Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και
Φυσικών Επισημών - Τομέας Φυσικής

Διπλωματική Εργασία

Διαζωνικές Κβαντικές Καταστάσεις Τάξεως

Στέφανος Πολιτσάκης

Επιβλέπων Καθηγητής:

Αναπλ. Καθ. Γεώργιος Βαρελογιάννης
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών & Φυσικών Επιστημών

Αθήνα, Σεπτέμβριος 2014

Περίληψη

Θεωρείται ένα διζωνικό μεταλλικό σύστημα (δύο ζώνες τέμνουν την επιφάνεια Fermi). Με την προυπόθεση ότι ο δείκτης ζώνης είναι ένας κατάλληλος κβαντικός αριθμός για την κατηγοριοποίηση των προσπελάσιμων κβαντικών καταστάσεων τάξεως του συστήματος, γίνεται μια συστηματική καταγραφή των καταστάσεων αυτών στα πλαίσια ενός δεκαεξαδιάστατου σπινοριακού φορμαλισμού. Θεωρούνται όλες οι προσπελάσιμες καταστάσεις, υπεραγώγιμες και συμπυκώματα ηλεκτρονίου - οπής τόσο ενδοζωνικές όσο και διαζωνικές.

Περιεχόμενα

1 Εισαγωγή **4**

1.1 Η Συμβατική Θεωρία των BCS 4

1.2 Κύματα Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν 7

1.3 Η γενικευμένη θεωρία των BCS: μη συμβατικές καταστάσεις τάξεως και συνύπαρξη φάσεων 10

1.4 Σπινοριακός Φορμαλισμός Τύπου Nambu 12

1.4.1 Σπίνορας 16 Διαστάσεων για Διζωνικά Συστήματα . . . 12

1.4.2 Οι Κινητικοί Όροι σε Σπινοριακή Μορφή 13

2 Ενδοζωνικά Υπεραγώγιμα Συμπυκνώματα **17**

2.1 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου - Ζεύγη Cooper 17

2.2 Ενδοζωνικά Υπεραγώγιμα Συμπυκνώματα στον Σπινοριακό Φορμαλισμό 20

2.2.1 Μετασχηματισμός spin (↑→↓) 20

2.2.2 Μετασχηματισμός μετατόπισης: $(k \to k + Q)$ 21

2.2.3 Μετασχηματισμός Χωρικής Αντιστροφής: $(k \to -k)$ . . 22

2.2.4 Μετασχηματισμός αλλαγής ζώνης: $(\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)})$ 23

2.3 Κατηγοριοποίηση Ενδοζωνικών Υπεραγωγών 25

2.3.1 Καταστάσεις Αρτιες ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Αρτιες στην Αντιστροφή 25

2.3.2 Καταστάσεις Αρτιες ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Περιττές στην Αντιστροφή 27

2.3.3 Καταστάσεις Περιττές ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Αρτιες στην Αντιστροφή 28

2.3.4 Καταστάσεις Περιττές ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Περιττές στην Αντιστροφή 29

3 Ενδοζωνικά Συμπυκνώματα Ηλεκτρονίου - Οπής **33**

3.1 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου 33

3.2 Στον Σπινοριακό Φορμαλισμό 35

3.2.1 Μετασχηματισμός σπίν 35

3.2.2 Μετασχηματισμός μετατόπισης $(k \to k + q)$ 37

3.2.3 Μετασχηματισμός αντιστροφής $(k \to -k)$ 38

3.2.4 Μετασχηματισμός Αλλαγής Δείκτη Ζώνης $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}$ . . . 39
3.3 Κατηγοριοποίηση Ενδοζωνικών Συμπυκνωμάτων Ηλεκτρονίου - Οπής . . . 40
3.3.1 Καταστάσεις Αρτιες ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης 41
3.3.2 Καταστασεις περιττές ως προς την αλλαγή μπάντας . . . 43

4 Διαζωνικά Συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής 46
4.1 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου . . . 46
4.2 Εισάγοντας τον Σπινοριακός Φορμαλισμό . . . 49
4.2.1 Μετασχηματισμός spin . . . 49
4.2.2 Μετασχηματισμός Μετατόπισης: $(k \to k+q)$ . . . 51
4.2.3 Μετασχηματισμός Αντιστροφής $(k \to -k)$ . . . 52
4.2.4 Μετασχηματισμός Αλλαγής Δείκτη Ζώνης $1 \to 2$. . . . 53
4.3 Κατηγοριοποίηση Διαζωνικών Συμπυκνωμάτων Ηλεκτρονίου-Οπής . . . 55
4.3.1 Καταστάσεις Αρτιες στον Μετασχηματισμό Δείκτη Ζώνης 56
4.3.2 Καταστάσεις Περιττές στον Μετασχηματισμό Δείκτη Ζώνης 58

5 Υπεραγώγιμα Διαζωνικά Συμπυκνώματα 62
5.1 Εισάγοντας το Σπινοριακό Φορμαλισμό . . . 65
5.1.1 Μετασχηματισμός spin : . . . 65
5.1.2 Μετασχηματισμός μετατόπισης $(k \to k+q)$ . . . 66
5.1.3 Μετασχηματισμός Αντιστροφής $(k \to -k)$ . . . 67
5.1.4 Μετασχηματισμός Αλλαγής Δείκτη Ζώνης $(1 \to 2)$ . . . 68
5.2 Κατηγοριοποίηση Διαζωνικών Υπεραγωγών . . . 70
5.2.1 Καταστάσεις Αρτιες στην Ανταλλαγή Δείκτη Ζώνης . . 70
5.2.2 Καταστάσεις Περιττές στην Ανταλλαγή Δείκτη Ζώνης . 73

Α΄ Παράρτημα 77
Α΄.1 Παράρτημα Α: Φερμιονικές ιδιότητες δυναμικού και σχέση χασμάτων . . . 77
Α΄.2 Παράρτημα Β: Γενική μορφή Χαμιλτονιανής . . . 78

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Η Συμβατική Θεωρία των BCS

Εδώ εξετάζουμε πιο λεπτομερώς την υπεραγωγιμότητα, καθώς και κάποιες φαινομενολογικές προσεγγίσεις που πραγματοποιήθηκαν πριν την οριστική μικροσκοπική περιγραφή του φαινομένου από τους Bardeen, Cooper, Schrieffer (BCS) . Ένας υπεραγωγός, όπως μας αποκαλύπτει και το όνομά του, είναι ένας αγωγός ο οποίος δύναται να φέρει μεγάλα ποσά ρεύματος ηλεκτρικού από μέσα του. Η διαφορά έγκειται στην αγωγιμότητα του υλικού. Από την κλασσική θεωρία της αγωγιμότητας, η οποία είναι τμήμα του Ηλεκτρισμού της Ηλεκτρομαγνητικής θεωρίας, η αγωγιμότητα σ ορίζεται ως το αντίστροφο της ηλεκτρικής αντίστασης R: $\sigma = 1/R$. Η ηλεκτρική αγωγιμότητα αυξάνεται όταν η αντίσταση μειώνεται. Αυτό ισχύει, εν γένει για κλασσικές περιπτώσεις αγωγών που χρησιμοποιούνται σε ηλεκτρικές εφαρμογές εδώ και δύο τουλάχιστον αιώνες. Ένας υπεραγωγός όμως, εξ ορισμού πρέπει να έχει άπειρη αγωγιμότητα, άρα η αντίστασή του πρέπει να είναι μηδέν. Καθίσταται πλέον φανερό πως, η κλασσική θεωρία αγωγιμότητας και τα παράγωγά της δε δύνανται να εξηγήσουν το περίεργο αυτό φαινόμενο. Το αξιοπερίεργο αυτής της ιδιότητας είναι ο τρόπος που βρίσκουν τα ηλεκτρόνια αγωγιμότητας να ξεπερνούν τα εμπόδια των ιόντων - πυρήνων του πλέγματος χωρίς αυτά τα δεύτερα να αντιστέκονται στα πρώτα. Η αρχή των Βαρδεεν, Σχηριεφφερ και Cooper ήταν να εξηγήσουν τον τρόπο με τον οποίον τα ηλεκτρόνια συνεργάζονται για να δημιουργήσουν την υπεραγωγιμότητα. Αυτός ο μηχανισμός περιέχει την ελκτική δύναμη που ασκεί ένα ιόν θετικού φορτίου (φωνόνιο των ταλαντώσεων πλέγματος) σε δύο ηλεκτρόνια ώστε αυτά να σχηματίσουν ένα ζεύγος, το λεγόμενο ζεύγος Cooper . Εδώ πρέπει να σημειωθεί πως, ενεργειακές καταστάσεις ίσες και μικρότερες από την ενέργεια Fermi είναι πλήρως κατηλειμμένες από ηλεκτρόνια και, βάσει της απαγορευτικής αρχής του Pauli , απαγορεύεται να καταληφθούν εκ νέου. Έτσι, μένει για την ολική ενέργεια, έστω E_{tot}, του ζεύγους Cooper να γίνει μεγαλύτερη από την ενέργεια Fermi . Για παράδειγμα, υπολογίζεται ότι η πυκνότητα καταστάσεων κατά την μετάβαση από $E_{tot} < 2E_F$ σε

$E_{tot} > 2E_F$ πέφτει ασυνεχώς από την πεπερασμένη της τιμή στο μηδέν σε θερμοκρασία απολύτου μηδενός ($T = 0K \simeq -273^oC$), με το σημείο ασυνέχειας για $E_{tot} = 2E_F$. Εδώ να επισημάνουμε ότι η ελκτική δύναμη μεταξύ των ηλεκτρονίων συνεχίζει να υφίσταται αν, για κάθε ενεργειακή διασπορά $\varepsilon(k_1)$ και $\varepsilon(k_2)$ των δύο ηλεκτρονίων ισχύει:

$$|\varepsilon(k_1) - \varepsilon(k_2)| < \hbar\omega_{\mathbf{q}} \tag{1.1}$$

όπου $\omega_{\mathbf{q}}$ η ιδιοσυχνότητα του φωνονίου.

Έχοντας κάνει μια μικρή επεξήγηση του μηχανισμού δημιουργίας της υπεραγωγιμότητας θα συνεχίσουμε με την παρουσίαση της θεωρίας των BCS για τη συμβατική υπεραγωγιμότητα. Οι BCS έδειξαν ότι αυτή η κατάσταση μπορεί να περιγραφεί με μια απλή σχετικά Χαμιλτονιανή η οποία είναι η εξής:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} + V \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} \tag{1.2}$$

όπου $\xi_{\mathbf{k}}$ η κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στη δομή των ενεργειακών ζωνών του συστήματος, $c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(c_{\mathbf{k},\sigma})$ είναι οι τελεστές δημιουργίας (καταστροφής) ενός ηλεκτρονίου ορμής $\mathbf{k}$ και σπιν σ με $V = 0$ για $|\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{k}'}| > \omega_D, V < 0$ γενικά όπου ω_D η συχνότητα Debye .

Οι BCS εισήγαγαν την κυματοσυνάρτηση:

$$|G\rangle_{BCS} = \prod_{\mathbf{k}} \left\{ u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\downarrow} \right\} |0\rangle \tag{1.3}$$

όπου $u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}} = 1$ ως πιθανότητες. Όντως, η ολική ενέργεια του συστήματος είναι χαμηλότερη από την κινητική ενέργεια των μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων (αέριο Fermi).

Πίσω στην εξ. (1.2.3), για να εξασφαλίσουμε την διαγωνιοποίηση επιλέγουμε μια μέθοδο προσεγγιστική, αυτή των Hartree - Fock , γνωστή και ως προσέγγιση *μέσου - πεδίου*. Ως μέσο πεδίο επιλέγεται ο όρος:

$$b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \tag{1.4}$$

ο οποίος περιλαμβάνει δύο τελεστές καταστροφής, δηλαδή: αφαιρεί ένα ηλεκτρόνιο από την κατάσταση $(-\mathbf{k},\downarrow)$ και ένα από την $(\mathbf{k},\uparrow)$. Η ουσία της προσέγγισης μέσου πεδίου αντικατοπτρίζεται στην εξίσωση: $c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} = b_{\mathbf{k}} + (c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} - b_{\mathbf{k}})$. αφού αγνοήσουμε όρους $(c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} - b_{\mathbf{k}})$ από 2ης τάξης και άνω, καταλήγουμε:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}'} \left[\left(\Delta_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} + \Delta^*_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right) - \Delta^* b_{\mathbf{k}} \right] \tag{1.5}$$

όπου $\Delta = -V \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}$. Διαγωνιοποιούμε τη χαμιλτονιανή με τη βοήθεια ενός μετασχηματισμού μοναδιακού, ονόματι Bogoliubov - de Gennes . Ακολουθεί η θέση του μετασχηματισμού:

$$c_{\mathbf{k},\uparrow} = u^*_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k},\downarrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow} = -v^*_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + u_{\mathbf{k}} \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k},\downarrow} \tag{1.6}$$

όπου, βεβαίως ως πιθανότητες, ισχύει $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ ενώ οι όροι $u_{\mathbf{k}}$ και $v_{\mathbf{k}}$ είναι οι ίδιοι με αυτούς της εξ. (1.2.4). Έτσι βλέπουμε ότι κάθε τελεστής που διαχειρίζεται τις ενεργειακές καταστάσεις των ηλεκτρονίων εκφράζεται ως γραμμικός συνδυασμός άλλων, $\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}, \gamma_{\mathbf{k},\sigma}$ [1]. Αντικαθιστούμε τις εξ. (1.2.7) στην εξ. (1.2.6) και μετά από την τέλεση των πράξεων λαμβάνουμε:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta b_{\mathbf{k}}) - \sum_{\mathbf{k}'} E_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k},\uparrow} \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + \gamma^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow} \right) \tag{1.7}$$

και ορίζουμε ως $E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2}$. Η ενεργειακή σχέση διασποράς των μ-πογκολονίων που προκύπτει, χωρίζεται σε δύο περιπτώσεις: $\pm E_{\mathbf{k}}$[2] και το χάσμα μεταξύ των είναι 2Δ. Έτσι βλέπουμε αστάθεια της επιφάνειας Fermi άμα τη δημιουργία του ζεύγους Cooper . Αυτό είναι αποτέλεσμα του γραμμικού συνδυασμού ηλεκτρονίων και οπών[3] στα νέα οιονεί - σωματίδια μέσω των αντίστροφων μετασχηματισμών Bogoliubov - de Gennes από αυτών που περιγράφονται στην εξ. (1.2.7). Οι αντίστροφοι αυτοί μετασχηματισμοί είναι οι εξής:

$$\gamma_{\mathbf{k},\uparrow} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\downarrow} \tag{1.8}$$

$$\gamma_{\mathbf{k},\downarrow} = u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\downarrow} + v_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{-\mathbf{k},\uparrow} \tag{1.9}$$

Το εν λόγω τώρα ενεργειακό χάσμα υπακούει στην εξίσωση αυτοσυνέπειας:

$$\Delta = -V \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} = -V \sum_{\mathbf{k}} u^*_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left[1 - n_F\left(E_{\mathbf{k}}\right)\right] = -V \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \tag{1.10}$$

[1] αυτοί οι τελεστές διαχειρίζονται οιονεί - σωματίδια τα λεγόμενα μπογκολόνια

[2] όπως γίνεται αντιληπτό, υπάρχει ένα ενεργειακό χάσμα, μια διαφορά σταθερή ανάμεσα στις δύο περιπτώσεις το οποίο είναι ίσο με

$$E_{\mathbf{k}} = (+E_{\mathbf{k}}) - (-E_{\mathbf{k}}) = \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2} + \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2} = 2\sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2}$$

Για $T = 0K \simeq -273^o C$ ξέρουμε από την Κινητική Θεωρία των Αερίων ότι η κινητική ενέργεια μηδενίζεται, αφού εξαρτάται από τον όρο $k_B T$: όπου k_B η σταθερά Βολτζμανν. Άρα μπορούμε να υποθέσουμε ότι $\xi_{\mathbf{k}} = 0$.Έτσι έχουμε:

$$E_{\mathbf{k}} = 2\sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2} \to 2\left|\Delta\right|$$

όμως από την εξ. (1.2.6) συμπεραίνουμε ότι $\Delta \geq 0$ άρα:

$$E_{\mathbf{k}} = 2\sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + \Delta^2} \to 2\left|\Delta\right| = 2\Delta$$

[3] οπή καλείται η απουσία ηλεκτρονίου από μία ενεργειακή στάθμη και εξετάζεται ως θετικά φορτισμένο σωματίδιο που του αποδίδεται και μία 'μάζα' η λεγόμενη ενεργός μάζα. Στις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου - οπής οφείλεται η πληθώρα μαγνητικών φαινομένων.

όπου $n_F\left(E_{\mathbf{k}}\right) = \frac{1}{\left(1+e^{\frac{E_{\mathbf{k}}}{(k_B T)}}\right)}$ η συνάρτηση κατανομής Fermi - Διρας ενώ k_B είναι η σταθερά Βολτζμανν (από εδώ και πέρα $k_B \to 1$ εκτός αντιθέτου αναφοράς). Η σχέση (1.2.11) είναι η `εξίσωση των BCS` . Οριακά αν $T \to 0$ έχουμε τη σχέση:

$$\Delta(T=0) = 1.76 k_B T_c \tag{1.11}$$

στην οποίαν υπακούν όλοι οι συμβατικοί υπεραγωγοί BCS . Εδώ υπετέθη $\Delta \ll \omega_D$ ενώ T_cείναι η κρίσιμη θερμοκρασία κάτω από την οποία το υλικό εμφανίζει υπεραγώγιμη κατάσταση και για την οποία ισχύει $\Delta = 0$[**;**].

Αν στις εξ. (1.2.3), (1.2.6) κάνουμε την αντικατάσταση $c \to ce^{i\theta}$τότε μεταβάλλουμε τη φάση των ηλεκτρονίων κατά ϑ. Εφ΄ όσον τα ηλεκτρόνια βρίσκονται στην ίδια φάση, μετά την αλλαγή δε θα προκύψει κάτι καινούριο και οι κυματοσυναρτήσεις μένουν ίδιες. Άρα οι Χαμιλτονιανές μένουν αναλλοίωτες υπό τέτοιου είδους μετασχηματισμούς. Ο συγκεκριμένος μετασχηματισμός λέγεται καθολικός μετασχηματισμός βαθμίδας και ανήκει στην αλγεβρική ομάδα $\Upsilon(1)$. Το αυτό δεν ισχύει για το $b_{\mathbf{k}}$.

Η μετάβαση στην υπεραγώγιμη κατάσταση μπορεί να ιδωθεί σαν ένα φαινόμενο μετάβασης τάξης. Συνεπώς, το πεδίο $b_{\mathbf{k}}$ έχει το ρόλο της παραμέτρου τάξης. Έτσι, βλέπουμε πως η μετάβαση στην υπεραγώγιμη φάση συνοδεύεται, για το πεδίο $b_{\mathbf{k}}$, από ένα σπάσιμο της καθολικής συμμετρίας βαθμίδας $\Upsilon(1)$. Άμεσο αποτέλεσμα τούτου είναι η εμφάνιση ενός 'ρεύματοσ' στο υλικό, αποτέλεσμα του συλλογικού τρόπου κίνησης των ηλεκτρονίων ανά δύο σε ζεύγη Cooper . Το εν λόγω 'ρεύμα' δημιουργείται λοιπόν, απουσία κάποιου δυναμικού και θωρακίζει το υλικό από εξωτερικά μαγνητικά πεδία. Τούτη η κατάσταση καλείται φαινόμενο Μεισσνερ. Έτσι, λέμε ότι ένας υπεραγωγός είναι τέλειος διαμαγνήτης.

1.2 Κύματα Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν

Εδώ είναι η στιγμή που συζητούμε τη δημιουργία των κυμάτων πυκνότητας φορτίου και σπιν. Τα κύματα πυκνότητας στα στερεά προκύπτουν από αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου - φωνονίου, ή ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου και είναι καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας[**;**]. Η θεμελιώδης κατάσταση των κυμάτων είναι μια σύμφωνη κατάσταση ηλεκτρονίων - οπών, όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο. Όπως νοείται υπό της ονομασίας τους περιγράφουν μια μεταβολή της πυκνότητας φορτίου ή σπιν συναρτήσει της θέσης. Ειδικά δε, η πυκνότητα παρουσιάζει μια περιοδική διαμόρφωση στο χώρο ώστε να μπορεί να ιδωθεί ως στάσιμο κύμα ή χωρική ταλάντωση. Στην περίπτωση του Κύματος Πυκνότητας Φορτίου[4] η σπασμένη συμμετρία είναι η μεταφορική στο χώρο των κυματανυσμάτων. Στην περίπτωση του Κύματος Πυκνότητας Σπιν[5] οι σπασμένες συμ-

[4]Charge Density Wave (CDW)
[5]Spin Density Wave (SDW)

μετρίες είναι αυτή της μεταφοράς και της αντιστροφής του σπιν. Τα Κύματα Πυκνότητας Φορτίου εισήχθησαν για πρώτη φορά από τον Frohlich το 1954 και από τον Πειερλς το 1955, ενώ τα Κύματα Πυκνότητας Σπιν εισήχθησαν το 1962 από τον Overhauser .

Αμέσως μετά την ανακάλυψή τους βρέθηκε ότι υπεύθυνες για την ύπαρξή τους είναι οι ανισοτροπικές δομές των ενεργειακών μπαντών ή ζωνών στα υπό μελέτη υλικά. Τέτοιες δομές συμβάλλουν σε μικρών διαστασεων επιφάνειες Fermi οι οποίες παρουσιάζουν ιδιότητες συναρμογής. Υπάρχει δηλαδή, ένα διάνυσμα το οποίο ενώνει δύο ισοδύναμα σημεία της επιφάνειας Fermi στην πρώτη ζώνη Βριλλουιν. Για τις δύο περιπτώσεις κυμάτων η επιδεκτικότητα φορτίου/σπιν αποκλίνει στο διάνυσμα συναρμογής. Αυτό το φαινόμενο μας εισάγει στη συμπυκνωμένη φάση και δημιουργεί χάσμα στο φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων που υπολογίζονται με διαγωνιοποίηση Bogoliubov . Έτσι, αυτά τα υλικά παρουσιάζουν συμπεριφορά ημιαγωγού. Για παράδειγμα, σε ένα δισδιάστατο χώρο ορμών μια ενεργειακή διασπορά σύμφωνα με το μοντέλο του Ισχυρού Δεσμού δίδει $\xi_{\mathbf{k}} = -t\left(\cos k_x + \cos k_y\right) - t' \cos k_x \cos k_y$. Αν επιλέξουμε μόνο τους κοντινούς γείτονες του μοντέλου τότε $t' = 0$ άρα $\xi_{\mathbf{k}} = -t\left(\cos k_x + \cos k_y\right)$. Έτσι η συνθήκη συναρμογής της επιφάνειας Fermi μπορεί να γραφεί ως $\xi_{\mathbf{k}} = -\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$με το μόνο διάνυσμα που την ικανοποιεί να είναι το $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$[6].

Κύματα Πυκνότητας Φορτίου και Σπίν (CDW, SDW)

Η θεμελιώδης κατάσταση ενός Κύματος Πυκνότητας Φορτίου που προκαλείται από αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - φωνονίου εκφράζεται ως υπέρθεση των καταστάσεων ηλεκτρονίου - οπής. Η περιοδικόητα της πυκνότητας φορτίου στο χώρο έχει ως ηλεκτρομαγνητική συνέπεια την περιοδική παραμόρφωση και του ιοντικού πλέγματος. Ωστόσο, ενώ περιμένουμε τα δύο περιοδικά μήκη να είναι αντιστρόφως ανάλογα των συνιστωσών του διανύσματος συναρμογής $\mathbf{Q}$, τιποτα δεν αποκλείει την ύπαρξη διαφοράς φάσης ανάμεσα στις δύο περιοδικές διαμορφώσεις/παραμορφώσεις. Η περιοδική παραμόρφωση του πλέγματος εξηγείται ως συνέπεια του Κύματος Πυκνότητας Φορτίου των ηλεκτρονίων και της ήδη υπάρχουσας αλληλεπίδρασης μεταξύ αυτών και των φωνονικών διεγέρσεων του (θετικού φορτίου) ιοντικού πλέγματος. Έτσι ο φωνονιακός κλάδος με ορμή $\mathbf{Q}$ εξασθενεί αφού η προλεχθείσα αλληλεπίδραση τώρα επανακανονικοποιεί το φάσμα ιδιοενεργειών των φωνονίων και εισάγει μια περιοδική επίσης παραμόρφωση στο ιοντικό πλέγμα. Η εξασθένιση του φωνονιακού φάσματος είναι γνωστή ως *ανωμαλία κατά Κοην* και η πλεγματική παραμόρφωση ως *παραμόρφωση κατά Πειερλς*.

Η μελέτη των κυμάτων πυκνότητας αρχίζει από τη Χαμιλτονιανή που εισήγαγε ο Φροηλιση η οποία εμπεριέχει την αληλεπίδραση ηλεκτρονίου - φωνονίου.

[6]προφανώς οι πλεγματικές σταθερές στον παρανομαστή των συνιστωσών του ανύσματος συναρμογής κανονικοποιούνται στη μονάδα

Μια προσέγγιση μέσου πεδίου δίνει τη διαγώνια Χαμιλτονιανή που είναι η εξής:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} + |W| \, e^{i\varphi} c^{\dagger}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k+Q}} + |W| \, e^{-i\varphi} c^{\dagger}_{\mathbf{k+Q}} c_{\mathbf{k}} \right] \tag{1.12}$$

όπου $W \backsim \langle c^{\dagger}_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k+Q}} \rangle$. Διαγωνοποίηση κατά Bogoliubov δίνει τη διασπορά των μπογκολονίων του συστήματος ως:

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k+Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k+Q}}}{2} \right)^2 + W^2} \tag{1.13}$$

Η ποσότητα Ω είναι μία παράμετρος τάξης για το κύμα, όπως φαίνεται. Το μέτρο της παραμέτρου αντιστοιχεί σε ένα άνοιγμα χάσματος πάνω από την E_F το οποίο δημιουργεί μια μετάβαση από μέταλλο σε μονωτή. Σε κατάσταση τελείας συναρμογής[7], όπως αναφέραμε προηγουμένως, θα έχουμε:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + W^2} \tag{1.14}$$

[8]Η επιφάνεια Fermi παύει να υπάρχει λόγω του χάσματος Ω. Το χάσμα, ως αναμενόμενο, υπακούει σε μία εξίσωση αυτοσυνέπειας τύπου BCS . Η πυκνότητα φορτίου μεταβάλλεται τώρα ως εξής:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \left(1 + W \cos\left(\mathbf{Q}\mathbf{r} + \varphi\right)\right) \tag{1.15}$$

Η διαφορά φάσης φ δηλώνει ότι η περιοδική διαμόρφωση του ηλεκτρονιακού φορτίου στο χώρο δε συμπίπτει με την ιοντική. Αυτό το γεγονός είναι μία ένδειξη της σπασμένης μεταφορικής συμμετρίας που διέπει το Κύμα Πυκνότητας Φορτίου. Η διαφορά φάσης εμφανίζεται όταν το ῎ΔΩ είναι ασύμμετρο, δηλαδή όταν το$\mathbf{Q}$ είναι άρρητο πολλαπλάσιο του αντιστρόφου της πλεγματικής σταθεράς. Όταν το ῎ΔΩ είναι συμμετρικό, το διάνυσμα $\mathbf{Q}$ είναι ρητό πολλαπλάσιο του αντιστρόφου της πλεγματικής σταθεράς; τότε $\varphi = 0$. Η τελευταία συνθήκη ικανοποιείται όταν η ενεργειακή ζώνη είναι ημικατειλημμένη από ηλεκτρόνια. Στην αυτήν περίπτωσην και συναρμογής προϊούσας, η πλεγματική σταθερά διπλασιάζεται. Έτσι η 1η ζώνη, ούσα στον αντίστροφο χώρο, υποδιπλασιάζεται.

Κύματα Πυκνότητας Σπιν

Εδώ , για να μεταβεί το σύστημα στην κατάσταση ΣΔΩ παρεμβαίνει η αλληλεπίδραση ϑυλομβ. Η μαγνητική επιδεκτικότητα είναι αυτή τώρα που θα αποκλίνει στο κυματάνυσμα συναρμογής, ενώ η πυκνότητα των σπιν είναι διαμορφωμένη περιοδικά στο χώρο με την πυκνότητα φορτίου σταθερή. Η ύπαρξη Σ-ΔΩ μπορεί να θεωρηθεί χωρίζοντας την ολική πυκνότητα φορτίου αρχικά σε δύο

[7] $\xi_{\mathbf{k}} = -\xi_{\mathbf{k+Q}}$

[8] Η διαφορά είναι

$$E_{\mathbf{k}} = 2\sqrt{\xi^2_{\mathbf{k}} + W^2} \rightarrow_{T \rightarrow 0K} 2\,|W|$$

τμήματα: $\rho\uparrow + \rho\downarrow = \rho(\mathbf{r})$. Αν τώρα εισάγουμε διαφορά φάσης ανάμεσα στα δύο μέρη, έστω $\theta = \pi$ θα έχουμε δύο πυκνότητες που αντιστοιχούν στις τιμές σπιν $\uparrow$ και σπιν $\downarrow$. Λόγω της διαφοράς φάσης πλέον η υπέρθεση των δύο πυκνοτήτων φορτίου μας δίνει ένα ΣΔΩ στο οποίο, μπορεί τα σπιν ξεχωριστά να παρουσιάζουν περιοδική διαμόρφωση, η ολική πυκνότητα φορτίου παραμένει σταθερή. Η παραπάνω κατάσταση περιγράφει έναν αντισιδηρομαγνήτη. Κατά αντιστοιχία με το ῝ΔΩ υπάρχει κι εδώ το ασύμμετρο και το συμμετρικό ΣΔΩ ανάλογα με το αν το $\mathbf{Q}$ είναι άρρητο ή ρητό πολλαπλάσιο του αντιστρόφου της πλεγματικής σταθεράς. Άμα τη δημιουργία του συμμετρικού ΣΔΩ υπάρχει αντιστοίχως και υποδιπλασιασμός της μοναδιαίας κυψελίδας κατά τα προηγούμενα, ενώ έχουμε και δημιουργία χάσματος με παράμετρο τάξης $M \sim \sum_{\sigma}\langle c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k+Q},\sigma}\rangle$

1.3 Η γενικευμένη θεωρία των BCS: μη συμβατικές καταστάσεις τάξεως και συνύπαρξη φάσεων

Η μελέτη σε ένα κβαντομηχανικό σύστημα γίνεται με τη βοήθεια της συνάρτησης Χάμιλτον. Η εν λόγω οντότητα αποτελεί τον μετασχηματισμό Λεγενδρε της συνάρτησης Lagrange η οποία είναι καίρια στην εξίσωση Euler - Lagrange της Αναλυτικής Μηχανικής. Η Σύγχρονη Φυσική δανείζεται τον προαναφερθέντα φορμαλισμό για την μελέτη των φαινομένων που την απασχολούν. Σε περιπτώσεις συστημάτων υλικών σημείων, η Χαμιλτονιανή παριστάνει απλώς την ολική ενέργεια του συστήματος (το άθροισμα της κινητικής και δυναμικής ενέργειας).

Η Χαμιλτονιανή χωρίζεται σε όρους κινητικούς που συμβολίζονται με H_0 και παριστάνουν την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων και σε όρους αλληλεπιδράσεων. Επειδή τα συστήματα στα οποία θα επικεντρωθούμε στην παρούσα μελέτη (όπως για παράδειγμα το FeSe) έχουν (ή μπορούν να προσεγγισθούν) από δύο ενεργειακές διασπορές (μπάντες) που διαπερνούν το επίπεδο Fermi , είναι επόμενο δύο αλληλεπιδρώντα ηλεκτρόνια να ανήκουν είτε στην ίδια μπάντα αλλά και σε διαφορετικές μπάντες μεταξύ των. Έτσι οι όροι της ολικής Χαμιλτονιανής θα περιλαμβάνουν Χαμιλτονιανές αλληλεπιδράσεων που συμβαίνουν εντός μίας εκάστης μπάντας (intra - band interaction) καθώς και διαμέσου αυτών (inter - band interaction).

Η φύση του συστήματος πολλών σωμάτων (π.χ. ύπαρξη πολλών βαθμών ελευθερίας) επιβάλλει αναγκαστικά στους διάφορους όρους της ολικής Χαμιλτονιανής να είναι μεγάλοι σε μέγεθος - δηλαδή να αποτελούνται από πολλούς προσθετέους. Είναι στο άμεσο ενδιαφέρον ενός φυσικού να βρει μια συνεπτυγμένη και σύντομη μορφή που θα περικλείει σε ένα μαθηματικό μόρφωμα το σύνολο της φυσικής πληροφορίας για το σύστημα και θα κωδικοποιεί κομψώς τους μετασχηματισμούς και τις συμμετρίες που έπονται αυτών. Αυτού του είδους ο φορμαλισμός καλείται φορμαλισμός Nambu . Εδώ θα αναλύσουμε τις αλγεβρικές μορφές που χρησιμοποιεί ο φορμαλισμός Nambu για να μελετήσει το πρόβλημα συνύπαρξης φάσεων. Η ιδέα είναι να τελέσουμε πράξεις με πίνακες και διανύσματα που στοιχεία έχουν τους γνωστούς τελεστές δημιουργίας και καταστροφής - αποτέλεσμα της δεύτερης κβάντωσης που έχουμε εισάγει στο σύστημα πολλών σωμάτων.

Γενικά το σύστημα περιγράφεται από την εξής ολική Χαμιλτονιανή

$$H^{tot} = H_0 + H_{SC}^{(1)} + H_{SC}^{(2)} + H_{SC}^{inter} + H_{DW}^{inter} + H_{DW}^{(1)} + H_{DW}^{(2)} \tag{1.16}$$

Η ενεργός αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου (κανάλι Cooper) [9] γράφεται

$$H_{SC}^{(1)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{s1,s2,s3,s4} c^{\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c_{\mathbf{k}',,s4} \tag{1.17}$$

Οι δείκτες spin s_i παραπάνω παίρνουν δύο δυνατές τιμές up - down ενώ με q συμβολίζουμε την ολική ορμή του ζεύγους Cooper . Οι τελεστές $c^{\dagger}, c$ *δημιουργίας* και *καταστροφής* αντίστοιχα είναι γνωστοί από το πρόβλημα του μονοσωματιδιακού ταλαντωτή της κβαντικής θεωρίας. Εδώ χρησιμοποιείται ο ίδιος φορμαλισμός και αντιστοιχεί στη μετάβαση ενός σωματιδίου από τη μία ενεργειακή κατάσταση του συστήματος πολλών σωματιδίων στην άλλη (καταστροφή - δημιουργία) με τη θεμελιώδη κατάσταση εκπεφρασμένη στη βάση Fock . Η φύση της αλληλεπίδρασης έχει να κάνει με τη φύση των μποζονικών πεδίων που δρουν, το οποίο αποτελεί μυστήριο για τη μη - συμβατική υπεραγωγιμότητα γενικώς. Το δυναμικό αλληλεπίδρασης $V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}$ παραπάνω αντιστοιχεί σε στοιχείο πίνακα.

$$\langle \mathbf{k}, s1; -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s2; \left| \widehat{V} \right| \mathbf{k}', s4; -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s3 \rangle \tag{1.18}$$

Αντίστοιχα για τη δεύτερη ζώνη ενός διζωνικού συστήματος:

$$H_{SC}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{s1,s2,s3,s4} d^{\dagger}_{\mathbf{k},s1} d^{\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} d_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} d_{\mathbf{k}',s4} \tag{1.19}$$

με αντίστοιχους τελεστές δ. Όπως θα περίμενε κανείς, βεβαίως, στη γενικότερη περίπτωση το σύστημα περιλαμβάνει και κανάλι Cooper διαζωνικό:

$$H_{SC}^{inter} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{s1,s2,s3,s4} c^{\dagger}_{\mathbf{k},s1} d^{\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} d_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c_{\mathbf{k}',s4} \tag{1.20}$$

---

[9] όπου το δυναμικό υπακούει στους φερμιονικούς κανόνες αντιμετάθεσης

$${}^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} = \left(V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \right)^{\dagger} = V^{s3,s4,s1,s2}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q})} = -V^{s3,s1,s4,s2}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k},\mathbf{k}',-(\mathbf{k}+\mathbf{q})}$$

$$V^{s1,s3,s4,s2}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',-(\mathbf{k}+\mathbf{q})} = -V^{s1,s3,s2,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}$$

με $\widehat{V}^{\dagger} = \widehat{V}$: ερμιτιανός [;].

1.4 Σπινοριακός Φορμαλισμός Τύπου Nambu

1.4.1 Σπίνορας 16 Διαστάσεων για Διζωνικά Συστήματα

Για τον προσιορισμό των παραμέτρων τάξεως λαμβάνονται υπ΄ όψιν όλες οι σημαντικές μετατροπές διακριτής συμμετρίας. Τέτοιες είναι η συμμετρία μετατόπισης κατά q η οποία περιγράφει τη μεταβολή μιας παραμέτρου όταν το κυματάνυσμα μετατοπίζεται κατά q εντός της 1ης ζώνης Βριλλουιν και η αντιστροφή του κυματανύσματος που προσδιορίζει τη μορφή των παραμέτρων υπό αντίθετης φοράς κυματανύσματα. Οι Χαμιλτονιανές για το κανάλι Cooper και το συμπύκνωμα ηλεκτρονίου-οπής απαιτούν, επομένως, την σπινοριακή κωδικοποίηση των απείρων το πλήθος ανυσμάτων q καθώς και την αντιστροφή οποιουδήποτε ανύσματος. Ο μετασχηματισμός της αντιστροφής είναι σαφής, όμως αυτός της μετατόπισης περιλαμβάνει το q το οποίο είναι αόριστο. Ευτυχώς, το ίδιο το σύστημα σκεπτόμενο ενεργειακά περιορίζει τις πιθανές τιμές του q κατά τον σχηματισμό συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου ή/και ηλεκτρονίου οπής. Αν στα προαναφερθέντα συνυπολογίσουμε τις ιδιότητες της επιφάνειας Fermi τότε οι πιθανές τιμές είναι πολύ λίγες. Πρακτικά, ένα κυματάνυσμα συναρμογής, Q , είναι επαρκές για να τελεστεί η μελέτη των φαινομένων. Έπειτα, θα μπορούσε κάποιος να εισάγει αποκλίσεις στο διάνυσμα και να μελετήσει τις πιθανές καταστάσεις. Ωστόσο, αυτή η εργασία ξεφεύγει από τους σκοπούς του παρόντος συγγράμματος και δε θα αναλυθεί εδώ.

Οι επιπλέον συμμετρίες που μας ενδιαφέρουν, εκτός της μεταφορικής και της αντιστροφής του κυματανύσματος, είναι η συμμετρία αντιστροφής spin καθώς και η περιστροφή του στο χώρο (singlet ή triplet καταστάσεις) και τέλος η συμμετρία αλλαγής αριθμού ζώνης η οποία περιγράφει τη συμπεριφορά των παραμέτρων τάξης από τη μία στην άλλη ζώνη για ένα σύστημα δύο ζωνών. Κάθε ένας από τους παραπάνω μετασχηματισμούς δύναται να περιγραφεί σε2×2 υπόχωρους Hilbert . Αυτοί δίνονται σε μορφή bracket εδώ:

$$\{|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k}+\mathbf{Q}\rangle\}, \{|\mathbf{k}\rangle, |-\mathbf{k}\rangle\}, \{|\mathbf{k}\uparrow\rangle, |\mathbf{k}\downarrow\rangle\}, \{|\mathbf{k(1)}\rangle, |\mathbf{k(2)}\rangle\}$$

και σε μορφή σπίνορα εδώ:

$$\psi_s^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger \\ c_{\mathbf{k},\downarrow} \end{pmatrix}, \psi_t^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^\dagger \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger \end{pmatrix}, \psi_I^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^\dagger \\ c_{-\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \psi_b^\dagger = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}}^{(1)\dagger} \\ c_{\mathbf{k}}^{(2)\dagger} \end{pmatrix}$$

Ο σπίνορας δεκαέξι διαστάσεων προκύπτει από το εξωτερικό γινόμενο αυτών έχει τη μορφή:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \begin{array}{l} (c_{\mathbf{k},\uparrow}^{(1)\dagger}, c_{\mathbf{k},\downarrow}^{(1)\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^{(1)\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^{(1)\dagger}, c_{-\mathbf{k},\uparrow}^{(1)}, c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{(1)}, c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow}^{(1)}, c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}^{(1)}, \\ c_{\mathbf{k},\uparrow}^{(2)\dagger}, c_{\mathbf{k},\downarrow}^{(2)\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^{(2)\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^{(2)\dagger}, c_{-\mathbf{k},\uparrow}^{(2)}, c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{(2)}, c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow}^{(2)}, c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}^{(2)}) \end{array}$$

η οποία εκφράζεται επί της βάσεως των πινάκων Pauli : $\widehat{\alpha}_i = \widehat{\kappa}_i \otimes \widehat{\rho}_i \otimes \widehat{\tau}_i \otimes \widehat{\sigma}_i$. Εδώ να υπενθυμίσουμε τους πίνακες Pauli οι οποίοι αποτελούν ομάδα με ταυτοτικό στοιχείο τον πρώτο από αυτούς:

$$\widehat{\kappa}_0, \widehat{\tau}_0, \widehat{\rho}_0, \widehat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\kappa}_1, \widehat{\tau}_1, \widehat{\rho}_1, \widehat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\kappa}_2, \widehat{\tau}_2, \widehat{\rho}_2, \widehat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\kappa}_3, \widehat{\tau}_3, \widehat{\rho}_3, \widehat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1.4.2 Οι Κινητικοί Όροι σε Σπινοριακή Μορφή

Εδώ θα εκφράσουμε τον κινητικό όρο στο σπινοριακό φορμαλισμό. Η Χαμιλτονιανή μας είναι η παρακάτω:

$$H_0 = H_0^{(1)} + H_0^{(2)} = \sum_{k,\sigma,i} \xi_k^{(i)} c_{k,\sigma}^{(i)\dagger} c_{k,\sigma}^{(i)} = \sum_{k,\sigma} \xi_k^{(1)} c_{k,\sigma}^{(1)\dagger} c_{k,\sigma}^{(1)} + \sum_{k,\sigma} \xi_k^{(2)} c_{k,\sigma}^{(2)\dagger} c_{k,\sigma}^{(2)} \tag{1.21}$$

όπου έχουμε τις ακόλουθες ιδιότητες:

$$\xi_k^{(i)} = \gamma_k^{(i)} + \delta_k^{(i)} \tag{1.22}$$

αντίστοιχα το περιοδικό και αντιπεριοδικό κομμάτι,όπου ι=1,2. Η μετατόπιση εντός της 1ης ζώνης Βριλλουιν κατά διάνυσμα Χ υπακούει στον εξής κανόνα:

$$k + 2Q \to k$$

και ακολουθούν οι ιδιότητες της μετατόπισης:

$$\xi_{k+Q}^{(i)} = \gamma_{k+Q}^{(i)} + \delta_{k+Q}^{(i)} = -\gamma_k^{(i)} + \delta_k^{(i)} \tag{1.23}$$

και της αντιστροφής του χώρου των ορμών: εδώ η ανταλλαγή αριθμού μπάντας (1,2) δε αλλάζει το αποτέλεσμα μιας κι οι αντίστοιχοι όροι κάθε μπάντας είναι προσθετέοι. Έτσι προκύπτουν κι οι παρακάτω ιδιότητες:

$$\xi_k^{(i)} + \xi_{k+Q}^{(i)} = 2\delta_k^{(i)} \tag{1.24}$$

$$\xi_k^{(i)} - \xi_{k+Q}^{(i)} = 2\gamma_k^{(i)} \tag{1.25}$$

Για κάθε μπάντα $i = 1, 2$. Επίσης ισχύουν και τα ακόλουθο:

$$\gamma_{-k}^{(i)} = \gamma_k^{(i)} \tag{1.26}$$

$$\delta_{-k}^{(i)} = \delta_k^{(i)} \tag{1.27}$$

Βλέπει κανείς ότι οι δύο παραπάνω όροι που απαρτίζουν τον κινητικό όρο είναι άρτιοι ως προς τον μετασχηματισμό της αντιστροφής του χώρου των ορμών. Ως διαγώνιοι όροι(αφού πρόκειται για κινητικό όρο) και άρτιοι στην αντιστροφή εκφράζονται σπινοριακά με τον μηδενικό πίνακα Pauli , το ταυτοτικό στοιχείο $\widehat{\varrho}_0$. Ωστόσο, κάτι τέτοιο δε συμβαίνει. Ο λόγος είναι η μορφή του σπίνορα αντιστροφής ο οποίος είναι:

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k,I} = \left(\begin{array}{c} \psi^{(i)\dagger}_{s,k} \\ \psi^{(i)}_{s,-k} \end{array} \right), i = 1, 2$$

με την υπόθεση ότι αντιπεριοδικός και περιοδικός όρος της κινητικής ενέργειας είναι αμφότεροι άρτιοι στην αντιστροφή των ορμών θα αναλύσουμε τον περιοδικό παραδείγματος χάριν. Έστω η σπινοριακή μορφή του περιοδικού τμήματος στο σημείο της εισαγωγής του σπίνορα αντιστροφής:

$$\left(\begin{array}{c} \psi^{(i)\dagger}_{s,k} \\ \psi^{(i)}_{s,-k} \end{array} \right)^{\mathsf{T}} \left(\begin{array}{cc} \widehat{\Delta}^{(i)}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{-k} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c} \psi^{(i)}_{s,k} \\ \psi^{(i)\dagger}_{s,-k} \end{array} \right), i = 1, 2$$

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)}_k \psi^{(i)}_{s,k} + \psi^{(i)}_{s,-k} \widehat{\Delta}^{(i)}_{-k} \psi^{(i)\dagger}_{s,-k}$$

Αφού ο περιοδικός όρος είναι άρτιος τότε εφαρμόζοντας τον τελεστή αντιστροφής στην παραπάνω παράσταση λαμβάνουμε:

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I+}_k \psi^{(i)}_{s,k} + \psi^{(i)}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I+}_k \psi^{(i)\dagger}_{s,k}$$

Βλέπουμε όμως ότι ο δεύτερος όρος έχει τους σπίνορες με αντίστροφη σειρά. Αν αλλάξουμε τη σειρά τότε, επειδή είναι φερμιονικοί, ο όρος θα αλλάξει πρόσημο κι έτσι θα γίνει:

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I+}_k \psi^{(i)}_{s,k} - \psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I+}_k \psi^{(i)}_{s,k}$$

ο οποίος είναι ίσος με μηδέν. Αν επιλέξουμε την περιττή περίπτωση τότε θα έχουμε τελικά:

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I-}_k \psi^{(i)}_{s,k} - (-\psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I-}_k \psi^{(i)}_{s,k})$$

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I-}_k \psi^{(i)}_{s,k} + \psi^{(i)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(i)I-}_k \psi^{(i)}_{s,k}$$

Άρα ο γενικός σπινοριακός όρος για τον κινητικό όρο περιέχει εντός του τον πίνακα Pauli $\widehat{\varrho}_3$ μεταξύ άλλων. Έτσι λοιπόν μπορούμε να εκφράσουμε τον ελεύθερο όρο της Χαμιλτονιανής σπινοριακά ως ακολούθως:

$$H_0 = H^{(1)}_0 + H^{(2)}_0 = \sum_k \Psi^\dagger_k \left(\gamma^{(1,2)}_k \widehat{\kappa}_0 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_0 + \delta^{(1,2)}_k \widehat{\kappa}_0 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_0 \right) \Psi_k$$

Αν συμβολίσουμε:

$$\widehat{E}_0 = \gamma_k^{(1,\,2)} \widehat{\kappa}_0 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_0 + \delta_k^{(1,\,2)} \widehat{\kappa}_0 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_0$$

Επομένως η σπινοριακή μορφή της κινητικής ενέργειας συμβολίζεται πιο συνεπτυγμένα:

$$H_0 = \sum_k \Psi_k^\dagger \widehat{E}_0 \Psi_k \tag{1.28}$$

Βιβλιογραφία

[1] V.P.Mineev, K.V.Samokhin, 'Introduction to unconventional superconductivity', Published by Taylor and Francis, 1999

[2] Charles P. Poole, Horacio A. Farach, Richard J. Creswick, 'Superconductivity', Academic Press, 1996

[3] J. R. Schrieffer, 'Theory of Superconductivity' W.A. Benjamin, INC., Publishers, 1964

[4] J. F. Annett, Superconductivity Superfluids and Condensates, Oxford University Press 2004

[5] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239, (1991).

[6] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).

[7] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. 104, 216103 (2010)

[8] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2012)

[9] Α. Απέρης, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2008)

[10] Μ. Γεωργίου, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2010)

[11] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[12] Π. Κοτετές, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2007)

[13] Γ. Λιβανάς, Μεταπτυχιακή Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[14] Γ. Ρούμπος, Διπλωματική Εργασία, ΗΜΜΗΥ-ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ (2004)

Κεφάλαιο 2

Ενδοζωνικά Υπεραγώγιμα Συμπυκνώματα

2.1 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου - Ζεύγη Cooper

Παρατίθεται ένας όρος με το γενικό δείκτη i που θα δεικνύει τον αριθμό ζώνης. Ο αντίστοιχος όρος για το κανάλι Cooper είναι ο ακόλουθος:

$$H_{SC}^{intra(i)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{s1,s2,s3,s4} c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s1,s2,s3,s4} c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} \tag{2.1}$$

το αντίστοιχο στοιχείο πίνακα για την πιο πάνω αλληλεπίδραση:

$$\langle \mathbf{k}(i), s_1; -(\mathbf{k}+\mathbf{q})(i), s_2; |\widehat{V}| - (\mathbf{k}'+\mathbf{q})(i), s_3; \mathbf{k}', s_4(i) \rangle$$

Το δυναμικό υπακούει στους γνωστούς κανόνες φερμιονικής μετάθεσης.

Για την προσέγγιση μέσου πεδίου τίθεται:

$$c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} = \langle c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} \rangle + \left(c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} - \langle c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} \rangle \right)$$

$$c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} = \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} \rangle + \left(c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} - \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} \rangle \right)$$

Αντικαθιστώντας στην Χαμιλτονιανή και κρατώντας τους όρους μέχρι πρώτης τάξεως ως προς τις διακυμάνσεις

$$H_{SC}^{intra(i)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{s1,s2,s3,s4} c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s1,s2,s3,s4} c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}} \sum_{s1,s2,s3,s4} \left[\langle c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} \rangle + \left(c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(k+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} - \langle c_{\mathbf{k},s1}^{(i)\dagger} c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}^{(i)\dagger} \rangle \right) \right] \times$$

$$V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s1,s2,s3,s4} \left[\langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} \rangle + \left(c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} - \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}^{(i)} c_{\mathbf{k}',s4}^{(i)} \rangle \right) \right]$$

Η τελική μορφή είναι η εξής:

$$
\begin{aligned}
H_{SC}^{intra(i)} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} & \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}\langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \\
& + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \\
& \times \left(c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4} - \langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \right) \\
+ \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} & \left(c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} - \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle \right) V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \\
& \times \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle \\
+ \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} & \left(c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} - \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle \right) V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \\
& \times \left(c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4} - \langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \right)
\end{aligned}
$$

διώχνοντας όρους με διακυμάνσεις δευτέρας τάξεως και κάνοντας τις επιμερίσεις:

$$
\begin{aligned}
H_{SC}^{intra(i)} = & \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4} \\
& + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}\langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \\
& - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}\langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle
\end{aligned}
$$

Ο τελευταίος όρος (*όρος κενού*) περιγράφει την ενεργειακή απαίτηση του συστήματος ώστε αυτό να περιέλθει στην υπεραγώγιμη κατάσταση κι ως εκ τούτου δεν μελετάται.

Οι παράμετροι τάξεως ορίζονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$\Delta^{(i)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1,s2} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}',s3,s4} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}\langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \tag{2.2}$$

$$\Delta^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',s3,s4} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},s1,s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}\langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle \tag{2.3}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις είναι εξισώσεις αυτοσυνέπειας της γενικευμένη θεωρία BCS η οποία περικλείει και τη μη συμβατική υπεραγωγιμότητα. Αν μετασχηματισθεί η πρώτη εξίσωση κατά: $k \to -(k+q)$ και με δεδομένες τις ιδιότητες Fermi του δυναμικού αλληλεπίδρασης οδηγεί στην ισότητα: $\Delta^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',s3,s4} = -\Delta^{*(i)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1,s2}$

Ολοκληρώνοντας προκύπτει η κάτωθι απλούστερη μορφή για την inter - band Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου στο κανάλι Cooper :

$$H_{SC}^{intra(i)} = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s1,s2}\left(\Delta^{(i)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1,s2}c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} - \Delta^{*(i)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{k},s1,s2}c^{(i)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1}c^{(i)}_{\mathbf{k},s2}\right) \tag{2.4}$$

Σημειώνεται ότι περιλαμβάνονται και ζεύγη Cooper με μη μηδενική ορμή q . Μέχρις εδώ, το άθροισμα επί των q επεκτείνεται στο άπειρο αφού πρόκειται για ανάλυση σε αρμονικές σε σειρά Fourier . Ομως όπως σημειώθηκε και στην εισαγωγή του σπίνορα, αρκεί ένα χαρακτηριστικό κυματάνυσμα Q για τις πιο γενικές ανομοιογεννείς καταστάσεις το οποίο είναι σύμμετρο (commensurate) δηλαδή $(\mathbf{k}+\mathbf{2Q}=\mathbf{k})$.

Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου για τη συγκεκριμένη περίπτωση παίρνει τη μορφή (αφού αθροίσουμε μόνον για $\mathbf{q}=\mathbf{0},\mathbf{q}=\mathbf{Q}$):

$$H_{SC}^{intra(i)} = -\sum_{\mathbf{k},s1,s2}\left(\Delta^{(i)}_{\mathbf{k},-\mathbf{k},s1,s2}c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(i)\dagger}_{-\mathbf{k},s2} - \Delta^{*(i)}_{-\mathbf{k},\mathbf{k},s1,s2}c^{(i)}_{-\mathbf{k},s3}c^{(i)}_{\mathbf{k},s4}\right)$$

$$-\sum_{\mathbf{k},s1,s2}\left(\Delta^{(i)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),s1,s2}c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),s2} - \Delta^{*(i)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\mathbf{k},s1,s2}c^{(i)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),s1}c^{(i)}_{\mathbf{k},s2}\right)$$

Από αυτό το σημείο οι δείκτες των κυματανυσμάτων θα εκφράζονται, για λόγους απλότητος, με απλή γραμματοσειρά. Έτσι, άθροιση πάνω στα σπιν δίνει:

$$^{intra(i)}_{SC} = -\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-k,\uparrow,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{k,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{-k,\uparrow} - \Delta^{*(i)}_{-k,k,\uparrow,\uparrow}c^{(i)}_{-k,\uparrow}c^{(i)}_{k,\uparrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-(k+Q),\uparrow,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{k,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{-(k+Q),\uparrow} - \Delta^{*(i)}_{-(k+Q),k,\uparrow,\uparrow}c^{(i)}_{-(k+Q),\uparrow}c^{(i)}_{k,\uparrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-k,\uparrow,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{k,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{-k,\downarrow} - \Delta^{*(i)}_{-k,k,\uparrow,\downarrow}c^{(i)}_{-k,\uparrow}c^{(i)}_{k,\downarrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-(k+Q),\uparrow,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{k,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{-(k+Q),\downarrow} - \Delta^{*(i)}_{-(k+Q),k,\uparrow,\downarrow}c^{(i)}_{-(k+Q),\uparrow}c^{(i)}_{k,\downarrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-k,\downarrow,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{k,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{-k,\uparrow} - \Delta^{*(i)}_{-k,k,\downarrow,\uparrow}c^{(i)}_{-k,\downarrow}c^{(i)}_{k,\uparrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-(k+Q),\downarrow,\uparrow}c^{(i)\dagger}_{k,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{-(k+Q),\uparrow} - \Delta^{*(i)}_{-(k+Q),k,\downarrow,\uparrow}c^{(i)}_{-(k+Q),\downarrow}c^{(i)}_{k,\uparrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-k,\downarrow,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{k,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{-k,\downarrow} - \Delta^{*(i)}_{-k,k,\downarrow,\downarrow}c^{(i)}_{-k,\downarrow}c^{(i)}_{k,\downarrow}\right)$$

$$\sum_{k}\left(\Delta^{(i)}_{k,-(k+Q),\downarrow,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{k,\downarrow}c^{(i)\dagger}_{-(k+Q),\downarrow} - \Delta^{*(i)}_{-(k+Q),k,\downarrow,\downarrow}c^{(i)}_{-(k+Q),\downarrow}c^{(i)}_{k,\downarrow}\right)$$

Στη συνέχεια, θα εισάγουμε έναν προς έναν τους σπίνορες καταλήγοντας στη σπινοριακή μορφή της Χαμιλτονιανής για το υπεραγώγιμο συμπύκνωμα.

2.2 Ενδοζωνικά Υπεραγώγιμα Συμπυκνώματα στον Σπινοριακό Φρομαλισμό

Ακολουθώντας τη συνήθη διαδικασία εισάγονται σπίνορες που αντιστοιχούν σε κάθε μετασχηματισμό συμμετρίας. Η όλη διαδικασία περιγράφεται αναλυτικά και σε προηγούμενες εργασίας φοιτητών της ομάδας, όπως για παράδειγμα στη Διδακτορική Διατριβή του κυρίου Α. Απέρη (ΕΜΠ 2012), μονο που εδώ προστίθεται και ο μετασχηματισμός αριθμού ζώνης στο τέλος.

2.2.1 Μετασχηματισμός spin (↑→↓)

Εισάγοντας τους σπίνορες

$$\psi_{s,k}^{(i)\dagger} = \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} \\ c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} \end{pmatrix} \quad , \quad \psi_{s,k}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^{(1)} \\ c_{k,\downarrow}^{(1)} \end{pmatrix}$$

ο όρος συμπυκνώματος παίρνει την ακόλουθη μορφή

$$\begin{aligned} H_{SC}^{intra(i)} = & -\sum_k \left[\psi_{s,k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(i)} \psi_{s,-k}^{(2)\dagger} + \psi_{s,k}^{(1)\dagger} \widehat{\Delta}_{k,-(k+Q)}^{(i)} \psi_{s,-(k+Q)}^{(i)\dagger} \right] \\ & -\sum_k \left[\psi_{s,-k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,-k,k}^{*(i)} \psi_{s,k}^{(i)} + \psi_{s,-(k+Q)}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,-(k+Q).k}^{*(i)} \psi_{s,k}^{(i)} \right] \end{aligned}$$

Όπου οι πίνακες:

$$\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,-k,\uparrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,-k,\uparrow,\downarrow}^{(i)} \\ \Delta_{k,-k,\downarrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,-k,\downarrow,\downarrow}^{(i)} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,-(k+Q),\uparrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,-(k+Q),\uparrow,\downarrow}^{(i)} \\ \Delta_{k,-(k+Q),\downarrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,-(k+Q),\downarrow,\downarrow}^{(i)} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\Delta}_{s,-k,k}^{*(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{-k,k,\uparrow,\uparrow}^{*(i)} & \Delta_{-k,k,\uparrow,\downarrow}^{*(i)} \\ \Delta_{-k,k,\downarrow,\uparrow}^{*(i)} & \Delta_{-k,k,\downarrow,\downarrow}^{*(i)} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\Delta}_{s,-(k+Q),k}^{*(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{-(k+Q),k,\uparrow,\uparrow}^{*(i)} & \Delta_{-(k+Q),k,\uparrow,\downarrow}^{*(i)} \\ \Delta_{-(k+Q),k,\downarrow,\uparrow}^{*(i)} & \Delta_{-(k+Q),k,\downarrow,\downarrow}^{*(i)} \end{pmatrix}$$

Οι παραπάνω πίνακες είναι δισδιάστατοι και περιέχουν το σύνολο της πληροφορίας για το μετασχηματισμό του σπιν σε πιο συμπτυγμένη μορφή. Αμέσως τώρα θα τους αναλύσουμε βάση των διαφόρων κατευθύνσεων της πόλωσης του σπιν που παρατηρείται σε έναν υπεραγωγό.

Τώρα εισάγουμε τους βαθμούς ελευθερίας του σπιν. Θα χωρίσουμε τον πίνακα $\widehat{\Delta}$ σε σινγλετ και τριπλετ μέρος. Δηλαδή:

$$\Delta = \widehat{\Delta}_{singlet} + \widehat{\Delta}_{triplet}$$

$$\Delta_{singlet} = id_{\mathbf{k}}\widehat{\sigma}_2, \widehat{\Delta}_{triplet} = i\left(\overrightarrow{d}_{\mathbf{k}}\overrightarrow{\sigma}\right)\widehat{\sigma}_2$$

Το στοιχείο $\overrightarrow{d}_{\mathbf{k}}$ είναι ένα διάνυσμα στο χώρο των ψευδοδιανυσμάτων το οποίο μας δείχνει το μέτρο και την κατεύθυνση της πόλωσης του spin ενός υπεραγωγού σε triplet . διάταξη, ενώ το $d_{\mathbf{k}}$ είναι η αλγεβρική τιμή που αντιστοιχεί σε έναν αγωγό που έχει το spin σε singlet κατάσταση. Αυτό το διάνυσμα βέβαια δεν αναπαριστά κάτι στον πραγματικό χώρο (π.χ. παράλληλο στην μαγνητική ροπή ενός ηλεκτρονίου) αφού το εσωτερικό γινόμενο πολλαπλασιάζεται με έναν πίνακα Pauli . Αυτός ο συμβολισμός μας επιτρέπει, αφενός να διαχωρίσουμε τις διαφορετικές συμμετρίες που διέπουν τη singlet από την triplet κατάσταση και αφετέρου να έχουμε στη διάθεσή μας ένα διάνυσμα που θα δείχνει στην επιφάνεια Fermi την κατεύθυνση του συνολικού spin σε triplet καταστάσεις. Είναι ξεκάθαρο από τις εξισώσεις, ότι ο ρόλος του μέτρου $\left|\overrightarrow{d}_{\mathbf{k}}\right|$είναι ίδιος με τον ρόλο του μέτρου του χάσματος $|\Delta|$. Έτσι θα έχουμε:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = id\widehat{\sigma}_2, \widehat{\Delta}_{triplet} = i(d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3)\widehat{\sigma}_2 = -d_x\widehat{\sigma}_3 + id_y\widehat{\sigma}_0 + d_z\widehat{\sigma}_1$$

Έπειτα, αναλύουμε σε πραγματικό και φανταστικό μέρος:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re} - \widehat{\sigma}_2 d^{\Im} \tag{2.5}$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = -d_x^{\Re}\widehat{\sigma}_3 - id_x^{\Im}\widehat{\sigma}_3 + id_y^{\Re}\widehat{\sigma}_0 - d_y^{\Im}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Re}\widehat{\sigma}_1 + id_z^{\Im}\widehat{\sigma}_1 \tag{2.6}$$

Στη συνέχεια εισάγουμε τον δεύτερο σπίνορα για τη μετατόπιση στο χώρο των ορμών.

2.2.2 Μετασχηματισμός μετατόπισης: $(k \to k + Q)$

,

Εδώ εισάγονται οι αντίσοιχοι σπίνορες

$$\psi_{s,k,t}^{(1)\dagger} = \begin{pmatrix} \psi_{s,k}^{(1)\dagger} \\ \psi_{s,k+Q}^{(1)\dagger} \end{pmatrix} \quad , \quad \psi_{s,k,t}^{(1)} = \begin{pmatrix} \psi_{s,k}^{(1)} \\ \psi_{s,k+Q}^{(1)} \end{pmatrix}$$

Η Χαμιλτονιανή εκφράζεται ως:

$$H_{SC}^{intra(i)} = -\sum_k \left(\psi_{s,k,t}^{(i)\dagger}\widehat{D}_{s,k}^{(i)}\psi_{s,-k,t}^{(i)\dagger} - \psi_{s,-k,t}^{(i)}\widehat{D}_{s,-k}^{*(i)}\psi_{s,k,t}^{(i)}\right) \tag{2.7}$$

Ενώ δίνονται οι πίνακες:

$$D_{s,k}^{(i)} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(i)} & \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(i)} \\ \widehat{\Delta}_{s,k+Q,-k}^{(i)} & \widehat{\Delta}_{s,k+Q,-(k+Q)}^{(i)} \end{pmatrix}$$

$$D_{s,-k}^{*(i)} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,-k,k}^{*(i)} & \widehat{\Delta}_{s,-k,k+Q}^{*(i)} \\ \widehat{\Delta}_{s,-(k+Q),k}^{*(i)} & \widehat{\Delta}_{s,-(k+Q),k+Q}^{*(i)} \end{pmatrix}$$

Σε αυτούς τους πίνακες οι οποίοι είναι σε δισδιάστατη μορφή - block και επί της ουσίας είναι τετραδιάστατοι εκτός από το μετασχηματισμό spin περιέχεται και η πληροφορία για το μετασχηματισμό μετατόπισης στο χώρο των ορμών. Μια επεξεργασία του πρώτου πίνακα με τη βοήθεια του τελεστή μετατόπισης $t_Q : k \to k + Q$ δίνει αποτέλεσμα:

$$\begin{aligned}\widehat{D}^{(i)}_{s,k} &= \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,-k} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,-(k+Q)} \\ \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k+Q,-k} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k+Q,-(k+Q)} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,-k} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,-(k+Q)} \\ t_Q\widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,-(k+Q)} & t_Q\widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,-k} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

ενώ ακολουθεί ανάλυση σε γινόμενα Κρονεσκερ επί των πινάκων Pauli :

$$\widehat{D}^{(i)}_{s,k} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}^{(i)t+}_{s,k,-k} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}^{(i)t-}_{s,k,-k} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}^{(i)t+}_{s,k,-(k+Q)} + i\widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}^{(i)t-}_{s,k,-(k+Q)} \tag{2.8}$$

Στη συνέχεια θα εισάγουμε τον τρίτο κατά σειρά σπίνορα:

2.2.3 Μετασχηματισμός Χωρικής Αντιστροφής: $(k \to -k)$

Με αντίστοιχη διαδικασία, χρησιμοποιώντας τον σπίνορα

$$\psi^{(i)\dagger}_{s,k,I} = \begin{pmatrix} \psi^{(i)\dagger}_{s,k} \\ \psi^{(i)}_{s,-k} \end{pmatrix}$$

Η Χαμιλτονιανή παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$H^{inter(i)}_{SC} = -\sum_k \left(\psi^{(i)\dagger}_{s,k,I}\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I}\psi^{(i)\dagger}_{s,-k,I}\right) \tag{2.9}$$

Ενώ ο 8×8 πίνακας που εισάγεται φέρει επιπλέον και την πληροφορία της αντιστροφής των κυματανυσμάτων και είναι ο εξής:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)}_{s,k} \\ -\widehat{D}^{*(i)}_{s,-k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Έπειτα, τα στοιχεία του πίνακα αναλύονται σε περιττό κι άρτιο μέρος ως προς τον μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου των ορμών. Δηλαδή:

$$\begin{aligned}\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} &= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)}_{s,k} \\ -\widehat{D}^{*(i)}_{s,-k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)}_{s,k} \\ -I\widehat{D}^{*(i)}_{s,k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)I+}_{s,k} + \widehat{D}^{(i)I-}_{s,k} \\ \widehat{D}^{*(i)I+}_{s,k} - \widehat{D}^{*(i)I-}_{s,k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \\ &= i\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}\right\} + \widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}\right\} - \widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}\right\}\end{aligned}$$

Επομένως ισχύει:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = i\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}\right\} + \widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}\right\} - \widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}\right\} \tag{2.10}$$

Προφανώς όλα τα παραπάνω ισχύουν για κάθε μία από τις δύο ζώνες:

$$H^{intra(1)}_{SC} = -\sum_k \left(\psi^{(1)\dagger}_{s,k,I}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I}\psi^{(1)\dagger}_{s,-k,I}\right) \tag{2.11}$$

$$H^{intra(2)}_{SC} = -\sum_k \left(\psi^{(2)\dagger}_{s,k,I}\widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I}\psi^{(2)\dagger}_{s,-k,I}\right) \tag{2.12}$$

2.2.4 Μετασχηματισμός αλλαγής ζώνης: $(\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)})$

.

Με τον σπίνορα μετάθεσης ζώνης

$$\psi^{\dagger}_{s,k,b} = \begin{pmatrix} \psi^{(1)\dagger}_{k,s} \\ \psi^{(2)\dagger}_{k,s} \end{pmatrix} \tag{2.13}$$

η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H^{intra}_{SC} = -\sum_k \Psi^{\dagger}_{s,k,b}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}\Psi_{s,k,b} \tag{2.14}$$

όπου $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ είναι ο 16×16 πίνακας:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

Η απαίτηση η Χαμιλτονιανή να είναι ερμιτιανή δίνει:

$$H^{intra}_{SC} = H^{intra\dagger}_{SC} \Rightarrow \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{G}^{\dagger}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$$
$$\Rightarrow \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)\dagger}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)\dagger}_{k,I} \end{pmatrix}$$

επομένως:

$$\widehat{D}^{(i)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(i)\dagger}_{k,I}$$

για $i = 1, 2$. Επομένως από την παραπάνω ερμιτιανή ιδιότητα έχουμε:

$$\begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)}_{s,k} \\ -\widehat{D}^{*(i)}_{s,-k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & -\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,-k} \\ \widehat{D}^{(i)\dagger}_{s,k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{D}^{(i)}_{s,k} = -\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,-k} \Rightarrow \widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)}_{s,k} \\ \widehat{D}^{(i)\dagger}_{s,k} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Χρησιμοποιώντας τον τελεστή αντιστροφής του χώρου των ορμών I λαμβάνουμε:

$$\widehat{D}^{(i)}_{s,k} = -\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,-k} = -I\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} \tag{2.15}$$

Αν ισχύει $\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} = \widehat{D}^{(i)}_{s,k}$, τότε:

$$\widehat{D}^{(i)}_{s,k} = -I\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,-k} = -II\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} = -\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} = -\widehat{D}^{(i)}_{s,k}$$

άρα είναι $\widehat{D}^{(i)}_{s,k}$περιττός ως προς την αντιστροφή του χώρου των ορμών και συμβολίζεται $\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}$. Αναλύοντας σε πραγματικά και φανταστικά μέρη:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = \widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}\right\} - \widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{s,k}\right\} \tag{2.16}$$

Αντιστοίχως, αν $\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} = -\widehat{D}^{(i)}_{s,k}$ τότε:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{s,k} = -I\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,-k} = -II\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} = -\widehat{D}^{(i)\intercal}_{s,k} = \widehat{D}^{(i)}_{s,k}$$

άρα ο πίνακας $\widehat{D}^{(i)}_{s,k}$ είναι άρτιος ως προς την αντιστροφή του χώρου των ορμών και συμβολίζεται με $\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}$. Αναλύοντας σε πραγματικά και φανταστικά μέρη:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = i\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{s,k}\right\} \tag{2.17}$$

Επιστρέφοντας τώρα στον τελικό πίνακα της σπινοριακής μορφής, έχουμε:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

όπου $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}$ ο τελεστής αλλαγής/μετάθεσης αριθμού μπάντας. Αν $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I}$ τότε ο $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I}$ είναι άρτιος ως προς τον μετασχηματισμό αλλαγής μπάντας, επομένως:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} & \emptyset \\ \emptyset & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} \end{pmatrix}$$

Παρατηρούμε ότι η δομή του πίνακα αυτού είναι όμοια της δομής του πίνακα Pauli $\widehat{\kappa}_0$ ο οποίος είναι και το ταυτοτικό στοιχείο στην ομάδα των πινάκων Pauli . Είναι επομένως θεμιτό να γράψουμε:

$$\Rightarrow \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} \tag{2.18}$$

Αν $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} = -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)}$ τότε $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)}$ είναι περιττός και γράφεται, ενώ ισχύει:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} & \emptyset \\ \emptyset & \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)b-} & \emptyset \\ \emptyset & -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)b-} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_3 \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)b-} \tag{2.19}$$

2.3 Κατηγοριοποίηση Ενδοζωνικών Υπεραγωγών

Έχοντας την τελική σπινοριακή μορφή του όρου για το ενδοζωνικό κανάλι Cooper :

$$H_{SC}^{intra} = -\sum_k \Psi_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}^{\dagger} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \Psi_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \tag{2.20}$$

Αναλύεται ο πίνακας της τετραγωνικής μορφής (ο οποίος περιέχει όλη τη φυσική πληροφορία του συμπυκνώματος), διερευνώντας περιπτώσεις του άρτιου και περιττού μέρους του ως προς τους μετασχηματισμούς.

2.3.1 Καταστάσεις Αρτιες ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Αρτιες στην Αντιστροφή

Εδώ ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_0 \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)b+}$. Επιπλέον, για καταστάσεις άρτιες και στον μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου των ορμών:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} = i\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)I+}\right\} + i\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)I+}\right\}$$

άρα:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)b+I+}\right\} + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)b+I+}\right\}$$

Λαμβάνοντας υπό όψιν και την ακόλουθη σχέση:

$$\widehat{D}_{s,k}^{(1)I+} = \widehat{\tau}_0 \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)I+t+} + \widehat{\tau}_3 \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)I+t-} + \widehat{\tau}_1 \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)I+t+} + i\widehat{\tau}_2 \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)I+t-}$$

προκύπτει:

$$\begin{aligned} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = {} & i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I+t+}\right\} + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I+t-}\right\} \\ & + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I+t+}\right\} - \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I+t-}\right\} \\ & + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I+t+}\right\} + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I+t-}\right\} \\ & + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I+t+}\right\} - \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I+t-}\right\} \end{aligned}$$

$\Delta_{+}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Re b+I+t+}$	
$\Delta_{-}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Re b+I+t-}$	
$h^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Re b+I+t+}$	
$\Pi_x^{\Re} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Re b+I+t-}$	
$\Pi_y^{\Re} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Im b+I+t-}$	
$\Pi_z^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Re b+I+t-}$	

Πίνακας 2.1: Πραγματικές Ενδοζωνικές Υπεραγωγιμες Παραμετροι Ταξεως Αρτιες στην Αλλαγή Ζώνης και Αρτιες στην Αντιστροφή

$\Delta_{+}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Im b+I+t+}$	
$\Delta_{-}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Im b+I+t-}$	
$h^{\Im} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Im b+I+t+}$	
$\Pi_x^{\Im} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Im b+I+t-}$	
$\Pi_y^{\Im} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Re b+I+t-}$	
$\Pi_z^{\Im} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Im b+I+t-}$	

Πίνακας 2.2: Φανταστικές Ενδοζωνικές Υπεραγωγιμες Παραμετροι Ταξεως Αρτιες στην Αλλαγή Ζώνης και Αρτιες στην Αντιστροφή

Σε αυτό το σημείο εισάγοντας και τους βαθμούς ελευθερίας spin :

$$Re\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re}, Im\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Im}$$
$$Re\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} = -d_x^{\Re}\widehat{\sigma}_3 - d_y^{\Im}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Re}\widehat{\sigma}_1$$
$$Im\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} = -d_x^{\Im}\widehat{\sigma}_3 + d_y^{\Re}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Im}\widehat{\sigma}_1$$

Έτσι η τελική μορφή των συνιστωσών του πίνακα της τετραγωνικής μορφής επί της βάσης Pauli μπορεί να ταξινομηθεί παρακάτω. Παρατίθενται πρώτα το πραγματικό μέρος των καταστάσεων στον παρακάτω πίνακα, ενώ ακολουθεί ο πίνακας με τα φανταστικά μέρη: Εντός της δεύτερης στήλης δίνεται η περιγραφή της αντίστοιχης παραμέτρου. Ακολούθως έχουμε τον δεύτερο πίνακα με τα φανταστικά μέλη των καταστάσεων

Το αρνητικό ή θετικό πρόσημο στο συμβολισμό υποδηλώνει το περιττό ή άρτιο μιας παραμέτρου τάξης συμβατικού ζεύγους Cooper ως προς τον αντίστοιχο μετασχηματισμό.

Τα μη συμβατικά συμπυκνώματα στα οποία τα ζεύγη Cooper εμφανίζουν μη μηδενική ολική ορμή ονομάζονται σε αυτήν την περίπτωση staggered και συμβολίζονται με h , Π. Για λόγους αντισυμμετρικότητας τα εν λόγω ζεύγη εμφανίζουν μόνο triplet διάταξη όταν είναι άρτιες στον μετασχηματισμό αντιστροφής και περιττές στον μετασχηματισμό μετατόπισης, και τούμπαλιν.

2.3.2 Καταστάσεις Αρτιες ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Περιττές στην Αντιστροφή

Για καταστάσεις περιττές ως προς την αντιστροφή του χώρου των ορμών ισχύει:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} = \widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)I-}\right\} - \widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)I-}\right\}$$

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{s,k}^{(1)b+I-}\right\} - \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{s,k}^{(1)b+I-}\right\}$$

Και:

$$D_{s,k}^{(1)I-} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)I-t+} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)I-t-} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)I-t+} + i\widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)I-t-}$$

$$\begin{aligned}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} &= \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I-t+}\right\} + \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I-t-}\right\} \\ &+\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I-t+}\right\} + i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I-t-}\right\} \\ &-\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I-t+}\right\} - \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)b+I-t-}\right\} \\ &-\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I-t+}\right\} - i\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)b+I-t-}\right\}\end{aligned}$$

Σε αυτό το σημείο θα εισάγουμε, όπως πάντα, τους spin βαθμούς ελευθερίας:

$$Re\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re}, Im\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Im}$$

$$Re\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} = -d_x^{\Re}\widehat{\sigma}_3 - d_y^{\Im}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Re}\widehat{\sigma}_1, Im\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} = -d_x^{\Im}\widehat{\sigma}_3 + d_y^{\Re}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Im}\widehat{\sigma}_1$$

Έτσι η τελική μορφή των συνιστωσών του πίνακα της τετραγωνικής μορφής επί της βάσης Pauli μπορεί να ταξινομηθεί παρακάτω. Ακολουθούν οι αντίστοιχοι πίνακες με τα πραγματικά και φανταστικά μέρη της κάθε κατάστασης:

$\Delta_{+,tr_x}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-k}^{\Re b+I-t+}$	
$\Delta_{+,tr_y}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-k}^{\Im b+I-t+}$	
$\Delta_{+,tr_z}^{\Re} = +\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-k}^{\Re b+I-t+}$	
$\Delta_{-,tr_x}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-k}^{\Re b+I-t-}$	
$\Delta_{-,tr_y}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-k}^{\Im b+I-t-}$	
$\Delta_{-,tr_z}^{\Re} = +\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-k}^{\Re b+I-t-}$	
$\Pi_{odd,x}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Re b+I-t+}$	
$\Pi_{odd,y}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Im b+I-t+}$	
$\Pi_{odd,z}^{\Re} = +\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Re b+I-t+}$	
$h^{\Re} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Re b+I-t-}$	

Ενώ ο δεύτερος πίνακας είναι:

$\Delta^{\Im}_{+,tr_x} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{\Im b+I-t+}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{+,tr_y} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{\Re b+I-t+}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{+,tr_z} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{\Im b+I-t+}_{z,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_x} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{\Im b+I-t-}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_y} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{\Re b+I-t-}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_z} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{\Im b+I-t-}_{z,k,-k}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,x} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{\Im b+I-t+}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,y} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{\Re b+I-t+}_{y,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,z} = -\widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{\Im b+I-t+}_{z,k,-(k+Q)}$	
$h^{\Im} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{\Im b+I-t-}_{k,-(k+Q)}$	

με τον συμβολισμό να παραμένει ως έχει.

2.3.3 Καταστάσεις Περιττές ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Αρτιες στην Αντιστροφή

Εδώ ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b-}_{k,I}$. Επιπλέον, για καταστάσεις άρτιες και στον μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου των ορμών έχουμε:

$$\widehat{D}^{(1)}_{k,I} = i\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}^{(1)I+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}^{(1)I+}_{s,k}\right\}$$

άρα:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}^{(1)b-I+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}^{(1)b-I+}_{s,k}\right\}$$

Λαμβάνοντας υπό όψιν την ακόλουθη σχέση:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}^{(1)I+t+}_{s,k,-k} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}^{(1)I+t-}_{s,k,-k} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}^{(1)I+t+}_{s,k,-(k+Q)} + i\widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}^{(1)I+t-}_{s,k,-(k+Q)}$$

Οπότε:

$$\begin{aligned}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} &= i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t+}_{s,k,-k}\right\} + i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t-}_{s,k,-k}\right\}\\ &+ i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\} - \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}\\ &+ i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t+}_{s,k,-k}\right\} + i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t-}_{s,k,-k}\right\}\\ &+ i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\} - \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I+t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}\end{aligned}$$

Σε αυτό το σημείο ονται, όπως πάντα, οι βαθμοί ελευθερίας spin :

$$Re\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re}, Im\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Im}$$

$$Re\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} = -d^{\Re}_x\widehat{\sigma}_3 - d^{\Im}_y\widehat{\sigma}_0 + d^{\Re}_z\widehat{\sigma}_1, Im\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} = -d^{\Im}_x\widehat{\sigma}_3 + d^{\Re}_y\widehat{\sigma}_0 + d^{\Im}_z\widehat{\sigma}_1$$

Έτσι η τελική μορφή των συνιστωσών του πίνακα της τετραγωνικής μορφής επί της βάσης Pauli μπορεί να ταξινομηθεί παρακάτω. Ξεκινούμε με τα πραγματικά μέρη των καταστάσεων:

$\Delta_{+}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Re b-I+t+}$	
$\Delta_{-}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Re b-I+t-}$	
$h^{\Re} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Re b-I+t+}$	
$\Pi_{x}^{\Re} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Re b-I+t-}$	
$\Pi_{y}^{\Re} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Im b-I+t-}$	
$\Pi_{z}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Re b-I+t-}$	

Ενώ τα φανταστικά μέλη των καταστάσεων είναι τα εξής:

$\Delta_{+}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Im b-I+t+}$	
$\Delta_{-}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Im b-I+t-}$	
$h^{\Im} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Im b-I+t+}$	
$\Pi_{x}^{\Im} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Im b-I+t-}$	
$\Pi_{y}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Re b-I+t-}$	
$\Pi_{z}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Im b-I+t-}$	

Τα μη συμβατικά συμπυκνώματα στα οποία τα ζεύγη Cooper εμφανίζουν μη μηδενική ολική ορμή ονομάζονται και σε αυτήν την περίπτωση σταγγερεδ και συμβολίζονται με h g, P. Gia l'ogous antisummetrik'othtas ta en l'ogw ze'ugh emfan'izoun m'ono triplet διάταξη όταν είναι άρτιες στον μετασχηματισμό αντιστροφής και περιττές στον μετασχηματισμό μετατόπισης, και τούμπαλιν.

2.3.4 Καταστάσεις Περιττές ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης και Περιττές στην Αντιστροφή

Για καταστάσεις περιττές ως προς την αντιστροφή του χώρου των ορμών ισχύει:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} = \widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)I-}\right\} - \widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)I-}\right\}$$

και

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)b-I-}\right\} - \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1)b-I-}\right\}$$

Και δεδομένου ότι:

$$\widehat{D}_{s,k}^{(1)I-} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)I-t+} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1)I-t-} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)I-t+} + i\widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1)I-t-}$$

Προκύπτει τελικά

$$
\begin{aligned}
\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} &= \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t+}_{s,k,-k}\right\} + \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t-}_{s,k,-k}\right\} \\
&+\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\} + i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\} \\
&-\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t+}_{s,k,-k}\right\} - \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t-}_{s,k,-k}\right\} \\
&-\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\} - i\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1)b-I-t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}
\end{aligned}
$$

Και εισάγοντας όπως πάντα τους spin βαθμούς ελευθερίας:

$$
\begin{aligned}
Re\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re}, Im\left\{\widehat{\Delta}_{singlet}\right\} &= i\widehat{\sigma}_2 d^{\Im} \\
Re\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} &= -d^{\Re}_x\widehat{\sigma}_3 - d^{\Im}_y\widehat{\sigma}_0 + d^{\Re}_z\widehat{\sigma}_1 \\
Im\left\{\widehat{\Delta}_{triplet}\right\} &= -d^{\Im}_x\widehat{\sigma}_3 + d^{\Re}_y\widehat{\sigma}_0 + d^{\Im}_z\widehat{\sigma}_1
\end{aligned}
$$

Έτσι η τελική μορφή των συνιστωσών του πίνακα της τετραγωνικής μορφής επί της βάσης Pauli μπορεί να ταξινομηθεί παρακάτω. Ακολουθούν τα πραγματικά μέρη των καταστάσεων:

$\Delta^{\Re}_{+,tr_x} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{\Re b-I-t+}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_y} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{\Im b-I-t+}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_z} = +\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{\Re b-I-t+}_{z,k,-k},$	
$\Delta^{\Re}_{-,tr_x} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{\Re b-I-t-}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{-,tr_y} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{\Im b-I-t-}_{y,k,-k},$	
$\Delta^{\Re}_{-,tr_z} = +\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{\Re b-I-t-+}_{z,k,-k}$	
$\Pi^{\Re}_{odd,x} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{\Re b-I-t+}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{odd,y} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{\Im b-I-t+}_{y,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{odd,z} = +\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{\Re b-I-t+}_{z,k,-(k+Q)}$	
$h^{\Re} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{\Re b-I-t-}_{k,-(k+Q)}$	

Ενώ τα φανταστικά μέρη των καταστάσεων είναι τα εξής:

$\Delta^{\Im}_{+,tr_x} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{\Im b-I-t+}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{+,tr_y} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{\Re b-I-t+}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{+,tr_z} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{\Im b-I-t+}_{z,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_x} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{\Im b-I-t-}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_y} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{\Re b-I-t-}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_z} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{\Im b-I-t-}_{z,k,-k}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,x} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{\Im b-I-t+}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,y} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{\Re b-I-t+}_{y,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,z} = -\widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{\Im b-I-t+}_{z,k,-(k+Q)}$	
$h^{\Im} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{\Im b-I-t-}_{k,-(k+Q)}$	

με τον συμβολισμό να παραμένει ως έχει.

Βιβλιογραφία

[1] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).

[2] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. 104, 216103 (2010)

[3] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2012)

[4] Α. Απέρης, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2008)

[5] Μ. Γεωργίου, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2010)

[6] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[7] Π. Κοτετές, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2007)

[8] Γ. Λιβανάς, Μεταπτυχιακή Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[9] Γ. Ρούμπος, Διπλωματική Εργασία, ΗΜΜΗΥ-ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ (2004)

[10] J. F. Annett, Superconductivity Superfluids and Condensates, Oxford University Press 2004

[11] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239, (1991).

Κεφάλαιο 3

Ενδοζωνικά Συμπυκνώματα Ηλεκτρονίου - Οπής

3.1 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου

Έχουμε τώρα τον όρο:

$$H_{DW}^{intra(i)} = \frac{1}{2}\sum_{k,k',q} c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)} V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4} c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)} \tag{3.1}$$

Η απουσία ηλεκτρονίου από μία ενεργειακή κατάσταση ονομάζεται οπή και συμβολίζεται με έναν τελεστή *καταστροφής* έστω $c_{k+q,s2}^{(i)}$ ο οποίος διώχνει ένα ηλεκτρόνιο που πριν βρισκόταν στην ενέργεια $k+q, s2$. Το δυναμικό του παραπάνω συμπυκνώματος $V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}$ αντιστοιχεί στο στοιχείο πίνακα:

$$V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4} = \langle k(i), s1, k+q(i), s2|\widehat{V}|k'+q, s3(i), k'(i), s4\rangle \tag{3.2}$$

Ο παραπάνω όρος καρπώνεται την εμφάνιση φαινομένων μαγνητικής φύσεως εντός του υλικού τα οποία μπορεί να συνυπάρχουν με τις υπεραγώγιμες φάσεις. Για να εξασφαλίσουμε το εφικτό της διαγωνιοποίησης της Χαμιλτονιανής του συμπυκνώματος θα χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου. Γενικά η προσέγγιση μέσου πεδίου εκφράζει τη συμπεριφορά ενός τελεστικού γινομένου με τη βοήθεια της μέσης τιμής του και μίας διακύμανσης, ως εξής:

$$c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)} = \langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle + \left(c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)} - \langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle\right)$$

$$c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)} = \langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle + \left(c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)} - \langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle\right)$$

Η ολική Χαμιλτονιανή περιέχει κι έναν όρο συμπυκνώματος στον οποίον τα το ηλεκτρόνιο και η οπή ανήκουν σε διαφορετικές μπάντες μεταξύ των.

Ωστόσο, αυτός ο όρος θα αναλυθεί παρακάτω μαζί με τον αντίστοιχό του για το διαζωνικό συμπύκνωμα ηλεκτρονίου - ηλεκτρονίου. Έτσι λοιπόν για την τρέχουσα αλληλεπίδραση θα έχουμε:

$$H_{DW}^{intra(i)} = \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\left[\langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle + \left(c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)} - \langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle\right)\right] \times$$
$$V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}\left[\langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle + \left(c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)} - \langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle\right)\right]$$

με απόρριψη όρων διακύμανσης μεγαλύτερων της β′ τάξης, αφού τελέσουμε προσεκτικά όλες τις επιμερίσεις βρίσκουμε:

$$\begin{aligned} H_{DW}^{intra(i)} &= \frac{1}{2}\sum_{k,k',q} c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)} V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}\langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle \\ &+\frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4} c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)} \\ &-\frac{1}{2}\sum_{k,k',q} V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}\langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle\langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle \end{aligned}$$

Ομοίως, δε λαμβάνουμε υπ′ όψιν τον όρο θεμελιώδους κατάστασης - κενού γενικής μορφής:

$$\langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle\langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle$$

διότι δε θα μας απασχολήσει ακόμη. Για απλούστευση της παραπάνω μορφής θα ορίσουμε τις παραμέτρους τάξης Δ ως εξής:

$$\Delta_{k,k+q,s1,s2}^{(i)} = -\frac{1}{2}\sum_{k',s3,s4} V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}\langle c_{k'+q,s3}^{(i)\dagger} c_{k',s4}^{(i)}\rangle \tag{3.3}$$

$$\Delta_{k'+q,k',s3,s4}^{(i)} = -\frac{1}{2}\sum_{k,s1,s2} V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}\langle c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)}\rangle \tag{3.4}$$

με τους δείκτες σπιν στην πιο γενική τους μορφή πριν τους αθροίσουμε. Μετασχηματίζουμε ακολούθως: $k \to -(k+q)$. Συνεχίζοντας θεωρούμε δεδομένες τις φερμιονικές ιδιότητες του δυναμικού αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής Έτσι καταλήγουμε στην ακόλουθη σχέση μεταξύ των παραμέτρων: $\Delta_{k,k+q,s1,s2}^{(i)} = \Delta_{k'+q,k',s3,s4}^{(i)}$ (παράρτημα α′). Έτσι, μπορούμε να γράψουμε τον όρο της Χαμιλτονιανής περί αλληλεπιδράσεων απλούστερα ως:

$$H_{DW}^{intra(i)} = -\sum_{k,q,s1,s2,}\left(\Delta_{k,k+q,s1,s2}^{(i)} c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+q,s2}^{(i)} + \Delta_{k+q,k,s1,s2}^{(i)} c_{k+q,s1}^{(i)\dagger} c_{k,s2}^{(i)}\right) \tag{3.5}$$

Για χ=0 η εξίσωση περιγράφει σιδηρομαγνητικες παραμέτρους τάξης στην μπάντα ι ενώ, ο όρος με χ=X περιγράφει παραμέτρους για Κύματα Πυκνότητας Σπιν/Φορτίου.

Σε αναλογία με τη διαδικασία για τα υπεραγώγιμα συμπυκνώματα του προηγούμενου κεφαλαίου, η άθροιση ως προς q μόνον στους όρους $\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{q} = \mathbf{Q}$ δίνει:

$$
\begin{aligned}
H_{DW}^{intra(i)} = &- \sum_{k,s1,s2} \left(\Delta_{k,k,s1,s2}^{(i)} c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k,s2}^{(i)} + \Delta_{k,k,s1,s2}^{(i)} c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k,s2}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k,s1,s2} \left(\Delta_{k,k+Q,s1,s2}^{(i)} c_{k,s1}^{(i)\dagger} c_{k+Q,s2}^{(i)} + \Delta_{k+Q,k,s1,s2}^{(i)} c_{k+Q,s1}^{(i)\dagger} c_{k,s2}^{(i)} \right)
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

ενώ άθροιση των $s1, s2$ δίνει:

$$
\begin{aligned}
H_{DW}^{intra(i)} = &- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k,,\uparrow,\uparrow}^{(i)} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k,\uparrow}^{(i)} + \Delta_{k,k,\uparrow,\uparrow}^{(i)} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k,\uparrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k+Q,\uparrow,\uparrow}^{(i)} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k+Q,\uparrow}^{(i)} + \Delta_{k+Q,k,\uparrow,\uparrow}^{(i)} c_{k+Q,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k,\uparrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k,,\uparrow,\downarrow}^{(i)} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k,\downarrow}^{(i)} + \Delta_{k,k,\uparrow,\downarrow}^{(i)} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k,\downarrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k+Q,\uparrow,\downarrow}^{(i)} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k+Q,\downarrow}^{(i)} + \Delta_{k+Q,k,\uparrow,\downarrow}^{(i)} c_{k+Q,\uparrow}^{(i)\dagger} c_{k,\downarrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k,,\downarrow,\uparrow}^{(i)} c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k,\uparrow}^{(i)} + \Delta_{k,k,\downarrow,\uparrow}^{(i)} c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k,\uparrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k+Q,\downarrow,\uparrow}^{(i)} c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k+Q,\uparrow}^{(i)} + \Delta_{k+Q,k,\downarrow,\uparrow}^{(i)} c_{k+Q,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k,\uparrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k,,\downarrow,\downarrow}^{(i)} c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k,\downarrow}^{(i)} + \Delta_{k,k,\downarrow,\downarrow}^{(i)} c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k,\downarrow}^{(i)} \right) \\
&- \sum_{k} \left(\Delta_{k,k+Q,\downarrow,\downarrow}^{(i)} c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k+Q,\downarrow}^{(i)} + \Delta_{k+Q,k,\downarrow,\downarrow}^{(i)} c_{k+Q,\downarrow}^{(i)\dagger} c_{k,\downarrow}^{(i)} \right)
\end{aligned}
$$

Εδώ εισάγουμε σπίνορες προς τυποποίηση των εξισώσεων:

3.2 Στον Σπινοριακό Φορμαλισμό

Η διαδικασία είναι ανάλογη αυτής του κεφαλαίου.

3.2.1 Μετασχηματισμός σπίν

Οι σπίνορες

$$
\psi_{s,k}^{(i)\dagger} = \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^{(i)\dagger} \\ c_{k,\downarrow}^{(i)\dagger} \end{pmatrix} \quad , \quad \psi_{s,k}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_{k,\uparrow}^{(i)} \\ c_{k,\downarrow}^{(i)} \end{pmatrix}
$$

οδηγούν στη σχέση

$$\begin{aligned} H_{DW}^{intra(i)} = &- \sum_{k} \left[\psi_{s,k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)} \psi_{s,k}^{(i)} + \psi_{s,k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{k,k+Q}^{(i)} \psi_{s,k+Q}^{(i)} \right] \\ &- \sum_{k} \left[\psi_{s,k+Q}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,k+Q,k}^{(i)} \psi_{s,k}^{(i)} + \psi_{s,k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)} \psi_{s,k}^{(i)} \right] \end{aligned}$$

Ισοδύναμα:

$$\begin{aligned} H_{DW}^{intra(i)} = &- \sum_{k} \left[2\psi_{s,k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)} \psi_{s,k}^{(i)} + \psi_{s,k}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{k,k+Q}^{(i)} \psi_{s,k+Q}^{(i)} \right] \\ &- \sum_{k} \left[\psi_{s,k+Q}^{(i)\dagger} \widehat{\Delta}_{s,k+Q,k}^{(i)} \psi_{s,k}^{(i)} \right] \end{aligned} \tag{3.7}$$

Οι εμφανιζόμενοι στις τετραγωνικές μορφές πίνακες είναι:

$$\Delta_{s,k,k}^{(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,k,,\uparrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,k,,\uparrow,\downarrow}^{(i)} \\ \Delta_{k,k,,\downarrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,k,,\downarrow,\downarrow}^{(i)} \end{pmatrix}$$

$$\Delta_{s,k,k+Q}^{(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,k+Q,\uparrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,k+Q,\uparrow,\downarrow}^{(i)} \\ \Delta_{k,k+Q,\downarrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k,k+Q,\downarrow,\downarrow}^{(i)} \end{pmatrix}$$

$$\Delta_{s,k+Q,k}^{(i)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k+Q,k,\uparrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k+Q,k,\uparrow,\downarrow}^{(i)} \\ \Delta_{k+Q,k,\downarrow,\uparrow}^{(i)} & \Delta_{k+Q,k,\downarrow,\downarrow}^{(i)} \end{pmatrix}$$

Οι πίνακες αυτοί είναι δισδιάστατοι και περιέχουν όλη την πληροφορία για την αλλαγή κατεύθυνσης του σπιν συνοπτικά. Εισάγοντας την ανάλυση των βαθμών ελευθερίας του σπιν:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = d\widehat{\sigma}_0 \tag{3.8}$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3 \tag{3.9}$$

όπου:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = \Delta_{singlet}\widehat{\sigma}_0$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = \Delta_{triplet}^{x}\widehat{\sigma}_1 + \Delta_{triplet}^{y} i\widehat{\sigma}_2 + \Delta_{triplet}^{z}\widehat{\sigma}_3$$

όπου θέσαμε $d_y = i\Delta_{triplet}^{y}$ για να εξασφαλίσουμε την ερμιτιανή ιδιότητα της Χαμιλτονιανής, ενώ ισχύει και εδώ:

$$\widehat{\Delta}_s = \widehat{\Delta}_{singlet} + \widehat{\Delta}_{triplet}$$

Συνεχίζοντας, θα κάνουμε μια παρένθεση για να αναφέρουμε τη μορφή που παίρνει η μέση τιμή του spin στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης. Αν και αναφέρεται εδώ μόνο, ισχύει για όλες τις περιπτώσεις συμπυκνώματος ηλεκτρονίου-οπής που παρουσιάζονται και στη συνέχεια. Η μορφή είναι η εξής:

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r})\rangle^{(i)} = \sum_{k,q}\sum_{s1,s2}\langle \mathbf{k}, s1(i)\left|\widehat{s}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right| \mathbf{k}+\mathbf{q}, s2(i)\rangle \Delta^{(i)}_{k,k+q,s1,s2}$$

με:$\widehat{s} = \widehat{\sigma}_1\widehat{x} + \widehat{\sigma}_2\widehat{y} + \widehat{\sigma}_3\widehat{z}$. Η παραπάνω μορφή αντιστοιχεί σε μία triplet κατάσταση επίσης. Θεωρώντας ηλεκτρόνια Bloch η έκφραση μετατρέπεται στην ακόλουθη:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{S}(\mathbf{r})\rangle^{(i)} &= \sum_{k,q}\sum_{s1} e^{-\mathbf{iqr}}\left(\delta_{-s1,s1}\widehat{x} - is1\delta_{-s1,s1}\widehat{y} + s1\delta_{s1,s1}\widehat{z}\right)\Delta^{(i)}_{k,k+q,s1,s2} \\ &= \sum_{k,q} e^{-\mathbf{iqr}}\Big\{\left(\Delta^{(i)}_{k,k+q,\uparrow,\downarrow} + \Delta^{(i)}_{k,k+q,\downarrow,\uparrow}\right)\widehat{x} + \left(\Delta^{(i)}_{k,k+q,\uparrow,\downarrow} - \Delta^{(i)}_{k,k+q,\downarrow,\uparrow}\right)\widehat{y} \\ &\qquad + \left(\Delta^{(i)}_{k,k+q,\uparrow,\uparrow} - \Delta^{(i)}_{k,k+q,\downarrow,\downarrow}\right)\widehat{z}\Big\}\end{aligned}$$

Για καταστάσεις singlet (S=0) προκύπτει αντίστοιχα:

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r})\rangle^{(i)} = \sum_{k,q}\sum_{s} e^{-\mathbf{iqr}}\delta_{s,s}\Delta^{(i)}_{k,k+q,s1,s2} = \sum_{k,q} e^{-\mathbf{iqr}}\left(\Delta^{(i)}_{k,k+q,\uparrow,\uparrow} + \Delta^{(i)}_{k,k+q,\downarrow,\downarrow}\right) = \langle \rho\left(\mathbf{r}\right)\rangle \tag{3.10}$$

όπου $\langle \rho\left(\mathbf{r}\right)\rangle$είναι η μέση τιμή της πυκνότητας φορτίου συναρτήσει του διανύσματος θέσης εντός του υλικού.

Παρακάτω, γίνεται η εισαγωγή και των υπολοίπων τριών σπινόρων για την εξαγωγή της σπινοριακής Χαμιλτονιανής:

3.2.2 Μετασχηματισμός μετατόπισης ($k \to k+q$)

Σε αναλογία με τα υπεραγώγιμα συμπυκνώματα του προηγούμενου κεφαλαίου, η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H^{intra(i)}_{DW} = -\sum_{k}\psi^{(i)\dagger}_{s,k,t}\widehat{D}^{(i)}_{k,t}\psi^{(i)}_{s,k,t} \tag{3.11}$$

Ενώ ο πίνακας $\widehat{D}_k$, ορίζεται τώρα από:

$$\widehat{D}^{(i)}_k = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,k+Q} \\ \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k+Q,k} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k+Q,k+Q} \end{pmatrix}$$

α Με τη βοήθει του τελεστή μετατόπισης $t_Q : k \to k+Q$ ξαναγράφεται ο παραπάνω πίνακας ως εξής:

$$\widehat{D}^{(i)}_k = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,k+Q} \\ t_Q\widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,k+Q} & t_Q\widehat{\Delta}^{(i)}_{s,k,k} \end{pmatrix}$$

ενώ τα στοιχεία του πίνακα είναι οι δισδιάστατοι πίνακες που ορίστηκαν στην προηγούμενη παράγραφο, στο πρώτο βήμα κατά την εισαγωγή του σπίνορα αντιστροφής του spin . Έτσι ο πίνακας αποτελείται από τέσσερα blocks δισδιάστατων πινάκων και συνολικά είναι τετραδιάστατος. Αναλύοντας τα blocks σε περιττό κα άρτιο μέρος ως προς τον μετασχηματισμό της μετατόπισης στο χώρο των ορμών προκύπτει:

$$\widehat{D}_k^{(i)} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)t+} + \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)t-} & \widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t+} + \widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t-} \\ \widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t+} - \widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t-} & \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)t+} - \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)t-} \end{pmatrix}$$

κι έτσι ο πίνακας γράφεται με τη βοήθεια των πινάκων Pauli :

$$\widehat{D}_k^{(i)} = \widehat{\tau}_0 \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)t+} + \widehat{\tau}_3 \widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(i)t-} + \widehat{\tau}_1 \widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t+} + i\widehat{\tau}_2 \widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t-} \tag{3.12}$$

ενώ θέτουμε $\widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t-} = i\widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(i)t-}$ για απορροφήσουμε τη φανταστική μονάδα εντός των παραμέτρων τάξης και να διασφαλίσουμε την ερμιτιανή ιδιότητα της Χαμιλτονιανής.

3.2.3 Μετασχηματισμός αντιστροφής ($k \to -k$)

Με τον αντίστοιχο σπίνορα, η Χαμιλτονιανή παίρνει τη μορφή:

$$H_{DW}^{intra(i)} = -\sum_k \Psi_I^{(i)\dagger} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(i)} \Psi_I^{(i)} \tag{3.13}$$

όπου ορίζεται ο πίνακας δισδιάστατος block με στοιχεία τον πίνακα $\widehat{D}_k^{(i)}$ ως εξής:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(i)} = \begin{pmatrix} \widehat{D}_k^{(i)} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{D}_{-k}^{(i)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{D}_k^{(i)} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -\widehat{D}_{-k}^{(i)\intercal} \end{pmatrix}$$

Ο παραπάνω πίνακας είναι $8x8$. Ο εν λόγω πίνακας περιέχει όλη την πληροφορία για τη συμπεριφορά του συμπυκνώματος σε αντιστροφή των κυνατασυσμάτων.

Εδώ θα χρησιμοποιήσουμε τον τελεστή αντιστροφής I. Δηλαδή:

$$\widehat{D}_{k,I}^{(i)} = \begin{pmatrix} \widehat{D}_k^{(i)} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}_k^{(i)\intercal} \end{pmatrix}$$

Η Χαμιλτονιανή πλήρως και για τις δύο μπάντες έχει ως εξής:

$$H_{DW}^{intra} = H_{DW}^{intra(1)} + H_{DW}^{intra(2)} = -\sum_k \psi_{k,I}^{(1)\dagger} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1)} \psi_{k,I}^{(1)} - \sum_k \psi_{k,I}^{(2)\dagger} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(2)} \psi_{k,I}^{(2)} \tag{3.14}$$

3.2.4 Μετασχηματισμός Αλλαγής Δείκτη Ζώνης $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}$

Με τον αντίστοιχο σπίνορα η Χαμιλτονιανή της αλληλεπίδρασης γίνεται:

$$H_{DW}^{intra} = -\sum_k \Psi^\dagger_{\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \Psi_{\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \tag{3.15}$$

όπου ορίζεται ο $16x16$ σε μορφή $2x2$ πίνακα block με στοιχεία τους $8x8$ πίνακες $\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I}, i = 1,2$ ως εξής:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

Η Χαμιλτονινανή είναι ερμιτιανή. Επομένως ισχύει:

$$H_{DW}^{intra} = H_{DW}^{intra\dagger}$$

αυτό δίνει το συμπέρασμα:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{G}^\dagger_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$$

Επομένως:

$$\begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)\dagger}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)\dagger}_{k,I} \end{pmatrix}$$

Έτσι λαμβάνουμε τις εξής σχέσεις από την παραπάνω ισότητα πινάκων, σε συμπυγμένη μορφή:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(i)\dagger}_{k,I}, i = 1,2$$

άρα τελικά έχουμε:

$$\begin{pmatrix} \widehat{D}^{(i)}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}^{(i)\mathsf{T}}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(i)\dagger}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}^{(i)*}_k \end{pmatrix}$$

Αν $\widehat{D}^{(i)}_k$ άρτιος τότε:

$$\begin{pmatrix} \widehat{D}^{(i)\dagger}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}^{(i)*}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(i)\dagger}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -\widehat{D}^{(i)*}_k \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = Re\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_k\right\}\widehat{\varrho}_3 + iIm\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_k\right\}\widehat{\varrho}_0 \tag{3.16}$$

Αν $\widehat{D}^{(i)}_k$ περιττός τότε έχουμε:

$$\begin{pmatrix} \widehat{D}^{(i)\dagger}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}^{(i)*}_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(i)\dagger}_k & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{D}^{(i)*}_k \end{pmatrix}$$

Άρα:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(i)}_{k,I} = Re\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_0 + iIm\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_3 \tag{3.17}$$

Επιστρέφουμε τώρα στον πίνακα $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ τον χωρίζουμε σε άρτιο και περιττό μέλος ως προς το μετασχηματισμό αλλαγής μπάντας. Αν ισχύει:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} \end{pmatrix}$$

Τότε $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I}$ είναι άρτιος στην αλλαγή μπάντας και ο $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ γραφεται με τη βοήθεια των πινάκων Pauli ως εξής:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} \tag{3.18}$$

Ενώ αν ισχύει το ακόλουθο:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b-}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \\ \widehat{\emptyset} & -\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b-}_{k,I} \end{pmatrix}$$

τότε $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)}_{k,I}$ είναι περιττός στην αλλαγή μπάντας και ο $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ γραφεται με τη βοήθεια των πινάκων Pauli ως εξής:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I} \tag{3.19}$$

3.3 Κατηγοριοποίηση Ενδοζωνικών Συμπυκνωμάτων Ηλεκτρονίου - Οπής

Έχουμε λοιπόν την σπινοριακή Χαμιλτονιανή στην παρκάτω μορφή:

$$H^{intra}_{DW} = -\sum_{k} \Psi^{\dagger}_{\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}\Psi_{\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \tag{3.20}$$

3.3.1 Καταστάσεις Αρτιες ως προς την Αλλαγή Δείκτη Ζώνης

Εδώ ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ παίρνει, όπως εξήχθη προηγουμένως, την κάτωθι μορφή:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_0 \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I}$$

Ακολούθως παραθέτουμε τις περιττές και άρτιες καταστάσεις ως προς την ανιστροφή των κυματανυσμάτων:

$$\widehat{D}^{(i)}_{k,I} = Re\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_3 + iIm\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_0$$

$$\widehat{D}^{(i)}_{k,I} = Re\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_0 + iIm\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_3$$

καθώς και την αντίστοιχη σχέση ως προς το μετασχηματισμό της μετατόπισης στο χώρο των κυματανυσμάτων - ή ορμών:

$$\widehat{D}^{(i)}_{k} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}^{(i)t+}_{s,k,k} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}^{(i)t-}_{s,k,k} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}^{(i)t+}_{s,k,k+Q} + \widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}^{(i)t-}_{s,k,k+Q}$$

Τώρα εισάγουμε τους βαθμούς ελευθερίας του spin ήτοι, singlet και triplet καταστάσεις:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = d\widehat{\sigma}_0$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3$$

Με όλες αυτές τις προσθήκες συγκεντρωμένες προχωρούμε στην κατηγοριοποίηση των πιθανών καταστάσεων που προκύπτουν. Ο συμβολισμός των παραμέτρων έχει διατηρηθεί ο ίδιος γενικά όταν η ανανφορά γίνεται σε συμπυκνώματα ηλεκτρονίου - οπής (είτε ιντερ -, είτε intra - band) και χρησιμοποιείται αυτούσιος για να δηλώσει τις φυσικές καταστάσεις που προκύπτουν από αυτήν την αλληλεπίδραση:

Singlet καταστάσεις. Πρώτα παρατίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$P_- = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{b+I+t+}_{k,k}$	
$W_{CDW} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{b+I+t+}_{k,k+Q}$	
$W^{odd}_{CDW} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{b+I-t+}_{k,k+Q}$	

Ενώ οι περιττές στην μετατόπισης των ορμών καταστάσεις είναι οι εξής:

$P_+ = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{b+I+t-}_{k,k}$	
$W_{OAF} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d^{b+I+t-}_{k,k+Q}$	
$\gamma^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{b+I-t-}_{k,k}$	
$W^{odd}_{OAF} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d^{b+I-t-}_{k,k+Q}$	

Spin triplet καταστάσεις. Εδώ ξεκινούμε από τις άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$F_x = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{b+I+t+}_{x,k,k,x}$	
$F_y = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d^{b+I+t+}_{y,k,k}$	
$F_z = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{b+I+t+}_{z,k,k}$	
$M_x = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{b+I+t+}_{x,k,k+Q}$	
$M_y = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d^{b+I+t+}_{y,k,k+Q}$	
$M_z = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{b+I+t+}_{z,k,k+Q}$	
$F_x^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{b+I-t+}_{x,k,k,x}$	
$F_y^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d^{b+I-t+}_{y,k,k}$	
$F_z^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{b+I-t+}_{z,k,k}$	
$M_x^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{b+I-t+}_{x,k,k+Q}$	
$M_y^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d^{b+I-t+}_{y,k,k+Q}$	
$M_z^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{b+I-t+}_{z,k,k+Q}$	

Ενώ οι περιττές στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις είναι οι εξής:

$A_x = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{b+I+t-}_{x,k,k,x}$	
$A_y = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d^{b+I+t-}_{y,k,k}$	
$A_z = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{b+I+t-}_{z,k,k}$	
$J_x = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d^{b+I+t-}_{x,k,k+Q}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{b+I+t-}_{y,k,k+Q}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d^{b+I+t-}_{z,k,k+Q}$	
$A_x^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{b+I-t-}_{x,k,k,x}$	
$A_y^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d^{b+I-t-}_{y,k,k}$	
$A_z^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{b+I-t-}_{z,k,k}$	
$J_x^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d^{b+I-t-}_{x,k,k+Q}$	
$J_y^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{b+I-t-}_{y,k,k+Q}$	
$J_y^{odd} = \widehat{\kappa}_0\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d^{b+I-t-}_{z,k,k+Q}$	

Η περίπτωση άρτίου και περιττού μέρους ως προς την αντιστροφή για τις παραμέτρους τάξης δεικνύεται με την απουσία ή παρουσία της λέξεως odd αντιστοίχως στο κάτω μέρος του γράμματος που συμβολίζει την παράμετρο τάξης. Με πρόσημο θετικό (αρνητικό) συμβολίζονται παράμετροι τάξης οι οποίες είναι άρτιες (περιττές) ως προς τον μετασχηματισμό μετατόπισης στο χώρο των ορμών (κυματανυσμάτων). Έτσι στις spin singlet καταστάσεις, με γ και $P_\pm$ συμβολίζονται οι ηλεκτρονιακες νηματικές καταστάσεις τάξης ή Pomeranchuck - φορτίου (με γ συμβολίζονται ειδικά οι περιττές στην αντιστροφή κυματανυσμάτων νηματικές παράμετροι τάξης). Με W_{CDW} συμβολίζεται το συμβατικό Κύμα Πυκνότητας Φορτίου - CDW , ενώ με W_{OAF} το μη συμβατικό Κύμα

Πυκνότητας Φορτίου. Οι spin triplet καταστάσεις περιέχουν τις σιδηρομαγνητικές παραμέτρους που συμβολίζονται με F_i ενώ οι αντισιδηρομαγνητικές, οι οποίες ταυτοποιούνται από το Κύμα Πυκνότητας Spin - SDW , με M_i. Το μη συμβατικό Κύμα Πυκνότητας Spin συμβολίζεται με J_i ενώ, οι spin - Pomeranchuck καταστάσεις συμβολίζονται με A_i. Στις triplet καταστάσεις ο συμβολισμός που χρησιμοποιείται αναφέρεται στη γενική μορφή των συνιστωσών πόλωσης του spin .

3.3.2 Καταστασεις περιττές ως προς την αλλαγή μπάντας

Εδώ ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ όπως εξηγήθηκε παραπάνω παίρνει τη μορφή:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_3 \widehat{\mathfrak{D}}^{(1)b+}_{k,I}$$

Ακολούθως παραθέτουμε τις περιττές και άρτιες καταστάσεις ως προς την ανιστροφή των κυματανυσμάτων:

$$\widehat{D}^{(i)}_{k,I} = Re\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_3 + iIm\left\{\widehat{D}^{(i)I+}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_0$$

$$\widehat{D}^{(i)}_{k,I} = Re\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_0 + iIm\left\{\widehat{D}^{(i)I-}_{k}\right\}\widehat{\varrho}_3$$

καθώς και την αντίστοιχη σχέση ως προς το μετασηματισμό της μετατόπισης στο χώρο τηψν κυματανυσμάτων - ή ορμών:

$$D^{(i)}_k = \widehat{\tau}_0 \widehat{\Delta}^{(i)t+}_{s,k,k} + \widehat{\tau}_3 \widehat{\Delta}^{(i)t-}_{s,k,k} + \widehat{\tau}_1 \widehat{\Delta}^{(i)t+}_{s,k,k+Q} + \widehat{\tau}_2 \widehat{\Delta}^{(i)t-}_{s,k,k+Q}$$

Τώρα εισάγουμε τους βαθμούς ελευθερίας του σπιν ήτοι, σινγλετ και τριπλετ καταστάσεις:

$$\Delta_{singlet} = d\widehat{\sigma}_0$$

$$\Delta_{triplet} = d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3$$

Με όλες αυτές τις προσθήκες συγκεντρωμένες προχωρούμε στην κατηγοριοποίηση των πιθανών καταστάσεων που προκύπτουν. Πρώτα παρατίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

Singlet καταστάσεις. Πρώτα παρατίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$P_- = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{b-I+t+}_{k,k}$	
$W_{CDW} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{b-I+t+}_{k,k+Q}$	
$W^{odd}_{CDW} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{b-I-t+}_{k,k+Q}$	

Ενώ οι περιττές στην μετατόπισης των ορμών καταστάσεις είναι οι εξής:

$P_+ = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{b-I+t-}_{k,k}$	
$W_{OAF} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d^{b-I+t-}_{k,k+Q}$	
$\gamma^{odd} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{b-I-t-}_{k,k}$	
$W^{odd}_{OAF} = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d^{b-I-t-}_{k,k+Q}$	

Σπιν τριπλετ καταστάσεις. Εδώ ξεκινούμε από τις άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$F_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{b-I+t+}_{x,k,k,x}$	
$F_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d^{b-I+t+}_{y,k,k}$	
$F_z = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{b-I+t+}_{z,k,k}$	
$M_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{b-I+t+}_{x,k,k+Q}$	
$M_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d^{b-I+t+}_{y,k,k+Q}$	
$M_z = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{b-I+t+}_{z,k,k+Q}$	
$F^{odd}_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{b-I-t+}_{x,k,k,x}$	
$F^{odd}_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d^{b-I-t+}_{y,k,k}$	
$F^{odd}_z = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{b-I-t+}_{z,k,k}$	
$M^{odd}_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{b-I-t+}_{x,k,k+Q}$	
$M^{odd}_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d^{b-I-t+}_{y,k,k+Q}$	
$M^{odd}_z = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{b-I-t+}_{z,k,k+Q}$	

Ενώ οι περιττές στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις είναι οι εξής:

$A_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{b-I+t-}_{x,k,k,x}$	
$A_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d^{b-I+t-}_{y,k,k}$	
$A_z = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{b-I+t-}_{z,k,k}$	
$J_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d^{b-I+t-}_{x,k,k+Q}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{b-I+t-}_{y,k,k+Q}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d^{b-I+t-}_{z,k,k+Q}$	
$A^{odd}_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{b-I-t-}_{x,k,k,x}$	
$A^{odd}_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d^{b-I-t-}_{y,k,k}$	
$A^{odd}_z = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{b-I-t-}_{z,k,k}$	
$J^{odd}_x = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d^{b-I-t-}_{x,k,k+Q}$	
$J^{odd}_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{b-I-t-}_{y,k,k+Q}$	
$J^{odd}_y = \widehat{\kappa}_3\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d^{b-I-t-}_{z,k,k+Q}$	

Εδώ πρέπει να σημειωθεί πως ο συμβολισμός είναι αυτός με την προηγούμενη ανάλυση.

Βιβλιογραφία

[1] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).

[2] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. 104, 216103 (2010)

[3] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2012)

[4] Α. Απέρης, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2008)

[5] Μ. Γεωργίου, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2010)

[6] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[7] Π. Κοτετές, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2007)

[8] Γ. Λιβανάς, Μεταπτυχιακή Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[9] Γ. Ρούμπος, Διπλωματική Εργασία, ΗΜΜΗΥ-ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ (2004)

[10] J. F. Annett, Superconductivity Superfluids and Condensates, Oxford University Press 2004

[11] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239, (1991).

Κεφάλαιο 4

Διαζωνικά Συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής

Πρόκειτα για ζεύγη ήλεκτρονίου - οπής όταν το κάθε μέλος του ζέυγους ανήκει σε διαφορετικές ζώνες

4.1 Προσέγγιση Μέσου Πεδίου

Ο όρος αλληλεπίδρασης μεταξύ των δύο διασπορών:

$$H_{DW}^{inter} = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} c_{k,\uparrow}^{\dagger} d_{k+q,\downarrow} V_{k,k+q,k'+q,k'} d_{k'+q,\uparrow}^{\dagger} c_{k',s4\downarrow} \tag{4.1}$$

Εδώ βέβαια έχουμε ήδη απλοποιήσει το άθροισμα ως προς τα spin $s_i, i = 1, 2, 3, 4 - s_i =\uparrow, \downarrow$λαμβάνοντας υπό όψιν όρους που περιέχον μόνο αντίθετες κατευθύνσεις spin . Το q συμβολίζει την ολική ορμή του ζεύγους ηλεκτρονίου - οπής. Ο γενικότερος όρος όμως είναι ο παρακάκω:

$$H_{DW}^{inter} = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} c_{k,s1}^{\dagger} d_{k+q,s2} V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4} d_{k'+q,s3}^{\dagger} c_{k',s4} \tag{4.2}$$

Το δυναμικό $V_{k,k+q,k'+q,k'}^{s1,s3,s2,s4}$ στο παραπάνω συμπύκνωμα αντιστοιχεί στο στοιχείο πίνακα:

$$\langle k(1), s1; k+q(2), s2; \left| \widehat{V} \right| k'+q(2), s3; k'(1), s4 \rangle$$

Όπως βλέπουμε ηλεκτρόνιο και οπή βρίσκονται σε διαφορετικές ενεργειακές διασπορές - μπάντες. Ως προς τα υπεραγώγιμα συμπυκνώματα αλλά και αυτά των ηλεκτρονίων - οπών αυτή είναι μια ιδιαιτερότητα του FeSe αλλά και άλλων υλικών με περισσότερες μπάντες. Επιτρέπουν τα εν λόγω υλικά την συνύπαρξη συμπυκνωμάτων εντός μίας μπαντας μαζί με αυτά που σχηματίζονται μεταξύ δύο μπαντών. Αυτό είναι ένας κύριος λόγος μελέτης αναλόγου είδους υλικών και κάτι που τα καθιστά άκρως ενδιαφέροντα από ερευνητικής απόψεως.

Στη συνέχεια, θα χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου-μια μέθοδο Hartree-Fock , για να εξασφαλίσουμε το εφικτό της διαγωνοποίησης των Χαμιλτονιανών και του υπολογισμού των ιδιοτιμή. Γενικά η προσέγγιση μέσου πεδίου εκφράζει τη συμπεριφορά ενός τελεστικού γινομένου με τη βοήθεια της μέσης τιμής του και μίας διακύμανσης, ως εξής:

$$c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2} = \langle c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2}\rangle + \left(c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2} - \langle c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2}\rangle\right)$$

$$d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4} = \langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle + \left(d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4} - \langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle\right)$$

Ο όρος της ολικής Χαμιλτονιανής εκφράζει, όπως είπαμε, μια αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου - οπής ανάμεσα στις δύο μπάντες του FeSe (ιντερ-βανδ ιντεραςτιον, 1- 2). Η προσέγγιση μέσου πεδίου ωστόσο, θα εφαρμοστεί κατά το γνωστόν της τρόπο. Έτσι λοιπόν για την αλληλεπίδραση μεταξύ των δύο διασπορών θα έχουμε:

$$\begin{aligned} H^{inter}_{DW} &= \frac{1}{2}\sum_{k,k',q} c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2}V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'}\langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle \\ &\quad +\frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\langle c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2}\rangle V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'}d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4} \\ &\quad -\frac{1}{2}\sum_{k,k',q}V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'}\langle c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2}\rangle\langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle \end{aligned} \tag{4.3}$$

με απόρριψη όρων διακύμανσης μεγαλύτερων της β′ τάξης, αφού τελέσουμε προσεκτικά όλες τις επιμερίσεις. Αναλυτικά:

$$\begin{aligned} H^{inter}_{DW} = \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}&\left[\langle c^{\dagger}_{k,s1}c^{\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle + \left(c^{\dagger}_{k,s1}c^{\dagger}_{-(k+q),s2} - \langle c^{\dagger}_{k,s1}c^{\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle\right)\right]\times \\ &\times V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'}\left[\langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle + \left(d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4} - \langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle\right)\right] \end{aligned}$$

εκτελούμε τις επιμερίσεις και αυθαίρετα αφαιρούμε όρους που περιέχουν δύο διακυμάνσεις. Ομοίως, δε λαμβάνουμε υπό όψιν τον όρο θεμελιώδους κατάστασης - 'κενού' γενικής μορφής:

$$c^{\dagger}_{k,s1}d_{k+q,s2}\rangle\langle d^{\dagger}_{k'+q,s3}c_{k',s4}\rangle$$

διότι δε θα μας απασχολήσει ακόμη. Ο παραπάνω όρος, όπως είπαμε και για τα υπεραγώγιμα συμπυκνώματα, σχετίζεται με το ενεργειακό ποσό που χρειάζεται ώστε το σύστημα να δημιουργήσει το συμπύκνωμα αυτό και να εμφανιστούν τα μαγνητικής φύσεως φαινόμενα που το χαρακτηρίζουν (π.χ. σιδηρομαγνητισμός, κύμα πυκνότητας σπιν κ.α.). Για απλούστευση της παραπάνω μορφής θα ορίσουμε τις παραμέτρους τάξης Δ ως εξής:

$$\Delta_{k,k+q,s1,s2} = -\frac{1}{2}\sum_{k',s3,s4} V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'} \langle d^{\dagger}_{k'+q,s3} c_{k',s4}\rangle \tag{4.4}$$

$$\Delta_{k'+q,k',s3,s4} = -\frac{1}{2}\sum_{k,s1,s2} V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'} \langle c^{\dagger}_{k,s1} d_{k+q,s2}\rangle \tag{4.5}$$

με τους δείκτες σπιν στην πιο γενική τους μορφή πριν τους αθροίσουμε. Αν θεωρήσουμε (όπως στη θεωρία BCS) ότι η ποσότητα $\langle c^{\dagger}_{k,s3} d_{k+q,s4}\rangle$ είναι παράμετρος τάξης, τότε οι εξισώσεις (75), (76) είναι εξισώσεις αυτοσυνέπειας. Η επίλυσή τους είναι και το ζητούμενο της όλης διαδικασίας. Μετασχηματίζουμε ακολούθως: $k \to -(k+q)$, $c \to d$ κι έπειτα θέτουμε $c \to c^{(1)}$, $d \to c^{(2)}$. Η τελευταία αλλαγή γίνεται για να μας επιτρέψει να χειριστούμε την εναλλαγή ανάμεσα στις δύο μπάντες σε όποια intra - band διαδικασία ως ένα κβαντικό αριθμό εφάμιλλο με αυτό του spin και των υπολοίπων μετασχηματισμών. Έτσι, αντί να δηλώνουμε την έτερη σχέση διασποράς με άλλο τελεστή χρησιμοποιούμε το γράμμα ς και εισάγουμε νέους δείκτες 1, 2 αντιστοίχους προς τις δύο ενεργειακές διασπορές που έχει το υλικό μας (FeSe). Οι υπόλοιποι μετασχηματισμοί θα μας επιτρέψουν κι εδώ να βρούμε μια σχέση ανάμεσα στις παραπάνω εξισώσεις αυτοσυνέπειας και να απλουστεύσουμε την έκφραση της Χαμιλτονιανής. Έτσι οι παράμετροι τάξης εκφράζονται:

$$\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,s1,s2} = -\frac{1}{2}\sum_{k',s3,s4} V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'} \langle c^{(2)\dagger}_{k'+q,s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \tag{4.6}$$

$$\Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k'+q,k',s3,s4} = -\frac{1}{2}\sum_{k,s1,s2} V^{s1,s3,s2,s4}_{k,k+q,k'+q,k'} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)}_{k+q,s2}\rangle \tag{4.7}$$

όπου οι δείκτες δηλώνουν τις δύο διαφορετικές μπάντες με το αμφίδρομο βέλος να δηλώνει ότι η αλληλεπίδραση είναι μεταξύ φορέων(ηλεκτρονίων ή οπών) που ανήκουν σε διαφορετικές μπάντες. Ομοίως πράττεται σε όλα τα διαζωνικά συμπυκνώματα

Συνεχίζοντας θεωρούμε δεδομένες τις φερμιονικές ιδιότητες του δυναμικού αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-οπής και πράγματι καταλήγουμε στη σύνδεση των δύο παραμέτρων τάξης λόγω των μετασχηματισμών $k \to -(k+q), c \to d$ από την ακόλουθη σχέση: $\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k+q,k,s1,s2} = \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k',k'+q,s3,s4}$ Έτσι, μπορούμε να γράψουμε τον όρο της Χαμιλτονιανής περί αλληλεπιδράσεων ως:

$$H^{inter}_{DW} = -\sum_{k,q,s1,s2,} \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,s1,s2} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)}_{k+q,s2} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k+q,k,s1,s2} c^{(2)\dagger}_{k+q,s1} c^{(1)}_{k,s2}\right) \tag{4.8}$$

Εδώ πρέπει να τονιστεί το γεγονός πως, η σταθερά $\frac{1}{2}$ ως συντελεστής έχει ενσωματωθεί στον παραπάνω ορισμό των παραμέτρων τάξης. Το αυτό ισχύει για όλους τους όρους της Χαμιλτονιανής που περιγράφουν αλληλεπίδραση και έχει θεωρηθεί αυτονόητο παρακάτω και παραπάνω.

Οπως και στις προηγούμενες περιπτώσεις, κρατάμε μόνο τους όρους $\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{q} = \mathbf{Q}$ στο άθροισμα ως προς q παίρνοντας:

$$H_{DW}^{inter} = -\sum_{k,s1,s2}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k,s1,s2} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)}_{k,s2} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,k,s1,s2} c^{(2)\dagger}_{k,s1} c^{(1)}_{k,s2}\right)$$
$$-\sum_{k,s1,s2}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+Q,s1,s2} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)}_{k+Q,s2} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k+Q,k,s1,s2} c^{(2)\dagger}_{k+Q,s1} c^{(1)}_{k,s2}\right)$$

ενώ άθροιση των $s1, s2$ έχει αποτέλεσμα:

$$\begin{aligned}
H_{DW}^{inter} = \; & - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k,,\uparrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)}_{k,\uparrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,k,\uparrow,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(1)}_{k,\uparrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+Q,\uparrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)}_{k+Q,\uparrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k+Q,k,\uparrow,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{k+Q,\uparrow} c^{(1)}_{k,\uparrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k,,\uparrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)}_{k,\downarrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,k,\uparrow,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(1)}_{k,\downarrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+Q,\uparrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)}_{k+Q,\downarrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k+Q,k,\uparrow,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{k+Q,\uparrow} c^{(1)}_{k,\downarrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k,,\downarrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)}_{k,\uparrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,k,\downarrow,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(1)}_{k,\uparrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+Q,\downarrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)}_{k+Q,\uparrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k+Q,k,\downarrow,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{k+Q,\downarrow} c^{(1)}_{k,\uparrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k,,\downarrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)}_{k,\downarrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,k,\downarrow,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(1)}_{k,\downarrow}\right) \\
& - \sum_{k}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+Q,\downarrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)}_{k+Q,\downarrow} + \Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{k+Q,k,\downarrow,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{k+Q,\downarrow} c^{(1)}_{k,\downarrow}\right) \quad (4.9)
\end{aligned}$$

4.2 Εισάγοντας τον Σπινοριακός Φορμαλισμό

Εδώ εισάγουμε σπίνορες προς τυποποίηση των εξισώσεων όπως και στα προηγούμενα κεφάλαια:

4.2.1 Μετασχηματισμός spin

Εισάγονται οι παρατιθέμενοι σπίνορες:

$$\psi^{(1)\dagger}_{s,k} = \begin{pmatrix} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} \\ c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} \end{pmatrix}, \psi^{(2)\dagger}_{s,k} = \begin{pmatrix} c^{(2)\dagger}_{k,\uparrow} \\ c^{(2)\dagger}_{k,\downarrow} \end{pmatrix}, \psi^{(1)}_{s,k} = \begin{pmatrix} c^{(1)}_{k,\uparrow} \\ c^{(1)}_{k,\downarrow} \end{pmatrix}, \psi^{(2)}_{s,k} = \begin{pmatrix} c^{(2)}_{k,\uparrow} \\ c^{(2)}_{k,\downarrow} \end{pmatrix}$$

Έτσι ο όρος αλληλεπίδρασης γράφεται

$$
\begin{aligned}
H_{DW}^{inter} = &-\sum_k \left[\psi_{s,k}^{(1)\dagger}\widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)}\psi_{s,k}^{(2)} + \psi_{s,k}^{(1)\dagger}\widehat{\Delta}_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)}\psi_{s,k+Q}^{(2)}\right] \\
&-\sum_k \left[\psi_{s,k+Q}^{(2)\dagger}\widehat{\Delta}_{s,k+Q,k}^{(2\leftrightarrow 1)}\psi_{s,k}^{(1)} + \psi_{s,k}^{(2)\dagger}\widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(2\leftrightarrow 1)}\psi_{s,k}^{(1)}\right] \qquad (4.10)
\end{aligned}
$$

οι παραπάνω μορφές είναι τετραγωνικές και υπολογίζονται κατά το γνωστό τρόπο από την άλγεβρα ως εσωτερικά γινόμενα. Ενώ ορίζονται οι πίνακες:

$$\Delta_{s,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,k,,\uparrow,\uparrow}^{(1\leftrightarrow 2)} & \Delta_{k,k,,\uparrow,\downarrow}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \Delta_{k,k,,\downarrow,\uparrow}^{(1\leftrightarrow 2)} & \Delta_{k,k,,\downarrow,\downarrow}^{(1\leftrightarrow 2)} \end{pmatrix}$$

$$\Delta_{s,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,k+Q,\uparrow,\uparrow}^{(1\leftrightarrow 2)} & \Delta_{k,k+Q,\uparrow,\downarrow}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \Delta_{k,k+Q,\downarrow,\uparrow}^{(1\leftrightarrow 2)} & \Delta_{k,k+Q,\downarrow,\downarrow}^{(1\leftrightarrow 2)} \end{pmatrix}$$

$$\Delta_{s,k,k}^{(2\leftrightarrow 1)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k,k,\uparrow,\uparrow}^{(2\leftrightarrow 1)} & \Delta_{k,k,\uparrow,\downarrow}^{(2\leftrightarrow 1)} \\ \Delta_{k,k,\downarrow,\uparrow}^{(2\leftrightarrow 1)} & \Delta_{k,k,\downarrow,\downarrow}^{(2\leftrightarrow 1)} \end{pmatrix}$$

$$\Delta_{s,k+Q,k}^{(2\leftrightarrow 1)} = \begin{pmatrix} \Delta_{k+Q,k,\uparrow,\uparrow}^{(2\leftrightarrow 1)} & \Delta_{k+Q,k,\uparrow,\downarrow}^{(2\leftrightarrow 1)} \\ \Delta_{k+Q,k,\downarrow,\uparrow}^{(2\leftrightarrow 1)} & \Delta_{k+Q,k,\downarrow,\downarrow}^{(2\leftrightarrow 1)} \end{pmatrix}$$

Αυτοί οι πίνακες περιέχουν την πληροφορία αλλαγής κατεύθυνσης του σπιν στο συμπύκνωμα.

Αμέσως τώρα θα αναλύσουμε τις διάφορες περιπτώσεις διαφορετικής πόλωσης του σπιν μέσα στο υλικό. Για αυτό το λόγο χωρίζουμε τους πίνακες Δ σε τριπλετ και σινγλετ μέρος τοιουτοτρόπως:

$$\Delta_s = \widehat{\Delta}_{singlet} + \widehat{\Delta}_{triplet}$$

όπου:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = \Delta_{singlet}\widehat{\sigma}_0 = d\widehat{\sigma}_0 \qquad (4.11)$$

$$\Delta_{triplet} = \Delta_{triplet}^{x}\widehat{\sigma}_1 + \Delta_{triplet}^{y} i\widehat{\sigma}_2 + \Delta_{triplet}^{z}\widehat{\sigma}_3$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3 \qquad (4.12)$$

Για να διασφαλίζουμε την ερμιτιανή ιδιότητα της Χαμιλτονιανής θέτουμε: $d_y = i\Delta_{triplet}^{y}$.

Συνεχίζοντας, θα κάνουμε μια παρένθεση για να αναφέρουμε τη μορφή που παίρνει η μέση τιμή του σπιν στη γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης και διαμέσου των δύο μπαντών. Η μορφή είναι η εξής:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r})\rangle_{inter} = \sum_{k,q}\sum_{s1,s2}\langle \mathbf{k}, s1(i)\left|\widehat{s}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|\mathbf{k}+\mathbf{q}, s2(i)\rangle\Delta_{k,k+q,s1,s2}^{(1\leftrightarrow 2)}$$

με:$\widehat{s} = \widehat{\sigma}_1\widehat{x} + \widehat{\sigma}_2\widehat{y} + \widehat{\sigma}_3\widehat{z}$. Η παραπάνω μορφή αντιστοιχεί σε μία τριπλετ κατάσταση επίσης. Θεωρώντας ότι χειριζόμαστε ηλεκτρόνια Βλοςη η έκφραση μετατρέπεται σε αυτήν:

$$\mathbf{S}(\mathbf{r})\rangle_{inter} = \sum_{k,q}\sum_{s1} e^{-iqr}\left(\delta_{-s1,s1}\widehat{x} - is1\delta_{-s1,s1}\widehat{y} + s1\delta_{s1,s1}\widehat{z}\right)\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,s1,s2}$$

$$\sum_{k,q} e^{-iqr}\left\{\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\uparrow,\downarrow} + \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\downarrow,\uparrow}\right)\widehat{x} + \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\uparrow,\downarrow} - \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\downarrow,\uparrow}\right)\widehat{y}\right.$$
$$\left. + \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\uparrow,\uparrow} - \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\downarrow,\downarrow}\right)\widehat{z}\right\} \tag{4.13}$$

Για καταστάσεις σινγλετ (Σ=0) λαμβάνουμε την αντίστοιχη έκφραση:

$$\langle\mathbf{S}(\mathbf{r})\rangle_{inter} = \sum_{k,q}\sum_{s} e^{-iqr}\delta_{s,s}\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,s1,s2} = \sum_{k,q} e^{-iqr}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\uparrow,\uparrow} + \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,k+q,\downarrow,\downarrow}\right) = \langle\rho\left(\mathbf{r}\right)\rangle_{inter} \tag{4.14}$$

όπου $\langle\rho\left(\mathbf{r}\right)\rangle_{inter}$ είναι η μέση τιμή της πυκνότητας φορτίου συναρτήσει του διανύσματος θέσης εντός του υλικού.

4.2.2 Μετασχηματισμός Μετατόπισης: $(k \to k+q)$

Εδώ οι σπίνορες είναι

$$\psi^{(1)\dagger}_{s,k,t} = \begin{pmatrix} \psi^{(1)\dagger}_{s,k} \\ \psi^{(1)\dagger}_{s,k+Q} \end{pmatrix}, \psi^{(2)\dagger}_{s,k,t} = \begin{pmatrix} \psi^{(2)\dagger}_{s,k} \\ \psi^{(2)\dagger}_{s,k+Q} \end{pmatrix}, \psi^{(1)}_{s,k,t} = \begin{pmatrix} \psi^{(1)}_{s,k} \\ \psi^{(1)}_{s,k+Q} \end{pmatrix}, \psi^{(2)}_{s,k,t} = \begin{pmatrix} \psi^{(2)}_{s,k} \\ \psi^{(2)}_{s,k+Q} \end{pmatrix}$$

έτσι η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H^{inter}_{DW} = -\sum_{k}\left(\psi^{(1)\dagger}_{s,k,t}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\to 2)}_{s,k}\psi^{(2)}_{s,k,b} + \psi^{(2)\dagger}_{s,k,t}\widehat{\mathfrak{D}}^{(2\to 1)}_{s,k}\psi^{(1)}_{s,k,t}\right) \tag{4.15}$$

Οι πίνακες ορίζονται αντίστοιχα:

$$D^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k+Q} \\ \widehat{\Delta}^{(1\to\leftrightarrow 2)}_{s,k+Q,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k+Q,k+Q} \end{pmatrix}$$

$$D^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k,k+Q} \\ \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k+Q,k} & \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k+Q,k+Q} \end{pmatrix}$$

Το σύμβολο τ για την αναστροφή του πρώτου διανύσματος στην τετραγωνική μορφή θα θεωρείται αυτονόητο. Όσον αφορά τους όρους που προκύπτουν από τις μορφές, κάθε τετραγωνική μορφή συνεισφέρει τέσσερις όρους. Συνολικά έχουμε 4 επιπλέον όρους ωστόσο οι Χαμιλτονιανές είναι ισοδύναμες αν λάβουμε υπό όψιν τους μετασχηματισμούς τους οποίου περιέχουν. Οι παραπάνω πίνακες περικλείουν μέσα τους την πληροφορία για τη συμπεριφορά του συμπυκνώματος υπό τον μετασχηματισμό μετατόπισης στο χώρο των ορμών.

Συνεχίζοντας, εισάγουμε τον τελεστή μετατόπισης $t_Q : k \to k+Q$. Έπειτα εκφράζουμε στοιχεία του $\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k}$μέσω αυτού.

$$D^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k+Q} \\ \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k+Q,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k+Q,k+Q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k+Q} \\ t_Q\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k+Q} & t_Q\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k} \end{pmatrix}$$

Όπως παρατηρούμε, πριν το φορμαλισμό Nambu , η αναλυτική έκφραση της Χαμιλτονιανής δεν περιέχει όρους που να περιέχουν του δύο κάτω όρους του πίνακα. Για δε τον:

$$D^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k,k+Q} \\ \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k+Q,k} & \widehat{\Delta}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k+Q,k+Q} \end{pmatrix}$$

το αριστερό του μέρος - πάνω και κάτω - είναι μηδέν για τους ίδιους λόγους. Προχωρούμε στην υπενθύμιση των πινάκων Pauli : $\widehat{\kappa}_i, \widehat{\tau}_i, \widehat{\varrho}_i, \widehat{\sigma}_i, i = 0, 1, 2, 3$

Όπως είδαμε στην προηγούμενη παράγραφο, εκφράσαμε κάποια στοιχεία του πίνακα $\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k}$ τη βοηθεία του τελεστή μετατόπισης $t_Q : k \to k+Q$. Τώρα, θα αναλύσουμε περαιτέρω αυτά τα στοιχεία σε περιττά και άρτια ως προς τον εν λόγω τελεστή, για να εκφράσουμε τον παραπάνω πίνακα ως γραμμικό συνδυασμό πινάκων Pauli .

$$D^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k+Q} \\ t_Q\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k+Q} & t_Q\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,k} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t+}_{s,k,k} + \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t-}_{s,k,k} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t+}_{s,k,k+Q} + \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t-}_{s,k,k+Q} \\ \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t+}_{s,k,k+Q} - \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t-}_{s,k,k+Q} & \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t+}_{s,k,k} - \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t-}_{s,k,k} \end{pmatrix}$$

Επομένως ο πίνακας μπορεί να γραφτεί ως γραμμικός συνδυασμός των πινάκων Pauli :

$$\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t+}_{s,k,k} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t-}_{s,k,k} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t+}_{s,k,k+Q} + i\widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)t-}_{s,k,k+Q} \quad (4.16)$$

4.2.3 Μετασχηματισμός Αντιστροφής ($k \to -k$)

με αντίστοιχο σπίνορα:

$$\psi^\dagger_I = \begin{pmatrix} \psi^\dagger_k \\ \psi_{-k} \end{pmatrix}$$

Έτσι η Χαμιλτονιανή παίρνει τη μορφή:

$$H^{inter}_{DW} = -\sum_k \left(\psi^{(1)\dagger}_{s,k,b}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow 2)}_{,k,I}\psi^{(2)}_{s,k,b} + \psi^{(2)\dagger}_{s,k,b}\widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow 1)}_{,k,I}\psi^{(1)}_{s,k,b} \right) \quad (4.17)$$

Ενώ οι 8×8 πίνακες που εισάγονται αναλύονται εδώ:

$$\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,I} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} & \emptyset \\ \widehat{\emptyset} & -\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)\intercal}_{s,-k} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{D}^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,I} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(2\leftrightarrow 1)}_{s,k} & \widehat{\emptyset} \\ \emptyset & -\widehat{D}^{(2\leftrightarrow 1)\intercal}_{s,-k} \end{pmatrix}$$

Οι ανωτέρω πίνακες περιγράφουν την συμπεριφορά του συμπυκνώματος υπό αντιστροφή των κυματανυσμάτων.

Έπειτα, τα στοιχεία του πρώτου από τους δύο πίνακες, αναλύονται σε περιττό κι άρτιο μέρος ως προς τον μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου των ορμών. Δηλαδή:

$$\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,I} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} & \emptyset \\ \widehat{\emptyset} & -\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)\intercal}_{s,-k} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} & \emptyset \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)\intercal}_{s,k} \end{pmatrix}$$

Το ερμιτιανό της Χαμιλτονιανής και οι ιδιότητές του καταλήγουν:

$$\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,I} = \begin{pmatrix} \widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k} & \emptyset \\ \widehat{\emptyset} & -I\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)*}_{s,k} \end{pmatrix}$$

Αν $\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k}$ άρτιοσ(I+) ή περιττόσ(I-) στην αντιστροφή τότε έχουμε:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,I} = \widehat{\varrho}_3 Re\left\{\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)I+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\varrho}_0 Im\left\{\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)I+}_{s,k}\right\} \tag{4.18}$$

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,I} = \widehat{\varrho}_0 Re\left\{\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)I-+}_{s,k}\right\} + i\widehat{\varrho}_3 Im\left\{\widehat{D}^{(1\leftrightarrow 2)I-}_{s,k}\right\} \tag{4.19}$$

Ακολουθεί αμέσως μετά ο τέταρτος μετασχηματισμός:

4.2.4 Μετασχηματισμός Αλλαγής Δείκτη Ζώνης $1 \to 2$.

Εισάγουμε σπίνορα μετάθεσης $\psi^{\dagger}_{s,k,b} = \begin{pmatrix} \psi^{(1)\dagger}_{k,\varsigma} \\ \psi^{(2)\dagger}_{k,\varsigma} \end{pmatrix}$ με s, και k θεωρούμενα σταθερά. Ο τελεστής που εκφράζει τον εν λόγω μετασχηματισμό είναι ο εξής $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}$. Έτσι η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H^{inter}_{DW} = -\sum_k \Psi^{\dagger}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \Psi_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \tag{4.20}$$

Επεξήγηση πινάκων:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,I} \\ \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow 1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Ο τελευταίος πίνακας περιέχει τη φυσική πληροφορία για αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου - οπής δια μέσου των δύο διασπορών καθώς και για όλους τους μετασχηματισμούς και τις συμμετρίες που την διέπουν. Πρέπει να αντιπροσωπεύεται λοιπόν από μετρήσιμα ιδιοποσά άρα πραγματικά. Επομένως πρέπει να είναι ερμιτιανός $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}} = \widehat{G}^{\dagger}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}}$ άρα:

$$\begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} \\ \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)\dagger}_{k,I} \\ \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} \Rightarrow \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)\dagger}_{k,I}$$

$$\Rightarrow \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} \\ \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Η ερμιτιανή ιδιότητα της Χαμιλτονιανής οδηγεί στο εξής συμπέρασμα:

$$\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)\dagger}_{k,I} = \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} \tag{4.21}$$

όπου $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}$ ο τελεστής αλλαγής μπάντας. Αν

$$\widehat{D}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} \Rightarrow \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)\dagger}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I}$$

άρα $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I}$άρτιος ως προς $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}$[1]. Αν

$$\widehat{D}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = -\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} \Rightarrow \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = -\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} = -\widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)\dagger}_{k,I} = -\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I}$$

τότε $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I}$περιττός ως προς $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}$ (δηλαδή τον μετασχηματισμό αλλαγής μπάντας). Αντιστοίχως αναλύουμε τον $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}}$σε γραμμικό συνδυασμό πινάκων Pauli . Παρακάτω εξηγείται ο τρόπος. Υπενθυμίζουμε τον πίνακα:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)\dagger}_{k,I} \\ \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Παραπάνω είχαμε διακρίνει περιπτώσεις περιττού κι άρτιου μέρους ως προς τον τελεστή $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}$ μετάθεσης αριθμού μπάντας.

Αν ο πίνακας $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} = \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)\dagger}_{k,I}$ τότε ο πίνακας $\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I}$ είναι άρτιος στην αλλαγή μπάντας κι ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}}$ μπορεί να εκφραστεί ακολούθως ως εξής:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} \\ \widehat{\mathfrak{D}}^{(2\leftrightarrow1)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} \\ \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow2)}\widehat{\mathfrak{D}}^{(1\leftrightarrow2)}_{k,I} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

[1] δηλαδή τον μετασχηματισμό αλλαγής μπάντας

$$\begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+} \\ \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Επομένως, εν τοιαύτη περιπτώση ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ εκφράζεται τη βοηθεία πινάκων Pauli ως:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+} \tag{4.22}$$

Αν ο πίνακας $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)\dagger}$ τότε ο πίνακας $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)}$ είναι περιττός στην αλλαγή μπάντας κι ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ μπορεί να εκφραστεί ακολούθως ως εξής:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Άρα μπορούμε να γράψουμε τον πίνακα $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ τη βοηθεία των πινάκων Pauli ως εξής:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = i\widehat{\kappa}_2 \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-} \tag{4.23}$$

.

4.3 Κατηγοριοποίηση Διαζωνικών Συμπυκνωμάτων Ηλεκτρονίου-Οπής

Έως τώρα έχουμε εκφράσει τη Χαμιλτονιανή ως εξής:

$$H_{DW}^{inter} = -\sum_{k} \Psi_{s,k,b}^{\dagger} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \Psi_{s,k,b} \tag{4.24}$$

όπου όλη η φυσική πληροφορία ευρίσκεται εντός του πίνακα $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ ο οποίος είναι $16x16$. Χρησιμοποιώντας τις αναλύσεις που κάναμε προηγουμένως στον πίνακα $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ θα εκφράσουμε τελικά τον παρόντα πίνακα σε γραμμικό συνδυασμό επί της βάσης των πινάκων Pauli .

Για το μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου:

$$\widehat{D}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\varrho}_3 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+}\right\} + i\widehat{\varrho}_0 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+}\right\}$$

$$\widehat{D}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\varrho}_0 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I-+}\right\} + i\widehat{\varrho}_3 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I-}\right\}$$

Για το μετασχηματισμό μετατόπισης στο χώρο των κυματανυσμάτων οι πίνακες $\widehat{D}_k^{(1\leftrightarrow 2)I\pm}$ αναλύονται ως εξής:

$$D_k^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}_{s,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)t-} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + \widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}_{s,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)t-}$$

4.3.1 Καταστάσεις Αρτιες στον Μετασχηματισμό Δείκτη Ζώνης

Εν τοιαύτη περιπτώσει λαμβάνουμε:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+}$$

Εισάγουμε την ανάλυση των βαθμών ελευθερίας του σπιν:

$$\Delta_{singlet} = d\widehat{\sigma}_0$$

$$\Delta_{triplet} = d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3$$

με:

$$\Delta_s = \widehat{\Delta}_{singlet} + \widehat{\Delta}_{triplet}$$

Έτσι καταλήγουμε στις εξής περιπτώσεις για τις παραμέτρους τάξης εκπεφρασμένες επί της 16ξ16 βάσης των πινάκων Pauli :Σπιν σινγλετ καταστάσεις. Πρώτα παρατίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$P_- = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}$	
$W_{CDW} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}$	
$W_{CDW}^{odd} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	

Ενώ οι περιττές καταστάσεις στην μετατόπιση των ορμών είναι οι εξής:

$P_+ = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$W_{OAF} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\gamma_-^{odd} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$W_{OAF}^{odd} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	

Σπιν τριπλετ καταστάσεις. Πρώτα, κατά τα ηωθώτα, εκτίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$F_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t+}_{x,k,k,x}$	
$F_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t+}_{y,k,k}$	
$F_z = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t+}_{z,k,k}$	
$M_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_1 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t+}_{x,k,k+Q}$	
$M_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_1 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t+}_{y,k,k+Q}$	
$M_z = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_1 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t+}_{z,k,k+Q}$	
$F^{odd}_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t+}_{x,k,k,x}$	
$F^{odd}_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t+}_{y,k,k}$	
$F^{odd}_z = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_0 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t+}_{z,k,k}$	
$M^{odd}_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_1 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t+}_{x,k,k+Q}$	
$M^{odd}_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_1 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t+}_{y,k,k+Q}$	
$M^{odd}_z = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_1 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t+}_{z,k,k+Q}$	

Έπειτα, ακολουθούν οι περιττές στη μετατόπιση καταστάσεις που είναι οι εξής:

$A_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t-}_{x,k,k,x}$	
$A_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t-}_{y,k,k}$	
$A_z = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t-}_{z,k,k}$	
$J_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_2 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t-}_{x,k,k+Q}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_2 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t-}_{y,k,k+Q}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_2 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I+t-}_{z,k,k+Q}$	
$A^{odd}_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t-}_{x,k,k,x}$	
$A^{odd}_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t-}_{y,k,k}$	
$A^{odd}_z = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_3 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t-}_{z,k,k}$	
$J^{odd}_x = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_2 \widehat{\sigma}_1 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t-}_{x,k,k+Q}$	
$J^{odd}_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_0 \widehat{\tau}_2 \widehat{\sigma}_2 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t-}_{y,k,k+Q}$	
$J^{odd}_y = \widehat{\kappa}_1 \widehat{\varrho}_3 \widehat{\tau}_2 \widehat{\sigma}_3 d^{(1\leftrightarrow2)b+I-t-}_{z,k,k+Q}$	

Όπου με F_i συμβολίζουμε τις σιδηρομαγνητικές και με M_i τις αντισιδηρομαγνητικές παραμέτρους τάξης (Κύμα Πυκνότητας Σπιν, ΣΔΩ), με A_i, J_i τις σπιν - νηματικές καταστάσεις εντός των οποίων περιέχονται η σπιν - Πομερανςηυςκ και το μη συμβατικό κύμα πυκνότητας σπιν αντιστοίχως. Ο δείκτης υποδηλώνει την εκάστοτε πόλωση του σπιν. Οι σπιν σινγλετ καταστάσεις αποτελούνται από το συμβατικό κύμα πυκνότητας φορτίου (W_{CDW}), το μη συμβατικό (W_{OAF}) καθώς και τις νηματικές καταστάσεις τάξης, γνωστές και ως καταστάσεις Πομερανςηυςκ - φορτίου. Οι δείκτες οδδ υποδηλώνουν κατάσταση περιττή ως προς τον μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου των ορμών. Εδώ να τονίσουμε ότι, τα παραπάνω φαινόμενα τα περιγραφόμενα από τις αντίστοιχες παραμέτρους τάξης συμβαίνουν μεταξύ των δύο ενεργειακών μπαντών. Δηλαδή, το ηλεκτρόνιο και η οπή βρίσκονται σε διαφορετικές μ-πάντες (1η και 2η ή τούμπαλιν) όταν αλληλεπιδρούν (ιντερ βανδ παρτιςλε - ηαλλ ςονδενσατε). Επομένως, πρόκειται για ταξινόμηση των διαφόρων προσθετέων, ουσιαστικά, που απαρτίζουν την ιντερβανδ Χαμιλτονιανή περί συμπυκνωμάτων οπήσ-ηλεκτρονίου[2]:

$$H_{DW}^{inter} = -\sum_{k} \psi^{\dagger}_{s,k,b} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \psi_{s,k,b} \tag{4.25}$$

4.3.2 Καταστάσεις Περιττές στον Μετασχηματισμό Δείκτη Ζώνης

Εν τοιαύτη περιπτώσει λαμβάνουμε:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = i\widehat{\kappa}_2 \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\rightarrow 2)b-}$$

Σε αυτήν την περίπτωση θέτουμε $i\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\rightarrow 2)b-} \rightarrow \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\rightarrow 2)b-}$ ώστε να απορροφήσουμε εντός του πίνακα τη φανταστική μονάδα i, άρα:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_2 \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\rightarrow 2)b-}$$

Εισάγοντας την ανάλυση των βαθμών ελευθερίας του σπιν:

$$\Delta_{singlet} = d\widehat{\sigma}_0$$

$$\Delta_{triplet} = d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3$$

με:

$$\Delta_s = \widehat{\Delta}_{singlet} + \widehat{\Delta}_{triplet}$$

Έτσι καταλήγουμε στις εξής περιπτώσεις για τις παραμέτρους τάξης εκπεφρασμένες επί της$16x16$ βάσης των πινάκων Pauli :

Σπιν σινγλετ καταστάσεις. Πρώτα παρατίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$P_- = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$W_{CDW} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$E_0 = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	
$W_{CDW}^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	

Ενώ οι περιττές καταστάσεις στην μετατόπιση των ορμών είναι οι εξής:

[2]αρκεί να ικανοποιούν την απαγορευτική αρχή του Pauli

$P_+ = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$W_{OAF} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$\gamma_-^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	
$W_{OAF}^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	

Σπιν τριπλετ καταστάσεις. Πρώτα, κατά τα ηωθώτα, εκτίθενται οι άρτιες στην μετατόπιση των ορμών καταστάσεις:

$F_x = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k,x}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$F_y = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$F_z = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$M_x = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$M_y = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$M_z = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}$	
$F_x^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k,x}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	
$F_y^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	
$F_z^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	
$M_x^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	
$M_y^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	
$M_z^{odd} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}$	

Έπειτα, ακολουθούν οι περιττές στη μετατόπιση καταστάσεις που είναι οι εξής:

$A_x = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k,x}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$A_y = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$A_z = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$J_x = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$J_y = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}$	
$A_x^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k,x}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	
$A_y^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	
$A_z^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	
$J_x^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{x,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	
$J_y^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_3\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d_{y,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	
$J_y^{odd} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_0\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{z,k,k+Q}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}$	

Εδώ πρέπει να σημειωθεί πως ο συμβολισμός είναι αυτός με την προηγούμενη ανάλυση.

Βιβλιογραφία

[1] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2012)

[2] Α. Απέρης, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2008)

[3] Μ. Γεωργίου, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2010)

[4] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[5] Π. Κοτετές, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2007)

[6] Γ. Λιβανάς, Μεταπτυχιακή Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[7] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[8] Γ. Ρούμπος, Διπλωματική Εργασία, ΗΜΜΗΥ-ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ (2004)

[9] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).

[10] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. 104, 216103 (2010)

[11] J. F. Annett, Superconductivity Superfluids and Condensates, Oxford University Press 2004

[12] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239, (1991).

Κεφάλαιο 5

Υπεραγώγιμα Διαζωνικά Συμπυκνώματα

Εδώ θέτουμε το πρόβλημα στη μορφή της Διαζωνικής Χαμιλτονιανής

$$H_{SC}^{inter} = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} \sum_{s1,s2,s3,s4} c_{k,s1}^{\dagger} d_{-(k+q),s2}^{\dagger} V_{k,-(k+q),-(k'+q),k'}^{s1,s2,s3,s4} d_{-(k'+q),s3} c_{k',s4} \tag{5.1}$$

Όπως και στην περίπτωση του συμπυκνώματος ηλεκτρονίου οπής έτσι κι εδώ αντί για διαφορετικά γράμματα στην υπόδειξη τελεστών από δύο διαφορετικές μπάντες θα χρησιμοποιήσουμε αριθμητικούς δείκτες 1,2. Θέτουμε κι εδώ $d \rightarrow c^{(2)}$ και $c \rightarrow c^{(1)}$. Έτσι η εξίσωση (130) ξαναγράφεται:

$$H_{SC}^{inter} = \frac{1}{2} \sum_{k,k',q} \sum_{s1,s2,s3,s4} c_{k,s1}^{(1)\dagger} c_{-(k+q),s2}^{(2)\dagger} V_{k,-(k+q),-(k'+q),k'}^{s1,s2,s3,s4} c_{-(k'+q),s3}^{(2)} c_{k',s4}^{(1)} \tag{5.2}$$

ενώ κι εδώ μπορούμε να παραστήσουμε το δυναμικό $V_{k,-(k+q),-(k'+q),k'}^{s1,s2,s3,s4}$ με το αντίστοιχο στοιχείο πίνακα με μορφή:

$$\langle k(1), s1; -(k+q)(2), s2|\widehat{V}|k', s4(2); -(k+q)(1), s3\rangle$$

Το εν λόγω συμπύκνωμα μαζί με την προηγούμενη περίπτωση ηλεκτρονίου-οπής ανάμεσα στις δύο μπάντες, όπως αναφέρεται στο τμήμα 2.3, αποτελούν και την ιδιαίτερη διαφοροποίηση που χαρακτηρίζει υλικά τα οποία έχουν περισσότερες της μίας μπάντες.

Ομοίως κι εδώ θα εφαρμόσουμε την προσέγγιση μέσου πεδίου αφού πρώτα παραθέσουμε τον τρόπο λειτουργίας, όπως κάναμε και προηγουμένως:

$$c_{k,s1}^{(1)\dagger} c_{-(k+q),s2}^{(2)\dagger} = \langle c_{k,s1}^{(1)\dagger} c_{-(k+q),s2}^{(2)\dagger}\rangle + \left(c_{k,s1}^{(1)\dagger} c_{-(k+q),s2}^{(2)\dagger} - \langle c_{k,s1}^{(1)\dagger} c_{-(k+q),s2}^{(2)\dagger}\rangle\right)$$

$$c_{-(k'+q),s3}^{(2)} c_{k',s4}^{(1)} = \langle c_{-(k'+q),s3}^{(2)} c_{k',s4}^{(1)}\rangle + \left(c_{-(k'+q),s3}^{(2)} c_{k',s4}^{(1)} - \langle c_{-(k'+q),s3}^{(2)} c_{k',s4}^{(1)}\rangle\right)$$

Επομένως λαμβάνουμε:

$$H_{SC}^{inter} = \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle + \left(c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2} - \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle \right)$$

$$^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle + \left(c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4} - \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \right)$$

Κάνοντας χρήση της προσέγγισης, συμφωνούμε να κρατήσουμε στο άθροισμα όρους με διακυμάνσεις μέχρι πρώτης τάξης. Έπειτα, αναπτύσσουμε όλα τα αθροίσματα(μετά των διακυμάνσεων) και καταλήγουμε στους τελικούς όρους του αθροίσματος.

Η μορφή στην οποία καταλήγουμε είναι η εξής:

$$\begin{aligned}
H_{SC}^{inter} = &+ \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \times \\
&\times \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \times \\
&\times \left(c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4} - \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \right) \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \left(c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2} - \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle \right) \times \\
&\times V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle \\
&+ \frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \left(c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2} - \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle \right) \times \\
&\times V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \left(c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4} - \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \right)
\end{aligned}$$

και αφού διώξουμε όρους με διακυμάνσεις β′ τάξεως και κάνουμε τις επιμερίσεις:

$$\begin{aligned}
H_{SC}^{inter} = &\frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4} \\
&+\frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \\
&-\frac{1}{2}\sum_{k,k',q}\sum_{s1,s2,s3,s4} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle
\end{aligned}$$

Ο τελευταίος όρος (όρος κενού) περιγράφει την ενεργειακή απαίτησή του συστήματος ώστε αυτό να περιέλθει στην υπεραγώγιμη κατάσταση κι ως εκ τούτου δεν μελετάται εδώ και αγνοείται.

Παρακάτω ορίζουμε τις παραμέτρους τάξης με σκοπό να απλοποιήσουμε την παραπάνω σχέση. Έχουμε λοιπόν:

$$\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+q),s1,s2} = -\frac{1}{2}\sum_{k',s3,s4} V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \langle c^{(2)}_{-(k'+q),s3} c^{(1)}_{k',s4}\rangle \tag{5.3}$$

$$\Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{-(k'+q),k',s3,s4} = -\frac{1}{2}\sum_{k,s1,s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'} \langle c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2}\rangle \tag{5.4}$$

Μετασχηματίζουμε την πρώτη εξίσωση κατά:$k \to -(k+q), 1 \leftrightarrow 2$ ώστε να εκμεταλλευτούμε τις συμμετρίες που τη διέπουν και να καταλήξουμε σε μία σχέση ανάμεσα στις αυτές τις δύο. Οι παραπάνω σχέσεις περιέχουν μέσα τους τη μέση τιμή τελεστικού γινομένου. Αυτό μπορεί να θεωρηθεί στο πνεύμα μιας γενικής θεωρίας BCS ως παράμετρος τάξης. Άρα οι δύο εξισώσεις είναι επί της ουσίας εξισώσεις αυτοσυνέπειας. Λόγω των φερμιονικών ιδιοτήτων στις οποίες υπακούει το δυναμικό $V^{s1,s2,s3,s4}_{k,-(k+q),-(k'+q),k'}$ καθώς και των μετασχηματισμών που αναφέραμε καταλήγουμε στη ακόλουθη σχέση: $\Delta^{(2\leftrightarrow 1)}_{-(k'+q),k',s3,s4} = -\Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+q),s1,s2}$ (παράρτημα α').

Ολοκληρώνοντας καταλήγουμε στην κάτωθι απλοποιημένη μορφή για την ιντερ - βανδ Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου στο κανάλι Cooper :

$$H^{inter}_{SC} = -\sum_{k,,q,s1,s2}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+q),s1,s2} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+q),s2} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-(k+q),k,s1,s2} c^{(2)}_{-(k+q),s1} c^{(1)}_{k',s2}\right) \tag{5.5}$$

Ακολουθώντας τα βήματα στο αντίστοιχο υποτμήμα της προηγούμενης παραγράφου, σε αυτό το εδάφιο θα εισάγουμε τον φορμαλισμό Nambu στον όρο της Χαμιλτονιανής του πραγματευόμαστε έτσι όπως έχει μορφοποιηθεί μετά την εισαγωγή της προσέγγισης μέσου πεδίου. Η Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου, αφού αθροίσουμε για $\mathbf{q} = \mathbf{0}, \mathbf{q} = \mathbf{Q}$) παίρνει τη μορφή:

$$\begin{aligned} H^{inter}_{SC} = & - \sum_{k,s1,s2}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,s1,s2} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-k,s2} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-k,k,s1,s2} c^{(2)}_{-k,s1} c^{(1)}_{k,s2}\right) \\ & - \sum_{k,s1,s2}\left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),s1,s2} c^{(1)\dagger}_{k,s1} c^{(2)\dagger}_{-(k+Q),s2} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-(k+Q),k,s1,s2} c^{(2)}_{-(k+Q),s1} c^{(1)}_{k,s2}\right) \end{aligned}$$

το άθροισμα στα σπίν έχει αποτέλεσμα:

$$
\begin{aligned}
H_{SC}^{inter} = & - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\uparrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{-k,\uparrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-k,k,\uparrow,\uparrow} c^{(2)}_{-k,\uparrow} c^{(1)}_{k,\uparrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\uparrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{-(k+Q),\uparrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-(k+Q),k,\uparrow,\uparrow} c^{(2)}_{-(k+Q),\uparrow} c^{(1)}_{k,\uparrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\uparrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{-k,\downarrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-k,k,\uparrow,\downarrow} c^{(2)}_{-k,\uparrow} c^{(1)}_{k,\downarrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\uparrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\uparrow} c^{(2)\dagger}_{-(k+Q),\downarrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-(k+Q),k,\uparrow,\downarrow} c^{(2)}_{-(k+Q),\uparrow} c^{(1)}_{k,\downarrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\downarrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{-k,\uparrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-k,k,\downarrow,\uparrow} c^{(2)}_{-k,\downarrow} c^{(1)}_{k,\uparrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\downarrow,\uparrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{-(k+Q),\uparrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-(k+Q),k,\downarrow,\uparrow} c^{(2)}_{-(k+Q),\downarrow} c^{(1)}_{k,\uparrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\downarrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{-k,\downarrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-k,k,\downarrow,\downarrow} c^{(2)}_{-k,\downarrow} c^{(1)}_{k,\downarrow} \right) \\
& - \sum_k \left(\Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\downarrow,\downarrow} c^{(1)\dagger}_{k,\downarrow} c^{(2)\dagger}_{-(k+Q),\downarrow} - \Delta^{*(1\leftrightarrow 2)}_{-(k+Q),k,\downarrow,\downarrow} c^{(2)}_{-(k+Q),\downarrow} c^{(1)}_{k,\downarrow} \right)
\end{aligned}
$$

Στη συνέχεια κατά την ήδη παρατεθείσα διαδικασία, θα εισάγουμε έναν προς έναν τους σπίνορες καταλήγοντας στη σπινοριακή μορφή της Χαμιλτονιανής για το υπεραγώγιμο συμπύκνωμα.

5.1 Εισάγοντας το Σπινοριακό Φορμαλισμό

Εδώ εισάγουμε σπίνορες προς τυποποίηση των εξισώσεων:

5.1.1 Μετασχηματισμός spin :

Με τους αντίστοιχους σπίνορες ο όρος συμπυκνώματος γίνεται:

$$
\begin{aligned}
H_{SC}^{inter} = & -\sum_k \left[\psi^{(1)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,-k} \psi^{(2)\dagger}_{s,-k} + \psi^{(1)\dagger}_{s,k} \widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q)} \psi^{(2)\dagger}_{s,-(k+Q)} \right] \\
& -\sum_k \left[\psi^{(2)\dagger}_{s,-k} \widehat{\Delta}^{*(2\leftrightarrow 1)}_{s,-k,k} \psi^{(1)}_{s,k} + \psi^{(2)\dagger}_{s,-(k+Q)} \widehat{\Delta}^{*(2\leftrightarrow 1)}_{s,-(k+Q).k} \psi^{(1)}_{s,k} \right]
\end{aligned}
$$

Όπου οι πίνακες:

$$
\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,-k} = \begin{pmatrix} \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\uparrow,\uparrow} & \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\uparrow,\downarrow} \\ \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\downarrow,\uparrow} & \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-k,\downarrow,\downarrow} \end{pmatrix}
$$

$$
\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)}_{s,k,-(k+Q)} = \begin{pmatrix} \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\uparrow,\uparrow} & \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\uparrow,\downarrow} \\ \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\downarrow,\uparrow} & \Delta^{(1\leftrightarrow 2)}_{k,-(k+Q),\downarrow,\downarrow} \end{pmatrix}
$$

$$\widehat{\Delta}^{*(2\leftrightarrow1)}_{s,-k,k} = \begin{pmatrix} \Delta^{*(2\leftrightarrow1)}_{-k,k,\uparrow,\uparrow} & \Delta^{*(2\leftrightarrow1)}_{-k,k,\uparrow,\downarrow} \\ \Delta^{(2\leftrightarrow1)}_{-k,k,\downarrow,\uparrow} & \Delta^{(2\leftrightarrow1)}_{-k,k,\downarrow,\downarrow} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\Delta}^{*(2\leftrightarrow1)}_{s,-(k+Q),k} = \begin{pmatrix} \Delta^{*(2\leftrightarrow1)}_{-(k+Q),k,\uparrow,\uparrow} & \Delta^{*(2\leftrightarrow1)}_{-(k+Q),k,\uparrow,\downarrow} \\ \Delta^{*(2\leftrightarrow1)}_{-(k+Q),k,\downarrow,\uparrow} & \Delta^{*(2\leftrightarrow1)}_{-(k+Q),k,\downarrow,\downarrow} \end{pmatrix}$$

Η σημασία των εισηγμένων πινάκων είναι ότι αυτοί περιέχουν μέσα τους την πληροφορία αλλαγής του σπιν σε λιτή μορφή καθώς και τη συμπεριφορά του ζεύγους Cooper ως προς την πόλωση του σπιν.

Τώρα εισάγουμε τους βαθμούς ελευθερίας του σπιν. Θα χωρίσουμε τον πίνακα $\widehat{\Delta}$ σε σινγλετ και τριπλετ μέρος. Δηλαδή:

$$\Delta = \widehat{\Delta}_{singlet} + \widehat{\Delta}_{triplet}$$

όπου ισχύει για τους υπεραγωγούς:

$$\Delta_{singlet} = id_{\mathbf{k}}\widehat{\sigma}_2, \widehat{\Delta}_{triplet} = i\left(\overrightarrow{d}_{\mathbf{k}}\overrightarrow{\sigma}\right)\widehat{\sigma}_2$$

Το στοιχείο $\overrightarrow{d}_{\mathbf{k}}$ είναι ένα διάνυσμα στο χώρο των ψευδοδιανυσμάτων το οποίο μας δείχνει το μέτρο και την κατεύθυνση του σπιν ενός υπεραγωγού σε τριπλετ διάταξη, ενώ το $d_{\mathbf{k}}$είναι η αλγεβρική τιμή που αντιστοιχεί σε έναν αγωγό που έχει το σπιν σε σινγλετ κατάσταση. Αυτό το διάνυσμα βέβαια δεν αναπαριστά κάτι στον πραγματικό χώρο (π.χ. παράλληλο στην μαγνητική ροπή ενός ηλεκτρονίου) αφού το εσωτερικό γινόμενο πολλαπλασιάζεται με έναν πίνακα Pauli . Ανήκει στο χώρο των ψευδοσπιν και δεικνύει την πόλωση του σπιν σε έναν υπεραγωγό. Τελικά θα έχουμε:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = id\widehat{\sigma}_2, \widehat{\Delta}_{triplet} = i(d_x\widehat{\sigma}_1 + d_y\widehat{\sigma}_2 + d_z\widehat{\sigma}_3)\widehat{\sigma}_2 = -d_x\widehat{\sigma}_3 + id_y\widehat{\sigma}_0 + d_z\widehat{\sigma}_1$$

Έπειτα, αναλύουμε σε πραγματικό και φανταστικό μέρος:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re} - \widehat{\sigma}_2 d^{\Im} \tag{5.6}$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = -d_x^{\Re}\widehat{\sigma}_3 - id_x^{\Im}\widehat{\sigma}_3 + id_y^{\Re}\widehat{\sigma}_0 - d_y^{\Im}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Re}\widehat{\sigma}_1 + id_z^{\Im}\widehat{\sigma}_1 \tag{5.7}$$

Στη συνέχεια εισάγουμε τον δεύτερο σπίνορα για τη μετατόπιση στο χώρο των ορμών.

5.1.2 Μετασχηματισμός μετατόπισης ($k \to k + q$)

Η Χαμιλτονιανή εκφράζεται ως:

$$H^{inter}_{SC} = -\sum_k \left(\psi^{(1)\dagger}_{s,k,t}\widehat{D}^{(1\leftrightarrow2)}_k\psi^{(2)\dagger}_{s,-k,t} - \psi^{(2)}_{s,-k,t}\widehat{D}^{*(2\leftrightarrow1)}_{-k}\psi^{(1)}_{s,k,t}\right) \tag{5.8}$$

Ενώ ορίζονται οι πίνακες της παραπάνω μορφής και οι οποίοι περιγράφουν τη συμπεριφορά και τις συμμετρίες του συμπυκνώματος υπό μετατόπιση των ορμών των φερμιονίων:

$$\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{\Delta}_{s,k+Q,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\Delta}_{s,k+Q,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{D}_{s,-k}^{*(2\leftrightarrow 1)} = \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,-k,k}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\Delta}_{s,-k,k+Q}^{*(2\leftrightarrow 1)} \\ \widehat{\Delta}_{s,-(k+Q),k}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\Delta}_{s,-(k+Q),k+Q}^{*(2\leftrightarrow 1)} \end{pmatrix}$$

Εδώ εισάγουμε τον τελεστή μετατόπισης στον χώρο των ορμών $t_Q : k \to k+Q$ και χρησιμοποιώντας τον εκφράζουμε τον πίνακα $\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)}$ ως εξής:

$$\begin{aligned}\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} &= \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{\Delta}_{s,k+Q,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\Delta}_{s,k+Q,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ t_Q\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)} & t_Q\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Εκφράζοντάς τον ως συνδυασμό πινάκων Pauli :

$$\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\tau}_0\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + \widehat{\tau}_3\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)t-} + \widehat{\tau}_1\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + i\widehat{\tau}_2\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)t-} \quad (5.9)$$

Στη συνέχεια θα εισάγουμε τον τρίτο κατά σειρά σπίνορα:

5.1.3 Μετασχηματισμός Αντιστροφής ($k \to -k$)

Με αντίστοιχους σπίνορες

$$\psi_{s,k,I}^{(1)\dagger} = \begin{pmatrix} \psi_{s,k}^{(1)\dagger} \\ \psi_{s,-k}^{(1)} \end{pmatrix}, \psi_{s,k,I}^{(2)\dagger} = \begin{pmatrix} \psi_{s,k}^{(2)\dagger} \\ \psi_{s,-k}^{(2)} \end{pmatrix}$$

Η Χαμιλτονιανή παίρνει την παρακάτω μορφή:

$$H_{SC}^{inter} = -\sum_k \left(\psi_{s,k,I}^{(1)\dagger}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)}\psi_{s,k,I}^{(2)\dagger} - \psi_{s,k,I}^{(2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(2\leftrightarrow 1)}\psi_{s,k,I}^{(1)}\right) \quad (5.10)$$

Ενώ οι 8×8 πίνακες που εισάγονται εδώ αντιπροσωπεύουν το τρόπο συμπεριφοράς του διαζωνικού ζεύγους Cooper αν αντιστρέψουμε τις ορμές των ηλεκτρονίων του. Οι πίνακες, όπως και στις προηγούμενες ανάλογες περιπτώσεις δεν παρατίθενται πλήρη διαστάσει, αλλά σε μορφή βλοςκς. Έτσι κάθε στοιχείο του είναι ένας πίνακας, εν προκειμένω, 8×8 που ομοίως είναι σε δισδιάστατη μορφή block . Αυτό επιτρέπει στον αναγνώστη να παρακολουθεί τη λειτουργίες και τις συμμετρίες που εμφανίζονται στο συμπύκνωμα ξεχωριστά μεταξύ των μετασχηματισμών χάρη στο φορμαλισμό του Nambu . Εδώ λοιπόν ορίζονται οι πίνακες ως εξής:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\to 2)} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{D}_{s,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(2\to 1)} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}_{s,k}^{*(2\leftrightarrow 1)} \\ \widehat{D}_{s,-k}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Έπειτα, τα στοιχεία του πρώτου πίνακα (αφού ο έτερος είναι απλά ο συζυγής του πρώτου) αναλύονται σε περιττό κι άρτιο μέρος ως προς τον μετασχηματισμό αντιστροφής του χώρου των ορμών. Δηλαδή:

$$\begin{aligned} \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\to 2)} &= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{D}_{s,-k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ I\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+} + \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I-} \\ \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+} - \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I-} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Έτσι μπορούμε να εκφράσουμε και αυτόν τον πίνακα ως συνδυασμό των πινάκων Pauli , ως εξής:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\to 2)} = \widehat{\varrho}_1 \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+} + i\widehat{\varrho}_2 \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+} \tag{5.11}$$

όπου I τελεστής αντιστροφής του χώρου των ορμών. Ακολουθεί αμέσως μετά ο τέταρτος μετασχηματισμός.

5.1.4 Μετασχηματισμός Αλλαγής Δείκτη Ζώνης $(1 \to 2)$

. Όπως ξέρουμε το υπό μελέτη υλικό έχει δύο μπάντες, την 1 και τη 2.

Εισάγουμε σπίνορα μετάθεσης $\psi_{s,k,b}^{\dagger} = \begin{pmatrix} \psi_{k,s}^{(1)\dagger} \\ \psi_{k,s}^{(2)\dagger} \end{pmatrix}$ με s και k θεωρούμενα σταθερά. Έτσι η Χαμιλτονιανή γράφεται:

$$H_{SC}^{inter} = -\sum_k \Psi_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}^{\dagger} \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \Psi_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \tag{5.12}$$

όπου ο 16×16 πίνακας:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Εδώ σε αυτόν τον πίνακα - που είναι σε δισδιάστατη μορφή block για χάρη της απλότητας - βρίσκεται συγκεντρωμένη όλη η φυσική γύρω από το διαζωνικό ζεύγος Cooper . Δηλαδή συμπεριφορά και συμμετρίες κάτω από τους τέσσερις το πλήθος μετασχηματισμούς στους οποίους υπεβλήθη.

Συν τοις άλλοις απαιτείται η Χαμιλτονιανή να είναι ερμιτιανή για να είναι εφικτός ο υπολογισμός των ιδιοτιμή της. Άρα:

$$H_{SC}^{inter} = H_{SC}^{inter\dagger} \Rightarrow \widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{G}^{\dagger}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} \Rightarrow \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(2\leftrightarrow 1)} \\ \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\dagger(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\dagger(1\leftrightarrow 2)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Από τη παραπάνω ιδιότητα είναι φανερό ότι:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(2\leftrightarrow 1)} = -\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)} \tag{5.13}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τον τελεστή αλλαγής μπάντας $\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}$. Ο τελεστής αυτός μας μεταφέρει από τη μία στην άλλη μπάντα του FeSe και τον χρησιμοποιούμε όπως αμέσως παρακάτω.

Αν ισχύει $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)}$ τότε

$$\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}(-\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(2\leftrightarrow 1)})$$
$$= -\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)} = -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)} = -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)}$$

. Άρα ο πίνακας $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)}$ είναι περιττός ως προς τον μετασχηματισμό. Συνεπώς, χωρίζοντας σε πραγματικά και φανταστικά μέλη έχουμε:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}(-\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(1\leftrightarrow 2)}) & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-} \\ \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(1\leftrightarrow 2)b-} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Έτσι ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ μπορεί να εκφραστεί ως γραμμικός συνδυασμός των πινάκων Pauli κατά αυτόν εδώ τον τρόπον:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_1 Re\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-}\right\} - \widehat{\kappa}_2 Im\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-}\right\} \tag{5.14}$$

Αν ισχύει $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)}$ τότε

$$\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\rightarrow 2)} = \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}(-\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(2\leftrightarrow 1)})$$
$$= -\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)} = -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{\intercal(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)}$$

. Άρα ο πίνακας $\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)}$ είναι άρτιος ως προς την αλλαγή μπάντας. Έτσι μπορούμε να τον χωρίσουμε σε πραγματικά και φανταστικά μέλη χρησιμοποιώντας τη βάση των πινάκων Pauli . Έτσι λαμβάνουμε:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(2\leftrightarrow 1)} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)} \\ \mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}(-\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(1\leftrightarrow 2)}) & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} \widehat{\emptyset} & \widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+} \\ -\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{*(1\leftrightarrow 2)b+} & \widehat{\emptyset} \end{pmatrix}$$

Αυτό μας δίνει τον εξής γραμμικό συνδυασμό:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = i\widehat{\kappa}_2 Re\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+}\right\} + i\widehat{\kappa}_1 Im\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+}\right\} \tag{5.15}$$

5.2 Κατηγοριοποίηση Διαζωνικών Υπεραγωγών

Έχοντας πλέον καταλήξει στην τελική σπινοριακή μορφή του όρου για το διαζωνικό κανάλι Cooper :

$$H_{SC}^{inter} = -\sum_k \Psi_{s,k,b}^{\dagger}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}\Psi_{s,k,b} \tag{5.16}$$

θα αναλύσουμε τον πίνακα της τετραγωνικής μορφής (ο οποίος περιέχει όλη τη φυσική πληροφορία του συμπυκνώματος), διερευνώντας περιπτώσεις του άρτιου και περιττού μέρους του ως προς τους μετασχηματισμούς. Επίσης θα λάβουμε υπό όψιν τους βαθμούς ελευθερίας του σπιν, αναλύοντας τους πίνακες σε singlet και triplet μέρη. Όπως είδαμε στα προηγούμενα βήματα του φορμαλισμού, με κάθε εισαγωγή σπίνορα οι πίνακες των τετραγωνικών μορφών αυξάνουν διάσταση ως φυσικές δυνάμεις του δύο. Αυτό γίνεται διότι οι σπίνορες μας είναι πάντα δισδιάστατοι αφού τυποποιούν μετασχηματισμούς καταστάσεων. Έτσι η μία συντεταγμένη του σπίνορα δηλώνει την αρχική κατάσταση κι η δεύτερη την τελική, μετασχηματισμένη. Όπως θα έχει παρατηρήσει ο αναγνώστης, πριν την εισαγωγή νέου σπίνορα αναλύεται ο πίνακας που προέκυψε στη βάση Pauli τη βοηθεία των πινάκων Pauli . Όταν καταλήξουμε στην τελική μορφή της Χαμιλτονιανής, εισάγουμε όλες τις προηγούμενες αναλύσεις στον πίνακα της τετραγωνικής μορφής και με αυτόν τον τρόπο τον αναλύουμε επί της βάσης Pauli . Υπενθυμίζουμε ότι η βάση Pauli είναι ένα γινόμενο Κρονεςκερ των ομωνύμων πινάκων γενικής μορφής: $\widehat{\alpha}_i = \widehat{\kappa}_i \otimes \widehat{\varrho}_i \otimes \widehat{\tau}_i \otimes \widehat{\sigma}_i$. Οι συνιστώσες της εν λόγω ανάλυσης είναι οι παράμετροι τάξης, οι οποίες φέρουν ξεχωριστό φυσικό νόημα αφού περιγράφουν στο έπακρο τα φυσικά φαινόμενα του συμπυκνώματος. Η αυτή διαδικασία θα ακολουθηθεί αμέσως παρακάτω.

5.2.1 Καταστάσεις Αρτιες στην Ανταλλαγή Δείκτη Ζώνης

Ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ αναλύεται ως εξής:

$$\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = i\widehat{\kappa}_2 Re\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+}\right\} + i\widehat{\kappa}_1 Im\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b+}\right\}$$

και:

$$\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\to 2)} = \widehat{\varrho}_1 \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+} + i\widehat{\varrho}_2 \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I-}$$

άρα:

$$\begin{aligned}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} &= i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+}\right\} - \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-}\right\} \\ &+ i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+}\right\} - \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-}\right\}\end{aligned}$$

Όμως, προηγουμένως είχαμε καταλήξει στην εξής έκφραση:

$$\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\tau}_0 \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + \widehat{\tau}_3 \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\to 2)t-} + \widehat{\tau}_1 \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + i\widehat{\tau}_2 \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)t-}$$

Επομένως:

$$\begin{aligned}\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} &= i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}\right\} + i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}\right\} \\
&+ i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}\right\} - \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}\right\} \\
&- \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}\right\} - \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}\right\} \\
&- \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}\right\} - i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}\right\} \\
&+ i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}\right\} + i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}\right\} \\
&+ i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}\right\} - \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}\right\} \\
&- \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}\right\} - \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}\right\} \\
&- \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}\right\} - i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}\right\}\end{aligned}$$

Εισάγουμε και τους spin βαθμούς ελευθερίας:

$$\widehat{\Delta}_{singlet} = i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re} + i(i\widehat{\sigma}_2 d^{\Im})$$

$$\widehat{\Delta}_{triplet} = -d_x^{\Re}\widehat{\sigma}_3 - id_x^{\Im}\widehat{\sigma}_3 + id_y^{\Re}\widehat{\sigma}_0 - d_y^{\Im}\widehat{\sigma}_0 + d_z^{\Re}\widehat{\sigma}_1 + id_z^{\Im}\widehat{\sigma}_1$$

Έτσι λαμβάνουμε τις εξής πιθανές καταστάσεις των παραμέτρων τάξης. Πρώτα παραθέτουμε τις καταστάσεις για S=0 (singlet)και μετά τις triplet . Μια πρακτική που ακολουθείται συνήθως. Spin singlet καταστάσεις. Πρώτα παραθέτουμε τα πραγματικά μέρη των καταστάσεων:

$\Delta_{+}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}$	
$\Delta_{-}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$h_{+}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}$	
$h_{odd,-}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	

Ενώ, τα φανταστικά μέρη των καταστάσεων είναι τα εξής:

$\Delta_{+}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}$	
$\Delta_{-}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d_{k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$h_{+}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I+t+}$	
$h_{odd,-}^{\Im} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d_{k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	

Spin triplet καταστάσεις. Κι εδώ, πρώτα θα παρουσιαστούν τα πραγματικά μέρη των παραμέτρων τάξης:

$\Pi_{x}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\Pi_{y}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\Pi_{z}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\Delta_{+,tr_x}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Delta_{+,tr_y}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Delta_{+,tr_z}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Delta_{-,tr_x}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$\Delta_{-,tr_y}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$\Delta_{-,tr_z}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$\Pi_{odd,x}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Pi_{odd,y}^{\Re} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t+},$	
$\Pi_{odd,z}^{\Re} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	

Ενώ, τα φανταστικά μέρη των καταστάσεων είναι τα εξής:

$\Pi_{x}^{\Im} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\Pi_{y}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\Pi_{z}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I+t-}$	
$\Delta_{+,tr_x}^{\Im} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Delta_{+,tr_y}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Delta_{+,tr_z}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Delta_{-,tr_x}^{\Im} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$\Delta_{-,tr_y}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d_{x,k,-k}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$\Delta_{-,tr_z}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-k}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t-}$	
$\Pi_{odd,x}^{\Im} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d_{x,k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Pi_{odd,y}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d_{y,k,-(k+Q)}^{\Re(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	
$\Pi_{odd,z}^{\Im} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d_{z,k,-(k+Q)}^{\Im(1\leftrightarrow 2)b+I-t+}$	

Για λόγους απλότητας των εκφράσεων στις παραμέτρους τάξης έχουμε παραλείψει τον δείκτη $(1 \leftrightarrow 2)$ ο οποίος καταδεικνύει το γεγονός ότι, το υπεραγώγιμο συμπύκνωμα που αναλύεται δημιουργείται από ζεύγη ηλεκτρονίων (ζεύγη Cooper), στα οποία τα δύο ηλεκτρόνια ανήκουν σε διαφορετική μπάντα το καθένα. Με $\Delta_{\pm,tr_i}$συμβολίζονται σινγλετ και τριπλετ καταστάσεις μηδενικής ορμής ζεύγους Cooper αντιστοίχως, οι οποίες είναι είτε άρτιες, είτε περιττές ως προς τον μετασχηματισμό μετατόπισης στον χώρο των ορμών. Ζεύγη Cooper με πεπερασμένη, μη μηδενική ορμή ζεύγους ονομάζονται σταγγερεδ και συμβολίζονται εδώ με Π, h. Η ταξινόμηση των παραμέτρων έγινε με γνώμονα την αντισυμμετρικότητα των, συμμετεχόντων στο ζεύγος, ηλεκτρονίων η οποία επιβάλλει την ύπαρξη τριπλετ καταστάσεων για περιττές στην μετατόπιση καταστάσεις και άρτιες στην αντιστροφή.

Εδώ πρέπει να τονιστεί ότι όλες αυτές οι υπεραγώγιμες καταστάσεις δημιουργήθηκαν από ζεύγη Cooper των οποίων τα ηλεκτρόνια ανήκουν σε δύο ξεχωριστές ζώνες μέσα στο υλικό. Δηλαδή τα εντός μιας μπάντας συμπυκνώματα εκτός του ότι συνυπάρχουν μεταξύ των, συνυπάρχουν και με συμπυκνώματα ανάμεσα στις μπάντες. Έτσι εισάγονται στο σύστημα φαινόμενα που είναι συνδυασμοί πολλών μεταξύ των περιπτώσεων. Σε υλικά με τέσσερις μπάντες οι πιθανοί παράμετροι τάξης είναι τόσοι πολλοί που στην πραγματικότητα αντικατοπτρίζουν τις πολυπληθείς και διαφορετικές εφαρμογές αντίστοιχες προς τις πολυάριθμες ιδιότητες που παρουσιάζει το υλικό. Αυτό σημαίνει ότι, άμα τη καταλήξει της θεωρητικής και πειραματικής μελέτης ενός τέτοιου υλικού όπως το FeSe , οι πιθανές εφαρμογές του είναι φαινομενικά ανεξάντλητες.

5.2.2 Καταστάσεις Περιττές στην Ανταλλαγή Δείκτη Ζώνης

Ο πίνακας $\widehat{G}_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}}$ αναλύεται ως εξής:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_1 Re\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-}\right\} - \widehat{\kappa}_2 Im\left\{\widehat{\mathfrak{D}}_{k,I}^{(1\leftrightarrow 2)b-}\right\}$$

και:

$$\widehat{D}_{k,I}^{(1\rightarrow 2)} = \widehat{\varrho}_1 \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I+} + i\widehat{\varrho}_2 \widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)I-}$$

Επομένως:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+}\right\} + i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2 Re\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-}\right\}$$

$$\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+}\right\} - i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2 Im\left\{\widehat{D}_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-}\right\}$$

Λαμβάνοντας υπό όψιν την παρακάτω σχέση:

$$D_{s,k}^{(1\leftrightarrow 2)} = \widehat{\tau}_0 \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + \widehat{\tau}_3 \widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)t-} + \widehat{\tau}_1 \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)t+} + i\widehat{\tau}_2 \widehat{\Delta}_{s,k,-(k+Q)}^{(1\leftrightarrow 2)t-}$$

Έχουμε:

$$G_{k,\mathbf{b}^{(1\leftrightarrow 2)}} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}\right\} + \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}_{s,k,-k}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}\right\}$$

$$\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\}+i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}$$

$$i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{s,k,-k}\right\}+i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{s,k,-k}\right\}$$

$$i\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\}-\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Re\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}$$

$$\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{s,k,-k}\right\}-\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{s,k,-k}\right\}$$

$$\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\}-i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}$$

$$i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{s,k,-k}\right\}-i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{s,k,-k}\right\}$$

$$i\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{s,k,-(k+Q)}\right\}+\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2 Im\left\{\widehat{\Delta}^{(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{s,k,-(k+Q)}\right\}$$

Εδώ, τώρα, είναι το σημείο όπου εισάγουμε, κατά τα ηωθώτα, τους σπιν βαθμούς ελευθερίασ(σινγλετ, τριπλετ):

$$\Delta_{singlet}=i\widehat{\sigma}_2 d^{\Re}-\widehat{\sigma}_2 d^{\Im}$$

$$\Delta_{triplet}=-d^{\Re}_x\widehat{\sigma}_3-id^{\Im}_x\widehat{\sigma}_3+id^{\Re}_y\widehat{\sigma}_0-d^{\Im}_y\widehat{\sigma}_0+d^{\Re}_z\widehat{\sigma}_1+id^{\Im}_z\widehat{\sigma}_1$$

Σπιν σινγλετ καταστάσεις. Πρώτα, παραθέτουμε τα πραγματικά μέρη των καταστάσεων

$\Delta^{\Re}_{+}=-\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{-}=-\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{k,-k}$	
$h^{\Re}=-\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{k,-(k+Q)}$	
$h^{\Re}_{odd}=-\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{k,-(k+Q)}$	

Ενώ τα φανταστικά μέρη δίνονται:

$\Delta^{\Im}_{+}=\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_2 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-}=\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_2 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{k,-(k+Q)}$	
$h^{\Im}=\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_2 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{k,-(k+Q)}$	
$h^{\Im}_{odd}=\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_2 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I-t+}_{k,-(k+Q)}$	

Σπιν τριπλετ καταστάσεις. Κι εδώ, πρώτα παρουσιάζονται τα πραγματικά μέρη των παραμέτρων τάξης

$\Delta^{\Re}_{+,tr_x} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_y} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_z} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{z,k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_x} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_y} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{k,-k}$	
$\Delta^{\Re}_{+,tr_z} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{k,-k}$	
$\Pi^{\Re}_{x} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{y} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{y,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{z} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{z,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{odd,x} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{odd,y} = \widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{y,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Re}_{odd,z} = -\widehat{\kappa}_1\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{k,-(k+Q)}$	

Ενώ, τα φανταστικά μέρη των καταστάσεων δίνονται

$\Delta^{\Im}_{+,tr_x} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_3 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{+,tr_y} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_0 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{+,tr_z} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_0\widehat{\sigma}_1 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t+}_{z,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_x} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_3 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{x,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_y} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_0 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{y,k,-k}$	
$\Delta^{\Im}_{-,tr_z} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_3\widehat{\sigma}_1 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{z,k,-k}$	
$\Pi^{\Im}_{x} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_3 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{y} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_0 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{y,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{z} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_1\widehat{\tau}_1\widehat{\sigma}_1 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I+t-}_{z,k,-k}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,x} = -\widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_3 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{x,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,y} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_0 d^{\Re(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{y,k,-(k+Q)}$	
$\Pi^{\Im}_{odd,z} = \widehat{\kappa}_2\widehat{\varrho}_2\widehat{\tau}_2\widehat{\sigma}_1 d^{\Im(1\leftrightarrow 2)b-I-t-}_{z,k,-(k+Q)}$	

όπου ο συμβολισμός είναι ίδιος με τα προηγούμενα.

Βιβλιογραφία

[1] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**, 4172 (2000).

[2] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. 104, 216103 (2010)

[3] Α. Απέρης, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2012)

[4] Α. Απέρης, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2008)

[5] Μ. Γεωργίου, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2010)

[6] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[7] Π. Κοτετές, Διπλωματική Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2007)

[8] Γ. Λιβανάς, Μεταπτυχιακή Εργασία, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[9] Π. Κοτετές, Διδακτορική Διατριβή, ΣΕΜΦΕ ΕΜΠ (2011)

[10] Γ. Ρούμπος, Διπλωματική Εργασία, ΗΜΜΗΥ-ΣΕΜΦΕ, ΕΜΠ (2004)

[11] J. F. Annett, Superconductivity Superfluids and Condensates, Oxford University Press 2004

[12] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239, (1991).

Παράρτημα Α΄

Παράρτημα

Α΄.1 Παράρτημα Α: Φερμιονικές ιδιότητες δυναμικού και σχέση χασμάτων

Ισχύουν, φερμιονικώς, οι ιδιότητες του δυναμικού που μας οδηγούν στην εξαγωγή σχέσεων ανάμεσα στις παραμέτρους τάξης στη Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου. Χάριν παραδείγματος έχουμε:

$$\Delta^{(i)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1,s2} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}',s3,s4} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \langle c^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(i)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \tag{Α΄.1}$$

$$\Delta^{(i)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',s3,s4} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},s1,s2} V^{s1,s2,s3,s4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \langle c^{(i)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(i)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle \tag{Α΄.2}$$

Τις οποίες αναγνωρίζουμε ως ορισμούς παραμέτρων τάξεως στο ιντρα - βανδ πρόβλημα στο κανάλι Cooper . Ας υποθέσουμε τώρα ότι οι δείκτες της μπάντας έχουν μία όμοια μορφή με αυτούς του σπιν. Λαμβάνουμε λοιπόν:

$$\Delta^{(b1,b2)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1,s2} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}',s3,s4} V^{s1,s2,s3,s4,b1,b2,b3,b4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \langle c^{(b3)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3} c^{(b4)}_{\mathbf{k}',s4}\rangle \tag{Α΄.3}$$

$$\Delta^{(b3,b4)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',s3,s4} = -\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},s1,s2} V^{s1,s2,s3,s4,b1,b2,b3,b4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'} \langle c^{(b1)\dagger}_{\mathbf{k},s1} c^{(b2)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}\rangle \tag{Α΄.4}$$

Μετασχηματίζουμε έπειτα σύμφωνα με $\mathbf{k}(b1) \to -(\mathbf{k}+\mathbf{q})(b2)$. Σύμφωνα με τις φερμιονικές ιδιότητες του δυναμικού όπως εξηγήθηκαν στην αρχή του Κεφαλαίου 2 και πάντα με τις φερμιονικές ιδιότητες αντιμετάθεσης των τελεστών καταστροφής εφαρμόζουμε στην πρώτη παράμετρο τον εν λόγω μετασχηματισμό. Καταλήγουμε, ύστερα από μεταθέσεις των τελεστών και εφαρμογή του μιγαδικού συζυγούς[1], στη μορφή: [2]

$$\Delta^{(b3,b4)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',s3,s4} = -\Delta^{*(b2,b1)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{k},s1,s2} \tag{A'.5}$$

Αν πράξουμε ομοίως και για το αντίστοιχο συμπύκνωμα ηλεκτρονίου - οπής θα λάβουμε επίσης κάτι αντίστοιχο.

Α΄.2 Παράρτημα Β: Γενική μορφή Χαμιλτονιανής

Εδώ παρατίθεται μια μορφή αλληλεπίδρασης η οποία απαιτεί λιγότερους όρους για το κάθε συμπύκνωμα. Λαμβάνοντας υπό όψιν τα αναλυθέντα στο Παράρτημα Α΄ μπορούμε να γράψουμε την ολική Χαμιλτονιανή του συστήματος ως εξής:

$$H^{tot} = H_0 + H_{SC} + H_{DW} \tag{A'.6}$$

όπου H_0 ακριβώς όπως παρουσιάζεται στο τμήμα 2.5 του 2ου Κεφαλαίου και ακολούθως:

$$H_{SC} = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s1,s2}\sum_{b1,b2}\Delta^{(b1,b2)}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1,s2}c^{(b1)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(b2)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s1,s2}\sum_{b1,b2}\Delta^{*(b2,b1)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{k},s1,s2}c^{(b2)}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s1}c^{(b1)}_{\mathbf{k},s2} \tag{A'.7}$$

$$H_{DW} = -\sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s1,s2}\sum_{b1,b2}\Delta^{(b1,b2)}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},s1,s2}c^{(b1)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(b2)}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s2} - \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},s1,s2}\sum_{b1,b2}\Delta^{(b2,b1)}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},s1,s2}c^{(b2)\dagger}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s1}c^{(b1)}_{\mathbf{k},s2} \tag{A'.8}$$

Όπου με άθροιση επάνω στους δείκτες μπάντας $b1$, $b2$ λαμβάνουμε τις ιντερ - και ιντρα - βανδ περιπτώσεις, όπως τις παραθέσαμε στην αρχή του Κεφαλαίου 2. Έπειτα, η ανάλυση είναι αυτή που ακολουθείται στο ίδιο κεφάλαιο και καταλήγει στις παραμέτρους τάξης. Τώρα παραθέτουμε τις αρχικές Χαμιλτονιανές που δίνουν τις παραπάνω προσεγγίσεις μέσου πεδίου:

$$H_{SC} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4}\sum_{b1,b2,b3,b4} c^{(b1)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(b2)\dagger}_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s2}V^{s1,s2,s3,s4,b1,b2,b3,b4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}c^{(b3)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}c^{(b4)}_{\mathbf{k}',s4} \tag{A'.9}$$

Και για τα συμπυκνώματα ηλεκτρονίου - οπής:

$$H_{DW} = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}\sum_{s1,s2,s3,s4}\sum_{b1,b2,b3,b4} c^{(b1)\dagger}_{\mathbf{k},s1}c^{(b2)}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},s2}V^{s1,s3,s2,s4,b1,b3,b2,b4}_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}c^{(b3)}_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s3}c^{(b4)}_{\mathbf{k}',s4} \tag{A'.10}$$

[1] με το αντίστοιχο συζυγές και για τους τελεστές

[2] μην ξεχνούμε ότι οι αντιμετάθεση τώρα περιλαμβάνει εκτός των άλλων γνωστών και το μετασχηματισμό αλλαγής μπάντας