β ορίζεται σαν η δυνατότητα οδήγησης του ρεύματος εξόδου από την τάση εισόδου ή πιο απλά $g_m^\beta = \partial I_D^\beta / \partial V_{GS}$ όπου V_{GS} η τάση μεταξύ πύλης και πηγής και το β αφορά την παράλληλη ($\beta = P$) ή την αντιπαράλληλη ($\beta = AP$) σχετική μαγνήτιση. Οπότε η διαγωγιμότητα g_m^β δίνεται από την κλίση της καμπύλης $I_D^\beta - V_{GS}$ όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.7(b). Μεγάλες και μικρές τιμές της διαγωγιμότητας g_m^β μπορούν να επιτευχθούν για παράλληλη και αντιπαράλληλη μαγνήτιση αντίστοιχα. Αυτή η δυνατότητα συχνά αναφέρεται ως σπιν-εξαρτώμενη χαρακτηριστική εξόδου ή χαρακτηριστικά εξόδου που εξαρτώνται από τη σχετική μαγνήτιση. Η μεταβλητή διαγωγιμότητα των σπιν τρανζίστορ δίνει έναν επιπλέον βαθμό ελευθερίας στον έλεγχο του ρεύματος εξόδου. Επιπλέον η διάταξη της μαγνήτισης σε ένα σπιν τρανζίστορ μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως μη πτητική δυαδική πληροφορία. Ας σημειωθεί επίσης ότι η διάταξη της σχετικής μαγνήτισης σε ένα σπιν τρανζίστορ χρησιμοποιείται για να δημιουργήσει δύο διαφορετικά ρεύματα αγωγής (και όχι για την αγωγή ή την αποκοπή του σπιν τρανζίστορ). Η αποκοπή του σπιν τρανζίστορ επιτυγχάνεται όπως και στα κανονικά τρανζίστορ μεταβάλλοντας την πόλωση της πύλης.



Σχήμα 1.7: (a) Ιδανικά ρεύματα εξόδου ενός σπιν τρανζίστορ, όπου I_D^P και I_D^{AP} τα ρεύματα υποδοχής για παράλληλη και αντιπαράλληλη σχετική μαγνήτιση αντίστοιχα. (b) Η χαρακτηριστική καμπύλη $I_D^\beta - V_{GS}$. Το g_m^β βρίσκεται από την κλίση της καμπύλης $I_D^\beta - V_{GS}$. (c) Ημιλογαριθμική παρουσίαση του σχήματος (b)[1].

Για να μπορέσει να ποσοτικοποιηθεί η αλλαγή του ρεύματος εξόδου συναρτήσει της σχετικής διάταξης μαγνήτισης, ορίζεται το πηλίκο του μαγνητορεύματος σαν ένας δείκτης απόδοσης. Το πηλίκο του μαγνητορεύματος, γ_{MC} , ορίζεται ως εξής:

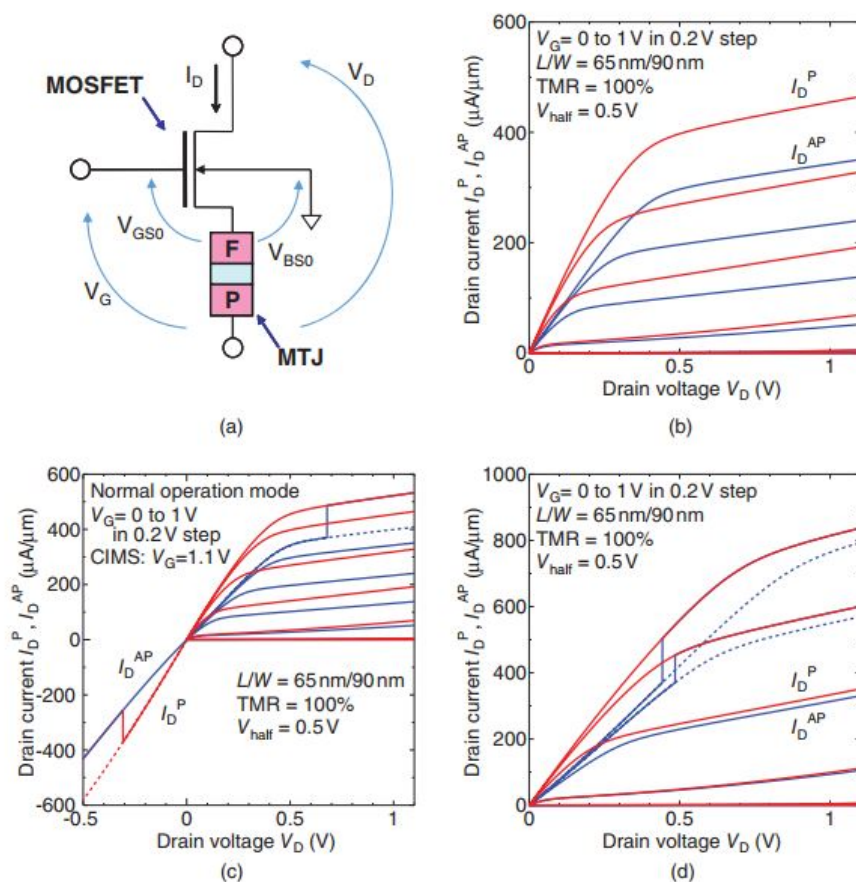
$$\gamma_{MC} = \frac{I_D^P - I_D^{AP}}{I_D^{AP}} \quad (1.9)$$

Μεγάλη γ_{MC} είναι επιθυμητή για εφαρμογές μη πτητικής μνήμης. Ενώ για τα λογικά κυκλώματα προτιμώνται μεσαίες τιμές του γ_{MC} εξαιτίας του ανταγωνισμού μεταξύ του γ_{MC} και της καθυστέρησης διάδοσης. Για να είναι μεγάλος ο λόγος του γ_{MC} θα πρέπει το I_D^P να είναι μεγάλο σε σχέση με το I_D^{AP} . Όμως ο κύριος παράγοντας της καθυστέρησης διάδοσης στα ηλεκτρονικά κυκλώματα είναι η φόρτιση και η εκφόρτιση χωρητικοτήτων, εύκολα αντιλαμβάνε-

ται κανείς ότι ένα μικρό I_D^{AP} θα εντείνει αυτό το πρόβλημα. Βέβαια είναι δυνατό με κατάλληλη σχεδίαση των κυκλωμάτων να αποφύγουμε τέτοιες καταστάσεις και να συνδυάσουμε υψηλές τιμές της γ_{MC} με αποδεκτή καθυστέρησης διάδοσης.

1.3.2 Ψευδο-σπιν Τρανζίστορ

Ένας εντελώς διαφορετικός τρόπος να υλοποιήσει κανείς μια διάταξη με τα χαρακτηριστικά του σπιν τρανζίστορ είναι το ψευδο-σπιν τρανζίστορ (PS-MOSFET). Το ψευδο-σπιν τρανζίστορ υλοποιεί τις λειτουργίες ενός σπιν τρανζίστορ χρησιμοποιώντας ένα συνηθισμένο MOSFET και μια MTJ. Στο σχήμα 1.8(a) φαίνεται το κυκλωματικό ισοδύναμο του ψευδο-σπιν MOSFET.



Σχήμα 1.8: (a)Κυκλωματικό ισοδύναμο ενός ψευδο-σπιν MOSFET. (b) Χαρακτηριστικά εξόδου ενός ψευδο-σπιν MOSFET. (c) εναλλαγή μαγνητίσεως επαγόμενη από ρεύμα (CIMS) του ψευδο-σπιν MOSFET, κατά την οποία το ελεύθερο στρώμα της MTJ συνδέεται με την πηγή του MOSFET. (d) Χαρακτηριστικά εξόδου ενός άλλου τύπου ψευδο-σπιν τρανζίστορ όπου η MTJ συνδέεται στην υποδοχή του MOSFET. Οι διακεκομμένες καμπύλες στο (c) και (d) είναι τα ρεύματα εξόδου άμα δεν υπάρχει εναλ Η κατάλληλη τιμή του γ_{MC} αλλάζει ανάλογα με την εφαρμογή. Μια υψηλή τιμή του λαγή μαγνητίσεως επαγόμενη από ρεύμα. [1]

Η πτώση τάσης της MTJ που συνδέεται στην πηγή του MOSFET έρχεται σαν ανάδραση

στην πύλη, ο βαθμός της αρνητικής ανάδρασης εξαρτάται από την αντίσταση της MTJ. Έτσι η τάση εισόδου V_{GS0} και η τάση του υποστρώματος V_{BS0} μπορεί να μεταβληθεί ανάλογα με τη διεύθυνση πολώσεως της MTJ ακόμα και όταν η V_G είναι σταθερή. Οπότε το ψευδο-σπιν MOSFET μπορεί να οδηγήσει υψηλά και χαμηλά ρεύματα τα οποία ελέγχονται από το προφίλ μαγνήτισης της MTJ όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.8(b).

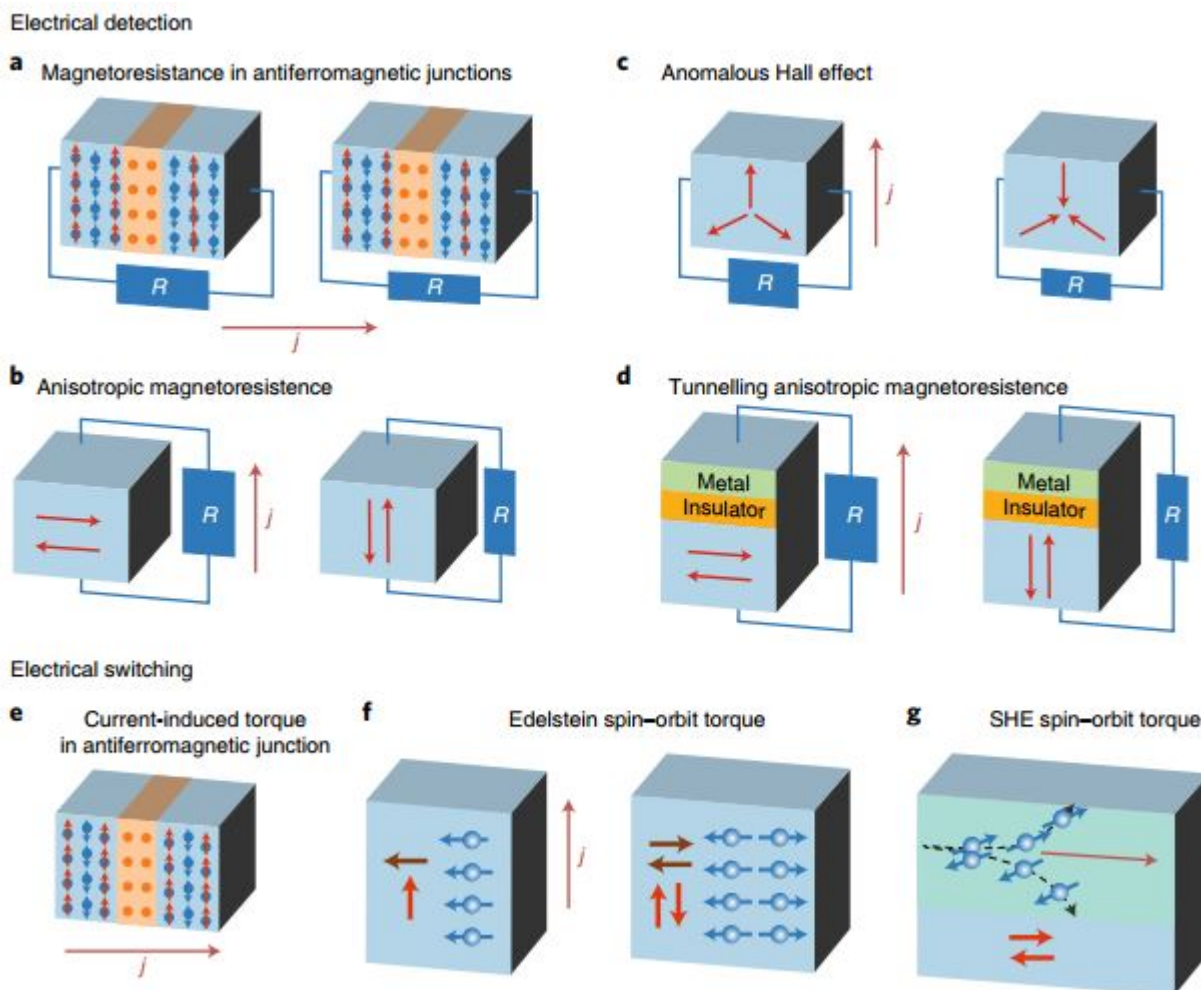
Παρόλο που η μεταβολή της αντίστασης σειράς που οφείλεται στην MTJ επηρεάζει το ρεύμα εξόδου του ψευδο-σπιν MOSFET, η αρνητική ανάδραση είναι πιο αποτελεσματικός μηχανισμός για τη ρύθμιση του ρεύματος. Το ψευδο-σπιν τρανζιστορ μπορεί να αναπαραγάγει τις ιδιότητες του σπιν-τρανζιστορ και είναι το πιο εύκολα υλοποιήσιμο σπιν-τρανζιστορ εάν βασιστούμε στην παρούσα τεχνολογία MRAM (τεχνολογία ροπής μεταφοράς σπιν MRAM). Άμα η MTJ συνδεθεί στην υποδοχή του MOSFET, η διαφορά στα ρεύματα υποδοχής μεταξύ της παράλληλης και της αντιπαράλληλης διαμόρφωσης της μαγνήτισης μειώνεται με το V_{DS} , όπως φαίνεται και στο σχήμα 1.8(d). Αυτό οφείλεται στην απουσία της αρνητικής ανάδρασης. Όμως αυτό έχει επίπτωση και στα ρεύματα υποδοχής τα οποία είναι μεγαλύτερα από αυτά της περίπτωσης όπου η MTJ συνδέεται στην πηγή. Αν και οι δυο διαμορφώσεις μπορούν να λειτουργήσουν σαν σπιν-τρανζιστορ, η κατάλληλη τοπολογία επιλέγεται σύμφωνα με τις ανάγκες της εκάστοτε υλοποίησης.

Όπως περιγράφηκε παραπάνω, τα σπιν τρανζιστορ μπορούν ουσιαστικά να υλοποιηθούν από την αρχιτεκτονική PS-MOSFET με βάση την παρούσα τεχνολογία MRAM. Ο σχεδιασμός των PS-MOSFET μπορεί εύκολα να επιτευχθεί χρησιμοποιώντας ένα γενικό προσομοιωτή κυκλώματος όπως το SPICE με ένα κατάλληλο μοντέλο κυκλώματος MTJ [3, 22]. Επομένως, τα σπιν τρανζιστορ μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε λογικά κυκλώματα CMOS πολύ σύντομα, όταν προστεθεί η τεχνολογία MRAM στη πλατφόρμα της λογικής CMOS.

1.4 Αντισιδηρομαγνητική Σπιντρονική

Οι σιδηρομαγνήτες υπήρξαν και είναι βασικά υλικά για εφαρμογές στην σπιντρονική. Αντίθετα οι αντισιδηρομαγνήτες, που αντιπροσωπεύουν μια πιο κοινή μορφή μαγνητικών διατάξεων της ύλης, εκτός από τη χρήση τους για να εδραιώσουν έναν μαγνητικό προσανατολισμό αναφοράς μέσω του φαινομένου της ανταλλαγής πόλωσης (exchange bias) έχουν βρει λιγότερες εφαρμογές στο πεδίο της σπιντρονικής. Αυτό μπορεί να αλλάξει στο μέλλον λόγω της πρόσφατης προόδου στην έρευνα υλικών και της ανακάλυψης αντισιδηρομαγνητικών σπιντρονικών φαινομένων κατάλληλα για εφαρμογές σε επίπεδο διατάξεων. Πειράματα ηλεκτρικής μεταγωγής και ανίχνευσης της τάξεως Néel ανοίγουν ένα πολλά υποσχόμενο δρόμο για διατάξεις που βασίζονται σε σιδηρομαγνήτες. Εκτός από την ανθεκτικότητα στην ακτινοβολία και στο μαγνητικό πεδίο, οι δομές μνήμης που κατασκευάζονται από αντισιδηρομαγνήτες μπορούν να είναι εγγενώς πολυεπίπεδες και η ιδιότητα τους αυτή θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για νευρομορφική λογική. Οι ταχύτητες μεταγωγής στους αντισιδηρομαγνήτες είναι κατά πολύ μεγαλύτερες από αυτές των τεχνολογιών μνημών που βασίζονται σε σιδηρομαγνήτες ή ημιαγωγούς. Παρακάτω θα μελετήσουμε κάποιες νέες ανακαλύψεις σχετικά με την μεταφορά σπιν και τη ροπή σπιν στους αντισιδηρομαγνήτες και οι οποίες εδράζονται ως επί τω πλείστον σε

σχετικιστικά-κβαντομηχανικά φαινόμενα[24]. Το κύριο εμπόδιο για την χρησιμοποίηση των αντισιδηρομαγνητών σε εφαρμογές σπιντρονικής είναι ότι είναι δύσκολο να εγγραφεί σε αυτές τις διατάξεις η πληροφορία και επίσης δύσκολο να διαβαστεί. Αντίθετα με τη κατάσταση τάξης του σιδηρομαγνητισμού η οποία μπορεί να ανιχνευθεί από τα μαγνητικά πεδία που δημιουργεί και να αλλάξει από εξωτερικά πεδία, οι αντισιδηρομαγνητική τάξη δεν παράγει κάποιο μαγνητικό πεδίο και επηρεάζεται πολύ λιγότερο από τα εξωτερικά πεδία (αν και μπορεί να έχουμε μεταβολή στην κατάσταση της από αρκετά μεγάλα μαγνητικά πεδία). Παρόλα αυτά ενώ τα μαγνητικά πεδία παρέχουν έναν πρακτικό τρόπο για την ανίχνευση και χειραγώγηση της σιδηρομαγνητικής τάξης, έχουν αναπτυχθεί και άλλες μέθοδοι για το σκοπό αυτό. Η πιο σημαντική μέθοδος από αυτές είναι η χρήση σπιν πολωμένων ρευμάτων για την ανίχνευση και μεταβολή της σιδηρομαγνητικής τάξης. Η δυνατότητα χρήσης σπιν-πολωμένου ρεύματος στις σιδηρομαγνητικές διατάξεις ενέπνευσε το ενδιαφέρον για την εισαγωγή τους στις αντισιδηρομαγνητικές διατάξεις. Θα παρουσιαστεί στη συνέχεια η πρόσφατη θεωρητική και πειραματική πρόοδος στη μεταφορά σπιν και στα φαινόμενα που αφορούν την ροπή σπιν, τα οποία επιτρέπουν την εγγραφή και ανάγνωση της πληροφορία σε αντισιδηρομαγνητικές διατάξεις. Μια σύνοψη των προτεινόμενων μεθόδων βρίσκεται στο σχήμα . Θα αναλυθούν επίσης και άλλα φαινόμενα μεταφοράς που σχετίζονται με τη σπιντρονική όπως η δημιουργία ρευμάτων σπιν από αντισιδηρομαγνήτες εξαιτίας του φαινομένου σπιν Hall.



Σχήμα 1.9: Παρουσίαση των διαφόρων μεθόδων για την ηλεκτρική ανίχνευση και αλλαγή της αντισιδηρομαγνητικής τάξης. Σε όλα τα επιμέρους σχήματα το μπλε δηλώνει αντισιδηρομαγνητικές ή σιδηρομαγνητικές περιοχές, τα κόκκινα βέλη δηλώνουν μαγνητική ροπή, το j ηλεκτρικό ρεύμα και το R αντίσταση. (a) Μαγνητοαντίσταση σε αντισιδηρομαγνητική βαλβίδα σπιν ή διεπαφή σήραγγας. Έχει θεωρητικά προταθεί, αλλά δεν έχει ανιχνευθεί σίγουρα πειραματικά ακόμα. Η πορτοκαλί περιοχή είναι μη μαγνητική ή μονωτική. Τα μπλε και κόκκινα βέλη δηλώνουν μαγνητικές ροπές στα δύο υποπλέγματα. (b) Ανισοτροπική Μαγνητοαντίσταση. Αυτή η μέθοδος έχει αποδειχθεί πειραματικά σε διάφορους αντισιδηρομαγνήτες. (c) Ανώμαλο φαινόμενο Hall (AHE). Η μέθοδος αυτή έχει αποδειχθεί πειραματικά για μη γραμμικούς αντισιδηρομαγνήτες. (d) Ανισοτροπική Μαγνητοαντίσταση σήραγγος. Έχουν παρατηρηθεί μεγάλες μεταβολές στα σήματα ανίχνευσης της τάξεως. (e) Ροπή σπιν σε μια αντισιδηρομαγνητική βαλβίδα σπιν ή μαγνητική διεπαφή σήραγγας. Τέτοιες ροπές έχουν θεωρητικά προταθεί, αλλά δεν έχουν ακόμα ανακαλυφθεί σε κάποιο πείραμα. (f) IGSE ροπή σπιν-τροχιάς σε ένα σιδηρομαγνήτη (αριστερά) και σε ένα αντισιδηρομαγνήτη (δεξιά). Τα μπλε βέλη δηλώνουν την πόλωση του σπιν που προέρχεται από το ρεύμα. Τα κόκκινα και καφέ βέλη δηλώνουν την αρχική και τελική διεύθυνση της μαγνητικής ροπής. Η μεταγωγή χρησιμοποιώντας αυτή τη ροπή έχει αποδειχθεί πειραματικά. (g) SHE ροπή σπιν-τροχιάς. Η πράσινη περιοχή αντιστοιχεί σε μη μαγνητικό υλικό, το οποίο δημιουργεί το φαινόμενο SHE (spin Hall effect). Το καφέ βέλος δηλώνει το ηλεκτρικό ρεύμα και τα μαύρα βέλη τη διεύθυνση της τροχιάς των ηλεκτρονίων με αντίθετες πολώσεις σπιν (στο σχήμα με μπλε). Η ροπή σε μια τέτοια διάταξη έχει πειραματικά αποδειχθεί και η μεταγωγή έχει παρατηρηθεί πρόσφατα σε μονωτικούς αντισιδηρομαγνήτες.[24]

1.4.1 Μη σχετικιστικά φαινόμενα σπιντρονικής

Η αντισιδηρομαγνητική σπιντρονική αρχικά εστίασε στον να αναπαραγάγει αντίστοιχες σιδηρομαγνητικές διατάξεις όπως οι βαλβίδες σπιν και μαγνητικές διεπαφές σήραγγας. Αυτές οι διατάξεις θεωρητικά θα είχαν την ίδια λειτουργικότητα όπως οι αντίστοιχες σιδηρομαγνητικές συσκευές. Παρόλα αυτά παρατηρήθηκε ότι ήταν ιδιαίτερα ευαίσθητες σε διαταραχές και απαιτούσαν τέλεια επιταξία, πράγμα το οποίο αποτρέπει την πειραματική τους υλοποίηση. Μια πιο ελπιδοφόρα προσέγγιση θα μπορούσε να είναι οι συσκευές που συνδυάζουν αντισιδηρομαγνήτες με σιδηρομαγνήτες. Σε αυτές τις συσκευές ο σιδηρομαγνήτης δρα σαν πόλωση σπιν. Οι Gomonyay και Loktev έδειξαν ότι ένα σπιν-πολωμένο ρεύμα μπορεί να μεταβάλλει αποτελεσματικά την αντιφαιρομαγνητική τάξη, υποθέτοντας ότι η ροπή που δημιουργείται από το σπιν-πολωμένο ρεύμα έχει την ίδια μορφή σε κάθε υποπλέγμα όπως είναι το σύνηθες στους σιδηρομαγνήτες, δηλαδή $T_j M_j \times (M_j \times p)$. Στη σχέση αυτή j είναι ο δείκτης του υποπλέγματος, M_j η μαγνητική ροπή στο σημείο j και p η κατεύθυνση τη πόλωσης του σπιν του ρεύματος. Οι διατάξεις που έχουν παρουσιαστεί μέχρι στιγμής βασίζονται σε μη σχετικιστικά φαινόμενα. Αντίθετα πολλές από αυτές που θα παρουσιάσουμε παρακάτω βασίζονται σε σχετικιστικά φαινόμενα προεξάρχοντος του φαινομένου που έχουμε αναφέρει εκτενώς παραπάνω σε αυτή την εργασία και δεν είναι άλλο από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς.

1.4.2 Ανισοτροπική Μαγνητοαντίσταση

Η πρώτη και ακόμα ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος για την ηλεκτρική ανίχνευση της αλλαγής διεύθυνσης του μαγνητισμού σε ένα σιδηρομαγνήτη είναι η χρήση της ανισοτροπικής μαγνητοαντίστασης (AMR): η εξάρτηση της αντίστασης από την διεύθυνση της μαγνήτισης σε σχέση με το ρεύμα ή τους άξονες συμμετρίας του στερεού. Η (AMR) τείνει να είναι μικρότερη από την γιγάντια μαγνητοαντίσταση και την μαγνητοαντίσταση σήραγγας, παρόλα αυτά είναι ευκολότερα ανιχνεύσιμη πειραματικά καθώς είναι φαινόμενο που σχετίζεται με το σώμα του ημιαγωγού και δεν απαιτεί περίπλοκα πολυεπίπεδα στρώματα για τη διερεύνηση του. Επίσης επειδή είναι άρτια συνάρτηση της μαγνήτισης, είναι παρούσα και στους αντισιδηρομαγνήτες. Ωστόσο μέχρι πρότινος το φαινόμενο δεν ήταν δυνατόν να παρατηρηθεί εργαστηριακά λόγω της δυσκολίας ελέγχου της κατεύθυνσης της μαγνητικής ροπής σε αντισιδηρομαγνήτες. Παρόλα αυτά η AMR έχει παρατηρηθεί πλέον σε αρκετούς αντισιδηρομαγνήτες. Οι Marti et al.[12] χρησιμοποίησαν το αντισιδηρομαγνητικό υλικό FeRh για την παρατήρηση της AMR. Αυτό το υλικό γίνεται σιδηρομαγνητικό όταν θερμαίνεται, και ανταποκρίνεται στην εφαρμογή μαγνητικών πεδίων. Ψύχοντας το στην αντισιδηρομαγνητική φάση και συνεχίζοντας να εφαρμόζεται μαγνητικό πεδίο, η αντισιδηρομαγνητική κατεύθυνση του σπιν μπορεί να ελεγχθεί. Σε άλλα πειράματα χρησιμοποιήθηκαν αντισιδηρομαγνήτες με αλληλεπίδραση εναλλαγής με σιδηρομαγνήτη, μεγάλα μαγνητικά πεδία ή ηλεκτρικά ρεύματα για να μεταβληθούν οι αντισιδηρομαγνητικές ροπές. Η AMR είναι χρήσιμη για πειραματική ανίχνευση της μεταγωγής στους αντισιδηρομαγνήτες, παρόλα αυτά το μικρό της πλάτος είναι εμπόδιο στην σμίχρυνση των διαστάσεων των συσκευών που βασίζονται σε αυτό το φαινόμενο έτσι ώστε να φτάσουν τη τεχνολογία ολοκλήρωσης που χρησιμοποιείται σήμερα. Επίσης εξαιτίας του μικρού πλάτους του

φαινομένου της AMR η ταχύτητα ανάγνωσης στις συσκευές που το χρησιμοποιούν είναι περιορισμένη. Ένα περισσότερο υποσχόμενο φαινόμενο είναι η Ανισοτροπική Μαγνητοαντίσταση Σήραγγας (TAMR) η οποία προκύπτει χρησιμοποιώντας ένα ρεύμα το οποίο μεταβαίνει από τον αντισιδηρομαγνήτη σε ένα μεταλλικό μη μαγνητικό υλικό μέσω ενός στρώματος μονωτής χάφης το φαινόμενο σήραγγος 1.9(d).

1.4.3 Μεταγωγή χρησιμοποιώντας την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς

Η αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς επιτρέπει τη δημιουργία μια ροπής επαγόμενης από ρεύμα σε έναν σιδηρομαγνήτη χωρίς έγχυση σπιν από έναν εξωτερικό πολωτή σπιν. Οι *elezný et al.* προέβλεψαν [23] ότι η ροπή σπιν-τροχιάς υφίσταται και στους αντισιδηρομαγνήτες αν υπάρχει η κατάλληλη συμμετρία και ότι χρησιμοποιώντας τη μπορούμε να μεταβάλλουμε κατάλληλα την αντισιδηρομαγνητική τάξη. Ο λόγος για τον αποτελεσματικό χειρισμό της αντισιδηρομαγνητικής τάξης είναι ότι, με την κατάλληλη συμμετρία, η επαγόμενη από το ρεύμα πόλωση σπιν περιέχει μια εναλλασσόμενη συνιστώσα. Η εναλλασσόμενη αυτή συνιστώσα με την σειρά της δημιουργεί ένα εναλλασσόμενο μαγνητικό πεδίο, το οποίο μπορεί να μεταβάλλει την αντισιδηρομαγνητική τάξη αποτελεσματικά. Η μεταγωγή χρησιμοποιώντας ροπή σπιν-τροχιάς έχει μερικά πλεονεκτήματα σε σχέση με τα άλλα φαινόμενα που μελετήθηκαν μέχρι τώρα. Επειδή η ροπή παράγεται τοπικά, δεν είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη σε διαταραχές και επειδή είναι ένα φαινόμενο το οποίο αφορά το σώμα του αντισιδηρομαγνήτη δεν απαιτεί ειδικές ετεροδομές. Από την άλλη πλευρά υφίσταται μόνο σε αντισιδηρομαγνήτες με την κατάλληλη συμμετρία.

1.4.4 Το φαινόμενο σπιν Hall στους αντισιδηρομαγνήτες

Όταν ρεύμα ρέει σε ένα υλικό εμφανίζεται ένα ρεύμα σπιν το οποίο ρέει με κατεύθυνση εγκάρσια προς αυτή του αρχικού ρεύματος. Αυτό το φαινόμενο είναι γνωστό ως φαινόμενο σπιν Hall (SHE). Προέρχεται από την αλληλεπίδραση σπιν-τροχιάς η οποία επιβάλλει στα ηλεκτρόνια με αντίθετο σπιν να εκτρέπονται σε αντίθετες διευθύνσεις όποτε και δημιουργείται το σπιν ρεύμα. Ισχύει επίσης και το αντίστροφο φαινόμενο: όταν ένα ρεύμα σπιν εγχέεται μέσα σε ένα υλικό που μπορεί να εκφράσει την ιδιότητα της αλληλεπίδρασης σπιν-τροχιάς, τότε μια εγκάρσια πτώση τάσης εμφανίζεται. Το ευθύ και το αντίστροφο φαινόμενο σπιν Hall είναι φαινόμενα μεγάλης σημασίας για τη σπιντρονική καθώς επιτρέπουν την εναλλαγή μεταξύ σπιν ρεύματος σε ρεύμα φορτίων και την αντίστροφη διαδικασία.

Το SHE μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να δημιουργήσει μια ροπή σπιν-τροχιάς η οποία μπορεί να μεταβάλλει την κατάσταση ενός σιδηρομαγνήτη. Όταν ένα υλικό στο οποίο εμφανίζεται SHE είναι σε διεπαφή με ένα σιδηρομαγνήτη και ένα ηλεκτρικό πεδίο υφίσταται παράλληλα στην διεπιφάνεια. Τότε ένα ρεύμα σπιν ρέει μέσα στον σιδηρομαγνήτη και δημιουργεί μια ροπή. Επιτρέπει πιο γρήγορη και αποτελεσματική αλλαγή στην μαγνήτιση των σιδηρομαγνητικών στρωμάτων σε σχέση με την κλασική ροπή σπιν-τροχιάς.

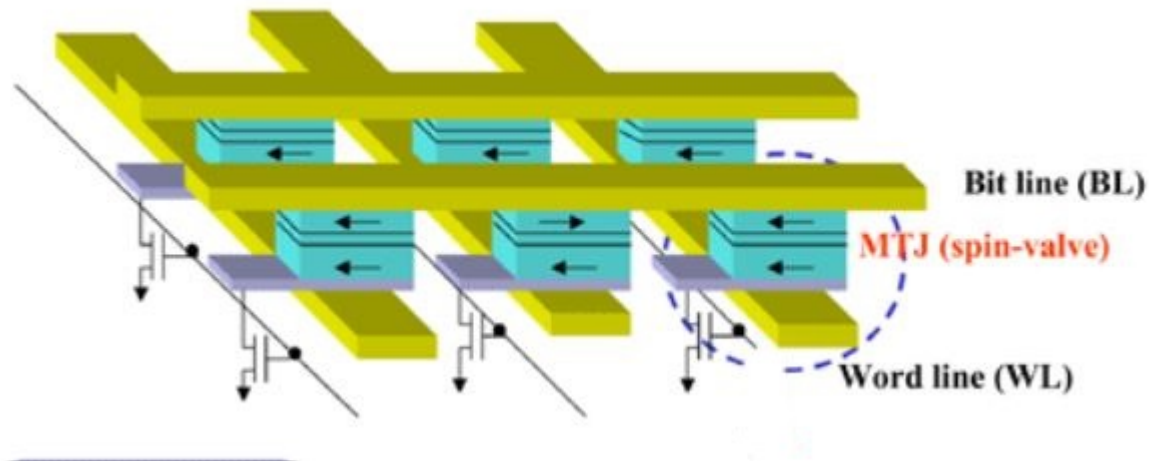
Η ροπή σπιν-τροχιάς που οφείλεται στο SHE θα μπορούσε επίσης να χρησιμοποιηθεί για τον χειρισμό των αντισιδηρομαγνητικών ροπών 1.9(g). Όπως αναλύθηκε παραπάνω, ένα ρεύμα σπιν που εγχέεται σε έναν αντισιδηρομαγνήτη παράγει μια ροπή που μπορεί να μεταβάλλει

την κατάσταση του σιδηρομαγνήτη. Ένα τέτοιο ρεύμα σπιν θα μπορούσε να εγχυθεί από έναν σιδηρομαγνήτη, αλλά και το οφειλόμενο στο SHE ρεύμα σπιν θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί. Μια τέτοια ροπή σπιν-τροχιάς σε μια διεπαφή βαρέως μετάλλου/αντισιδηρομαγνήτη έχει υλοποιηθεί πειραματικά[16]. Ωστόσο η δυσκολία του χειρισμού της αντισιδηρομαγνητικής τάξης με μαγνητικά πεδία δεν κατέστησε δυνατό τον λεπτομερή χαρακτηρισμό της ροπής όπως γίνεται συνήθως σε διεπαφές βαρέων μετάλλων με σιδηρομαγνήτες. Πρόσφατα παρατηρήθηκε η εναλλαγή της μαγνήτισης του αντισιδηρομαγνήτη NiO που αποδίδεται στο SHE. Η ανακάλυψη αυτή έγινε σε διεπαφές στρωμάτων Pt/NiO/Pt.

Κατά το παρελθόν η έρευνα επάνω στο SHE επικεντρώθηκε κυρίως σε μη μαγνητικά υλικά. Εντούτοις το φαινόμενο είναι δυνατό σε κάθε υλικό ακόμα και σε αντισιδηρομαγνητικά υλικά. Το SHE βρέθηκε θεωρητικά και πειραματικά σε αρκετούς αντισιδηρομαγνήτες. Αντί για το ευθύ SHE τα πειράματα αυτά βασίστηκαν στο αντίστροφο SHE το οποίο μπορεί να ανιχνευθεί ηλεκτρικά με έγχυση ρεύματος σπιν(μεσω π.χ. spin pumping ή με χρήση ενός μέσου που θα μεταβάλλει την βαθμίδα θερμότητας.

1.5 Υπάρχουσες εμπορικές εφαρμογές: MRAM

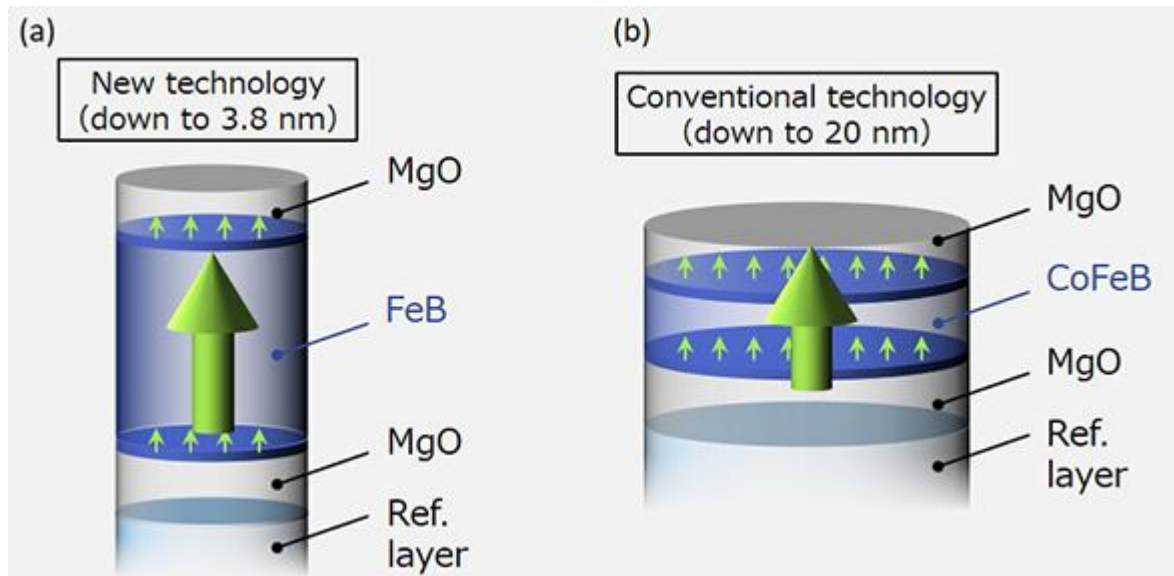
Μεγάλες εταιρίες όπως οι AVR, Seagate και η Freescale επενδύουν στο τομέα των μνημών σπιντρονικής κατασκευάζοντας και παράγοντας μαζικά ήδη μνήμες σπιντρονικής, με διασημότερες τις λεγόμενες MRAM(Magneto resistive Random Access Memory). Μικρότερες εταιρίες του χώρου έχουν επιδείξει επίσης σημαντικές καινοτομίες όπως η Everspin.



Σχήμα 1.10: Συστοιχία κυττάρων μνήμης MRAM.

Το ενδιαφέρον που δείχνουν όλοι αυτοί οι κολοσσοί της τεχνολογίας δίνει ώθηση στα διάφορα εργαστήρια ανά τον κόσμο να προσπαθήσουν να καινοτομήσουν σε αυτό τον τομέα. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι η ομάδα σπιντρονικής του πανεπιστημίου Tohoku στην Ιαπωνία του καθηγητή Hideo Ohno. Άξια αναφοράς είναι η τελευταία επιτυχία της συγκεκριμένης ομάδας η οποία είναι η σμίχρυνση πέραν του ορίου των 20nm των διαστάσεων της βασικής μονάδας καταχώρησης πληροφορίας στις MRAM που είναι η μαγνητική διεπαφή

σήραγγος (Magnetic Tunneling Junction ή αλλιώς MTJ). Πιο συγκεκριμένα οι ερευνητές κατάφεραν να εκμεταλλευτούν την ανισοτροπικότητα σχήματος και να κατασκευάσουν μια MTJ με διαστάσεις μικρότερες των 20nm[21]. Η προϋπάρχουσα διάταξη MTJ διαστάσεων 20nm την οποία οι ερευνητές κατάφεραν να σμικρύνουν ήταν κατασκευασμένη από ετεροδομές CoFeB/MgO και έκανε χρήση της ανισοτροπικότητας διεπαφών.



Σχήμα 1.11: (α) Τεχνολογία MTJ που βασίζεται στην ανισοτροπικότητα σχήματος. (β) Προηγούμενη τεχνολογία η οποία βασίζεται στην ανισοτροπικότητα στις διεπαφές

Επίσης το ερευνητικό κέντρο IMEC ανακοίνωσε πρόσφατα στη διάρκεια του '2018 Symposium on VLSI Technology and Circuits' ότι κατάφερε να κατασκευάσει διατάξεις SOT-MRAM επάνω σε wafer πυριτίου 300mm χρησιμοποιώντας διαδικασία κατάλληλης και για κατασκευή διατάξεων CMOS. Αυτή η επιτυχία μπορεί να φέρει την πιθανότητα της ενσωματωμένης μνήμης στη λογική ένα βήμα πιο κοντά στην πραγματικότητα.

Ένας καινούριος λοιπόν τομέας της τεχνολογίας φαίνεται να αναπτύσσεται και ο οποίος μπορεί να αποτελέσει ενδιαφέρον για μια ευρεία γκάμα ανθρώπων. Από τον ηλεκτρολόγο μηχανικό και τον φυσικό στερεάς κατάστασης μέχρι τον επιστήμονα πληροφορικής ο οποίος θέλει να εντρυφήσει επάνω στο νευρομορφικό υπολογισμό (neuromorphic computing)[20].

Κεφάλαιο 2

Βασικός Φορμαλισμός και επίλυση διατάξεων Σπιντρονικής με κβαντικές καταστάσεις τάξεως

2.1 Φορμαλισμός Δεύτερης Κβάντωσης

Τα προβλήματα πολλών σωμάτων στη φυσική είναι ιδιαίτερα δυσεπίλυτα και πιθανότατα δεν επιδέχονται μια λύση κλειστής αναλυτικής μορφής. Πιο συγκεκριμένα κοιτάζοντας πέρα από τα προβλήματα με περιορισμένο αριθμό σωματιδίων που συναντά κανείς σε όλα τα εισαγωγικά μαθήματα στην κβαντομηχανική, γρήγορα αντιλαμβάνεται ότι ο μέχρι εκείνη τη στιγμή επαρκέστατος φορμαλισμός πρέπει να επεκταθεί ώστε η μελέτη αυτών το προβλημάτων να καταστεί σημαντικά πιο εύκολη.

Ας περιγράψουμε όμως ένα παράδειγμα το οποίο καταδεικνύει την ανάγκη για επέκταση του υπάρχοντος φορμαλισμού. Έστω λοιπόν ότι έχουμε ένα πρόβλημα πολλών σωματιδίων και επιχειρούμε κατά τα γνωστά να το μοντελοποιήσουμε. Θα πρέπει να εκφράσουμε την κυματοσυνάρτηση Ψ του συστήματος ως γινόμενο μονοσωματιδιακών κυματοσυναρτήσεων στην εκάστοτε συμφέρουσα βάση για εμάς. Δηλαδή η κυματοσυνάρτηση η οποία θα προέκυπτε θα ήταν της μορφής

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{E'_1 \dots E'_N} C(E'_1 \dots E'_N, t) \psi_{E'_1}(x_1) \dots \psi_{E'_N}(x_N) \quad (2.1)$$

όπου ψ_{E_k} η κυματοσυνάρτηση ενός σωματιδίου και E_k ένα πλήρες σύνολο κβαντικών αριθμών για το πρόβλημα. Η άθροιση που πραγματοποιούμε στην εξίσωση (2.1) είναι προς όλους τους συνδυασμούς καταστάσεων των μεμονωμένων σωματιδίων. Η εξίσωση Schrödinger που θα προέκυπτε για το πρόβλημα αυτό θα ήταν η εξής:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, \dots, x_N, t) = H \Psi(x_1, \dots, x_N, t) \quad (2.2)$$

όπου H η χαμιλτονιανή που στη γενική της μορφή είναι:

$$H = \sum_{k=1}^N T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N V(x_k, x_l) \quad (2.3)$$

με T τον όρο κινητικής ενέργειας και V τη δυναμική ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ των σωματιδίων. Για να υπολογίσουμε την κυματοσυνάρτηση του συστήματος αντικαθιστούμε στην εξίσωση Schrödinger (2.2) την έκφραση για την κυματοσυνάρτηση (2.1) και πολλαπλασιάζουμε από αριστερά με το γινόμενο $\psi_{E_1}(x_1)^\dagger \dots \psi_{E_N}(x_N)^\dagger$. Ολοκληρώνοντας προς όλες τις μεταβλητές και χρησιμοποιώντας τις σχέσεις ορθογωνιότητας μεταξύ των κυματοσυναρτήσεων. Δηλαδή:

$$\int \psi_{E_i}(x_k)^\dagger \psi_{E_j}(x_k) dx_k = \delta_{ij} \quad (2.4)$$

οπότε τελικά έχουμε:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} C(E_1 \dots E_N) &= \sum_{k=1}^N \sum_W \int dx_k \psi_{E_k}(x_k)^\dagger T(x_k) \psi_W(x_k) \\ &\times C(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_N, t) \\ \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \sum_W \sum_{W'} \int \int dx_k dx_l \psi_{E_k}(x_k)^\dagger \psi_{E_l}(x_l)^\dagger V(x_k, x_l) \psi_W(x_k) \psi_{W'}(x_l) \\ &\times C(E_1 \dots E_{k-1} W E_{k+1} \dots E_{l-1} W' E_{l+1} E_N, t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

θα πρέπει ωστόσο να λάβουμε υπόψιν μας και την φύση των σωματιδίων δηλαδή αν είναι φερμιόνια ή μποζόνια. Οπότε η κυματοσυνάρτηση θα πρέπει να υπακούει επίσης τη σχέση:

$$\Psi(\dots x_i \dots x_j \dots, t) = \pm \Psi(\dots x_j \dots x_i \dots, t) \quad (2.6)$$

όπου το $+$ είναι για τα μποζόνια και το $-$ για τα φερμιόνια. Από την παραπάνω σχέση προκύπτει ότι είναι αναγκαία συνθήκη για τους συντελεστές να είναι είτε συμμετρικοί είτε αντισυμμετρικοί ως προς τους κβαντικούς αριθμούς:

$$C(\dots E_i \dots E_j \dots, t) = \pm C(\dots E_j \dots E_i \dots, t) \quad (2.7)$$

Όπως είναι φανερό από τη μέχρι τώρα ανάλυση ο φορμαλισμός που χρησιμοποιήθηκε έκανε ένα δύσκολο πρόβλημα ακόμα πιο περίπλοκο! Οπότε όπως είναι φανερό θα πρέπει να βρούμε κάποιον άλλο φορμαλισμό που θα μας διευκολύνει περισσότερο. Από τη δύσκολη θέση θα μας βγάλει ο φορμαλισμός της δεύτερης κβάντωσης.

Αντί λοιπόν για την παραπάνω ανάλυση θα χρησιμοποιήσουμε μια νέα διατύπωση του προβλήματος όπου αυτό που διαδραματίζει σημαίνοντα ρόλο είναι ο αριθμός των σωματιδίων που καταλαμβάνουν την κάθε μονοσωματιδιακή κατάσταση $|\psi_i\rangle$. Εισάγουμε λοιπόν ένα νέο διάνυσμα κατάστασης για αυτό το λόγο:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle, \sum_{j=1}^{\infty} n_j = N \quad (2.8)$$

Το διάνυσμα αυτό ερμηνεύεται σαν μια κατάσταση N σωματιδίων από τα οποία n_1 βρίσκονται στην κατάσταση $|\psi_1\rangle$, n_2 στην κατάσταση $|\psi_2\rangle$ κ.ο.κ. Το σύνολο αυτών των διανυσμάτων $(|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle)$ αποτελεί μια βάση του χώρου Hilbert για το σύστημα των N ταυτόσημων σωματιδίων. Ισχύουν λοιπόν οι παρακάτω σχέσεις πληρότητας και ορθοκανονικότητας:

$$\langle n_1, n_2, n_3, \dots | n'_1, n'_2, n'_3, \dots \rangle = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \delta_{n_3, n'_3} \dots \quad (2.9)$$

$$\sum_{n_1, n_2, n_3, \dots} |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \langle n_1, n_2, n_3, \dots| = 1 \quad (2.10)$$

Οπότε η τυχαία κατάσταση $|\Psi\rangle$ γράφεται σε αυτή τη βάση:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n_1, n_2, n_3, \dots} c(n_1, n_2, n_3, \dots) |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.11)$$

Μια γενίκευση του παραπάνω χώρου είναι ο χώρος Fock, στον οποίο μπορούμε να έχουμε καταστάσεις με διαφορετικό αριθμό σωματιδίων. Για την κατασκευή του χρησιμοποιούμε όλους τους χώρους καταστάσεων N σωματιδίων, με $N=0,1,2,3$ κ.ο.κ. Η βάση του χώρου αυτού αποτελείται από τα διανύσματα:

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \text{ με } \sum_{j=1}^{\infty} n_j < \infty \quad (2.12)$$

Μπορούμε λοιπόν στη συνέχεια να ορίσουμε τους τελεστές αριθμού κατάληψης \hat{n}_j οι οποίοι έχουν ως ιδιοκαταστάσεις τα παραπάνω διανύσματα με αντίστοιχη ιδιοτιμή τον αριθμό των σωματιδίων που καταλαμβάνουν την κατάσταση $|u_j\rangle$. Δηλαδή:

$$\hat{n}_j |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = n_j |n_1, n_2, n_3, \dots\rangle \quad (2.13)$$

Επίσης κατά τα γνωστά μας από τον αρμονικό ταλαντωτή θα ορίσουμε και τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής. Όπως θα δούμε και αργότερα οι τελεστές αυτοί είναι μεγάλης σημασίας για τον φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης καθώς επιτρέπουν την έκφραση όλων των χρήσιμων τελεστών βάσει αυτών. Ο συντελεστής λοιπόν δημιουργίας ενός σωματιδίου στην κατάσταση $|\phi\rangle$ ορίζεται ως:

$$\alpha^\dagger(\phi) |\psi_1, \dots, \psi_N\rangle = |\phi, \psi_1, \dots, \psi_N\rangle \quad (2.14)$$

Η ερμηνεία του τελεστή α^\dagger είναι ότι μετατρέπει μια κατάσταση N σωματιδίων σε κατάσταση $N+1$ σωματιδίων προσθέτοντας ένα ακόμα σωματίδιο στην κατάσταση $|\phi\rangle$.

Με αντίστοιχο τρόπο ορίζουμε και τον τελεστή καταστροφής σωματιδίου στην κατάσταση $|\phi\rangle$ οποίος είναι κατά τα γνωστά ο συζυγής του τελεστή δημιουργίας:

$$\alpha(\phi) = [\alpha^\dagger(\phi)]^\dagger \quad (2.15)$$

και η ερμηνεία του είναι αντίστοιχα η μετατροπή ενός συστήματος N σωματιδίων σε ένα σύστημα $N-1$ σωματιδίων.

Η στατιστική των σωματιδίων ενσωματώνεται πολύ κομψά στον φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης βάσει των παρακάτω σχέσεων:

$$\begin{aligned} [a^\dagger(\phi_1), a^\dagger(\phi_2)]_{-\zeta} &= 0^2 \\ [a(\phi_1), a(\phi_2)]_{-\zeta} &= 0 \\ [a(\phi_1), a^\dagger(\phi_2)]_{-\zeta} &= \langle \phi_1 | \phi_2 \rangle \end{aligned} \quad (2.16)$$

όπου ο $[A, B]_{-\zeta} = AB - \zeta BA$, ο μεταθέτης ($\zeta=-1$) ή ο αντιμεταθέτης ($\zeta=1$) αντίστοιχα. Η ακολουθώντας την πιο κοινή σημειολογία ο μεταθέτης για τα φερμιόνια γράφεται σαν $[A, B]$ ενώ ο αντιμεταθέτης γράφεται για τα μποζόνια $\{A, B\}$.

Τα διανύσματα του χώρου Fock κατασκευάζονται δρώντας με τους συντελεστές δημιουργίας στην αντίστοιχη ιδιοκατάσταση της κατάστασης κενού.

$$|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle = [a^\dagger(u_1)]^{n_1} [a^\dagger(u_2)]^{n_2} [a^\dagger(u_3)]^{n_3} \dots |0\rangle \quad (2.17)$$

Βάσει των σχέσεων 2.13 και 2.17 προκύπτει ότι ο τελεστής αριθμού κατάληψης γράφεται συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής ως:

$$\hat{n}_j = a^\dagger(u_j)a(u_j) \quad (2.18)$$

Οπότε ο συντελεστής αρίθμησης που δίνει το συνολικό αριθμό των σωματιδίων σε ένα σύστημα γράφεται ως:

$$\hat{N} = \sum_j a^\dagger(u_j)a(u_j) \quad (2.19)$$

Αν τώρα θεωρήσουμε την βάση των εντοπισμένων καταστάσεων $\{|x\sigma\rangle\}$, όπου ως $|x\sigma\rangle$ περιγράφεται η κατάσταση εντοπισμού ενός σωματιδίου στη θέση x με σπίν σ τότε οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής ονομάζονται τελεστές πεδίου και τους συμβολίζουμε ως εξής:

$$\begin{aligned} c_\sigma^\dagger(x) &= a^\dagger(x\sigma) \\ c_\sigma(x) &= a(x\sigma) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Οι συντελεστές ενός και δύο σωματιδίων γράφονται συναρτήσει των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής ως

$$A_N = \sum_{i,j} A_{ij} a^\dagger(u_i)a(u_j) \text{ με } A_{ij} = \langle u_i | A | u_j \rangle \quad (2.21)$$

και αντίστοιχα για των τελεστή δύο σωματιδίων:

$$B_N = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} B_{i,j,k,l} a^\dagger(u_i)a^\dagger(u_j)a(u_l)a(u_k) \text{ με } B_{i,j,k,l} = \langle u_i, u_j | B | u_k, u_l \rangle \quad (2.22)$$

Μπορούμε λοιπόν με τη βοήθεια των δύο παραπάνω σχέσεων να εκφράσουμε την Χαμιλτονιανή ενός συστήματος ταυτόσημων σωματιδίων. Στα σωματίδια αυτά ασκείται ένα εξωτερικό δυναμικό μέσω του τελεστή V , η κινητική τους ενέργεια δίνεται από τον τελεστή T και το

δυναμικό αλληλεπίδρασης τους από το δυναμικό U (όπου λαμβάνουμε υπόψιν το χώρο αλληλεπίδρασης των δύο σωματιδίων).

$$H = \sum_{i,j} \epsilon_{ij} a^\dagger(u_i) a(u_j) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,m} U_{i,j,l,m} a^\dagger(u_i) a^\dagger(u_j) a(u_m) a(u_l) \quad (2.23)$$

με:

$$\epsilon_{i,j} = \langle u_i | (T + V) | u_j \rangle \quad (2.24)$$

$$U_{ijklm} = \langle u_i, u_j | U | u_l, u_m \rangle \quad (2.25)$$

2.2 Στοιχεία Στατιστικής Φυσικής

Ο φορμαλισμός της δεύτερης κβάντωσης αναφέρεται σε συστήματα N σωματιδίων όπου ο αριθμός των σωματιδίων είναι γενικά μη καθορισμένος. Ένα τέτοιο ensemble στην στατιστική φυσική περιγράφεται από το μεγαλοκανονικό σύνολο. Στο σύνολο αυτό το σύστημά μας είναι εμβαπτισμένο μέσα σε μια δεξαμενή με σταθερή θερμοκρασία και το σύνολο των σωματιδίων της δεξαμενής και του συστήματος παραμένει σταθερό. Από τη δεξαμενή προς το σύστημα μπορεί να μεταφερθεί ενέργεια ή σωματίδια προς οποιαδήποτε κατεύθυνση.

Αφού λοιπόν το πλήθος N των σωματιδίων είναι μεταβλητό θα πρέπει και οι ιδιοσυναρτήσεις της χαμιλτονιανής να εξαρτώνται από το N . Έστω λοιπόν N_i ο αριθμός των σωματιδίων του συστήματος που βρίσκονται στην κατάσταση $|\Psi_i\rangle$ και E_i η ενέργεια στην κατάσταση αυτή.

$$H |\Psi_i\rangle = E_i |\Psi_i\rangle \sum_k c_k^\dagger c_k \Psi_i = N_i \Psi_i \quad (2.26)$$

Η πιθανότητα να βρεθεί το σύστημα στην κατάσταση $|\Psi_i\rangle$ δίνεται από τη σχέση:

$$P_i = \frac{e^{-\beta[E_i - \mu N_i]}}{\sum_n e^{-\beta[E_n - \mu N_n]}} = \frac{\rho_i}{Z} \quad (2.27)$$

όπου μ_i το χημικό μηχανικό και $\beta = \frac{1}{kT}$ (με k τη σταθερά Boltzmann). Ο παρονομαστής Z της (2.27) είναι η μεγαλοκανονική συνάρτηση επιμερισμού και ο αριθμητής ρ η μεγαλοκανονική συνάρτηση κατανομής. Μπορούμε να γράψουμε τις ποσότητες Z , ρ συναρτήσεις του τελεστή κατανομής.

$$\rho = e^{-\beta(H - \mu N)} \quad (2.28)$$

οπότε και προκύπτει:

$$\rho_i = \langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle \quad (2.29)$$

$$Z = \sum_i \langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle = \text{tr} \rho, \quad P = \frac{\langle \Psi_i | \rho | \Psi_i \rangle}{\text{Tr} \rho} \quad (2.30)$$

όπου Tr το ίχνος του αντίστοιχου πίνακα. Για να βρούμε τη μέση τιμή οποιοδήποτε θερμοδυναμικού μεγέθους που μας ενδιαφέρει, υπολογίζουμε τη μέση τιμή του τελεστή του

μεγέθους που μας ενδιαφέρει επάνω σε όλες τις καταστάσεις, με βάρη τις αντίστοιχες πιθανότητες των καταστάσεων. Αν Q ο τελεστής του μεγέθους που μας ενδιαφέρει τότε θα έχουμε:

$$\langle Q \rangle = \sum_i \langle \Psi_i | Q | \Psi_i \rangle P_i = \frac{\text{Tr} Q \rho}{\text{Tr} \rho} \quad (2.31)$$

Οπότε βάσει της σχέσεως (2.31) μπορούμε να υπολογίσουμε χρήσιμα θερμοδυναμικά μεγέθη όπως:

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

2.3 Γενικό μοντέλο Χαμιλτονιανής σε στερεό σώμα

Η φυσική μελέτη των ηλεκτρικών χαρακτηριστικών ενός κρυσταλλικού στερεού σώματος ανήκει στο πεδίο και αυτή της φυσικής πολλών σωμάτων με ότι αυτό συνεπάγεται για την επίλυση του προβλήματος αυτού. Παρόλα αυτά τα σωματίδια που αποτελούν το κρυσταλλικό αυτό σώμα ως γνωστόν δε συμμετέχουν το ίδιο στην έκφραση των χημικών και ηλεκτρικών του ιδιοτήτων. Δηλαδή τα ηλεκτρόνια των εσωτερικών στοιβάδων δεν έχουν περιορισμένα τροχιακά τα οποία εκτείνονται σε αποστάσεις μικρότερες των πλεγματικών αποστάσεων και ως εκ τούτου δεν μπορούν να συνάψουν δεσμούς με άλλα ηλεκτρόνια ούτε να συνεισφέρουν με την κίνηση τους σε κάποιο ρεύμα. Αντιθέτως τα ηλεκτρόνια σθένους μπορούν όλα τα παραπάνω. Επίσης οι πυρήνες των ατόμων θεωρούνται σταθεροί, σε αντίθεση με τα ηλεκτρόνια σθένους (τα οποία από εδώ και στο εξής θα τα αποκαλούμαι απλώς ως ηλεκτρόνια), εκτός από περιοδικές κινήσεις του πλέγματος του κρυσταλλικού στερεού οι οποίες μοντελοποιούνται σαν τα εκπεμπόμενα σωματίδια φωνόνια.

Λαμβάνοντας υπόψιν την παραπάνω ποιοτική περιγραφή η Χαμιλτονιανή του κρυσταλλικού στερεού μπορεί να γραφτεί στην εξής μορφή:

$$H = T_{el} + T_{ion} + V_{el-el} + V_{ion-ion} + V_{el-ion} \quad (2.32)$$

Οι δύο πρώτοι όροι περιγράφουν την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων και των ιόντων αντίστοιχα. Οι υπόλοιποι τρεις όροι είναι όροι αλληλεπίδρασης. Ο όρος V_{el-el} είναι όρος αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων, ο όρος $V_{ion-ion}$ είναι όρος αλληλεπίδρασης μεταξύ των ιόντων του πλέγματος και ο όρος V_{el-ion} είναι όρος αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων και ιόντων. Αν συμβολίσουμε τώρα σαν r_i, p_i και m τη θέση, την ορμή και τη μάζα αντίστοιχα ενός ηλεκτρονίου. Ενώ με R_i, P_i και M τη θέση, την ορμή και τη μάζα ενός ιόντος. Η σχέση (2.32) γίνεται:

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_l \frac{P_l^2}{2M} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|} \sum_{l,n} V(R_l - R_n) + \sum_{i,l} V(r_i - R_l) \quad (2.33)$$

2.3.1 Διάφορα μοντέλα προσέγγισης Χαμιλτονιανής

Αν θεωρήσουμε ότι τα ιόντα του πλέγματος ταλαντώνονται γύρω από τις θέσεις ισορροπίας τους και οι ταλαντώσεις τους είναι τα φωνόνια. Τότε η χαμιλτονιανή 2.32 γίνεται:

$$H = T_{el} + E_{latt} + H_{ph} + V_{el-el} + V_{el-latt} + V_{el-ph} \quad (2.34)$$

Όπου E_{latt} η ενέργεια των ιόντων όταν βρίσκονται στη θέση ισορροπίας τους, ο H_{ph} αναφέρεται στο μη αλληλεπιδρόν μέρος των φωνονίων, ενώ τα $V_{el-latt}$ και V_{el-ph} περιγράφουν τις αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων με το στατικό και φωνονικό μέρος των ιόντων. Μπορούμε να θεωρήσουμε τα ηλεκτρόνια και τα ιόντα του συστήματος σαν δύο ξεχωριστά υποσυστήματα τα οποία αλληλεπιδρούν μέσω του όρου V_{el-ph} της χαμιλτονιανής. Υποθέτοντας θερμική ισορροπία σε όλο το σύστημα μπορούμε να γράψουμε για τον κάθε βαθμό ελευθερίας:

$$\left\langle \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \left\langle \frac{P_i^2}{2M} \right\rangle \quad (2.35)$$

και επειδή $m/M \simeq 10^{-4}$ προκύπτει ότι τα ηλεκτρόνια είναι πολύ ταχύτερα των ιόντων. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα τα ηλεκτρόνια να βλέπουν στατικά τα ιόντα και το δυναμικό που αυτά προκαλούν. Έτσι θεωρώντας τα ιόντα ακίνητα στη θέση ισορροπίας τους αμελούμε τους όρους που περιγράφουν δράση φωνονίων στην χαμιλτονιανή. Οι δύο αυτοί περιορισμοί, η περιοδικότητα δηλαδή του εξωτερικού προς τα ηλεκτρόνια δυναμικού του πλέγματος και η στατικότητα των ιόντων, προσδιορίζουν το μοντέλο πλέγματος, του οποίου η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H = T_{el} + V_{el-el} + V_{el-latt} \quad (2.36)$$

Αν επιπλέον θεωρήσουμε την περιοδική και διακριτή φύση του συστήματος των ιόντων σαν ένα συνεχές, ομογενές και θετικά φορτισμένο ρευστό τότε προκύπτει το jellium model η Χαμιλτονιανή του οποίου είναι η εξής.

$$H = T_{el} + V_{el-el} \quad (2.37)$$

Το Ενεργό Δυναμικό

Στις παραπάνω περιπτώσεις η ακριβής επίλυση της εκάστοτε Χαμιλτονιανής είναι ένα δυσεπίλυτο πρόβλημα λόγω του όρου αλληλεπιδράσεων των ηλεκτρονίων και μάλιστα η επίλυση καθίσταται πιο δυσχερής αν λάβουμε υπόψιν και το περιοδικό των ιόντων. Η προσέγγιση που χρησιμοποιείται λοιπόν για να ενσωματωθούν αυτές οι αλληλεπιδράσεις σε μια Χαμιλτονιανή η οποία είναι εφικτό να λυθεί είναι το ενεργό δυναμικό V_{eff} . Η Χαμιλτονιανή η οποία προκύπτει λοιπόν είναι:

$$H = \sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} + V_{eff}(r_i) \right) \quad (2.38)$$

Το αποτέλεσμα είναι ότι προσεγγίσαμε το πρόβλημα πολλών σωματιδίων με ένα πρόβλημα ενός σωματιδίου το οποίο είναι εύκολα επιλύσιμο. Για να λύσουμε το πρόβλημα βρίσκουμε

κατά τα γνωστά τις ιδιοτιμές της εξίσωσης:

$$\left(\frac{p_a^2}{2m} + V_{eff}(r_a) \right) \psi_a = \epsilon_a \psi_a \quad (2.39)$$

Σε κάθε περίπτωση πάντως η Χαμιλτονιανή (2.38) στο φορμαλισμό της δεύτερης κβάντωσης προκύπτει ως:

$$H = \sum_a \epsilon(a) c_a^\dagger c_a \quad (2.40)$$

Οι τιμές του ϵ_a είναι οι ενεργειακές καταστάσεις ενός συστήματος ελεύθερων οιονεί σωματιδίων. Για το γενικότερο μοντέλο πλέγματος έχουμε:

$$H_{lat} = \sum_{n,k,\sigma} \epsilon_n(k, \sigma) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \quad (2.41)$$

Με το γενικό μοντέλο πλέγματος μπορεί να εξηγηθεί η θεωρία ζωνών στα στερεά, με τη γενική μονοσωματιδιακή λύση να είναι:

$$\psi_{nk\sigma}(r) = u_{nk}(r) e^{jk \cdot r} \chi_\sigma \text{ με } \begin{cases} k \in FBZ \\ u_{nk}(r + R_n) = u_{nk} \\ n : \text{δείκτης ζώνης} \end{cases} \quad (2.42)$$

Το πρόβλημα πλέον έγκειται στον υπολογισμό αυτών των συναρτήσεων u_{nk} . Κάποιες από τις μεθόδους που έχουν αναπτυχθεί είναι οι εξής.

1. Μοντέλο Σχεδόν Ελεύθερων Ηλεκτρονίων: εφόσον οι συναρτήσεις u_{nk} είναι περιοδικές τότε μπορούμε να τις αναπτύξουμε κατά Fourier.

$$\psi_{nk}(r) = \sum_G C_{nk}(G) \frac{1}{\sqrt{V}} e^{j(k+G)r} \quad (2.43)$$

οπότε το πρόβλημα ανάγεται στον προσδιορισμό των C_{nk} . Η μέθοδος αυτή είναι επιτυχής όταν οι κινητικοί όροι επικρατούν σε σχέση με τους δυναμικούς όρος. Στην περίπτωση αυτή το υφιστάμενο περιοδικό δυναμικό μπορεί να θεωρηθεί σαν διαταραχή.

2. Μοντέλο LCAO (linear combination of atomic orbitals): Στο μοντέλο αυτό χρησιμοποιούμε τα ατομικά τροχιακά των ατόμων που απαρτίζουν το σύστημα και θεωρούμε απομονωμένα και θεωρούμε ότι τα τροχιακά $\psi_{nk}(r)$ γράφονται σαν γραμμικός συνδυασμός αυτών.

$$\psi_{nk}(r) = \sum_v C_{nv} \psi_{vk}(r) \quad (2.44)$$

με τα τροχιακά αυτά να έχουν τη μορφή επικαλυμμένων ατομικών τροχιακών, ώστε να συμβαδίζουν με τη μορφή Bloch

$$\psi_{vk}(r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{jk \cdot R_n} \phi_\nu(r - R_n) \quad (2.45)$$

Στην περίπτωση αυτή όπως και στις άλλες το πρόβλημα ανάγεται στον υπολογισμό των συντελεστών. Περαιτέρω απλοποίηση είναι δυνατή αν θεωρήσουμε πως η αλληλεπίδραση μεταξύ των ατομικών τροχιακών περιορίζεται μόνο μεταξύ των κοντινότερων γειτόνων. Κάτι τέτοιο δικαιολογείται μόνο για επαρκώς χωρικά περιορισμένα τροχιακά. Η προσέγγιση αυτή καλείται μοντέλο ισχυρού δεσμού (tight binding).

2.4 Καταστάσεις Τάξεως

Η έννοια της αλλαγής φάσεως ενός μέσου είναι διαισθητικά γνωστή στον αναγνώστη κυρίως λόγω του νερού. Στα διαγράμματα φάσης του νερού μπορεί κανείς να δει πως μεταβάλλονται οι φάσεις του νερού μεταβάλλοντας κάποιες μεταβλητές του συστήματος όπως η πίεση, η θερμοκρασία, η ενθαλπία κ.ο.κ. Μια περιοχή του διαγράμματος φάσης στην οποία όλες οι θερμοδυναμικές ποσότητες του συστήματος παραμένουν αναλυτικές συναρτήσεις ονομάζεται περιοχή φάσης. Τέτοιες περιοχές φάσης στο νερό είναι οι γνωστές σε όλους μας στερεή, υγρή και αέρια. Τώρα κατά την μετάβαση από μία από αυτές τις φάσεις σε κάποια άλλη έχουμε κάποια ασυνέχεια σε μία φυσική παράμετρο του συστήματος. Η κατηγοριοποίηση λοιπόν που χρησιμοποιούμε για να κατατάξουμε τις μεταβάσεις τάξεις (η οποία προέρχεται από τον Ehrenfest) είναι η ακόλουθη: Αν όλες οι παράγωγοι μέχρι $n-1$ τάξης του θερμοδυναμικού συνόλου και τα μεγέθη που σχετίζονται με αυτές είναι συνεχείς και η παράγωγος n τάξης είναι ασυνεχής τότε η μετάβαση είναι τάξης n .

Μια κατάσταση στην οποία εμφανίζεται μια τάξη μακράς εμβέλειας, η οποία δεν εμφανιζόταν στην κατάσταση αταξίας του υλικού ονομάζεται κατάσταση τάξεως. Στις καταστάσεις τάξεως έχουμε αυθόρμητο σπάσιμο κάποιων από τις συμμετρίες του συστήματος όπως παραδείγματος χάριν:

- η συμμετρία μεταφοράς στον χώρο
- η συμμετρία περιστροφής στον χώρο
- η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου
- η συμμετρία βαθμίδας

Στις μεταβάσεις η τάξη μικρής εμβέλειας η οποία είναι χαρακτηριστικό του συστήματος σε αταξία δίνει τη θέση της στη τάξη μακράς εμβέλειας η οποία είναι παρατηρήσιμη στην νέα κατάσταση τάξεως.

Η παράμετρος τάξης μιας μετάβασης φάσης είναι μία φυσική ποσότητα που χαρακτηρίζει το σπάσιμο της συμμετρίας που συμβαίνει κατά την μετάβαση φάσης. Μια παράμετρος ορίζεται ανάλογα με την μετάβαση φάσης που λαμβάνει χώρα. Θα πρέπει να είναι μηδενική όταν το υλικό βρίσκεται στην συνηθισμένη κατάσταση του και να αυξάνεται όσο προχωράμε πιο 'βαθιά' μέσα στη νέα φάση. Η κατηγοριοποίηση κατά Ehrenfest με χρήση της παραμέτρου τάξης γίνεται ως εξής: Αν η παράμετρος τάξης είναι ασυνεχής στο σημείο μετάβασης τότε πρόκειται για μετάβασης πρώτης τάξης και μπορούμε να έχουμε συνύπαρξη φάσεων στις κρίσιμες τιμές

των παραμέτρων. Αν η παράμετρος τάξης είναι συνεχής στο σημείο της μετάβασης με ασυνεχή πρώτη παράγωγο τότε πρόκειται για μετάβαση φάσης δεύτερης τάξης. Ομοίως αν η πρώτη παράγωγος είναι συνεχής και η δεύτερη εμφανίζει ασυνέχεια τότε πρόκειται για μετάβαση τρίτης φάσης κ.ο.κ. Μεταβάσεις φάσεις μεγαλύτερες της πρώτης δεν εμφανίζουν συνύπαρξη φάσεων.

2.5 Κύματα πυκνότητας Φορτίου και Σπιν

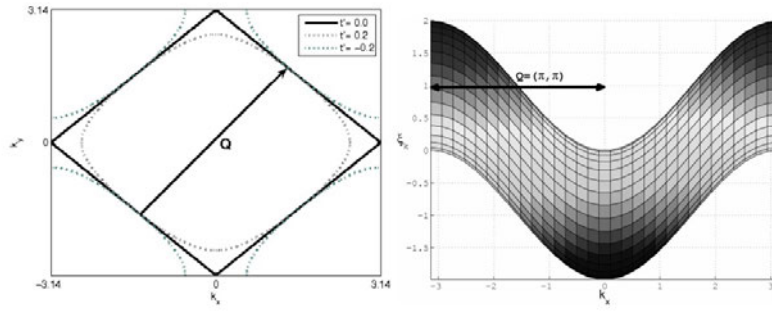
Αφού θα χρησιμοποιήσουμε στη συνέχεια τις καταστάσεις τάξεως των κυμάτων πυκνότητας φορτίου (CDW) και σπιν (SDW), καλό είναι να αναφέρουμε κάποια εισαγωγικά για αυτές τις καταστάσεις. Πολλά περισσότερα μπορεί να βρει κάποιος στη διδακτορική διατριβή του dr. Απέρη [26] καθώς και στις εξής πηγές [13], [7].

Τα κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν είναι καταστάσεις τάξεις οι οποίες εμφανίζονται σε μεταλλικά στερεά λόγω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φωτονίου ή ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Η θεμελιώδης κατάσταση του είναι μια σύμφωνη υπέρθεση ζευγών ηλεκτρονίου-οπής και όπως μαρτυρά και το όνομα τους παρουσιάζουν περιοδική διαμόρφωση της πυκνότητας φορτίου ή σπιν στο χώρο. Στα κύματα πυκνότητας φορτίου το σπάσιμο συμμετρίας αφορά τη μεταφορική συμμετρία ενώ στα κύματα πυκνότητας σπιν σπάει επιπλέον και η συμμετρία περιστροφής σπιν. Η αρχή της κατανόησης των κυμάτων πυκνότητας έγινε από τον Peierls ο οποίος εξέτασε μια αλυσίδα ηλεκτρονίων με πλεγματική απόσταση a σε χαμηλή θερμοκρασία και απέδειξε ότι είναι ενεργειακά προτιμότερο για τα ηλεκτρόνια να πλησιάσουν ανά δύο και να σχηματίσουν ένα πλέγμα με πλεγματική απόσταση $2a$ (σχήμα 2.2). Οι καταστάσεις τάξεις των κυμάτων πυκνότητας είναι πιο συνήθης σε συστήματα περιορισμένων διαστάσεων. Σημαντικό ρόλο για την ύπαρξη τους παίζει η ισχυρή ανισοτροπική δομή των ενεργειακών ζωνών των συστημάτων. Η δομή αυτή οδηγεί σε χαμηλοδιάστατη επιφάνεια Fermi, η οποία παρουσιάζει χαρακτηριστικά συναρμογής (nesting). Υπάρχει δηλαδή ένα χαρακτηριστικό κυματόνυσμα το οποίο ενώνει τα ισοδύναμα σημεία της επιφάνειας Fermi στην πρώτη ζώνη Brillouin. Στο κυματόνυσμα αυτό η επιδεικτικότητα φορτίου/σπιν αποκλίνει, σηματοδοτώντας τη μετάβαση από μέταλλο σε μονωτή εξαιτίας της ύπαρξης χάσματος στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος.

Για ένα σύστημα σε διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με ενεργειακή διασπορά η οποία περιγράφεται από το μοντέλο ισχυρού δεσμού κοντινότερων και αμέσως κοντινότερων γειτόνων, είναι δηλαδή της μορφής $\xi_k = -t(\cos k_x + \cos k_y) - t'\cos k_x \cos k_y$, η επιφάνεια Fermi έχει τη μορφή του σχήματος 2.1(α). Στο σχήμα 2.1(β), για t' υπάρχει ένα κυματόνυσμα $Q = (\pi, \pi)$ τέτοιο ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη τέλεια συναρμογής $\xi_k = -\xi_{k+Q}$.

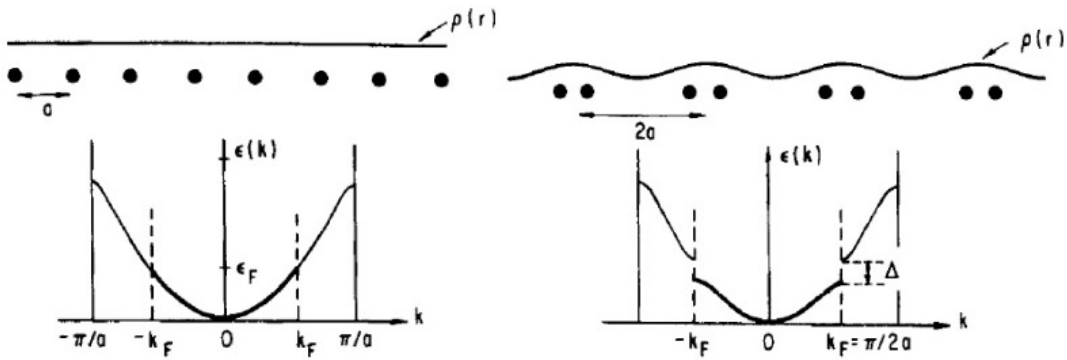
2.5.1 Κύματα Πυκνότητας Φορτίου

Τα κύματα πυκνότητας φορτίου οφείλονται στη παραμόρφωση του πλέγματος λόγω των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-φωτονίου που κάνει ενεργειακά πιο συμφέρουσα την αναδιάταξη του πλέγματος (σχήμα 2.2). Οι δύο περίοδοι που εμφανίζονται στο πλέγμα είναι ανάλογες



Σχήμα 2.1: α) Η επιφάνεια Fermi για ένα τετραγωνικό σύστημα το οποίο περιγράφεται από ένα μοντέλο ισχυρού δεσμού με κοντινούς και αμέσως επόμενους γείτονες. β) Η ενεργειακή ζώνη στη συνθήκη ημικατάλειψης ($t' = 0$) παρουσιάζει τέλεια συναρμογή στο κυματόνισμα Q [26].

του κυματόνισματος της συναρμογής Q ενώ η ηλεκτρική επιδεκτικότητα αποκλίνει στο κυματόνισμα αυτό.



Σχήμα 2.2: Η πυκνότητα φορτίου $\rho(r)$, η παραμόρφωση πλεγματικής σταθεράς a και η ενεργειακή διασπορά στο μονοδιάστατο μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων ($\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, $Q = 2k_f$) όταν (α) $T > T_{CDW}$ και (β) $T < T_{CDW}$ [26]. Για το σχήμα ισχύει $\Delta = W$

Για να περιγραφεί η κατάσταση τάξης CDW χρησιμοποιείται η Χαμιλτονιανή που εισήγαγε πρώτος ο Frölich η οποία περιλαμβάνει την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωνονίου. Εναλλακτικά μπορεί να περιγραφεί από την παρακάτω Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου:

$$H = \sum_k [\xi_k c_k^\dagger c_k + |W| e^{i\phi} c_k^\dagger c_{k+Q} + |W| e^{-i\phi} c_{k+Q}^\dagger c_k] \quad (2.46)$$

με $W \propto \langle c_k^\dagger c_{k+Q} \rangle$. Διαγωνοποιώντας τη Χαμιλτονιανή με τη μέθοδο Bogoliubov που θα δούμε στη συνέχεια προκύπτει η ενεργειακή διασπορά των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων:

$$E_k = \frac{\xi_k + \xi_{k+Q}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_k + \xi_{k+Q}}{2}\right)^2 + W^2} \quad (2.47)$$

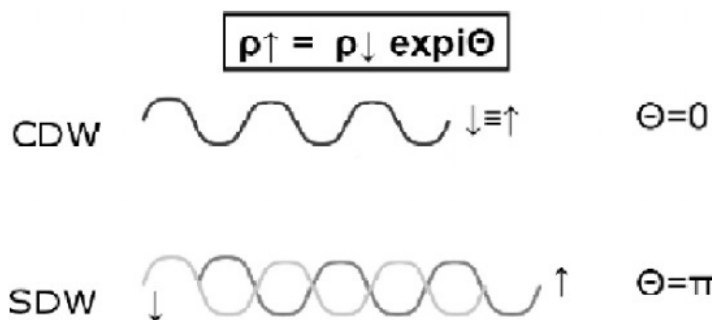
Η μεταβλητή W αποτελεί παράμετρο τάξης του συστήματος και αντιστοιχεί στο άνοιγμα του ενεργειακού χάσματος πάνω από την επιφάνεια Fermi. Όταν $T < T_{CDW}$ παρατηρείται μια μετάβαση μέταλλου-μονωτή. Όταν ικανοποιείται η συνθήκη τέλει συναρμογής, ο όρος έξω από το ριζικό μηδενίζεται και ολόκληρη η επιφάνεια Fermi εξαφανίζεται λόγω του χάσματος. Στην κατάσταση αυτή η πυκνότητα του φορτίου μεταβάλλεται ως εξής:

$$\rho(r) = \rho_0(1 + W \cos(Qr + \phi)) \quad (2.48)$$

Η φάση ϕ δηλώνει ότι το περιοδικό πλέγμα πυκνότητας φορτίου δεν συμπίπτει εν γένει με το ιοντικό πλέγμα. Αυτή η διαφορά φάσης εμφανίζεται όταν το CDW είναι ασύμμετρο, δηλαδή το κυματόνισμα Q είναι άρρητο πολλαπλάσιο της πλεγματικής σταθεράς. Όταν το Q είναι σύμμετρο τότε $\phi = 0$. Η συνθήκη αυτή ικανοποιείται όταν η ενεργειακή ζώνη είναι ημικατελιημένη από ηλεκτρόνια. Στην περίπτωση αυτή, η παραμόρφωση του πλέγματος έχει ως συνέπεια τον διπλασιασμό της μοναδιαίας κυψελίδας και κατά συνέπεια τον υποδιπλασιασμό της ζώνης Brillouin από $(-\pi/\alpha, \pi/\alpha)$ σε $(-\pi/2\alpha, \pi/2\alpha)$.

2.5.2 Κύματα Πυκνότητας Σπιν

Για την μετάβαση στην κατάσταση του κύματος πυκνότητας σπιν ευθύνεται η αλληλεπίδραση Coulomb. Η μετάβαση στη φάση σηματοδοτεί μια αποκλίνουσα μαγνητική επιδεκτικότητα στο κυματόνισμα προσαρμογής Q . Για $T < T_{SDW}$ η πυκνότητα των σπιν παρουσιάζει μια περιοδική διαμόρφωση με αποτέλεσμα η μαγνήτιση στο υλικό να είναι περιοδικά διαμορφωμένη. Έτσι το υλικό συμπεριφέρεται σαν αντισιδηρομαγνήτης. Η μετάβαση σε ένα σύμμετρο SDW έχει ως συνέπεια τον διπλασιασμό της μοναδιαίας κυψελίδας, ο οποίος οδηγεί σε υποδιπλασιασμό της ζώνης Brillouin κατά αντίστοιχο τρόπο με ότι συμβαίνει σε ένα CDW. Εμφανίζεται δε ένα ενεργειακό χάσμα, M , το οποίο αποτελεί παράμετρο τάξης της μετάβασης με σχέση $M \propto \sum_{\sigma} \sigma \langle c_{k,\sigma}^{\dagger}, c_{k+Q,\sigma} \rangle$



Σχήμα 2.3: Σχηματική απεικόνιση της διαμόρφωσης πυκνότητας φορτίου για κάθε ζώνη σπιν $\rho(r)_{\sigma}$, στην CDW και στην SDW φάση.[26]

Μπορούμε να περιγράψουμε εναλλακτικά το SDW σαν μια υπέρθεση ενός CDW στη πάνω σπιν ζώνη και ενός στη κάτω σπιν ζώνη τα οποία παρουσιάζουν διαφορά φάσης μεταξύ τους

π. Οπότε και η ολική πυκνότητα φορτίου παραμένει σταθερή ενώ η πόλωση μεταβάλλεται περιοδικά όπως φαίνεται και στο σχήμα 2.3.

2.6 Συστήματα Ισχυρά συσχετισμένων Ηλεκτρονίων

Στο τέλος της προηγούμενης ενότητας προσεγγίσαμε την επίλυση του προβλήματος πολλών σωμάτων σε ένα στερεό σώμα μέσω της έννοιας του ενεργού δυναμικού. Δυστυχώς όμως δε μπορούμε τόσο με αυτό το μοντέλο όσο και με άλλα μοντέλα τα οποία χειρίζονται της αλληλεπιδράσεις μεταξύ των σωματιδίων, είτε προσεγγιστικά είτε αμελώντας τις τελείως, να εξηγήσουμε πειραματικά δεδομένα σε μια μεγάλη γκάμα συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων. Τέτοια πειραματικά δεδομένα είναι η μετάβαση από μέταλλο σε μονωτή Mott και η υπεραγωγιμότητα υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας. Επίσης το φαινόμενο του αντισιδηρομαγνητισμού που μας απασχολεί ιδιαίτερα στις διατάξεις σπιντρονικής υπαγορεύει κάποιας μορφής θωράκιση (screening) σε τοπικό επίπεδο, οπότε και η χρήση κάποιου μοντέλου για την επίλυση συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων καθίσταται αναγκαία. Για την κατανόηση και περαιτέρω μελέτη αυτών των φαινομένων θα πρέπει να καταφύγουμε σε άλλες μεθόδους όπως αυτή του μέσου πεδίου[28] ή των συναρτήσεων Green, οι οποίες χρησιμοποιούνται ευρέως για τη περιγραφή συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων σωματιδίων. Καταφεύγουμε ξανά λοιπόν στην χαμιλτονιανή ενός σωματιδίου εκπεφρασμένη στη βάση $\{|k\sigma\rangle\}$.

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger + \sum_{\substack{k,k' \\ q \in BZ}} \sum_{\sigma,\sigma'} U(q)^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k,\sigma} \quad (2.49)$$

Οι συντελεστές ϵ_k του ελεύθερου μέρους της Χαμιλτονιανής περιλαμβάνουν τον κινητικό όρο των ηλεκτρονίων, το περιοδικό δυναμικό των ιόντων του πλέγματος καθώς και το ενεργό δυναμικό αλληλεπίδρασης για τα ηλεκτρόνια στις χαμηλότερες ενεργειακές στοιβάδες των ατόμων. Για το αλληλεπιδρών τμήμα της χαμιλτονιανής ισχύει

$$U(q) = \begin{cases} \frac{4\pi e^2}{2V|q|^2} q \neq 0 \\ 0 & q = 0 \end{cases} \quad (2.50)$$

όπου V ο όγκος του συστήματος. Οι συντελεστές $U(q)$ είναι οι συντελεστές Fourier του δυναμικού αλληλεπίδρασης μεταξύ των ηλεκτρονίων της γενικής σχέσης (2.23) Αν υποθέσουμε περιοδικές συνθήκες στα όρια του συστήματος τότε οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίων μπορούν να γραφούν σαν γραμμικός συνδυασμός των τελεστών πεδίου

$$c_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{jkR_i} c_{i\sigma} \quad \text{και} \quad c_{k\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-jkR_i} c_{i\sigma}^\dagger \quad (2.51)$$

Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σχέσεις (2.51) στο ελεύθερο τμήμα της Χαμιλτονιανής προκύπτει:

$$\sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k \frac{1}{N} \sum_i e^{-jkR_i} c_{i\sigma}^\dagger \sum_j e^{jkR_j} c_{j\sigma} \quad (2.52)$$

$$= \sum_{i,j,\sigma} \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k e^{jk(R_j - R_i)} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (2.53)$$

$$= \sum_{i,\sigma} \epsilon_{at} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \sum_{\substack{i,j,\sigma \\ i \neq j}} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \quad (2.54)$$

όπου $\epsilon_{at} \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k$ και $t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_k \epsilon_k e^{jk(R_j - R_i)}$. Ο πρώτος παράγοντας του ελεύθερου τμήματος αποτελεί την ενέργεια που έχει το ηλεκτρόνιο όταν βρίσκεται μόνο του σε ένα πλεγματοειδές σημείο, ενώ ο δεύτερος παράγοντας είναι το κέρδος ενέργειας που προκύπτει από τον απεντοπισμό των ηλεκτρονίων από ένα σημείο του πλέγματος R_i σε ένα σημείο R_j . Μπορούμε να αναλύσουμε και το αλληλεπιδρών μέρος της Χαμιλτονιανής με τον ίδιο τρόπο ως εξής:

$$\sum_{k,k',q,\sigma,\sigma'} U(q) c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k'-q,\sigma'}^\dagger c_{k'\sigma'} c_{k\sigma} = \sum_{i,\sigma,\sigma'} U_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{i\sigma} + \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} V_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{j\sigma'} c_{i\sigma} \quad (2.55)$$

όπου U_i το στοιχείο του πίνακα της αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ δύο κυματοσυναρτήσεων που βρίσκονται στο ίδιο πλεγματοειδές σημείο και V_{ij} το στοιχείο του πίνακα αλληλεπίδρασης Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίου στο σημείο του πλέγματος R_i και ηλεκτρονίου στο σημείο του πλέγματος R_j

2.7 Hubbard Model

Το μοντέλο Hubbard είναι ένα απλοποιημένο πλεγματοειδές μοντέλο πολλών σωματιδίων το οποίο χρησιμοποιήθηκε αρχικά για να γίνει κατανοητή η μετάβαση μετάλλου-μονωτή Mott. Στο μοντέλο Hubbard περιλαμβάνονται μόνο δύο αντικρουόμενες τάσεις μέσα στο στερεό:

- η τάση απεντοπισμού των ηλεκτρονίων για την οποία είναι υπεύθυνη η κινητική ενέργεια
- και η τάση εντοπισμού των ηλεκτρονίων στα σημεία του πλέγματος, η οποία εκφράζεται μέσω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου.

Σε συνέχεια των παραπάνω μπορούμε να κάνουμε τις εξής παρατηρήσεις για το μοντέλο Hubbard οι οποίες στη συνέχεια θα μας βοηθήσουν να συνθέσουμε τη Χαμιλτονιανή που αντιστοιχεί στο συγκεκριμένο μοντέλο.

- Η ενέργεια μεταπήδησης t_{ij} από το πλεγματοειδές σημείο R_i στο πλεγματοειδές σημείο R_j είναι μη μηδενική μόνο για γειτονικές θέσεις του πλέγματος. Πέραν των κοντινότερων γειτόνων θεωρούμε ότι οι κυματοσυναρτήσεις των ηλεκτρονίων φθίνουν εκθετικά και δεν υπάρχει επικάλυψη μεταξύ τους. Οπότε για ένα τετραγωνικό πλέγμα θα ισχύει:

$$t_{ij} = \begin{cases} -t, & \text{αν } R_i \text{ και } R_j \text{ κοντινότεροι γείτονες} \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

- Όμοια η απώθηση Coulomb μεταξύ δύο ηλεκτρονίων είναι μη μηδενική μόνο για τα ηλεκτρόνια στο ίδιο πλεγματοειδές σημείο. Δηλαδή $U_i = U$ και $V_{ij} = 0$.
- Τέλος υποθέτουμε μια μή εκφυλισμένη, στενή ζώνη ενεργειών στην οποία βρίσκονται τα ηλεκτρόνια που μας ενδιαφέρουν και περιγράφονται από το συγκεκριμένο μοντέλο. Για πλέγματα Bravais το μοντέλο περιλαμβάνει μόνο μία ζώνη και σε κάθε σημείο του πλέγματος αντιστοιχεί ένα μοναδικό τροχιακό. Συνεπώς ένα άτομο μπορεί να δεχθεί το πολύ δύο ηλεκτρόνια.

Το απλό μοντέλο Hubbard μπορεί να θεωρηθεί σαν μια γενίκευση του 'tight binding' model. Εκτός από τον κινητικό όρο μεταπήδησης μεταξύ των κοντινότερων γειτόνων περιλαμβάνει και μια τοπική αλληλεπίδραση Coulomb η οποία δεν περιλαμβάνεται στο μοντέλο της μεθόδου Ισχυρού δεσμού.

Σε συνέχεια όλων των παραπάνω μπορούμε να εξάγουμε την χαμιλτονιανή του απλού μοντέλου Hubbard.

$$H - \mu N = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (2.56)$$

ή στην πιο οικεία μορφή

$$H - \mu N = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (2.57)$$

όπου $\langle i, j \rangle$ το άθροισμα ως προς τους κοντινότερους γείτονες. Θεωρούμε το t στον όρο της κινητικής ενέργειας ως θετικό οπότε ο όρος της κινητικής ενέργειας $H_T = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma}$ σημαίνει ότι κατά τη μετάβαση των ηλεκτρονίων από το ένα σημείο του πλέγματος στο άλλο έχουμε κέρδος ενέργειας για το σύστημα. Στην περίπτωση που το πλέγμα αποτελείται από δύο υποπλέγματα έτσι ώστε ο όρος μεταπήδησης να συνδέει ένα σημείο του ενός υποπλέγματος με σημεία του άλλου τότε κάτω από τον σχηματισμό $c_{j\sigma}^{\dagger} \rightarrow -c_{j\sigma}$ για τα σημεία του ενός υποπλέγματος και $c_{i\sigma}^{\dagger} \rightarrow c_{i\sigma}^{\dagger}$ προκύπτει ότι $H_T \rightarrow -H_T$. Αυτή η αλλαγή δε μεταβάλλει τις ιδιότητες του συστήματος απλά κάνει το πρόσημο του t αδιάφορο.

Ο όρος U του δυναμικού μεταξύ ηλεκτρονίων είναι αρνητικός καθώς περιγράφει τις απωστικές δυνάμεις μεταξύ τους. Ωστόσο χρήσιμες είναι και αρνητικές τιμές του δυναμικού αυτού καθώς περιγράφουν μηχανισμούς έμμεσων ελκτικών επιδράσεων όπως ο φωνονικός μηχανισμός ο οποίος οδηγεί στην υπεραγωγιμότητα. Ο τελευταίος όρος είναι ο όρος του χημικού δυναμικού. Αν συμβολίσουμε με N τον αριθμό των σημείων του πλέγματος και με L τον συνολικό αριθμό των ηλεκτρονίων του συστήματος, τότε ο αριθμός από τα ηλεκτρόνια που αντιστοιχούν κατά μέσο όρο σε κάθε σημείο του πλέγματος λέγεται παράγοντας γεμίματος και είναι:

$$ff = \frac{L}{N} = \frac{1}{N} \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \quad (2.58)$$

Για $ff = 1$ το σύστημα είναι ουδέτερο καθώς το θετικό υπόβαθρο των ιόντων εξισορροπείται πλήρως από τα ηλεκτρόνια του πλέγματος. Ο παράγοντας γεμίματος μαζί με την παράμετρο U/t και την θερμοκρασία καθορίζουν τη συμπεριφορά του μοντέλου.

Το μοντέλο Hubbard είναι ένα μοντέλο τεσσάρων καταστάσεων. Οι τέσσερις ιδιοκαταστάσεις στις οποίες μπορεί να βρεθεί ένα σημείο του πλέγματος είναι οι εξής:

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

2.8 Extended Hubbard Model

2.8.1 Extended Hubbard Model στον χώρο θέσεων

Για να εξηγήσουμε συμπεριφορές υλικών που έχουν μεγάλο ερευνητικό ενδιαφέρον θα πρέπει να προσθέσουμε στο απλό μοντέλο Hubbard την δυνατότητα για αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων μεγαλύτερης κλίμακας και να επιτρέψουμε ο κινητικός όρος της χαμιλτονιανής να επεκταθεί και σε σημεία πλέον των κοντινότερων γειτόνων. Έτσι προκύπτει το Extended Hubbard Model με τις εξής επιπλέον παραδοχές σε σχέση με το απλό μοντέλο Hubbard:

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

Όσον αφορά την αλληλεπίδραση μεταξύ σωματιδίων σε γειτονικά σημεία θα θεωρήσουμε ότι για σωματίδια με παράλληλο σπιν, το προερχόμενο από αυτήν την αλληλεπίδραση δυναμικό είναι 0. Οι λόγοι για αυτή μας τη θεώρηση είναι καθαρά φυσικοί. Σύμφωνα με την απαγορευτική αρχή του Pauli, δύο ηλεκτρόνια με παράλληλα σπιν έχουν πολύ μικρή πιθανότητα να βρεθούν σε πολύ μικρή απόσταση μεταξύ τους. Έτσι στην περίπτωση του Extended Hubbard Model θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων με αντιπαράλληλα σπιν αυτή που διαδραματίζει τον σημαντικότερο ρόλο.

Προκύπτει λοιπόν η χαμιλτονιανή του μοντέλου ως εξής:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{ij} \sum_{ss'} \epsilon c_{i,s}^\dagger c_{j,s'} + \frac{1}{N} \sum_i \sum_s U c_{i,s}^\dagger c_{i,s} c_{i,s'}^\dagger c_{i,s'} \\
 & + \frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{ss'} V_{ij} c_{i,s}^\dagger c_{i,s} c_{j,s'}^\dagger c_{j,s'}
 \end{aligned} \tag{2.59}$$

ή στην πιο οικεία μορφή:

$$\begin{aligned}
H - \mu N = & -t \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + t' \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \delta_{i,j+\rho'} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - \mu \sum_i c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} \\
& + U \sum_i c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow} + V \sum_{i,j} \delta_{i,j+\rho} c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} c_{i\uparrow}
\end{aligned} \tag{2.60}$$

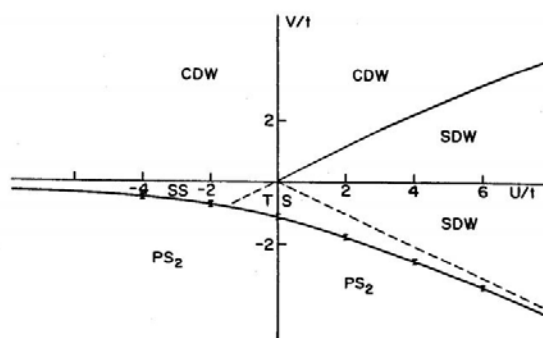
με :

$$\begin{aligned}
\delta_{i,j} &= \begin{cases} 1, & \text{αν } i = j \\ 0, & \text{αλλιώς.} \end{cases} \\
\rho &= \{(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1)\} \\
\rho' &= \{(\pm 1, \pm 1, 0), (\pm 1, 0, \pm 1), (0, \pm 1, \pm 1)\}
\end{aligned}$$

Ανάλογα με τα προηγούμενα για την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων μεταξύ κοντινότερων σημείων του πλέγματος μπορούμε να θεωρήσουμε $V > 0$ ή $V < 0$. Οι του μοντέλου που καθορίζουν την συμπεριφορά του συστήματος και τη φάση στη ν οποία βρίσκεται κάθε φορά το υλικό είναι ο παράγοντας γεμίσματος (ff), οι όροι μεταπήδηση t, t' , τα δυναμικά U και V καθώς και η θερμοκρασία T . Το όριο $|U| \gg t$ και $|V| \gg t'$ αποτελεί την περιοχή ισχυρών συσχετίσεων, ενώ αντίστοιχα για $|U| \ll t$ και $|V| \ll t'$ έχουμε την περιοχή ασθενών συσχετίσεων.

Με την προσθήκη αυτών των παραμέτρων στην περιγραφή της Χαμιλτονιανής γίνεται δυνατή η εμφάνιση ενός πλούτου από φάσεις του συστήματος που προκύπτουν ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων. Έτσι δύναται να εμφανιστούν οι εξής φάσεις: υπεραγωγιμότητα (s-wave SC, d-wave SC, π-wave SC), σιδηρομαγνητισμός, αντισιδηρομαγνητισμός, κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν.

Παρόλη την απλότητα του και την εκτενή μελέτη του, το Extended Hubbard Model δεν είναι απολύτως κατανοητό. Η θεμελιώδης κατάσταση του συστήματος που περιγράφεται από αυτό δεν είναι πλήρως γνωστή συναρτήσει των παραμέτρων που το χαρακτηρίζουν και κυρίως στην περιοχή των μέσων αλληλεπιδράσεων. Παρόλα αυτά προσεγγιστικές μέθοδοι, σαν τη θεωρία μέσου πεδίου που θα εξετάσουμε αργότερα, έχουν αναπτυχθεί και μέσω αυτών έχουν εξαχθεί αποτελέσματα που συμφωνούν με τα πειραματικά δεδομένα. Στη συνέχεια θα παρουσιάσουμε κάποια χαρακτηριστικά αποτελέσματα που έχουν εξαχθεί χρησιμοποιώντας το Extended Hubbard Model.



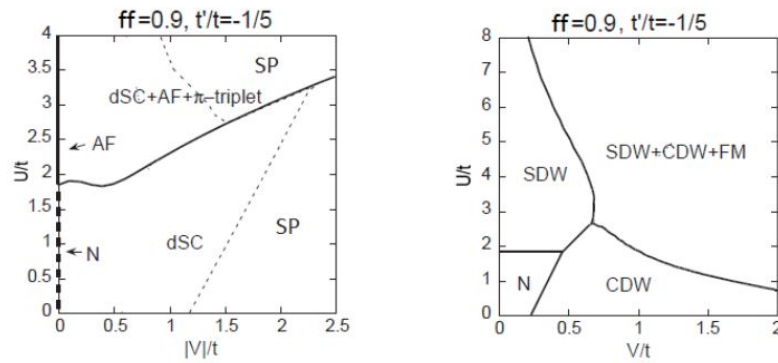
Σχήμα 2.4: Διάγραμμα φάσης για μονοδιάστατο σύστημα με τη μέθοδο μέσου πεδίου για $ff=1$ και $t' = 0$ σε μηδενική θερμοκρασία. SC, η υπεραγωγίμη φάση, CDW το κύμα πυκνότητας φορτίου, SDW το κύμα πυκνότητας σπιν και PS η τάξη μικρής εμβέλειας του συστήματος (κατάσταση αταξίας). Πηγή: [11]

Στο Σχήμα 2.4 φαίνεται το μονοδιάστατο μοντέλο Extended Hubbard για $ff = 1$ και $t' = 0$. Μελετώντας το διάγραμμα αυτό μπορούμε να εξαγάγουμε κάποια συμπεράσματα που θα μας φανούν χρήσιμα και για συστήματα μεγαλύτερης τάξης:

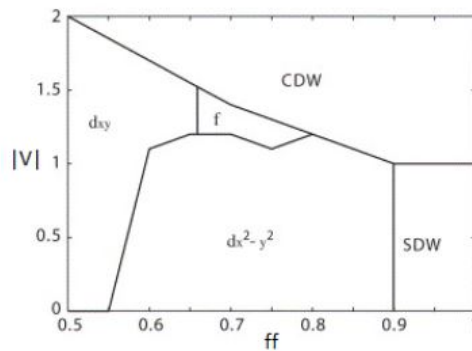
- Η υπεραγωγιμότητα εμφανίζεται για ελκτικό δυναμικό κοντινότερων γειτόνων και ευνοείται από το ελκτικό δυναμικό στο ίδιο πλεγματικό σημείο.
- Για θετικές τιμές των δυναμικών οι φάσεις CDW και SDW ανταγωνίζονται η μία την άλλη. Η συνύπαρξη τους εξαρτάται από τη διάσταση του συστήματος και από τις τιμές των άλλων παραμέτρων του μοντέλου. Για V αρκετά μικρότερο του U ευνοείται η εμφάνιση κύματος πυκνότητας φορτίου, ενώ από μια τιμή του λόγου τους και πάνω η κατάσταση αντιστρέφεται και το κύμα πυκνότητας φορτίου δίνει τη θέση του σε ένα κύμα πυκνότητας σπιν.

Η περίπτωση του διδιάστατου πλέγματος για $ff = 0.9$, δηλαδή έχοντας εισάγει προσμίξεις, φαίνεται στο Σχήμα 2.5. Όσο αναφέρθηκαν παραπάνω είναι επίσης εμφανή και στο συγκεκριμένο διάγραμμα. Σε αυτή την περίπτωση διακρίνονται και συνύπαρξεις φάσεων όπως η συνύπαρξη κύματος πυκνότητας φορτίου με κύμα πυκνότητας σπιν, υπεραγωγιμότητα d-wave με π-triplet υπεραγωγιμότητα και αντισιδερομαγνητισμού.

Στο Σχήμα 2.6 παρατηρείται ένα άλλο αποτέλεσμα που έρχεται σε συμφωνία με τα υπάρχοντα πειραματικά δεδομένα [15]. Για ελκτικό δυναμικό σε μη ντοπαρισμένο σύστημα ($ff = 1$) εμφανίζεται αντισιδερομαγνητική φάση στη θεμελιώδη τους κατάσταση με κατάλληλο συνδυασμό των υπόλοιπων παραμέτρων. Εισάγοντας προσμίξεις στο σύστημα σπάει η συμμετρία ηλεκτρονίων-οπών και η αντισιδερομαγνητική φάση δίνει τη θέση της σε υπεραγωγιμότητα.



Σχήμα 2.5: Διαγράμματα φάσης για διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με την προσέγγιση του μέσου πεδίου για $ff = 0.9$ και $t' = 0.2t$ σε μηδενική θερμοκρασία. Η αριστερή εικόνα αντιστοιχεί σε ελκτικό δυναμικό $V < 0$ και η δεξιά σε απωστικό δυναμικό $V > 0$. Στα δύο διαγράμματα έχουμε $U > 0$. Με AF συμβολίζεται ο αντισιδηρομαγνητισμός.



Σχήμα 2.6: Διαγράμματα φάσης για διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα με την προσέγγιση του μέσου πεδίου για διάφορες τιμές της ελκτικής αλληλεπίδρασης κοντινότερων γειτόνων και του παράγοντα γεμίματος (ff). Το δυναμικό U διατηρείται σταθερό και ίσο με $4t$.

2.8.2 Extended Hubbard Model στον μικτό χώρο θέσεων - ορμών

Για τα συστήματα τα οποία θα μελετήσουμε σε αυτή τη μεταπτυχιακή εργασία γνωρίζουμε ότι οι διεπαφές θα βρίσκονται κάθετες στο επίπεδο x' ενώ κατά τον άξονα y'/y οι περιοχές θα είναι ομοιογενείς. Οπότε είναι επιβεβλημένο να χρησιμοποιήσουμε ένα φορμαλισμό που θα εξετάζει την διάταξη κατά των άξονα x' στον χώρο των θέσεων (αφού θα πρέπει να εξετάσουμε φαινόμενα στο σύνορο των προς μελέτη περιοχών). Δεν είναι ωστόσο απαραίτητο αυτό να πρέπει να γίνει και κατά τον άξονα y'/y . Πιο συγκεκριμένα στον άξονα y'/y μπορούμε να θεωρήσουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες και να περιγράψουμε το σύστημα κατά τον άξονα y'/y στον χώρο των ορμών (καθώς η ορμή αποτελεί διατηρήσιμη ποσότητα σε συστήματα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες). Έτσι περιορίζουμε τους βαθμούς ελευθερίας του

συστήματος και καθιστούμε το πρόβλημα πιο εύκολα υπολογιστικά επιλύσιμο.

Για να μεταβούμε στο χώρο των ορμών στον άξονα $y'y$ θα πρέπει να εφαρμόσουμε το μετασχηματισμό Fourier στους τελεστές πεδίου κατά τον άξονα $y'y$. Εφαρμόζοντας λοιπόν το μετασχηματισμό Fourier προκύπτει:

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

όπου η ορμή $k_y = -\pi + \frac{2\pi n}{N_y}$ ανήκει στο διάστημα $[-\pi, \pi)$ με $n = 0 - (N_y - 1)$ με N_y τα πλεγμιακά σημεία ή αντίστοιχα η διάσταση του συστήματος κατά τον y άξονα. Αντικαθιστώντας τα παραπάνω στην εξίσωση (2.59) προκύπτει η εξής χαμιλτονιανή

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i_x, j_x} \sum_{\delta_y} \sum_{k_y} \sum_{s, s'} \epsilon e^{-k_y \delta_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{j_x, k_y, s'} \\ & + \frac{1}{N_y} \sum_{i_x} \sum_{k_y} \sum_{k'_y, k''_y} \sum_s U_{i_x} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{i_x, k_y + k'_y - k''_y, s} \psi_{i_x, k'_y, s'}^\dagger \psi_{i_x, k''_y, s'} \\ & + \frac{1}{N_y} \sum_{i_x, j_x} \sum_{k_y, \delta_y} \sum_{k'_y, k''_y} \sum_{s, s'} V_{i_x, j_x} e^{i(k'_y - k''_y) \delta_y} \psi_{i_x, k_y, s}^\dagger \psi_{i_x, k_y + k'_y - k''_y, s} \psi_{j_x, k'_y, s'}^\dagger \psi_{j_x, k''_y, s'} \end{aligned} \quad (2.61)$$

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

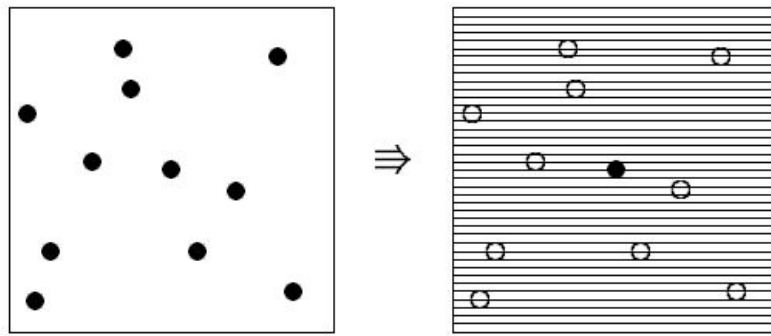
2.9 Προσέγγιση μέσου πεδίου

Το Extended Hubbard model, αν και θεωρητικά είναι ένα απλό μοντέλο που συμπεριλαμβάνει μόνο τις αλληλεπιδράσεις των κοντινότερων και των αμέσως κοντινότερων γειτόνων, εντούτοις περιέχει στην Χαμιλτονιανή του όρο με τέσσερις τελεστές fermi πράγμα που το καθιστά μη ακριβώς επιλύσιμο. Η προσέγγιση που ακολουθείται συχνά για την επίλυση αυτού του προβλήματος είναι η προσεγγιστική μέθοδος του μέσου πεδίου[2]. Σε αυτή τη μέθοδο οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ηλεκτρονίων ενσωματώνονται σε ένα μέσω πεδίο το οποίο α-σχεύεται επάνω στα σωματίδια. Παραστατικά το παραπάνω φαίνεται στο Σχήμα 2.7 . Έτσι το πρόβλημα το οποίο προκύπτει είναι ενός σωματιδίου και κατά συνέπεια ακριβώς επιλύσιμο ¹.

Αν υποθέσουμε λοιπόν δυο φερμιονικούς τελεστές A και B τότε αυτοί γράφονται ως εξής:

$$\begin{aligned} A &= (A - \langle A \rangle) + \langle A \rangle \\ B &= (B - \langle B \rangle) + \langle B \rangle \end{aligned} \quad (2.62)$$

¹μπορούμε πάντα να φέρουμε την Χαμιλτονιανή σε διαγώνια μορφή και να βρούμε έτσι τις ιδιοτιμές της και τα ιδιοδιανύσματά της



Σχήμα 2.7: Παραστατική απεικόνιση της μεθόδου μέσου πεδίου. Αριστερά το πραγματικό σύστημα όπου οι αλληλεπιδράσεις οδηγούν σε συσχέτιση της κίνησης των σωματιδίων. Δεξιά φαίνονται οι αλληλεπιδράσεις επάνω στο μαύρο σωματίδιο που έχουν αντικατασταθεί από τις μέσες αλληλεπιδράσεις οφειλόμενες στη μέση πυκνότητα των σωματιδίων σύμφωνα με τη μέθοδο μέσου πεδίου

Σαν το άθροισμα δηλαδή της μέσης τιμής τους και της διακύμανσής τους γύρω από την μέση τιμή. Το γινόμενο των δύο αυτών τελεστών AB θα πάρει λοιπόν σύμφωνα με τα παραπάνω την εξής τιμή:

$$\begin{aligned}
 AB &= [(A - \langle A \rangle) + \langle A \rangle][(B - \langle B \rangle) + \langle B \rangle] \\
 &= (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) + (A - \langle A \rangle)\langle B \rangle \\
 &\quad + \langle A \rangle(B - \langle B \rangle) + \langle A \rangle\langle B \rangle \\
 &= (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) + A\langle B \rangle - \langle A \rangle\langle B \rangle \\
 &\quad + \langle A \rangle B - \langle A \rangle\langle B \rangle + \langle A \rangle\langle B \rangle \\
 &= (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) + A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle\langle B \rangle
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

Η προσέγγιση της μεθόδου του μέσου πεδίου έγκειται στο γεγονός ότι θεωρούμε την διακύμανση γύρω από τη μέση τιμή μικρή οπότε ο όρος $(A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle)$ αμελείται. Επίσης ο όρος $\langle A \rangle\langle B \rangle$ αν και παίζει μεγάλο ρόλο στον υπολογισμό των θερμοδυναμικών ποσοτήτων μπορεί εν αρχή να αμεληθεί αφού συμβάλει απλά μια σταθερά και μπορεί ως εκ τούτου να απορροφηθεί με ένα μετασχηματισμό βαθμίδας. Έτσι λοιπόν προκύπτει ότι

$$AB \approx A\langle B \rangle + \langle A \rangle B \tag{2.64}$$

Οπότε τελικά προκύπτει σύμφωνα με την παραπάνω σχέση ότι το γινόμενο δύο τελεστών μας δίνει τη σύζευξη του πρώτου επί το μέσο πεδίο του δευτέρου και τη σύζευξη του δευτέρου με το μέσο πεδίο του πρώτου.

2.9.1 Προσέγγιση μέσου πεδίου στον πραγματικό χώρο

Μπορούμε λοιπόν να εφαρμόσουμε τη σχέση (2.64) στο αλληλεπιδρόν μέρος της Χαμιλτονιανής, λαμβάνοντας υπόψιν και τις αντιμεταθετικές σχέσεις των φερμιονικών τελεστών

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} &= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \\ &= -c_{i\uparrow} c_{j\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \end{aligned} \quad (2.65)$$

εφαρμόζουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου για κάθε δυνατό ζεύγος τελεστών του όρου αλληλεπιδράσεων, αφού κάθε συνδυασμός μπορεί να έχει σημαντική συμμετοχή στο μέσο πεδίο:

$$\begin{aligned} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} &\approx \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \\ &\quad - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle - \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \rangle \\ &\quad + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle + \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \langle c_{j\downarrow} c_{i\uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (2.66)$$

όπου τα πρόσημα -1 οφείλονται στις μεταθέσεις μεταξύ δύο τελεστών.

Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου που προκύπτει από την παραπάνω προσέγγιση για τη χαμιλτονιανή μέσου πεδίου στον πραγματικό χώρο σχέση(2.61) είναι:

$$\begin{aligned} H_{MF} &= \sum_{ij} \sum_{ss'} [U_i(1 - \delta_{ss'})\delta_{ij} + V_{ij}] \langle c_{js}^\dagger c_{js} \rangle \langle c_{j's'}^\dagger c_{j's'} \rangle \\ &\quad + \sum_{ij,s} -U_i(1 - \delta_{ss'})\delta_{ij} \langle c_{js}^\dagger c_{j's'} \rangle \langle c_{i's'}^\dagger c_{is} \rangle \\ &\quad - \sum_{ij} \sum_{ss'} V_{ij} \langle c_{j's'}^\dagger c_{is} \rangle \langle c_{is}^\dagger c_{j's'} \rangle \\ &\quad + \sum_{ij} \sum_{ss'} [U_i\delta_{ij}(1 - \delta_{ss'} + V_{ij})] \langle c_{j's'}^\dagger c_{is}^\dagger \rangle \langle c_{i,s} c_{j's'} \rangle \end{aligned} \quad (2.67)$$

2.9.2 Προσέγγιση μέσου πεδίου στον μικτό χώρο θέσεων-ορμών

Η αντίστοιχη χαμιλτονιανή για την προσέγγιση μέσου πεδίου στο χώρο των θέσεων-ορμών αντικαθιστώντας αντίστοιχα

$$\psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} = \langle \psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} \rangle + \{ \psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} - \langle \psi_{i_x, k_y, s}^{(\dagger)} \psi_{j_x, k'_y, s'}^{(\dagger)} \rangle \} \quad (2.68)$$

και

$$k'_y - k''_y = q_y \quad (2.69)$$

προκύπτει ως:

$$\begin{aligned}
H_{MF} = & \frac{1}{N_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'}^{q_y, \delta_y} [U_i(1 - \delta_{ss'})\delta_{i,j} + V_{ij}e^{iq_y\delta_y}] \langle \psi_{j, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s} \rangle \psi_{i, k_y, s'}^\dagger \\
& - \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} U_i \delta_{i,j} \langle \psi_{j, k'_y, s}^\dagger \psi_{j, k'_y + q_y, s'} \rangle \psi_{i, k_y, s}^\dagger \\
& - \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} V_{ij} e^{ik_y\delta_y} \langle \psi_{i, k'_y, s}^\dagger \psi_{i, k'_y + q_y, s'} \rangle e^{-ik_y\delta_y} \psi_{j, k_y + q_y, s'} \psi_{i, k_y, s} \\
& - \frac{1}{N_y} \sum_{q_y, \delta_y} \sum_{k_y, k'_y} \sum_{ij, ss'} [U_i \delta_{ij}(1 - \delta_{s,s}) + V_{ij} e^{ik'_y\delta_y}] \langle \psi_{j, -k'_y, s'} \psi_{i, k'_y + q_y, s} \rangle e^{-ik_y\delta_y} \psi_{i, k_y, s}^\dagger \psi_{j, -k_y + q_y, s'}^\dagger
\end{aligned} \tag{2.70}$$

Για τον υπολογισμό των μέσων τιμών που εμφανίζονται στην παραπάνω Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου εφαρμόζονται εφαρμόζεται μια από τις ακόλουθες δύο ισοδύναμες μεθόδους.

- Είτε οι μέσες τιμές προσδιορίζονται αυτοσυνεπώς χρησιμοποιώντας τη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου:

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

- Είτε προσδιορίζονται ως οι τιμές που ελαχιστοποιούν το μεγαλοκανονικό δυναμικό:

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

Χρησιμοποιώντας οποιαδήποτε από τις δύο αυτές μεθόδους προκύπτουν οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας ως προς την παράμετρο που μελετάμε.

2.10 Σπινωριακός Φορμαλισμός κατά Nambu

Αν μια Χαμιλτονιανή εκφράζεται σαν:

$$H = \sum_{ij} a_i^\dagger h_{ij} a_j \tag{2.71}$$

με h τετραγωνικό πίνακα, τότε για την επίλυση του προβλήματος το οποίο περιγράφει αρκεί η διαγωνοποίηση του πίνακα h και στη συνέχεια το γέμισμα των ενεργειακών επιπέδων που προκύπτουν ως ιδιοενέργειες με οιονεί σωματίδια, με τρόπο που να ικανοποιείται η απαγορευτική αρχή Pauli.

2.10.1 Σπινωριακός Φορμαλισμός κατά Nambu στο χώρο θέσεων

Για να εχμεταλλευτούμε το παραπάνω θεώρημα στην περίπτωση μας θα πρέπει να φέρουμε την χαμιλτονιανή μέσου πεδίου στην μορφή της εξίσωσης (2.71).

Εισάγουμε λοιπόν τον σπίνορα.

$$\Psi_i^\dagger = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow}^\dagger & c_{i\downarrow}^\dagger & c_{i\uparrow} & c_{i\downarrow} \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

και αντίστοιχα τον αναστροφοσυζυγή του.

$$\Psi_i = \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \\ c_{i\uparrow}^\dagger \\ c_{i\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.73)$$

και ορίζοντας τα παρακάτω πεδία για τη περίπτωση του προβλήματος στον αμιγώς πραγματικό χώρο.

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_i &= \sum_{j,s} \left[\frac{U_i}{2} \delta_{ij} + V_{ij} \right] \langle c_{js}^\dagger c_{js} \rangle & \tilde{h}_i^\mu &= \sum_{j,ss'} -\frac{U_i}{2} \delta_{ij} \langle c_{js}^\dagger [\sigma_\mu]_{ss'} c_{js} \rangle \\ \tilde{\mu}_{ij} &= -\frac{1}{2} \sum_s V_{ij} \langle c_{js}^\dagger c_{is} \rangle & \tilde{h}_{ij}^\mu &= -\frac{1}{2} \sum_{ss'} V_{ij} \langle c_{js}^\dagger [\sigma_\mu]_{ss'} c_{is} \rangle \\ \tilde{\Delta}_{ij} &= \sum_{ss'} (U_i \delta_{ij} + \frac{1}{2} V_{ij}) \langle c_{js'}^\dagger [i\sigma_y \sigma_0]_{ss'} c_{is}^\dagger \rangle \\ \tilde{\Delta}_{ij}^\mu &= \frac{1}{2} \sum_{ss'} V_{ij} \langle c_{js'}^\dagger [i\sigma_y \sigma_\mu]_{ss'} c_{is}^\dagger \rangle \end{aligned} \quad (2.74)$$

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 (\tilde{h}_i^μ και \tilde{h}_{ij}^μ) και σε singlet και triplet υπεραγωγία πεδία ($\tilde{\Delta}_{ij}$ και $\tilde{\Delta}_{ij}^\mu$). Στην παρούσα μεταπτυχιακή δίνεται περισσότερη βαρύτητα στα εκτεταμένα πεδία φορτίου και στα εκτεταμένα μαγνητικά πεδία. Με τη χρήση τους η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου γράφεται:

$$H_{MF} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \Psi_i^\dagger [\tau_z(0)(\tilde{\mu}, \tilde{h}_{ij}) + \tau_x(y)(t_z \tilde{\Delta}_{ij}, \tilde{\Delta}_{ij}) i\sigma_y] \cdot (\sigma_o, \tilde{\sigma}) \Psi_j \quad (2.75)$$

Χρησιμοποιώντας λοιπόν τον σπίνορα της σχέσης (2.77), η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου παίρνει την προσδοκώμενη μορφή $\sum_{i,j} \Psi_i^\dagger h_{ij} \Psi_j$.

2.10.2 Σπιντοριακός Φορμαλισμός κατά Nambu στο μικτό χώρο θέσεων-ορμών

Αντίστοιχα μπορούμε να εξάγουμε παρόμοιες εξισώσεις και για την περίπτωση που εξετάζουμε το σύστημα στον χώρο των θέσεων κατά τον x άξονα και στον χώρο των ορμών στον y άξονα όπως περιγράφεται και στη διδακτορική του Γεωργίου Λιβανά (EMΠ 2016)[25]

Εισάγουμε λοιπόν τον σπίνωρα:

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

και τον αναστροφουσυζυγή του

$$\Psi_{i,k_y,q_y}^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_{i_x,k_y,s} \\ \psi_{i_x,k_y,s'} \\ \psi_{i_x,-k_y,s}^\dagger \\ \psi_{i_x,-k_y,s'}^\dagger \\ \psi_{i_x,k_y+q_y,s} \\ \psi_{i_x,k_y+q_y,s'} \\ \psi_{i_x,-k_y+q_y,s}^\dagger \\ \psi_{i_x,-k_y+q_y,s'}^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.77)$$

ορίζοντας τα εξής πεδία για το πρόβλημα έχουμε:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_i^{q_y} &= \frac{1}{N_y} \sum_{k'_y,s} \sum_{j,\delta_y} \left[\frac{U_i}{2} \delta_{i,j} + V_{ij} e^{iq_y \delta_y} \right] \langle \psi_{j,k'_y,s}^\dagger \psi_{j,k'_y+q_y,s} \rangle \\ \tilde{h}_i^{\mu,q_y} &= \frac{1}{N_y} \sum_{k'_y,ss'} \sum_{j,\delta_y} -\frac{U_i}{2} \delta_{i,j} \langle \psi_{j,k'_y,s}^\dagger [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{j,k'_y+q_y,s'} \rangle \\ \tilde{\mu}_{ij}^{k_y,q_y} &= -\frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y,s} \sum_{j,\delta_y} V_{ij} e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{i,k'_y,s}^\dagger \psi_{j,k'_y+q_y,s} \rangle e^{-ik_y \delta_y} \\ \tilde{h}_{ij}^{\mu,k_y,q_y} &= -\frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y,ss'} \sum_{j,\delta_y} V_{ij} e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{i,k'_y,s}^\dagger [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{j,k'_y+q_y,s'} \rangle e^{-ik_y \delta_y} \\ \tilde{\Delta}_{ij}^{0,k_y,q_y} &= \frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y,s} \sum_{j,\delta_y} [U_i \delta_{i,j} + V_{ij} e^{ik'_y \delta_y}] \langle \psi_{j,-k_y+q_y,s'} \psi_{i,k'_y,s} \rangle e^{-ik_y \delta_y} \\ \tilde{\Delta}_{ij}^{\mu,k_y,q_y} &= \frac{1}{2N_y} \sum_{k'_y,ss'} \sum_{j,\delta_y} V_{ij} e^{ik'_y \delta_y} \langle \psi_{j,-k_y+q_y,s'} [\sigma^\mu]_{ss'} \psi_{i,k'_y,s} \rangle e^{-ik_y \delta_y} \end{aligned} \quad (2.78)$$

Χρησιμοποιώντας τον παραπάνω σπίνωρα, τα παραπάνω ορισμένα πεδία καθώς 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 μορφή.

$$H_{MF} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k_y,q_y} \Psi_{i,k_y,q_y}^\dagger \left[\rho_x(y) (\tau_z(0) (\tilde{\mu}_{ij}^{q_y}, \tilde{h}_{ij}^{q_y}) + \tau_y(x) (\tilde{\Delta}_{ij}^{0,q_y}, \tilde{\Delta}_{ij}^{q_y} i\sigma_y)) \right] (\sigma_0, \tilde{\sigma}) \Psi_{j,k_y,q_y} \quad (2.79)$$

Η εξίσωση (2.79) περιέχει την ίδια πληροφορία με την 2.75 στο χώρο των θέσεων. Παρατηρούμε ωστόσο ότι η χαμιλτονιανή (2.79) έχει μπλόκ-διαγώνια μορφή στο χώρο των ορμών k_y και q_y . Στην περιγραφή αυτή μας δίνεται όμως η δυνατότητα να επιλέξουμε ποιές συνιστώσες είναι πεπερασμένες. Συγκεκριμένα εμείς θα ασχοληθούμε μόνο με συστήματα που μόνο οι συνιστώσες $q_y = 0$ και $q_y = Q_y = \pi$ είναι πεπερασμένες. Στην περίπτωση αυτή

λοιπόν η Χαμιλτονιανή απλοποιείται ως εξής:

$$\begin{aligned}
 H_{MF} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k_y} \Psi_{i,k_y}^\dagger & [\rho_{z(0)}(\tau_{z(0)}(\tilde{\mu}_{ij}, \tilde{h}_{ij}) + \tau_{y(x)}(\tilde{\Delta}_{ij}^0, \tilde{\Delta}_{ij} i\sigma_y) \\
 & + \rho_{x(y)}(\tau_{z(0)}(\tilde{\mu}_{ij}^{Q_y}, \tilde{h}_{ij}^{Q_y}) + \tau_{y(x)}(\tilde{\Delta}_{ij}^{0,Q_y}, \tilde{\Delta}_{ij}^{Q_y} i\sigma_y))] (\sigma_0, \tilde{\sigma}) \Psi_{j,k_y}
 \end{aligned} \tag{2.80}$$

όπου $\Psi_{i,k_y}^\dagger = \Psi_{i,k_y,Q_y}^\dagger$. Η επίλυση του συστήματος θα αποφέρει μικρότερη πληροφορία καθώς ένα μεγάλο κομμάτι της είναι ήδη ανακτημένο. Έτσι η αριθμητική επίλυση τη εξ.(2.80) έχει σημαντικά μικρότερες υπολογιστικές απαιτήσεις από την επίλυση της εξ.(2.75) στο χώρο των θέσεων.

Κεφάλαιο 3

Μέθοδος Υπολογισμού

3.1 Φορμαλισμός Bogoliubov - de Gennes

Η διαγωνοποίηση της Χαμιλτονιανής h γίνεται εφικτή εισάγοντας τον παρακάτω μετασχηματισμό, γνωστό και ως μετασχηματισμό Bogoliubov-de Gennes:

$$\begin{aligned}c_{i\uparrow} &= \sum_n (\gamma_{n\uparrow} u_{ni} - \gamma_{n\downarrow}^\dagger v_{ni}^*) \\c_{i\downarrow} &= \sum_n (\gamma_{n\downarrow} u_{ni} + \gamma_{n\uparrow}^\dagger v_{ni}^*)\end{aligned}\tag{3.1}$$

και αντίστοιχα για τους τελεστές δημιουργίας:

$$c_{i\uparrow}^\dagger = \sum_n n (\gamma_{n\uparrow}^\dagger u_{ni}^* - \gamma_{n\downarrow} v_{ni})\tag{3.2}$$

$$c_{i\downarrow}^\dagger = \sum_n n (\gamma_{n\downarrow}^\dagger u_{ni}^* + \gamma_{n\uparrow} v_{ni})\tag{3.3}$$

$c_{i\sigma}, c_{i\sigma}^\dagger$ είναι οι γνωστοί τελεστές δημιουργίας και καταστροφής σωματιδίων στη θέση R_i και σπιν σ , οι οποίοι γράφονται σαν γραμμικοί συνδυασμοί $2N$ νέων τελεστών δημιουργίας και καταστροφής οιονεί σωματιδίων στις καταστάσεις n ($\gamma_{n\sigma}^\dagger, \gamma_{n\sigma}$). Οι μιγαδικοί συντελεστές u_{ni}, v_{ni} είναι μεταβλητές προς προσδιορισμό έτσι ώστε να επιτευχθεί η διαγωνοποίηση της Χαμιλτονιανής ως:

$$H_{MF} - \mu N = E_0 + \sum_{n,\sigma} E_n \gamma_{n\sigma}^\dagger \gamma_{n\sigma}\tag{3.4}$$

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

Οι παραπάνω τελεστές θα πρέπει να συνεχίσουν να διατηρούν τον φερμιονικό χαρακτήρα των τελεστών και η μορφή τους να παραμένει αμετάβλητη κάτω από κανονικούς μετασχηματισμούς:

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

Επειδή στα παραδείγματα που θα ακολουθήσουν οι καταστάσεις τάξεις που εξετάζονται είναι CDW και SDW μπορούμε να απλοποιήσουμε περαιτέρω το φορμαλισμό και βασιζόμενοι στην διδακτορική διατριβή του dr Κοτετέ [27] και του dr Απέρη [26] να περιγράψουμε την χαμιλτονιανή μέσου πεδίου ως εξής στο χώρο των ορμών.

$$H_{MF} = \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^\dagger [\epsilon(k) - \mu] c_{k,\sigma} + \sum_{k,\sigma} c_{k+Q,\sigma}^\dagger [\epsilon(k) - \mu] c_{k+Q,\sigma} + \sum_{k,\sigma} \{ c_{k,\sigma}^\dagger [M_Q(k) + \sigma H_Q(k)] c_{k+Q,\sigma} + c_{k+Q,\sigma}^\dagger [M_Q(k) \sigma H_Q(k)] c_{k,\sigma} \} \quad (3.5)$$

όπου ο δείκτης $\sigma = \pm$ αντιστοιχεί στις δύο δυνατές πολώσεις του ηλεκτρονιακού σπιν \uparrow, \downarrow ενώ οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας που αφορούν τις παραμέτρους τάξεως του συστήματος είναι οι παρακάτω:

$$M_Q(k) = -\frac{1}{N/2} \sum_{k \in B.Z.} \sum_{\sigma} \frac{\langle c_{k,\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} + c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \rangle}{4} \quad (3.6)$$

$$H_Q(k) = -\frac{1}{N/2} \sum_{k \in B.Z.} \sum_{\sigma} \sigma \frac{\langle c_{k,\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} + c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \rangle}{4}$$

όπου στην παρούσα διπλωματική μας απασχολούν μόνο οι συμβατικές καταστάσεις τάξεως. Σε αυτό το σημείο θα επαναλάβουμε το μετασχηματισμό Bogoliubov αλλά αυτή τη φορά στο χώρο των ορμών και σε μητρική μορφή.

$$\begin{pmatrix} c_{k,\sigma} \\ c_{k+Q,\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\sigma(k) & -v_\sigma^*(k) \\ v_\sigma(k) & u_\sigma^*(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{k,\sigma} \\ \gamma_{k+Q,\sigma} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

αν γράψουμε τη χαμιλτονιανή 3.5 και αντικαταστήσουμε τις εξισώσεις του μετασχηματισμού Bogoliubov της σχέσης 3.7, προκύπτουν τα εξής.

$$\begin{aligned} H_{MF} &= \sum_{k,\sigma=\pm} \begin{pmatrix} c_{k,\sigma}^\dagger & c_{k+Q,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\mu + \epsilon(k) & M_Q(k) + \sigma H_Q(k) \\ M_Q(k) + \sigma H_Q(k) & -\mu - \epsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k,\sigma} \\ c_{k+Q,\sigma} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{k,\sigma=\pm} \begin{pmatrix} \gamma_{k,\sigma}^\dagger & \gamma_{k+Q,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma^*(k) & v_\sigma^*(k) \\ -v_\sigma(k) & u_\sigma(k) \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} -\mu + \epsilon(k) & M_Q(k) + \sigma H_Q(k) \\ M_Q(k) + \sigma H_Q(k) & -\mu - \epsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma(k) & -v_\sigma^*(k) \\ v_\sigma(k) & u_\sigma^*(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{k,\sigma} \\ \gamma_{k+Q,\sigma} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{k,\sigma=\pm} \begin{pmatrix} \gamma_{k,\sigma}^\dagger & \gamma_{k+Q,\sigma}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma^*(k) & v_\sigma^*(k) \\ -v_\sigma(k) & u_\sigma(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{+,\sigma}(k) u_\sigma(k) & -E_{-,\sigma}(k) v_\sigma^*(k) \\ E_{+,\sigma}(k) v_\sigma(k) & E_{-,\sigma}(k) u_\sigma^*(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{k,\sigma} \\ \gamma_{k+Q,\sigma} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{k,\sigma=\pm} \{ E_{+,\sigma}(k) [|u_\sigma(k)|^2 + |v_\sigma|^2] \gamma_{k,\sigma}^\dagger \gamma_{k,\sigma} + E_{-,\sigma}(k) [|u_\sigma(k)|^2 + |v_\sigma|^2] \gamma_{k+Q,\sigma}^\dagger \gamma_{k+Q,\sigma} \} \\ &= \sum_{k,\sigma=\pm} [E_{+,\sigma}(k) \gamma_{k,\sigma}^\dagger \gamma_{k,\sigma} + E_{-,\sigma}(k) \gamma_{k+Q,\sigma}^\dagger \gamma_{k+Q,\sigma}] \end{aligned} \quad (3.8)$$

Τα στοιχεία του πίνακα του μετασχηματισμού οφείλουν να ικανοποιούν τις εξισώσεις Bogoliubov-de Gennes.

$$\begin{pmatrix} -\mu + \epsilon(k) & M_Q(k) + \sigma H_Q(k) \\ M_Q(k) + \sigma H_Q(k) & -\mu - \epsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\sigma(k) \\ v_\sigma(k) \end{pmatrix} = E_{+,\sigma}(k) \begin{pmatrix} u_\sigma(k) \\ v_\sigma(k) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\begin{pmatrix} -\mu + \epsilon(k) & M_Q(k) + \sigma H_Q(k) \\ M_Q(k) + \sigma H_Q(k) & -\mu - \epsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -v_\sigma^*(k) \\ u_\sigma^*(k) \end{pmatrix} = E_{-,\sigma}(k) \begin{pmatrix} -v_\sigma^*(k) \\ u_\sigma^*(k) \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

υπό την επιπρόσθετη συνθήκη κανονικοποίησης $|u_\sigma(k)|^2 |v_\sigma|^2 = 1$. Οι παραπάνω εξισώσεις υπαγορεύουν ότι η κάθε στήλη του πίνακα μετασχηματισμού αποτελεί ένα ιδιοδιάνυσμα της Χαμιλτονιανής Μέσου Πεδίου. Προκύπτουν λοιπόν οι προς διερεύνηση μεταβλητές:

$$u_\sigma = e^{i\phi_\sigma(k)} \sqrt{\frac{E_\sigma(k) + \epsilon(k)}{2E_\sigma(k)}} \quad v_\sigma(k) = e^{i\theta_\sigma(k)} \sqrt{\frac{E_\sigma(k) - \epsilon(k)}{2E_\sigma(k)}} \quad (3.11)$$

με $E_\sigma(k) = \sqrt{|\epsilon(k)|^2 + M_Q(k) + \sigma H_Q(k)}^2$ και $E_{\nu,\sigma}(k) = -\mu + \nu E_\sigma(k)$, όπου $\nu = \pm$. Οι ενεργειακές διασπορές $E_{\nu,\sigma}(k)$ αντιστοιχούν στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος. Κανονικά οι παράμετροι u_σ και v_σ έχουν κάποια διαφορά φάσης μεταξύ τους η οποία υπαγορεύεται από τον εκθέτη των δύο σχέσεων. Εμείς όμως επειδή έχουμε συμπεριλάβει μόνο πραγματικά μέσα πεδία δεν περιμένουμε να έχουμε κάποια διαφορά φάσης οπότε οι σχέσεις για τις μεταβλητές καταλήγουν στις:

$$u_\sigma = \sqrt{\frac{E_\sigma(k) + \epsilon(k)}{2E_\sigma(k)}} \quad v_\sigma(k) = \sqrt{\frac{E_\sigma(k) - \epsilon(k)}{2E_\sigma(k)}} \quad (3.12)$$

Έχοντας υπολογίσει λοιπόν τα ιδιοδιανύσματα μπορούμε να προσδιορίσουμε την μορφή των εξισώσεων αυτοσυνέπειας για τα κύματα πυκνότητας στον χώρο των ορμών. Αρκεί να εκφράσουμε τις αναμενόμενες τιμές των τελεστών $\langle c_{k,\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} \rangle$ και $\langle c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \rangle$ βάσει των νέων τελεστών γ .

$$\begin{aligned} \langle c_{k,\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} \rangle &= \langle [u_\sigma^*(k)\gamma_{k,\sigma}^\dagger - v_\sigma(k)\gamma_{k+Q,\sigma}^\dagger][v_\sigma(k)\gamma_{k,\sigma} + u_\sigma^*(k)\gamma_{k+Q,\sigma}] \rangle \\ &= u_\sigma^*(k)v_\sigma(k)\{n_F[E_{+,\sigma}(k)] - n_F[E_{-,\sigma}(k)]\} \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \langle c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \rangle &= \langle [v_\sigma^*(k)\gamma_{k,\sigma}^\dagger + u_\sigma(k)\gamma_{k+Q,\sigma}^\dagger][u_\sigma(k)\gamma_{k,\sigma} - v_\sigma^*(k)\gamma_{k+Q,\sigma}] \rangle \\ &= u_\sigma(k)v_\sigma^*(k)\{n_F[E_{+,\sigma}(k)] - n_F[E_{-,\sigma}(k)]\} \end{aligned} \quad (3.14)$$

οπότε αντικαθιστώντας τα $u_\sigma(k)$ και $v_\sigma(k)$ έχουμε.

$$\begin{aligned} \langle c_{k,\sigma}^\dagger c_{k+Q,\sigma} + c_{k+Q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \rangle &= [u_\sigma^*(k)v_\sigma(k) + u_\sigma(k)v_\sigma^*(k)]\{n_F[E_{+,\sigma}(k)] - n_F[E_{-,\sigma}(k)]\} \\ &= \frac{M_Q(k) + \sigma H_Q(k)}{E_\sigma(k)}\{n_F[E_{+,\sigma}(k)] - n_F[E_{-,\sigma}(k)]\} \end{aligned} \quad (3.15)$$

και οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας παίρνουν τη μορφή.

$$M_Q = \frac{1}{n/2} \sum_{k,\sigma} \frac{n_F[E_{-, \sigma}(k)] - n_F[E_{+, \sigma}(k)]}{2E_\sigma(k)} (M_Q + \sigma H_Q) \quad (3.16)$$

$$H_Q = \frac{1}{n/2} \sum_{k,\sigma} \frac{n_F[E_{-, \sigma}(k)] - n_F[E_{+, \sigma}(k)]}{2E_\sigma(k)} (H_Q + \sigma M_Q) \quad (3.17)$$

Παρατηρούμε ότι οι εξισώσεις για τις παραμέτρους τάξεις είναι συζευγμένες. Η καθεμία επηρεάζει και επηρεάζεται από την άλλη.

3.2 Συστήματα Ετεροδομών

Θα περιγραφεί στη συνέχεια, βασιζόμενοι στο φορμαλισμό που αναπτύχθηκε στις προηγούμενες ενότητες, μια ετεροδομή. Η επέκταση της ανάλυσης σε συστήματα πολλών ετεροδομών είναι άμεση. Αν θεωρήσουμε τη διεπαφή κατά τον άξονα y τότε η Χαμιλτονιανή του συνολικού συστήματος θα είναι η εξής:

$$H = H_L + H_R + H_T \quad (3.18)$$

όπου H_A με $A = L$ ή R η Χαμιλτονιανή που περιγράφει το σύστημα αριστερά η δεξιά αντίστοιχα της διεπαφής και H_T η Χαμιλτονιανή σύζευξης των δύο αυτών περιοχών.

Οι τελεστές H_A της χαμιλτονιάνης του Extended Hubbard Model έχουν τη μορφή που έχει παρουσιαστεί και στα προηγούμενα με:

$$H_A = \sum_{i,j,\sigma} \epsilon_{ijA} c_{i\sigma A}^\dagger c_{j\sigma A} + \sum_{i,j} V_{ijA} c_{i\uparrow A}^\dagger c_{j\downarrow A}^\dagger c_{j\downarrow A} c_{i\uparrow A} \quad (3.19)$$

με

$$\begin{aligned} \epsilon_{ijA} = & -t_{x_A} \delta_{i,j+(\pm 1,0,0)} - t_{y_A} \delta_{i,j+(0,\pm 1,0)} - t_{z_A} \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} \\ & + t'_{xy_A} \delta_{i,j+(\pm 1,\pm 1,0)} + t'_{xz_A} \delta_{i,j+(\pm 1,0,\pm 1)} + t'_{yz_A} \delta_{i,j+(0,\pm 1,\pm 1)} \end{aligned} \quad (3.20)$$

και

$$V_{ijA} = U_A \delta_{i,j} + V_{xA} \delta_{i,j+(\pm 1,0,0)} + V_{yA} \delta_{i,j+(0,\pm 1,0)} + V_{zA} \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} \quad (3.21)$$

η δε Χαμιλτονιανή σύζευξης έχει την παρακάτω μορφή:

$$H_T = \sum_{i,j,\sigma} \sum_{A,B} t_{ij}^m c_{i\sigma A}^\dagger c_{j\sigma B} + \sum_{i,j} \sum_{A,B} V_{ij}^m c_{i\uparrow A}^\dagger c_{j\downarrow B}^\dagger c_{j\downarrow B} c_{i\uparrow A} \quad (3.22)$$

όπου αντίστοιχα ισχύουν

$$t_{ij}^m = -t_z^m \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} + t_{xz}^m \delta_{i,j+(\pm 1,0,\pm 1)} + t_{yz}^m \delta_{i,j+(0,\pm 1,\pm 1)} \quad (3.23)$$

και

$$V_{ij}^m = V_z^m \delta_{i,j+(0,0,\pm 1)} \quad (3.24)$$

Στην περίπτωση της Χαμιλτονιανής στη διεπαφή η άθροιση γίνεται για όλα τα σημεία που βρίσκονται στη διεπαφή. Αυτό σημαίνει ότι ένα ηλεκτρόνιο (ή αντίστοιχα μία οπή) μπορεί να μεταπηδήσει από το ένα υποσύστημα στο άλλο μόνο μέσω των σημείων που βρίσκονται στην διεπιφάνεια.

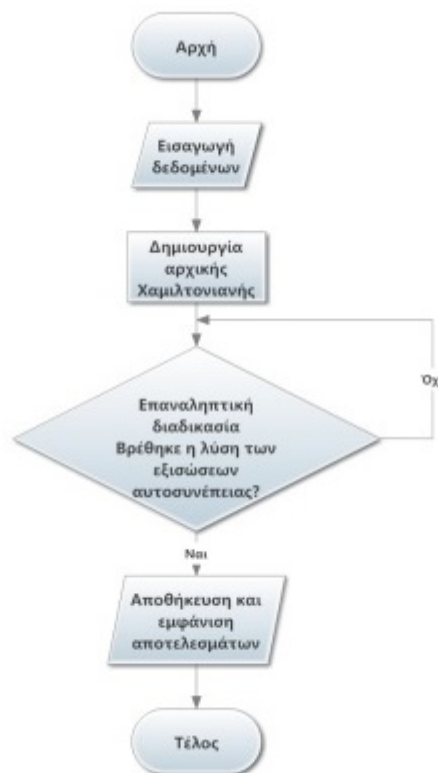
3.2.1 Διαδικασία επίλυσης

Θα χρησιμοποιήσουμε τον μικτό φορμαλισμό που περιγράφει και ο κύριος Λιβανάς στην διδακτορική του διατριβή [25]. Μπορούμε να εξετάσουμε τις διατάξεις αυτές στον πραγματικό χώρο x κατά μήκος της γεωμετρίας της οποίας χρησιμεύει λειτουργικά η διάταξη. Για τη δε διάσταση y μπορούμε να πάρουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Η ορμή αποτελεί όμως διατηρήσιμη ποσότητα για συστήματα με περιοδικές συνθήκες και έτσι μπορούμε να μεταβούμε στο χώρο των ορμών καθιστώντας το πρόβλημα ευκολότερα επιλύσιμο.

Η διαδικασία για την επίλυση των προβλημάτων συνοψίζοντας είναι η εξής:

- προσέγγιση με τη μέθοδο του μέσου πεδίου της παραπάνω Χαμιλτονιανή (3.18).
- διαγωνιοποίηση της προσεγγιστικής Χαμιλτονιανή μέσω των εξισώσεων Bogoliubov - de Gennes.
- ελαχιστοποίηση της ελεύθερης ενέργειας του συστήματος.

η με τη μορφή διαγραμματός ροής στο σχήμα (3.1) όπως έχει παρουσιαστεί στη διπλωματική του κυρίου Χριστοδούλου[28].



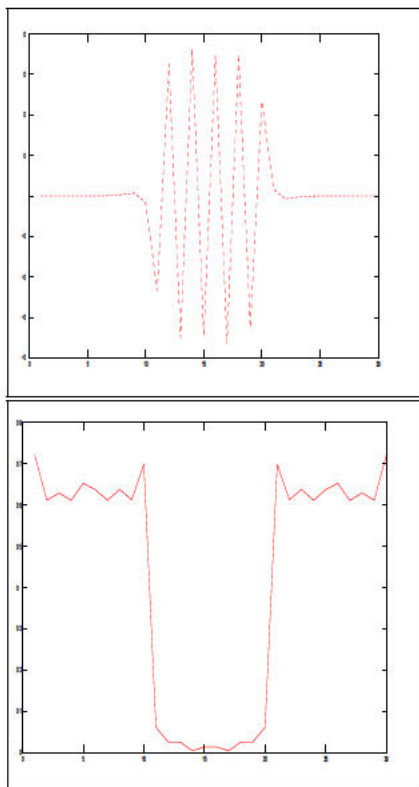
Σχήμα 3.1: Διάγραμμα ροής για την μέθοδο επίλυσης.

3.3 Παραδείγματα Ετεροδομών που εμπλέκονται στη Σπιντρονική

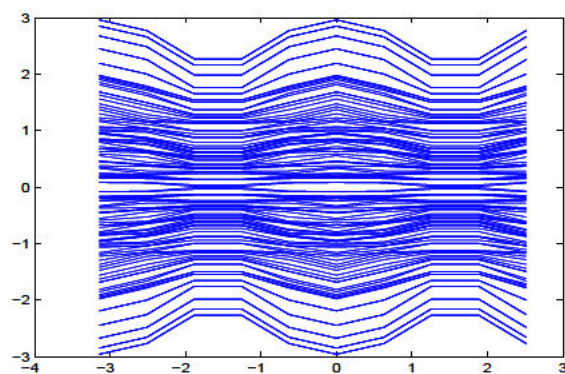
Σε συνέχεια όσων αναφέρθηκαν στα προηγούμενα κεφάλαια θα παραθέσουμε μερικά αποτελέσματα για διατάξεις σπιντρονικής. Πιο συγκεκριμένα θα εξετάσουμε τις ‘κλασσικές’ πλέον διατάξεις σιδηρομαγνητικής σπιντρονικής, που είναι οι μαγνητικές διεπαφές σήραγγος MTJ, αλλά και τις αντίστοιχες διατάξεις που έχουν προκύψει με χρήση αντισιδηρομαγνητικών υλικών.

3.3.1 Ετεροδομές Σιδηρομαγνήτη/Μονωτή/Σιδηρομαγνήτη

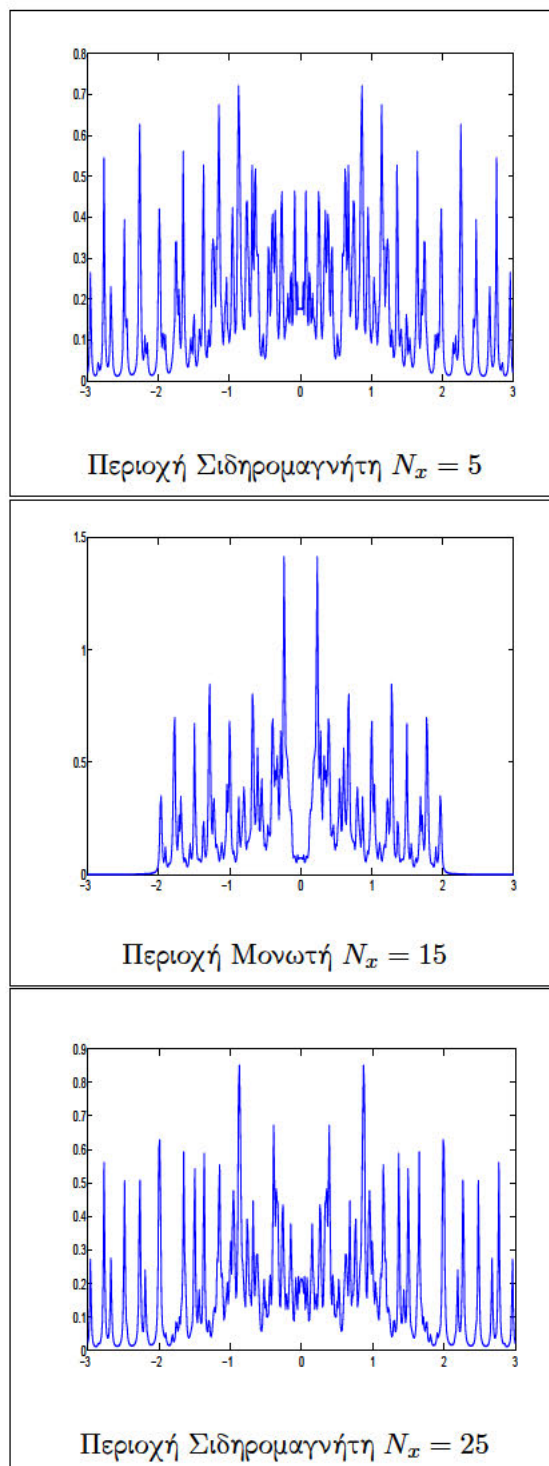
Οι ‘κλασσικές’ διατάξεις MTJ οι οποίες αποτελούνται από ετεροδομές σιδηρομαγνήτη/μονωτή, μονωτή/σιδηρομαγνήτη μπορούν να προσομοιωθούν στην περίπτωση μας με μια ετεροδομή FM/CDW/FM όπου FM είναι σιδηρομαγνήτης και CDW κύμα πυκνότητας φορτίου το οποίο βέβαια είναι μονωτής. Μελετήθηκαν οι δύο διαφορετικοί προσανατολισμοί των μαγνητικών πεδίων (δηλαδή παράλληλοι και αντιπαράλληλοι) στα σιδηρομαγνητικά στρώματα και παρακάτω παρουσιάζονται κάποια γραφικά αποτελέσματα. Για τον παράλληλο προσανατολισμό των δύο μαγνητικών πεδίων έχουμε τα ακόλουθα:



Σχήμα 3.2: Στην παραπάνω εικόνα, στο επάνω παράθυρο έχουμε ένα CDW που δρα σαν μονωτής ενώ στο κάτω παράθυρο έχουμε τις δύο σιδηρομαγνητικές περιοχές αριστερά και δεξιά της περιοχής του CDW. Και οι δύο με την ίδια κατεύθυνση πόλωσης

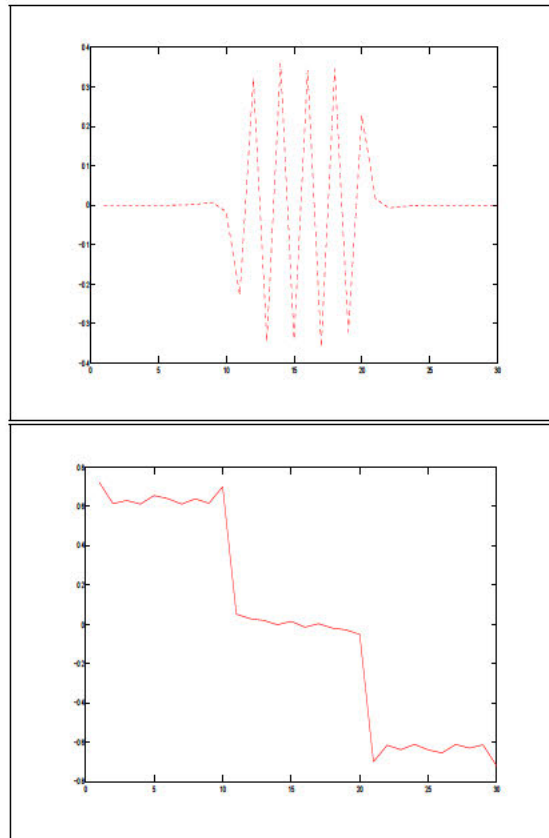


Σχήμα 3.3: Σχέση διασποράς της ενέργειας για την σιδηρομαγνητική MTJ για παράλληλο προσανατολισμό των στρωμάτων.

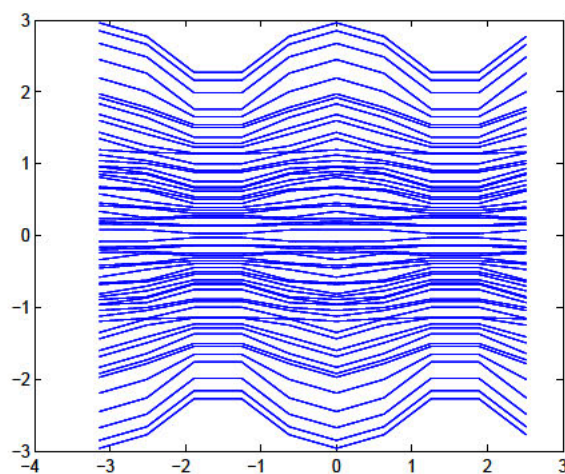


Σχήμα 3.4: Τοπική Πυκνότητα Καταστάσεων για $N_x = 5, 15, 25$ αντίστοιχα για παράλληλη πόλωση

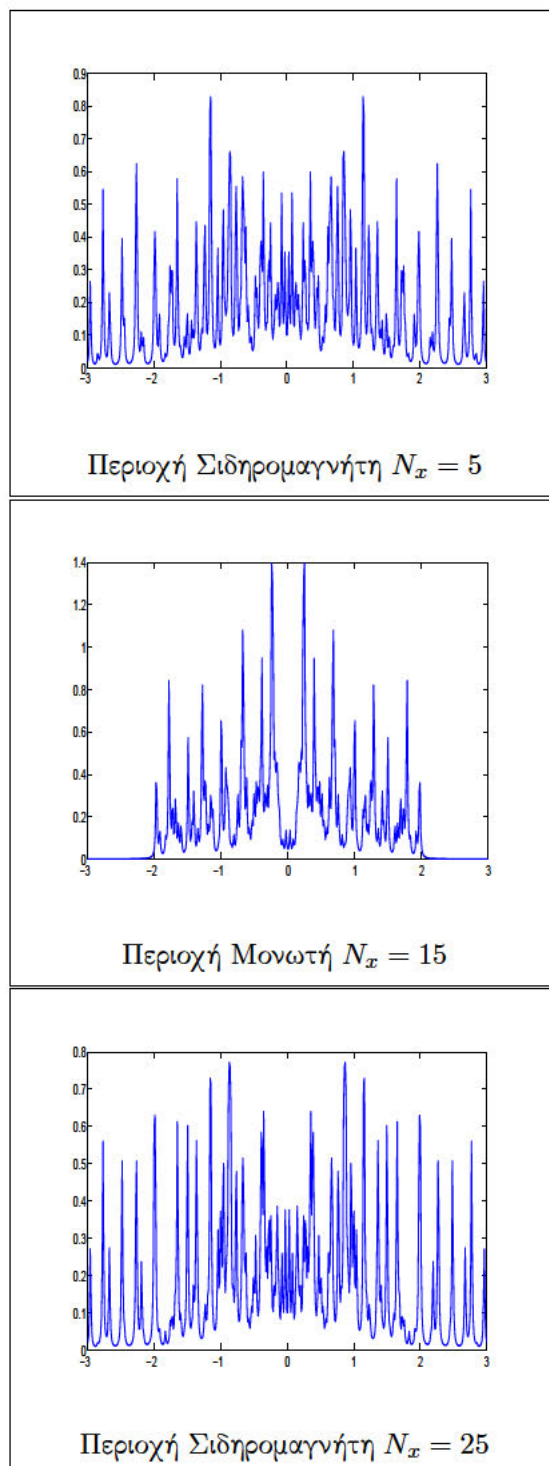
Για τον αντιπαράλληλο προσανατολισμό των πεδίων έχουμε:



Σχήμα 3.5: Στην παραπάνω εικόνα, στο επάνω παράθυρο έχουμε ένα CDW που δρα σαν μονωτής ενώ στο κάτω παράθυρο έχουμε τις δύο σιδηρομαγνητικές περιοχές αριστερά και δεξιά της περιοχής του CDW. Οι δύο σιδηρομαγνητικές περιοχές έχουν αντιπαράλληλη πόλωση



Σχήμα 3.6: Σχέση διασποράς της ενέργειας για την σιδηρομαγνητική MTJ για αντιπαράλληλο προσανατολισμό των στρωμάτων.



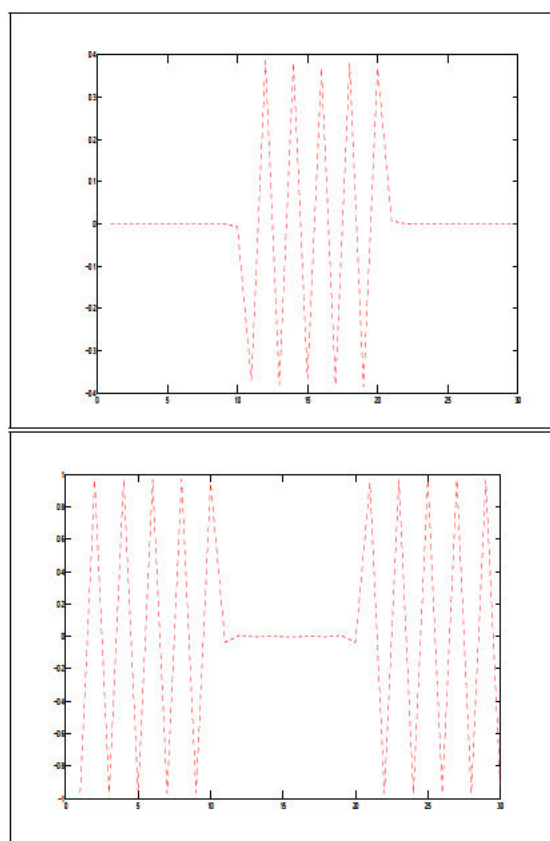
Σχήμα 3.7: Τοπική Πυκνότητα Καταστάσεων για $N_x = 5, 15, 25$ αντίστοιχα για αντιπαράλληλη πόλωση

3.3.2 Ετεροδομές Αντισιδηρομαγνήτη/Μονωτή/Αντισιδηρομαγνήτη

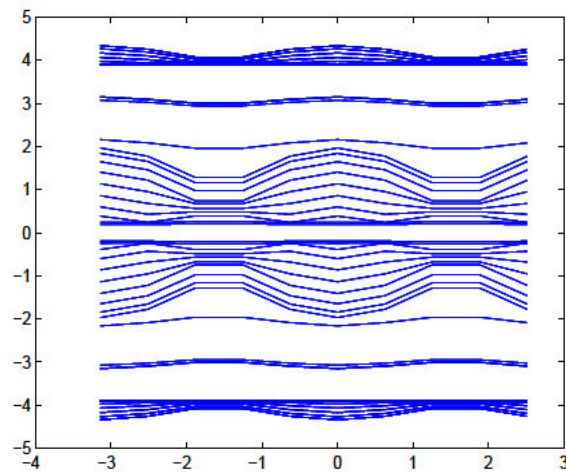
Μπορούμε να μοντελοποιήσουμε τις διατάξεις της αντισιδηρομαγνητικής σπιντρονικής που αποτελούνται από ετεροδομές Αντισιδηρομαγνήτη/Μονωτή και Μονωτή/Αντισιδηρομαγνήτη

με ετεροδομές SDW/CDW και CDW/SDW αντίστοιχα. Αντίστοιχα με παραπάνω θα καταγράψουμε τα αποτελέσματα για παράλληλο και αντιπαράλληλο προσανατολισμό της πόλωσης.

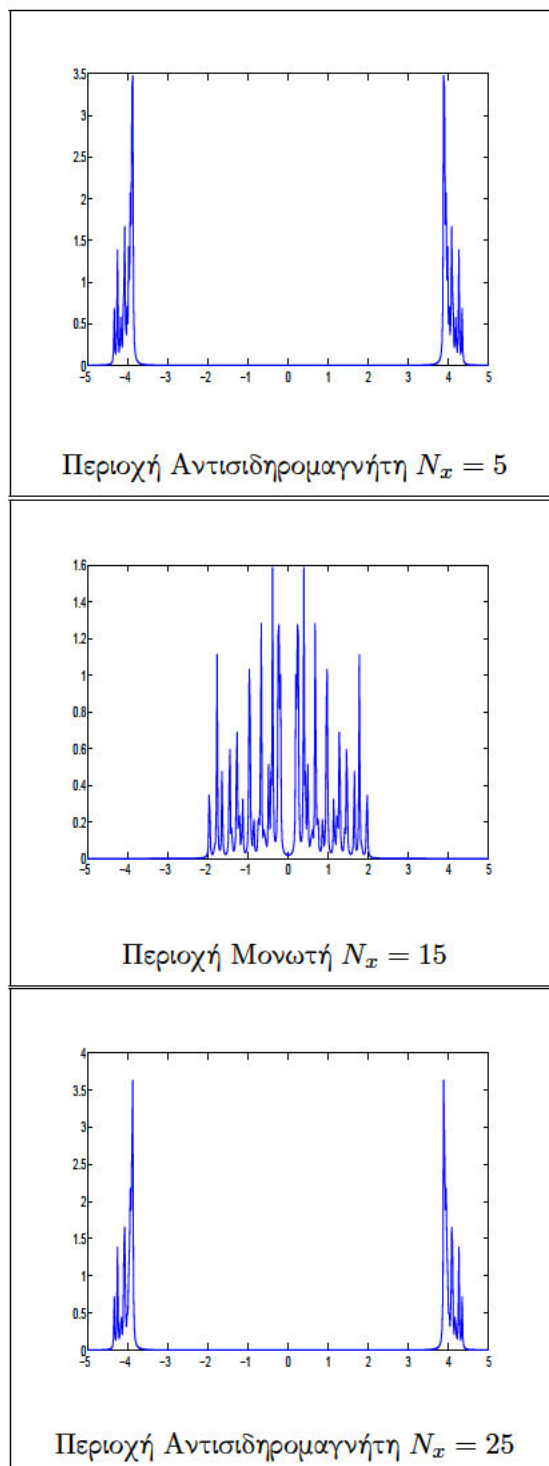
Για τον παράλληλο προσανατολισμό των δύο μαγνητικών πεδίων έχουμε τα ακόλουθα:



Σχήμα 3.8: Στην παραπάνω εικόνα, στο επάνω παράθυρο έχουμε ένα CDW που δρα σαν μονωτής ενώ στο κάτω παράθυρο έχουμε τις δύο αντισηδηρομαγνητικές περιοχές (SDW) αριστερά και δεξιά της περιοχής του CDW. Και οι δύο με την ίδια κατεύθυνση πόλωσης

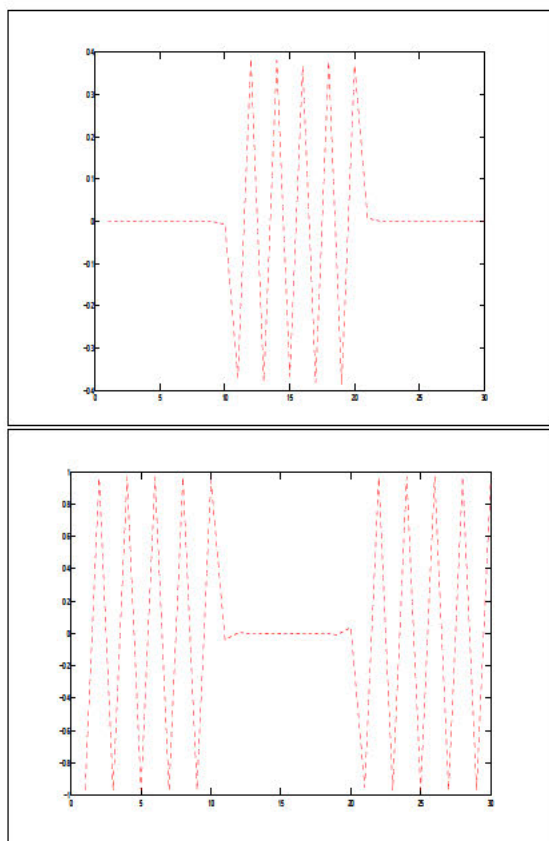


Σχήμα 3.9: Σχέση διασποράς της ενέργειας για την αντισιδηρομαγνητική ΜΤJ για παράλληλο προσανατολισμό των στρωμάτων.

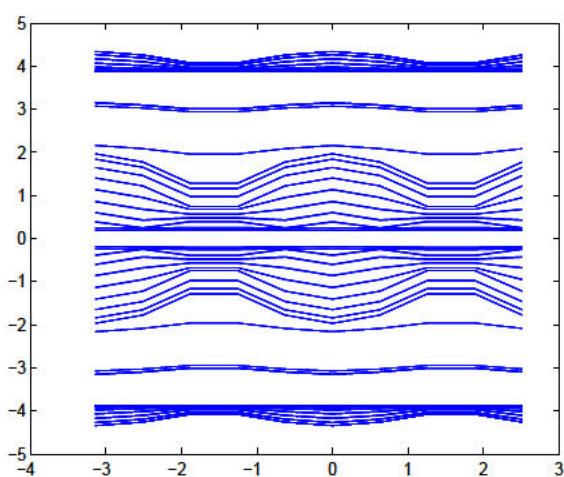


Σχήμα 3.10: Τοπική Πυκνότητα Καταστάσεων για $N_x = 5, 15, 25$ αντίστοιχα για παράλληλη πόλωση

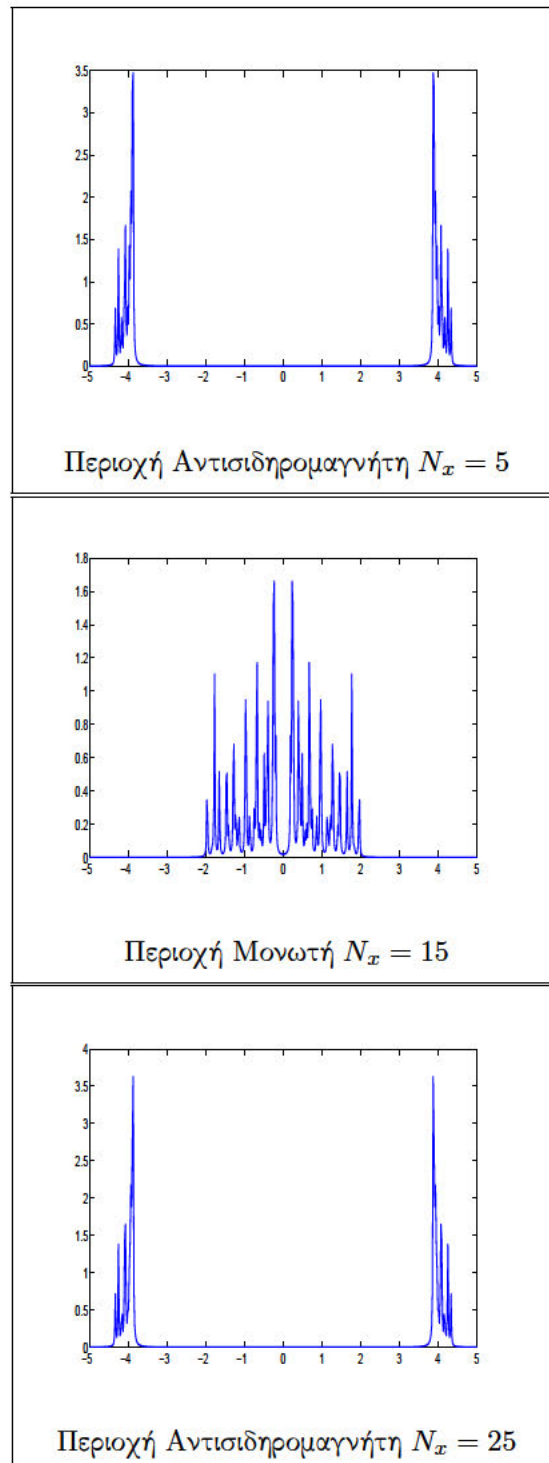
Για τον αντιπαράλληλο προσανατολισμό των πεδίων έχουμε:



Σχήμα 3.11: Στην παραπάνω εικόνα, στο επάνω παράθυρο έχουμε ένα CDW που δρα σαν μονωτής ενώ στο κάτω παράθυρο έχουμε τις δύο αντισιδηρομαγνητικές περιοχές (SDW) αριστερά και δεξιά της περιοχής του CDW. Η σχετική πόλωση των δύο αντισιδηρομαγνητικών στρωμάτων είναι αντιπαράλληλη.



Σχήμα 3.12: Σχέση διασποράς της ενέργειας για την αντισιδηρομαγνητική MTJ για αντιπαράλληλο προσανατολισμό των στρωμάτων.



Σχήμα 3.13: Τοπική Πυκνότητα Καταστάσεων για $N_x = 5, 15, 25$ αντίστοιχα για παράλληλη πόλωση

3.3.3 Συμπέρασμα

Αυτοί οι προκαταρκτικοί υπολογισμοί αποδεικνύουν ότι η μέθοδος που εφαρμόστηκε είναι επιτυχής. Χρειάστηκαν μόνο μερικά λεπτά υπολογισμού σε ένα μέτριο φορητό υπολογιστή

για να μοντελοποιήσουμε μια ετεροδομή από αυτές που ενδεχομένως εμπλέκονται σε βασικές διατάξεις της σπιντρονικής. Συμπεραίνουμε ότι η προσέγγιση αυτή είναι μια καλή βάση για την πιο συστηματική μοντελοποίηση στο μέλλον διατάξεων ενδιαφέροντος για την σπιντρονική όπου θα εισαχθούν ρεύματα και οι αλληλεπιδράσεις των ρευμάτων αυτών με τα φορτία και τα σπιν. Αυτό θα επιτρέψει την μοντελοποίηση πραγματικών διατάξεων σπιντρονικής.

Βιβλιογραφία

- [1] Jayasimha Atulasimha and Supriyo Bandyopadhyay. *Nanomagnetic and Spintronic Devices for Energy-Efficient Memory and Computing*.
- [2] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics*. Oxford University Press, 2016.
- [3] Kerem Yunus Camsari. *Modular Approach to Spintronics*. Apr. 2015. URL: <https://nanohub.org/resources/22224>.
- [4] L. Chang et al. “A brief introduction to giant magnetoresistance”. In: *ArXiv e-prints* (Dec. 2014). arXiv: 1412.7691 [cond-mat.mtrl-sci].
- [5] Supriyo Datta. *Lessons from Nanoelectronics*. World Scientific Publishing Co Pte Ltd, 2018.
- [6] Supriyo Datta and Biswajit Das. “Electronic analog of the electro-optic modulator”. In: *Applied Physics Letters* 56.7 (1990), pp. 665–667. DOI: 10.1063/1.102730.
- [7] L. P. Gor’kov and G. Grüner. *Charge Density Waves in Solids*. Elsevier Science, 1989.
- [8] Jun Hayakawa et al. “Current-Driven Magnetization Switching in CoFeB/MgO/CoFeB Magnetic Tunnel Junctions”. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 44.No. 41 (2005), pp. L1267–L1270. DOI: 10.1143/jjap.44.11267.
- [9] M. Johnson. “Bipolar Spin Switch”. In: *Science* 260.5106 (1993), pp. 320–323. DOI: 10.1126/science.260.5106.320.
- [10] J. A. Katine et al. “Current-Driven Magnetization Reversal and Spin-Wave Excitations in Co /Cu /Co Pillars”. In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (14 Apr. 2000), pp. 3149–3152. DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.3149. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.3149>.
- [11] H. Q. Lin, D. K. Campbell, and R. T. Clay. “Broken Symmetries in the One-Dimensional Extended Hubbard Model”. In: *Chinese Journal of Physics* 38.1 (2000).
- [12] X. Marti et al. “Room-temperature antiferromagnetic memory resistor”. In: *Nature Materials* 13.4 (2014), pp. 367–374. DOI: 10.1038/nmat3861.
- [13] P. Monceau. “Electronic crystals: an experimental overview”. In: *Advances in Physics* 61 (Aug. 2012), pp. 325–581. DOI: 10.1080/00018732.2012.719674. arXiv: 1307.0929 [cond-mat.str-el].

- [14] N. F. Mott. “The Electrical Conductivity of Transition Metals”. In: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 153.880 (1936), pp. 699–717. DOI: 10.1098/rspa.1936.0031.
- [15] Seiichiro Onari et al. “Phase diagram of the two-dimensional extended Hubbard model: pairing from charge and spin fluctuations”. In: *Physica B: Condensed Matter* 359-361 (2005), pp. 518–520. DOI: 10.1016/j.physb.2005.01.133.
- [16] H. Reichlová et al. “Current-induced torques in structures with ultrathin IrMn antiferromagnets”. In: 92.16, 165424 (2015), p. 165424. DOI: 10.1103/PhysRevB.92.165424. arXiv: 1503.03729 [cond-mat.mes-hall].
- [17] G Schmidt and L W Molenkamp. “Spin injection into semiconductors, physics and experiments”. In: *Semiconductor Science and Technology* 17.4 (2002), p. 310. URL: <http://stacks.iop.org/0268-1242/17/i=4/a=304>.
- [18] R. Shan et al. “Demonstration of Half-Metallicity in Fermi-Level-Tuned Heusler Alloy $\text{CO}_2\text{FeAl}_{0.5}\text{Si}_{0.5}$ at Room Temperature”. In: *Physical Review Letters* 102.24 (2009). DOI: 10.1103/physrevlett.102.246601.
- [19] J.C. Slonczewski. “Current-driven excitation of magnetic multilayers”. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 159.1 (1996), pp. L1–L7. ISSN: 0304-8853. DOI: [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(96\)00062-5](https://doi.org/10.1016/0304-8853(96)00062-5). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885396000625>.
- [20] Jacob Torrejon et al. “Neuromorphic computing with nanoscale spintronic oscillators”. In: *Nature* 547.7664 (2017), pp. 428–431. DOI: 10.1038/nature23011.
- [21] K. Watanabe et al. “Shape anisotropy revisited in single-digit nanometer magnetic tunnel junctions”. In: *Nature Communications* 9.1 (2018). DOI: 10.1038/s41467-018-03003-7.
- [22] Shuu’ichirou Yamamoto and Satoshi Sugahara. “Nonvolatile Static Random Access Memory Using Magnetic Tunnel Junctions with Current-Induced Magnetization Switching Architecture”. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 48.4 (2009), p. 043001. DOI: 10.1143/jjap.48.043001.
- [23] J. Železný et al. “Relativistic Néel-Order Fields Induced by Electrical Current in Antiferromagnets”. In: *Physical Review Letters* 113.15, 157201 (Oct. 2014), p. 157201. DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.157201. arXiv: 1410.8296 [cond-mat.mtrl-sci].
- [24] J. Železný et al. “Spin transport and spin torque in antiferromagnetic devices”. In: *Nature Physics* 14.3 (2018), pp. 220–228. DOI: 10.1038/s41567-018-0062-7.
- [25] Λιβανάς Γεώργιος. ‘Θεωρητική μελέτη νέων λειτουργικών υλικών και νανοδομών από την συνύπαρξη και τον ανταγωνισμό κβαντικών καταστάσεων τάξης’. Διδακτορική διατρ. ΕΜΠ: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Οκτ. 2016.

- [26] Απέρης Παναγιώτης. ‘Μελέτη ανομοιογενών ηλεκτρονικών καταστάσεων σε υλικά ισχυρά συσχετισμένων φορέων’. Διδακτορική διατρ. ΕΜΠ: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Μάι. 2012.
- [27] Κοτετές Παναγιώτης. ‘Θεωρητική και υπολογιστική μελέτη της δυναμικής ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονικών συστημάτων παρουσία κβαντικών καταστάσεων τάξεως’. Διδακτορική διατρ. ΕΜΠ: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Μάι. 2011.
- [28] Χριστοδούλου Παναγιώτης. ‘Κβαντικές Καταστάσεις Τάξεως στις Διεπιφάνειες $\text{LaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$, $\text{LaVO}_3/\text{SrTiO}_3$ και $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ ’. Μεταπτυχική διπλ. εργασ. ΕΜΠ: Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Φεβ. 2013.

