



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών
και Φυσικών Επιστημών

Μελέτη Ανομοιογενών
Ηλεκτρονικών Καταστάσεων σε
Υλικά Ισχυρά Συσχετισμένων
Φορέων

Διδακτορική Διατριβή

Αλέξανδρου Ν. Απέρη

Διπλωματούχου Σ.Ε.Μ.Φ.Ε. Ε.Μ.Π.

Επιβλέπων:

Γ. Βαρελογιάννης

Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάιος 2012

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών
Τομέας Φυσικής

Διδακτορική Διατριβή με τίτλο:

Μελέτη Ανομοιογενών Ηλεκτρονικών Καταστάσεων σε
Υλικά Ισχυρά Συσχετισμένων Φορέων

του

Αλέξανδρου Απέρη

Επταμελής Εξεταστική
Επιτροπή:

Τριμελής Συμβουλευτική
Επιτροπή:

1. Γ. Βαρελογιάννης, Αν. Καθηγητής
Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων)
2. Ε. Λιαροκάπης, Καθηγητής Ε.Μ.Π.
3. Κ. Παρασκευαΐδης, Αν. Καθηγητής
Ε.Μ.Π.

1. Γ. Βαρελογιάννης,
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π. (Επιβλέπων)
2. Ε. Λιαροκάπης,
Καθηγητής Ε.Μ.Π.
3. Κ. Παρασκευαΐδης,
Αν. Καθηγητής Ε.Μ.Π.
4. Γ. Παπαβασιλείου,
Διευθυντής ΙΕΥ Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. Δημόκριτος
5. Ε. Παπαντωνόπουλος,
Καθηγητής Ε.Μ.Π.
6. Μ. Πίσσας,
Ερευνητής Α' Ε.Κ.Ε.Φ.Ε. Δημόκριτος
7. Α. Τσέτσερης,
Επ. Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Μάιος 2012

*Στους γονείς μου Δήμητρα και Νίκο,
στην αδερφή μου Ελευθερία
και στη Βίκυ*

Ευχαριστίες

Καταρχήν θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντά μου Αναπληρωτή Καθηγητή Γιώργο Βαρελογιάννη για την καθοδήγησή του και για την εμπιστοσύνη που έδειξε στο πρόσωπό μου. Οι αμέτρητες ώρες τις οποίες αφιέρωσε με ειλικρινές ενδιαφέρον για την συζήτηση εννοιών γύρω από την φυσική καθώς και η ιδιαίτερα ανθρώπινη και ενθαρρυντική στάση του θεωρώ πως συνετέλεσαν στο να ολοκληρώσω την διατριβή μου με ενθουσιασμό και αγάπη για το αντικείμενο. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της συμβουλευτικής επιτροπής, τους Καθηγητή Ευθύμιο Λιαροκάπη και Αναπληρωτή Καθηγητή Κωνσταντίνο Παρασκευαΐδη για το ενδιαφέρον και την βοήθειά τους όλα αυτά τα χρόνια. Τέλος νιώθω την ανάγκη να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον Καθηγητή του εργαστηρίου Cavendish του Πανεπιστημίου Cambridge, Peter B. Littlewood, για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε και για την πολύ καλή συνεργασία μας.

Καταλυτικής σημασίας για την ποιότητα του ερευνητικού μου έργου αποτέλεσε η οικονομική ενίσχυση την οποία έλαβα μέσω αρχικά του Ευρωπαϊκού προγράμματος CoMePhS και στην συνέχεια μέσω της χρηματοδότησης από τον ΕΛΚΕ του ΕΜΠ ως υπότροφος του τομέα Φυσικής και ως συμμετέχων στο ΠΕΒΕ 2010.

Κατά την διάρκεια του διδακτορικού μου είχα την μεγάλη τύχη να γνωρίσω τους συναδέλφους και πολύ καλούς μου φίλους Παναγιώτη Κοτετέ, Πάρη Παρισιάδη, Θοδωρή Κολυβάρη και Μηνά Τσουκαλά. Τους ευχαριστώ θερμά για την φιλία τους, τις συζητήσεις μας και τον χρόνο που περάσαμε μαζί εντός και κυρίως εκτός του ΕΜΠ. Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Παναγιώτη Κοτετέ για την στήριξή του σε ορισμένες δύσκολες φάσεις αλλά και γιατί ήταν και είναι πάντα εκεί. Ακόμη, θέλω να ευχαριστήσω τους φίλους μου Θοδωρή και Άγγελο, οι οποίοι όλα αυτά τα χρόνια έδειξαν ειλικρινές ενδιαφέρον για την πορεία της διατριβής μου.

Θεωρώ πως η διατριβή αυτή δεν θα ήταν εφικτή δίχως την στήριξη από την οικογένειά μου. Νιώθω την ανάγκη να ευχαριστήσω από τα βάθη της ψυχής μου τους γονείς μου Νίκο και Δήμητρα οι οποίοι με μεγάλωσαν με όλη την αγάπη του κόσμου και φρόντισαν έτσι ώστε να αποκτήσω όσο το δυνατό πιο ολοκληρωμένη μόρφωση εντός αλλά και εκτός πανεπιστημίου. Το ίδιο ισχύει και για την αδερφή μου Ελευθερία, της οποίας οι συμβουλές και η πίστη της σε μένα ήταν και είναι πολύτιμες. Ακόμη, θέλω να ευχαριστήσω τον θείο μου Παναγιώτη για το ενδιαφέρον και την υποστήριξή του όλα αυτά τα χρόνια.

Κλείνοντας, θέλω να αναθερθώ στην σύντροφό μου Βίκυ, η οποία με την στήριξη και την δύναμη που μου εμπνέει, με κάνει πιο ολόκληρο άνθρωπο μέρα με την μέρα. Με την παρουσία σου, ομορφαίνεις την ζωή μου. Δεν υπάρχουν λόγια για να εκφράσω πόσο ευγνώμων σου είμαι για αυτό. Σε ευχαριστώ.

Περίληψη

Το πρώτο μέρος της παρούσας διατριβής πραγματεύεται νέα φαινόμενα επαγόμενα από την εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου σε συστήματα ισχυρά συσχετισμένων φορέων τα οποία παρουσιάζουν ανταγωνισμό και συνύπαρξη μεταξύ πολλών χβαντικών καταστάσεων τάξης. Εφαρμόζοντας μια γενικευμένη ενεργό σπινωριακή θεωρία μέσου-πεδίου, μελετήθηκαν λεπτομερώς δύο μοτίβα συνυπάρχοντων συμπυκνωμάτων. Το πρώτο περιλαμβάνει τις υπεραγωγίμες καταστάσεις τύπου $d_{x^2-y^2}$ singlet και π-triplet και την αντισιδηρομαγνητική κατάσταση γνωστή ως Κύμα Πυκνότητας Σπιν. Λεπτομερής μελέτη οδήγησε στην ανακάλυψη νέων υπεραγωγίμων μεταβάσεων επαγόμενων από το πεδίο οι οποίες φέρουν τα χαρακτηριστικά των FFLO φάσεων. Ωστόσο, κατά τις μεταβάσεις αυτές, το σύστημα μεταβαίνει σε μια φάση όπου και οι τρεις καταστάσεις τάξης συνυπάρχουν οδηγώντας έτσι στην εμφάνιση μιας νέας ανομοιογενούς σύνθετης κατάστασης της ύλης. Για το σύστημα αυτό υπολογίστηκαν και οι μαγνητικές του ιδιότητες όπως η μετατόπιση κατά Knight και ο ρυθμός εφησύχησης σπιν-πλέγματος NMR. Το δεύτερο μοτίβο που μελετήθηκε αποτελείται από τα συμπυκνώματα ηλεκτρονίου -οπής σύμμετρων Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν (ΚΠΦ/ΚΠΣ) και σιδηρομαγνητισμού ζώνης. Αποδεικνύεται ότι κάτω από γενικές συνθήκες, η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου σε έναν μονωτή τύπου ΚΠΦ, μπορεί να οδηγήσει σε μια σειρά μεταμαγνητικών μεταβάσεων «διπλού σχαλοπατιού» η οποία συνοδεύεται από την εμφάνιση του μοτίβου συνύπαρξης των εν λόγω συμπυκνωμάτων και χαρακτηρίζεται από ημιμεταλλική συμπεριφορά και, υπό ορισμένες συνθήκες, κολοσσιαία μαγνητοαντίσταση. Η μελέτη των συμπυκνωμάτων αυτών συμπληρώνεται από υπολογισμούς της στατικής και οπτικής μαγνητοαντίστασης.

Στο δεύτερο μέρος της διατριβής ασχοληθήκαμε με την φυσική των νεοανακαλυφθέντων υπεραγωγών πνικτιδίων του σιδήρου. Μελετήσαμε συστηματικά το υπεραγωγίμο χάσμα των νοθευμένων με ηλεκτρόνια ή με σπές υλικών, μέσω ρεαλιστικών πολυζωνικών αριθμητικών υπολογισμών από την σκοπιά μιας φωνονικής θεωρίας τύπου smI-q. Αποδεικνύεται, για πρώτη φορά, ότι η υπεραγωγιμότητα συμμετρίας s_{\pm} δίχως κομβικά σημεία μπορεί να προκύψει μέσω ενός φωνονικού μηχανισμού στα υλικά αυτά. Επιπλέον, δείχνουμε ότι η συγκεκριμένη θεωρία μπορεί να εξηγήσει ταυτόχρονα τα αντικρουόμενα ιστορικά φαινόμενα τα οποία έχουν αναφερθεί σε αρκετά από τα πνικτίδια. Ανάλογα με τη νόθευση, οι λύσεις που βρίσκουμε συμπεριλαμβάνουν και άλλες μη συμβατικές συμμετρίες. Η πιο απροσδόκητη είναι ίσως η εύρεση p σπιν triplet συμμετρίας, η οποία φαίνεται να παρατηρήθηκε στο LiFeAs. Το τελευταίο μέρος της διατριβής επικεντρώνεται στο υλικό αυτό. Συνολικά, τα αποτελέσματά μας δείχνουν ότι μια πληθώρα ανεξήγητων παρατηρήσεων στα πνικτίδια μπορεί να ερμηνευτεί μέσω μιας φωνονικής θεωρίας, ενισχύοντας έτσι την άποψη ότι ο ρόλος των φωνονίων στην υπεραγωγιμότητα των υλικών αυτών είναι ιδιαίτερα σημαντικός.

Abstract

The first part of this thesis focuses on the study of novel magnetic field induced phenomena in strongly correlated electron systems which exhibit competition and/or coexistence of multiple quantum states of matter. These states are linked together by symmetry and under given circumstances may appear all together simultaneously, thus forming a pattern of coexisting condensates. Two of these patterns were studied thoroughly via a generalized effective, mean-field scheme and utilizing a spinor formalism. The first pattern consists of two superconducting states known as $d_{x^2-y^2}$ singlet and π -triplet, and the itinerant antiferromagnetic state known as Spin Density Wave (SDW). Detailed studies led to the discovery of novel field-induced superconducting transitions which exhibit the characteristics of FFLO phases. However, throughout these transitions, the system enters a phase where all three ordered states coexist, thus forming a new inhomogeneous complex state of matter. Concerning this system, we report here for the first time self-consistent calculations of experimentally measurable quantities such as the NMR Knight shift and the spin-lattice relaxation rate. The second pattern which was studied, consists of the particle-hole condensates of commensurate Charge/Spin Density Waves (CDW/SDW) and itinerant ferromagnetism. It is shown that under general conditions, the application of a magnetic field to a CDW insulator, can lead to a cascade of double-step metamagnetic transitions which is accompanied by the emergence of the coexistence pattern formed by the aforementioned condensates. These transitions can exhibit semi-metallic behavior and, under certain circumstances, even colossal magnetoresistance. The study of these condensates is supplemented with original calculations of the static and optical magnetoconductivity.

The second part of this thesis focuses on the physics of the newly discovered iron pnictide superconductors. We studied systematically the symmetry of the superconducting gap of the electron and hole doped compounds, by employing realistic multiband numerical calculations and a small-q phonon theory. We demonstrate, for the first time, that the nodeless superconducting symmetry of the s_{\pm} type can emerge via a phonon mechanism in these materials. Moreover, it is shown that our theory may provide a plausible explanation for the contradicting isotope effect observations that have been reported for these compounds. Depending on the doping level, our solutions include several unconventional symmetries. Perhaps our most unexpected finding is the observation of a p -wave triplet symmetry which has recently been suggested to formulate in LiFeAs. The last part of this thesis focuses especially on this material. In conclusion, the results obtained in this part of the present thesis, indicate that a large number of controversial observations on the pnictides may be well explained through a phonon based theory, thus emphasizing the importance of the role of phonons to the superconducting pairing of these materials.

Πρόλογος

Σημαντικό ρόλο στις ηλεκτρονιακές ιδιότητες μιας πλειάδας υλικών, διαδραματίζει ο ανταγωνισμός μεταξύ φαινομένων απεντοπισμού των φορέων λόγω της κινητικής τους ενέργειας και εντοπισμού τους λόγω της αλληλεπίδρασης Coulomb. Αν θεωρήσουμε ότι t είναι η ενέργεια μεταπήδησης ενός ηλεκτρονίου σε μια γειτονική του θέση και U το δυναμικό Coulomb, στο όριο όπου $t \gg U$, τα ηλεκτρόνια στο στερεό συμπεριφέρονται σχεδόν σαν ελεύθερα. Καθώς το δυναμικό Coulomb τείνει να γίνει ίδιας τάξης με την κινητική ενέργεια, οι αλληλεπιδράσεις αρχίζουν να παίζουν σημαντικό ρόλο οδηγώντας συχνά σε δραματικές αλλαγές στις ιδιότητες του υλικού· βρισκόμαστε στην περιοχή των *ισχυρών συσχετίσεων*. Τα υλικά τα οποία πληρούν τις προϋποθέσεις αυτές ονομάζονται και «συστήματα ισχυρά συσχετισμένων φορέων». Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι τα υλικά που αποτελούνται από κράματα μεταβατικών μετάλλων ή οξειδίων αυτών και διαθέτουν ημικατελημμένα d ή f τροχιακά, ο υβριδισμός των οποίων οδηγεί σε στενές ενεργειακές ζώνες με αποτέλεσμα $t \sim U$.

Η περιοχή αυτή παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον δεδομένου ότι απεντοπισμένοι φορείς και ισχυρές συσχετίσεις συνυπάρχουν στο υλικό. Συχνά, η εικόνα αυτή είναι υπεραπλουστευτική για πληθώρα υλικών των οποίων η περιγραφή εμφανίζει αυξημένη πολυπλοκότητα εξαιτίας επιπρόσθετων συσχετίσεων λόγω π.χ. της χημικής νόθευσης, πολλαπλών τροχιακών και της σύζευξης με τους βαθμούς ελευθερίας του πλέγματος ή/και του σπιν.

Ο συνδυασμός των αλληλεπιδράσεων αυτών οδηγεί σε έναν πλούτο συναρπαστικών φαινομένων και ιδιοτήτων με σημαντικές τεχνολογικές εφαρμογές όπως για παράδειγμα η υπεραγωγιμότητα υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας, η ημιμεταλλική συμπεριφορά και η κολοσσιαία μαγνητοαντίσταση. Σημαντικό ρόλο στην φυσική και στις ιδιότητες των υλικών αυτών θεωρείται πως διαδραματίζουν οι διάφορες χβαντικές καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας οι οποίες συναντώνται συχνά στα διαγράμματα φάσης τους. Σε αυτές συγκαταλέγονται καταστάσεις μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας, και διαφόρων ειδών χωρικά διαμορφωμένων φάσεων, εκ των οποίων τα απλούστερα παραδείγματα είναι τα κύματα πυκνότητας φορτίου και σπιν.

Χαρακτηριστικό είναι το γεγονός ότι οι καταστάσεις αυτές συχνά συνυπάρχουν ή αν-

ταγωνίζονται δεδομένου και των εξωγενών συνθηκών όπως είναι π.χ. η θερμοκρασία, η νόθευση, η πίεση ή η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου. Ως εκ τούτου, μεγάλη έμφαση έχει δοθεί στην μελέτη της επίδρασης των εξωγενών αυτών ρυθμιστικών παραμέτρων στις διάφορες συμπυκνωμένες φάσεις. Προς αυτή την κατεύθυνση, τα τελευταία χρόνια, πειράματα παρουσία ισχυρών μαγνητικών πεδίων έχουν φέρει στο φως νέα συναρπαστικά φαινόμενα, όπως την παρατήρηση ανομοιογενούς υπεραγωγιμότητας επαγόμενης από το πεδίο, κυμάτων πυκνότητας φορτίου/σπιν επαγόμενα από το πεδίο καθώς και μεταμαγνητικών μεταβάσεων «διπλού σκαλοπατιού» σε μια ποικιλία υλικών τα οποία φαινομενικά είναι ασύνδετα μεταξύ τους.

Το πρώτο μέρος της παρούσας διατριβής, πραγματεύεται ακριβώς την φυσική πίσω από τα φαινόμενα αυτά. Το κεντρικό ερώτημα το οποίο τίθεται είναι το εξής: μπορούμε να απομονώσουμε κάποια καθολικά βασικά χαρακτηριστικά τα οποία βρίσκονται πίσω από την παρόμοια φαινομενολογία διαφορετικών μεταξύ τους υλικών και αν ναι, τότε ποια είναι αυτά και ποιοι είναι οι απαραίτητοι βαθμοί ελευθερίας που πρέπει να συμπεριληφθούν σε μια Χαμιλτονιανή περιγραφή τους; Η απάντηση που επιχειρούμε να δώσουμε στο ερώτημα αυτό, πηγάζει από τον ανταγωνισμό και την συνύπαρξη μεταξύ διαφορετικών συμπυκνωμένων καταστάσεων όπως παρατηρείται στα υλικά αυτά. Κεντρικό ρόλο στην θεωρία μας διαδραματίζει η έννοια του «μοτίβου από συνυπάρχοντα συμπυκνώματα». Όπως θα δούμε, ένα τέτοιο μοτίβο συνιστούν συγκεκριμένες χβαντικές καταστάσεις τάξης οι οποίες συνδέονται μεταξύ τους λόγω συμμετρίας. Κατά συνέπεια, κάτω από την επίδραση συγκεκριμένων εξωτερικών παραμέτρων, όπως π.χ. η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου, το μοτίβο αυτό μπορεί να κάνει την εμφάνισή του ως μια νέα επαγόμενη ανομοιογενής φάση κατά την οποία παραπάνω από μία καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας συνυπάρχουν σχηματίζοντας πολύπλοκες δομές. Οι μεταβάσεις αυτές μπορούν να οδηγήσουν σε νέα φαινόμενα τα οποία δεν μπορούν να παρατηρηθούν θεωρητικά αν δεν συμπεριληφθούν στην αρχική Χαμιλτονιανή του συστήματος όλοι οι βαθμοί ελευθερίας/όλες οι πιθανές συμπυκνωμένες φάσεις που κλείνουν το μοτίβο.

Μελετήσαμε λεπτομερώς δυο μοτίβα συνύπαρξης, τα οποία θεωρούμε ιδιαίτερου ενδιαφέροντος αλλά και πιο συνήθη ανάμεσα στα συστήματα ισχυρά συσχετισμένων φορέων: το πρώτο βρίσκει εφαρμογή σε όλους τους αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς και αποτελείται από τα υπεραγωγία μη συμβατικά συμπυκνώματα $d_{x^2-y^2}$ σπιν singlet και π-σπιν triplet καθώς και από το συμπύκνωμα ηλεκτρονίου-οπής γνωστό ως Κύμα Πυκνότητας Σπιν. Το δεύτερο μοτίβο αποτελείται από την συνύπαρξη Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν και απεντοπισμένου σιδηρομαγνητισμού (ή σιδηρομαγνητισμού ζώνης) και μπορεί να εμφανιστεί σε μονωτικά υλικά τύπου κύματος πυκνότητας φορτίου παρουσία ισχυρών πεδίων ή/και σιδηρομαγνητισμού. Την επιχειρηματολογία μας, στηρίζουμε με εκτενείς αναλυτικούς και αριθμητικούς υπολογισμούς τόσο των διαγραμμάτων φάσης των συστημάτων αυτών όσο και των πειραματικών υπογραφών που επιφέρει η επαγωγή ενός μοτίβου συνύπαρξης. Ως

επιβεβαίωση της πρωτοτυπίας και της αποτελεσματικότητας της μελέτης που παρουσιάζεται εδώ, αξίζει να αναφέρουμε ότι κατά την διάρκεια της εκπόνησης της παρούσας διατριβής, μία από τις κύριες προβλέψεις μας που αφορά στην παρατηρούμενη υπεραγωγίμη φάση χαμηλής θερμοκρασίας και υψηλών μαγνητικών πεδίων στο υλικό CeCoIn_5 επιβεβαιώθηκε πειραματικά, ανοίγοντας έτσι μια νέα κατεύθυνση στην μέχρι τώρα θεωρητική προσέγγιση για την κατανόηση παρόμοιων φαινομένων.

Λίγους μήνες μετά την έναρξη της εκπόνησης της παρούσας διατριβής, συνέβη μια ανακάλυψη η οποία χαιρετίστηκε με μεγάλο ενθουσιασμό από την επιστημονική κοινότητα. Αυτή ήταν η παρατήρηση υπεραγωγιμότητας σε θερμοκρασίες έως και τα 56 K στα σύνθετα πνικτιδίων του σιδήρου. Η τιμή αυτή είναι η μεγαλύτερη που έχει μετρηθεί ποτέ σε ενώσεις που δεν βασίζονται σε οξειδία του χαλκού. Κατά συνέπεια, τα πνικτιδία αναγνωρίστηκαν αμέσως ως μία δεύτερη οικογένεια υλικών, η μελέτη της οποίας μπορεί να συνεισφέρει στην αναζήτηση του «αγίου δισκοπότηρου» της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης, δηλαδή στην κατανόηση του μποζονικού μηχανισμού που οδηγεί στην υπεραγωγιμότητα «υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας». Η αποκρυπτογράφηση του φαινομένου αυτού μπορεί να επιτρέψει στην σύνθεση νέων υλικών τα οποία να παρουσιάζουν υπεραγωγιμότητα σε θερμοκρασία δωματίου, με πρωτοφανείς εφαρμογές για την τεχνολογία του μέλλοντος.

Συνήθως, σημαντική πληροφορία για τον εν λόγω μηχανισμό παρέχει ο προσδιορισμός της συμμετρίας του υπεραγωγίμου χάσματος. Για παράδειγμα, γνωρίζουμε ότι στους συμβατικούς υπεραγωγούς συμμετρίας s ο μηχανισμός σύζευξης είναι φωνονικός, ενώ για τους μη-συμβατικούς υπεραγωγούς, έχει επικρατήσει η εντύπωση ότι για τον σχηματισμό ζευγών Cooper ευθύνονται αποκλειστικά οι διακυμάνσεις του ηλεκτρονιακού σπιν. Στην περίπτωση των πνικτιδίων, ο κύριος όγκος των πειραματικών δεδομένων μέχρι στιγμής υποδηλώνει ότι το υπεραγωγίμο χάσμα είναι μη συμβατικό, κάτι που ερμηνεύεται ως ένδειξη μη-φωνονικής υπεραγωγιμότητας. Ωστόσο, η παρατήρηση ισχυρών ισοτοπικών φαινομένων αποδεικνύει την εμπλοκή των φωνονίων. Η συμμετρία του χάσματος δεν είναι καθολική αλλά φαίνεται να διαφέρει ανάλογα το σύνθετο πνικτιδίου ή ακόμα και με το ποσοστό νόθευσης με ηλεκτρόνια ή οπές στο ίδιο υλικό. Πρόσφατα δημοσιεύτηκαν πειράματα τα οποία υποστηρίζουν ότι ένα υλικό της οικογένειας αυτής, το οποίο παρουσιάζει ισχυρή σύζευξη ηλεκτρονίου-φωνονίου, εμφανίζει εξωτική υπεραγωγιμότητα με σπιν triplet διάταξη.

Τα παραπάνω άκρως ενδιαφέροντα πειραματικά αποτελέσματα είχαν ως αποτέλεσμα κατά την διάρκεια της εκπόνησης της παρούσας διατριβής να στρέψουμε το ενδιαφέρον μας στην μελέτη της φυσικής των νέων αυτών υπεραγωγών. Η μελέτη μας επικεντρώθηκε γύρω από την συμμετρία του υπεραγωγίμου χάσματος όπου και εξετάσαμε την πιθανή εμπλοκή των φωνονίων στον υπεραγωγίμο μηχανισμό και τα αποτελέσματά της σε σχέση με τα σχετικά πειράματα. Οι ακριβείς υπολογισμοί μας οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η παρατήρηση μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας και ισοτοπικού φαινομένου μπορούν να εξηγηθούν μέσω της

δράσης ενός small- q φωνονικού μηχανισμού. Τέλος, ο ίδιος μηχανισμός μπορεί να ευθύνεται και για την εμφάνιση της σπιν-triplet φωνονικής υπεραγωγιμότητας στα υλικά αυτά. Ένα μεγάλο μέρος των αποτελεσμάτων που προέκυψαν κατά την μελέτη μας παρουσιάζεται στο δεύτερο μέρος της διατριβής.

Επιγραμματικά, η διατριβή ακολουθεί την εξής δομή:

Στο Κεφάλαιο 1 επιχειρούμε μια όσο το δυνατόν πιο συμπαγή και ολοκληρωμένη παρουσίαση και επεξήγηση βασικών εννοιών οι οποίες θεωρούμε ότι είναι απαραίτητες για την ολοκληρωμένη κατανόηση των αποτελεσμάτων της υπόλοιπης διατριβής.

Στα Κεφάλαια 2 και 3 αναπτύσσουμε το κατάλληλο θεωρητικό πλαίσιο για την μελέτη συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων φορέων στα οποία συνυπάρχουν ή ανταγωνίζονται περισσότερες από μια φάσεις συμπυκνωμένης ύλης. Συγκεκριμένα, στο Κεφάλαιο 2, ξεκινώντας από τις πιο γενικές εκφράσεις για την ενεργό αλληλεπίδραση στο κανάλι ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής, κατασκευάζουμε την κατάλληλη σπινοριακή θεωρία για την ταυτόχρονη περιγραφή πολλών συμπυκνωμάτων στο επίπεδο της προσέγγισης μέσου-πεδίου. Παράλληλα με την κατασκευή του θεωρητικού μοντέλου, η συζήτηση που πλαισιώνει το κεφάλαιο αυτό θεωρούμε πως βοηθά τον αναγνώστη να αποκτήσει μια βαθύτερη εξοικείωση όχι μόνο με τα συμπυκνώματα τα οποία μελετάμε εδώ, αλλά και με τις υπόλοιπες πιθανές χβαντικές καταστάσεις τάξης που προβλέπονται για τα συστήματα ισχυρά συσχετισμένων φορέων.

Στο Κεφάλαιο 3 επαναδιατυπώνουμε έννοιες και τεχνικές της χβαντικής θεωρίας πεδίου στην γλώσσα του σπινοριακού φορμαλισμού, ορίζοντας την κατάλληλη συνάρτηση Green-πίνακα για την μελέτη συστημάτων συνύπαρξης πολλών παραμέτρων τάξης. Χρησιμοποιώντας την ποσότητα αυτή, αναπτύσσουμε τις πρωτότυπες μεθόδους μέσω των οποίων εξάγαμε τα αποτελέσματα της παρούσας διατριβής.

Στο Κεφάλαιο 4 μελετάμε την επίδραση ενός μαγνητικού πεδίου Zeeman στο μοτίβο συνυπάρχοντων συμπυκνωμάτων: $dSC + \pi SC + SDW$, ενώ εισάγουμε και τον κατάλληλο φορμαλισμό για τον υπολογισμό των μαγνητικών ιδιοτήτων ενός συστήματος με πολλά συνυπάρχοντα συμπυκνώματα. Στην συνέχεια, υπολογίζουμε την μαγνητική επιδεκτικότητα και τον ρυθμό επανάπαυσης σπιν-πλέγματος για το συγκεκριμένο μοτίβο. Τα διαγράμματα φάσης που προκύπτουν καθώς και οι μαγνητικές ιδιότητες του συστήματος υπολογίζονται αυτοσυνεπώς.

Στο Κεφάλαιο 5 μελετάμε την επίδραση ενός μαγνητικού πεδίου Zeeman στο μοτίβο συνυπάρχοντων συμπυκνωμάτων: $CDW + SDW + FM$, ενώ εισάγουμε και τον κατάλληλο φορμαλισμό για τον υπολογισμό της στατικής και της οπτικής αγωγιμότητας του συστήματος αυτού. Όλα τα αποτελέσματα και αυτού του κεφαλαίου υπολογίζονται αυτοσυνεπώς.

Στο Κεφάλαιο 6 εξετάζουμε την συμμετρία του υπεραγώγιμου χάσματος των πνικτιδίων μέσω της αυτοσυνεπούς αριθμητικής επίλυσης ενός ρεαλιστικού πολυζωνικού μοντέλου

στην περίπτωση όπου η αλληλεπίδραση μεταξύ των ηλεκτρονίων είναι φωνονικής φύσεως τύπου small-q. Στους υπολογισμούς λαμβάνεται υπόψη, η πλήρης ανισοτροπία του χάσματος καθώς και η επίδραση της νόθευσης. Για την ακριβή περιγραφή της επιφάνειας Fermi των υλικών αυτών εισάγουμε ένα μοντέλο ισχυρού δεσμού τεσσάρων ενεργειακών ζωνών. Χρησιμοποιώντας τα αυτοσυνεπή αποτελέσματά μας για το υπεραγωγίμο χάσμα, υπολογίζουμε αριθμητικά και τον ισοτοπικό συντελεστή συναρτήσεως της νόθευσης για τα υλικά αυτά. Τέλος, επικεντρωνόμαστε στην πιθανότητα εύρεσης σπιν triplet υπεραγωγιμότητας στο LiFeAs.

Στο Κεφάλαιο 7 συνοψίζουμε τα κυριότερα αποτελέσματά μας.

Η διατριβή συμπληρώνεται με τα απαραίτητα παραρτήματα στα οποία παρουσιάζουμε αναλυτικά πράξεις και τεχνικές οι οποίες κρίναμε ότι θα διέκοπταν την φυσική ροή της συζήτησης που αναπτύχθηκε στο κυρίως κείμενο.

Περιεχόμενα

Πρόλογος	vii
1 Εισαγωγικές έννοιες	1
1.1 Η θεωρία των BCS	1
1.2 Μη συμβατική υπεραγωγιμότητα	4
1.3 Κύματα Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν	5
1.4 Υπεραγωγός σε υψηλά μαγνητικά πεδία	8
1.5 Το όριο Pauli	9
1.6 Πέρα από το H_p : Υπεραγωγιμότητα των FFLO	10
1.7 Υπεραγωγία Κύματα Πυκνότητας Ζεύγους	13
2 Γενικευμένη θεωρία BCS για το πρόβλημα συνύπαρξης	15
2.1 Υπεραγωγία συμπυκνώματα	15
2.1.1 Σπινωριακός Φορμαλισμός κατά Nambu	18
2.1.2 Κατηγοριοποίηση υπεραγωγίων συμπυκνωμάτων	22
2.2 Συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής	25
2.2.1 Σπινωριακός φορμαλισμός	25
2.2.2 Κατηγοριοποίηση συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-οπής	28
2.3 Σπινωριακή μορφή της κανονικής κατάστασης	30
3 Συναρτήσεις Green και παρατηρήσιμα μεγέθη	31
3.1 Η συνάρτηση Green σε μορφή πίνακα	31
3.2 Γενικευμένος μετασχηματισμός Bogoliubov	33
3.3 Μέθοδος επίλυσης συζευγμένων εξισώσεων αυτοσυνέπειας	34
3.4 Θερμοδυναμικές ιδιότητες	35
3.5 Η φασματική αναπαράσταση	36
3.6 Γενικευμένη επιδεκτικότητα	37

4	Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντι-σιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς	41
4.1	Εισαγωγικά	41
4.1.1	Μοτίβο από συνυπάρχοντα συμπυκνώματα επαγόμενο από το μαγνητικό πεδίο στην υπεραγώγιμη φάση του CeCoIn_5	43
4.2	Θεωρητικό μοντέλο	45
4.2.1	Εξισώσεις αυτοσυνέπειας	46
4.2.2	Αριθμητική διερεύνηση - νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το πεδίο σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς	51
4.3	Μαγνητικές ιδιότητες	53
4.3.1	Μαγνητική επιδεκτικότητα	53
4.3.2	Πυρηνικός Μαγνητικός Συντονισμός (NMR)	55
4.3.3	Μετατόπιση κατά Knight	57
4.3.4	Ρυθμός επανάπαυσης σπιν-πλέγματος	58
4.4	Μεταβάσεις τύπου I	59
4.5	Μεταβάσεις τύπου II	66
5	Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το μαγνητικό πεδίο σε μονωτές τύπου CDW	69
5.1	Θεωρητικό μοντέλο	70
5.1.1	Αναγωγή σε νέα βάση και εξισώσεις αυτοσυνέπειας	71
5.2	Διαγράμματα φάσης	76
5.2.1	Μεταμαγνητικές μεταβάσεις - Επαγόμενα Κύματα πυκνότητας σπιν	77
5.3	Υπολογισμοί μαγνητοαντίστασης	80
5.3.1	Στατική μαγνητοαγωγιμότητα	83
5.3.2	Οπτική μαγνητοαγωγιμότητα	84
5.3.3	Τήξη ενός ισχυρού μονωτή από ένα πολύ μικρό μαγνητικό πεδίο	84
5.3.4	Πειραματικές υπογραφές της επαγόμενης φάσης συνύπαρξης	86
5.4	Κύματα Πυκνότητας τύπου FFLO	88
5.4.1	Μελέτη φαινομένων ατελούς συναρμογής	88
5.4.2	Επαναπροσδιορισμένο διάγραμμα φάσης	90
6	Υπεραγωγιμότητα στα πνικτίδια του σιδήρου	93
6.1	Μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα από φωνόνια τύπου «small-q»	95
6.1.1	Θεωρητικό μοντέλο	97
6.1.2	Αλληλεπίδραση «small-q»	97
6.1.3	Πολυζωνικό Μοντέλο Ισχυρού Δεσμού	99
6.1.4	Αριθμητικά αποτελέσματα	101

6.2	Ισοτοπικό φαινόμενο	108
6.2.1	Το μοντέλο των AM για πολυζωνικούς μη-συμβατικούς υπεραγωγούς	109
6.2.2	Υπολογισμός του ισοτοπικού συντελεστή	112
6.3	Σπιν triplet υπεραγωγιμότητα στον φωνονικό υπεραγωγό LiFeAs	115
6.3.1	Ιδιότητες και μορφολογία της επιφάνειας Fermi	116
6.3.2	Υπολογισμοί για το υπεραγωγίμο χάσμα	117
7	Συμπεράσματα	121
A'	Η ελεύθερη ενέργεια στον φορμαλισμό Nambu	125
A'.1	Το θεώρημα Feynman-Hellman	125
A'.2	Ένα συμπύκνωμα	127
A'.3	Πολλά συμπυκνώματα: το πρόβλημα συνύπαρξης	129
A'.4	Έκφραση για πολυζωνικό σύστημα	130
B'	Φασματική αναπαράσταση της γενικευμένης επιδεκτικότητας	133
B'.1	Τελεστής ρεύματος	135
B'.2	Θεώρημα Wick σε σπινωριακό φορμαλισμό	135
B'.3	Στατική μαγνητική επιδεκτικότητα του αντισιδηρομαγνητικού υπεραγωγού	137
Γ'	Ενδιάμεσοι υπολογισμοί	139
Γ'.1	Εξισώσεις κίνησης για την πυκνότητα φορτίου	139
Γ'.2	Μετασχηματισμός Bogoliubov για το σύστημα CDW+SDW+FM	141
	Αναφορές	143

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγικές έννοιες

1.1 Η θεωρία των BCS

Είναι σκόπιμο για την συζήτηση που θα επακολουθήσει να κάνουμε μια σύντομη αναδρομή στην μικροσκοπική θεωρία των Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) για την συμβατική υπεραγωγιμότητα [1]. Ο σχηματισμός των ζευγών Cooper, τα οποία βρίσκονται στην καρδιά της θεωρίας αυτής, προϋποθέτει την παρουσία μιας ελκτικής αλληλεπίδρασης μεταξύ των ηλεκτρονίων σε ένα υλικό. Για τους συμβατικούς υπεραγωγούς, αυτή παρέχεται μέσω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φωνονίου, η οποία είναι γενικά χρονοεξαρτώμενη. Η ομορφιά της θεωρίας των BCS έγκειται στο γεγονός ότι για την περιγραφή μιας μεγάλης ομάδας συμβατικών υπεραγωγών αρκεί, όπως έδειξαν, μια απλή Χαμιλτονιανή η οποία περιγράφει αλληλεπιδράσεις που είναι ιστροπικές και χρονοανεξάρτητες. Στην γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης αυτή δίνεται ως:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} + V \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}',\downarrow} c_{\mathbf{k}',\uparrow} \quad (1.1)$$

όπου $\xi_{\mathbf{k}}$ είναι η κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην δομή των ενεργειακών ζωνών του συστήματος, $c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger (c_{\mathbf{k},\sigma})$ είναι ο τελεστής δημιουργίας (καταστροφής) ενός ηλεκτρονίου με ορμή \mathbf{k} και spin σ και $V = 0$ για $|\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{k}'}| > \omega_D, V < 0$ όπου ω_D η συχνότητα Debye.

Η επίλυση της Εξ.(1.1) συνιστά ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων. Στην αρχική τους θεώρηση, οι BCS εισήγαγαν την διαταραχτική κυματοσυνάρτηση[2]:

$$|\Phi\rangle_{BCS} = \prod_{\mathbf{k}} \left\{ u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger \right\} |0\rangle \quad (1.2)$$

($u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$) η οποία αποτελεί μια σύμφωνη κατάσταση ζευγών Cooper και οδηγεί σε χαμηλότερη θεμελιώδη ενέργεια από αυτήν του ελεύθερου αερίου Fermi. Μια εναλλακτική

προσέγγιση, μέσω της οποίας υπολογίζεται κατευθείαν το φάσμα των οιονεί-σωματιδίων της σύμφωνης κατάστασης, είναι εφαρμόζοντας την θεωρία Μέσου-Πεδίου με την οποία μπορούμε να μετατρέψουμε τον όρο αλληλεπίδρασης σε τετραγωνικό και άρα επιλύσιμο. Ως μέσο πεδίο επιλέγεται ο μη διαγώνιος όρος:

$$b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \rangle \quad (1.3)$$

ο οποίος συνδέει καταστάσεις οι οποίες διαφέρουν ως προς τον αριθμό των σωματιδίων τους κατά 2, όπως εννοείται από την Εξ.(1.2).

Θέτοντας $c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} = b_{\mathbf{k}} + (c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} - b_{\mathbf{k}})$ και αγνοώντας τους όρους 2ης τάξης ως προς (...) καταλήγουμε στην Χαμιλτονιανή Μέσου-Πεδίου:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k},\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} + \Delta^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right) - \Delta^* b_{\mathbf{k}} \quad (1.4)$$

με $\Delta = -V \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}$. Η τετραγωνική μορφή της Χαμιλτονιανής καθιστά εύκολη την εύρεση του φάσματος των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων μέσω ενός μετασχηματισμού κατά Bogoliubov[3]:

$$c_{\mathbf{k},\uparrow} = u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}, \quad c_{-\mathbf{k},\downarrow} = -v_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + u_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \quad (1.5)$$

με $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ και οι όροι $u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ ταυτίζονται με αυτούς της Εξ.(1.2). Οι τελεστές $\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} (\gamma_{\mathbf{k},\sigma})$ είναι τελεστές δημιουργίας (καταστροφής) που δρουν στον χώρο των οιονεί-σωματιδίων¹. Τελικά, η διαγωνιοποιημένη Χαμιλτονιανή BCS έχει την μορφή:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} + \Delta b_{\mathbf{k}}] + \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left(\gamma_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k},\uparrow} + \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k},\downarrow} \right) \quad (1.6)$$

με $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\Delta^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2}$. Η διασπορά των οιονεί-σωματιδίων που προκύπτει δε, είναι χωρισμένη σε δυο κλάδους: $\pm E_{\mathbf{k}}$. Παρατηρούμε λοιπόν, ότι η ελκτική αλληλεπίδραση V οδηγεί σε μια αστάθεια της επιφάνειας Fermi, ανοίγοντας ένα ενεργειακό χάσμα ίσο με 2Δ . Το χάσμα αυτό είναι το αποτέλεσμα του υβριδισμού μεταξύ των αρχικών ηλεκτρονίων και οπών σε νέα σωματίδια τα οποία είναι μια υπέρθεση των αρχικών, όπως φαίνεται και από τις σχέσεις 1.5.

Το ενεργειακό αυτό χάσμα υπακούει την εξίσωση αυτοσυνέπειας:

$$\Delta = -V \sum_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} = -V \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} [1 - n_F(E_{\mathbf{k}})] = -V \sum_{\mathbf{k}} \frac{\Delta}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh \frac{E_{\mathbf{k}}}{2k_B T} \quad (1.7)$$

με $n_F(E_{\mathbf{k}}) = 1/(1 + e^{E_{\mathbf{k}}/(k_B T)})$ την συνάρτηση κατανομής Fermi-Dirac και k_B την σταθερά

¹ονομαζόμενα και ως μπογκολόνια

του Boltzmann (για το υπόλοιπο της διατριβής θέτουμε $k_B = 1$). Η σχέση (1.7) είναι η περίφημη εξίσωση των BCS. Παίρνοντας τα όρια για $T \rightarrow 0$ και $T \rightarrow T_c$ (όπου T_c είναι η λεγόμενη κρίσιμη θερμοκρασία στην οποία $\Delta = 0$) καταλήγουμε σε μια ακόμη γνωστή σχέση:

$$\Delta(T = 0) = 1.76k_B T_c \quad (1.8)$$

την οποία υπακούουν όλοι οι BCS υπεραγωγοί. Για την εύρεση της σχέσης (1.8) υποθέσαμε ότι $\Delta \ll \omega_D$. Η προσέγγιση αυτού του τύπου μας επέτρεψε να εκφράσουμε τον λόγο Δ/T_c με μία σταθερά, ανεξάρτητο δηλαδή από το ενεργειακό κατώφλι ω_D . Υπό αυτή την έννοια η σχέση (1.8) ισχύει στο λεγόμενο όριο της ασθενούς αλληλεπίδρασης. Στο όριο αυτό, η ενέργεια συμπύκνωσης² δίνεται από την σχέση:

$$E_{cond} = -\frac{1}{2}N_0|\Delta_0|^2 \quad (1.9)$$

όπου N_0 η πυκνότητα καταστάσεων στην στάθμη Fermi. Βλέπουμε δηλαδή, ότι το σύστημα είναι ασταθές ως προς την μετάβασή του στην υπεραγώγιμη φάση, όσο μικρό και αν είναι το ενεργειακό χάσμα Δ .

Αν στις εξισώσεις (1.1),(1.4) κάνουμε την αντικατάσταση $c \rightarrow ce^{i\theta}$, δηλαδή θεωρήσουμε μια αλλαγή στην φάση της κυματοσυνάρτησης των ηλεκτρονίων κατά θ , παρατηρούμε αμέσως ότι αυτές παραμένουν ίδιες. Δηλαδή, οι Χαμιλτονιανές αυτές είναι αμετάβλητες κάτω από έναν μετασχηματισμό βαθμίδας $U(1)$. Το ίδιο δεν ισχύει για το πεδίο $b_{\mathbf{k}} \rightarrow b_{\mathbf{k}}e^{2i\theta}$. Το πεδίο αυτό μπορεί να ερμηνευτεί ως η κυματοσυνάρτηση των ζευγών Cooper στον χώρο των ορμών.

Στα πλαίσια της περιγραφής της υπεραγωγιμότητας ως ένα φαινόμενο μετάβασης φάσης, ο όρος αυτός αποτελεί την παράμετρο τάξης του προβλήματος. Έτσι, βλέπουμε ότι η μετάβαση στην υπεραγώγιμη κατάσταση χαρακτηρίζεται από ένα αυθόρμητο σπάσιμο της καθολικής συμμετρίας βαθμίδας $U(1)$. Οι συνέπειες της σπασμένης συμμετρίας $U(1)$ είναι δραματικές: η συμπυκνωμένη φάση διατηρεί ένα «υπερρεύμα» το οποίο είναι μη αποσβεννόμενο και οφείλεται στις συλλογικές διεγέρσεις του συμπυκνώματος ενώ, παρουσία ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, ο υπεραγωγός παρουσιάζει διαμαγνητική συμπεριφορά. Το τελευταίο φαινόμενο είναι γνωστό ως φαινόμενο Meibner και αποτελεί βασικό γνώρισμα όλων των υπεραγωγών.

²η οποία ουσιαστικά είναι η διαφορά στην ελεύθερη ενέργεια λόγω του συμπυκνώματος για $T = 0$

1.2 Μη συμβατική υπεραγωγιμότητα

Ας ρίξουμε μια ματιά στο γενικευμένο πρόβλημα σύζευξης δυο ηλεκτρονίων σε ένα ζεύγος Cooper με την βοήθεια αρχών της Κβαντομηχανικής. Όπως είναι γνωστό, η κυματοσυνάρτηση ενός ζεύγους ηλεκτρονίων, ψ , μπορεί να χωριστεί σε χωρικό ($g(\mathbf{k})$) και σπιν (χ_{12}) κομμάτι: $\psi = g(\mathbf{k})\chi_{12}$. Η κυματοσυνάρτηση του σπιν μπορεί να είναι συμμετρική ως προς την εναλλαγή των ηλεκτρονίων αν τα σπιν βρίσκονται σε triplet διάταξη (με συνολικό σπιν $S = 1$) και αντισυμμετρική αν βρίσκονται σε singlet διάταξη ($S = 0$). Επιπλέον, υποθέτοντας σφαιρική συμμετρία, η $g(\mathbf{k})$ μπορεί να αναλυθεί, κατά τα γνωστά, σε σφαιρικές αρμονικές από τις οποίες προκύπτει η ιδιότητα ομοτιμίας: $g_l(-\mathbf{k}) = (-1)^l g_l(\mathbf{k})$, όπου $l = 0, 1, 2, \dots$ ο κβαντικός αριθμός της τροχιακής στροφορμής. Έχει επικρατήσει δε από την ατομική φυσική η ονομασία s, p, d, \dots για τα αντίστοιχα τροχιακά. Σύμφωνα τώρα με την απαγορευτική αρχή του Pauli, η ψ οφείλει να είναι αντισυμμετρική ως προς την εναλλαγή των ηλεκτρονίων. Καταλήγουμε λοιπόν στο γνωστό συμπέρασμα ότι ζεύγη με περιττό τροχιακό αριθμό l έχουν τα σπιν τους σε triplet διάταξη ενώ ζεύγη με άρτιο l σε singlet διάταξη.

Τα ζεύγη Cooper της αρχικής θεωρίας των BCS ανήκουν στην πιο συμμετρική περίπτωση με $l = 0, S = 0$ (s -wave). Όλες οι υπόλοιπες περιπτώσεις σύζευξης Cooper αντιστοιχούν σε υπεραγωγίμες καταστάσεις *χαμηλότερης συμμετρίας* οι οποίες συνολικά αναφέρονται στην διεθνή βιβλιογραφία ως μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα. Σε ένα υλικό, η σφαιρική συμμετρία παύει να ισχύει και την θέση της παίρνει η συμμετρία σημείου του κρυστάλλου. Έτσι, σε αντιστοιχία με τα παραπάνω, η $g(\mathbf{k})$ αναπτύσσεται στις λεγόμενες κρυσταλλικές αρμονικές οι οποίες αποτελούν συναρτήσεις βάσης των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της αντίστοιχης ομάδας συμμετρίας σημείου του κρυστάλλου [4, 5].

Στην πιο γενική περίπτωση, η υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης μπορεί να μετασχηματίζεται σύμφωνα με την ομάδα συμμετρίας: $G = SO(3) \times G_c \times U(1) \times T$ όπου $SO(3)$ είναι η ομάδα περιστροφών στον χώρο των σπιν, G_c η ομάδα συμμετρίας σημείου του κρυστάλλου, $U(1)$ η ομάδα συμμετρίας βαθμίδας και T η συμμετρία αντιστροφής του χρόνου [6]. Όταν η σύζευξη μεταξύ σπιν και τροχιάς των ηλεκτρονίων είναι αρκετά ισχυρή, η περιστροφή του σπιν εξαρτάται από την χωρική περιστροφή με αποτέλεσμα η πιο συμμετρική ομάδα να είναι η εξής: $G = G_c \times U(1) \times T$. Προφανώς ο διαχωρισμός αυτός αφορά μόνο σπιν triplet υπεραγωγίμες παραμέτρους τάξης. Στην τελευταία περίπτωση ανήκει και το μοναδικό στερεό το οποίο έχει επιβεβαιωθεί πέρα κάθε αμφιβολία ότι είναι σπιν triplet υπεραγωγός, το Sr_2RuO_4 .

Στην παρούσα διατριβή θα ασχοληθούμε αποκλειστικά με συστήματα τετραγωνικής συμμετρίας³. Έτσι, είναι σκόπιμο να παραθέσουμε τον σχετικό πίνακα των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων της ομάδας D_{4h} που *συναντώνται πιο συχνά*⁴ στην σχετική βιβλιογραφία

³αν και ο φορμαλισμός που θα αναπτύξουμε είναι ανεξάρτητος της συμμετρίας του κρυστάλλου

⁴Υποθέτουμε επίσης ισχυρή σύζευξη σπιν-τροχιάς. Οι πλήρεις πίνακες υπάρχουν στις σχετικές αναφορές

καθώς και τις αντίστοιχες συναρτήσεις βάσης και την εμπειρική τους ονομασία:

Γ	Ονομασία	Συνάρτηση βάσης
A_{1g}	s-wave	1
	extended s-wave ή s_{\pm}	$\cos k_x + \cos k_y$
A_{2g}	g-wave	$\sin k_x \sin k_y (\cos k_x - \cos k_y)$
B_{1g}	$d_{x^2-y^2}$ -wave	$\cos k_x - \cos k_y$
B_{2g}	d_{xy} -wave	$\sin k_x \sin k_y$
E_u	p-wave	$\{\hat{z} \sin k_x, \hat{z} \sin k_y\}$

όπου ο συμβολισμός g (gerade) είναι για καταστάσεις άρτιες και u (ungerade) περιττές στην χωρική αντιστροφή. Για τις σπιν triplet καταστάσεις παραθέτουμε μόνο την «μοναδιαία» αναπαράσταση η οποία θα μας απασχολήσει στην παρούσα διατριβή. Το διάνυσμα \hat{z} δείχνει την προβολή του «ψευδοδιανύσματος» \vec{d} για το οποίο θα πούμε περισσότερα στο επόμενο κεφάλαιο. Στο κεφάλαιο αυτό, εξάλλου, θα αναπτύξουμε έναν εναλλακτικό τρόπο κατηγοριοποίησης των υπεραγωγικών καταστάσεων μέσω μιας θεωρίας ενοποίησης των υπεραγωγικών καταστάσεων με συμπυκνώματα στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής, όπως είναι τα κύματα πυκνότητας στα στερεά.

1.3 Κύματα Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν

Τα κύματα πυκνότητας στα στερεά [7] είναι καταστάσεις σπασμένης συμμετρίας οι οποίες εμφανίζονται σε μεταλλικά συστήματα λόγω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φωτονίου ή ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου. Η θεμελιώδης κατάσταση είναι μια σύμφωνη υπέρθεση ζευγών ηλεκτρονίου-οπής, κατ' αντιστοιχία με τα ζεύγη ηλεκτρονίων ή Cooper στην θεωρία της υπεραγωγιμότητας, και όπως υπονοεί το όνομά τους, η πυκνότητα του φορτίου ή η πυκνότητα του σπιν δεν είναι ομοιόμορφη στον χώρο, αλλά παρουσιάζει μια περιοδική διαμόρφωση. Στην πρώτη περίπτωση το συμπύκνωμα ονομάζεται Κύμα Πυκνότητας Φορτίου⁵ και η σπασμένη συμμετρία είναι η μεταφορική, ενώ στην δεύτερη Κύμα Πυκνότητας Σπιν⁶ όπου επιπλέον σπάει και η συμμετρία περιστροφής των σπιν. Τα κύματα πυκνότητας φορτίου πρωτοσυστήθηκαν από τους Fröhlich το 1954 και Peierls το 1955, ενώ τα κύματα πυκνότητας σπιν εισήχθησαν από τον Overhauser το 1962.

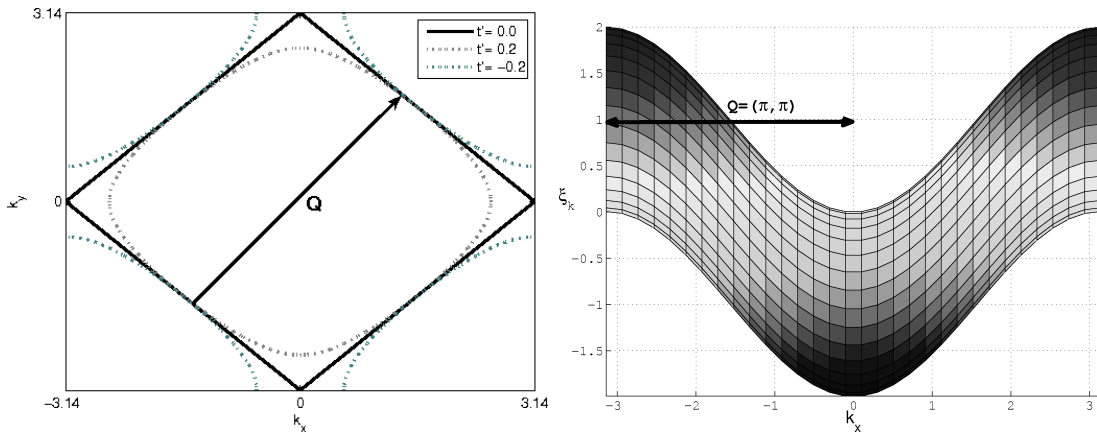
Σύντομα μετά την ανακάλυψή τους έγινε κατανοητό ότι σημαντικό ρόλο για την ύπαρξη αυτών των καταστάσεων διαδραματίζει η ισχυρή ανισοτροπική δομή των ενεργειακών ζωνών των υποψήφιων υλικών. Η δομή αυτή οδηγεί σε χαμηλοδιάστατη επιφάνεια Fermi η οποία

[4, 5, 6].

⁵Charge Density Wave ή CDW

⁶Spin Density Wave ή SDW

παρουσιάζει χαρακτηριστικά «συναρμογής» (nesting), με την έννοια ότι υπάρχει ένα χαρακτηριστικό κυματόνυμα το οποίο ενώνει τα ισοδύναμα σημεία της επιφάνειας αυτής στην 1η ζώνη Brillouin. Στο κυματόνυμα αυτό η επιδεκτικότητα φορτίου/σπιν του συστήματος αποκλίνει, σηματοδοτώντας την είσοδο στην συμπυκνωμένη φάση η οποία διακρίνεται κυρίως για την ύπαρξη χάσματος στις μονοσωματιδιακές διεγέρσεις του συστήματος εξαιτίας του οποίου τα υλικά αυτά παρουσιάζουν ημιαγώγιμη συμπεριφορά. Στην παρούσα διατριβή θα



Σχήμα 1.1: a) Η επιφάνεια Fermi για ένα τετραγωνικό σύστημα το οποίο περιγράφεται από ένα μοντέλο ισχυρού δεσμού με κοντινούς και αμέσως επόμενους γείτονες b) Η ενεργειακή ζώνη στην συνθήκη ημικατάλειψης ($t' = 0$) παρουσιάζει τέλεια συναρμογή στο κυματόνυμα \mathbf{Q} .

ασχοληθούμε κυρίως με διδιάστατα τετραγωνικά συστήματα. Για ένα τέτοιο σύστημα με ενεργειακή διασπορά η οποία περιγράφεται από ένα μοντέλο Ισχυρού Δεσμού [8] κοντινών και αμέσως κοντινότερων γειτόνων, $\xi_{\mathbf{k}} = -t(\cos k_x + \cos k_y) - t' \cos k_x \cos k_y$, η επιφάνεια Fermi έχει την μορφή του Σχ.1.1(a). Όπως φαίνεται και στο Σχ.1.1(b), για $t' = 0$, υπάρχει ένα κυματόνυμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ τέτοιο ώστε να ικανοποιείται η συνθήκη τέλει συναρμογής: $\xi_{\mathbf{k}} = -\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$.

Κύματα Πυκνότητας Φορτίου

Η θεμελιώδης κατάσταση γνωστή ως Κύμα Πυκνότητας Φορτίου εμφανίζεται σε χαμηλοδιάστατα μέταλλα εξαιτίας των αλληλεπιδράσεων ηλεκτρονίου-φωνονίου [9]. Η περιοδική διαμόρφωση της πυκνότητας του φορτίου έχει ως συνέπεια το πλέγμα είναι και αυτό περιοδικά παραμορφωμένο (βλ. π.χ. Σχ.1.2). Και οι δυο περίοδοι είναι ανάλογες του κυματόνυμου συναρμογής \mathbf{Q} ενώ η ηλεκτρική επιδεκτικότητα αποκλίνει στο κυματόνυμα αυτό. Ακόμη μια συνέπεια της δημιουργίας των CDW είναι η επανακανονικοποίηση του φωνονιακού φάσματος λόγω της αλληλεπίδρασης με τα ηλεκτρόνια με αποτέλεσμα την εξασθένιση του φωνονιακού κλάδου με κυματόνυμα \mathbf{Q} , σηματοδοτώντας την περιοδική παραμόρφωση του

πλέγματος. Η εξασθένιση στο φωνονιακό φάσμα είναι γνωστή ως *ανωμαλία του Kohn* και η παραμόρφωση του πλέγματος ως *παραμόρφωση κατά Peierls*.

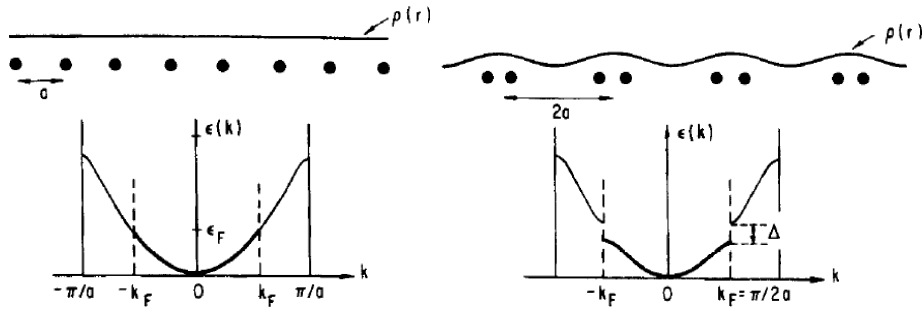
Σημείο εκκίνησης για την περιγραφή της CDW κατάστασης αποτελεί η Χαμιλτονιανή που εισήγαγε ο Frölich η οποία συμπεριλαμβάνει την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωνονίου. Εναλλακτικά, η κατάσταση αυτή συνηθίζεται να μελετάται ξεκινώντας από την ενεργό Χαμιλτονιανή μέσου πεδίου:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} + |W| e^{i\phi} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + |W| e^{-i\phi} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}} \right] \quad (1.10)$$

με $W \propto \langle c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \rangle$. Διαγωνιοποίηση κατά Bogoliubov δίνει την ενεργειακή διασπορά των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος:

$$E_{\mathbf{k}} = \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \right)^2 + W^2} \quad (1.11)$$

Το μέτρο της παραμέτρου τάξης W , αντιστοιχεί στο άνοιγμα ενός ενεργειακού χάσματος πάνω από την επιφάνεια Fermi. Δηλαδή καθώς $T < T_{CDW}$ παρατηρείται μια μετάβαση μέταλλου-μονωτή. Όταν ικανοποιείται η συνθήκη τέλει συναρμογής, ο όρος έξω από το ριζικό μηδενίζεται: ολόκληρη η επιφάνεια Fermi εξαφανίζεται λόγω του χάσματος. Το χάσμα αυτό υπακούει μία εξίσωση αυτοσυνέπειας τύπου BCS. Στην κατάσταση αυτή, η πυκνότητα



Σχήμα 1.2: Η πυκνότητα φορτίου $\rho(\mathbf{r})$, η παραμόρφωση πλέγματος σταθεράς a και η ενεργειακή διασπορά στο μονοδιάστατο μοντέλο των ελεύθερων ηλεκτρονίων ($\epsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, $\mathbf{Q} = 2k_F$) όταν α) $T > T_{CDW}$ και β) $T < T_{CDW}$ [9]. Στο σχήμα, $\Delta = W$.

φορτίου μεταβάλλεται ως εξής:

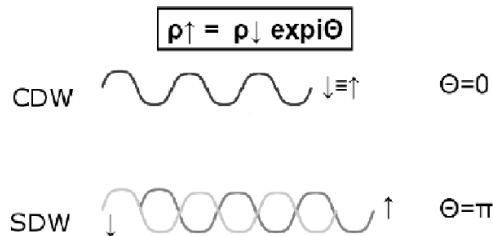
$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 (1 + W \cos(\mathbf{Q}\mathbf{r} + \phi)) \quad (1.12)$$

Η φάση ϕ δηλώνει ότι το περιοδικό πλέγμα πυκνότητας φορτίου δεν συμπίπτει με το ιοντικό πλέγμα, δηλαδή μεταξύ τους υπάρχει διαφορά φάσης και σχετίζεται με συλλογικές διεγέρσεις που προκύπτουν από το σπάσιμο της μεταφορικής συμμετρίας. Εμφανίζεται δε όταν το

CDW είναι ασύμμετρο, δηλαδή το κυματόνισμα \mathbf{Q} είναι άρρητο πολλαπλάσιο της πλεγματικής σταθεράς. Όταν το \mathbf{Q} είναι σύμμετρο τότε $\phi = 0$. Η συνθήκη αυτή ικανοποιείται όταν η ενεργειακή ζώνη είναι ημικατελιγμένη από ηλεκτρόνια. Στην περίπτωση αυτή, η παραμόρφωση του πλέγματος έχει ως αποτέλεσμα τον διπλασιασμό της μοναδιαίας κυψελίδας εφόσον η πλεγματική σταθερά γίνεται $2a$, όπως φαίνεται και στο Σχ.1.2. Κατά συνέπεια, η ζώνη Brillouin υποδιπλασιάζεται από $(-\pi/a, \pi/a)$ σε $(-\pi/2a, \pi/2a)$.

Κύματα Πυκνότητας Σπιν

Για την μετάβαση στην κατάσταση του Κύματος Πυκνότητας Σπιν ευθύνεται η αλληλεπίδραση Coulomb και συνήθως περιγράφεται θεωρητικά μέσω της Χαμιλτονιανής του Hubbard [10, 11]. Η μετάβαση στην φάση SDW σηματοδοτείται από μια αποκλίνουσα μαγνητική επιδεκτικότητα στο κυματόνισμα συναρμογής \mathbf{Q} . Σε αναλογία με την φάση CDW, για $T < T_{SDW}$, η πυκνότητα των σπιν παρουσιάζει μια περιοδική διαμόρφωση με αποτέλεσμα η μαγνήτιση στο υλικό να είναι περιοδικά διαμορφωμένη. Κατά συνέπεια, το υλικό συμπεριφέρεται ως αντισιδηρομαγνήτης. Η συμπίκνωση σε ένα σύμμετρο SDW έχει ως συνέπεια τον διπλασιασμό της μαγνητικής μοναδιαίας κυψελίδας, οδηγώντας σε υποδιπλασιασμό της ζώνης Brillouin σε αντιστοιχία με ότι συμβαίνει στην μετάβαση CDW. Το φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων εμφανίζει ένα χάσμα, M , το οποίο ταυτίζεται με την παράμετρο τάξης της μετάβασης, $M \propto \sum_{\sigma} \sigma \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma} \rangle$, και υπακούει μια BCS εξίσωση αυτοσυνέπειας.



Σχήμα 1.3: Σχηματική απεικόνιση της διαμόρφωσης της πυκνότητας φορτίου για κάθε σπιν μπάντα $\rho(\mathbf{r})_{\sigma}$, στην CDW (πάνω) και στην SDW (κάτω) φάση.

Εναλλακτικά, το SDW μπορεί να θεωρηθεί ως μια υπέρθεση ενός CDW στην πάνω σπιν μπάντα και ενός στην κάτω σπιν μπάντα, τα οποία παρουσιάζουν μεταξύ τους μια διαφορά φάσης π . Κατά συνέπεια, η ολική πυκνότητα φορτίου παραμένει σταθερή στον χώρο, ενώ η πόλωση των σπιν εναλλάσσεται περιοδικά, όπως φαίνεται και στο Σχ.1.3.

1.4 Υπεραγωγός σε υψηλά μαγνητικά πεδία

Γενικά, η εφαρμογή ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου σε έναν υπεραγωγό αργά ή γρήγορα θα αναγκάσει το σύστημα να επιστρέψει στην αρχική παραμαγνητική του κατάσταση. Το

1.5 Το όριο Pauli

μαγνητικό πεδίο μπορεί να αλληλεπιδράσει με τα ηλεκτρόνια μέσω σύζευξής του είτε με το ηλεκτρονιακό σπιν (παραμαγνητικά φαινόμενα), είτε με τους τροχιακούς βαθμούς ελευθερίας (τροχιακά φαινόμενα) ή και με τα δύο. Η περιγραφή και των δυο μηχανισμών μπορεί να μελετηθεί φαινομενολογικά μέσω της θεωρίας των Ginzburg-Landau (GL)⁷[2, 12]. Το συναρτησιακό της ελεύθερης ενέργειας κατά τους GL δίνεται ως εξής:

$$f[\psi, \mathbf{A}] = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left| \left(\nabla - \frac{ie^*}{\hbar} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + r|\psi|^2 + \frac{u}{2} |\psi|^4 + \frac{(\nabla \times \mathbf{A})^2}{2\mu_0} \quad (1.13)$$

Στην θεωρία αυτή, η παράμετρος τάξης είναι η κυματοσυνάρτηση των ζευγών Cooper ψ ($\psi \sim b_{\mathbf{k}}$), e^*, m^* είναι το φορτίο και η μάζα του ζεύγους Cooper, και $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$ το μαγνητικό πεδίο. Η Εξ.(1.13) εμπεριέχει δυο χαρακτηριστικά μήκη: το μήκος συμφωνίας: $\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|r|}}$ και το βάθος διείσδυσης κατά London: $\lambda_L = \sqrt{\frac{m^*}{n_s e^{*2} \mu_0}}$, με n_s την υπέρρευστη πυκνότητα του συμπυκνώματος ($\psi \sim \sqrt{n_s}$). Το πρώτο ουσιαστικά μετράει το εύρος ενός ζεύγους Cooper, ενώ το δεύτερο την απόσταση μέσα στον υπεραγωγό όπου διεισδύει το μαγνητικό πεδίο.

Ο λόγος: $\kappa = \frac{\lambda_L}{\xi}$ ονομάζεται παράμετρος των GL. Ανάλογα την τιμή της, οι υπεραγωγοί χωρίζονται σε δυο μεγάλες κατηγορίες:

- $\kappa < \frac{1}{\sqrt{2}}$ Υπεραγωγοί τύπου I. Τα μαγνητικά πεδία απωθούνται τελείως από το εσωτερικό του υλικού. Υπάρχει ένα κρίσιμο πεδίο, H_c , στο οποίο το σύστημα επιστρέφει στην κανονική κατάσταση μέσω μιας μετάβασης 1ης τάξης Βρίσκεται δε από την σχέση: $H_c = \sqrt{\frac{\mu_0 r^2}{u}}$.
- $\kappa > \frac{1}{\sqrt{2}}$ Υπεραγωγοί τύπου II. Πάνω από ένα κρίσιμο πεδίο H_{c1} τα μαγνητικά πεδία διεισδύουν στον υπεραγωγό χωρίς να τον καταστρέφουν δημιουργώντας τις λεγόμενες δίνες του Abrikosov. Πάνω από ένα δεύτερο κρίσιμο πεδίο, H_{c2} , το σύστημα επιστρέφει στην κανονική κατάσταση μέσω μιας μετάβασης 2ης τάξης. Το κρίσιμο πεδίο στο οποίο τα λεγόμενα τροχιακά φαινόμενα καταστρέφουν τον υπεραγωγό είναι:

$$H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} \quad (1.14)$$

όπου Φ_0 είναι το κβάντο της μαγνητικής ροής: $\Phi_0 = \pi\hbar c/|e|$.

1.5 Το όριο Pauli

Τα ηλεκτρόνια σε ένα singlet ζεύγος Cooper έχουν τα σπιν τους σε αντιπαράλληλη διάταξη. Ως εκ τούτου, η εφαρμογή ενός πεδίου Zeeman το οποίο πολώνει τα σπιν προς μια

⁷για την ακρίβεια, η θεωρία G-L ήταν προγενέστερη της θεωρίας BCS

κατεύθυνση μπορεί να καταστρέψει την υπεραγωγιμότητας σε κάποιο κρίσιμο πεδίο⁸.

Υπεραγωγιμότητα τύπου s

Στο κρίσιμο πεδίο της μετάβασης, η ενέργεια Zeeman ισούται με την ενέργεια συμπίκνωσης: $E_Z = E_{cond} \Rightarrow -\frac{1}{2}\chi_P H_c^2 = -\frac{\Delta^2}{2}N_0$, όπου χ_P η επιδεκτικότητα του Pauli η οποία για μέταλλα: $\chi_P \approx 2N(0)$ [13]. Άρα τελικά:

$$H_P = \frac{\Delta_0}{\sqrt{2}} = 0.707\Delta_0 \quad (1.15)$$

Το πεδίο H_P ονομάζεται όριο των Clogston-Chandrasekhar [14] ή όριο Pauli.

Ο λόγος $\alpha = \frac{H_{c_2}^{orb}}{H_P^P}$ αποτελεί ένα κριτήριο για το ποιο από τα δυο φαινόμενα, τροχιακά ή παραμαγνητικά, διαδραματίζουν τον σημαντικότερο ρόλο στην τιμή του H_{c_2} ενός υπεραγωγού, με α την λεγόμενη παράμετρο του Maki [15]. Από τους ορισμούς που δόθηκαν, παρατηρούμε ότι για υπεραγωγούς με μικρό μήκος συμφωνίας ξ , $H_{c_2}^{orb} \gg H_{c_2}^P$ και $\alpha \gg 1$, με αποτέλεσμα τα παραμαγνητικά φαινόμενα να κυριαρχούν. Οι υπεραγωγοί αυτοί ονομάζονται *υπεραγωγοί στο όριο Pauli*. Χαρακτηριστικό γνώρισμα των υλικών αυτών είναι ότι η μετάβαση στην παραμαγνητική φάση είναι 1ης τάξης σε χαμηλές θερμοκρασίες, ενώ πάνω από μια κρίσιμη τιμή T^* αυτή αλλάζει σε 2ης. Η παρούσα διατριβή πραγματεύεται ακριβώς την φυσική τέτοιων συστημάτων.

Υπεραγωγιμότητα τύπου $d_{x^2-y^2}$

Για την περιγραφή της singlet μη συμβατικής υπεραγωγιμότητας αρκεί να θέσουμε $\Delta \rightarrow \Delta_{\mathbf{k}} = \Delta f_{\mathbf{k}}$ και $V \rightarrow V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ στην Εξ.(1.1) [16]. Στην προσέγγιση λοιπόν της ασθενούς σύζευξης, και θεωρώντας ισοτροπική επιφάνεια Fermi, το ενεργειακό κέρδος κατά την συμπίκνωση δίνεται από την σχέση: $E_{cond}^{dSC} = -\frac{\Delta^2}{2}N(0)\langle f_{\mathbf{k}}^2 \rangle$ ⁹. Για υπεραγωγό $d_{x^2-y^2}$, $f_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2}(\cos k_x - \cos k_y)$ και τελικά το όριο Pauli δίνεται από την προσεγγιστική σχέση[17]:

$$H_P^{dSC} \approx 0.5\Delta_0 \quad (1.16)$$

1.6 Πέρα από το H_p : Υπεραγωγιμότητα των FFLO

Η προηγούμενη συζήτηση γεννά το εξής ερώτημα: μπορεί να υπάρξει υπεραγωγιμότητα πάνω από το όριο Pauli; Η απάντηση, σε θεωρητικό επίπεδο, δόθηκε την δεκαετία του '60 ανεξάρτητα από τους Fulde και Ferrell [18], και Larkin και Ovchinnikov [19] (FFLO).

⁸Για σπιν triplet υπεραγωγούς, το πεδίο λειτουργεί καταστροφικά μόνο για διάταξη σπιν παράλληλα σε αυτό[5]

⁹όπου $\langle \dots \rangle$ είναι ο μέσος όρος στην επιφάνεια Fermi

Η πρότασή τους ουσιαστικά εισήγαγε μια νέα κατάσταση της ύλης, την λεγόμενη FFLO υπεραγωγιμότητα.

Στην FFLO φάση, η υπεραγώγιμη παράμετρος τάξης *αλλάζει πρόσημο στον πραγματικό χώρο*. Στην κατάσταση αυτή, η συμπύκνωση συμβαίνει μεταξύ των διαχωρισμένων (λόγω του πεδίου Zeeman) κομματιών της επιφάνειας Fermi με αποτέλεσμα την δημιουργία μιας νέας υπεραγώγιμης κατάστασης όπου τα ζεύγη Cooper έχουν πεπερασμένη ορμή-κέντρου-μάζας \mathbf{q} : $((\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} + \mathbf{q} \downarrow))$. Αυτό έρχεται σε αντίθεση με το $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ ζεύγος της παραδοσιακής θεωρίας των BCS. Λόγω της πεπερασμένης ορμής \mathbf{q} , η υπεραγώγιμη παράμετρος τάξης $\Delta(\mathbf{r}) \propto \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \rangle$ εμφανίζει μια διαμόρφωση στον χώρο κατά $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$, σπάζοντας έτσι και την μεταφορική συμμετρία εκτός από την συμμετρία βαθμίδας. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα, την δημιουργία μιας *ανομοιογενούς* υπεραγώγιμης κατάστασης [15, 20].

Σημείο εκκίνησης για την μελέτη της FFLO φάσης αποτελεί μια γενική Χαμιλτονιανή ενός $s - wave$ υπεραγωγού¹⁰ υπό την επίδραση ενός μαγνητικού πεδίου Zeeman:

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow}^{\dagger} + \Delta_{\mathbf{q}}^* c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \uparrow} \right) + \frac{|\Delta_{\mathbf{q}}|^2}{V} \quad (1.17)$$

με $\Delta_{\mathbf{q}} = V \sum_{\mathbf{k}'} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}/2, \uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}/2, \downarrow}^{\dagger} \rangle$, όπου $\xi_{\mathbf{k}, \sigma} = \xi_{\mathbf{k}} - \sigma h$ με h το μαγνητικό πεδίο¹¹ και $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ με μ το χημικό δυναμικό. Στην Εξ.(1.17), έχουμε συμπεριλαμβάνει και την πιθανότητα τα ζεύγη Cooper να έχουν πεπερασμένη ορμή κέντρου-μάζας \mathbf{q} . Για $\mathbf{q} = 0$ παίρνουμε την Εξ.(1.4) στην οποία έχει απλά προστεθεί ένας όρος Zeeman.

Με την χρήση ενός σπινόρα της μορφής: $\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = (c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \uparrow}^{\dagger}, c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow}^{\dagger})$, η Εξ.(1.17) γράφεται:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \uparrow} & -\Delta_{\mathbf{q}} \\ -\Delta_{\mathbf{q}}^* & -\xi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow} \end{pmatrix} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \xi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow} + \frac{|\Delta_{\mathbf{q}}|^2}{V} \quad (1.18)$$

και μπορεί εύκολα να διαγωνιοποιηθεί μέσω ενός μετασχηματισμού Bogoliubov δίνοντας το φάσμα των οιονεί-σωματιδίων:

$$E(\mathbf{k}, \mathbf{q})_{\pm} = \frac{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \uparrow} - \xi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow}}{2} \pm \sqrt{\Delta_{\mathbf{q}}^2 + \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \uparrow} + \xi_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \downarrow}}{2} \right)^2} \quad (1.19)$$

Υποθέτοντας ότι το κυματόνισμα \mathbf{q} των ζευγών Cooper είναι γενικά μικρό, ώστε μόνο ο πρώτος όρος στο ανάπτυγμα Taylor της Εξ.(1.19) είναι σημαντικός καταλήγουμε στις

¹⁰ παρόμοια ανάλυση μπορεί να γίνει και για ένα singlet μη-συμβατικό υπεραγωγό, π.χ. τύπου $d_{x^2-y^2}$

¹¹ από εδώ και στο εξής θέτουμε $\mu_B = 1$

εξισώσεις διασποράς:

$$E(\mathbf{k}, \mathbf{q})_{\pm} = \left(\frac{1}{2} \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} - h \right) \pm \sqrt{\Delta_{\mathbf{q}}^2 + \xi_{\mathbf{k}}^2} \quad (1.20)$$

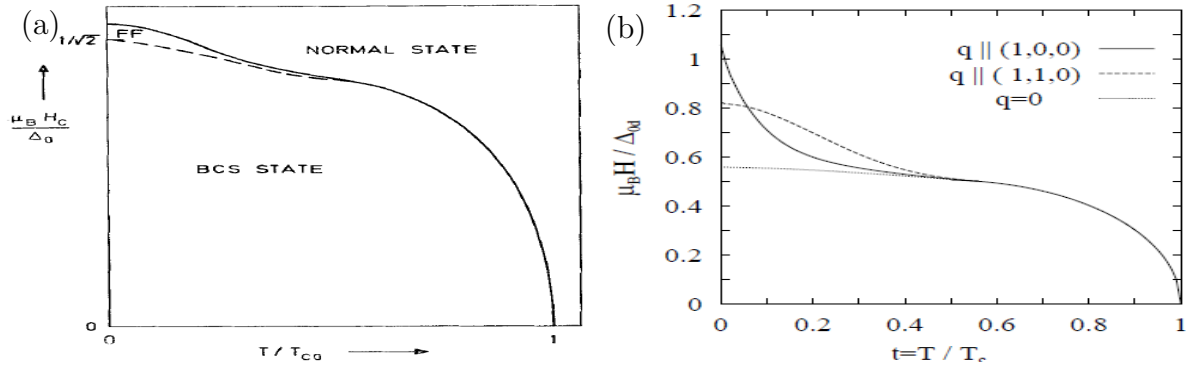
Υπό αυτή την συνθήκη, η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος μπορεί ναδειχθεί ότι παίρνει την μορφή:

$$F_{\mathbf{q}} = \frac{\Delta_{\mathbf{q}}^2}{V} - T \sum_{\mathbf{k}, \pm} \ln(1 + e^{-E(\mathbf{k}, \mathbf{q})_{\pm}/T}) + \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2} \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} + h \right) \quad (1.21)$$

η οποία ελαχιστοποιείται για κατάλληλες τιμές των $\Delta_{\mathbf{q}}$ και \mathbf{q} οι οποίες είναι και η λύση του προβλήματος [21]. Ελαχιστοποίηση κατά $\Delta_{\mathbf{q}}$ παρέχει την αντίστοιχη εξίσωση BCS. Ελαχιστοποίηση ως προς \mathbf{q} οδηγεί στην πολύ ενδιαφέρουσα σχέση [18]:

$$q = \frac{2h}{v_F x} \quad (1.22)$$

όπου v_F είναι η ταχύτητα Fermi και $x = \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{|\mathbf{k}| |\mathbf{q}|} = \cos \theta$, με θ την γωνία μεταξύ \mathbf{k} και \mathbf{q} . Στην FFLO φάση, το πλάτος του κυματανύσματος \mathbf{q} είναι ανάλογο του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου.



Σχήμα 1.4: H-T διάγραμμα φάσης της FFLO υπεραγωγιμότητας τύπου a) s [22] και b) $d_{x^2-y^2}$ [23].

Το κρίσιμο πεδίο για s -wave FFLO υπεραγωγό δίνεται από την σχέση:

$$h_c^{FF} \approx 0.754 \Delta_0 \quad (1.23)$$

ενώ, η μετάβαση στην παραμαγνητική κατάσταση είναι 2ης τάξης και η μετάβαση από υπεραγωγό με $\mathbf{q} = 0$ σε FFLO, είναι 1ης τάξης [18, 21]. Βλέπουμε δηλαδή ότι υπάρχει ένα παράθυρο: $0.707 < H < 0.754$ στο οποίο αναμένεται η φάση FFLO. Για υπεραγωγούς με

ανιστροπική επιφάνεια Fermi ή/και μη-συμβατική παράμετρο τάξης για ($H = 0$), το H_c^{FF} γενικά αναμένεται μεγαλύτερο [15], όπως για παράδειγμα συμβαίνει στην περίπτωση των υπεραγωγών $d_{x^2-y^2}$ (Σχ.1.4b).

1.7 Υπεραγωγίμα Κύματα Πυκνότητας Ζεύγους

Εκτός από την FFLO φάση, έχει προταθεί θεωρητικά μια ακόμα κατηγορία μη-συμβατικής υπεραγωγιμότητας στην οποία τα ζεύγη Cooper διαθέτουν πεπερασμένη συνολική ορμή. Στην περίπτωση αυτή, το ζεύγος έχει την γενική μορφή: $(|\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \sigma), |-\mathbf{k}, \sigma')$ και η παράμετρος τάξης ορίζεται ως η μέση τιμή: $\langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}, c_{-\mathbf{k},\sigma'} \rangle$, όπου το κυματόνισμα \mathbf{Q} δεν είναι συνάρτηση του μαγνητικού πεδίου αλλά σχετίζεται με τις ιδιότητες συναρμογής της εκάστοτε επιφάνειας Fermi, σε αναλογία με τα Κύματα Πυκνότητας στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής. Οι μη-συμβατικές υπεραγωγίμες καταστάσεις αυτού του είδους ονομάζονται γενικά και ως staggered υπεραγωγίμες καταστάσεις. Πρόσφατα, λόγω της αναλογίας τους με τα κύματα πυκνότητας φορτίου/σπιν εισήχθη και ο όρος: «Κύμα Πυκνότητας Ζεύγους» (Pair Density Wave ή PDW). Η ιδιαιτερότητα των PDW έγκειται στο ότι η εμφάνισή τους δεν προϋποθέτει την εφαρμογή ενός ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, σε αντίθεση με την υπεραγωγιμότητα τύπου FFLO.

Οι καταστάσεις αυτές είναι γνωστές από την δεκαετία του '70. Ωστόσο, το ενδεχόμενο ύπαρξης μιας τέτοιας φάσης πρωτοεξετάστηκε μια δεκαετία μετά κυρίως λόγω της ανακάλυψης των αντισιδηρομαγνητικών υπεραγωγών. Η σπιν triplet εκδοχή συζητήθηκε από τους Ψαλτάκη και Fenton [24], ενώ η σπιν singlet από τον Yang [25]. Το ενδιαφέρον για τις καταστάσεις αυτές αναζωπυρώθηκε την δεκαετία του '00 κυρίως λόγω της σχετικότητάς τους στα υπονοθευμένα οξειδία του χαλκού [26, 27], ενώ εικάζεται ότι η υπεραγωγίμη κατάσταση των σιδηρομαγνητικών υπεραγωγών UPt₃ και UGe₂ είναι ένα σπιν triplet PDW [28]. Πολύ πρόσφατα, σημαντικό ενδιαφέρον προκάλεσε το ενδεχόμενο της ύπαρξης μιας τέτοιας εξωτικής κατάστασης στην λεγόμενη \mathbf{Q} -φάση του υπεραγωγού CeCoIn₅ [29, 30].

Στην πορεία της διατριβής, τα συμπυκνώματα αυτά θα μελετηθούν εκτενώς σε συνδυασμό και με τις υπόλοιπες καταστάσεις της ύλης που παρουσιάστηκαν στο παρόν κεφάλαιο.

Κεφάλαιο 2

Γενικευμένη θεωρία BCS για το πρόβλημα συνύπαρξης

Σε αυτό το κεφάλαιο θα επιχειρήσουμε μια πρώτη, διερευνητική ματιά στις πιθανές καταστάσεις τάξης οι οποίες μπορούν εν δυνάμει να παρουσιαστούν σε ένα υλικό στο οποίο οι φορείς του είναι ισχυρά συσχετισμένοι. Αυτές, μπορούν πολύ γενικά να χωριστούν σε δυο μεγάλες κατηγορίες: υπεραγώγιμα συμπυκνώματα και συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής. Στόχος μας είναι να διατηρήσουμε την συζήτηση όσο πιο γενική και ανεξάρτητη από τις μικροσκοπικές παραμέτρους οι οποίες χαρακτηρίζουν κάθε υλικό. Για τον σκοπό αυτό, θα ξεκινήσουμε από μια γενικευμένη, ενεργό Χαμιλτονιανή της μορφής:

$$H = H_0 + \mathcal{H}_{SC} + \mathcal{H}_{DW} \quad (2.1)$$

και θα δούμε βήμα-βήμα πώς, χρησιμοποιώντας έναν κατάλληλο σπινორιακό φορμαλισμό, είναι δυνατό να περιγράψουμε, επί ίσοις όροις, όλες τις δυνατές αυτές καταστάσεις. Παράλληλα, ελπίζουμε ότι η ανάλυση που ακολουθεί θα βοηθήσει ώστε να διασαφηνιστούν οι κύριες έννοιες γύρω από την φυσική των συμπυκνωμάτων που θα μας απασχολήσουν στην παρούσα διατριβή.

2.1 Υπεραγώγιμα συμπυκνώματα

Ως εφαλτήριο, θα θεωρήσουμε την πιο γενική Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης η οποία περιγράφει διαδικασίες που οδηγούν σε γενικευμένη σύζευξη στο κανάλι Cooper:

$$\mathcal{H}_{SC} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger V_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), -(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}'}^{s_1, s_2, s_3, s_4} c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), s_3} c_{\mathbf{k}', s_4} \quad (2.2)$$

όπου $s_i, i = 1..4$ είναι δείκτες spin: $s_i = \uparrow\downarrow$ και \mathbf{q} η ορμή ενός ζεύγους ηλεκτρονίων. Ο όρος: $V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s_1,s_2,s_3,s_4}$ αντιστοιχεί στο στοιχείο του πίνακα¹:

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

Ο τελεστής \hat{V} είναι μια αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου η οποία είναι ελκτική σε μια περιοχή γύρω από την επιφάνεια Fermi εύρους ω_c . Η προέλευση της αλληλεπίδρασης αυτής εξαρτάται από την φύση των μποζονικών πεδίων² που δρουν στο υλικό η ακριβής γνώση της οποίας αποτελεί ένα από τα μεγάλα σύγχρονα μυστήρια όσον αφορά τους μη-συμβατικούς υπεραγωγούς. Προς το παρόν λοιπόν, θα επικεντρωθούμε μόνο στους ηλεκτρονιοακούς (φερμιονικούς) βαθμούς ελευθερίας. Υπό αυτή την έννοια, η Εξ.(2.2) αποτελεί μία ενεργό (effective) Χαμιλτονιανή περιγραφή του γενικού προβλήματος Cooper η οποία μπορεί να προκύψει από μια αντίστοιχη πλήρης Κβαντική Θεωρία Πεδίου (ΚΘΠ). Για παράδειγμα, η θεωρία των BCS για την συμβατική υπεραγωγιμότητα είναι μια ενεργός θεωρία που πηγάζει από την ΚΘΠ του Eliashberg όπου το μποζονικό πεδίο είναι τα φωνόνια και $\omega_c = \omega_D$ την χαρακτηριστική συχνότητα του Debye.

Η Εξ.(2.2) αποτελεί ένα πρόβλημα πολλών σωμάτων (ΠΠΣ). Ως εκ τούτου, η επίλυσή της είναι εφικτή μόνο με προσεγγιστικές τεχνικές, εκ των οποίων η πιο συνηθισμένη είναι αυτή του Μέσου-Πεδίου (ΜΠ). Στην προσέγγιση αυτή, χωρίζουμε αρχικά την Εξ.(2.2) σε ζεύγη τελεστών και τις διακυμάνσεις αυτών γύρω από την μέση τους τιμή:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s_2}^\dagger &= \langle c_{\mathbf{k},s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s_2}^\dagger \rangle + \left(c_{\mathbf{k},s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s_2}^\dagger - \langle c_{\mathbf{k},s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),s_2}^\dagger \rangle \right) \\ c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s_3} c_{\mathbf{k}',s_4} &= \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s_3} c_{\mathbf{k}',s_4} \rangle + \left(c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s_3} c_{\mathbf{k}',s_4} - \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),s_3} c_{\mathbf{k}',s_4} \rangle \right) \end{aligned}$$

και στην συνέχεια αντικαθιστώντας πίσω στην Εξ.(2.2) κρατάμε όρους μέχρι 1ης τάξης στις διακυμάνσεις. Δηλαδή θεωρούμε τις διακυμάνσεις αμελητέες. Τελικά καταλήγουμε

¹Ισχύουν οι παρακάτω ταυτότητες:

$$\begin{aligned} \left(V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s_1,s_2,s_3,s_4} \right)^\dagger &= V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s_1,s_2,s_3,s_4} = V_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{q})}^{s_3,s_4,s_1,s_2} = -V_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k},\mathbf{k}',-(\mathbf{k}+\mathbf{q})}^{s_3,s_1,s_4,s_2} \\ &= V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),\mathbf{k}',-(\mathbf{k}+\mathbf{q})}^{s_1,s_3,s_4,s_2} = -V_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}),-(\mathbf{k}+\mathbf{q}),\mathbf{k}'}^{s_1,s_3,s_2,s_4} \quad \text{με} \quad \hat{V}^\dagger = \hat{V} = \text{ερμιτιανός} \end{aligned}$$

²στην σύζευξη δεν είναι απαραίτητο να συμμετέχει μόνο ένα είδος μποζονίου, όπως θα δούμε και στο 2ο μέρος της παρούσας διατριβής

2.1 Υπεραγωγήματα συμπυκνώματα

στην εξίσωση:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SC} = & \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{s_1 \dots s_4} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger V_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), -(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}'}^{s_1, s_2, s_3, s_4} \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), s_3} c_{\mathbf{k}', s_4} \rangle \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{s_1 \dots s_4} \langle c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger \rangle V_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), -(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}'}^{s_1, s_2, s_3, s_4} c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), s_3} c_{\mathbf{k}', s_4} \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{s_1 \dots s_4} V_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), -(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}'}^{s_1, s_2, s_3, s_4} \langle c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger \rangle \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), s_3} c_{\mathbf{k}', s_4} \rangle \end{aligned} \quad (2.3)$$

όπου ο τελευταίος όρος είναι ο λεγόμενος «όρος κενού», ο οποίος μετράει το ενεργειακό κόστος προκειμένου το σύστημα να περιέλθει στην υπεραγωγήμη φάση. Ο όρος αυτός δραματίζει σημαντικό ρόλο στον υπολογισμό της θεμελιώδους κατάστασης του συστήματος, όμως δεν επηρεάζει την μελέτη μας σε αυτό το στάδιο, οπότε για την ώρα τον παραλείπουμε. Ο ρόλος του διασαφηνίζεται στο Παρ.Α' όπου και μελετάται αναλυτικά η ελεύθερη ενέργεια τέτοιων συστημάτων.

Στο σημείο αυτό ορίζουμε τις γενικευμένες παραμέτρους τάξης (ΠΤ) μέσω των εξισώσεων αυτοσυνέπειας:

$$\Delta_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_1, s_2} = - \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{s_3, s_4} V_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), -(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}'}^{s_1, s_2, s_3, s_4} \langle c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), s_3} c_{\mathbf{k}', s_4} \rangle \quad (2.4)$$

$$\Delta_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}', s_3, s_4} = - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} V_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), -(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}'}^{s_1, s_2, s_3, s_4} \langle c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger \rangle \quad (2.5)$$

και η Χαμιλτονιανή (2.3) παίρνει την μορφή:

$$\mathcal{H}_{SC} = -\frac{1}{2} \left[\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2} \Delta_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger + \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{s_3, s_4} \Delta_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}', s_3, s_4} c_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), s_3} c_{\mathbf{k}', s_4} \right] \quad (2.6)$$

Για να συνεχίσουμε την ανάλυσή μας, θα προσπαθήσουμε να συσχετίσουμε τον δεύτερο όρο στα δεξιά της παραπάνω εξίσωσης με τον πρώτο. Είναι φανερό ότι οι δυο αυτοί όροι πρέπει να συνδέονται με έναν ερμιτιανό μετασχηματισμό συνοδευόμενο από την αλλαγή από \mathbf{k} σε $-(\mathbf{k} + \mathbf{q})$.

Κάνοντας την αντικατάσταση $\mathbf{k} \rightarrow -(\mathbf{k} + \mathbf{q})$ στην Εξ.(2.4) και εκμεταλλευόμενοι τους κανόνες φερμιονικής αντιμετάθεσης που υπακούει το ενεργό δυναμικό καταλήγουμε στην σχέση: $\Delta_{-(\mathbf{k}'+\mathbf{q}), \mathbf{k}', s_3, s_4} = -\Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), \mathbf{k}, s_1, s_2}^*$. Τελικά η Εξ.(2.2) στην προσέγγιση μέσου-

πεδίου γράφεται:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SC} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2} \Delta_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_2}^\dagger \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2} \Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), \mathbf{k}, s_1, s_2}^* c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{q}), s_1} c_{\mathbf{k}, s_2} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Η Εξ.(2.7) αποτελεί την γενίκευση της θεωρίας BCS για μη-συμβατικούς υπεραγωγούς[4] ώστε να συμπεριλαμβάνονται και ζεύγη Cooper με πεπερασμένη ορμή κέντρου-μάζας. Ως έχει, το άθροισμα στα κυματάνυσματα \mathbf{q} εκτείνεται ιδανικά σε άπειρα, αντανακλώντας έτσι τις διάφορες Fourier αρμονικές στις οποίες μπορεί να αναλυθεί μια υπεραγωγίμη παράμετρος τάξης όταν αυτή είναι διαμορφωμένη στον πραγματικό χώρο.

2.1.1 Σπινორιακός Φορμαλισμός κατά Nambu

Ο στόχος μας σε αυτήν την ενότητα είναι να θέσουμε τα θεμέλια για την ταυτόχρονη περιγραφή υπεραγωγίμων καταστάσεων και συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-οπής όπως είναι π.χ. τα Κύματα Πυκνότητας Σπιν/Φορτίου. Ακόμη, επιθυμούμε να κατασκευάσουμε μια ενοποιημένη σπινორιακή θεωρία για τον σκοπό αυτό που σημαίνει ότι θέλουμε να συμπεριλάβουμε τις βασικές συμμετρίες κάτω από τις οποίες μετασχηματίζονται τα εν λόγω συμπυκνώματα. Μία από αυτές είναι η μεταφορική η οποία ουσιαστικά μας λέει πώς μεταβάλλεται μια ΠΤ σε μια μετατόπιση κατά ένα κυματάνυσμα \mathbf{q} της 1ης Ζώνης Brillouin. Είναι φανερό, ότι μια πλήρης περιγραφή της Εξ.(2.7) απαιτεί την κωδικοποίηση στον σπινόρα μας της πληροφορία για το πώς μετασχηματίζονται άπειρα τον αριθμό δυνητικά συμπυκνώματα σε μετατοπίσεις κατά έναν ισάριθμο αριθμό κυματανυσμάτων \mathbf{q} ³. Ευτυχώς, τα πιθανά κυματάνυσματα στα οποία συμφέρει ενεργειακά ένα σύστημα να επιτρέψει την συμπύκνωση ζευγών ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου ή/και ηλεκτρονίου-οπής περιορίζονται δραστικά αν λάβουμε υπόψη τις ιδιότητες της επιφάνειας Fermi. Έτσι, μπορούμε να διακρίνουμε τα βασικά κυματάνυσματα συναρμογής και να επικεντρωθούμε σε αυτά. Στην πράξη, ένα βασικό κυματάνυσμα, \mathbf{Q} , είναι αρκετό. Σε δεύτερο στάδιο, μπορεί κάποιος να μελετήσει πιθανές αποκλίσεις από το κυματάνυσμα αυτό όπως θα δούμε σε παρακάτω ενότητα.

Οι επιπλέον συμμετρίες που μας ενδιαφέρουν είναι εκτός από την μεταφορική, η συμμετρία χωρικής αντιστροφής και περιστροφής του σπιν (singlet/triplet καταστάσεις). Όπου θεωρώντας ένα κυματάνυσμα συναρμογής, \mathbf{Q} , ο αντίστοιχος ισοσπίν χώρος είναι διδιάστατος. Κάθε ένας από αυτούς τους μετασχηματισμούς συμμετρίας μπορεί να περιγραφεί ξεχωριστά σε 2×2 υπόχωρους Hillbert: $\{|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k} + \mathbf{Q}\rangle\}$, $\{|\mathbf{k}\rangle, |-\mathbf{k}\rangle\}$ και $\{|\mathbf{k} \uparrow\rangle, |\mathbf{k} \downarrow\rangle\}$ όπου οι δι-

³Στην πράξη, μια τέτοια θεωρία ίσως να είναι επιλύσιμη στον πραγματικό χώρο μέσω ενός φορμαλισμού Bogoliubov-deGennes και μόνο με αμιγώς αριθμητικές μεθόδους

2.1 Υπεραγωγήμα συμπυκνώματα

διάστατοι σπίνορες που δρουν σε κάθε υπόχωρο είναι οι: $\psi_t^\dagger = (c_{\mathbf{k}}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger)$, $\psi_I^\dagger = (c_{\mathbf{k}}^\dagger, c_{-\mathbf{k}})$ και $\psi_s^\dagger = (c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger)$ αντιστοίχως. Μια βολική βάση για κάθε υπόχωρο μπορεί να οριστεί μέσω των πινάκων Pauli τους οποίους συμβολίζουμε ως: $\hat{\tau}_i, \hat{\rho}_i$ ανδ $\hat{\sigma}_i$, για κάθε υπόχωρο αντίστοιχα. Μπορούμε να ενώσουμε τους τρεις αυτούς χώρους σε έναν παίρνοντας το εξωτερικό γινόμενο μεταξύ τους, όπου τελικά καταλήγουμε σε έναν οκταδιάστατο χώρο:

$$\mathcal{C} = \{|\mathbf{k}, \uparrow\rangle, |\mathbf{k}, \downarrow\rangle, |-\mathbf{k}, \uparrow\rangle, |-\mathbf{k}, \downarrow\rangle, |\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \uparrow\rangle, |\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \downarrow\rangle, |-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}), \uparrow\rangle, |-(\mathbf{k} + \mathbf{Q}), \downarrow\rangle\}$$

όπου ο αντίστοιχος 8-διάστατος σπίνορας έχει την μορφή:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \left(c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger, c_{-\mathbf{k},\uparrow}, c_{-\mathbf{k},\downarrow}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^\dagger, c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow}, c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow} \right) \quad (2.8)$$

με βάση που δίνεται από τα γινόμενα: $\hat{a}_i = \hat{\tau}_i \otimes \hat{\rho}_i \otimes \hat{\sigma}_i$.

Ιστορικά, ο πρώτος που εισήγαγε παρόμοιο φορμαλισμό ήταν ο Nambu στην μελέτη του για τις ηλεκτροδυναμικές ιδιότητες της συμβατικής υπεραγωγιμότητας[31]. Έκτοτε, ο λεγόμενος φορμαλισμός Nambu αποτελεί μια πρότυπη τεχνική στον χώρο της υπεραγωγιμότητας κυρίως λόγω της απλότητας με την οποία επιτρέπει τον χειρισμό των σύνθετων εξισώσεων που προκύπτουν σε τέτοιου είδους προβλήματα. Ο σπίνορας δε της Εξ.(2.8) εισήχθη για πρώτη φορά για την μελέτη των σιδηρομαγνητικών υπεραγωγών από τους Nass-Levin [32] και Psaltakis-Fenton [24].

Επιστρέφοντας τώρα στην ανάλυσή μας, κρατώντας μόνο τους όρους με $\mathbf{q} = 0$ και $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ από το \mathbf{q} -άθροισμα, η Εξ.(2.7) γίνεται:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SC} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} \left(\Delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-\mathbf{k}, s_2}^\dagger - \Delta_{-\mathbf{k}, \mathbf{k}, s_1, s_2}^* c_{-\mathbf{k}, s_1} c_{\mathbf{k}, s_2} \right. \\ & \left. + \Delta_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q}), s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}), s_2}^\dagger - \Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}), \mathbf{k}, s_1, s_2}^* c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}), s_1} c_{\mathbf{k}, s_2} \right) \end{aligned}$$

και, γράφοντας τα αθροίσματα στα σπιν αναλυτικά:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{SC} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\uparrow,\uparrow} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger - \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\uparrow,\uparrow}^* c_{-\mathbf{k},\uparrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right. \\
 & + \Delta_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow,\uparrow} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow}^\dagger - \Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\mathbf{k},\uparrow,\uparrow}^* c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\
 & \quad + \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\downarrow,\downarrow} c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\downarrow,\downarrow}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\downarrow} \\
 & + \Delta_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow,\downarrow} c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}^\dagger - \Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\mathbf{k},\downarrow,\downarrow}^* c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow} c_{\mathbf{k},\downarrow} \\
 & \quad + \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\uparrow,\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\downarrow}^\dagger - \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\uparrow,\downarrow}^* c_{-\mathbf{k},\uparrow} c_{\mathbf{k},\downarrow} \\
 & + \Delta_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow,\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow}^\dagger - \Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\mathbf{k},\uparrow,\downarrow}^* c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow} c_{\mathbf{k},\downarrow} \\
 & \quad + \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\downarrow,\uparrow} c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k},\uparrow}^\dagger - \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\downarrow,\uparrow}^* c_{-\mathbf{k},\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \\
 & \left. + \Delta_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow,\uparrow} c_{\mathbf{k},\downarrow}^\dagger c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\uparrow}^\dagger - \Delta_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\mathbf{k},\downarrow,\uparrow}^* c_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\downarrow} c_{\mathbf{k},\uparrow} \right)
 \end{aligned}$$

Εισάγοντας τώρα τον σπινόρα: ψ_s^\dagger η παραπάνω γράφεται:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_{SC} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(\psi_{s\mathbf{k}}^\dagger \hat{\Delta}_{s\mathbf{k},-\mathbf{k}} \psi_{s-\mathbf{k}}^\dagger - \psi_{s-\mathbf{k}} \hat{\Delta}_{s-\mathbf{k},\mathbf{k}}^* \psi_{s\mathbf{k}} \right. \\
 & \left. + \psi_{s\mathbf{k}}^\dagger \hat{\Delta}_{s\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \psi_{s-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^\dagger - \psi_{s-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \hat{\Delta}_{s-(\mathbf{k}+\mathbf{Q}),\mathbf{k}}^* \psi_{s\mathbf{k}} \right) \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

όπου έχουμε ορίσει τους πίνακες:

$$\hat{\Delta}_{s\mathbf{k},-\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\uparrow\uparrow} & \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\downarrow\uparrow} & \Delta_{\mathbf{k},-\mathbf{k},\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta}_{s-\mathbf{k},\mathbf{k}}^* = \begin{pmatrix} \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\uparrow\uparrow}^* & \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\uparrow\downarrow}^* \\ \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\downarrow\uparrow}^* & \Delta_{-\mathbf{k},\mathbf{k},\downarrow\downarrow}^* \end{pmatrix}$$

και τους αντίστοιχους με $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$.

Ακολουθώντας την πιο διαδεδομένη τακτική, μπορούμε να διαχωρίσουμε τον γενικό πίνακα $\hat{\Delta}_s$ (όπου επικεντρωνόμαστε μόνο στους δείκτες σπιν για την ώρα), σε σπιν singlet και σπιν triplet μέρη κάνοντας χρήση του λεγόμενου διανυσματικού φορμαλισμού (vector notation)[33, 5]:

$$\begin{aligned}
 \hat{\Delta}_s &= \hat{\Delta}_{singlet} + \hat{\Delta}_{triplet} \\
 \hat{\Delta}_{singlet} &= id_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_2, \quad \hat{\Delta}_{triplet} = i(\vec{\mathbf{d}}_{\mathbf{k}} \vec{\sigma}) \hat{\sigma}_2
 \end{aligned}$$

Το στοιχείο $\vec{\mathbf{d}}_{\mathbf{k}}$ είναι ένα διάνυσμα στον χώρο των ψευδοσπιν το οποίο συμβολίζει την τιμή και την πόλωση ενός triplet υπεραγωγού, ενώ το $d_{\mathbf{k}}$ είναι η τιμή ενός singlet υπεραγωγού και είναι βαθμωτό μέγεθος. Η ονομασία του χώρου που δρα το $\vec{\mathbf{d}}_{\mathbf{k}}$ ως ψευδοσπιν δικαιολογείται αν προσέξει κανείς ότι ο τελεστής σπιν πολλαπλασιάζεται με ένα $\hat{\sigma}_2$ πίνακα: $\vec{\sigma} \hat{\sigma}_2$.

2.1 Υπεραγωγήμα συμπυκνώματα

Σύμφωνα με τα παραπάνω τελικά έχουμε:

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

Αναλύοντας κάθε παράμετρο τάξης σε πραγματικό και φανταστικό κομμάτι:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{singlet} &= i\hat{\sigma}_2(\Re\{d\} + i\Im\{d\}) = i\hat{\sigma}_2d^{Re} - \hat{\sigma}_2d^{Im} \\ \hat{\Delta}_{triplet} &= -d_x^{Re}\hat{\sigma}_3 - id_x^{Im}\hat{\sigma}_3 + id_y^{Re}\hat{\sigma}_0 - d_y^{Im}\hat{\sigma}_0 + d_z^{Re}\hat{\sigma}_1 + id_z^{Im}\hat{\sigma}_1 \end{aligned} \quad (2.10)$$

Με τον ίδιο τρόπο, όπως προηγουμένως, μπορούμε να αναλύσουμε την Εξ.(2.9) σε \mathbf{k} και $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$ μέρη και να εισάγουμε τον σπίνορα: $\psi_{s_{\mathbf{k}t}}^\dagger = (\psi_{s_{\mathbf{k}}}^\dagger, \psi_{s_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}^\dagger)$, παίρνοντας τελικά:

$$\mathcal{H}_{SC} = - \sum_{\mathbf{k}} \left(\psi_{s_{\mathbf{k}t}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k}} \psi_{s_{-\mathbf{k}t}}^\dagger - \psi_{s_{-\mathbf{k}t}} \hat{D}_{-\mathbf{k}}^* \psi_{s_{\mathbf{k}t}} \right) \quad (2.11)$$

όπου εισάγαμε τους πίνακες:

$$\hat{D}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}} & \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \\ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}},-\mathbf{k}} & \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \end{pmatrix} \quad , \quad \hat{D}_{-\mathbf{k}}^* = \begin{pmatrix} \hat{\Delta}_{s_{-\mathbf{k}},\mathbf{k}}^* & \hat{\Delta}_{s_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})},\mathbf{k}}^* \\ \hat{\Delta}_{s_{-\mathbf{k}},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* & \hat{\Delta}_{s_{-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^* \end{pmatrix}$$

Χρησιμοποιώντας τον τελεστή μεταφοράς $t_{\mathbf{Q}}$, ο $\hat{D}_{\mathbf{k}}$ γράφεται:

$$\hat{D}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}} & \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} \\ t_{\mathbf{Q}}\hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})} & t_{\mathbf{Q}}\hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}} \end{pmatrix}$$

και αναλύοντας τον παραπάνω σε άρτιες και περιττές ως προς την μεταφορά παραμέτρους τάξης:

$$\begin{aligned} \hat{D}_{\mathbf{k}} &= \begin{pmatrix} \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}}^{t+} + \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}}^{t-} & \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+} + \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-} \\ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+} - \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-} & \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}}^{t+} - \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}}^{t-} \end{pmatrix} \\ &= \hat{\tau}_0 \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}}^{t+} + \hat{\tau}_3 \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-\mathbf{k}}^{t-} + \hat{\tau}_1 \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+} + i\hat{\tau}_2 \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-} \end{aligned} \quad (2.12)$$

όπου θέτουμε: $\hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^-$ φανταστικό: $i\hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^-$, έτσι ώστε να απορροφήσουμε τον όρο i .

Τέλος, με τον ίδιο τρόπο, εισάγουμε και τον σπίνορα $\psi_{s_{\mathbf{k}I}}^\dagger = (\psi_{s_{\mathbf{k}}}^\dagger, \psi_{s_{-\mathbf{k}}}^\dagger)$ στην Εξ.(2.11):

$$\mathcal{H}_{SC} = - \sum_{\mathbf{k}} \psi_{s_{\mathbf{k}I}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k}I} \psi_{s_{\mathbf{k}I}} \quad (2.13)$$

με $\hat{D}_{\mathbf{k}_I} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{D}_{\mathbf{k}} \\ -\hat{D}_{-\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}$. Επιβάλλοντας την ανάγκη η Χαμιλτονιανή μας να είναι ερμιτιανή, παίρνουμε τις σχέσεις:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{SC} = \mathcal{H}_{SC}^\dagger &\Rightarrow \hat{D}_{\mathbf{k}_I} = \hat{D}_{\mathbf{k}_I}^\dagger \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \hat{D}_{\mathbf{k}} \\ -\hat{D}_{-\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{D}_{-\mathbf{k}}^T \\ \hat{D}_{\mathbf{k}}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow \hat{D}_{\mathbf{k}} = -\hat{D}_{-\mathbf{k}}^T \Rightarrow \hat{D}_{\mathbf{k}_I} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{D}_{\mathbf{k}} \\ \hat{D}_{\mathbf{k}}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

και χρησιμοποιώντας τον τελεστή αντιστροφής \mathcal{I} , παίρνουμε την σχέση:

$$\hat{D}_{\mathbf{k}} = -\hat{D}_{-\mathbf{k}}^T = -\mathcal{I}\hat{D}_{\mathbf{k}}^T \quad (2.14)$$

Βλέπουμε ότι, αν $\hat{D}_{\mathbf{k}}^T = \hat{D}_{\mathbf{k}}$, τότε $\mathcal{I}\hat{D}_{\mathbf{k}} = -\hat{D}_{\mathbf{k}}$ και ο $\hat{D}_{\mathbf{k}}$ είναι περιττός στην αντιστροφή του χώρου. Αναλύοντας σε πραγματικά/φανταστικά μέρη και εκμεταλλευόμενοι τις παραπάνω σχέσεις, έχουμε για το περιττό κομμάτι:

$$\hat{D}_{\mathbf{k}_I} = \Re \left\{ \hat{D}_{\mathbf{k}}^{I-} \right\} \hat{\rho}_1 - \Im \left\{ \hat{D}_{\mathbf{k}}^{I-} \right\} \hat{\rho}_2 \quad (2.15)$$

Κατ' αντιστοιχία, αν $\hat{D}_{\mathbf{k}}^T = -\hat{D}_{\mathbf{k}}$, τότε $\mathcal{I}\hat{D}_{\mathbf{k}} = \hat{D}_{\mathbf{k}}$ και ο $\hat{D}_{\mathbf{k}}$ είναι άρτιος στην χωρική αντιστροφή:

$$\hat{D}_{\mathbf{k}_I} = i\Re \left\{ \hat{D}_{\mathbf{k}}^{I+} \right\} \hat{\rho}_2 + i\Im \left\{ \hat{D}_{\mathbf{k}}^{I+} \right\} \hat{\rho}_1 \quad (2.16)$$

2.1.2 Κατηγοριοποίηση υπεραγωγίων συμπυκνωμάτων

Η μέχρι τώρα ανάλυσή μας, μας έχει οδηγήσει να γράψουμε την Εξ.(2.7) στην πιο ελκυστική μορφή:

$$\mathcal{H}_{SC} = - \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (2.17)$$

όπου όλη η πληροφορία των πιθανών υπεραγωγίων παραμέτρων τάξης είναι κωδικοποιημένη στον 8×8 πίνακα $\hat{D}_{\mathbf{k}}$. Στο σημείο αυτό, κάνοντας χρήση των ορισμών και των σχέσεων που εξήχθησαν στην προηγούμενη παράγραφο είμαστε πλέον σε θέση να κατηγοριοποιήσουμε όλες αυτές τις καταστάσεις καθώς θα αναλύουμε τον $\hat{D}_{\mathbf{k}}$ ως γραμμικό συνδυασμό αυτών στην βάση $\hat{\tau}_i \otimes \hat{\rho}_i \otimes \hat{\sigma}_i$.

Για τους μετασχηματισμούς μεταφορικής συμμετρίας, είδαμε ότι ο πίνακας $\hat{D}_{\mathbf{k}}$ αναλύεται

2.1 Υπεραγωγήματα συμπυκνώματα

ως:

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

Καταστάσεις άρτιες στην χωρική αντιστροφή

Στην περίπτωση αυτή έχουμε:

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

άρα:

$$\begin{aligned} \hat{D}_{\mathbf{k}_I} = & i\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -\mathbf{k}}^{t+I+} \right\} + i\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -\mathbf{k}}^{t-I+} \right\} + i\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+I+} \right\} - \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\} \\ & + i\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -\mathbf{k}}^{t+I+} \right\} + i\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -\mathbf{k}}^{t-I+} \right\} + i\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+I+} \right\} - \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\} \end{aligned}$$

Εισάγοντας τους σπιν βαθμούς ελευθερίας:

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

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

καταλήγουμε τελικά στις εξής πιθανές καταστάσεις και τις αναπαραστάσεις τους στη νέα βάση:

$$\Delta_+^{Re} = -\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}}^{t+I+} \right\} \quad , \quad i\Delta_+^{Im} = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_2 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -\mathbf{k}}^{t+I+} \right\} \quad (2.18)$$

$$\Delta_-^{Re} = -\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}}^{t-I+} \right\} \quad , \quad i\Delta_-^{Im} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_2 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -\mathbf{k}}^{t-I+} \right\} \quad (2.19)$$

$$h^{Re} = -\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{\mathbf{k}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+I+} \right\} \quad , \quad ih^{Im} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_2 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t+I+} \right\} \quad (2.20)$$

$$\Pi_x^{Re} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_3 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\}_x \quad , \quad \Pi_x^{Im} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\}_x \quad (2.21)$$

$$\Pi_y^{Re} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_0 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\}_y \quad , \quad \Pi_y^{Im} = -\hat{\tau}_2 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_0 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\}_y \quad (2.22)$$

$$\Pi_z^{Re} = -\hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_1 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\}_z \quad , \quad \Pi_z^{Im} = -\hat{\tau}_2 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, -(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}^{t-I+} \right\}_z \quad (2.23)$$

Με $\Delta_{-(+)}$ συμβολίζονται οι singlet παράμετροι τάξης οι οποίες (δεν) αλλάζουν πρόσημο κατά μετακινήσεις κατά \mathbf{Q} στην 1η Ζώνη Brillouin και το ζεύγος Cooper έχει συνολική ορμή μηδέν. Έτσι, για παράδειγμα, σε ένα τετραγωνικό σύστημα στους πιθανούς παράγοντες δομής για τα Δ_+ συγκαταλέγονται οι $f_s = 1$ και $f_{d_{xy}} = \sin k_x \sin k_y$, ενώ για Δ_- επιτρέπονται οι $f_{d_{x^2-y^2}} = \cos k_x - \cos k_y$ και $f_{s_{\pm}} = \cos k_x + \cos k_y$.

Τα συμπυκνώματα στα οποία το ζεύγος Cooper έχει πεπερασμένη συνολική ορμή ίση με

\mathbf{Q} συνήθως συμβολίζονται με η, Π για singlet και triplet καταστάσεις, αντίστοιχα, ενώ στο σύνολό τους αναφέρονται συχνά ως staggered υπεραγωγίμες καταστάσεις. Στον διαχωρισμό αυτόν, έχουμε λάβει υπόψη ότι η αντισυμμετρικότητα του ζεύγους Cooper επιβάλλει σε ένα staggered ζεύγος ηλεκτρονίων που είναι περιττό στην μεταφορική συμμετρία να έχει τα σπιν του σε triplet διάταξη.

Καταστάσεις περιττές στην χωρική αντιστροφή

Ακολουθώντας τα ίδια βήματα με παραπάνω για τις αντίστοιχες καταστάσεις που σπάνε την συμμετρία αντιστροφής του χώρου έχουμε τελικά:

$$\Delta_{+,tr_x}^{Re} = -\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t+I-} \right\}_x, \quad \Delta_{+,tr_x}^{Im} = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_3 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t+I-} \right\}_x \quad (2.24)$$

$$\Delta_{+,tr_y}^{Re} = -\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_0 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t+I-} \right\}_y, \quad \Delta_{+,tr_y}^{Im} = -\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_0 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t+I-} \right\}_y \quad (2.25)$$

$$\Delta_{+,tr_z}^{Re} = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_1 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t+I-} \right\}_z, \quad \Delta_{+,tr_z}^{Im} = -\hat{\tau}_0 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t+I-} \right\}_z \quad (2.26)$$

$$\Delta_{-,tr_x}^{Re} = -\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t-I-} \right\}_x, \quad \Delta_{-,tr_x}^{Im} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_3 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t-I-} \right\}_x \quad (2.27)$$

$$\Delta_{-,tr_y}^{Re} = -\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_0 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t-I-} \right\}_y, \quad \Delta_{-,tr_y}^{Im} = -\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_0 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t-I-} \right\}_y \quad (2.28)$$

$$\Delta_{-,tr_z}^{Re} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_1 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t-I-} \right\}_z, \quad \Delta_{-,tr_z}^{Im} = -\hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}}^{t-I-} \right\}_z \quad (2.29)$$

$$\Pi_{odd,x}^{Re} = -\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t+I-} \right\}_x, \quad \Pi_{odd,x}^{Im} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_3 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t+I-} \right\}_x \quad (2.30)$$

$$\Pi_{odd,y}^{Re} = -\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_0 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t+I-} \right\}_y, \quad \Pi_{odd,y}^{Im} = -\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_0 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t+I-} \right\}_y \quad (2.31)$$

$$\Pi_{odd,z}^{Re} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_1 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t+I-} \right\}_z, \quad \Pi_{odd,z}^{Im} = -\hat{\tau}_1 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_1 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t+I-} \right\}_z \quad (2.32)$$

$$h_{odd}^{Re} = -\hat{\tau}_2 \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_2 \Re \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t-I-} \right\}, \quad ih_{odd}^{Im} = -\hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 \Im \left\{ \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},-(\mathbf{k}+\mathbf{Q})}}^{t-I-} \right\} \quad (2.33)$$

όπου ο συμβολισμός είναι παρόμοιος με τα προηγούμενα.

2.2 Συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής

Στην περίπτωση των συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-οπής η γενικευμένη ενεργός Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\mathcal{H}_{DW} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2, s_3, s_4} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^{s_1, s_3, s_2, s_4} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s_3}^\dagger c_{\mathbf{k}', s_4} \quad (2.34)$$

όπου στην περίπτωση αυτή το ενεργό δυναμικό αλληλεπίδρασης $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^{s_1, s_3, s_2, s_4}$ αντιστοιχεί στο στοιχείο του πίνακα: $\langle \mathbf{k}, s_1; (\mathbf{k} + \mathbf{q}), s_2 | \widehat{V} | \mathbf{k}', s_4; (\mathbf{k}' + \mathbf{q}), s_3 \rangle$. Η διαδικασία αποσύζευξης μέσω της προσέγγισης Μέσου-Πεδίου είναι σχεδόν ίδια με όσα αναφέραμε για την περίπτωση της υπεραγωγιμότητας στην προηγούμενη ενότητα. Οι γενικευμένες παράμετροι τάξης στην περίπτωση αυτή είναι της μορφής:

$$\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, s_1, s_2} = - \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{s_3, s_4} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^{s_1, s_3, s_2, s_4} \langle c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, s_3}^\dagger c_{\mathbf{k}', s_4} \rangle \quad (2.35)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}', s_3, s_4} = - \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{q}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}'}^{s_1, s_3, s_2, s_4} \langle c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s_2} \rangle \quad (2.36)$$

και η γενικευμένη Χαμιλτονιανή Μέσου-Πεδίου στην οποία καταλήγουμε έχει ως εξής:

$$\mathcal{H}_{DW} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2} \left(\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s_2} + \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}, s_2} \right) \quad (2.37)$$

όπου έχουμε παραλείψει τους όρους κενού, όπως και στην ενότητα 2.1.

Η Εξ.(2.37) μπορεί να περιγράψει σιδηρομαγνητικές παραμέτρους τάξης για $\mathbf{q} = 0$ και Κύματα Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν για $\mathbf{q} \neq 0$ όπου τα ΚΠ μπορούν να είναι σύμμετρα ή ασύμμετρα.

2.2.1 Σπινორιακός φορμαλισμός

Προκειμένου να καταλήξουμε σε έναν ενοποιημένο φορμαλισμό για την περιγραφή των συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και ηλεκτρονίου-οπής, θα χρησιμοποιήσουμε τον ίδιο σπινόρα με την ενότητα 2.1 για να γράψουμε την Εξ.(2.37) σε μορφή πινάκων. Η επιλογή ενός βασικού κυματανύσματος \mathbf{Q} , το οποίο είναι και διάνυσμα συναρμογής, στην συγκεκριμένη περίπτωση είναι πιο προφανής, αφού περιμένουμε μία αστάθεια τύπου ΚΠ να είναι κυρίαρχη πρωτίστως σε αυτό το κυματόνυσμα. Έτσι η ενεργός Χαμιλτονιανή την οποία θα

μελετήσουμε είναι της μορφής:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{DW} = & -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{s_1, s_2} \left(\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}, s_2} + \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}, s_2} \right) \\ & + \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s_2} + \Delta_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, \mathbf{k}, s_1, s_2} c_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k}, s_2} \end{aligned} \quad (2.38)$$

Αναπτύσσοντάς την ως προς το άθροισμα στα σπιν και εισάγοντας τον σπινόρα ψ_s^\dagger αυτή γράφεται ως:

$$\mathcal{H}_{DW} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left(2\psi_{s_{\mathbf{k}}}^\dagger \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, \mathbf{k}} \psi_{s_{\mathbf{k}}} + \psi_{s_{\mathbf{k}}}^\dagger \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, \mathbf{k} + \mathbf{Q}} \psi_{s_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}}} + \psi_{s_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}}}^\dagger \hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k} + \mathbf{Q}}, \mathbf{k}} \psi_{s_{\mathbf{k}}} \right) \quad (2.39)$$

όπου έχουμε ορίσει τους πίνακες:

$$\hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k}}, \mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \uparrow\uparrow} & \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \downarrow\uparrow} & \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \downarrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

και τους αντίστοιχους για $\mathbf{k} + \mathbf{Q}$.

Στο σημείο αυτό, είναι σχότιμο να θυμηθούμε την έκφραση για την μέση τιμή του τελεστή σπιν στην γλώσσα της δεύτερης κβάντωσης[34]:

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2} \langle \mathbf{k}, s_1 | \hat{s} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_2 \rangle \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_1, s_2}$$

όπου $\hat{s} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_1 \hat{x} + \hat{\sigma}_2 \hat{y} + \hat{\sigma}_3 \hat{z})$ και έχουμε αντικαταστήσει την έκφραση $\langle c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s_2} \rangle$ με την γενικευμένη παράμετρο τάξης $\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_1, s_2}$ ⁴. Περαιτέρω πράξεις οδηγούν στην εξίσωση⁵:

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \left\{ (\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\uparrow\downarrow} + \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\downarrow\uparrow}) \hat{x} + (\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\uparrow\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\downarrow\uparrow}) \hat{y} \right. \quad (2.40)$$

$$\left. + (\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\uparrow\uparrow} - \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\downarrow\downarrow}) \hat{z} \right\} \quad (2.41)$$

ενώ για $S = 0$ καταστάσεις, παίρνουμε κατ' αντιστοιχία:

$$\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_s e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \delta_{s, s} \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_1, s_2} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} (\Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\uparrow\uparrow} + \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}\downarrow\downarrow}) = \langle \rho(\mathbf{r}) \rangle \quad (2.42)$$

όπου $\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle$ δεν είναι τίποτα άλλο από την μέση τιμή της πυκνότητας φορτίου. Η μικρή αυτή

⁴Όπως έχουμε ήδη πει, η μέση τιμή $\langle c_{\mathbf{k}, s_1}^\dagger c_{\mathbf{k} + \mathbf{q}, s_2} \rangle$ αποτελεί τον ορισμό της παραμέτρου τάξης για ένα πρόβλημα συμπύκνωσης. Υπό αυτό το πρίσμα οι Εξ.(2.35-2.36) δεν είναι τίποτα άλλο παρά εξισώσεις αυτοσυνέπειας.

⁵Θεωρώντας ηλεκτρόνια Bloch έχουμε: $\langle \mathbf{S}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1, s_2} \langle \mathbf{k}, s_1 | \hat{s} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_2 \rangle \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_1, s_2} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{s_1} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} (\delta_{-s_1, s_1} \hat{x} - i s_1 \delta_{-s_1, s_1} \hat{y} + s_1 \delta_{s_1, s_1} \hat{z}) \Delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, s_1, s_2}$

παρένθεση είναι πολύ χρήσιμη στην αποσαφήνιση της φυσικής πίσω από τα συμπυκνώματα ηλεκτρονίου-οπής: Εάν στην Εξ.(2.40) θεωρήσουμε ότι μόνο ο συντελεστής Fourier για $\mathbf{q} = 0$ είναι μη μηδενικός, τότε καταλήγουμε στο γνωστό αποτέλεσμα ότι η μέση τιμή της πυκνότητας σπιν σε έναν σιδηρομαγνήτη είναι πεπερασμένη και ομοιογενής μέσα στο υλικό. Εάν στην ίδια εξίσωση θεωρήσουμε ότι μόνο ο $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ συντελεστής είναι πεπερασμένος, τότε οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι η μέση πυκνότητα σπιν είναι διαμορφωμένη στον χώρο κατά \mathbf{Q} , με αποτέλεσμα το υλικό να είναι αντισιδηρομαγνήτης. Στην τελευταία περίπτωση το συμπύκνωμα λέγεται Κύμα Πυκνότητας Σπιν. Αντίστοιχα, από την Εξ.(2.42) για μοναδικό κυματόνυσμα μη μηδενικό το \mathbf{Q} , η πυκνότητα φορτίου είναι αυτή που είναι διαμορφωμένη στον χώρο και $\Delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow}, \Delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow}$ είναι οι παράμετροι τάξης για συμπύκνωση σε Κύμα Πυκνότητας Φορτίου.

Μετά τις παραπάνω διασαφήνισεις, επιστρέφουμε στην ανάλυση του πίνακα $\hat{\Delta}_{s_{\mathbf{k},\mathbf{k}}}$ σε σπιν singlet και σπιν triplet όρους: $\hat{\Delta}_s = \hat{\Delta}_{singlet} + \hat{\Delta}_{triplet}$, οι οποίοι, σε έναν ψευδο-διανυσματικό φορμαλισμό (σε αναλογία με την περίπτωση της υπεραγωγιμότητας) μπορούν τελικά να γραφτούν ως:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{singlet} &= \Delta_{singlet} \hat{\sigma}_0, & \hat{\Delta}_{triplet} &= \Delta_{triplet}^x \hat{\sigma}_1 + \Delta_{triplet}^y i \hat{\sigma}_2 + \Delta_{triplet}^z \hat{\sigma}_3 \\ \hat{\Delta}_{singlet} &= d \hat{\sigma}_0, & \hat{\Delta}_{triplet} &= d_x \hat{\sigma}_1 + d_y \hat{\sigma}_2 + d_z \hat{\sigma}_3 \end{aligned} \quad (2.43)$$

όπου θέσαμε $dy = i \Delta_{triplet}^y$ έτσι ώστε να διασφαλίσουμε την ερμιτιανή ιδιότητα της αρχικής Χαμιλτονιανής. Παρατηρούμε, ότι στην περίπτωση των συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-οπής, η πόλωση του σπιν των διάφορων παραμέτρων τάξης συμπίπτει με την πόλωση του ψευδο-διανύσματος d , σε αντίθεση με ότι συμβαίνει στην περίπτωση της υπεραγωγιμότητας.

Η υπόλοιπη ανάλυση ακολουθεί τα ίδια βήματα με αυτά της ενότητας 2.1, οπότε είναι σκόπιμο να παραθέσουμε κατευθείαν τα αποτελέσματα της κατηγοριοποίησης.

2.2.2 Κατηγοριοποίηση συμπυκνωμάτων ηλεκτρονίου-οπής

Καταστάσεις άρτιες στην χωρική αντιστροφή

$$P_+ = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-}, \quad P_- = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+} \quad (2.44)$$

$$W_{CDW} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad W_{OAF} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.45)$$

$$F_x = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+}, \quad A_x = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.46)$$

$$F_y = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+}, \quad A_y = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.47)$$

$$F_z = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+}, \quad A_z = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.48)$$

$$M_x = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad J_x = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.49)$$

$$M_y = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad J_y = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.50)$$

$$M_z = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad J_z = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.51)$$

Όπου με F_i, M_i συμβολίζονται οι σιδηρομαγνητικές και αντισιδηρομαγνητικές (Κύμα Πυκνότητας Σπιν) παράμετροι τάξης, με A_i, J_i οι λεγόμενες σπιν-νηματικές καταστάσεις οι οποίες περιλαμβάνουν την σπιν-Pomeranchuk [35] και το μη-συμβατικό κύμα πυκνότητας σπιν[65, 37] αντίστοιχα. Ο δείκτης i υποδηλώνει την πόλωση των σπιν του ζεύγους. Στις σπιν singlet καταστάσεις, διακρίνουμε το συμβατικό κύμα πυκνότητας φορτίου (W_{CDW}) και το μη συμβατικό (W_{OAF}). Το τελευταίο συναντάται και με την ονομασία τροχιακός αντισιδηρομαγνήτης[65, 37]. Τέλος, οι P_+ και P_- αποτελούν ηλεκτρονιακές νηματικές καταστάσεις τάξης ή καταστάσεις Pomeranchuk-φορτίου.

Οφείλουμε να σημειώσουμε εδώ ότι εφόσον δουλεύουμε με ηλεκτρόνια μπάντας⁶ (ή απεντοπισμένα ηλεκτρόνια), οι παραπάνω καταστάσεις προέρχονται από αλληλεπιδράσεις μεταξύ αυτών των ηλεκτρονίων και δεν θα πρέπει να συγχέονται με αντίστοιχα φαινόμενα που παρουσιάζονται σε συστήματα όπου τα ηλεκτρόνια θεωρούνται εντοπισμένα. Π.χ. ο σιδηρομαγνητισμός στην περίπτωση που εξετάζουμε είναι τύπου Stoner και όχι τύπου Heisenberg.

⁶Ίσως ο όρος «ηλεκτρόνια ζώνης» να είναι πιο δόκιμος, εφόσον τα ηλεκτρόνια αυτά βρίσκονται σε μια ενεργειακή ζώνη του υλικού. Στο υπόλοιπο της διατριβής χρησιμοποιούμε και τις δυο ονομασίες, οι οποίες όμως έχουν το ίδιο φυσικό νόημα.

Καταστάσεις περιπτές στην χωρική αντιστροφή

Για πληρότητα, παραθέτουμε και τις πιθανές καταστάσεις που σπάνε την συμμετρία αντιστροφής:

$$\gamma^{odd} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.52)$$

$$W_{CDW}^{odd} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad W_{OAF}^{odd} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_0 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.53)$$

$$F_x^{odd} = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+}, \quad A_x^{odd} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.54)$$

$$F_y^{odd} = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+}, \quad A_y^{odd} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.55)$$

$$F_z^{odd} = \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t+}, \quad A_z^{odd} = \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}}^{t-} \quad (2.56)$$

$$M_x^{odd} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad J_x^{odd} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.57)$$

$$M_y^{odd} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad J_y^{odd} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_2 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.58)$$

$$M_z^{odd} = \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_0 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t+}, \quad J_z^{odd} = \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{\Delta}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^{t-} \quad (2.59)$$

όπου ο συμβολισμός είναι σε πλήρη αντιστοιχία με τα προηγούμενα.

2.3 Σπινωριακή μορφή της κανονικής κατάστασης

Θεωρώντας ότι η επιφάνεια Fermi ενός υλικού με ηλεκτρονιακή διασπορά $\xi(\mathbf{k})$ διαθέτει ένα κυματόνισμα τέλειας συναρμογής \mathbf{Q} τέτοιο ώστε $\mathbf{k} + 2\mathbf{Q} \rightarrow \mathbf{k}$, μπορούμε να αναλύσουμε την $\xi(\mathbf{k})$ σε περιοδικό ($\delta_{\mathbf{k}}$) και αντιπεριοδικό ($\gamma_{\mathbf{k}}$) μέρος, όσον αφορά τις μετακινήσεις κατά \mathbf{Q} στην 1η Ζώνη Brillouin. Έτσι, η ελεύθερη Χαμιλτονιανή για ένα τέτοιο σύστημα μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\gamma_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}}) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma} \quad (2.60)$$

όπου οι όροι αυτοί έχουν τις ιδιότητες:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = -\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}, \quad \gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}}, \quad 2\gamma_{\mathbf{k}} = \xi(\mathbf{k}) - \xi(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \quad (2.61)$$

$$\delta_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}, \quad \delta_{\mathbf{k}} = \delta_{-\mathbf{k}}, \quad 2\delta_{\mathbf{k}} = \xi(\mathbf{k}) + \xi(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) \quad (2.62)$$

Συγκρίνοντας τις Εξ.(2.61-2.62) με την Εξ.(2.44), μπορούμε αμέσως να δούμε ότι στον σπινωριακό φορμαλισμό που εισήχθη προηγουμένως, η Εξ.(2.60) τελικά γράφεται:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \left(\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 \right) \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{E}_0 \Psi_{\mathbf{k}} \quad (2.63)$$

Ανάλογα συμπεράσματα μπορούν να εξαχθούν και για την Χαμιλτονιανή αλληλεπίδρασης των ηλεκτρονίων με ένα μαγνητικό πεδίο τύπου Zeeman:

$$H_Z = -\mu_B H \sum_{\mathbf{k},s_1,s_2} (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{n})_{s_1,s_2} \left(c_{\mathbf{k},s_1}^\dagger c_{\mathbf{k},s_2} + h.c. \right) \quad (2.64)$$

όπου, \mathbf{n} είναι η πόλωση του μαγνητικού πεδίου. Εύκολα μπορεί κάποιος να δείξει ότι η H_Z έχει την ίδια αναπαράσταση σε σπινωριακή μορφή με τις σιδηρομαγνητικές παραμέτρους τάξης F_i των Εξ.(2.46-2.48), πράγμα αναμενόμενο αν αναλογιστεί κανείς ότι και η μαγνήτιση ουσιαστικά δρα σαν ένα εσωτερικό μαγνητικό πεδίο μέσα στο υλικό.

Κεφάλαιο 3

Συναρτήσεις Green και παρατηρήσιμα μεγέθη

3.1 Η συνάρτηση Green σε μορφή πίνακα

Στις προηγούμενες ενότητες, είδαμε πως με την εισαγωγή του κατάλληλου σπινόρα η Εξ.(2.1) μπορεί να γραφτεί ως:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{E}_0 \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{D}_0^{SC} \Psi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{D}_0^{DW} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \quad (3.1)$$

όπου ο πίνακας $\hat{E}_{\mathbf{k}}$ περιέχει όλη την πληροφορία του αλληλεπιδρώντος συστήματος και είναι ένα άθροισμα της αναπαράστασης όλων των πιθανών παραμέτρων τάξης στην βάση που ορίζεται από γινόμενα πινάκων Pauli. Η Εξ.(3.1) έχει παρόμοια μορφή με αυτήν της ελεύθερης Χαμιλτονιανής της Εξ.(2.60). Κατ' αντιστοιχία λοιπόν με το ελεύθερο σύστημα, μπορούμε αμέσως να γράψουμε την συνάρτηση Green στον χώρο των ορμών και των συχνοτήτων Matsubara, η οποία είναι ένας $h \times h$ πίνακας (στην περίπτωσή μας $h = 8$):

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = [i\omega_n - \hat{E}_{\mathbf{k}}]^{-1} \quad (3.2)$$

όπου $\omega_n = \pi k_B T(2n + 1)$ οι φερμιονικές συχνότητες Matsubara. Τα σημεία στα οποία ο παρανομαστής της συνάρτησης Green μηδενίζεται, ονομάζονται πόλοι της συνάρτησης Green και δίνουν την ενεργειακή διασπορά των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων (ιονεί-σωματίδια) του συστήματος. Εδώ, οι πόλοι δίνονται από τις ιδιοτιμές του ενεργειακού πίνακα $\hat{E}_{\mathbf{k}}$.

Το γεγονός ότι οι σπίνορες είναι φερμιονικά πεδία που ορίζουν μια φερμιονική άλγεβρα, σε αντιστοιχία με τους απλούς φερμιονικούς τελεστές δημιουργίας/καταστροφής, φαίνεται και από το γεγονός ότι υπακούουν σε αντίστοιχους κανόνες αντιμετάθεσης: $\{\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \hat{I}$, $\{\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}\} = 0$.

Φορμαλιστικά, η (3.2) υπακούει την σχέση:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \hat{G}(\mathbf{k}, \tau) \quad (3.3)$$

όπου $\hat{G}(\mathbf{k}, \tau)$ είναι η συνάρτηση Green- πίνακας στον φανταστικό χρόνο ($\tau = -it$) κατά Wick και $\beta = 1/k_B T$ με k_B την σταθερά του Boltzmann (εκτός αν δηλωθεί ρητά, από δω και στο εξής $k_B = 1$).

Επίσης, σε πλήρη αντιστοιχία με την καθιερωμένη θεωρία, η $\hat{G}(\mathbf{k}, \tau)$ ορίζεται ως:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, \tau) = -\langle T_\tau \Psi_{\mathbf{k}}(\tau) \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \quad (3.4)$$

$$= -\langle T_\tau \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{\mathbf{k}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\uparrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \\ c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger & c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\uparrow} & c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} & \dots \end{pmatrix} \rangle \quad (3.5)$$

όπου οι αγκύλες σημαίνουν τον θερμοκρασιακό και χβαντικό μέσο όρο, T_τ είναι ο χρονικό τελεστής κατά Wick και $\Psi_{\mathbf{k}}(\tau)$ ο σπινόρας γραμμένος στην εικόνα Heisenberg, (με $\Psi_{\mathbf{k}} = \Psi_{\mathbf{k}}(0)$). Ακόμη, εννοείται ότι το γινόμενο μεταξύ των σπινωριακών τελεστών είναι γινόμενο Kronecker.

Κάθε στοιχείο από τον παραπάνω πίνακα αντιστοιχεί σε ένα ζεύγος τελεστών δημιουργίας ή/και καταστροφής του οποίου η θερμοδυναμική και χβαντική μέση τιμή είναι η παράμετρος τάξης για το συγκεκριμένο είδος ζευγαρώματος/συμπύκνωσης. Για παράδειγμα, το (1, 4) στοιχείο είναι το:

$$-\langle T_\tau c_{\mathbf{k},\uparrow}(\tau) c_{-\mathbf{k},\downarrow} \rangle = G(\mathbf{k}, \tau)_{sSC} \quad (3.6)$$

που δεν είναι τίποτα άλλο από την ανώμαλη συνάρτηση που εισήγαγε ο Gor'kov στην θεωρητική περιγραφή της συμβατικής υπεραγωγιμότητας με συναρτήσεις Green[38, 39].

Είμαστε σε θέση τώρα να κάνουμε την σύνδεση μεταξύ των γενικευμένων παραμέτρων τάξης της Εξ.(2.4) και της συνάρτησης Green της Εξ.(3.5). Στον φορμαλισμό Gor'kov, η γνωστή BCS εξίσωση της συμβατικής υπεραγωγιμότητας δίνεται από την σχέση αυτοσυνέ-

3.2 Γενικευμένος μετασχηματισμός Bogoliubov

πείας:

$$\Delta_s = VT \sum_{\mathbf{k},n} G(\mathbf{k}, i\omega_n)_{sSC} \quad \text{με} \quad G(\mathbf{k}, i\omega_n)_{sSC} = \frac{1}{i\omega_n - \xi_{\mathbf{k}} - \Delta_s}$$

Στον πολυδιάστατο φορμαλισμό Nambu, η ίδια εξίσωση δίνεται ως:

$$\Delta_s = \frac{1}{8} VT \sum_{\mathbf{k}',n} \text{Tr} \left\{ \hat{\tau}_0 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 \hat{G}(\mathbf{k}', i\omega_n) \right\} \quad (3.7)$$

όπου παίρνοντας το ίχνος διαιρούμε με 8 (ή γενικά με την διάσταση του πίνακα Green). Η διαφορά σε σχέση με την συμβατική θεωρία, είναι ότι ο πίνακας Green μπορεί να περιέχει και άλλες παραμέτρους τάξης, πέραν της Δ_s , για τις οποίες αντίστοιχα μπορούμε να γράψουμε τις εξώσεις αυτοσυνέπειας τύπου-BCS που υπακούν ακολουθώντας τον γενικό τύπο:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^\alpha = -\frac{1}{h} T \sum_{\mathbf{k}',n} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \text{Tr} \left\{ \hat{a} \hat{G}(\mathbf{k}', i\omega_n) \right\} \quad (3.8)$$

όπου γενικά h είναι η διάσταση του χώρου Nambu και \hat{a} η αναπαράσταση μιας παραμέτρου τάξης στην σπινοριακή βάση¹.

3.2 Γενικευμένος μετασχηματισμός Bogoliubov

Η Εξ.(3.2) υπονοεί ότι για να βρούμε τελικά την συνάρτηση Green πρέπει να αντιστρέψουμε τον πίνακα στο δεξί μέρος της έκφρασης αυτής. Αυτό ισοδυναμεί με την διαγωνιοποίηση του ενεργειακού πίνακα $\hat{E}_{\mathbf{k}}$ και η συνήθης διαδικασία που ακολουθείται είναι μέσω του λεγόμενου μετασχηματισμού Bogoliubov[40].

Ξεκινώντας από την Χαμιλτονιανή (3.1) ο στόχος είναι να βρούμε κατάλληλο μετασχηματισμό ομοιότητας μέσω ενός πίνακα \hat{U} έτσι ώστε:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k}}^{-1} \hat{D}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k}} \Phi_{\mathbf{k}} \quad (3.9)$$

όπου $\hat{D}_{\mathbf{k}}$ είναι ένας διαγώνιος πίνακας, με στοιχεία τις ιδιοτιμές του $\hat{E}_{\mathbf{k}}$ (δηλαδή του πόλους

¹Γενικά, τα στοιχεία του πίνακα $\hat{a} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ δεν είναι ανεξάρτητα μεταξύ τους, αλλά συνδέονται κάτω από κατάλληλους μετασχηματισμούς συμμετρίας του προβλήματος. Για τον λόγο αυτόν, ο παράγοντας $1/h$ είναι απαραίτητος έτσι ώστε ο μέσος όρος που παίρνουμε μετά το ίχνος να είναι σωστά κανονικοποιημένος.

της συνάρτησης Green). Οι νέοι σπίνορες υπακούν τους μετασχηματισμούς:

$$\Phi_{\mathbf{k}}^\dagger = \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger \Rightarrow \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger = \Phi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k}} \quad (3.10)$$

$$\Phi_{\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}} \Rightarrow \Psi_{\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger \Phi_{\mathbf{k}} \quad (3.11)$$

και είναι σπινοριακά πεδία που δρουν ως σύνθετοι τελεστές δημιουργίας/καταστροφής των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος. Το γεγονός ότι η Χαμιλτονιανή πρέπει να είναι ερμιτιανή επιβάλλει στον \hat{U} να είναι επίσης ερμιτιανός με $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$. Πίνακες τέτοιου είδους ονομάζονται μοναδιαίοι και για τον λόγο αυτό ο μετασχηματισμός Bogoliubov συναντάται στην βιβλιογραφία και ως «μοναδιαίος μετασχηματισμός». Εύκολα διαπιστώνει κανείς ότι λόγω των ιδιοτήτων του \hat{U} , οι νέοι σπίνορες που δρουν στον χώρο των οιονείσωματιδίων ικανοποιούν τις συνήθεις σχέσεις αντιμετάθεσης και άρα είναι φερμιονικοί, όπως περιμέναμε:

$$\{\Phi_{\mathbf{k}}, \Phi_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \{\hat{U}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \{\Psi_{\mathbf{k}}, \Psi_{\mathbf{k}'}^\dagger\} = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$$

Κάνοντας χρήση του μοναδιαίου μετασχηματισμού, η συνάρτηση Green της Εξ.(3.2) μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = [i\omega_n - \hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}}]^{-1} = [\hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger (i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}}) \hat{U}_{\mathbf{k}}]^{-1} = \hat{U}_{\mathbf{k}}^\dagger (i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}})^{-1} \hat{U}_{\mathbf{k}} \quad (3.12)$$

3.3 Μέθοδος επίλυσης συζευγμένων εξισώσεων αυτοσυνέπειας

Η μορφή στην οποία καταλήξαμε είναι πολύ χρήσιμη για πληθώρα πράξεων. Για παράδειγμα, η Εξ.(3.8) γράφεται:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^\alpha = \frac{1}{h} T \sum_{\mathbf{k}', n} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \text{Tr} \left\{ \hat{a} \hat{U}_{\mathbf{k}'}^\dagger (i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}'})^{-1} \hat{U}_{\mathbf{k}'} \right\} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{h} T \sum_{\mathbf{k}', n} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k}'} (i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}'})^{-1} \right\} \\ &= \frac{1}{h} T \sum_{\mathbf{k}', n} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_i \hat{A}(\mathbf{k}')_{(i,i)} \frac{1}{i\omega_n - E_i(\mathbf{k}')} \end{aligned} \quad (3.14)$$

με $\hat{A}(\mathbf{k}') = \hat{U}_{\mathbf{k}'} \hat{a} \hat{U}_{\mathbf{k}'}^\dagger$, $E_i(\mathbf{k}')$ ο i -οστός πόλος και έχουμε χρησιμοποιήσει την κυκλική ιδιότητα του ίχνους. Μπορούμε εισάγοντας την γνωστή ταυτότητα: $T \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \epsilon} = n_F(\epsilon)$ [34, 41, 40],

3.4 Θερμοδυναμικές ιδιότητες

όπου $n_F(\epsilon) = \frac{1}{1+e^{\beta\epsilon}}$ η συνάρτηση κατανομής του Dirac, να καταλήξουμε στην εξίσωση:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \frac{1}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sum_i \hat{A}(\mathbf{k})_{(i,i)} n_F [E_i(\mathbf{k})] \quad (3.15)$$

δηλαδή να πάρουμε την εξίσωση αυτοσυνέπειας για την Δ_{α} έχοντας αθροίσει στις συχνότητες Matsubara.

Είναι κατανοητό πως όλη η πληροφορία είναι αποθηκευμένη στον πίνακα $\hat{A}_{\mathbf{k}}$ και κατά συνέπεια στον $\hat{U}_{\mathbf{k}}$. Τα στοιχεία του πίνακα αυτού είναι γνωστά ως «παράγοντες συμφωνίας» (coherence factors) και ουσιαστικά η μορφή τους διέπει όλες τις ιδιότητες ενός συμπυκνωμένου συστήματος, από τις μονοσωματιδιακές (βλ. θεωρία Bogoliubov-deGennes[12]) έως τις συλλογικές[39, 42].

Δυστυχώς, η εύρεση μιας αναλυτικής μορφής τους, περιορίζεται σε απλά συστήματα συνυπάρχοντων παραμέτρων τάξης και εξαρτάται από την δομή του πίνακα $\hat{E}_{\mathbf{k}}$ και την σχέση (αν υπάρχει) μεταξύ των στοιχείων αυτού. Ένα παράδειγμα αναλυτικού υπολογισμού τους θα δούμε στο Κεφ.5, ενώ ένα παράδειγμα όπου ο υπολογισμός αυτός είναι μη διαχειρίσιμος αναλυτικά θα συναντήσουμε συντομότερα, στο Κεφ.4.

Ευτυχώς, είναι διαθέσιμες βιβλιοθήκες (όπως π.χ. η Lapack) που παρέχουν την δυνατότητα υπολογισμού μοναδιαίων μετασχηματισμών αριθμητικά. Έτσι, η μέθοδος που εισάγαμε σε αυτή την ενότητα παρέχει την δυνατότητα αυτοσυνεπούς αριθμητικής επίλυσης όσων συζευγμένων εξισώσεων επιθυμούμε, ανεξαρτήτως την πολυπλοκότητα των αναλυτικών εκφράσεων των ίδιων των εξισώσεων.

3.4 Θερμοδυναμικές ιδιότητες

Ο πιο άμεσος τρόπος επίλυσης πολλών συζευγμένων αυτοσυνεπών εξισώσεων, είναι ξεκινώντας από ένα αρχικό σύνολο τιμών των παραμέτρων τάξης, να το εισάγουμε στο συζευγμένο σύστημα, να πάρουμε ένα νέο σύνολο τιμών και να επαναλάβουμε την ίδια διαδικασία, μέχρι οι τιμές να συγκλίνουν σε ένα τελικό σετ λύσεων. Η τελική λύση οφείλει να ελαχιστοποιεί την ελεύθερη ενέργεια του συστήματος. Κατά την διαδικασία αυτή, ελλοχεύει πάντα ο κίνδυνος η τελική λύση να συγκλίνει σε ένα τοπικό ελάχιστο. Αυτό μπορεί να συμβεί εξαιτίας του μεγάλου χώρου φάσεων μέσα στο οποίο μπορεί να κινηθεί το σύστημα ώπου να καταλήξει στο ζητούμενο ελάχιστο. Όσο ο αριθμός των παραμέτρων τάξης αυξάνει, τόσο πιο περίπλοκη είναι η έκφραση της ελεύθερης ενέργειας με αποτέλεσμα οι πιθανότητες για τοπικά ελάχιστα να αυξάνουν.

Ειδικά, σε μεταβάσεις 1ης τάξης, όπου η μετάβαση στο ελάχιστο δεν γίνεται με συνεχή τρόπο, είναι πολύ εύκολο να καταλήξουμε σε τοπικό ελάχιστο αντί για το ολικό. Στην περίπτωση αυτή η λύση που προκύπτει αντιπροσωπεύει μια μετασταθής φάση [43], με την

έννοια ότι μικρές διαταραχές μπορούν να την καταστήσουν την θερμοδυναμικά σταθερή κατάσταση του συστήματος.

Προκειμένου λοιπόν να εξασφαλίσουμε ότι οι μεταβάσεις που συζητάμε στην παρούσα διατριβή είναι πράγματι θερμοδυναμικά επιτρεπτές, όλες οι αυτοσυνεπείς λύσεις των συζευγμένων εξισώσεων στις οποίες καταλήγουμε ελέγχονται και μέσω της ελαχιστοποίησης της αντίστοιχης ελεύθερης ενέργειας. Για τον σκοπό αυτό, εξήχθη ο γενικός τύπος (μια λεπτομερής απόδειξη παρατίθεται στο Παράρτημα A'):

$$F_c - F_0 = \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k}, n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A_{(i, \nu_i)}=0}} \right\} \quad (3.16)$$

ο οποίος δίνει την μεταβολή της ελεύθερης ενέργειας καθώς το σύστημα περνάει από την κανονική κατάσταση (F_0) στην συμπυκνωμένη φάση (F_c) γενικά αυθαίρετου αριθμού παραμέτρων τάξης A_i λόγω των δυναμικών αλληλεπίδρασης V_i . Ο πρώτος όρος στο δεξί μέρος είναι ο όρος κενού που συναντήσαμε στην αρχή της παραγράφου 2.1.

Η σχέση 3.16 στην μορφή αυτή, είναι βολική και για την κατασκευή θεωριών τύπου Ginzburg-Landau για την συνύπαρξη πολλών συμπυκνωμάτων. Για αριθμητικούς υπολογισμούς, μια ισοδύναμη έκφραση της Εξ.(3.16) είναι:

$$F_c - F_0 = \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_j \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{1 + e^{-\beta E_j(\mathbf{k})}}{1 + e^{-\beta \epsilon_j(\mathbf{k})}} \quad (3.17)$$

όπου έχει γίνει το άθροισμα στις συχνότητες Matsubara και $E_j(\mathbf{k}), \epsilon_j(\mathbf{k})$ ο j -οστός πόλος της συμπυκνωμένης και της κανονικής κατάστασης, αντίστοιχα.

3.5 Η φασματική αναπαράσταση

Η φασματική αναπαράσταση ή αναπαράσταση κατά Lehmann, συνδέει την συνάρτηση Green στον μιγαδικό χώρο των συχνοτήτων Matsubara με την λεγόμενη καθυστερημένη (retarded) συνάρτηση Green μέσω της σχέσης:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\hat{A}(\mathbf{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} \quad (3.18)$$

όπου:

$$\hat{A}(\mathbf{k}, \omega) = -2\Im \left\{ \hat{G}_{ret}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \quad (3.19)$$

3.6 Γενικευμένη επιδεκτικότητα

Από την Εξ.(3.12) μπορούμε να βρούμε την καθυστερημένη συνάρτηση Green μέσω αναλυτικής συνέχισης στις πραγματικές συχνότητες και με την βοήθεια της ταυτότητας του Cauchy²:

$$\hat{G}_{ret}(\mathbf{k}, \omega) = \hat{G}(\mathbf{k}, \omega + i\delta) = \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - E_{\mathbf{k}_1} + i\delta} & 0 \\ 0 & \ddots \end{pmatrix} \hat{U}_{\mathbf{k}} = \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \{ \hat{\mathcal{D}}_{\mathbf{k}} - i\pi \hat{\Delta}_{\mathbf{k}} \} \hat{U}_{\mathbf{k}} \quad (3.20)$$

με

$$\hat{\mathcal{D}}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\omega - E_{\mathbf{k}_1}} & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \frac{1}{\omega - E_{\mathbf{k}_h}} \end{pmatrix}, \quad \hat{\Delta}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \delta(\omega - E_{\mathbf{k}_1}) & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \delta(\omega - E_{\mathbf{k}_h}) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

όπου h είναι η διάσταση του χώρου Nambu (και ο αριθμός των πόλων). Η συνάρτηση διασποράς, περιέχει πληροφορία για την ενεργειακή κατανομή των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων του συστήματος και συνδέεται με την πυκνότητα των καταστάσεων ($N(\omega)$) των οιονεί-σωματιδίων. Με την βοήθεια των παραπάνω, καταλήγουμε στην εξής έκφραση για την $N(\omega)$:

$$N(\omega) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \{ \hat{\mathcal{A}}(\mathbf{k}, \omega) \} = \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \{ \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\Delta}_{\mathbf{k}} \hat{U}_{\mathbf{k}} \} = \sum_{\mathbf{k}, i} \delta(\omega - E_{\mathbf{k}_i}) \quad (3.22)$$

Παρατηρούμε δηλαδή, ότι αν σε ένα σύστημα στο οποίο συνυπάρχουν πολλές παράμετροι τάξης, αυτές συσχετίζονται με τέτοιο τρόπο ώστε να προκύψουν πολλαπλοί μη-εκφυλισμένοι κλάδοι μονοσωματιδιακών διεγέρσεων, η πολλαπλότητα αυτή μπορεί να οδηγήσει σε νέες, διακριτές κορυφές στην πυκνότητα καταστάσεων των διεγέρσεων αυτών. Αυτό βέβαια μπορεί να ανιχνευτεί πειραματικά σε μετρήσεις φασματοσκοπίας σήραγγος, εφόσον βέβαια φαινόμενα απόσβεσης, όπως π.χ. λόγω ατελειών, δεν παραμορφώσουν το φάσμα σε συνεχές.

3.6 Γενικευμένη επιδεκτικότητα

Το σύγχρονο πειραματικό «οπλοστάσιο» του φυσικού συμπυκνωμένης ύλης περιλαμβάνει μια πληθώρα πειραματικών τεχνικών για την μελέτη των φαινομένων που παρουσιάζονται στα υλικά με ισχυρά συσχετισμένους φορείς. Παρά την ποικιλία τους, η αρχή που διέπει όλα τα πειράματα είναι η ίδια: εφαρμόζοντας μια εξωτερική διέγερση στο υπό μελέτη υλικό, μετράται πειραματικά το αποτέλεσμα αυτής της διέγερσης στο υλικό. Έτσι για παράδειγμα, ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο θα έχει ως αποτέλεσμα την κίνηση ηλεκτρονίων

² $\frac{1}{x+i\delta} = \mathcal{P}\frac{1}{x} - i\pi\delta(x)$

δηλαδή την δημιουργία ρεύματος σε ένα μέταλλο, ένα μαγνητικό πεδίο Zeeman την πόλωση των σπιν δηλαδή την επαγωγή μιας μαγνήτισης κ.όκ. [40].

Αν η εξωτερική διέγερση είναι διαταρακτική με την έννοια ότι δεν είναι τόσο ισχυρή ώστε να επιφέρει μη γραμμικά φαινόμενα στο υλικό, μπορούμε να εφαρμόσουμε την λεγόμενη Θεωρία της Γραμμικής Απόκρισης ώστε να προβλέψουμε θεωρητικά το αποτέλεσμα που θα επιφέρει η διέγερση αυτή στο υπό μελέτη σύστημα. Στην προσέγγιση λοιπόν, της γραμμικής απόκρισης, η φυσική ποσότητα $X_\mu(\mathbf{r}, t)$ συνδέεται με το αίτιο $F_\nu(\mathbf{r}', t')$ μέσω μιας γραμμικής σχέσης (ή σχέσης Kubo) της μορφής [40, 34, 41]:

$$X_\mu(\mathbf{r}, t) = \int d^d \mathbf{r}' \int dt' \chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') F_\nu(\mathbf{r}', t') \quad (3.23)$$

όπου:

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = -i\theta(t - t') \langle [X_\mu(\mathbf{r}, t), X_\nu(\mathbf{r}', t')] \rangle \quad (3.24)$$

η γενικευμένη επιδεκτικότητα η οποία όπως φαίνεται και από την Εξ.(3.24) υπακούει την σχέση αιτιότητας:

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t, t') = 0 \quad , \quad t < t' \quad (3.25)$$

Για συστήματα με μεταφορική συμμετρία, η χωρική εξάρτηση θα είναι της μορφής: $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Μπορούμε λοιπόν να μεταφερθούμε στον χώρο των ορμών:

$$\begin{aligned} & \int [X_\mu(\mathbf{r}, t), X_\nu(\mathbf{r}', t')] e^{-iq(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d^3 r = \int \sum_{\mathbf{q}_1} \sum_{\mathbf{q}_2} [X_\mu(\mathbf{q}_1, t), X_\nu(\mathbf{q}_2, t')] e^{i(\mathbf{q}_1-\mathbf{q})r} e^{i(\mathbf{q}_2+\mathbf{q})r'} d^3 r \\ & = \sum_{\mathbf{q}_2} [X_\mu(\mathbf{q}, t), X_\nu(\mathbf{q}_2, t')] e^{i(\mathbf{q}_2+\mathbf{q})r'} = \sum_{\mathbf{q}_2} [X_\mu(\mathbf{q}, t), X_\nu(\mathbf{q}_2, t')] \delta_{\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}} = [X_\mu(\mathbf{q}, t), X_\nu(-\mathbf{q}, t')] \end{aligned}$$

όπου θέσαμε $e^{i(\mathbf{q}_2+\mathbf{q})r'} \rightarrow \delta_{\mathbf{q}_2, -\mathbf{q}}$ εφόσον λόγω της μεταφορικής συμμετρίας, το τελικό αποτέλεσμα δεν μπορεί να εξαρτάται από το r' [34].

Από την Εξ.(3.24) είναι κατανοητό ότι η γενικευμένη επιδεκτικότητα έχει την μορφή μιας συνάρτησης Green. Λόγω αιτιότητας, οφείλουμε να κρατήσουμε μόνο το «καθυστερημένο» κομμάτι ή αλλιώς πρέπει αν υπολογίσουμε μόνο την καθυστερημένη (retarded) συνάρτηση Green [34]. Αν η Χαμιλτονιανή του συστήματος δεν εξαρτάται ρητά από τον χρόνο, η απόκριση θα είναι συνάρτηση της διαφοράς $t - t'$ (χρονική μεταφορική συμμετρία). Στο σημείο αυτό μπορούμε να εισάγουμε και την θερμοκρασιακή εξάρτηση στους υπολογισμούς κάνοντας μια στροφή κατά Wick, $t = -i\tau$, σε μιγαδικούς χρόνους, οπότε παίρνουμε την

σχέση:

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, \tau - \tau') = -\langle T_\tau X_\mu(\mathbf{q}, \tau) X_\nu(-\mathbf{q}, \tau') \rangle \quad (3.26)$$

Εκμεταλλευόμενοι την χρονική μεταφορική συμμετρία του προβλήματος, μπορούμε να μεταφερθούμε στον χώρο Matsubara μέσω ενός μετασχηματισμού Fourier και να καταλήξουμε στην έκφραση: $\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, iq_n) = -\langle T_\tau X_\mu(\mathbf{q}, iq_n) X_\nu(-\mathbf{q}, -iq_n) \rangle$, ή στον λεγόμενο συμβολισμό τετραορμής [34]:

$$\chi_{\mu\nu}(\tilde{\mathbf{q}}) = -\langle T_\tau X_\mu(\tilde{\mathbf{q}}) X_\nu(-\tilde{\mathbf{q}}) \rangle \quad (3.27)$$

όπου $\tilde{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}, iq_n)$.

Για τον υπολογισμό της απόκρισης ενός συστήματος όπου συνυπάρχουν πολλά συμπυκνώματα, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε απευθείας τα παραπάνω αποτελέσματα αρκεί να εκφράσουμε τον τελεστή X σε μια κατάλληλη σπινωριακή μορφή. Όπως θα δούμε στα επόμενα Κεφάλαια, ο τελεστής X μπορεί να εκφραστεί γενικά ως:

$$X_\mu(\tilde{\mathbf{q}}) = \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\gamma}_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \Psi(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \quad (3.28)$$

όπου ο όρος $\hat{\gamma}_{\tilde{\mathbf{q}}}$ ονομάζεται κομβική συνάρτηση (vertex function). Χρησιμοποιώντας την Εξ.(3.28) και με την βοήθεια του θεωρήματος του Wick, η Εξ.(3.27) γράφεται (βλ. Παρ.Β'2) στην συμπαγή μορφή:

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, iq_n) = T \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^\mu \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iq_n) \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\nu \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \quad (3.29)$$

Βλέπουμε λοιπόν, ότι μέσω του σπινωριακού φορμαλισμού, είναι δυνατό να κατασκευάσουμε ένα θεωρητικό πλαίσιο για τον υπολογισμό *δυναμικών και στατικών ιδιοτήτων συστημάτων* όπου συνυπάρχει ένας αυθαίρετος αριθμός παραμέτρων τάξης.

Κεφάλαιο 4

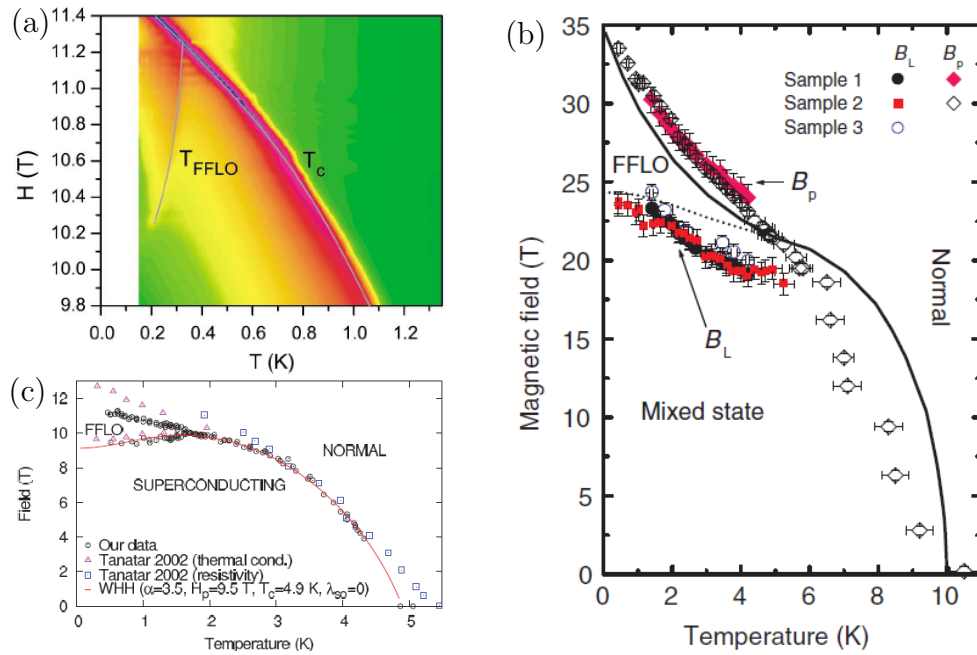
Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς

4.1 Εισαγωγικά

Η ύπαρξη της FFLO υπεραγωγιμότητας έχει προταθεί θεωρητικά εδώ και πάνω από 40 χρόνια και εξακολουθεί να αποτελεί ένα από τα πιο ενεργά αντικείμενα θεωρητικής και πειραματικής έρευνας στον τομέα της φυσικής συμπυκνωμένης ύλης [20]. Στο γεγονός αυτό συντέλεσε και η ανάπτυξη του κλάδου της φυσικής των παγιδευμένων αερίων Fermi τα οποία προσφέρουν ένα εργαστήριο ελεγχόμενων συνθηκών κατάλληλο για την παρατήρηση τέτοιων εξωτικών φαινομένων [44].

Ωστόσο, μέχρι σήμερα, δεν υπάρχουν σαφείς αποδείξεις ότι η νέα αυτή κατάσταση της ύλης έχει παρατηρηθεί σε κάποιο στερεό. Η δυσκολία πηγάζει κυρίως από τις πολύ αυστηρές συνθήκες τις οποίες οφείλει να πληροί το υποψήφιο υλικό [15]. Όπως έχουμε αναφέρει, στους περισσότερους υπεραγωγούς τύπου-II, για την καταστροφή της υπεραγωγιμότητας ευθύνονται τα τροχιακά φαινόμενα τα οποία είναι επίσης καταστρεπτικά για την FFLO φάση. Άρα, ο υποψήφιος υπεραγωγός πρέπει, καταρχήν να βρίσκεται στο όριο Pauli ή ισοδύναμα, να διαθέτει μεγάλη παράμετρο Maki ($\alpha > 1.8$). Στην περίπτωση ενός υπεραγωγού σε διάταξη λεπτού φιλμ με πάχος μικρότερο από το μήκος συνοχής του, ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο παράλληλο με την επιφάνεια του φιλμ ($H \parallel a$ - b ή $H \perp c$) επιδρά στον υπεραγωγό μόνο μέσω σύζευξής του με το ηλεκτρονικό σπιν (όρος Zeeman). Δηλαδή, τα τροχιακά φαινόμενα είναι αμελητέα [22]. Ακόμη, η φάση αυτή είναι ιδιαίτερα ευαίσθητη στις προσμίξεις, οπότε το

4. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς



Σχήμα 4.1: Πειραματικά διαγράμματα φάσης μαγνητικού πεδίου-θερμοκρασίας (H-T) υποψήφιων FFLO υπεραγωγών: a) CeCoIn_5 [45] b) $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu(NCS)}_2$ [46] και c) $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{GaCl}_4$ [47].

σύστημα οφείλει να είναι απαλλαγμένο κατά μεγάλο βαθμό από αυτές.

Αντίθετα, πολλές θεωρητικές μελέτες έχουν υποδείξει την ευεργετική επίδραση που μπορούν να έχουν τυχόν ανισοτροπίες της επιφάνειας Fermi και του υπεραγωγίμου χάσματος στην κατάσταση αυτή [15]. Για την ώρα, ο αριθμός των γνωστών υπεραγωγών που πληρούν τις παραπάνω συνθήκες είναι εξαιρετικά περιορισμένος, πόσο μάλλον, οι υπεραγωγοί για τους οποίους υπάρχουν ενδείξεις ύπαρξης μιας τέτοιας φάσης. Αδιαμφισβήτητα, το πιο γνωστό και καλά μελετημένο υλικό είναι ο υπεραγωγός «βαρέων φερμιονίων» CeCoIn_5 [45], ενώ άλλα ελπιδοφόρα υλικά είναι οι δισδιάστατοι οργανικοί υπεραγωγοί $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu(NCS)}_2$ [46] και $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{GaCl}_4$ [47] (βλ. Σχ.4.1).

Κοινό χαρακτηριστικό των υλικών αυτών, πέρα από την έντονα δισδιάστατη φύση τους, είναι η $d_{x^2-y^2}$ συμμετρία που παρουσιάζει το υπεραγωγίμο χάσμα καθώς και το ότι ανήκουν στην οικογένεια των λεγόμενων αντισιδηρομαγνητικών υπεραγωγών. Στους υπεραγωγούς αυτούς, η έντονη ανισοτροπία οδηγεί σε αστάθειες στο κανάλι ηλεκτρονίου-οπής οι οποίες εκδηλώνονται είτε με τη μορφή συμπίκνωσης σε κύματα πυκνότητας σπιν ή ως ισχυρές διακυμάνσεις των ηλεκτρονιακών σπιν [48].

Πρόσφατα, βασισμένοι σε αποτελέσματα της παρούσας διατριβής, διατυπώσαμε ένα εναλλακτικό σενάριο για την υπεραγωγίμη κατάσταση που εμφανίζεται στο H-T διάγραμμα φάσης των υλικών αυτών. Λαμβάνοντας υπόψη τα κοινά αυτά χαρακτηριστικά τους, προτείναμε ότι η μυστηριώδης αυτή κατάσταση είναι στην πραγματικότητα μια συνύπαρξη από τρεις

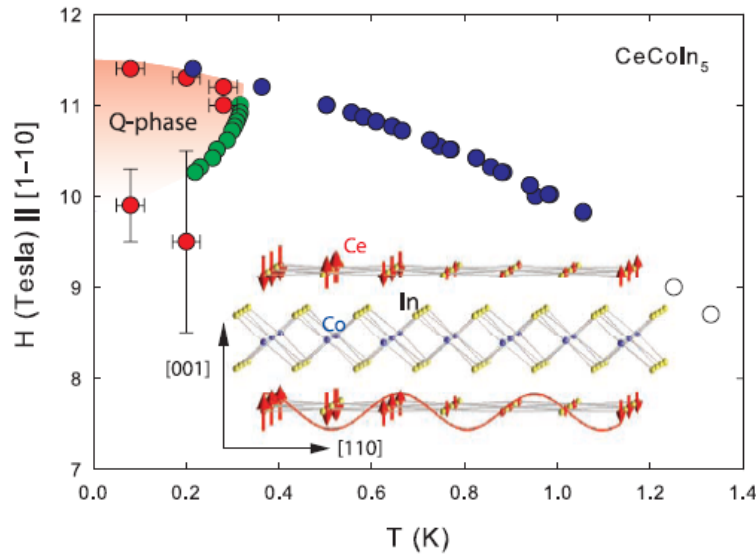
ξεχωριστές παραμέτρους τάξης: $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητας, SDW και μιας ακόμη, σπιν triplet υπεραγώγιμης φάσης η οποία έχει πεπερασμένη ορμή κέντρου-μάζας [49, 30]. Ιδιαίτερο χαρακτηριστικό της νέας αυτής κατάστασης, είναι ότι μαζί με την ανομοιογενή υπεραγωγιμότητα μπορεί να επαχθεί και αντισιδηρομαγνητισμός τύπου SDW. Μετρήσεις σκέδασης νετρονίων στην αντίστοιχη φάση του CeCoIn_5 [29] δείχνουν να επιβεβαιώνουν τις προβλέψεις μας, ενώ μια σειρά άλλων, μέχρι πρόσφατα, ανεξήγητων πειραματικών αποτελεσμάτων για το ίδιο υλικό εξηγούνται μέσω της εν λόγω θεωρίας [30, 50]. Κρίνεται σκόπιμο, για την ανάλυση που θα επακολουθήσει, να κάνουμε μια σύντομη αναδρομή στα πειράματα και την φαινομενολογία του CeCoIn_5 ,

4.1.1 Μοτίβο από συνυπάρχοντα συμπυκνώματα επαγόμενο από το μαγνητικό πεδίο στην υπεραγώγιμη φάση του CeCoIn_5

Το CeCoIn_5 είναι ένα υλικό με χαμηλά επίπεδα προσμίξεων το οποίο κρυσταλλώνεται σε τετραγωνική δομή [51] (βλ. ένθετο Σχ.4.2), ενώ η επιφάνεια Fermi του έχει δισδιάστατο χαρακτήρα και σχεδόν κυλινδρική συμμετρία [52, 53]. Σε κανονικές συνθήκες πίεσης, εμφανίζει μη συμβατική υπεραγωγιμότητα κάτω από τους 2.3 K [51] η οποία είναι τύπου $d_{x^2-y^2}$ -wave [54]. Πειράματα NMR και μαγνητοαντίστασης υποδεικνύουν ότι στο διάγραμμα φάσης του υλικού αυτού πιθανότατα κρύβονται δυο μαγνητικά κβαντικά κρίσιμα σημεία, ένα για ελαφρώς αρνητική πίεση [55] και ένα για υψηλά μαγνητικά πεδία, κοντά στο H_{c2} [56]. Η ύπαρξη αυτών των κρίσιμων σημείων θεωρείται ότι οδηγεί στην παρουσία ισχυρών αντισιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων στο υλικό αυτό, μία πειραματική υπογραφή των οποίων είναι και η παρατηρούμενη κορυφή συντονισμού των διακυμάνσεων του σπιν στο σύμμετρο κυματόνισμα (π, π) [57]. Τα ευρήματα αυτά έχουν συντελέσει στην διαμόρφωση της άποψης ότι οι μαγνητικές αυτές διακυμάνσεις ευθύνονται για την υπεραγωγιμότητα στο υλικό. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές μάλιστα είναι ισχυρές σε τέτοιο βαθμό ώστε να πολλαπλασιάζουν την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων, καθιστώντας το CeCoIn_5 υπεραγωγό βαρέων φερμιονίων [58].

Για υψηλά μαγνητικά πεδία, το υλικό αυτό είναι υπεραγωγός περιορισμένος κατά Pauli τόσο για πεδία παράλληλα στην επιφάνειά του ($H \parallel ab$, $H_{c2} \approx 11.4$ T), όσο και για κάθετα σε αυτήν ($H \parallel c$, $H_{c2} \approx 4.7$ T) [59]. Ίσως το πιο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό του CeCoIn_5 είναι το υπεραγώγιμο H-T διάγραμμα φάσης του. Στις αρχές του 2000 πειράματα μέτρησης της ειδικής θερμοχωρητικότητας απέδειξαν ότι για χαμηλές θερμοκρασίες και υψηλά μαγνητικά πεδία, μέσα στην υπεραγώγιμη φάση λαμβάνει χώρα μια ακόμα υπεραγώγιμη μετάβαση. Το εύρημα αυτό, θεωρήθηκε ως η πρώτη πειραματική παρατήρηση της FFLO φάσης [45]. Η μετάβαση από ομοιογενή σε FFLO υπεραγωγιμότητα βρέθηκε 2ης τάξης, ενώ από FFLO

4. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς



Σχήμα 4.2: H-T διάγραμμα φάσης για το CeCoIn_5 όπου με κόκκινη σκίαση απεικονίζεται η λεγόμενη Q-φάση [29]. Οι μπλε και λευκοί κύκλοι υποδηλώνουν μετάβαση πρώτης και δεύτερης τάξης αντίστοιχα, διαχωρίζοντας την υπεραγώγιμη από την κανονική κατάσταση. Οι πράσινοι κύκλοι οριοθετούν την μετάβαση 2ης τάξης μέσα στην υπεραγώγιμη φάση και οι κόκκινοι τα σημεία στα οποία μετρήθηκε η ύπαρξη SDW. Όπως είναι φανερό, ο αντισιδηρομαγνητισμός υπάρχει μόνο μέσα στην Q-φάση. Ένθετο: Κρυσταλλική δομή του CeCoIn_5 .

στην κανονική κατάσταση 1ης τάξης. Το συμπέρασμα αυτό ενισχύθηκε από επακόλουθες μετρήσεις NMR [60] όπου και παρατηρήθηκε ότι η μετατόπιση κατά Knight για μαγνητικά πεδία που αντιστοιχούν στην φάση αυτή δεν τείνει στο μηδέν για $T \rightarrow 0$ όπως θα περίμενε κανείς για singlet υπεραγωγιμότητα, αλλά τείνει σε μια πεπερασμένη τιμή (βλ. Σχ.4.10α). Η παρατήρηση αυτή ερμηνεύτηκε ως ένδειξη ύπαρξης μη υπεραγώγιμων περιοχών στην φάση αυτή, κάτι που προβλέπεται από την θεωρία των FFLO δεδομένου ότι στην περίπτωση αυτή η υπεραγώγιμη παράμετρος τάξης είναι διαμορφωμένη στον χώρο κατά \mathbf{q} .

Ωστόσο, μετρήσεις υπό πίεση [55], έδειξαν ότι η περιοχή στο H-T διάγραμμα φάσης όπου εμφανίζεται η νέα αυτή κατάσταση, επεκτείνεται καθώς αυξάνει η πίεση, σε αντίθεση με τις προβλέψεις της θεωρίας των FFLO (βλ. Σχ.4.8α)¹. Η μέχρι τότε πειραματική εικόνα περιπλέχτηκε ακόμα περισσότερο ύστερα από την παρατήρηση, μέσω NMR, της ύπαρξης κάποιου είδους μαγνητικής κατάστασης αντισιδηρομαγνητικής φύσης [61] με κυματόνισμα $\mathbf{Q} = 2\pi(q, 0.5, 0.5)$ και μαγνητική ροπή πολωμένη παράλληλα με το εξωτερικό πεδίο.

Πειραματικά αποτελέσματα σκέδασης νετρονίων τα οποία δημοσιεύτηκαν λίγο αργότερα, απέδειξαν πέρα από κάθε αμφιβολία, ότι στην εξωτερική αυτή φάση του CeCoIn_5 , η υπεραγωγιμότητα συνυπάρχει με ένα σχεδόν σύμμετρο SDW ($\mathbf{Q} \approx 2\pi(0.45, 0.45, 0.5)$) του οποίου

¹Η FFLO φάση αναμένεται να είναι εξαιρετικά ευαίσθητη σε κάθε είδους πλεγματική διαταραχή, όπως επιφέρουν π.χ. η πίεση, το ντοπάρισμα και οι προσμίξεις [15].

η πόλωση βρέθηκε κάθετη με το εξωτερικό πεδίο [29]. Μάλιστα, ο αντισιδηρομαγνητισμός εμφανίζεται ταυτόχρονα με την τελευταία και καταστρέφεται ακριβώς στο υπεραγωγίμο H_{c2} μέσω μιας μετάβασης 1ης τάξης (βλ. Σχ.4.2). Δηλαδή, το SDW είναι περιορισμένο μόνο μέσα στην επαγόμενη φάση και σε αντίθεση με κάθε θεωρητική πρόβλεψη, επιβιώνει «παρασιτικά» λόγω της υπεραγωγιμότητας. Επιπλέον, το κυματόνισμα διαμόρφωσης του κύματος πυκνότητας σπιν είναι ανεξάρτητο από το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Η παρατήρηση αυτή είναι απολύτως ασυμβίβαστη με την θεωρία των FFLO κατά την οποία η υπέρρευστη πυκνότητα παρουσιάζει διαμόρφωση η οποία είναι ανάλογη με το πεδίο (βλ. Εξ.(1.22)). Η νέα αυτή κατάσταση της ύλης ονομάστηκε **Q**-φάση. Όπως θα δείξουμε, σχεδόν όλα τα προαναφερθέντα φαινόμενα μπορούν να εξηγηθούν με ενιαίο τρόπο αν ερμηνεύσουμε την **Q**-φάση ως την εκδήλωση του μοτίβου συνύπαρξης $d_{x^2-y^2}$ και π υπεραγωγιμότητας με SDW μέσω μιας μετάβαση τύπου I (βλ. παρ. 4.2.2).

4.2 Θεωρητικό μοντέλο

Η μη συμβατική υπεραγωγιμότητα συμμετρίας $d_{x^2-y^2}$ και ο αντισιδηρομαγνητισμός τύπου SDW είναι δυο καταστάσεις τάξης οι οποίες απαντώνται συχνά να συνυπάρχουν ή να ανταγωνίζονται για την ίδια επιφάνεια Fermi στα διαγράμματα φάσης μιας πλειάδας συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων φορέων [48]. Στις πιο γνωστές οικογένειες τέτοιων υλικών συγκαταλέγονται οι υπεραγωγοί υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας οξειδίων του χαλκού [62], τα πρόσφατα ανακαλυφθέντα οξυπνικτίδια [63], σχεδόν-δισδιάστατοι οργανικοί υπεραγωγοί [64] και υπεραγωγοί «βαρέων φερμιονίων» [65], όπως π.χ. η σειρά CeMIn_5 ($M=\text{Co,Rh,Ir}$).

Εξαιτίας της γενικότητάς του, το θεωρητικό πρόβλημα του ανταγωνισμού και της συνύπαρξης $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητας και SDW έχει γίνει αντικείμενο μελέτης σε έναν μεγάλο αριθμό ερευνητικών εργασιών (βλ. π.χ. [66, 67]). Ήδη, από τις αρχές της δεκαετίας του '80 προτάθηκε θεωρητικά ότι η συνύπαρξη των δυο αυτών καταστάσεων μπορεί να οδηγήσει στην δυναμική δημιουργία μιας ακόμη ξεχωριστής συμπυκνωμένης φάσης, η οποία είναι υπεραγωγίμη. Αυτή η νέα κατάσταση της ύλης, αποτελείται από ζεύγη Cooper με ενδιάμεσα χαρακτηριστικά από αυτά των δυο φάσεων που προαναφθθηκαν, με τις οποίες και συνυπάρχει. Τα ζεύγη Cooper βρίσκονται σε triplet διάταξη με το διάνυσμα \mathbf{d} παράλληλο με τα σπιν του SDW και έχουν πεπερασμένη συνολική ορμή ίση με το διάνυσμα τέλειας συναρμογής [24]. Κατά συνέπεια, η υπεραγωγίμη κατάσταση είναι ανομοιογενής, με την υπέρρευστη πυκνότητα του συμπυκνώματος να παρουσιάζει μια διαμόρφωση στον πραγματικό χώρο ως προς **Q**, Εξαιτίας των χαρακτηριστικών αυτών, έχει επικρατήσει η ονομασία π (ή **Q**)-triplet υπεραγωγιμότητα.

Έκτοτε έχει εδραιωθεί, σε θεωρητικό επίπεδο, ότι οι τρεις αυτές παράμετροι τάξης μπορούν να συνυπάρξουν κάτω από αρκετά γενικές συνθήκες, είτε λόγω παρουσίας μη μα-

γνητικών προσμίξεων [24, 68] ή λόγω αποκλίσεων από την συνθήκη τέλει συναρμογής [69, 70, 49]. Πρόσφατα προτάθηκε [49, 71] ότι, εν γένει, η ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής ευθύνεται για την επαγωγή της τρίτης παραμέτρου τάξης όταν οι άλλες δυο συνυπάρχουν με αποτέλεσμα τα τρία αυτά συμπυκνώματα να σχηματίζουν ένα μοτίβο φάσεων [71]. Όπως θα δούμε, το συμπέρασμα αυτό ισχύει για όλους τους αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς. Ωστόσο, συχνά στην βιβλιογραφία ο π -triplet όρος αγνοείται ή παραλείπεται προκειμένου η επίλυση των αυτοσυνεπών εξισώσεων να είναι ευκολότερη.

Στα επόμενα, θα γενικεύσουμε την μελέτη του ανταγωνισμού και συνύπαρξης των τριών αυτών φάσεων συμπεριλαμβάνοντας την επίδραση ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου μέσω ενός όρου Zeeman, δηλαδή αγνοώντας τα τροχιακά φαινόμενα. Η προσέγγιση αυτή είναι καλή για υλικά με μεγάλη παράμετρο Maki, δηλαδή υπεραγωγούς στο όριο Pauli. Ακόμη, θεωρούμε απόλυτα «καθαρό» σύστημα αγνοώντας την επίδραση πιθανών προσμίξεων. Η ένταξη στην μελέτη μας του π -triplet όρου οδηγεί σε μια νέα οικογένεια μεταβάσεων επαγόμενων από το πεδίο, όπου το μοτίβο των τριών φάσεων εμφανίζεται ως η θερμοδυναμικά σταθερή κατάσταση του συστήματος βοηθώντας την υπεραγωγιμότητα να υπερβεί το όριο Pauli. Αξίζει να σημειωθεί ότι πρόσφατα έγιναν προσπάθειες μελέτης της κατάστασης συνύπαρξης των φάσεων αυτών και μέσω των θεωριών Ginzburg-Landau [72] και Bogoliubov-deGennes [73].

4.2.1 Εξισώσεις αυτοσυνέπειας

Σύμφωνα με την ανάλυση του Κεφ.2, η γενικευμένη Χαμιλτονιανή Μέσου-Πεδίου, κατάλληλη για την περιγραφή της συνύπαρξης και του ανταγωνισμού $d_{x^2-y^2}$ singlet και π -triplet υπεραγωγιμότητας με Κύματα Πυκνότητας Σπιν παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου Zeeman είναι της μορφής:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k},\alpha} \xi_{\mathbf{k}\alpha} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\alpha} - \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})_{\alpha\beta} M_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\beta} + hc \right) - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} (\hat{\sigma}_2)_{\alpha\beta} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger + hc \right) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} \hat{\sigma}_2 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})_{\alpha\beta} \left(\Pi_{\mathbf{k}}^{-\mathbf{Q}} c_{-\mathbf{k}-\mathbf{Q}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta}^\dagger + \Pi_{\mathbf{k}}^{\mathbf{Q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\alpha}^\dagger c_{-\mathbf{k}\beta}^\dagger + hc \right) \\ & - \mu_B H \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})_{\alpha\beta} \left(c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta} + hc \right) \end{aligned} \quad (4.1)$$

όπου α, β είναι δείκτες σπιν, $M_{\mathbf{k}}, \Delta_{\mathbf{k}}$ και $\Pi_{\mathbf{k}}$ είναι οι παράμετροι τάξης που αντιστοιχούν στο SDW και στις d-wave singlet και π -triplet υπεραγωγίμες καταστάσεις, $\mu_B H$ είναι το εξωτερικό πεδίο Zeeman και \mathbf{n} είναι η πόλωση των σπιν των μαγνητικών παραμέτρων τάξης²

²όπως έχουμε ήδη τονίσει, για triplet υπεραγωγιμότητα \mathbf{n} είναι η πόλωση του d -διανύσματος

4.2 Θεωρητικό μοντέλο

και του μαγνητικού πεδίου, το οποίο θα θεωρήσουμε παράλληλο με το SDW ³. Ακόμη, τα $\Delta_{\mathbf{k}}, \Pi_{\mathbf{k}}$ έχουν την διαχωρίσιμη μορφή: $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta f_{\mathbf{k}}$ και $\Pi_{\mathbf{k}} = \Pi f_{\mathbf{k}}$, όπου $f_{\mathbf{k}}$ είναι ο «παράγοντας μορφής» ο οποίος καθορίζεται από την μη αναγωγίσιμη αναπαράσταση σύμφωνα με την οποία μετασχηματίζεται το χωρικό κομμάτι της παραμέτρου τάξης. Δεδομένου ότι οι $\Delta_{\mathbf{k}}, \Pi_{\mathbf{k}}$ είναι περιττές στην μεταφορική συμμετρία ως προς \mathbf{Q} , οι $f_{\mathbf{k}}$ για τετραγωνικό σύστημα ανήκουν στις αναπαραστάσεις A_{1g} και B_{1g} με επικρατέστερους παράγοντες δομής τους $f_{\mathbf{k}} = (\cos k_x + \cos k_y)$ και $f_{\mathbf{k}} = (\cos k_x - \cos k_y)$, αντίστοιχα [4, 5].

Εν γένει, ο παράγοντας δομής των $\Delta_{\mathbf{k}}, \Pi_{\mathbf{k}}$ μπορεί να διαφέρει. Πρώτος ο Kyung [70] πρότεινε ότι για να υπάρξει σύζευξη μεταξύ των $\Delta_{\mathbf{k}}, \Pi_{\mathbf{k}}$, πρέπει αναγκαστικά: $f_{\mathbf{k}}^{dSC} = f_{\mathbf{k}}^{\pi SC}$. Στο συμπέρασμα αυτό μπορούμε να καταλήξουμε εξετάζοντας την γενική μορφή των συζευγμένων αυτοσυνεπών εξισώσεων που προκύπτουν για τις τρεις παραμέτρους τάξης (βλ. Εξ.4.10) παρακάτω). αν $f_{\mathbf{k}}^{dSC} \neq f_{\mathbf{k}}^{\pi SC}$, τότε $\int f_{\mathbf{k}}^{dSC} f_{\mathbf{k}}^{\pi SC} d\mathbf{k} = 0$, λόγω της συνθήκης ορθογωνιότητας μεταξύ διαφορετικών μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων και κατά συνέπεια ο όρος $\delta_{\mathbf{k}} M \Delta_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}}$ μηδενίζεται.

Δεδομένου ότι για όλους σχεδόν τους μέχρι τώρα ανακαλυφθέντες μη συμβατικούς singlet υπεραγωγούς (πλην των πνικτιδίων) υπάρχουν σαφείς ενδείξεις ότι έχουν $d_{x^2-y^2}$ συμμετρία, επιλέγουμε για την μελέτη μας $f_{\mathbf{k}} = (\cos k_x - \cos k_y)$.

Διαλέγοντας για τους υπολογισμούς μας $\mathbf{n} \parallel \hat{z}$, μπορούμε να γράψουμε αμέσως την Εξ.(4.1) στον 8-διάστατο σπινοριακό φορμαλισμό που αναπτύξαμε στα Κεφ.(2-3) ως:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} (\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 + \Pi_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_1 + \Delta_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 - \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3) \Psi_{\mathbf{k}} \quad (4.2)$$

όπου οι όροι $\gamma_{\mathbf{k}}, \delta_{\mathbf{k}}$ αντιστοιχούν, κατά τα γνωστά, στο αντιπεριοδικό και περιοδικό κομμάτι της $\xi_{\mathbf{k}}$ όσον αφορά μετατοπίσεις κατά το διάνυσμα τέλειας συναρμογής \mathbf{Q} . Η συνθήκη τέλειας συναρμογής ικανοποιείται όταν $\delta_{\mathbf{k}} = 0$, οπότε και το σύστημα διαθέτει συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής.

Αντιστρέφοντας την συνάρτηση Green-πίνακα: $\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = (i\omega_n - \hat{E}_{\mathbf{k}})^{-1}$, μπορούμε

³Επιπλέον, εφόσον το SDW είναι συμβατικό, $M_{\mathbf{k}} = M$. Παρ' όλα αυτά, κρατάμε τον δείκτη \mathbf{k} στον συμβολισμό του δεδομένου ότι είναι πιθανόν, σε μια πιο γενική θεώρηση, αυτό να παρουσιάζει κάποια ανισοτροπία την οποία εδώ αγνοούμε, όπως είθισται και στην σχετική ερευνητική βιβλιογραφία.

να την γράψουμε στην βάση των πινάκων Pauli ($\hat{\tau}_i \otimes \hat{\rho}_i \otimes \hat{\sigma}_i$) ως:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{G}}_o(\mathbf{k}, \omega_n) = & \left(-\omega_n - \hat{E}_{\mathbf{k}} \right) \otimes \left[A(\mathbf{k}', \omega_n) \hat{\tau}_2 + 2(i\gamma_{\mathbf{k}} (\delta_{\mathbf{k}} - H\mu_B \hat{\sigma}_3) \hat{\tau}_1 \right. \\ & + (\delta_{\mathbf{k}}^2 + H^2 \mu_B^2 - H\delta_{\mathbf{k}} \mu_B \hat{\sigma}_3) \hat{\tau}_2 + i(-HM_{\mathbf{k}} \mu_B + (M_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}}) \hat{\sigma}_3) \hat{\tau}_3 \\ & \left. - \hat{\rho}_1 (H\mu_B \Pi_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_2 - i\hat{\sigma}_1 (H\Delta_{\mathbf{k}} \mu_B \hat{\tau}_1 + \gamma_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3)) \right] \otimes \\ & \left[(B(\mathbf{k}', \omega_n) + 8H\mu_B (-M_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Pi_{\mathbf{k}}^2 + \omega^2)) \hat{\sigma}_3) \hat{\tau}_2 \right. \\ & - 8H\mu_B \hat{\rho}_1 (\hat{\sigma}_2 (M_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} + (\gamma_{\mathbf{k}}^2 - \delta_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2 - H^2 \mu_B^2) \Pi_{\mathbf{k}} \\ & - H\mu_B (\delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} - M_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}}) \hat{\tau}_1) - \gamma_{\mathbf{k}} (\delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} - M_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}}) \hat{\sigma}_1 \hat{\tau}_2) \\ & \left. - 4A(\mathbf{k}', \omega_n) H\mu_B (\delta_{\mathbf{k}} \hat{\sigma}_3 \hat{\tau}_2 - \Pi_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_2) \right] \times D(\mathbf{k}', \omega_n) \end{aligned} \quad (4.3)$$

όπου:

$$\hat{E}_{\mathbf{k}} = \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \delta_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - M_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 + \Pi_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_2 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_1 + \Delta_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_2 \hat{\sigma}_2 - \mu_B H \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \quad (4.4)$$

και:

$$\begin{aligned} A(\mathbf{k}', \omega_n) &= M_{\mathbf{k}'}^2 + \gamma_{\mathbf{k}'}^2 - \delta_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 + \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2 \\ B(\mathbf{k}', \omega_n) &= A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 - 4 \left(2M_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}} + (\gamma_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2 - 2H^2 \mu_B^2) \Pi_{\mathbf{k}}^2 \right. \\ & \quad \left. - H^2 \mu_B^2 \omega_n^2 - \delta_{\mathbf{k}}^2 (\Delta_{\mathbf{k}}^2 + H^2 \mu_B^2 + \Pi_{\mathbf{k}}^2 + \omega_n^2) \right) \\ D(\mathbf{k}', \omega_n) &= [(\omega_n^2 + E_{++}^2(\mathbf{k}')) (\omega_n^2 + E_{+-}^2(\mathbf{k}')) (\omega_n^2 + E_{-+}^2(\mathbf{k}')) (\omega_n^2 + E_{--}^2(\mathbf{k}'))]^{-1} \end{aligned}$$

Οι κλάδοι διασποράς των οιονεί-σωματιδίων βρίσκονται είτε από του πόλους της συνάρτησης Green είτε διαγωνιοποιώντας κατευθείαν την $\hat{E}_{\mathbf{k}}$ και είναι της μορφής:

$$E_{+\pm}(\mathbf{k}) = -\mu_B H + \sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 + \delta_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Pi_{\mathbf{k}}^2 \pm \Gamma(\mathbf{k})} \quad (4.5)$$

$$E_{-\pm}(\mathbf{k}) = -\mu_B H - \sqrt{M_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 + \delta_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Pi_{\mathbf{k}}^2 \pm \Gamma(\mathbf{k})} \quad (4.6)$$

$$\Gamma(\mathbf{k}) = 2\sqrt{(M_{\mathbf{k}}^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2) \delta_{\mathbf{k}}^2 + 2\delta_{\mathbf{k}} M_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \Pi_{\mathbf{k}} + (\gamma_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2) \Pi_{\mathbf{k}}^2}$$

Οι εξισώσεις αυτοσυνέπειας βρίσκονται προβάλλοντας την συνάρτηση Green στο κάθε κανάλι συμμετρίας σύμφωνα με τον τύπο (3.8):

$$\begin{aligned}
 M_{\mathbf{k}} = & T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} \times \left\{ M_{\mathbf{k}'} \left(C(\mathbf{k}', \omega_n) + 2A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 \delta_{\mathbf{k}'}^2 - 4A(\mathbf{k}', \omega_n) \delta_{\mathbf{k}'}^2 (M_{\mathbf{k}'}^2 \right. \right. \\
 & + \left. \gamma_{\mathbf{k}'}^2 - \delta_{\mathbf{k}'}^2) + 16\delta_{\mathbf{k}'}^2 (\Delta_{\mathbf{k}'}^2 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2 \omega_n^2) \right) - 2\delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} [A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 \\
 & - 4((\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2) \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \mu_B^2 H^2 \omega_n^2 - \delta_{\mathbf{k}'}^2 (\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - \mu_B^2 H^2 + \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2))] \left. \right\} \times D(\mathbf{k}', \omega_n) \quad (4.7)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\mathbf{k}} = & T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{dSC} \left\{ \Delta_{\mathbf{k}'} \left(-C(\mathbf{k}', \omega_n) + 2A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 - 4A(\mathbf{k}', \omega_n) \delta_{\mathbf{k}'}^2 (\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 \right. \right. \\
 & + \left. 5\Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2) + 8[3M_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'}^3 \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} - 3M_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'}^3 - (\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2) \Pi_{\mathbf{k}'}^4 + \delta_{\mathbf{k}'}^2 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 \right. \\
 & \times (3\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + 4\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - 3H^2 \mu_B^2 + 3\Pi_{\mathbf{k}'}^2) - \delta_{\mathbf{k}'}^4 (\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 + 3\Pi_{\mathbf{k}'}^2) - (\delta_{\mathbf{k}'}^4 + H^2 \mu_B^2 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 \\
 & + \left. \delta_{\mathbf{k}'}^2 (H^2 \mu_B^2 - 3\Pi_{\mathbf{k}'}^2) \omega_n^2 \right] + 2\delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} [A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 - 4(\gamma_{\mathbf{k}'}^2 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + H^2 \mu_B^2 (\delta_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2) \\
 & - \left. \delta_{\mathbf{k}'}^2 (\Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2))] \right\} \times D(\mathbf{k}', \omega_n) \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Pi_{\mathbf{k}} = & T \sum_{\mathbf{k}'} \sum_n V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{Qtr} \left\{ -\Pi_{\mathbf{k}'} \left(C(\mathbf{k}', \omega_n) - 2A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 (\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2) + 4A(\mathbf{k}', \omega_n) \delta_{\mathbf{k}'}^2 \right. \right. \\
 & \times (5\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 + \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2) + 8[-3M_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'}^3 \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} + 3M_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}^3 \Pi_{\mathbf{k}'} + \gamma_{\mathbf{k}'}^4 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 \\
 & + \Delta_{\mathbf{k}'}^4 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + H^2 \Delta_{\mathbf{k}'}^2 \mu_B^2 \omega_n^2 + \delta_{\mathbf{k}'}^4 (3\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 + \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2) + \delta_{\mathbf{k}'}^2 (-3\Delta_{\mathbf{k}'}^4 \\
 & + H^2 \mu_B^2 \omega_n^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2 (3H^2 \mu_B^2 - 4\Pi_{\mathbf{k}'}^2 - 3\omega_n^2)) + \gamma_{\mathbf{k}'}^2 (3M_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} + 2\Delta_{\mathbf{k}'}^2 \Pi_{\mathbf{k}'}^2 \\
 & + \left. H^2 \mu_B^2 \omega_n^2 - \delta_{\mathbf{k}'}^2 (3\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 + 2\Pi_{\mathbf{k}'}^2 + \omega_n^2))] \right) + 2M_{\mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} (A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 \\
 & - \left. 4H^2 \mu_B^2 \omega_n^2 + 4\delta_{\mathbf{k}'}^2 (\Delta_{\mathbf{k}'}^2 - H^2 \mu_B^2 + \omega_n^2)) \right\} \times D(\mathbf{k}', \omega_n) \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

όπου:

$$\begin{aligned}
 C(\mathbf{k}', \omega_n) = & A(\mathbf{k}', \omega_n) \left(A(\mathbf{k}', \omega_n)^2 + 2A(\mathbf{k}', \omega_n) \delta_{\mathbf{k}'}^2 \right. \\
 & \left. - 8\delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} - 4(\gamma_{\mathbf{k}'}^2 + \Delta_{\mathbf{k}'}^2) \Pi_{\mathbf{k}'}^2 + 4\mu_B^2 H^2 \omega_n^2 \right)
 \end{aligned}$$

Μία προσεκτική διερεύνηση των παραπάνω εξισώσεων οδηγεί στο συμπέρασμα ότι αυτές

έχουν την γενική δομή:

$$\begin{aligned}
 M_{\mathbf{k}} &= \sum_n \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} \left\{ M_{\mathbf{k}'} \{ \dots \} + \delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} \{ \dots \} \right\} \\
 \Delta_{\mathbf{k}} &= \sum_n \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{dSC} \left\{ \Delta_{\mathbf{k}'} \{ \dots \} + \delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} \{ \dots \} \right\} \\
 \Pi_{\mathbf{k}} &= \sum_n \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{Qtr} \left\{ \Pi_{\mathbf{k}'} \{ \dots \} + \delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \{ \dots \} \right\}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Στο δεξί μέρος κάθε εξίσωσης αυτοσυνέπειας για κάθε χάσμα, υπάρχουν επιπλέον όροι οι οποίοι δεν είναι ανάλογοι με το χάσμα στο αριστερό μέρος της ίδιας εξίσωσης. Παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής, αν δυο από τις παραμέτρους τάξης είναι μη μηδενικές, τότε η τρίτη παράμετρος τάξης είναι αναγκαστικά επίσης μη μηδενική. Επιπλέον, οι νέοι αυτοί μη-BCS όροι, είναι άρτιοι ως προς τις συχνότητες Matsubara, έτσι ώστε μετά το άθροισμα σε αυτές αναμένουμε να παραμένουν μη μηδενικοί. Υπό αυτές τις συνθήκες, είναι δυνατόν να βρούμε ως λύση του παραπάνω συστήματος είτε μία από τις τρεις παραμέτρους τάξης ή ταυτόχρονη συνύπαρξη και των τριών.

Οδηγούμαστε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής, οι παράμετροι τάξης για το SDW, την singlet $d_{x^2-y^2}$ -wave και την π-triplet υπεραγωγιμότητα αποτελούν ένα μοτίβο από συμπυκνώματα που συνυπάρχουν. Αυτό το μοτίβο δεδομένου των συνθηκών, μπορεί να κάνει την εμφάνισή του ως την θερμοδυναμικά σταθερή κατάσταση ενός υπεραγωγού οδηγώντας έτσι σε απρόσμενα φαινόμενα τα οποία θα αναλύσουμε στην συνέχεια. Αξίζει να σημειωθεί ότι, λόγω της γενικότητας του φορμαλισμού, τα παραπάνω συμπεράσματα, εν γένει, είναι ανεξάρτητα από τις μικροσκοπικές παραμέτρους ενός συγκεκριμένου υλικού, με αποτέλεσμα να ισχύουν για κάθε αντισιδηρομαγνητικό $d_{x^2-y^2}$ - wave υπεραγωγό.

Ακολουθώντας την μέθοδο των ολοκληρωτικών υπολοίπων, μπορούμε να κάνουμε αναλυτικά την άθροιση στις συχνότητες Matsubara στο σύστημα εξισώσεων (4.7-4.9). Τελικά οδηγούμαστε στην τελική μορφή των εξισώσεων:

$$\begin{aligned}
 M_{\mathbf{k}} &= \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{SDW} \frac{1}{4C_0(\mathbf{k}')} \left\{ M_{\mathbf{k}'} \left(\frac{C_0(\mathbf{k}') + \delta_{\mathbf{k}'}^2}{C_1(\mathbf{k}')} [n_F(E_{-+}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{++}(\mathbf{k}'))] \right. \right. \\
 &+ \left. \frac{C_0(\mathbf{k}') - \delta_{\mathbf{k}'}^2}{C_2(\mathbf{k}')} [n_F(E_{--}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{+-}(\mathbf{k}'))] \right) + \delta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} \\
 &\times \left. \left(\frac{n_F(E_{++}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{-+}(\mathbf{k}'))}{C_1(\mathbf{k}')} + \frac{n_F(E_{--}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{+-}(\mathbf{k}'))}{C_2(\mathbf{k}')} \right) \right\} \tag{4.11}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Delta_{\mathbf{k}} = & \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{dSC} \frac{1}{4C_0(\mathbf{k}')} \left\{ \Delta_{\mathbf{k}'} \left(\frac{C_0(\mathbf{k}') + \Pi_{\mathbf{k}'}^2}{C_1(\mathbf{k}')} [n_F(E_{-+}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{++}(\mathbf{k}'))] + \frac{C_0(\mathbf{k}') - \Pi_{\mathbf{k}'}^2}{C_2(\mathbf{k}')} \right. \right. \\
 & \times [n_F(E_{--}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{+-}(\mathbf{k}'))] \left. \right) + \delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \Pi_{\mathbf{k}'} \left(\frac{n_F(E_{++}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{-+}(\mathbf{k}'))}{C_1(\mathbf{k}')} \right. \\
 & \left. \left. + \frac{n_F(E_{--}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{+-}(\mathbf{k}'))}{C_2(\mathbf{k}')} \right) \right\} \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Pi_{\mathbf{k}} = & \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\pi SC} \frac{1}{4C_0(\mathbf{k}')} \left\{ \Pi_{\mathbf{k}'} \left(\frac{C_0(\mathbf{k}') + \Delta_{\mathbf{k}'}^2 + \gamma_{\mathbf{k}'}^2}{C_1(\mathbf{k}')} [n_F(E_{-+}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{++}(\mathbf{k}'))] \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{C_0(\mathbf{k}') - \Delta_{\mathbf{k}'}^2 - \gamma_{\mathbf{k}'}^2}{C_2(\mathbf{k}')} [n_F(E_{--}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{+-}(\mathbf{k}'))] \right) + \delta_{\mathbf{k}'} M_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'} \right. \\
 & \left. \times \left(\frac{n_F(E_{++}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{-+}(\mathbf{k}'))}{C_1(\mathbf{k}')} + \frac{n_F(E_{--}(\mathbf{k}')) - n_F(E_{+-}(\mathbf{k}'))}{C_2(\mathbf{k}')} \right) \right\} \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

όπου:

$$C_0(\mathbf{k}') = \frac{\Gamma(\mathbf{k}')}{2}, \quad C_1(\mathbf{k}') = \frac{E_{++}^2(\mathbf{k}') - E_{-+}^2(\mathbf{k}')}{2}, \quad C_2(\mathbf{k}') = \frac{E_{+-}^2(\mathbf{k}') - E_{--}^2(\mathbf{k}')}{2} \quad (4.14)$$

4.2.2 Αριθμητική διερεύνηση - νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το πεδίο σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς

Για την αριθμητική επίλυση των συζευγμένων αυτοσυνεπών εξισώσεων (4.11)-(4.13) θεωρούμε ένα πλέγμα με τετραγωνική συμμετρία για το οποίο η ενεργειακή διασπορά της κανονικής του κατάστασης περιγράφεται μέσω του μοντέλου του ισχυρού δεσμού και δίνεται από την σχέση: $\xi_{\mathbf{k}} = -t(\cos k_x + \cos k_y) - t' \cos k_x \cos k_y$, όπου t, t' είναι η ενέργεια μεταπήδησης των ηλεκτρονίων στις κοντινότερες και τις επόμενες πιο κοντινές γειτονικές πλεγματικές θέσεις. Σύμφωνα με τα όσα είπαμε στην ενότητα 2.3, έχουμε: $\gamma_{\mathbf{k}} = -t(\cos k_x + \cos k_y)$ και $\delta_{\mathbf{k}} = -t' \cos k_x \cos k_y$. Για $t' = 0$, η επιφάνεια Fermi έχει κυματόνυσμα τέλειας συναρμογής το $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ και το σύστημα διαθέτει συμμετρία ηλεκτρονίου-οπής καθώς η ενεργειακή ζώνη είναι ημικατελιημμένη από ηλεκτρόνια. Θέτοντας $t' \neq 0$, διαταράσσουμε την συνθήκη τέλειας συναρμογής ενώ παράλληλα εισάγουμε ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής στο σύστημα. Στο εξής, θέτουμε $t = 1$. Η τιμή αυτή καθορίζει την ενεργειακή κλίμακα για τις υπόλοιπες παραμέτρους της θεωρίας. Για τον όρο t' θεωρούμε τιμές στο διάστημα $t' \in [0, 0.5]$, έτσι ώστε να διερευνήσουμε την επίδραση της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής.

Είναι προφανές ότι κάθε διάγραμμα φάσης για τα M, Δ, Π συναρτήσει των παραμέτρων T, H, t' , εξαρτάται από τις τιμές των αντίστοιχων ενεργών δυναμικών σχέδασης $V^{SDW}, V^{dSC}, V^{\pi SC}$ τα οποία καθορίζουν το πόσο ισχυρή είναι η σύζευξη στο αντίστοιχο κανάλι συμμετρίας. Η αριθμητική διερεύνηση των πιθανών διαγραμμάτων φάσης συναρτήσει των T, t' για $H = 0$ είναι ήδη διαθέσιμη στην διεθνή βιβλιογραφία [70]. Ένα χαρακτηριστικό εύρημα των μελετών αυτών είναι ότι ο π -triplet όρος είναι υπολειπόμενος των δυο άλλων. Κατά συνέπεια, για $T = t' = 0$, η θεμελιώδης κατάσταση μπορεί να είναι είτε συνύπαρξη $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητας με SDW ή μια καθαρή φάση μιας από τις δυο αυτές καταστάσεις.

Από τις τρεις αυτές πιθανές θεμελιώδεις καταστάσεις, επικεντρωθήκαμε στις περιπτώσεις όπου το σύστημα είναι υπεραγωγίμο. Προκειμένου να διερευνήσουμε τις μεταβάσεις που μπορούν να προκύψουν συναρτήσει του πεδίου, το σύστημα των εξισώσεων (4.11)-(4.13) επιλύθηκε αριθμητικά μέσω μιας επαναληπτικής μεθόδου για έναν μεγάλο αριθμό συνδυασμών των ενεργών δυναμικών σχέδασης με τιμές $V^i \in [1t, 4t]$, καθώς και για διάφορες τιμές των t', H για $T = 0$. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι αυτοσυνεπείς λύσεις μας όταν τα ενεργά δυναμικά και των τριών παραμέτρων τάξης έχουν κοντινές τιμές μεταξύ τους, $V^{SDW} \approx V^{dSC} \approx V^{\pi SC} = V^i$. Στην περίπτωση αυτή, το μαγνητικό πεδίο επάγει μεταβάσεις σε μια φάση συνύπαρξης $dSC + \pi SC + SDW$ και μάλιστα με κυρίαρχο όρο τον π -triplet. Συγκεκριμένα, βρέθηκαν δυο γενικές περιπτώσεις μεταβάσεων συναρτήσει του πεδίου στις οποίες στο εξής θα αναφερόμαστε ως I και II:

I. $V^i < 2$: $dSC \rightarrow \pi SC + dSC(+SDW)$, για $t' = 0$ ($\neq 0$).

II. $V^i > 2$: $dSC + SDW(+\pi SC) \rightarrow \pi SC + dSC + SDW$, για $t' = 0$ ($\neq 0$).

Αξίζει να σημειωθεί ότι μεταβάσεις τέτοιου τύπου δεν έχουν συζητηθεί ποτέ στο παρελθόν στην διεθνή βιβλιογραφία και αποτελούν ένα απολύτως πρωτότυπο εύρημα στα πλαίσια της παρούσας διατριβής. Στις επόμενες ενότητες θα εξετάσουμε το διάγραμμα φάσης $T - H$ κάθε περίπτωσης συνδέοντάς το με πειραματικά δεδομένα για συγκεκριμένα υλικά. Πρώτα όμως, θα αναπτύξουμε το θεωρητικό πλαίσιο για τον χαρακτηρισμό της φαινομενολογίας των μεταβάσεων αυτών, μελετώντας τις μαγνητικές ιδιότητές τους.

4.3 Μαγνητικές ιδιότητες

Η εύρεση της σύνθετης κατάστασης όπου συνυπάρχουν οι παράμετροι τάξης SDW, d-wave singlet και π -triplet υπεραγωγιμότητα αποτελεί μια δύσκολη πειραματική διαδικασία εξαιτίας του πολύπλοκου σήματος το οποίο αναμένεται να παράγει μια τέτοια φάση όταν αυτή διαταραχτεί από ένα εξωτερικό αίτιο.

Δεδομένου ότι στην φάση αυτή συνυπάρχουν μαγνητικές καταστάσεις, όπως είναι το SDW και η π -triplet υπεραγωγιμότητα, είναι λογικό το σύστημα αυτό να παρουσιάζει ιδιαίτερη απόκριση όσον αφορά τους σπιν βαθμούς ελευθερίας. Έτσι, κατάλληλες μετρήσεις για τον εντοπισμό της είναι οι μαγνητικές μέσω, για παράδειγμα, τεχνικών Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού ή μετρήσεων μαγνήτισης. Ειδικά η πρώτη τεχνική αποτελεί πολύ σημαντικό εργαλείο για την αναγνώριση φάσεων επαγόμενων από μαγνητικά πεδία, όπως π.χ. στην περίπτωση του CeCoIn_5 που θα συζητήσουμε σε επόμενη ενότητα.

Θεωρητικά, ο χαρακτηρισμός ενός συστήματος ως προς τις μαγνητικές του ιδιότητες, ουσιαστικά συνίσταται στον υπολογισμό της μαγνητικής του επιδεκτικότητας. Η ποσότητα αυτή, είναι μια συνάρτηση απόκρισης η οποία μετρά την απόκριση των σπιν του συστήματος σε ένα εξωτερικό μαγνητικό πεδίο. Στην διεθνή βιβλιογραφία, οι μοναδικοί διαθέσιμοι υπολογισμοί για το σύστημα αυτό, περιορίζονταν στο ομοιογενές και στατικό όριο απουσία του μαγνητικού πεδίου [24]. Στην ενότητα αυτή θα εξάγουμε πρωτότυπα αποτελέσματα για την γενικευμένη μαγνητική επιδεκτικότητα της σύνθετης αυτής φάσης, συμπεριλαμβάνοντας την εξάρτησή της από την θερμοκρασία, τη νόθευση/πίεση και το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

4.3.1 Μαγνητική επιδεκτικότητα

Το μετρήσιμο πειραματικά μέγεθος, αποτέλεσμα της μαγνητικής διέγερσης, είναι η μαγνήτιση την οποία επάγει το πεδίο. Σύμφωνα με την θεωρία της γραμμικής απόκρισης, η δυναμική και χωρικά εξαρτημένη μαγνητική επιδεκτικότητα υπολογίζεται από μία σχέση τύπου Kubo ως η συνάρτηση συσχέτισης ανάμεσα στην μαγνήτιση δύο σωματιδίων τα οποία βρίσκονται σε διαφορετικά χρονικά και χωρικά σημεία [41]:

$$m_\mu(x) = \sum_\nu \int \chi_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') H_\nu(\mathbf{r}', t') d^3r' dt' \quad (4.15)$$

Γενικά, υπάρχουν δυο ειδών διεργασίες τις οποίες μπορεί να προκαλέσει η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου: διεργασίες πόλωσης του σπιν και διεργασίες αλλαγής κατεύθυνσης του σπιν (spin-flip). Στην πρώτη περίπτωση η αντίστοιχη επιδεκτικότητα λέγεται διαμήκης (χ_{zz}) και στην δεύτερη εγκάρσια (χ_{+-}). Κάθε μια από αυτές είναι χρήσιμη για τον υπολογισμό περαιτέρω μαγνητικών ιδιοτήτων όπως για παράδειγμα η μετατόπιση κατά Knight. Θεωρώντας το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο παράλληλο στον άξονα χβάντωσης \hat{z} , οι χ_{zz} και

χ_{+-} ταυτίζονται με την παράλληλη (χ_{\parallel}) και την κάθετη (χ_{\perp}) επιδεκτικότητα.

Οι σχέσεις για την μαγνήτιση είναι [41]:

$$m_z(\mathbf{q}) = \mu_B \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \quad , \quad m_x(\mathbf{q}) = \mu_B \sum_{\mathbf{k}} \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} \right) \quad (4.16)$$

και ουσιαστικά αναλογούν στον τελεστή πυκνότητας του σπιν (στο εξής $\mu_B = 1$). Στην 8-διάστατη σπινοριακή βάση, αυτές μπορούν να γραφτούν ως:

$$m_z(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \quad , \quad m_x(\mathbf{q}, \tau) = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger(\tau) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau) \quad (4.17)$$

όπου έχουμε εισάγει την χρονική εξάρτηση γράφοντας τους τελεστές στον φανταστικό χρόνο στην αναπαράσταση Heisenberg . Μετασχηματίζοντας κατά Fourier περνάμε στον χώρο των συχνοτήτων Matsubara. Οι παραπάνω εξισώσεις γράφονται σε τετραδιανυσματικό συμβολισμό ($\tilde{\mathbf{k}} = (ik_n, \mathbf{k})$) ως:

$$m_z(\tilde{\mathbf{q}}) = \frac{1}{4} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \quad , \quad m_x(\tilde{\mathbf{q}}) = \frac{1}{4} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \Psi(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \quad (4.18)$$

όπου $\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} = T \sum_{\mathbf{k}, ik_n}$. Οι διαμήκης και η εγκάρσια επιδεκτικότητα του σπιν στον σπινοριακό φορμαλισμό λοιπόν, δίνονται από τις παρακάτω συναρτήσεις συσχέτισης⁴:

$$\chi_{zz}(\tilde{\mathbf{q}}) = \langle T_\tau m_z(\tilde{\mathbf{q}}) m_z(-\tilde{\mathbf{q}}) \rangle \quad (4.19)$$

$$= \frac{1}{8} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}'} - \tilde{\mathbf{q}}) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \Psi(\tilde{\mathbf{k}'}) \rangle \quad (4.20)$$

$$\chi_{\perp}(\tilde{\mathbf{q}}) = \sum_{\lambda\mu} \langle T_\tau m_x^{\lambda\mu}(\tilde{\mathbf{q}}) m_x^{\lambda\mu}(-\tilde{\mathbf{q}}) \rangle \quad (4.21)$$

$$= \frac{1}{8} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \Psi(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \Psi^\dagger(\tilde{\mathbf{k}'} - \tilde{\mathbf{q}}) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \Psi(\tilde{\mathbf{k}'}) \rangle \quad (4.22)$$

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Wick (βλ. Παρ.B'.2) τελικά καταλήγουμε στις εξής εκφράσεις:

$$\chi_{\parallel}(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{1}{8} T \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{G}(\mathbf{k}, ik_n) \right\} \quad (4.23)$$

$$\chi_{\perp}(\mathbf{q}, iq_n) = -\frac{1}{8} T \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, ik_n + iq_n) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{G}(\mathbf{k}, ik_n) \right\} \quad (4.24)$$

⁴όπου έχουμε πολλαπλασιάσει επί 2 κάθε όρο έτσι ώστε να κανονικοποιήσουμε τις επιδεκτικότητες με αυτήν της κανονικής κατάστασης

4.3 Μαγνητικές ιδιότητες

Η άθροιση στις συχνότητες Matsubara και η αναλυτική συνέχιση γίνεται με την βοήθεια της μεθοδολογίας που αναπτύξαμε στο Παρ. Β', οπότε και καταλήγουμε στις σχέσεις:

$$\chi'_{\parallel(\perp)}(\mathbf{q}, \omega) = -\frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i,j} a_{ij}^{\parallel(\perp)} b_{ji}^{\parallel(\perp)} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)}{\omega + E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j} \quad (4.25)$$

$$\chi''_{\parallel(\perp)}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{\pi}{8} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i,j} a_{ij}^{\parallel(\perp)} b_{ji}^{\parallel(\perp)} (n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)) \delta(\omega + E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \quad (4.26)$$

όπου $a_{ij}^{\parallel(\perp)}$ το (i, j) στοιχείο του πίνακα $\hat{A}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\parallel(\perp)}$ και $b_{ji}^{\parallel(\perp)}$ το (j, i) στοιχείο του πίνακα $\hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\parallel(\perp)}$.
Και:

$$\hat{A}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\parallel} = \hat{U}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \quad , \quad \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\parallel} = \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (4.27)$$

$$\hat{A}_{\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\perp} = \hat{U}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \quad , \quad \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \mathbf{k}}^{\perp} = \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_1 \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (4.28)$$

Ο μοναδιαίος πίνακας $\hat{U}_{\mathbf{k}}$ διαγωνιοποιεί την $\hat{E}_{\mathbf{k}}$, σύμφωνα μέσω ενός γενικευμένου μετασχηματισμού Bogoliubov, όπως αναλύσαμε στην ενότητα 3.2. Δεδομένου της πολυπλοκότητας των εξισώσεων που εμπλέκονται, αυτός υπολογίζεται αριθμητικά σύμφωνα με την μέθοδο που εισάγαμε στην ίδια ενότητα.

Οι εξισώσεις (4.25)-(4.26) αποτελούν τις γενικές εκφράσεις για την διαμήκη και την εγκάρσια δυναμική και ανομοιογενή επιδεικτικότητα των σπιν. Ως εκ τούτου, είναι αρκετές για τον χαρακτηρισμό των μαγνητικών ιδιοτήτων ενός συστήματος. Σύμφωνα δε, με την μέθοδο που εισήχθη στην παρούσα διατριβή, οι εξισώσεις αυτές μπορούν να λυθούν αριθμητικά ανεξαρτήτως της πολυπλοκότητας της Χαμιλτονιανής του δεδομένου προβλήματος.

4.3.2 Πυρηνικός Μαγνητικός Συντονισμός (NMR)

Σε ένα πείραμα Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (ΠΜΣ ή NMR⁵), αρχικά ένα υλικό τοποθετείται σε ένα στατικό, ομοιογενές μαγνητικό πεδίο. Το πεδίο αυτό πολώνει τα σπιν του πυρήνα με αποτέλεσμα την δημιουργία διεγερμένων καταστάσεων με σπιν παράλληλο στο πεδίο (για παράδειγμα, ως υποθέσουμε πυρηνικό σπιν 1/2), όπου η ενεργειακή διαφορά μεταξύ μιας διεγερμένης, σπιν-πάνω, και της θεμελιώδους, σπιν-κάτω, κατάστασης ισούται με ω_0 . Στην συνέχεια, προσπίπτει στο δείγμα ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και μετράται το φάσμα απορρόφησης. Αν η σπιν-πάνω κατάσταση είναι ιδιοκατάσταση του συστήματος, τότε στο φάσμα απορρόφησης της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας εμφανίζεται μια κορυφή συντονισμού για $\omega = \omega_0$. Στην ιδανική περίπτωση, η κορυφή αυτή είναι μια συνάρτηση δέλτα στο ω_0 .

Στα πραγματικά υλικά, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των πυρηνικών σπιν και των υπόλοιπων

⁵Nuclear Magnetic Resonance

διεγέρσεων του συστήματος (π.χ. ηλεκτρόνια, φωνόνια, μαγνόνια κ.λ.π.) διευρύνουν την κορυφή αυτή, προσδίδοντας στην σπιν-πάνω κατάσταση έναν πεπερασμένο χρόνο ζωής T_1 . Το πλάτος της διευρυμένης κορυφής συντονισμού ισούται με $1/T_1$ και ονομάζεται ρυθμός χαλάρωσης σπιν-πλέγματος⁶. Ακόμη, οι αλληλεπιδράσεις αυτές μπορούν να προκαλέσουν και μια μετατόπιση της κορυφής συντονισμού, γνωστή και ως μετατόπιση κατά Knight. Ο πειραματικός προσδιορισμός, του T_1 και της μετατόπισης Knight παρέχει σημαντική πληροφορία για τις μαγνητικές ιδιότητες ενός υλικού σε μικροσκοπικό επίπεδο και μάλιστα για όλο τον όγκο του υλικού⁷.

Η βασική Χαμιλτονιανή για την περιγραφή του πυρηνικού σπιν σε μέταλλα παρουσία ενός μαγνητικού πεδίου, μπορεί να γραφτεί ως άθροισμα των δυο επικρατέστερων όρων [74, 3]: $H = \gamma\hbar\mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{I} + H_{hf}$, όπου γ είναι ο πυρηνικός γυρομαγνητικός λόγος, \mathbf{I} ο πυρηνικός τελεστής σπιν, \mathbf{H}_0 το τοπικό μαγνητικό πεδίο και H_{hf} είναι η αλληλεπίδραση «υπέρλεπτης υψής» μεταξύ του πυρηνικού σπιν και των σπιν των οιονεί-σωματιδίων του συστήματος:

$$H_{hf} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r} = 0) + \sum_i B_i \mathbf{I} \cdot \mathbf{S}(\mathbf{r}_i) \quad (4.29)$$

Ο πρώτος όρος αντιστοιχεί σε μια τοπική αλληλεπίδραση μεταξύ πυρηνικών και των υπολοίπων σπιν και ο δεύτερος σε αλληλεπιδράσεις μεταξύ γειτονικών σπιν, οι οποίες συνήθως έχουν μικρότερη συνεισφορά[74]. Κρατώντας τον πρώτο όρο, η Εξ.(4.29) γράφεται:

$$H_{hf} = \mathbf{AI} \cdot \mathbf{S} = AI_z S_z + \frac{1}{2} (I_+ S_- + I_- S_+) \quad (4.30)$$

Ο πρώτος όρος ευθύνεται για την μετατόπιση κατά Knight. Το ποσοστό της μετατόπισης, K , είναι ανάλογο της μαγνητικής επιδεκτικότητας: $K \sim \chi$. Δηλαδή, μέτρηση της μετατόπισης κατά Knight ισοδυναμεί με την εύρεση της στατικής, ομοιογενούς μαγνητικής επιδεκτικότητας του υλικού. Ο δεύτερος όρος περιγράφει διεργασίες αλλαγής κατεύθυνσης του σπιν (spin-flip) και οδηγεί στην δυναμική επανάπαυση των διεγερμένων πυρηνικών σπιν πίσω στην θεμελιώδη κατάσταση. Μέσω του χρυσού κανόνα του Fermi, μπορεί να δείχτεί ότι ο ρυθμός επανάπαυσης, δίνεται από την σχέση:

$$T_1^{-1} = \gamma^2 A^2 \int_0^\infty \langle \hat{S}_+(t) \hat{S}_-(0) \rangle e^{i\omega_0 t} dt \quad (4.31)$$

όπου η ποσότητα στις αγκύλες είναι μια συνάρτηση συσχέτισης που περιγράφει τις διακυμάνσεις του σπιν. Μέσω του ομώνυμου θεωρήματος το οποίο συνδέει τις διακυμάνσεις με

⁶spin-lattice relaxation rate

⁷bulk probe

την διασπορά[40, 41], η παραπάνω σχέση παίρνει την μορφή⁸:

$$T_1^{-1} = T \lim_{\omega_0 \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{q}} A_{\mathbf{q}}^2 \frac{\chi''_{+-}(\mathbf{q}, \omega_0)}{\omega_0} \quad (4.32)$$

Στην, παραπάνω εξίσωση, η οποία εισήχθη από τον Moriya[75], έχει συμπεριληφθεί και ο δεύτερος όρος της Εξ.(4.29). Το όριο $\omega_0 \rightarrow 0$ προκύπτει επειδή στην πράξη η συχνότητα συντονισμού είναι αμελητέα σε σχέση με τις υπόλοιπες ενεργειακές κλίμακες του προβλήματος.

4.3.3 Μετατόπιση κατά Knight

Η στατική και ομοιογενής σπιν επιδεκτικότητα υπολογίζεται αριθμητικά από την Εξ.(4.25) για $iq_n = \mathbf{q} = 0$. Για $H = 0$, μπορούμε ξεκινώντας από τις Εξ.(4.23-4.24) :

$$\chi_{\parallel(\perp)} = -\frac{1}{8}T \sum_{\mathbf{k}, ik_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_{3(1)} \hat{G}(\mathbf{k}, ik_n) \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_{3(1)} \hat{G}(\mathbf{k}, ik_n) \right\} \quad (4.33)$$

να βρούμε αναλυτικές σχέσεις. Στον χώρο των συχνοτήτων Matsubara αυτές έχουν ως εξής:

$$\begin{aligned} \chi_{\parallel} = & -T \sum_{k'} \sum_n \left\{ A(k', \omega_n)^3 - 2A(k', \omega_n)^2 (2\delta_{k'}^2 + \omega_n^2) + (\delta_{k'}^4 + 2M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'}) \right. \\ & - (\gamma_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2 (4A(k', \omega_n) + 8\omega_n^2) + 4\delta_{k'}^2 (A(k', \omega_n) (\Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2 - \omega_n^2) \\ & \left. + 2\omega_n^2 (\Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2 + \omega_n^2)) \right\} \left[(\omega_n^2 + E_+^2(k'))^2 (\omega_n^2 + E_-^2(k'))^2 \right]^{-1} \end{aligned} \quad (4.34)$$

$$\begin{aligned} \chi_{\perp} = & -T \sum_{k'} \sum_n \left\{ -A(k', \omega_n)^3 + 2A(k', \omega_n)^2 (\gamma_{k'}^2 + 3\delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2) - 8(\gamma_{k'}^2 + \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2) \right. \\ & \times (-\delta_{k'}^4 - 2M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} + (\gamma_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 (\Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2)) + 8\delta_{k'}^2 (-\gamma_{k'}^2 + \delta_{k'}^2 \\ & + \Delta_{k'}^2) \omega_n^2 - 4A(k', \omega_n) (3\delta_{k'}^4 + 2M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} - \Delta_{k'}^2 \Pi_{k'}^2 + \gamma_{k'}^2 (2\delta_{k'}^2 - \Pi_{k'}^2) \\ & \left. + \delta_{k'}^2 (3\Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2 + \omega_n^2)) \right\} \left[(\omega_n^2 + E_+^2(k'))^2 (\omega_n^2 + E_-^2(k'))^2 \right]^{-1} \end{aligned} \quad (4.35)$$

όπου $E_{\pm}^2(\mathbf{k}) = (M^2 + \gamma_{\mathbf{k}}^2 + \delta_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2 + \Pi_{\mathbf{k}}^2 \pm \Gamma(\mathbf{k}))$ είναι οι πόλοι της συνάρτησης Green απουσία του πεδίου. Η άθροιση στις συχνότητες Matsubara έγινε με την βοήθεια της μεθόδου των ολοκληρωτικών υπολοίπων. Η τελική έκφραση για την στατική και ομοιογενή

⁸στο εξής θέτουμε $\gamma = 1$

διαμήκη επιδεικτικότητα απουσία εξωτερικού πεδίου είναι της απλής μορφής:

$$\chi_{\parallel} = \frac{1}{4T} \sum_{k'} \left\{ 2 - \tanh^2 \left(\frac{E_+(k')}{2T} \right) - \tanh^2 \left(\frac{E_-(k')}{2T} \right) \right\} \quad (4.36)$$

Η αντίστοιχη έκφραση για την εγκάρσια επιδεικτικότητα είναι αρκετά μακροσκελής και δίνεται στο Παρ.(B.3).

4.3.4 Ρυθμός επανάπαυσης σπιν-πλέγματος

Με την βοήθεια της Εξ.(4.26) η Εξ.(4.32) γράφεται:

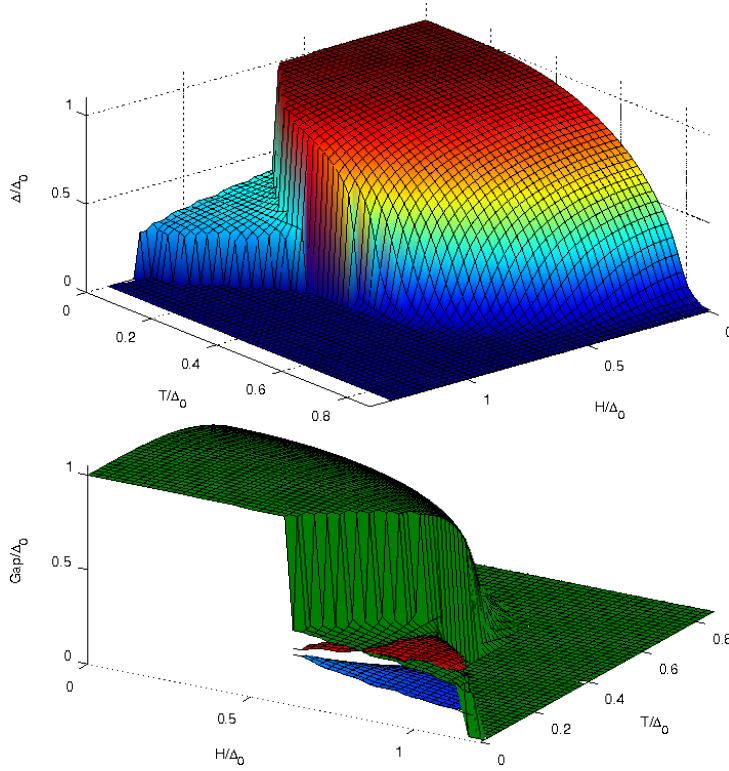
$$\begin{aligned} T_1^{-1} &= \frac{\pi T}{8} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{i, j} a_{ij}^{\perp} b_{ji}^{\perp} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)}{\omega} \delta(\omega + E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \\ &= \frac{\pi T}{8} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{i, j} a_{ij}^{\perp} b_{ji}^{\perp} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(\omega + E_{\mathbf{k}}^i)}{\omega} \delta(\omega + E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \\ &= \frac{1}{8} T \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{i, j} a_{ij}^{\perp} b_{ji}^{\perp} \left(-\frac{dn_F(E_{\mathbf{k}}^i)}{dE_{\mathbf{k}}^i} \right) \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)^2} \\ &= \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{i, j} a_{ij}^{\perp} b_{ji}^{\perp} n_F(E_{\mathbf{k}}^i) (1 - n_F(E_{\mathbf{k}}^i)) \frac{\Gamma}{\Gamma^2 + (E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)^2} \end{aligned} \quad (4.37)$$

όπου θέσαμε $A_{\mathbf{q}} = 1$. Στο δεύτερο βήμα της παραπάνω ανάλυσης εισάγαμε μια Λορεντζιανή με εύρος Γ αντί της συνάρτησης δέλτα. Η τακτική αυτή πρωτοεισήχθη από τους Bulut, Scalapino [76] και συναντάται συχνά σε αντίστοιχους υπολογισμούς. Το Γ , μπορεί να μεταφραστεί φαινομενολογικά ως ένας όρος απόσβεσης των οιονεί-σωματιδίων η οποία μπορεί να προκύψει λόγω αλληλεπιδράσεων, προσμίξεων κλπ [77].

Σύμφωνα με την μεθοδολογία που εισήχθη στην παρούσα διατριβή, η Εξ.(4.37) μπορεί να επιλυθεί αριθμητικά χρησιμοποιώντας τις τιμές των παραμέτρων τάξης αφού πρώτα αυτές επιλυθούν αυτοσυνεπώς.

4.4 Μεταβάσεις τύπου I

Οι μεταβάσεις αυτές έχουν τα χαρακτηριστικά: $V^i < 2$: $dSC \rightarrow \pi SC + dSC(+SDW)$, για $t' = 0$ ($\neq 0$). Εδώ παρουσιάζουμε αποτελέσματα για $V^i = V^{SDW} = V^{dSC} = V^{\pi tr} = 1.5t$. Στο Σχ. 4.3 φαίνεται η εξάρτηση των τριών χασμάτων συναρτήσει θερμοκρασίας και πεδίου για $t' = 0.35$. Σε χαμηλές θερμοκρασίες, παρατηρούνται δυο διαδοχικές μεταβάσεις 1ης τάξης με το πεδίο. Η πρώτη είναι από μια μεγάλη σε μια μικρότερη τιμή του Δ . Κατά την είσοδο σε αυτήν την περιοχή, ανοίγουν ταυτόχρονα και τα χάσματα Π και M . Η δεύτερη μετάβαση παρατηρείται για ακόμα μεγαλύτερες τιμές του πεδίου, όπου καταστρέφονται ταυτόχρονα και οι τρεις παράμετροι τάξης.

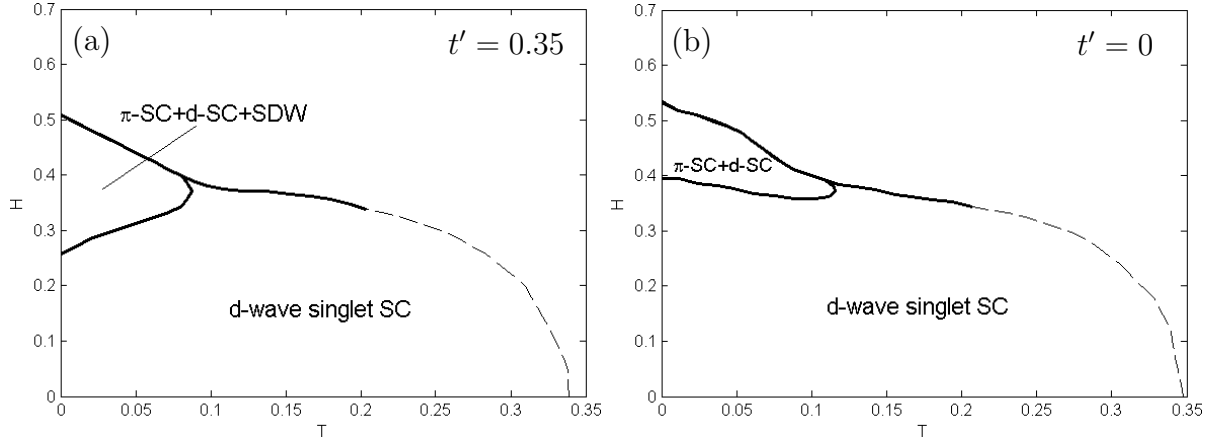


Σχήμα 4.3: Πάνω σχήμα: η εξάρτηση από το πεδίο και την θερμοκρασία της d -wave singlet υπεραγωγιμότητας (Δ) για $t' = 0.35t$. Η χρωματική διαβάθμιση αντιστοιχεί στην τιμή του χάσματος. Κάτω σχήμα: το ίδιο γράφημα συμπεριλαμβάνοντας όλες τις παραμέτρους τάξης από άλλη οπτική γωνία όπου φαίνεται η περιοχή συνύπαρξης. Τα χάσματα M , Π , Δ διακρίνονται με μπλε, κόκκινο και πράσινο χρώμα αντίστοιχα. Όλες οι τιμές είναι κανονικοποιημένες με την τιμή του Δ για $T = H = 0$, (Δ_0) [30].

Διάγραμμα φάσης

Στο Σχ.4.4 απεικονίζεται το H-T διάγραμμα φάσης για $t' = 0.35$ (a) και $t' = 0$ (b), όπως προκύπτει από τα αριθμητικά μας δεδομένα. Η αναλογία με τα αντίστοιχα διαγράμματα

4. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς



Σχήμα 4.4: Το διάγραμμα φάσης H-T που αντιστοιχεί στο Σχ. 4.3. Με συνεχή (διακεκομμένη) γραμμή διακρίνονται οι μεταβάσεις 1ης (2ης) τάξης. a) Για $t' = 0.35$, το Κύμα Πυκνότητας Σπιν εμφανίζεται μόνο στην περιοχή που οριοθετεί η επαγόμενη από το πεδίο ανομοιογενής triplet υπεραγωγιμότητα. Κάποιες ομοιότητες με το αντίστοιχο διάγραμμα φάσης της FFLO θεωρίας (Σχ.1.4b) είναι προφανείς, ωστόσο, το κρίσιμο πεδίο πάνω από το οποίο συμβαίνει η μετάβαση στην \mathbf{Q} -φάση, αυξάνει με την θερμοκρασία. b) Για $t' = 0$, η επαγόμενη φάση δεν περιέχει την SDW παράμετρο τάξης, ενώ το κρίσιμο πεδίο της μετάβασης στην φάση $dSC + \pi SC$ είναι αρχικά ανεξάρτητο της θερμοκρασίας, ενώ αυξάνει ελαφρώς καθώς $T \rightarrow 0$ [30].

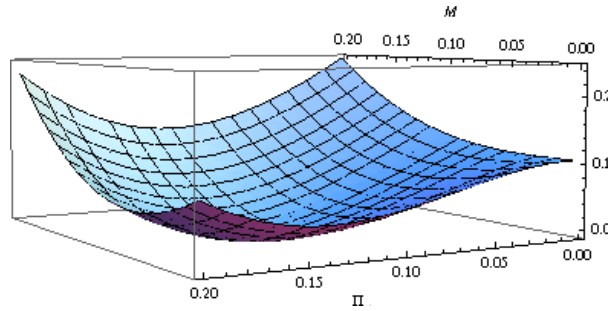
4.1 και 1.4 είναι προφανής. Ειδικά για το CeCoIn_5 , το πρόσφατα αναθεωρημένο διάγραμμα φάσης του (Σχ.4.2) σχεδόν ταυτίζεται με αυτό του Σχ.4.4(a). Για $t' \neq 0$, η περιοχή για χαμηλές θερμοκρασίες και υψηλά πεδία όπου εμφανίζεται το μοτίβο $dSC + \pi sC + SDW$ αντιστοιχεί στην \mathbf{Q} -φάση του υλικού αυτού. Στο κρίσιμο πεδίο, και οι τρεις παράμετροι τάξης καταστρέφονται ταυτόχρονα μέσω μιας μετάβασης 1ης τάξης, ακριβώς όπως αναφέρουν σχετικά πειράματα σκέδασης νετρονίων [29]. Το διάγραμμα φάσης του Σχ.4.4(b) είναι σχεδόν πανομοιότυπο με αυτό που έχει παρατηρηθεί στον οργανικό υπεραγωγό κ -(BEDT-TTF) $_2\text{Cu}(\text{NCS})_2$ (Σχ.4.1(c)). Στο υλικό αυτό, τόσο η μετάβαση στην επαγόμενη φάση, όσο και αυτήν στην κανονική κατάσταση, είναι 1ης τάξης με το πεδίο, σε αντίθεση με τις προβλέψεις της FFLO θεωρίας [46].

Η σύγκριση μεταξύ των περιπτώσεων $t' \neq 0$ και $t' = 0$ παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον. Όπως φαίνεται στο Σχ.4.4(b), για $t' = 0$ βρίσκουμε ένα παρόμοιο διάγραμμα φάσης, μόνο που τώρα το SDW απουσιάζει από την επαγόμενη φάση. Δηλαδή, το SDW επάγεται εξαιτίας της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής, σε συμφωνία με την συζήτηση που κάναμε σε προηγούμενη ενότητα και αυτός είναι και ο λόγος που περιορίζεται μόνο μέσα στην επαγόμενη φάση. Ακόμη, για $t' = 0$, οι μοναδικές μεταβάσεις τύπου I που παρατηρούμε είναι από $dSC \rightarrow dSC + \pi SC$, δηλαδή το σύστημα δεν παρουσιάζει αντισιδηρομαγνητισμό. Κατά συνέπεια, οδηγούμαστε στο συμπέρασμα ότι ο αντισιδηρομαγνητισμός είναι δευτερεύουσας σημασίας

για το σύστημα.

Έτσι, ο μηχανισμός πίσω από την **Q**-φάση, όπως αυτή που παρατηρήθηκε π.χ. στο CeCoIn_5 , είναι ο εξής: προκειμένου η $d_{x^2-y^2}$ singlet υπεραγωγιμότητα να επιβιώσει σε μαγνητικά πεδία μεγαλύτερα από αυτά που ορίζει το όριο Pauli, ένα μέρος των ζευγών Cooper αρχικά συζεύγνυται σε triplet διάταξη. Τα ηλεκτρόνια αυτά προέρχονται από το σπάσιμο $d_{x^2-y^2}$ ζευγών με αποτέλεσμα η νέα αυτή κατάσταση να έχει επίσης συμμετρία d-wave. Όμως, προκειμένου να μην παραβιαστεί η συμμετρία αντιστροφής του συστήματος, τα νέα αυτά ζεύγη εμφανίζουν πεπερασμένη ορμή κέντρου-μάζας ίση με το κυματόνισμα συναρμογής της επιφάνειας Fermi, οδηγώντας στην π-triplet υπεραγωγιμότητα. Οποιαδήποτε διαταραχή από την συνθήκη τέλει συναρμογής, επιβάλλει, λόγω συμμετρίας, την επαγωγή της τρίτης παραμέτρου του μοτίβου, δηλαδή τον αντισιδηρομαγνητισμό τύπου SDW.

Το κέρδος στην ενέργεια συμπύκνωσης του συστήματος κατά τη μετάβαση στην φάση συνύπαρξης, του επιτρέπει να παραμείνει υπεραγώγιμο πάνω από το προβλεπόμενο όριο Pauli. Η διαφορά μεταξύ της ελεύθερης ενέργειας της φάσης αυτής και της παραμαγνητικής κανονικής κατάστασης μπορεί να υπολογιστεί από την Εξ.(3.17) και χρησιμεύει και ως κριτήριο σταθερότητας των αριθμητικών αυτοσυνεπών λύσεων. Για παράδειγμα, στο Σχ.4.5 απεικονίζεται η διαφορά αυτή συναρτήσει των τιμών των χασμάτων M, Π για την αριθμητική τιμή που βρέθηκε για το Δ στην περιοχή συνύπαρξης του Σχ.4.4(a). Η ελεύθερη ενέργεια



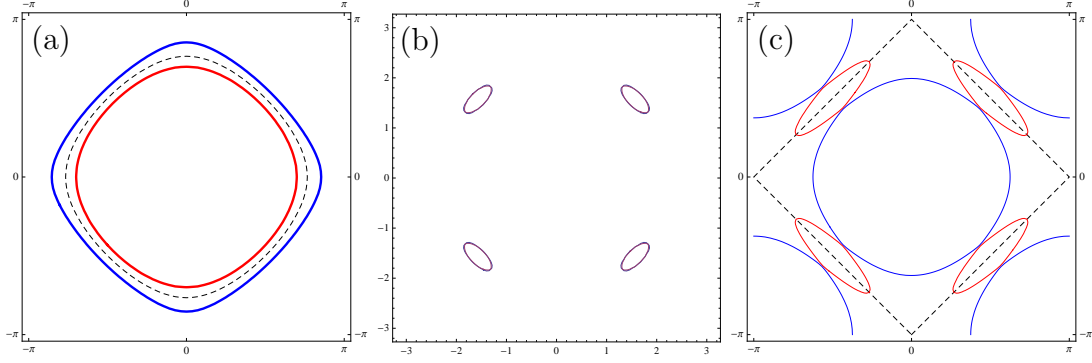
Σχήμα 4.5: Το κέρδος στην ελεύθερη ενέργεια κατά τη μετάβαση στην φάση συνύπαρξης. $t' = 0.35, T = 0.013, H = 0.4, \Delta = 0.1$ (βλ. Σχ.4.4(a))

παρουσιάζει ελάχιστο για $M, \Pi \neq 0$ και μάλιστα, ακριβώς στις τιμές που υπολογίστηκαν αριθμητικά.

Αύξηση του H_P λόγω πεπερασμένης μαγνήτισης

Η $d_{x^2-y^2}$ παράμετρος τάξης διαθέτει κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi, δηλαδή σημεία στα οποία το ενεργειακό χάσμα μηδενίζεται. Κατά συνέπεια, η επίδραση ενός πεδίου Zeeman αυξάνει την επιφάνεια Fermi ενός $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγού ενώ ταυτόχρονα πολώνει τα οιονεί σωματίδια που βρίσκονται σε αυτήν δημιουργώντας μια πεπερασμένη μαγνήτιση στον

υπεραγωγό (βλ. π.χ. 4.6(b)). Η μαγνήτιση αυτή, συντελεί στην περαιτέρω μείωση της ενέργειας συμπύκνωσης. Η συνεισφορά αυτή γίνεται αρκετά σημαντική για υψηλά μαγνητικά πεδία⁹. Αν αγνοήσουμε τα φαινόμενα μαγνήτισης, το όριο Pauli για έναν $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγό



Σχήμα 4.6: Η επιφάνεια Fermi όταν $t' = 0.35$ για τρεις περιπτώσεις: a) Όταν $M = \Pi = \Delta = 0$ και $H = 0$ (διακεκομμένη γραμμή) και $H = 0.21$ όπου με μπλε (κόκκινο) χρώμα διακρίνονται τα σπιν πάνω (κάτω) μέρη. b) Όταν $\Delta \neq 0$ και $H = 0.21$ (βλ. Σχ.4.4(a)) c) Όταν $H = 0.41$ στο Σχ.4.4(a). Με διακεκομμένη γραμμή φαίνονται τα όρια της ανηγμένης ζώνης Brillouin λόγω των M, Π χασμάτων. Στα σχήματα b),c) με μπλε (κόκκινο) χρώμα φαίνεται η συνεισφορά του $E_{++(-)}$ πόλου.

γό δίνεται από τον τύπο (1.16). Στην γενική περίπτωση, στο σημείο όπου $H = H_P^{dSC}$, η συνθήκη εξισορρόπησης της ενέργειας συμπύκνωσης με την ενέργεια Zeeman γράφεται ως: $N(0)H_P^2 = \frac{\Delta_P^2}{4}N(0) + \frac{1}{2}M_P H_P$, όπου M_P, Δ_P είναι η τιμή της μαγνήτισης και του υπεραγωγίμου χάσματος στο H_P . Η τιμή του τελευταίου δίνεται από την σχέση αυτοσυνέπειας:

$$H_P = \frac{M_P + \sqrt{M_P^2 + 4N(0)^2\Delta_P^2}}{4N(0)}$$

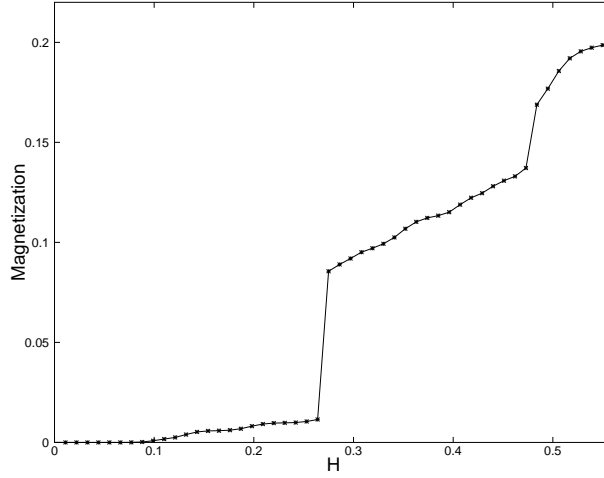
Σύμφωνα με την παραπάνω εξίσωση, η πεπερασμένη μαγνήτιση συνεισφέρει στην αύξηση του H_P . Ωστόσο, η ακριβής αριθμητική τιμή του μπορεί να υπολογιστεί μόνο λύνοντας αριθμητικά την εξίσωση αυτοσυνέπειας για το $d_{x^2-y^2}$ χάσμα. Σχετικοί υπολογισμοί στην βιβλιογραφία δίνουν: $\Delta_P \approx 0.92\Delta_0$ και $M_P \approx 0.049\Delta_0$ [78]. Άρα τελικά:

$$H_P^{dSC} \approx 0.56\Delta_0 \quad (4.38)$$

Στην σύνθετη φάση, το σύστημα παρουσιάζει εκτεταμένη επιφάνεια Fermi Σχ.4.6(c). Κατά συνέπεια, η μαγνήτιση¹⁰ που επάγει το μαγνητικό πεδίο είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτήν

⁹Το ίδιο φαινόμενο λαμβάνει χώρα και στην περίπτωση της FFLO υπεραγωγιμότητας, όπου έχειδειχθεί ότι η συνεισφορά των μαγνητικών αλληλεπιδράσεων οδηγεί σε αύξηση του H_c^{FF} [21].

¹⁰Η επαγόμενη μαγνήτιση μπορεί να υπολογιστεί αριθμητικά παίρνοντας το ίχνος: $\mathcal{M} = \frac{1}{8} \sum_{\mathbf{k}, n} Tr \left\{ \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\}$ και ακολουθώντας την μεθοδολογία του Κεφ.3 εισάγοντας τις αυτοσυνεπείς



Σχήμα 4.7: Η επαγόμενη μαγνήτιση λόγω του μαγνητικού πεδίου για $t' = 0.35$, $T = 0$.

στην $d_{x^2-y^2}$ φάση, όπως φαίνεται στο Σχ.4.7. Το φαινόμενο αυτό, συντελεί στην αύξηση του κρίσιμου πεδίου σε τιμές πάνω από το H_P . Σύμφωνα με τα αριθμητικά μας δεδομένα, για $t' = 0.35$, $\Delta_0 = 0.42t$ και $H_P = 0.54t$, άρα

$$H_P \approx 0.64\Delta_0 \quad (4.39)$$

Δηλαδή, η φάση συνύπαρξης αναμένεται στο παράθυρο: $0.56\Delta_0 < H < 0.64\Delta_0$. Το διάστημα αυτό είναι σαφώς μικρότερο από αυτό που προβλέπει η FFLO θεωρία για τον $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγό. Ωστόσο, η θεωρία αυτή, αγνοεί τελείως την παρουσία των ισχυρών σιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων.

Επίδραση του όρου ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής (t')

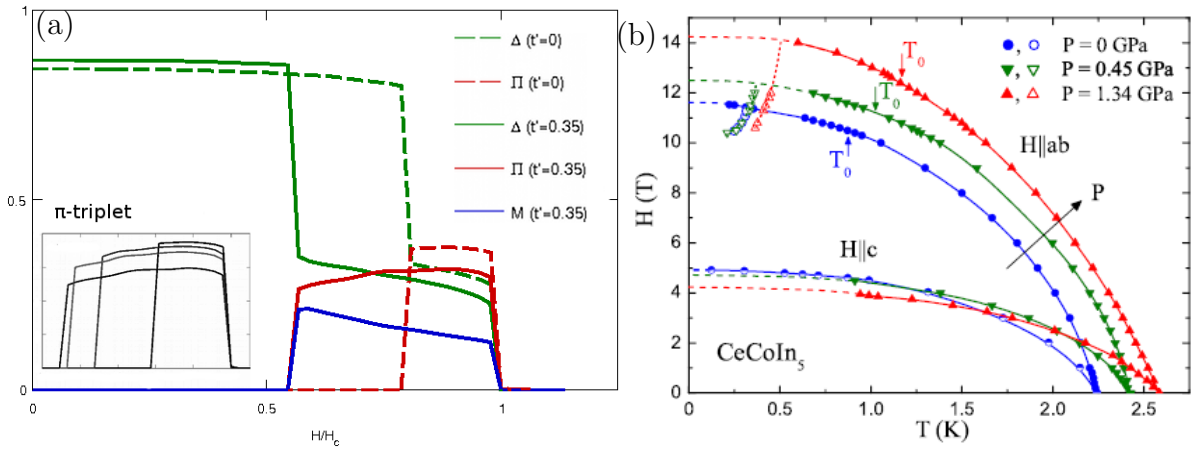
Συγκρίνοντας τα δυο διαγράμματα φάσης του Σχ.4.4, παρατηρούμε ότι η περιοχή συνύπαρξης διογκώνεται καθώς αυξάνει το t' . Η τάση αυτή φαίνεται καθαρά στο Σχ. 4.8. Μια ποιοτική εξήγηση του φαινομένου μπορεί να δοθεί μελετώντας τους πόλους της συνάρτησης Green.

$$E_{++}(\mathbf{k}) = -\mu_B H + \sqrt{(\gamma_{\mathbf{k}} + \delta_{\mathbf{k}})^2 + \Delta_{\mathbf{k}}^2} \quad (4.40)$$

Όταν $E_{++}(\mathbf{k}) = 0$, ο υπεραγωγός φτάνει στο όριο Clogston [14] και η φάση συνύπαρξης γίνεται η πιο συμφέρουσα ενεργειακά. Καθώς αυξάνει ο όρος t' , η μετάβαση αυτή είναι προσβάσιμη για μικρότερα πεδία, όπως επιβεβαιώνουν και οι αριθμητικοί υπολογισμοί. Η συμπεριφορά αυτή συνάδει με πειραματικές παρατηρήσεις της επίδρασης πίεσης στο CeCoIn₅ [55], (βλ. Σχ. 4.8((b))). Συχνά σε μοντέλα ισχυρού δεσμού, η επίδραση της πίεσης

λύσεις για τα τρία χάσματα.

4. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντισηδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς

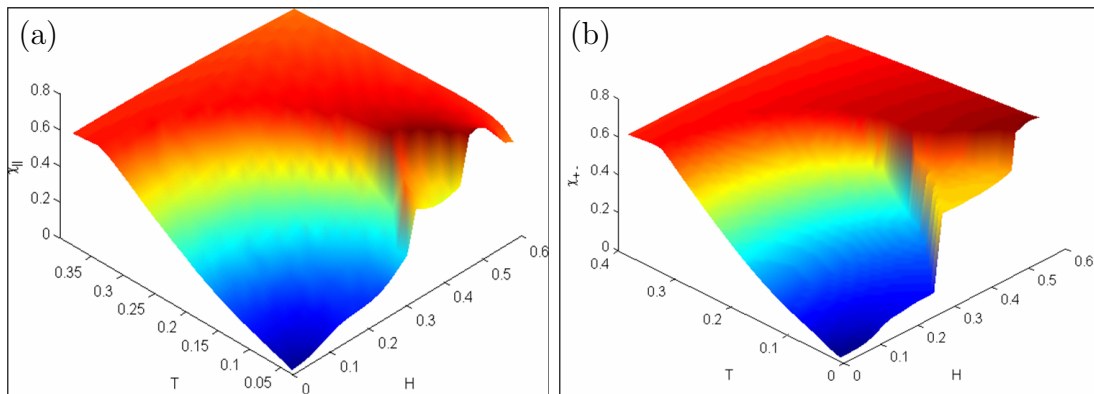


Σχήμα 4.8: a) Η εξάρτηση της τιμής των παραμέτρων τάξης συναρτήσει του πεδίου για $T = 0$ όταν $t' = 0$ (διακεκομμένη) και $t' = 0.35t$ (συνεχής γραμμή). Στο ένθετο φαίνεται η διόγκωση της περιοχής συνύπαρξης όταν $t' = (0, 0.15t, 0.25t, 0.35t)$ [30]. b) Το πειραματικό διάγραμμα φάσης του CeCoIn_5 υπό πίεση [55].

προσομοιώνεται μέσω της μεταβολής του όρου t' .

Μαγνητικές ιδιότητες

Χρησιμοποιώντας τις αριθμητικές τιμές για τα χάσματα M , Π , Δ και τους τύπους που εξήχθησαν στο προηγούμενο κεφάλαιο υπολογίστηκε αυτοσυνεπώς η στατική μαγνητική επιδεικτικότητα. Στο Σχ.4.9 (a) και (b) απεικονίζεται η παράλληλη και η κάθετη επιδεικτικότητα αντίστοιχα για $t' = 0.35$ συναρτήσει του πεδίου και της θερμοκρασίας. Για χαμηλά πεδία, βρίσκουμε την τυπική απόκριση ενός singlet υπεραγωγού. Στην επαγόμενη φάση, η επιδει-

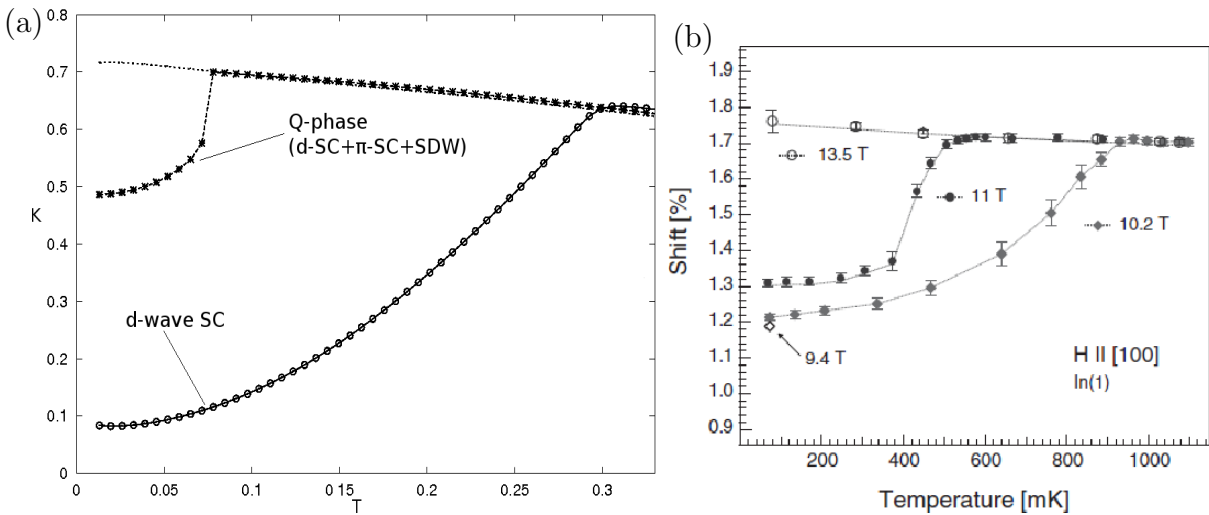


Σχήμα 4.9: Η παράλληλη, a) και κάθετη, b), στατική σπιν επιδεικτικότητα συναρτήσει του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου (H) και της θερμοκρασίας (T) που αντιστοιχεί στο Σχ.4.4(a). Η χρωματική διαβάθμιση αντιστοιχεί σε μπλε χρώμα για μικρές και κόκκινο για μεγάλες τιμές [50].

4.4 Μεταβάσεις τύπου I

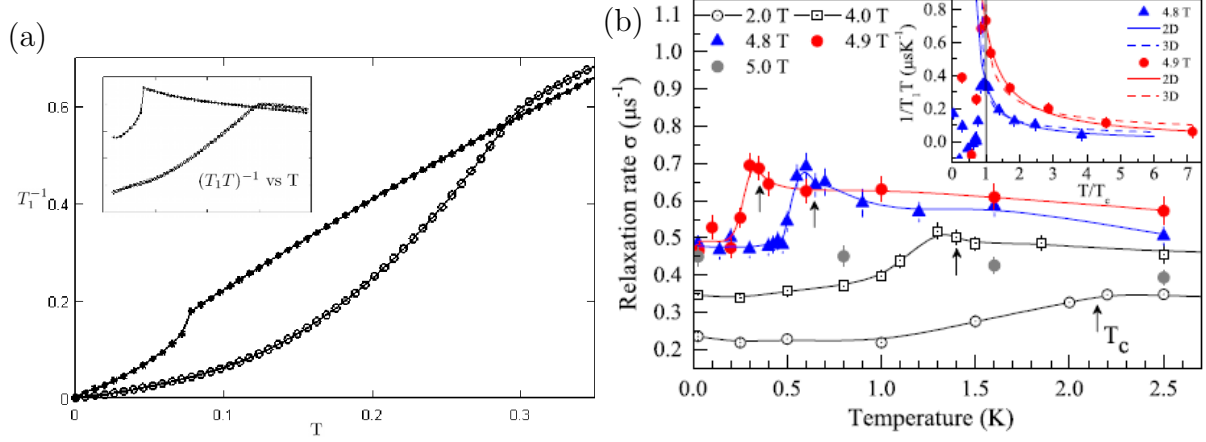
κτικότητα είναι μη μηδενική: οι σπιν triplet παράμετροι τάξης συμβάλλουν στην επαγωγή πεπερασμένης μαγνήτισης σε χαμηλές θερμοκρασίες. Η διόγκωση της επιφάνειας Fermi στην φάση αυτή, επηρεάζει την συμπεριφορά της επιδεκτικότητας σε τέτοιο βαθμό, ώστε η παράλληλη και η κάθετη επιδεκτικότητα να είναι σχεδόν πανομοιότυπες.

Η πεπερασμένη μαγνήτιση έχει ως αποτέλεσμα, η μετατόπιση κατά Knight στην επαγόμενη φάση να μην τείνει στο μηδέν όπως θα περίμενε κανείς στην περίπτωση της singlet υπεραγωγιμότητας, αλλά να κορένεται σε μια σταθερή πεπερασμένη τιμή. Η χαρακτηριστική αυτή υπογραφή της επαγόμενης κατάστασης φαίνεται στο Σχ.4.10 (a). Στην κρίσιμη θερμοκρασία της μετάβασης, παρατηρούμε ότι το K παρουσιάζει ένα «σκαλοπάτι» το οποίο σχετίζεται με την μετάβαση 1ης τάξης από την κανονική στην Q -φάση. Για χαμηλότερες θερμοκρασίες, η επιδεκτικότητα είναι σταθερή. Η συμπεριφορά αυτή, είναι πανομοιότυπη με τις αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις στην Q -φάση του $CeCoIn_5$ [60, 61, 79].



Σχήμα 4.10: Η μετατόπιση κατά Knight συναρτήσει της θερμοκρασίας. a) Αυτοσυνεπείς υπολογισμοί μέσω του μοντέλου μας για μαγνητικά πεδία $H = (0.21, 0.41, 0.51)$ τα οποία αντιστοιχούν σε διαφορετικές περιοχές του διαγράμματος φάσης του Σχ.4.4(a) [30]. b) Πειραματικές μετρήσεις του K για τις ίδιες περιοχές του διαγράμματος φάσης του $CeCoIn_5$ [60].

Για τον υπολογισμό του ρυθμού επανάπαυσης σπιν-πλέγματος (T_1^{-1}) χρησιμοποιήσαμε τα αυτοσυνεπώς υπολογισμένα χάσματα και τον τύπο (4.37) με $\Gamma = 10^{-6}$ και πυκνό \mathbf{k} και \mathbf{q} πλέγμα (256×256) για μέγιστη ακρίβεια. Στο Σχ.4.11(a) απεικονίζονται τα αποτελέσματά μας συναρτήσει της θερμοκρασίας για $H = (0.21, 0.41)$ που αντιστοιχούν στην καθαρή $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητα και στην επαγόμενη φάση συνύπαρξης αντίστοιχα. Για την πρώτη παρατηρούμε σχεδόν T^3 εξάρτηση, τυπική για $d_{x^2-y^2}$ χάσμα [4]. Για $T > T_c$ το T_1^{-1} αυξάνει γραμμικά με την θερμοκρασία, όπως θα περιμέναμε για ένα υγρό Fermi (συμπεριφορά Korringa). Το ενδιαφέρον είναι ότι η ίδια συμπεριφορά ($T^{-1} \sim T$) παρατηρείται και μέσα στην επαγόμενη κατάσταση. Σύμφωνα με την ανάλυση που προηγήθηκε, αυτό θα έπρεπε



Σχήμα 4.11: a) Ο ρυθμός επανάπαυσης σπιν-πλέγματος (T_1^{-1}) υπολογισμένος αυτοσυνεπώς σύμφωνα με το μοντέλο μας συναρτήσεως της θερμοκρασίας για $t' = 0.35$ και $H = (0.21, 0.41)$. Στο ένθετο απεικονίζεται η ποσότητα $(T_1T)^{-1}$ [30]. b) Η ίδια ποσότητα όπως μετρήθηκε λίγο αργότερα πειραματικά για το CeCoIn_5 [79].

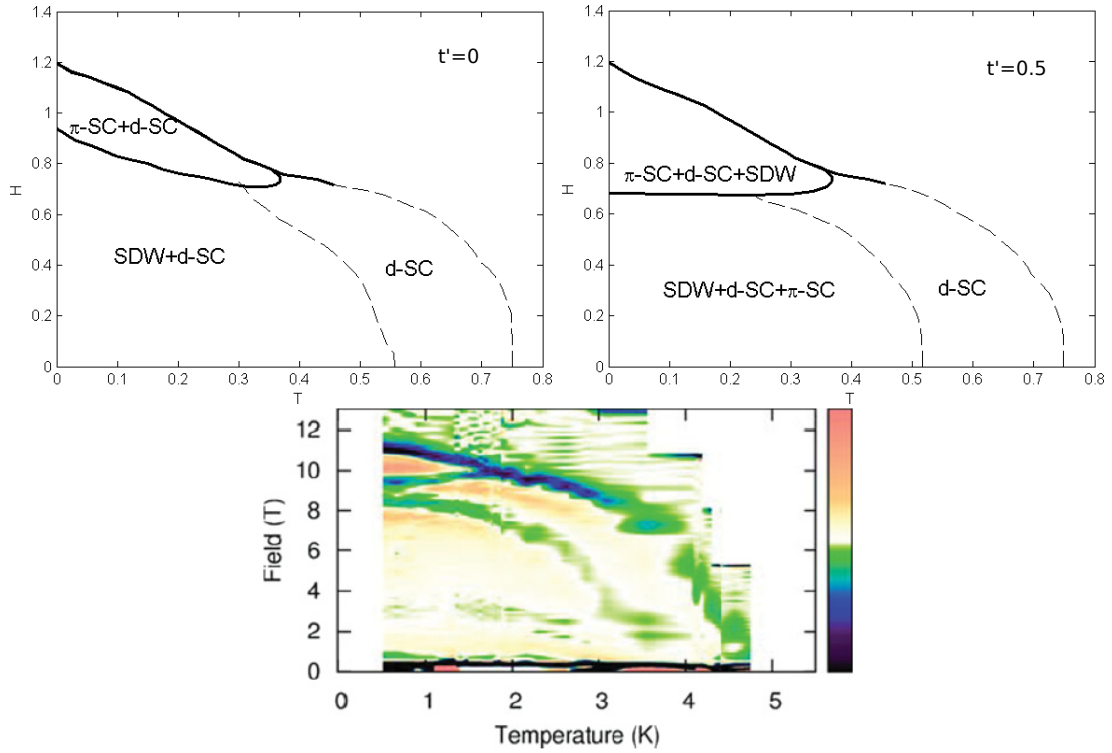
να αναμένεται καθότι όπως είδαμε στην φάση αυτή το σύστημα έχει εκτεταμένη επιφάνεια Fermi με αποτέλεσμα να συμπεριφέρεται παρόμοια με το ελεύθερο σύστημα. Λίγο μετά την δημοσίευσή τους, οι προβλέψεις αυτές επιβεβαιώθηκαν πειραματικά σε σχετικές μετρήσεις NMR στην Q-φάση του CeCoIn_5 [79].

4.5 Μεταβάσεις τύπου II

Οι μεταβάσεις αυτές έχουν τα χαρακτηριστικά: $V^i > 2$: $dSC + SDW(+\pi SC) \rightarrow \pi SC + dSC + SDW$, για $t' = 0$ ($\neq 0$). Είναι δε πιθανό να παρατηρηθούν σε υπεραγωγούς όπου υπεραγωγιμότητα και αντισιδηρομαγνητισμός συνυπάρχουν όταν $H = 0$. Θα παρουσιάσουμε αριθμητικά αποτελέσματα για $V^i = V^{SDW} = V^{dSC} = V^{\pi SC} = 3t$. Η περίπτωση αυτή αποτελεί γενίκευση της περίπτωσης $T_c > T_N$ στην αναφορά [80] όταν $t', H \neq 0$.

Στο Σχ.4.12 απεικονίζονται τα διαγράμματα φάσης στην περίπτωση αυτή για $t' = 0$ και $t' = 0.5$. Για χαμηλές θερμοκρασίες, μαγνητικά πεδία και $t' = 0$ η $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητα συνυπάρχει με τον αντισιδηρομαγνητισμό με τον δεύτερο όρο να είναι ο επικρατέστερος. Πάνω από μια κρίσιμη θερμοκρασία, T_N , επιβιώνει μόνο η υπεραγωγιμότητα μέσω μιας μετάβασης 2ης τάξης. Για $t' \neq 0$, στην περιοχή της αρχικής συνύπαρξης $dSC + SDW$ επάγεται η π -triplet υπεραγωγιμότητα ως υπολειπόμενη φάση. Η κατάσταση αντιστρέφεται για υψηλά μαγνητικά πεδία. Όταν $t' = 0$ βρίσκουμε μια μετάβαση από $dSC + SDW$ σε $dSC + \pi SC$ με το πεδίο, ενώ για $t' \neq 0$ η μετάβαση είναι από κυρίαρχο SDW όρο σε κυρίαρχο π -triplet όρο. Δηλαδή, το πεδίο επιδρά δραστικά στο σύστημα ουσιαστικά μετασχηματίζοντας την αντισιδηρομαγνητική κατάσταση τάξης σε υπεραγωγική στο triplet κανάλι.

4.5 Μεταβάσεις τύπου II



Σχήμα 4.12: Το H-T διάγραμμα φάσης μεταβάσεων τύπου II για (a) $t' = 0$ και (b) $t' = 0.5$. Με συνεχή (διακεκομμένη) γραμμή διακρίνονται οι μεταβάσεις 1ης (2ης) τάξης. c) Το διάγραμμα φάσης H-T από πρόσφατες μετρήσεις στον οργανικό υπεραγωγό λ -(BETS) $_2$ GaCl $_4$. Με μπλε χρώμα φαίνονται οι περιοχές όπου η μετάβαση είναι 1ης τάξης [47].

Οι μεταβάσεις με το πεδίο στην επαγόμενη φάση και εν συνεχεία στην παραμαγνητική κανονική κατάσταση, είναι 1ης τάξης. Στο Σχ. 4.13(a) απεικονίζεται η θερμοκρασιακή εξάρτηση των τριών παραμέτρων τάξης καθώς και ο επαγόμενος π -triplet όταν $t' \neq 0$. Παρατηρούμε ότι ακόμα και για $t' = 0.5$, οι κρίσιμες θερμοκρασίες T_c, T_N δεν αλλάζουν ανεξαρτήτως αν $\Pi \neq 0$. Η εξάρτηση των χασμάτων με το πεδίο φαίνεται στο Σχ. 4.13(b). Παρατηρούμε ότι μεταβάσεις που επάγει το πεδίο έχουν ως κυρίαρχο όρο τον π -triplet ενώ παρουσιάζουν παρόμοια χαρακτηριστικά με τις μεταβάσεις τύπου I. Χρησιμοποιώντας τις αριθμητικές τιμές του χάσματος της $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητας το H_{c2} για $t' = 0.5$ υπολογίστηκε ίσο με:

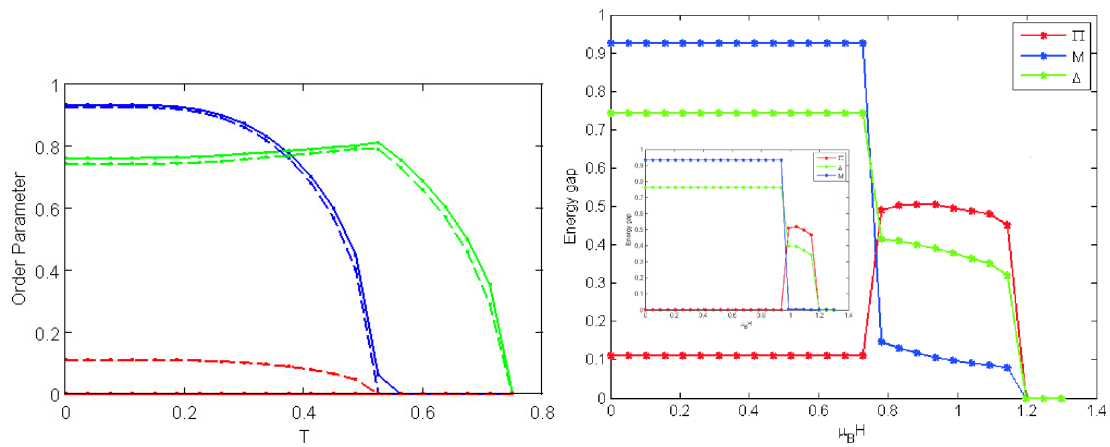
$$H_{c2} \approx 0.8\Delta_0 \quad (4.41)$$

το οποίο είναι εμφανώς μεγαλύτερο σε σύγκριση με τις μεταβάσεις τύπου II.

Πολύ πρόσφατα, μετρήσεις ακριβείας του βάθους διείσδυσης στον οργανικό υπεραγωγό λ -(BETS) $_2$ GaCl $_4$ κατέληξαν στο εξωτικό διάγραμμα φάσης H-T του Σχ.4.12(c) [47]. Αυτό βρέθηκε σε δυο από τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν στις μετρήσεις και η φυσική του

4. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από υψηλά μαγνητικά πεδία σε αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς

παραμένει ανεξήγητη. Τα υπόλοιπα δείγματα εμφάνισαν διάγραμμα φάσης παρόμοιο με αυτό των FFLO φάσεων ή των μεταβάσεων τύπου I της παρούσας διατριβής. Η επαγόμενη φάση σε μια μετάβαση τύπου II έχει ακριβώς την ίδια φαινομενολογία και ιδιότητες με την μετάβαση τύπου I που αναλύσαμε στην προηγούμενη ενότητα. Κατά συνέπεια, ενδείξεις για το αν η παρούσα θεωρία εξηγεί τις μυστηριώδεις μεταβάσεις του λ -(BETS) $_2$ GaCl $_4$ μπορούν να βρεθούν αν αποδειχτεί ότι για $H = 0$ η υπεραγωγιμότητα συνυπάρχει με ένα SDW. Η ανίχνευση του SDW μπορεί να γίνει π.χ. με πειράματα σκέδασης νετρονίων.



Σχήμα 4.13: a) Ένα παράδειγμα μίξης των τριών παραμέτρων τάξης λόγω της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής για $H = 0$. b) Το πεδίο επάγει μεταβάσεις σε μια κατάσταση ουσιαστικά μετασχηματίζοντας την αντισιδηρομαγνητική φάση σε ανομοιογενή triplet υπεραγωγιμότητα βοηθώντας τον υπεραγωγό να επιβιώσει πάνω από το όριο Pauli, σε αναλογία με μια FFLO μετάβαση [49].

Κεφάλαιο 5

Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το μαγνητικό πεδίο σε μονωτές τύπου CDW

Τα Κύματα Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν αποτελούν καταστάσεις ύλης πολύ διαδεδομένες στα υλικά ισχυρά συσχετισμένων φορέων. Το γεγονός ότι οι ιδιότητες συναρμογής της επιφάνειας Fermi ενισχύονται με την ανισοτροπία, ευνοεί ιδιαίτερα την εμφάνιση κυμάτων πυκνότητας σε σχεδόν μονοδιάστατα συστήματα [7], όπως π.χ. είναι τα άλατα του Bechgaard [81]. Ωστόσο, τα κύματα πυκνότητας έχουν παρατηρηθεί και σε πληθώρα δισδιάστατων υλικών, όπως π.χ. είναι τα φιλμ χρωμίου [82], τα διχαλκογενίδια [83], τα τελουρίδια [84] κλπ. Μία ειδική κατηγορία Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου και Σπιν, η οποία παρατηρείται σε διάφορα συστήματα ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων είναι και οι λεγόμενες «ρίγες» (stripes), οι οποίες μπορούν να περιγραφούν ως μονοκατευθυντικά κύματα πυκνότητας. Τέτοιες καταστάσεις έχουν παρατηρηθεί στα οξειδία του χαλκού [85] και του μαγγανίου [86]. Σε αναλογία με την υπεραγωγιμότητα, τα τελευταία χρόνια έχουν μελετηθεί και καταστάσεις τάξης μη συμβατικών κυμάτων πυκνότητας [65, 37]. Οι καταστάσεις αυτές έχουν προταθεί για την εξήγηση του λεγόμενου «ψευδοχάσματος» στα οξειδία του χαλκού [87, 88] και της «κρυφής τάξης» στο URu₂Si₂ [89, 90]. Πρόσφατα δε, προτάθηκε θεωρητικά και το ολογραφικό Κύμα Πυκνότητας Φορτίου [91].

Η επίδραση ισχυρών μαγνητικών πεδίων στα κύματα πυκνότητας φορτίου/σπιν έχει μελετηθεί στο παρελθόν κυρίως στα πλαίσια των μονοδιάστατων οργανικών υλικών. Στα υλικά αυτά, έχει δειχτεί ότι τα τροχιακά φαινόμενα μπορούν να οδηγήσουν σε κύματα πυκνότητας φορτίου/σπιν επαγόμενα από το πεδίο [92, 93]. Ωστόσο, τα τελευταία χρόνια έχουν παρατηρηθεί πειραματικά, μεταβάσεις επαγόμενες από μαγνητικά πεδία σε δισδιάστατους μονωτές τύπου CDW/SDW οι οποίες δεν σχετίζονται με τα τροχιακά φαινόμενα και των οποίων η κατανόηση παραμένει ελλιπής. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι η μετάβαση τύπου FFLO

στο $(\text{Per})_2\text{Au}(\text{mnt})_2$ [95] και οι μεταμαγνητικές μεταβάσεις «διπλού σκαλοπατιού» σε φαινομενικά τελείως ασύνδετα υλικά όπως το σύνθετο βαρέων φερμιονίων URu_2Si_2 (βλ. Σχ.5.3) και οι περοβσκιίτες μαγγανίου $(\text{La,Pr})_{1-x}(\text{Ca,Sr,Ba})_x\text{-MnO}_3$ [96]. Στα τελευταία, παρατηρείται επιπλέον και το ιδιαίτερα σημαντικό φαινόμενο της Κολοσσιαίας Μαγνητοαντίστασης κατά το οποίο ένα μαγνητικό πεδίο μερικών Tesla οδηγεί στην «τήξη» μιας ισχυρής μονωτικής τάξης η οποία ισοδυναμεί ενεργειακά σε εκατοντάδες Tesla [97].

Στο παρόν κεφάλαιο, θα μελετήσουμε φαινόμενα μεταβάσεων επαγόμενων λόγω ενός πεδίου Zeeman σε συστήματα κυμάτων πυκνότητας φορτίου/σπιν ανεξαρτήτως διαστατικότητας. Έχει δειχθεί ότι σε ένα σύστημα με ασυμμετρία ηλεκτρονίου-οπής, οι δυο αυτές καταστάσεις της ύλης συνυπάρχουν παρουσία πεπερασμένης μαγνήτισης [98]. Η μαγνήτιση αυτή μπορεί να είναι προϊόν είτε ισχυρών σιδηρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων του ίδιου του υλικού, είτε επαγωγής λόγω ενός ισχυρού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου Zeeman ή και των δυο. Ωστόσο, παρ'όλη την γενικότητα του αποτελέσματος αυτού, συνήθως στην διεθνή βιβλιογραφία οι δυο καταστάσεις θεωρούνται ανεξάρτητες μεταξύ τους και μελετώνται ξεχωριστά, με μοναδική εξαίρεση ίσως, θεωρίες που περιορίζονται σε μονοδιάστατα συστήματα [94].

Όπως θα δείξουμε, η μίξη των βαθμών ελευθερίας σπιν και φορτίου λόγω ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και πεπερασμένης μαγνήτισης σε έναν μονωτή κύματος πυκνότητας μπορεί να οδηγήσει σε νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το πεδίο οι οποίες εκδηλώνονται μέσω μιας μεταμαγνητικής μετάβασης «διπλού σκαλοπατιού». Κατά την μετάβαση αυτή, το ενεργειακό κέρδος από την εμφάνιση της φάσης συνύπαρξης $CDW + SDW + FM$ μπορεί να οδηγήσει στην αύξηση του κρίσιμου πεδίου του αρχικού κύματος πυκνότητας πολύ πιο πάνω από το αναμενόμενο όριο Pauli. Ακόμη, όπως θα δούμε, κατά την μετάβαση $CDW \rightarrow CDW + SDW + FM$ το σύστημα παρουσιάζει αρνητική μαγνητοαντίσταση, η οποία όταν ο ανταγωνισμός μεταξύ των τριών καταστάσεων είναι έντονος, μπορεί να είναι κολοσσιαία. Τέλος, ως μέσο ανίχνευσης της φάσης συνύπαρξης, παρουσιάζουμε πρωτότυπους αυτοσυνεπείς υπολογισμούς της οπτικής αγωγιμότητας ενός τέτοιου συστήματος.

5.1 Θεωρητικό μοντέλο

Θα επικεντρωθούμε στην συνύπαρξη συμβατικών κυμάτων πυκνότητας όπου το SDW και ο σιδηρομαγνητισμός έχουν παράλληλες πολώσεις. Σύμφωνα με την ανάλυση στην Ενότητα 2.2, η σχετική Χαμιλτονιανή γράφεται αμέσως ως εξής:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \left(\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\tau}_3 \hat{\rho}_3 + \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - W \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 - M \hat{\tau}_1 \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 - \tilde{F} \hat{\rho}_3 \hat{\sigma}_3 \right) \Psi_{\mathbf{k}} \quad (5.1)$$

5.1 Θεωρητικό μοντέλο

όπου W, M, F είναι οι παράμετροι τάξης για το CDW, SDW και τον απεντοπισμένο σιδηρομαγνητισμό (FM), $\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{k}} - \mu$ και $\tilde{F} = F + \mu_B H$, $\gamma_{\mathbf{k}}, \delta_{\mathbf{k}}$ ο αντιπεριοδικός και περιοδικός όρος ως προς το κυματόνισμα τέλειας συναρμογής \mathbf{Q} και $\mu_B H$ το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο παράλληλο στην πόλωση των SDW και FM. Το μοντέλο αυτό πρωτοεισήχθη στην μορφή αυτή για την μελέτη της κολοσιαίας μαγνητοαντίστασης στα μαγγανίδια [98].

5.1.1 Αναγωγή σε νέα βάση και εξισώσεις αυτοσυνέπειας

Ο χώρος στον οποίο δρα ο σπίνορας της Εξ.(2.8) είναι επιλεγμένος κατάλληλα ώστε να περιγράφει και υπεραγωγίμα συμπεκνώματα. Εφ'όσον στο σημείο αυτό θα ασχοληθούμε μόνο με συμπεκνώματα ηλεκτρονίου-οπής, και μάλιστα άρτια ως προς την χωρική αντιστροφή, μπορούμε να ανάγουμε την παραπάνω Χαμιλτονιανή σε μια ισοδύναμη, πιο απλή βάση, κρατώντας μόνο τους απαραίτητους βαθμούς ελευθερίας του προβλήματος. Αυτοί είναι η μεταφορική συμμετρία ως προς το κυματόνισμα τέλειας συναρμογής \mathbf{Q} ($\{|\mathbf{k}\rangle, |\mathbf{k} + \mathbf{Q}\rangle\}$) και η πόλωση του σπιν ($\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$). Σε αναλογία λοιπόν, με την ανάλυση του Κεφ.2, εισάγουμε τον σπίνορα:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \left(c_{\mathbf{k},\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k},\downarrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\uparrow}^{\dagger}, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\downarrow}^{\dagger} \right) \quad (5.2)$$

ο οποίος δρα στον 4-διάστατο χώρο με βάση: $\hat{a}_i = \hat{\rho}_i \otimes \hat{\sigma}_i$. Είναι θέμα απλών αλγεβρικών πράξεων να δείξει κανείς ότι στην βάση αυτή, η παραπάνω Χαμιλτονιανή γράφεται ισοδύναμα ως:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \left(\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 + \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - W \hat{\rho}_1 - M \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3 - \tilde{F} \hat{\sigma}_3 \right) \Psi_{\mathbf{k}} \quad (5.3)$$

Η συνάρτηση Green του συστήματος, μπορεί να βρεθεί αντιστρέφοντας τον πίνακα:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} + W \hat{\rho}_1 + M \hat{\rho}_1 \hat{\sigma}_3 + \tilde{F} \hat{\sigma}_3 \right)^{-1} \quad (5.4)$$

και οι συζευγμένες εξισώσεις αυτοσυνέπειας για τις τρεις παραμέτρους τάξης από τα ίχνη:

$$W(M, F) = \frac{1}{4} T V^{W(M, F)} \sum_{\mathbf{k}, n} \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}_1 (\sigma \hat{\rho}_1, \sigma) \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \quad (5.5)$$

Μια προσεκτική ματιά στην Εξ.(5.3) οδηγεί στο συμπέρασμα ότι η Χαμιλτονιανή είναι διαγώνια στον χώρο των σπιν. Ως εκ τούτου, μπορεί να γραφτεί στην ακόμα πιο απλή μορφή:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \zeta_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} \left(\gamma_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 + \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - W \hat{\rho}_1 - \sigma \hat{\rho}_1 - \sigma \tilde{F} \right) \zeta_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (5.6)$$

όπου:

$$\zeta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger) \quad (5.7)$$

Τελικά, καταφέραμε να ανάγουμε την αρχική Εξ.(5.2) στην ισοδύναμη, αλλά πολύ πιο απλουστευμένη, έκφραση της Εξ.(5.6) εισάγοντας τον δισδιάστατο σπινόρα (5.7) που δρα στον χώρο ηλεκτρονίου-οπής με βάση τους πίνακες Pauli $\hat{\rho}_i$.

Μετασχηματισμός Bogoliubov

Μπορούμε τώρα να βρούμε με σχετική ευκολία τον μοναδιαίο μετασχηματισμό που διαγωνοποιεί την Εξ.(5.6) έτσι ώστε να ισχύει:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \zeta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{D}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{U}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \zeta_{\mathbf{k},\sigma} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \phi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{D}_{\mathbf{k},\sigma} \phi_{\mathbf{k},\sigma} \quad (5.8)$$

με

$$\phi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = \zeta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \hat{U}_{\mathbf{k},\sigma} = (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},\sigma}^* & v_{\mathbf{k},\sigma}^* \\ -v_{\mathbf{k},\sigma} & u_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

$$= (u_{\mathbf{k},\sigma}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger - v_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger, v_{\mathbf{k},\sigma}^* c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + u_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger) = (\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger) \quad (5.10)$$

και γ τους νέους τελεστές δημιουργίας/καταστροφής των οιονεί-σωματιδίων. Όπως φαίνεται από την Εξ.(5.10), οι μονοσωματιδιακές διεγέρσεις της φάσης συνύπαρξης αποτελούν έναν υβριδισμό ηλεκτρονίων ($c_{\mathbf{k}}^\dagger$) και οπών ($c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}^\dagger$) χωρίς όμως υπέρθεση καταστάσεων με αντίθετο σπιν όπως στην περίπτωση της υπεραγωγιμότητας. Ύστερα από μια σειρά αλγεβρικών πράξεων, οι οποίες παραθέτονται στο Παρ.Γ'.2, βρίσκουμε:

$$u_{\mathbf{k},\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{(W+\sigma M)^2}{\gamma_{\mathbf{k}}^2}}} \right) \quad , \quad v_{\mathbf{k},\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{(W+\sigma M)^2}{\gamma_{\mathbf{k}}^2}}} \right) \quad (5.11)$$

και τελικά,

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [E_{\sigma+}(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\sigma-}(\mathbf{k}) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}] \quad (5.12)$$

με τους πόλους:

$$E_{\sigma\pm}(\mathbf{k}) = \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \sigma \tilde{F} \pm \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + \sigma M)^2} \quad (5.13)$$

Παρατηρούμε ότι στην φάση συνύπαρξης, η δημιουργική/καταστροφική συμβολή των δυο κυμάτων πυκνότητας έχει ως συνέπεια το ενεργειακό χάσμα πάνω από κάθε σπιν μάντα

να διαφέρει. Εναλλακτικά, μπορούμε να ερμηνεύσουμε το αποτέλεσμα αυτό ως δυο κύματα πυκνότητας, ένα σε κάθε σπιν μάντα με παραμέτρους τάξης $\Delta_\sigma = W + \sigma M$.

Εξισώσεις αυτοσυνέπειας

Χρησιμοποιώντας την Χαμιλτονιανή (5.6), η συνάρτηση Green (5.4) γράφεται ισοδύναμα ως το άθροισμα: $\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \sum_\sigma \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ όπου:

$$\hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \left(i\omega_n - \gamma_{\mathbf{k}} \hat{\rho}_3 - \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} + W \hat{\rho}_1 + \sigma M \hat{\rho}_1 + \sigma \tilde{F} \right)^{-1} \quad (5.14)$$

και εφ' όσον γνωρίζουμε τον μοναδιαίο μετασχηματισμό, $\hat{U}_{\mathbf{k}}$, μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την σχέση (3.15) οπότε και έχουμε:

$$W = \frac{V^W}{4} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_i \left(\hat{U}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{\rho}_1 \hat{U}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \right)_{(i,i)} n_F[E_{\sigma, i}(\mathbf{k})] \quad (5.15)$$

$$M = \frac{V^M}{4} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_i \sigma \left(\hat{U}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{\rho}_1 \hat{U}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \right)_{(i,i)} n_F[E_{\sigma, i}(\mathbf{k})] \quad (5.16)$$

$$F = \frac{V^F}{4} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_i \sigma n_F[E_{\sigma, i}(\mathbf{k})] \quad (5.17)$$

Τελικά καταλήγουμε στο σύστημα συζευγμένων εξισώσεων:

$$W = V^W \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{W + \sigma M}{4\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + \sigma M)^2}} [n_F(E_{\sigma-}) - n_F(E_{\sigma+})] \quad (5.18)$$

$$M = V^M \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{M + \sigma W}{4\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + \sigma M)^2}} [n_F(E_{\sigma-}) - n_F(E_{\sigma+})] \quad (5.19)$$

$$F = \frac{V^F}{4} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma [n_F(E_{\sigma-, -}(\mathbf{k})) + n_F(E_{\sigma+, +}(\mathbf{k}))] \quad (5.20)$$

Οι παραπάνω εξισώσεις διαφέρουν από την τυπική εξίσωση BCS δεδομένου ότι στο δεξί μέλος υπάρχουν όροι οι οποίοι δεν είναι ανάλογοι με την παράμετρο τάξης του αριστερού μέλους. Για παράδειγμα, ας ρίξουμε μια ματιά στην εξίσωση για το SDW. Θέτοντας $M = 0$ στο δεξί μέλος έχουμε:

$$M_{ind} = V^M \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \frac{\sigma W}{4\sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + W^2}} [n_F(E_{\sigma-}) - n_F(E_{\sigma+})] |_{M=0} \quad (5.21)$$

Για $W \neq 0$, η ποσότητα στην αγκύλη είναι μη μηδενική μόνο όταν $\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} \neq 0$ και $\tilde{F} \neq 0$. Παρόμοιες σχέσεις ισχύουν και για τις άλλες δυο εξισώσεις αυτοσυνέπειας. Έτσι, καταλήγουμε

στο συμπέρασμα ότι παρουσία ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής ($\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} \neq 0$) οι παράμετροι τάξης των CDW, SDW και FM αποτελούν ένα μοτίβο από συνυπάρχοντα συμπυκνώματα.

Στην φάση συνύπαρξης, μπορούμε να αναπτύξουμε κατά Taylor τις Εξ.(5.18-5.20) κοντά στο κοινό τους T_c θεωρώντας ταυτόχρονα μικρό όρο $\tilde{\delta}_{\mathbf{k}}$. Με τον τρόπο αυτό, βλέπουμε ότι η σύζευξη μεταξύ των τριών παραμέτρων, του πεδίου και της ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής είναι στην πραγματικότητα γραμμική. Για παράδειγμα, ο επαγόμενος όρος της μαγνήτισης έχει την μορφή:

$$F_{ind} = \frac{V^F}{4} \sum_{\mathbf{k}} \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} MW \frac{\tanh \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2T_c}}{T_c^2 \gamma_{\mathbf{k}} \cosh^2 \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2T_c}} \quad (5.22)$$

ενώ αντίστοιχα, $M_{ind} \propto \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} FW$ και $W_{ind} \propto \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} FM$.

Από τις Εξ.(5.14),(A.12-A.13) μπορούμε να γράψουμε κατευθείαν την ελεύθερη ενέργεια του συστήματος ως:

$$\delta\mathcal{F} = \frac{W^2}{V_{CDW}} + \frac{M^2}{V_{SDW}} + \frac{F^2}{V_{FM}} - T \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\pm} \ln \frac{1 + e^{-\beta E_{\sigma\pm}(\mathbf{k})}}{1 + e^{-\beta \epsilon_{\sigma\pm}(\mathbf{k})}} \quad (5.23)$$

όπου $\epsilon_{\sigma\pm}(\mathbf{k})$ οι πόλοι για $W = M = F = 0$. Είναι εύκολο να δειχθεί ότι ελαχιστοποίηση της παραπάνω ως προς W , M και F οδηγεί πίσω στις εξισώσεις αυτοσυνέπειας (5.18-5.20).

Μηχανισμοί μετάβασης στην φάση συνύπαρξης

Είναι σκόπιμο στο σημείο αυτό, να εξετάσουμε ποιοτικά τον μηχανισμό της μετάβασης $CDW \rightarrow CDW + SDW + FM$. Θα περιορίσουμε την συζήτηση σε μηδενικές θερμοκρασίες. Στο όριο $T \rightarrow 0$, οι συναρτήσεις Fermi-Dirac των εξισώσεων (5.18-5.20) παίρνουν την μορφή συναρτήσεων βήματος του Heaviside : $n_F[E_{\sigma\pm}(\mathbf{k})] \rightarrow \theta[-E_{\sigma\pm}(\mathbf{k})]$. Παρατηρούμε λοιπόν ότι η επαγωγή των όρων M, F γενικά συμβαίνει όταν μηδενιστεί ένας από τους πόλους της Εξ.(5.13). Η συνθήκη αυτή οδηγεί στην μετάβαση $CDW \rightarrow CDW + SDW + FM$, ενώ όταν ένας ακόμη πόλος μηδενιστεί, το σύστημα επιστρέφει στην κανονική του κατάσταση. Όπως φαίνεται και στο Σχ.5.2(b),(c), η συμπεριφορά αυτή επιβεβαιώνεται και από τους αριθμητικούς υπολογισμούς μας.

Χάριν απλότητας και χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε ότι είτε $t' \neq 0, \mu = 0$ ή $t' = 0, \mu \neq 0$ έτσι ώστε για $\tilde{\delta} > 0 (\tilde{\delta} < 0)$, $t', \mu < 0 (t', \mu > 0)$ και ακόμη ότι $H > 0$ (δηλαδή $\vec{H} \cdot \hat{z} = 1$). Ακόμη, από τον όρο σύζευξης: $W_{ind} \propto \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} FM$ (βλ. Εξ.(5.22)), παρατηρούμε ότι ο όρος $\tilde{\delta}$ καθορίζει το πρόσημο των M, F δεδομένου ότι πάντα: $W_{ind} > 0$. Διακρίνουμε τώρα δυο περιπτώσεις:

- I. $\tilde{\delta} > 0 (t', \mu < 0) \rightarrow F, M > 0$: Στην περίπτωση αυτή, μηδενίζονται διαδοχικά οι κλά-

δοι:

$$1. E_{\downarrow-}(\mathbf{k}) = \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} + \tilde{F} - \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W - M)^2}, \quad 2. E_{\uparrow+}(\mathbf{k}) = \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \tilde{F} + \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + M)^2}$$

Παρατηρούμε ότι οι όροι $\tilde{\delta}$ και \tilde{F} λειτουργούν συνεργιστικά με αποτέλεσμα την μείωση του κρίσιμου πεδίου (H_{c1}) πάνω από το οποίο γίνεται μετάβαση στην φάση συνύπαρξης. Αντίθετα, οι όροι αυτοί λειτουργούν ανταγωνιστικά πάνω από το H_{c1} με αποτέλεσμα το κρίσιμο πεδίο μετάβασης στην κανονική κατάσταση (H_{c2}) να αυξάνει. Κατά συνέπεια, στην περίπτωση I, η περιοχή συνύπαρξης διευρύνεται.

II. $\tilde{\delta} < 0$ ($t', \mu > 0$)

α) $F > 0, M < 0$: Στην περίπτωση αυτή, μηδενίζονται διαδοχικά οι κλάδοι:

$$1. E_{\uparrow+}(\mathbf{k}) = -\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \tilde{F} + \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W - M)^2}, \quad 2. E_{\downarrow-}(\mathbf{k}) = -\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} + \tilde{F} - \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + M)^2}$$

Εύκολα παρατηρεί κανείς ότι η περίπτωση αυτή είναι ισοδύναμη με την I.

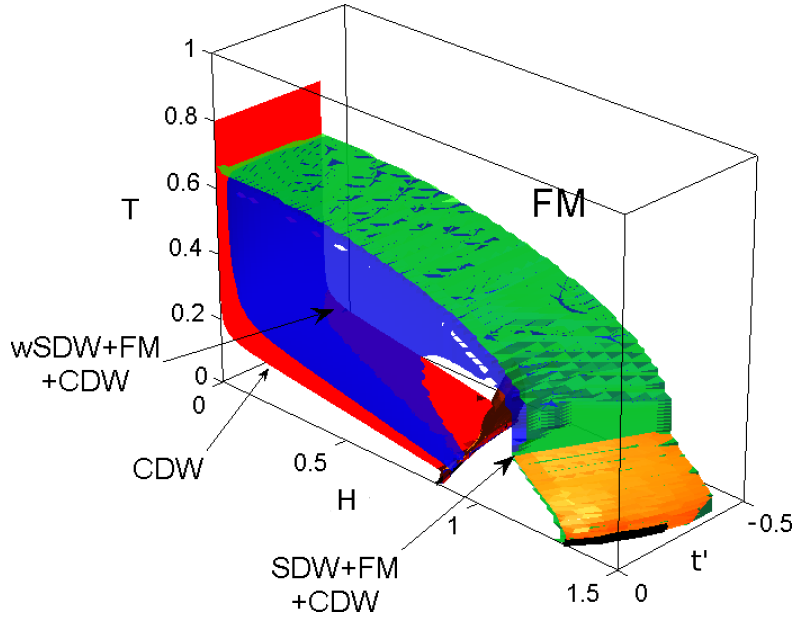
β) $F < 0, M > 0$: Στην περίπτωση αυτή, η επαγόμενη μαγνήτιση στο σύστημα είναι αντίθετη με το εξωτερικό πεδίο. Κατά συνέπεια, είναι αναγκαίες πολύ υψηλότερες τιμές του μαγνητικού πεδίου έτσι ώστε ο όρος $\tilde{F} = H - F$ να προκαλέσει μετάβαση στην φάση συνύπαρξης, μηδενίζοντας τον κλάδο: $E_{\downarrow-}(\mathbf{k}) = -\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} + (H - F) - \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W - M)^2}$. Στην υποθετική περίπτωση όπου η κατάσταση CDW είναι αρκετά ισχυρή ώστε να μην καταστραφεί στο H_{c1} επιτρέποντας το σύστημα να μεταβεί στην περιοχή του «σκαλοπατιού», ο επόμενος κλάδος που μηδενίζεται είναι ο: $E_{\uparrow+}(\mathbf{k}) = -\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \tilde{F} + \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + M)^2}$. Βλέπουμε δηλαδή, ότι οι όροι $\tilde{\delta}, \tilde{F}$ δρουν συνεργιστικά στην καταστροφή των κυμάτων πυκνότητας με αποτέλεσμα το H_{c2} να είναι πολύ μικρότερο από αυτό των περιπτώσεων I. και II(α). Καταλήγουμε λοιπόν στο συμπέρασμα ότι στην περίπτωση II(β) η περιοχή συνύπαρξης συρρικνώνεται.

Τα παραπάνω συμπεράσματα αποτελούν γενίκευση της συζήτησης που παρουσιάστηκε στην αναφορά [98] για το ίδιο σύστημα παραμέτρων τάξης στα πλαίσια του μηχανισμού πίσω από το φαινόμενο της Κολοσσιαίας Μαγνητοαντίστασης. Παρατηρούμε ότι σε κάθε περίπτωση η μετάβαση στην φάση συνύπαρξης σηματοδοτείται από τον μηδενισμό ενός πόλου με χάσμα $W - M$. Αυτό σημαίνει ότι αν $M \sim W$, το κρίσιμο πεδίο H_{c1} της μετάβασης είναι πολύ μικρό. Κατά συνέπεια, ένα ισχυρό CDW μπορεί εν μέρει να καταστραφεί, από ένα μαγνητικό πεδίο τάξης μεγέθους μικρότερο από αυτό που θα περίμενε κανείς σε έναν θεωρητικό υπολογισμό όπου το SDW δεν λαμβάνεται υπόψη.

5.2 Διαγράμματα φάσης

Για την αριθμητική επίλυση του συστήματος συζευγμένων αυτοσυνεπών εξισώσεων (5.18-5.20) θεωρούμε τετραγωνικό σύστημα με: $\gamma_{\mathbf{k}} = -t(\cos k_x + \cos k_y)$ και $\delta_{\mathbf{k}} = -t' \cos k_x \cos k_y - \mu$. Στο εξής, θέτουμε $t = 1$, ορίζοντας έτσι το εύρος της ενεργειακής ζώνης ίσο με $4t$. Οι τιμές των υπόλοιπων παραμέτρων της θεωρίας μετρώνται σε μονάδες του t . Γενικά, για $T = 0, H = 0$ και τιμές του $\delta_{\mathbf{k}}$ οι οποίες δεν καταστρέφουν τελείως τις ιδιότητες συναρμογής της επιφάνειας Fermi, η σιδηρομαγνητική παράμετρος τάξης είναι υπολειπόμενη των W, M . Αυτό είναι αναμενόμενο αφού όταν το σύστημα είναι σε μια κατάσταση κύματος πυκνότητας φορτίου/σπιν, γύρω από την επιφάνεια Fermi υπάρχει χάσμα, μεγιστοποιώντας έτσι το κέρδος στην ενέργεια συμπύκνωσης, σε αντίθεση με την σιδηρομαγνητική κατάσταση. Οι εξισώσεις των CDW και SDW (5.18,5.19) είναι συμμετρικές μεταξύ τους ως προς την εναλλαγή των W, M . Αυτό σημαίνει ότι όταν $V^W > V^M$ ($V^W < V^M$) το σύστημα είναι μονωτής τύπου CDW (SDW), όπως επιβεβαιώνουν και οι αριθμητικές μας λύσεις. Στην παρούσα μελέτη, ενδιαφερόμαστε για φυσικές περιπτώσεις όπου το σύστημα στην θεμελιώδη του κατάσταση είναι ένας CDW μονωτής. Σύμφωνα με τα παραπάνω λοιπόν, αρκεί να περιοριστούμε στον υποχώρο των ενεργών δυναμικών όπου: $V^W > V^M$.

Στο Σχ.5.1 παρουσιάζεται το γενικό διάγραμμα φάσης συναρτήσει πεδίου, ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και θερμοκρασίας ($H - t' - T$) του συστήματος $CDW + SDW + FM$ σύμφωνα με την αριθμητική επίλυση των αυτοσυνεπών εξισώσεων για τα αντίστοιχα χάσματα W, M, F . Η μορφή του διαγράμματος αυτού δεν εξαρτάται ποιοτικά από τα δυναμικά σκέδασης των W, M, F , αρκεί η $T = H = 0$ κατάσταση του συστήματος να είναι ένα CDW. Όπως φαίνεται στο σχετικό διάγραμμα, η κατάσταση αυτή είναι λύση του συστήματος για χαμηλές θερμοκρασίες και πεδία και οριοθετείται από την κόκκινη επιφάνεια. Η θερμοκρασιακή εξάρτηση του W είναι BCS μορφής. Κατά συνέπεια, καθώς η θερμοκρασία αυξάνει, θερμικά διεγερμένοι φορείς σχηματίζουν μια πεπερασμένη επιφάνεια Fermi στα σημεία της ζώνης Brillouin στα οποία το CDW χάσμα είναι ελάχιστο. Η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου πολώνει αυτούς τους διεγερμένους φορείς με αποτέλεσμα την επαγωγή μαγνήτισης στο σύστημα, ενώ για πεπερασμένο $t' \neq 0$, επάγεται και ένας αντισιδηρομαγνητικός όρος οδηγώντας στην εμφάνιση του μοτίβου συνύπαρξης $CDW + SDW + FM$. Η περιοχή εμφάνισης του φαινομένου αυτού περικλείεται από την μπλε επιφάνεια του διαγράμματος. Εξαιτίας του μικρού ποσοστού των θερμικά διεγερμένων φορέων, οι παράμετροι τάξης των M, F στην περιοχή αυτή είναι πολύ ασθενείς, τουλάχιστον μια τάξη μεγέθους μικρότερη από το επικρατέστερο CDW χάσμα και την ονομάζουμε wSDW φάση (w=weak).



Σχήμα 5.1: Διάγραμμα φάσης συναρτήσει πεδίου, ασυμμετρίας ηλεκτρονίου-οπής και θερμοκρασίας ($H - t' - T$) του συστήματος $CDW + SDW + FM$ σύμφωνα με την αριθμητική επίλυση των αυτοσυνεπών εξισώσεων για τα αντίστοιχα χάσματα W, M, F με $V^W/V^M = 1.2$ και $V^M = V^F = 2.5t$. Στην περιοχή κάτω από την κόκκινη επιφάνεια το σύστημα είναι μια καθαρή CDW φάση. Κάτω από την πράσινη επιφάνεια, οι τρεις παράμετροι τάξης συνυπάρχουν, ενώ πάνω από αυτήν το σύστημα είναι σιδηρομαγνητικό (FM). Με μπλε χρώμα, διακρίνεται η περιοχή στην οποία το CDW συνυπάρχει με πολύ ασθενή SDW και FM , τουλάχιστον μια τάξη μεγέθους μικρότερα από ότι στην περιοχή συνύπαρξης που οριοθετείται από τις πορτοκαλί επιφάνειες. Οι τελευταίες σηματοδοτούν μεταβάσεις 1ης τάξης.

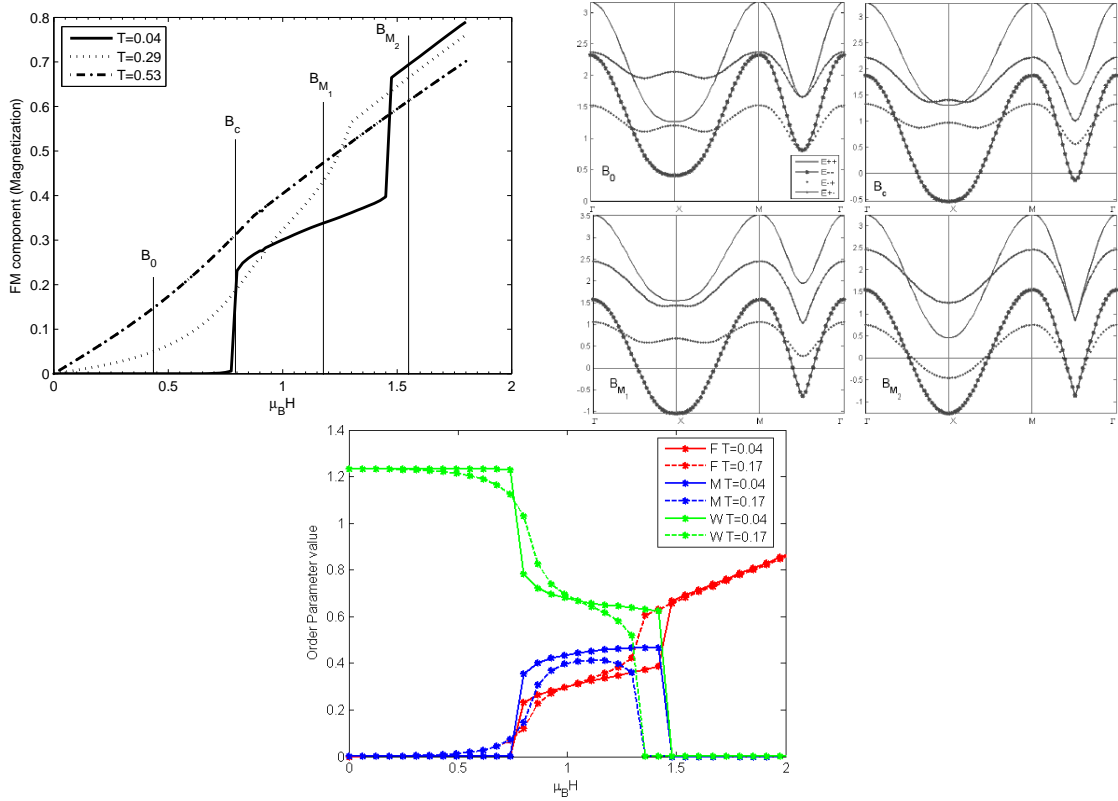
5.2.1 Μεταμαγνητικές μεταβάσεις - Επαγόμενα Κύματα πυκνότητας σπιν

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η συμπεριφορά του συστήματος για χαμηλές θερμοκρασίες και υψηλά μαγνητικά πεδία, δηλαδή στην περιοχή ανάμεσα από τις πορτοκαλί επιφάνειες του Σχ.5.1. Πάνω από ένα κρίσιμο πεδίο B_{c1} , παρατηρείται μια μετάβαση 1ης τάξης της μορφής: $CDW \rightarrow CDW + SDW + FM$. Στην περιοχή συνύπαρξης, οι τρεις παράμετροι τάξης είναι ίδιας τάξης, όπως φαίνεται και στο Σχ.5.2(c). Η επαγωγή ενός SDW στην περιοχή χαμηλών θερμοκρασιών που αναφέρουμε εδώ, αποτελεί έναν πρωτότυπο μηχανισμό επαγωγής κυμάτων πυκνότητας σπιν από CDW μονωτικές καταστάσεις λόγω μόνο της σύζευξης του μαγνητικού πεδίου με τα ηλεκτρονιακά σπιν μέσω του όρου Zeeman [99]. Όπως θα δούμε στην τελευταία ενότητα του κεφαλαίου, η μετάβαση αυτή, έχει τα χαρακτηριστικά των αντίστοιχων FFLO φάσεων στην περίπτωση των υπεραγωγών.

Σε ένα δεύτερο κρίσιμο πεδίο B_{c2} , το σύστημα μεταβαίνει στην παραμαγνητική φάση πάλι μέσω μιας μετάβασης 1ης τάξης. Η περιοχή της μετάβασης διευρύνεται για όλο και πιο

5. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το μαγνητικό πεδίο σε μονωτές τύπου CDW

αρνητικές τιμές του t' , επιβεβαιώνοντας τα συμπεράσματα που εξάγαμε για τον μηχανισμό συνύπαρξης στην περίπτωση I. Κατά την μετάβαση στη φάση συνύπαρξης, η μαγνήτιση του συστήματος παρουσιάζει την μορφή «διπλού σκαλοπατιού» που φαίνεται στο Σχ.5.2(a).

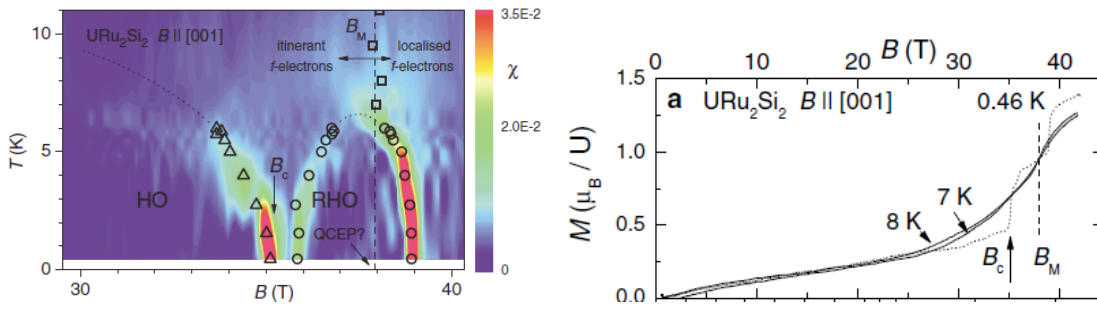


Σχήμα 5.2: a) Η μαγνήτιση συναρτήσει του πεδίου για διάφορες θερμοκρασίες. Για χαμηλές θερμοκρασίες, (συνεχής γραμμή) λαμβάνουν χώρα δυο διαδοχικές μεταμαγνητικές μεταβάσεις, ενώ η αύξηση της θερμοκρασίας (διακεκομμένες γραμμές) «σβήνει» τα μεταμαγνητικά σκαλοπατία. b) Το φάσμα των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων σε διάφορες κατευθύνσεις υψηλής συμμετρίας του τετραγωνικού πλέγματος για τιμές του πεδίου $B_0, B_c, B_{M_1}, B_{M_2}$ που αντιστοιχούν στο γράφημα (a) c) Η εξάρτηση των τριών παραμέτρων τάξης με το πεδίο σε χαμηλές θερμοκρασίες. Σε όλα τα γραφήματα, $t' = -0.4t$ [100].

Μεταβάσεις τέτοιου τύπου, κατά τις οποίες η μαγνήτιση ενός συστήματος αυξάνει απότομα με γραμμικό τρόπο συναρτήσει ενός εξωτερικού μαγνητικού πεδίου ονομάζονται μεταμαγνητικές. Μία μεταμαγνητική μετάβαση δεν συνοδεύεται από το σπάσιμο της συμμετρίας αντιστροφής του χρόνου, δεδομένου ότι αυτή έχει ήδη παραβιαστεί λόγω του ισχυρού εξωτερικού πεδίου. Χαρακτηριστικά συστήματα στα οποία έχουν παρατηρηθεί μεταβάσεις 1ης τάξης «διπλού σκαλοπατιού», είναι τα $Sr_3Ru_2O_7$ [101, 102] και URu_2Si_2 [103] (βλ.Σχ.5.3). Και τα δυο αυτά υλικά, εμφανίζουν μια νέα κατάσταση τάξης στην περιοχή του σκαλοπατιού της μεταμαγνητικής μετάβασης. Στο $Sr_3Ru_2O_7$ είναι σχεδόν σίγουρο ότι αυτή η κατάσταση είναι μια φάση Pomeranchuk [35], ενώ στο URu_2Si_2 τα πειραματικά δεδομένα συγκλίνουν

5.2 Διαγράμματα φάσης

σε μια η κατάσταση τύπου κύματος πυκνότητας φορτίου/σπιν [103, 104]. Παρόμοια φαινομενολογία βρίσκουμε και για τις μεταβάσεις του Σχ.5.1, όπου ανάμεσα στο μεταμαγνητικό σκαλοπάτι εμφανίζεται η παράμετρος τάξης του SDW. Μάλιστα το διάγραμμα φάσης που βρίσκουμε, παρουσιάζει προφανείς ομοιότητες με το αντίστοιχο διάγραμμα φάσης H-T του υλικού αυτού όπως φαίνεται και στο Σχ.5.3(α), ενώ η συμπεριφορά της μαγνήτισης στο υλικό είναι ακριβώς ίδια με αυτήν που προκύπτει από τις αυτοσυνεπείς λύσεις μας (βλ.Σχ.5.2(α) και Σχ.5.3(β)).



Σχήμα 5.3: α) Πειραματικό διάγραμμα φάσης T-H για το URu_2Si_2 . β) Η μαγνήτιση συναρτήσει του πεδίου για το ίδιο υλικό όπου σε χαμηλές θερμοκρασίες φαίνεται το μετρούμενο μεταμαγνητικό σκαλοπάτι [103].

Στο Σχ.5.2(b) απεικονίζεται η ενεργειακή διασπορά των κλάδων των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων των οιονεί σωματιδίων του συστήματος (Εξ.5.13) κατά μήκος περιοχών υψηλής συμμετρίας του τετραγωνικού πλέγματος: $\Gamma(0,0) - X(\pi,0) - M(\pi,\pi) - \Gamma(0,0)$. Παρατηρούμε ότι κατά την μεταμαγνητική μετάβαση στην φάση συνύπαρξης, ο πόλος $E_{--}(\mathbf{k})$ αλλάζει πρόσημο σε κάποια σημεία της ζώνης Brillouin, ενώ στην δεύτερη μεταμαγνητική μετάβαση στην οποία τα κύματα πυκνότητας καταστρέφονται, ο κλάδος $E_{++}(\mathbf{k})$ μηδενίζεται. Κατά συνέπεια, στην περιοχή του σκαλοπατιού, εμφανίζεται μια επιφάνεια Fermi η οποία κατοικείται μόνο από φορείς ενός είδους σπιν (εδώ $\sigma = \downarrow$) με αποτέλεσμα το σύστημα στην περιοχή αυτή να εμφανίζει ημιμεταλλική συμπεριφορά [105].

Πρόσφατα παρατηρήθηκε στην περιοχή «κρυφής τάξης» του URu_2Si_2 ένα γιγαντιαίο σήμα Nernst το οποίο υποδηλώνει ότι η εξωτική κατάσταση στο υλικό αυτό δεν είναι ένα συμβατικό κύμα πυκνότητας, αλλά ένα χειρικό μη συμβατικό κύμα πυκνότητας φορτίου/σπιν [88]. Με βάση τα στοιχεία αυτά, αυτή ακριβώς η κατάσταση προτάθηκε ως η «κρυφή τάξη» για το URu_2Si_2 [90]. Αξίζει να σημειωθεί ότι η προτεινόμενη θεωρία είναι η μοναδική ανάμεσα σε έναν μεγάλο αριθμό θεωριών που έχουν προταθεί για το υλικό αυτό τα τελευταία 20 χρόνια η οποία αναπαράγει πιστά το διάγραμμα φάσης, τις μεταμαγνητικές μεταβάσεις και το γιγαντιαίο σήμα Nernst για το υλικό αυτό [104].

5.3 Υπολογισμοί μαγνητοαντίστασης

Στην ενότητα αυτή θα αναπτύξουμε τον κατάλληλο φορμαλισμό για τον αυτοσυνεπή υπολογισμό της στατικής και της οπτικής ηλεκτρονικής αγωγιμότητας του υπό μελέτη συστήματος, υπό την επίδραση ενός μαγνητικού πεδίου. Η ποσότητα αυτή διαδραματίζει σημαντικό ρόλο σε αντίστοιχα πειράματα μέτρησης της μαγνητοαντίστασης.

Ο πυρήνας London

Όταν εφαρμόσουμε ένα εξωτερικό ηλεκτρομαγνητικό πεδίο σε ένα υλικό, το επαγόμενο ρεύμα συνδέεται με το εξωτερικό πεδίο μέσω της γραμμικής εξίσωσης:

$$J_\mu(x) = -\frac{c}{4\pi} \sum_\nu \int K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') A_\nu(\mathbf{r}', t') d^3r' dt' \quad (5.24)$$

όπου ο λεγόμενος ηλεκτρομαγνητικός πυρήνας απόκρισης ή πυρήνας London, $K_{\mu\nu}$, δίνεται από την σχέση [39]:

$$K_{\mu\nu}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -\frac{4\pi i}{c^2} \langle [j_\mu^p(\mathbf{r}, t), j_\nu^p(\mathbf{r}', t')] \rangle \theta(t - t') - \frac{4\pi e}{mc^2} \langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}] \quad (5.25)$$

ή στον αντίστροφο χώρο (υποθέτοντας μεταφορική συμμετρία) ως:

$$K_{\mu\nu}(\mathbf{q}, t - t') = -\frac{4\pi i}{c^2} \langle [j_\mu^p(\mathbf{q}, t), j_\nu^p(-\mathbf{q}, t')] \rangle \theta(t - t') + \frac{4\pi n e^2}{mc^2} \delta(t - t') \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}]$$

με n τον αριθμό των φορέων (εδώ ηλεκτρόνια) ανά μονάδα όγκου¹. Ο πρώτος όρος ονομάζεται παραμαγνητικός και όπως θα δούμε ευθύνεται για την αγωγιμότητα σε ένα μέταλλο, ενώ ο δεύτερος όρος ονομάζεται διαμαγνητικός και ευθύνεται για την εμφάνιση του διαμαγνητισμού κατά Landau². Σύμφωνα και με τα όσα αναφέραμε στην Ενότητα 3.6, ο ηλεκτρομαγνητικός πυρήνας γράφεται στον χώρο Matsubara ως:

$$K_{\mu\nu}(\tilde{\mathbf{q}}) = \frac{4\pi}{c^2} \left[-\langle T_\tau j_\mu^p(\tilde{\mathbf{q}}) j_\nu^p(-\tilde{\mathbf{q}}) \rangle + \frac{\tilde{n} e^2}{\tilde{m}} \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}] \right] \quad (5.26)$$

¹ο διαμαγνητικός όρος μετασχηματίζεται κατά Fourier ως εξής: $\int \langle \rho_e(\mathbf{r}, t) \rangle \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') e^{-iq(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d^3r = -e \langle 0 | \rho(\mathbf{r}, t) | 0 \rangle = -en$ και $\langle \rho(\mathbf{r}, t) \rangle = \langle \hat{N} / V \rangle = n$.

²ο διαμαγνητικός όρος στην υπεραγώγιμη κατάσταση οδηγεί στο φαινόμενο Meißner

5.3 Υπολογισμοί μαγνητοαντίστασης

με $\tilde{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}, i\omega_n)$ και στην προσέγγιση «ενεργού μάζας»:

$$\frac{\tilde{n}}{\tilde{m}} \delta_{\mu\nu} = \frac{1}{4V} \sum_{\mathbf{k}_i} n_F(E_{\mathbf{k}_i}) \frac{\partial^2 E_{\mathbf{k}_i}}{\partial \mathbf{k}_\mu \partial \mathbf{k}_\nu} \delta_{\mu\nu} \quad (5.27)$$

Ο πρώτος όρος στην αγκύλη της Εξ.(5.26) είναι μια συνάρτηση Green η οποία συναντάται συχνά ως συνάρτηση συσχέτισης ρεύματος -ρεύματος:

$$\Pi_{\mu\nu}^{CC}(\mathbf{q}, i\omega_n) = -\langle T_\tau j_\mu^p(\tilde{\mathbf{q}}) j_\nu^p(-\tilde{\mathbf{q}}) \rangle \quad (5.28)$$

Ο πυρήνας London μετά την αναλυτική συνέχιση και για $\mathbf{q} = 0$ γράφεται³:

$$K_{\mu\nu}(\omega + i\delta) = \frac{4\pi}{c^2} \left[\Re \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} + i \Im \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} - \frac{\tilde{n}e^2}{\tilde{m}} \delta_{\mu\nu} [1 - \delta_{\nu,0}] \right] \quad (5.29)$$

Σύνδεση με την αγωγιμότητα

Η προσέγγιση γραμμικής απόκρισης ουσιαστικά ισοδυναμεί με τον νόμο του Ohm έτσι ώστε:

$$J_\mu(\omega) = \sigma_{\mu\nu}(\omega) E_\nu(\omega) = i\omega \sigma_{\mu\nu}(\omega) A_\nu(\omega) \quad (5.30)$$

και από τα παραπάνω βρίσκουμε ότι ο ηλεκτρομαγνητικός πυρήνας ισούται με:

$$K_{\mu\nu}(\omega) = -\frac{4\pi}{c} i\omega \sigma_{\mu\nu}(\omega) \quad (5.31)$$

Κατά συνέπεια, η μιγαδική αγωγιμότητα δίνεται από την σχέση:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{c\omega} \left[i \Re \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} - \Im \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} - i \frac{\tilde{n}e^2}{\tilde{m}} \delta_{\mu\nu} \right]$$

Διαχωρίζοντας την αγωγιμότητα σε πραγματικό και φανταστικό κομμάτι: $\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \sigma_1^{\mu\nu}(\omega) + i\sigma_2^{\mu\nu}(\omega)$ καταλήγουμε τελικά στις σχέσεις (στο εξής θέτουμε $c = 1$):

$$\sigma_1^{\mu\nu}(\omega) = -\frac{1}{\omega} \Im \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} \quad (5.32)$$

$$\sigma_2^{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{\omega} \left[\Re \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} - \frac{\tilde{n}e^2}{\tilde{m}} \delta_{\mu\nu} \right] \quad (5.33)$$

Άρα τελικά, βλέπουμε ότι για τον υπολογισμό της αγωγιμότητας, αρκεί να υπολογίσουμε το φανταστικό κομμάτι της $\Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta)$.

³ Αν υποθέσουμε ότι $\hbar\mathbf{q} = m\mathbf{v}$ και $\hbar\omega = m\mathbf{v}^2/2 = \hbar\mathbf{q}\mathbf{v}/2$, τότε βλέπουμε ότι $\mathbf{q} \sim \frac{\omega}{v} \ll \mathbf{k}_F$ που οδηγεί στο συμπέρασμα ότι στα στερεά το \mathbf{q} είναι αμελητέο σε σχέση με το κυματόνισμα Fermi, έτσι είναι συνήθης πρακτική να θέτουμε $\mathbf{q} = 0$ εξαρχής στους υπολογισμούς της αγωγιμότητας [3].

Τελεστής ρεύματος σε σπινωριακή μορφή

Ο τελεστής της πυκνότητας φορτίου σε σπινωριακή μορφή γράφεται:

$$\rho(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \quad (5.34)$$

με: $\Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger)$ (για την ώρα, ξεχνάμε τον όρο φορτίου, $q = -|e|$ μπροστά από την Εξ.(5.34)). Θα βρούμε την μορφή του τελεστή ρεύματος χρησιμοποιώντας την εξίσωση συνέχειας, η οποία στον χώρο των ορμών είναι:

$$i\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) + \dot{\rho}(\mathbf{q}, t) = 0 \quad (5.35)$$

Με $\partial_t \rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\dot{\Psi}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} + \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \dot{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma})$. Η χρονική παράγωγος ενός τελεστή \hat{O} μπορεί να βρεθεί μέσω της εξίσωσης κίνησης: $i\partial_t \hat{O} = [\hat{O}, H]$. Με την βοήθεια της Εξ.(5.34) και ύστερα από μερικές αλγεβρικές πράξεις φερμιονικών τελεστών (βλ. Παρ.Γ'.1), βρίσκουμε:

$$\dot{\rho}_{\mathbf{q}} = i\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger (\hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} - \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}) \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \quad (5.36)$$

Επιστρέφοντας στην εξίσωση συνέχειας και λύνοντας για το ρεύμα (βλ. Παρ.Γ'.1), καταλήγουμε τελικά στην σχέση:

$$\mathbf{j}(\mathbf{q}, t) = -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \quad (5.37)$$

Υπολογισμός της συνάρτησης συσχέτισης ρεύματος

Κατά τα γνωστά, ανάγοντας την Εξ.(5.37) στον χώρο Matsubara(B'.1), μπορούμε να την εισάγουμε στην Εξ.(5.28) και κρατώντας μόνο τους $\mathbf{q} = 0$ όρους να καταλήξουμε στην συνάρτηση Green πίνακα τεσσάρων τελεστών της μορφής:

$$\Pi_{\mu\nu}^{CC}(\tilde{\mathbf{q}}) = -\frac{1}{4} \sum_{\tilde{\mathbf{k}},\tilde{\mathbf{k}}'} \sum_{\sigma\sigma'} \langle T_\tau \Psi_{\tilde{\mathbf{k}},\sigma}^\dagger \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}},\sigma} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}},\sigma} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}',\sigma'}^\dagger \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}'}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}',\sigma'} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}},\sigma'} \rangle \quad (5.38)$$

από την οποία, με την βοήθεια του θεωρήματος του Wick (βλ. Παρ.B'.2) και θέτοντας $\mathbf{q} = 0$, τελικά καταλήγουμε στην σχέση:

$$\Pi_{\mu\nu}^{CC}(iq_n) = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k},\sigma} T \sum_{i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \nabla_{\mathbf{k}}^\mu \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n + iq_n) \nabla_{\mathbf{k}}^\nu \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \quad (5.39)$$

Η άθροιση στις συχνότητες Matsubara και η αναλυτική συνέχιση γίνεται με την βοήθεια της μεθοδολογίας που αναπτύξαμε στο Παρ. Β', οπότε και καταλήγουμε στις σχέσεις:

$$\Im \{ \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\omega + i\delta) \} = -\frac{\pi}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} dq \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_i \delta(q - E_{\mathbf{k},\sigma}^i) \sum_j a_{ij}^\mu a_{ji}^\nu \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k},\sigma}^j) \times (n_F(q) - n_F(\epsilon)) \delta(\omega + q - \epsilon) \quad (5.40)$$

με $a_{ij}^{\mu(\nu)}$ τα στοιχεία του πίνακα: $\hat{A}_{\mathbf{k},\sigma}^{\mu(\nu)} = \hat{U}_{\mathbf{k},\sigma} \nabla_{\mathbf{k}}^{\mu(\nu)} \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} \hat{U}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger$.

5.3.1 Στατική μαγνητοαγωγιμότητα

Εισάγοντας την Εξ.(5.40) στην Εξ.(5.32) και παίρνοντας το όριο $\omega \rightarrow 0$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\nu} &= \frac{\pi}{4} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{i,j} a_{ij}^\mu a_{ji}^\nu \delta(\omega + E_{\mathbf{k},\sigma}^i - E_{\mathbf{k},\sigma}^j) \frac{(n_F(E_{\mathbf{k},\sigma}^i) - n_F(\omega + E_{\mathbf{k},\sigma}^i))}{\omega} \\ &= \frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{i,j} a_{ij}^\mu a_{ji}^\nu \delta(E_{\mathbf{k},\sigma}^i - E_{\mathbf{k},\sigma}^j) \left(-\frac{dn_F(E_{\mathbf{k},\sigma}^i)}{dE_{\mathbf{k},\sigma}^i} \right) = \frac{\pi}{4} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_i a_{ii}^\mu a_{ii}^\nu \left(-\frac{dn_F(E_{\mathbf{k},\sigma}^i)}{dE_{\mathbf{k},\sigma}^i} \right) \\ \sigma_{\mu\nu} &= \frac{\pi}{4T} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_i a_{ii}^\mu a_{ii}^\nu n_F(E_{\mathbf{k},\sigma}^i) (1 - n_F(E_{\mathbf{k},\sigma}^i)) \end{aligned} \quad (5.41)$$

όπου η τελευταία συνάρτηση δέλτα ικανοποιείται μόνο για $i = j$. Ο μόνος τρόπος να ικανοποιείται για $i \neq j$ είναι όταν $W = M = 0$ αλλά τότε $a_{i \neq j} = 0$. Η Εξ.(5.41) είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας, του χημικού δυναμικού και του εξωτερικού μαγνητικού πεδίου Zeeman. Υπό αυτή την έννοια, συνιστά την μαγνητοαγωγιμότητα ή παίρνοντας τον αντίστροφο, η *μαγνητοαντίσταση* του συστήματος παρουσία μαγνητικών πεδίων που συζεύγγονται με το ηλεκτρονιακό σπιν, σε αντιπαράθεση με τον παραδοσιακό ορισμό της μαγνητοαντίστασης, ως την αντίσταση του υλικού λόγω μαγνητικών πεδίων που αλληλεπιδρούν με την τροχιά των ηλεκτρονίων.

Παρατηρούμε ότι: $\lim_{T \rightarrow 0} \frac{n_F(x)(1-n_F(x))}{T} = \begin{cases} 0, & x \neq 0 \\ \infty, & x = 0 \end{cases} = \delta(x)$, δηλαδή σε μηδενική θερμοκρασία η αγωγιμότητα απειρίζεται για απειροστή συγκέντρωση φορέων στην στάθμη Fermi. Η αφύσικη αυτή συμπεριφορά αντανακλά το γεγονός ότι δεν έχουμε συμπεριλάβει την συνεισφορά των προσμίξεων στον παραπάνω υπολογισμό. Αυτό δεν μας εμποδίζει να εξάγουμε συμπεράσματα για την *μεταβολή* της $\sigma_{\mu\nu}$ σε πεπερασμένες θερμοκρασίες συναρτήσει του μαγνητικού πεδίου.

5.3.2 Οπτική μαγνητοαγωγιμότητα

Μπορούμε να λάβουμε υπόψη φαινομενολογικά διορθώσεις λόγω προσμίξεων απλά αντικαθιστώντας τις συναρτήσεις δέλτα που εμφανίζονται στην φασματική αναπαράσταση με Λορεντζιανές της μορφής: $\delta(z) \rightarrow M(z) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{z^2 + \Gamma^2}$ [106]. Με τον τρόπο αυτό, από την Εξ.(5.40) παίρνουμε:

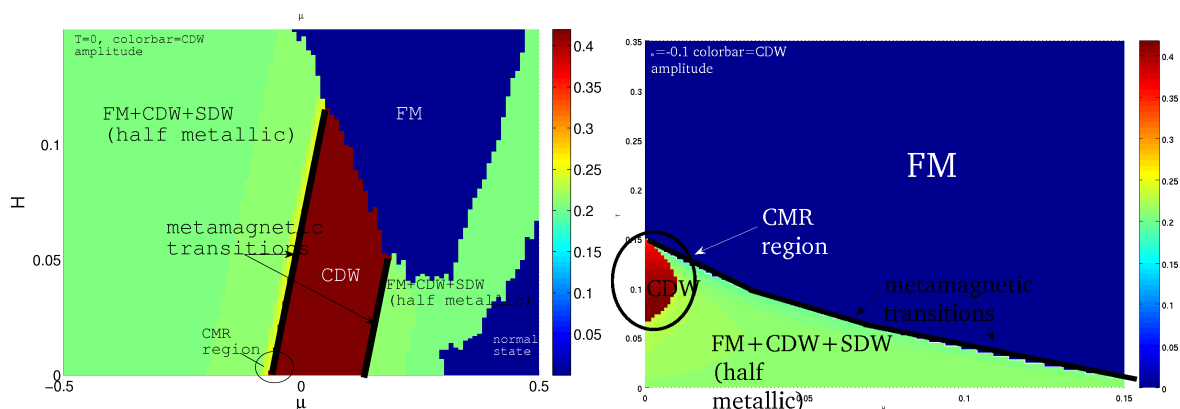
$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{i,j} a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} \frac{\Gamma}{(\epsilon - E_{\mathbf{k},\sigma}^i)^2 + \Gamma^2} \frac{\Gamma}{(\omega + \epsilon - E_{\mathbf{k},\sigma}^j)^2 + \Gamma^2} \times \frac{(n_F(\epsilon) - n_F(\omega + \epsilon))}{\omega} \quad (5.42)$$

5.3.3 Τήξη ενός ισχυρού μονωτή από ένα πολύ μικρό μαγνητικό πεδίο

Όπως έχουμε ήδη παρατηρήσει, κατά την μετάβαση στην φάση συνύπαρξης, το σύστημα μεταβαίνει από μια τέλεια μονωτική σε μια ημιμεταλλική κατάσταση. Η μετάβαση αυτή είναι 1ης τάξης και έχει ως αποτέλεσμα η μονωτική παράμετρος τάξης του CDW σχεδόν να υποδιπλασιάζεται κατά την μετάβαση. Έχουμε δηλαδή ένα φαινόμενο της λεγόμενης μονωτικής «τήξης» με το πεδίο. Οι φορείς που απελευθερώνονται κατά την τήξη είναι ελεύθεροι να διεγερθούν καθιστώντας το σύστημα αγωγίμο. Έτσι, κατά την μετάβαση στην φάση συνύπαρξης το σύστημα παρουσιάζει *αρνητική μαγνητοαντίσταση*. Σύμφωνα με όσα έχουμε πει, εάν $V^W \sim V^M$, δηλαδή η μονωτική και η σιδηρομαγνητική παράμετρος τάξης είναι συγκρίσιμες, το μαγνητικό πεδίο που χρειάζεται για την τήξη μικραίνει. Επιπλέον, αν το σύστημα είναι ισχυρά σιδηρομαγνητικό, το κρίσιμο πεδίο της τήξης ελαχιστοποιείται. Ο μηχανισμός αυτός έχει προταθεί ότι βρίσκεται πίσω από το φαινόμενο της Κολοσσαίας Μαγνητοαντίστασης που εμφανίζουν τα μαγγανίδια περοβσκίτη [98]. Στα υλικά αυτά, οι βαθμοί ελευθερίας φορτίου, σπιν και τροχιακών βρίσκονται σε ισχυρή αλληλεπίδραση μεταξύ τους με αποτέλεσμα τα διαγράμματα φάσης τους να παρουσιάζουν μια περίπλοκη τοπολογία από περιοχές ανταγωνισμού και συνύπαρξης σιδηρομαγνητισμού, αντισιδηρομαγνητισμού και καταστάσεων τάξης φορτίου [97]. Γενικά, οι τροχιακοί βαθμοί ελευθερίας θεωρούνται υψίστης σημασίας στα υλικά αυτά και γενικότερα χρειάζεται μια πολύ πιο σύνθετη μοντελοποίηση για την σωστή περιγραφή της φυσικής τους. Ωστόσο, τα τελευταία χρόνια, αυξάνουν τα πειραματικά δεδομένα που δείχνουν ότι η μονωτική τάξη στα υλικά αυτά είναι στην πραγματικότητα ένα Κύμα Πυκνότητας Φορτίου [86, 107]. Αυτή την άποψη θα υιοθετήσουμε κι εμείς για την ανάλυσή μας.

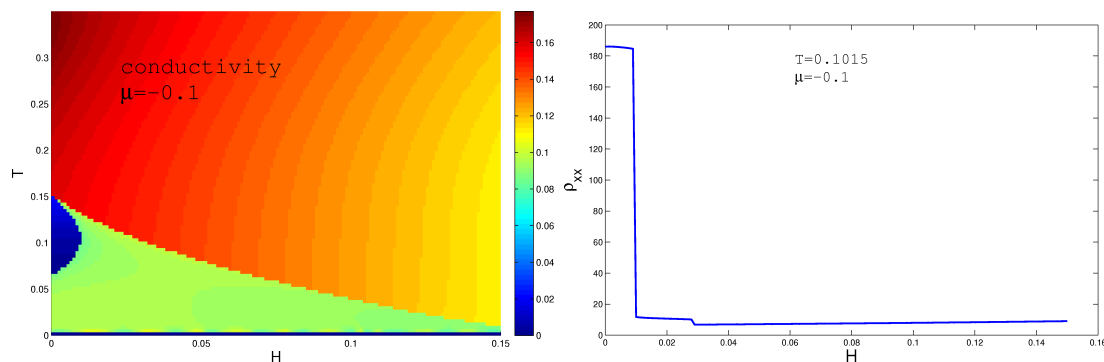
Ο συνδυασμός δυναμικών: $V^M = 1.4, V^W = 1.5, V^F = 3$ και $t' = 0$ δίνει το διάγραμμα μ -T του Σχ.5.4(α). Με κόκκινο χρώμα φαίνεται η ισχυρή μονωτική τάξη. Η κατάσταση αυτή μπορεί να τηχθεί από ένα μικρό πεδίο γύρω από το $\mu = 0$ ($-0.1 < \mu < 0.1$), όπως τονίζεται

5.3 Υπολογισμοί μαγνητοαντίστασης



Σχήμα 5.4: α) μ - H διάγραμμα φάσης για $T = 0$. Η χρωματική διαβάθμιση απεικονίζει την τιμή του W . Με κόκκινο χρώμα φαίνεται η περιοχή όπου υπάρχει μια καθαρή, ισχυρή μονωτική τάξη τύπου CDW. Η κατάσταση αυτή μπορεί να τηχθεί από ένα μικρό πεδίο γύρω από το $\mu = 0$ ($-0.1 < \mu < 0.1$), όπως τονίζεται π.χ. στην κυκλωμένη περιοχή. Οι μαύρες γραμμές οριοθετούν τις περιοχές όπου συνυπάρχουν όλες οι παράμετροι τάξης (πράσινο χρώμα). Οι γραμμές αυτές σηματοδοτούν μεταμαγνητικές μεταβάσεις 1ης τάξης με το πεδίο και την νόθευση. β) Το αντίστοιχο H - T διάγραμμα φάσης για $\mu = -0.1$.

π.χ. στην κυκλωμένη περιοχή. Επιλέγοντας $\mu = -0.1$ βρισκόμαστε στην ελαφρά νοθευμένη με οπές περιοχή όπου το σύστημα για $T = 0$ είναι ημιμεταλλικός σιδηρομαγνήτης. Το αντίστοιχο H - T διάγραμμα φάσης φαίνεται στο Σχ.5.4(β). Στην περιοχή αυτή, εμφανίζεται για πεπερασμένες θερμοκρασίες η ισχυρή μονωτική τάξη. Γύρω από αυτήν, το μαγνητικό πεδίο μπορεί εύκολα να επαναφέρει το σύστημα στην σιδηρομαγνητική φάση συνύπαρξης προκαλώντας αρνητική μαγνητοαντίσταση. Το ενεργειακό χάσμα του CDW ισούται με $W = 0.42t$ ενώ είναι φανερό ότι το μαγνητικό πεδίο που χρειάζεται για να τήξει το χάσμα αυτό είναι τουλάχιστον μία τάξη μεγέθους μικρότερο. Εισάγοντας τις αυτοσυνεπείς λύσεις των



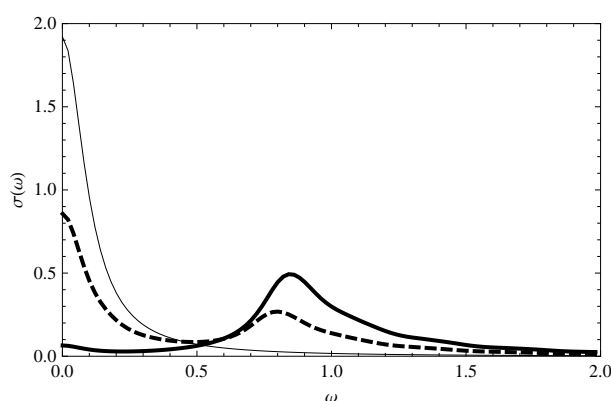
Σχήμα 5.5: Αποτελέσματα αυτοσυνεπών υπολογισμών για α) την στατική αγωγιμότητα και β) την μαγνητοαντίσταση.

M, W, F που οδήγησαν στο διάγραμμα φάσης του Σχ.5.4(β) στην Εξ.(5.41) υπολογίστηκε η

στατική μαγνητοαγωγιμότητα και η μαγνητοαντίσταση συναρτήσει του πεδίου του Σχ.5.5(α) και (β) αντίστοιχα. Όπως φαίνεται, η αγωγιμότητα/αντίσταση μπορεί να μεταβληθεί έως και 16 φορές γύρω από την κυκλωμένη περιοχή του Σχ.(5.4(β)). Το αποτέλεσμα αυτό αποτελεί μία καθαρή ένδειξη από την πλευρά μιας μικροσκοπικής θεωρίας ότι οι ηλεκτρονικοί βαθμοί ελευθερίας στα υλικά αυτά είναι ικανοί να οδηγήσουν στην φαινομενολογία της Κολοσσαίας Μαγνητοαντίστασης.

5.3.4 Πειραματικές υπογραφές της επαγόμενης φάσης συνύπαρξης

Με τον ίδιο τρόπο, όπως και παραπάνω, μπορούμε να υπολογίσουμε αριθμητικά και την οπτική αγωγιμότητα του συστήματος σύμφωνα με την Εξ.(5.42). Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η συμπεριφορά της ποσότητας αυτής στην τέλεια μονωτική και στην ημιμεταλλική φάση συνύπαρξης. Στο Σχ.5.6 φαίνεται η αυτοσυνεπώς υπολογισμένη οπτική αγωγιμότητα σε πεπερασμένη θερμοκρασία $T = 0.1015$, για τρεις περιπτώσεις: α) κανονική κατάσταση $W = M = F = H = 0$ β) τέλεια μονωτική κατάσταση CDW όταν $H = 9 \cdot 10^{-3}$ και γ) περιοχή συνύπαρξης $H = 10^{-2}$ (βλ. και Σχ.5.4). Στην κανονική κατάσταση, βρίσκουμε την συνήθη συμπεριφορά με την κορυφή Drude να εμφανίζεται σε χαμηλές συχνότητες. Στην CDW κατάσταση, ανακτούμε επίσης αναμενόμενη συμπεριφορά [9], με την αγωγιμότητα να είναι σχεδόν μηδενική ($\Gamma = 0.05$) εντός της περιοχής του χάσματος, $0 < \omega < 2W$, και να παρουσιάζει μια κορυφή για $\omega \approx 2W$. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η συμπεριφορά της φάσης συνύπαρξης. Παρατηρούμε ότι η οπτική αγωγιμότητα στην περιοχή αυτή αποτελείται

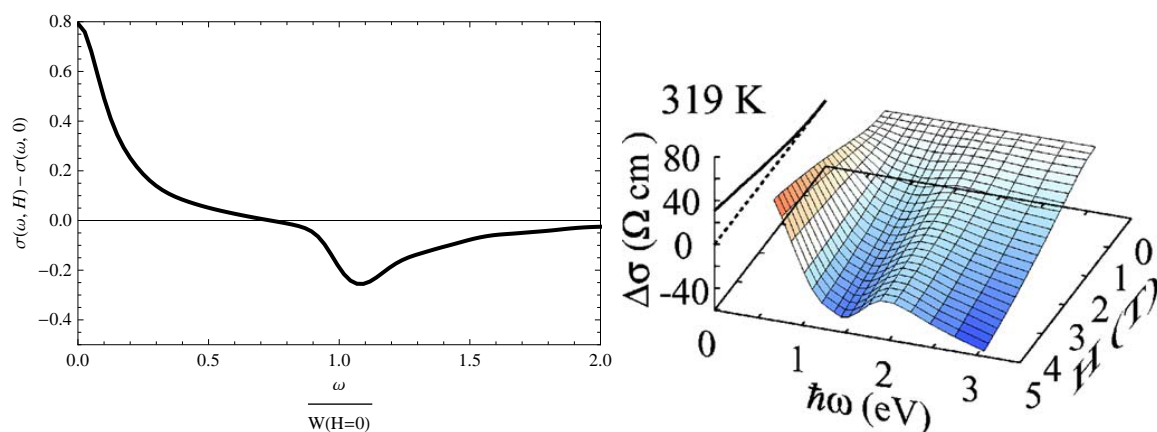


Σχήμα 5.6: Η οπτική μαγνητοαγωγιμότητα για $\Gamma = 0.05$, $T = 0.1015$ και τρεις περιπτώσεις ενδιαφέροντος: κανονική, μονωτική και $CDW + SDW$ κατάσταση οι οποίες συμβολίζονται με λεπτή συνεχή, παχιά συνεχή και διακεκομμένη γραμμή αντίστοιχα.

από μια υπέρθεση δυο συμπεριφορών. Οι σπιν κάτω φορείς της επιφάνειας Fermi συνεισφέρουν μια μικρότερη κορυφή Drude, ενώ οι σπιν πάνω φορείς μια πιο εξασθενημένη κορυφή

5.3 Υπολογισμοί μαγνητοαντίστασης

για συχνότητες $\omega \approx 2(W + M)$. Αξίζει να σημειωθεί ότι η πειραματική αυτή υπογραφή φαίνεται να έχει ήδη παρατηρηθεί σε σχετικά πειράματα στο $\text{Pr}_{0.6}\text{Sr}_{0.4}\text{MnO}_3$ [108]. Στο Σχ.5.7 παραθέτουμε τις σχετικές πειραματικές μετρήσεις και το αποτέλεσμα της παρούσας θεωρίας.



Σχήμα 5.7: Η διαφορά της μαγνητοαγωγιμότητας $\Delta\sigma = \sigma(\omega, H) - \sigma(\omega, 0)$ α) όπως υπολογίστηκε στην παρούσα θεωρία β) όπως μετρήθηκε σε αντίστοιχα πειράματα [108].

5.4 Κύματα Πυκνότητας τύπου FFLO

Τα κύματα πυκνότητας φορτίου, καθ'οτι singlet καταστάσεις, έχουν και αυτά ένα όριο Pauli σε πλήρη αντιστοιχία με τους υπεραγωγούς [109]. Για συμβατικά συμπυκνώματα, αυτό ισούται με: $H_P = W_0/\sqrt{2}$, με W_0 το CDW χάσμα για $T = H = 0$. Συνήθως, το παραμαγνητικό κρίσιμο πεδίο ενός CDW αντιστοιχεί σε τιμές άνω των 50 Tesla, καθώς τα συμπυκνώματα τέτοιου είδους έχουν μεγάλη κρίσιμη θερμοκρασία, περίπου στα 100 K. Το πρόσφατα ανακαλυφθέν δισδιάστατο οργανικό άλας $(\text{Per})_2\text{Au}(\text{mnt})_2$ παρουσιάζει σύμμετρο CDW (γνωστό και ως CDW_0) με αρκετά χαμηλό T_c με αποτέλεσμα το όριο Pauli να βρίσκεται στην πειραματικά προσβάσιμη τιμή των 37 T.

Για $H > H_P$, παρατηρήθηκε μια μετάβαση σε μια νέα CDW κατάσταση (φάση CDW_x) στην οποία το αρχικό χάσμα σχεδόν υποδιπλασιάζεται και μάλιστα συνυπάρχει με κανονικές περιοχές. Η κατάσταση αυτή επιβιώνει για μαγνητικά πεδία πολύ μεγαλύτερα από το όριο Pauli του υλικού και σύμφωνα με τα χαρακτηριστικά που αναφέραμε θεωρήθηκε ως το πρώτο παράδειγμα FFLO κατάστασης σε κύματα πυκνότητας φορτίου [95].

Σε αντίθεση με άλλα οργανικά υλικά, μόνο ο όρος Zeeman θεωρείται πως διαδραματίζει κάποιον ρόλο στην παρατηρούμενη μετάβαση. Έτσι, μια ανάλογη θεωρία τύπου FFLO έχει ήδη προταθεί για την CDW_x φάση, από την σκοπιά όμως ενός μονοδιάστατου μοντέλου. Σύμφωνα με αυτήν, η φάση αυτή αποτελείται από μια υπέρθεση δυο κυμάτων πυκνότητας φορτίου, ένα για κάθε κατεύθυνση του σπιν, στα οποία η πυκνότητα φορτίου είναι διαμορφωμένη κατά $\mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$, όπου το \mathbf{Q}_0 είναι το αρχικό κυματόνυσμα συναρμογής και $\mathbf{q} \propto H$ είναι η μεταβολή στο κυματόνυσμα αυτό η οποία είναι ανάλογη του μαγνητικού πεδίου [110]. Η αντιστοιχία με την FFLO κατάσταση στους υπεραγωγούς είναι προφανής.

5.4.1 Μελέτη φαινομένων ατελούς συναρμογής

Στο σημείο αυτό, θα επεκτείνουμε την θεωρία έτσι ώστε να συμπεριλάβουμε στην μελέτη μας την πιθανότητα συμπυκνωμάτων πυκνότητας φορτίου/σπιν με ασύμμετρο κυματόνυσμα συναρμογής. Ας θεωρήσουμε ότι για κάποιον λόγο το αρχικό κυματόνυσμα τέλειας συναρμογής \mathbf{Q}_0 των κυμάτων πυκνότητας αλλάζει κατά \mathbf{q} . Στην περίπτωση αυτή, μπορούμε να χωρίσουμε τον κινητικό όρο σε αντιπεριοδικό και περιοδικό ως προς μετακινήσεις κατά το νέο κυματόνυσμα $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$. Χρησιμοποιώντας τις ιδιότητες (2.61) μπορούμε να γράψουμε την Χαμιλτονιανή που περιγράφει συμπύκνωση σε αυτό το κυματόνυσμα συναρμογής ως:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \zeta_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \left(\frac{\xi_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}}{2} \hat{\rho}_3 + \frac{\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} - 2\mu - 2\sigma\tilde{F}}{2} - (W_{\mathbf{k}} + \sigma M_{\mathbf{k}}) \hat{\rho}_1 \right) \zeta_{\mathbf{k}, \sigma} \quad (5.43)$$

με $\zeta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger = (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}\sigma}^\dagger)$, $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$. Ή σε πιο συμπαγή μορφή ως:

$$\mathcal{H}_{\mathbf{q}} = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \zeta_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \left(\frac{\xi_{\mathbf{k},\sigma} - \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}}{2} \hat{\rho}_3 + \frac{\xi_{\mathbf{k},\sigma} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}}{2} - (W_{\mathbf{k}} + \sigma M_{\mathbf{k}}) \hat{\rho}_1 \right) \zeta_{\mathbf{k},\sigma} \quad (5.44)$$

με: $\xi_{\mathbf{k},\sigma} = \xi_{\mathbf{k}} - \mu - \sigma \tilde{F}$.

Ποιοτική ανάλυση για μικρό \mathbf{q}

Ας εξετάσουμε τώρα ποιοτικά τους τρόπους με τους οποίους είναι δυνατό να προκύψει ένα κύμα πυκνότητας στο κυματόνισμα \mathbf{Q} . Ξεκινώντας από την συνθήκη τέλει συναρμογής: $\xi_{\mathbf{k},\sigma} = -\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}$, αναπτύσσουμε σε σειρά Taylor τα δυο μέλη ως προς \mathbf{q} και κρατώντας μόνο τους $\mathcal{O}(q)$ όρους:

$$\xi_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0} - 2\sigma \tilde{F} = -\mathbf{q} \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_0}$$

Θεωρώντας ότι ο συμμετρικός όρος είναι ανεξάρτητος από τα \mathbf{k} , δηλαδή $\tilde{\delta}_{\mathbf{k}} = -\mu$, καταλήγουμε στην σχέση:

$$q = \frac{2(\mu + \sigma \tilde{F})}{v_F x} = (\mu + \sigma \tilde{F}) \alpha \quad (5.45)$$

όπου $\alpha = \frac{2}{v_F x}$, v_F είναι η ταχύτητα Fermi και $x = \cos \theta$ με θ την γωνία μεταξύ του \mathbf{q} και του κυματόνισματος Fermi, \mathbf{k}_F . Η Εξ.(5.45) είναι σχεδόν ίδια με το αποτέλεσμα των FFLO για την περίπτωση του υπεραγωγού (βλ. Εξ.(1.22)). Η βασική διαφορά είναι ότι το $|q|$ είναι συνάρτηση του δείκτη σπιν· δηλαδή, οι πυκνότητες φορτίου κάθε σπιν μπάντας είναι εκτός φάσης, με αποτέλεσμα την επαγωγή ενός κύματος πυκνότητας σπιν. Αυτό φαίνεται πιο καθαρά στον πραγματικό χώρο, αν γράψουμε για την διαμόρφωση της πυκνότητας φορτίου και σπιν:

$$\rho_c(\mathbf{r}) \propto \sum_{\sigma} W \cos [(\mathbf{Q}_0 + (\mu + \sigma \tilde{F}) \alpha) \cdot \mathbf{r}] = 2W \cos [(\mathbf{Q}_0 + \alpha \mu) \cdot \mathbf{r}] \cos [(\alpha \tilde{F}) \cdot \mathbf{r}] \quad (5.46)$$

$$\rho_s(\mathbf{r}) \propto \sum_{\sigma} \sigma M \cos [(\mathbf{Q}_0 + (\mu + \sigma \tilde{F}) \alpha) \cdot \mathbf{r}] = -2M \sin [(\mathbf{Q}_0 + \alpha \mu) \cdot \mathbf{r}] \sin [(\alpha \tilde{F}) \cdot \mathbf{r}] \quad (5.47)$$

Από τις παραπάνω σχέσεις, παρατηρούμε αμέσως ότι $\tilde{F} = 0$ συνεπάγεται $M = 0$. Στην περίπτωση αυτή διαφαίνεται και ο ρόλος του χημικού δυναμικού ως παράμετρος που αλλοιώνει την τέλεια συναρμογή, προκαλώντας εν δυνάμει ένα ασύμμετρο κύμα πυκνότητας φορτίου με κυματόνισμα $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \alpha \mu$. Οι παραπάνω εξισώσεις αποτελούν την γενίκευση της λεγόμενης φάσης «διπλού συνημιτόνου» [110].

Ακριβής αριθμητική επίλυση

Η Εξ.(5.45) παρέχει μια ποιοτική εκτίμηση του κυματανύσματος q . Στο όριο που η ενεργειακή διασπορά $\xi_{\mathbf{k}}$ έχει σφαιρική συμμετρία, δηλαδή $\xi = \frac{k^2}{2m}$ η εξίσωση είναι ακριβής, π.χ. σε ένα τέλειο μονοδιάστατο σύστημα. Για ένα σύστημα ανώτερης διάστασης, όπως το τετραγωνικό που εξετάζουμε εδώ, η ενεργειακή διασπορά είναι ισχυρά ανισοτροπική, με αποτέλεσμα $\nabla_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}} \neq v_F$. Στην περίπτωση αυτή, ο βέλτιστος όρος α αντιστοιχεί στην κατεύθυνση με την μεγαλύτερη πυκνότητα καταστάσεων στην επιφάνεια Fermi.

Η ακριβής επίλυση του προβλήματος συνίσταται στην ελαχιστοποίηση της διαφοράς στην ελεύθερη ενέργεια της Εξ.(5.23) ως προς τα χάσματα W, M, F και ως προς το βέλτιστο κυματόνισμα συναρμογής \mathbf{Q} , το οποίο εισάγεται αντικαθιστώντας τα $\gamma_{\mathbf{k}}, \delta_{\mathbf{k}}$ με τους όρους της Εξ.(5.43), παίρνοντας τελικά μια έκφραση $\delta F_{\mathbf{q}}$. Για την αριθμητική επίλυση, αναπτύχθηκε ένας παράλληλος κώδικας ο οποίος επιλύει το σύστημα αυτοσυνέπειας (5.18-5.20) σε ένα 64×64 k -πλέγμα αντλώντας τιμές του κυματανύσματος \mathbf{q} (το οποίο ορίζει την διακύμανση από το βέλτιστο κυματόνισμα συναρμογής \mathbf{Q}_0) από ένα 32×32 πλέγμα, ορισμένο στο πρώτο τεταρτημόριο της 1ης Ζώνης Brillouin, εκμεταλλευόμενοι την τετραγωνική συμμετρία του προβλήματος. Έτσι, για κάθε τιμή των παραμέτρων T, H, t', μ βρίσκουμε τις τιμές των W, M, F και την αντίστοιχη ελεύθερη ενέργεια για κάθε \mathbf{q} . Η λύση που κρατάμε σε κάθε βήμα είναι αυτή που ελαχιστοποιεί την $F_{\mathbf{q}}$. Δεδομένης της αριθμητικής πολυπλοκότητας των υπολογισμών, επικεντρωθήκαμε σε λύσεις με $t' = 0$. Στην περίπτωση αυτή, το βέλτιστο \mathbf{q} (όταν αυτό είναι πεπερασμένο) σχηματίζει πάντα γωνία 45° με το \mathbf{Q}_0 δείχνοντας δηλαδή προς τα σημεία Van Hove όπου η πυκνότητα καταστάσεων είναι μέγιστη. Αυτό μας επιτρέπει να περιορίσουμε τις τιμές των \mathbf{q} σε ένα μονοδιάστατο πλέγμα π.χ. ως προς $q = q_x$. Το τελικό κύμα πυκνότητας που προκύπτει είναι υπέρθεση των αρμονικών με $\mathbf{Q} = (\pm Q_0 \pm q, \pm Q_0)$ και $\mathbf{Q} = (\pm Q_0, \pm Q_0 \pm q)$.

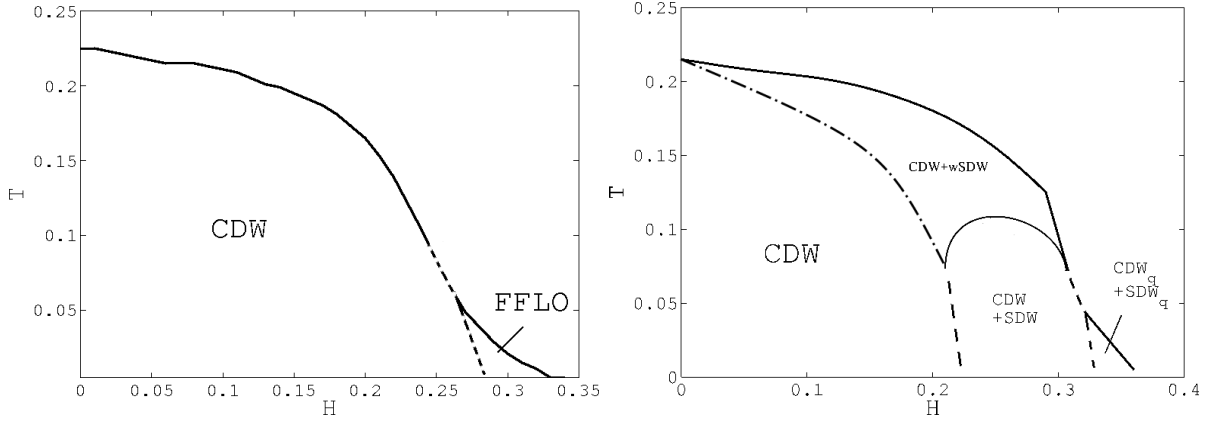
5.4.2 Επαναπροσδιορισμένο διάγραμμα φάσης

Θα παρουσιαστούν αριθμητικά αποτελέσματα για $V^M = 1.2, V^W = 1.5$ και $V^F = 0$, έτσι ώστε να εστιάσουμε στην αλληλεπίδραση μεταξύ των κυμάτων πυκνότητας και του εξωτερικού πεδίου. Άλλωστε, υπολογισμοί για $V^F \neq 0$ δείχνουν ότι στην περίπτωση αυτή απλά επηρεάζονται τα κρίσιμα πεδία των μεταβάσεων και γενικά μικραίνουν. Σύμφωνα με την συζήτηση γύρω από τον μηχανισμό των μεταμαγνητικών μεταβάσεων, η επιλογή $V^F = 0$ ισοδυναμεί με την περίπτωση $\Pi(\alpha)$, όπου για $\mu > 0$ το μεταμαγνητικό σκαλοπάτι διευρύνεται.

Στο Σχ.5.8(α) απεικονίζεται το H-T διάγραμμα φάσης ενός CDW μονωτή για $\mu = 0$ ενώ στο Σχ.5.9(α) φαίνεται η εξάρτηση των W, M , της επαγόμενης μαγνήτισης και του κυματανύσματος q_x από το πεδίο. Παρατηρούμε ότι υπάρχει ένα παράθυρο τιμών του πεδίου όπου το CDW γίνεται ασύμμετρο με $Q = Q_0 + q$ όπου το $q \propto H$, και η μονωτική τάξη

5.4 Κύματα Πυκνότητας τύπου FFLO

επιζεί για πεδία πάνω από το αναμενόμενο όριο Pauli: $H_c = 0.82W_0 > H_P = 0.707W_0$. Η συμπεριφορά αυτή είναι ακριβώς ίδια με αυτήν που προβλέπει η θεωρία των FFLO για singlet υπεραγωγό τύπου s .

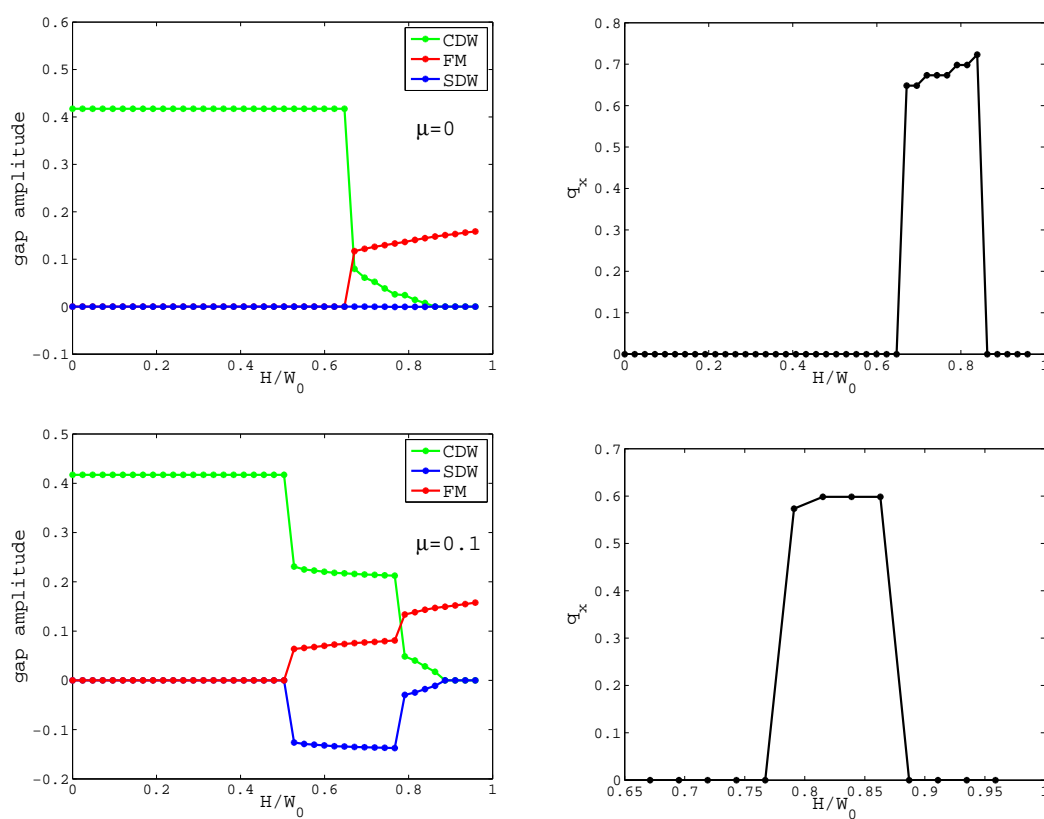


Σχήμα 5.8: Διαγράμματα φάσης H-T για $V^W = 1.5$, $V^M = 1.2$ όταν α) $\mu = 0$ και β) $\mu = 0.1$. Με συνεχείς (διακεκομμένες) γραμμές διακρίνονται οι μεταβάσεις (2ης) 1ης τάξης, ενώ η διακεκομμένη γραμμή με κουκίδες δείχνει επίσης μετάβαση 2ης τάξης.

Η κατάσταση γίνεται ενδιαφέρουσα για $\mu \neq 0$. Όπως φαίνεται στο Σχ.5.9(β), στην περίπτωση αυτή, το σύστημα μεταβαίνει πρώτα στην φάση συνύπαρξης σύμμετρων $CDW+SDW$, η οποία επιζεί μέχρι και για $H = 0.79W_0$ υπερβαίνοντας ήδη το όριο Pauli. Στην συνέχεια, το σύστημα μεταβαίνει σε μια φάση συνύπαρξης η οποία είναι διαμορφωμένη κατά q , επιζώντας για ακόμα μεγαλύτερες τιμές του μαγνητικού πεδίου με το κρίσιμο πεδίο $H_c \approx 0.89W_0$. Στην σύμμετρη φάση συνύπαρξης, τα ενεργειακά χάσματα W, M είναι σχεδόν τα μισά σε σχέση με το W_0 ενώ σε αντίθεση στην διαμορφωμένη φάση συνύπαρξης τα χάσματα είναι μιας τάξης μεγέθους μικρότερα από το W_0 , κάνοντας την παρατήρηση της φάσης αυτής ιδιαίτερα δύσκολη. Άλλωστε, η διαμορφωμένη φάση αναμένεται να είναι πολύ ευαίσθητη στις προσμίξεις με αποτέλεσμα η κατάσταση αυτή να είναι δύσκολο να σταθεροποιηθεί. Τέλος, πρέπει να σημειωθεί ότι καθώς $V^M \rightarrow V^W$, η καθαρή φάση FFLO γίνεται λιγότερο ενεργειακά συμφέρουσα από την φάση σύμμετρης συνύπαρξης, ακόμα και για $\mu \rightarrow 0$ [99].

Το σημαντικότερο αποτέλεσμα αυτής της ενότητας είναι ότι το μοτίβο από συνυπάρχοντα συμπυκνώματα σύμμετρων $CDW + SDW$ και σιδηρομαγνητισμού είναι επικρατέστερο ενεργειακά από μια ανομοιογενής CDW φάση τύπου FFLO και πιο σταθερό. Το γεγονός αυτό σημαίνει ότι σε όλους τους μονωτές CDW που επιζούν πάνω από το όριο Pauli όπως το $(\text{Per})_2\text{Au}(\text{mnt})_2$, αναμένεται ένα ισχυρό αντισιδηρομαγνητικό σήμα δίχως πρόσθετη διαμόρφωση του κυματανύσματος συναρμογής.

5. Νέες μεταβάσεις επαγόμενες από το μαγνητικό πεδίο σε μονωτές τύπου CDW



Σχήμα 5.9: Η εξάρτηση των τριών παραμέτρων τάξης με το πεδίο για $T = 0$. Στο δεξί μέρος φαίνεται η εξάρτηση του κυματανύσματος ατελούς συναρμογής q με το πεδίο. Για $q = 0$ το κυματάνυσμα των CDW,SDW ισούται με $Q = Q_0 = (\pi, \pi)$.

Κεφάλαιο 6

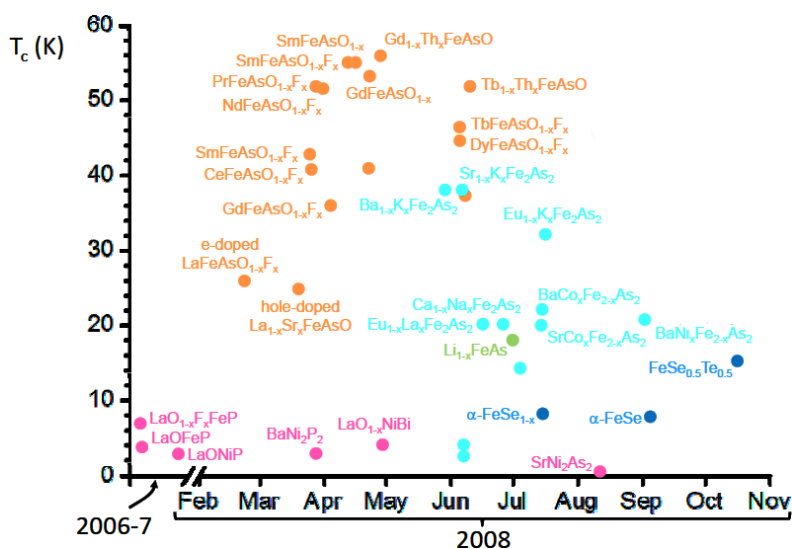
Υπεραγωγιμότητα στα πνικτίδια του σιδήρου

Ένα από τα πιο σημαντικά ζητήματα της σύγχρονης φυσικής συμπυκνωμένης ύλης είναι η κατανόηση του μηχανισμού που οδηγεί στην υπεραγωγιμότητα «υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας». Κεντρικό ρόλο στην κατεύθυνση αυτή διαδραματίζει η φυσική των πρόσφατα ανακαλυφθέντων πνικτιδίων του σιδήρου [111] (βλ. Σχ.6.1). Στα υλικά αυτά, υπάρχει τεράστια ερευνητική δραστηριότητα προκειμένου να ξεκαθαριστεί αν οι μποζονικοί βαθμοί ελευθερίας που ευθύνονται για την υπεραγωγιμότητα είναι φωνονικής ή ηλεκτρονιακής (διακυμάνσεις του ηλεκτρονιακού σπιν) προέλευσης, και με ποιόν τρόπο ο μηχανισμός σύζευξης συνάδει με την παρατηρούμενη συμμετρία του υπεραγωγίμου χάσματος [112].

Τα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα προς αυτή την κατεύθυνση δείχνουν να είναι ασύμβατα μεταξύ τους [113, 114]. Πειράματα φασματοσκοπίας φωτοεκπομπής (ARPES) και φασματοσκοπίας Andreev αναφέρουν είτε ένα ή δύο σχεδόν ιστροπικά χάσματα [115, 116, 117], ενώ μαγνητικές μετρήσεις του βάθους διεύθυνσης [118, 119] και Πυρηνικού Μαγνητικού Συντονισμού (NMR) [120, 121] υποστηρίζουν δομές χάσματος με κομβικά ή μη κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi. Ακόμη, πρόσφατα πειράματα εστιασμένα στην εξάρτηση της συμμετρίας του υπεραγωγίμου χάσματος από την νόθευση στο $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, έδειξαν ότι υπάρχει μια μετάβαση από υπεραγωγιμότητα δίχως κομβικά σημεία σε υπεραγωγιμότητα με κομβικά σημεία καθώς τα επίπεδα νόθευσης αυξάνουν στο υλικό [122]. Αξίζει να σημειωθεί ότι, ένα χάσμα δίχως κομβικά σημεία δεν σημαίνει απαραίτητα συμβατική υπεραγωγιμότητα τύπου s .

Σημαντικό παράγοντα στον προσδιορισμό της υπεραγωγίμης συμμετρίας στα πνικτίδια, αποτελεί η ιδιαίτερη επιφάνεια Fermi τόσο των 1111 (LaOFeAs), όσο και των 122 (BaFe_2As_2) οικογενειών. Αυτή είναι έντονα δισδιάστατη και αποτελείται κυρίως από τέσσερα κομμάτια: δυο «τσέπες» ηλεκτρονίων και δυο οπών¹ (βλ. Σχ.6.3(α)). Οι επιφάνειες Fermi ηλε-

¹η διάκριση μεταξύ ενεργειακών ζωνών ηλεκτρονίων και οπών έγκειται στο πρόσημο της ταχύτητας Fermi



Σχήμα 6.1: Σε σύντομο χρονικό διάστημα ύστερα από την εύρεση υπεραγωγιμότητας με $T_c = 26K$ στο $LaFeAsO_{1-x}F_x$, ανακαλύφθηκε μια πλειάδα νέων υπεραγωγών πνικτιδίων με κρίσιμες θερμοκρασίες έως και τα 56 K (©J. Hoffman).

κτρονίων και οπών, ικανοποιούν συνθήκες καλής συναρμογής, με κυματάνυσμα συναρμογής $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ στην ανηγμένη 1η Ζώνη Brillouin [123]-[127],[128] (βλ. Σχ.6.4(α)-(β)). Λόγω των καλών ιδιοτήτων συναρμογής, τα ανόθευτα υλικά εμφανίζουν αντισιδηρομαγνητισμό τύπου Κύματος Πυκνότητας Σπιν (SDW). Η νόθευση διαταράσσει το SDW οδηγώντας στην εμφάνιση υπεραγωγιμότητας [129].

Στην περίπτωση που για την υπεραγωγιμότητα ευθύνονται οι διακυμάνσεις του ηλεκτρονιακού σπιν, έχει προταθεί ότι το υπεραγωγίμο χάσμα είναι μη συμβατικό, χωρίς κομβικά σημεία και ότι εμφανίζει αντίθετο πρόσημο μεταξύ των κλάδων της επιφάνειας Fermi που αντιστοιχούν σε ηλεκτρόνια και οπές. Η υπεραγωγιμότητα αυτού του τύπου είναι γνωστή ως κατάσταση s_{\pm} [128, 130, 131, 112]. Πειράματα ευαίσθητα στην αλλαγή φάσης (άρα και προσήμου) του υπεραγωγίμου χάσματος είναι σε θέση να διακρίνουν την κατάσταση s_{\pm} από μια απλή υπεραγωγιμότητα s . Ωστόσο, τα πειραματικά δεδομένα μέχρι στιγμής δεν μπορούν να διασαφηνίσουν την κατάσταση [112]. Ίσως η πιο ισχυρή ένδειξη υπέρ της s_{\pm} προέρχεται από μετρήσεις ανελαστικής σκέδασης νετρονίων οι οποίες δείχνουν να εξηγούνται από την θεωρία μόνο αν οι παράγοντες συνοχής που υπεισέρχονται στους σχετικούς υπολογισμούς είναι υπεραγωγιμότητας τύπου s_{\pm} [113].

Η παρατήρηση αυτή θεωρήθηκε ως απόδειξη ότι ο μηχανισμός πίσω από την υπεραγωγιμότητα στα υλικά αυτά είναι μη φωνονικής προέλευσης. Στο συμπέρασμα αυτό βοήθησε και

. Για ηλεκτρόνια (οπές) $sgn(v_F) = 1(-1)$. Εναλλακτικά, μπορούμε να πούμε ότι αν η ενεργειακή διασπορά τέμνει την στάθμη Fermi με τα κοίλα προς τα κάτω, η επιφάνεια Fermi έχει ηλεκτρονικό χαρακτήρα και το αντίστροφο για τις οπές (βλ. Σχ.6.3 (β)).

6.1 Μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα από φωνόνια τύπου «small-q»

η υπεραπλουστευμένη αντίληψη ότι τα φωνόνια μπορούν να οδηγήσουν μόνο σε συμβατική υπεραγωγιμότητα τύπου s . Κατά συνέπεια, έχει επικρατήσει η άποψη ότι η υπεραγωγιμότητα στα πνικτίδια πηγάζει μόνο από αλληλεπιδράσεις λόγω αντισιδηρομαγνητικών διακυμάνσεων του σπιν. Από την άλλη μεριά, συστηματικές μελέτες NMR στο ντοπαρισμένο με φθόριο $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$, βρίσκουν ότι οι αντισιδηρομαγνητικές διακυμάνσεις στο υλικό αυτό περιορίζονται με τη νόθευση, ενώ η κρίσιμη θερμοκρασία, T_c , παραμένει ανεπηρέαστη. Το εύρημα αυτό υπονοεί ότι οι αντισιδηρομαγνητικές διακυμάνσεις μπορεί να μην σχετίζονται με την υπεραγωγιμότητα [132].

Η πιο ξεκάθαρη πειραματική υπογραφή της εμπλοκής των φωνονίων στον υπεραγωγίμο μηχανισμό αποτελεί η παρατήρηση του ισοτοπικού φαινομένου. Πράγματι, σχετικές μετρήσεις σε τρία από τα πιο αντιπροσωπευτικά πνικτίδια των οικογενειών 1111, 122 και 11 αναφέρουν ένα ιδιαίτερα ισχυρό ισοτοπικό φαινόμενο. Ο ισοτοπικός συντελεστής στα νοθευμένα με ηλεκτρόνια υλικά $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ και FeSe_{1-x} βρέθηκε ίσος με $\alpha = 0.35$ [114] και $a \approx 0.4$ [133], αντίστοιχα όταν η θεωρία BCS προβλέπει $\alpha = 0.5$ για τον ιδανικό φωνονικό υπεραγωγό. Τα αποτελέσματα αυτά αποτελούν άμεση απόδειξη της εμπλοκής των φωνονίων στον μηχανισμό σύζευξης Cooper στα υλικά αυτά. Ακόμη, για τον νοθευμένο με οπές υπεραγωγό $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$, ο ισοτοπικός εκθέτης βρέθηκε επίσης ίσος με $\alpha = 0.35$ [114]. Ειδικά για το υλικό αυτό, πειράματα από άλλη πειραματική ομάδα, κατέληξαν στον εκθέτη $\alpha \approx -0.18$ [134]. Η ερμηνεία πίσω από την προφανή αντίφαση μεταξύ των δυο αυτών αποτελεσμάτων παραμένει ένα μυστήριο, ωστόσο και τα δυο πειράματα καταδεικνύουν τον ενεργό ρόλο των φωνονίων στην υπεραγωγιμότητα. Ακόμα μεγαλύτερο μυστήριο αποτελεί το πώς οι παρατηρήσεις αυτές συνάδουν με ένα μη συμβατικό υπεραγωγίμο χάσμα το οποίο αλλάζει πρόσημο στην ζώνη Brillouin, όπως αυτό της $s\pm$ υπεραγωγιμότητας.

6.1 Μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα από φωνόνια τύπου «small-q»

Στην ενότητα αυτή, θα μελετήσουμε το υπεραγωγίμο χάσμα των πνικτιδίων από την αντίθετη σκοπιά σε σχέση με τις μέχρι τώρα θεωρίες που έχουν προταθεί και οι οποίες βασίζονται στον μηχανισμό των διακυμάνσεων του σπιν. Θα δείξουμε ότι η συμμετρία $s\pm$ μπορεί να επιτευχθεί μέσω ενός *φωνονιακού μηχανισμού*, αρκεί η ορμή των εμπλεκόμενων φωνονίων να είναι σχετικά μικρή (μηχανισμός «small-q»). Έχει δειχθεί στο παρελθόν ότι η ενεργός αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωνονίου μπορεί να κυριαρχείται από διεργασίες εμπροσθοσκέδασης (ορμή ανταλλασσόμενου δυναμικού φωνονίου $\mathbf{q} \rightarrow 0$), όταν η αλληλεπίδραση Coulomb είναι μικρής εμβέλειας στον πραγματικό χώρο (σημειακή ή τύπου Hubbard) [135, 136]. Η ύπαρξη ενός ισχυρού σημειακού όρου Coulomb είναι και η αναγκαία συνθήκη για την εμ-

φάνιση αντισιδηρομαγνητισμού τύπου SDW. Κατά συνέπεια, η εγγύτητα μεταξύ των καταστάσεων του Κύματος Πυκνότητας Σπιν και της «small-q» φωνονικής υπεραγωγιμότητας είναι αναμενόμενη, και ακριβώς αυτή την εικόνα θα υποθέσουμε και για την περίπτωση των πνικτιδίων. Αξίζει να αναφερθεί ότι μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα λόγω «small-q» φωνονίων έχει ήδη προταθεί σε μια πλειάδα συστημάτων όπως π.χ. στους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού [137, 136, 138], σε υλικά «βαρέων φερμιονίων» [139, 140], σε οργανικά σύνθετα [141, 142] και συστήματα κοβαλτιδίων [143]. Πολύ πρόσφατα δε, βρέθηκαν πειραματικές ενδείξεις μιας τέτοιας αλληλεπίδρασης στα οξείδια του χαλκού [144].

Ένα τέτοιο πρωτότυπο σενάριο δικαιολογεί πλήρως το ανεξήγητα ισχυρό ισοτοπικό φαινόμενο στα πνικτίδια, ενώ μέσω της θεωρίας του κεφαλαίου αυτού, θα δείξουμε ότι μπορεί να παρέχει και μια ερμηνεία, σε ποιοτικό επίπεδο, των ισοτοπικών εκθετών που έχουν μετρηθεί στα υλικά αυτά. Επιπλέον, θαδειχθεί ότι ο μηχανισμός αυτός μπορεί να οδηγήσει σε μια ποικιλία μη-συμβατικών συμμετριών για το υπεραγωγίμο χάσμα, ανάλογα το επίπεδο νόθευσης του συστήματος [145]. Προκειμένου να καταλήξουμε στα αποτελέσματα αυτά, επιλύουμε αυτοσυνεπώς την πολυζωνική εξίσωση BCS χρησιμοποιώντας ένα ρεαλιστικό, μη-διαχωρίσιμο δυναμικό αλληλεπίδρασης μεταξύ των ηλεκτρονίων όπως αυτό απορρέει από την small-q φωνονική θεωρία.

Η ιδιαιτερότητα των υπολογισμών αυτού του τύπου έγκειται στην μη-διαχωρισιμότητα του δυναμικού αλληλεπίδρασης. Η ύπαρξη της ιδιότητας αυτής μας επέτρεψε στους υπολογισμούς των προηγούμενων κεφαλαίων να θεωρήσουμε ότι η συμμετρία του εκάστοτε χάσματος στην ζώνη Brillouin καθορίζεται πλήρως σύμφωνα με τις μη αναγωγίσιμες αναπαραστάσεις του συστήματος. Για παράδειγμα, στο Κεφ.4 μελετήσαμε υπεραγωγίμες καταστάσεις $d_{x^2-y^2}$ συμμετρίας εισάγοντας τον κατάλληλο παράγοντα δομής. Εδώ ξεκινάμε από την αντίθετη κατεύθυνση· θεωρούμε μία ρεαλιστική αλληλεπίδραση και λύνοντας αυτοσυνεπώς, βρίσκουμε την διασπορά του υπεραγωγίμου χάσματος σε όλη την ζώνη Brillouin, δίχως να έχουμε προϋποθέσει κάποια συγκεκριμένη συμμετρία. Το τελικό αποτέλεσμα μπορεί να είναι είτε μια «καθαρή συμμετρία» ή μια υπέρθεση επιτρεπόμενων συμμετριών η οποία ελαχιστοποιεί καλύτερα την ενέργεια του συστήματος. Κατά την διαδικασία αυτή, καθορίζεται πλήρως και η ανισοτροπία του χάσματος. Είναι προφανές ότι σε τέτοιου είδους ρεαλιστικούς υπολογισμούς, σημαντικό ρόλο παίζει η λεγόμενη «φερμιολογία», δηλαδή τα ακριβή χαρακτηριστικά της επιφάνειας Fermi του συστήματος. Για την περιγραφή της ενεργειακής διασποράς στην κανονική κατάσταση των υλικών αυτών, χρησιμοποιούμε ένα ρεαλιστικό τετραζωνικό μοντέλο Ισχυρού Δεσμού, τα χαρακτηριστικά του οποίου αναλύουμε σε επόμενη ενότητα.

6.1.1 Θεωρητικό μοντέλο

Ως σημείο εκκίνησης, θεωρούμε την γενικευμένη πολυζωνική εξίσωση τύπου BCS :

$$\Delta_n(\mathbf{k}) = - \sum_{n', \mathbf{k}'} V_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{\Delta_{n'}(\mathbf{k}')}{2E_{n'}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{E_{n'}(\mathbf{k}')}{2T} \quad (6.1)$$

όπου $\Delta_n(\mathbf{k})$ είναι το υπεραγώγιμο χάσμα στο k -οστό σημείο της ζώνης Brillouin πάνω από την n -οστή ζώνη και $E_n(\mathbf{k}) = \sqrt{\epsilon_n^2(\mathbf{k}) + \Delta_n^2(\mathbf{k})}$ είναι η διασπορά των μονοσωματιδιακών διεγέρσεων των οιονεί σωματιδίων της n -οστής ζώνης λόγω του χάσματος αυτού. Τα ενεργά δυναμικά σύζευξης $V_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ υποστηρίζουν διεργασίες σκέδασης μεταξύ ηλεκτρονίων που ανήκουν είτε στην ίδια ($n = n'$) ή σε διαφορετική ($n \neq n'$) ζώνη, ενώ η σύζευξη μεταξύ δυο ηλεκτρονίων η οποία οδηγεί στο ζεύγος Cooper γίνεται μεταξύ φορέων από την ίδια μάντα². Η Εξ.(6.1) αποτελεί την επέκταση της καθιερωμένης θεωρίας των Suhl *et al.* [146], έτσι ώστε να συμπεριλαμβάνεται η περίπτωση όπου το υπεραγώγιμο χάσμα είναι ανισοτροπικό/μη-συμβατικό.

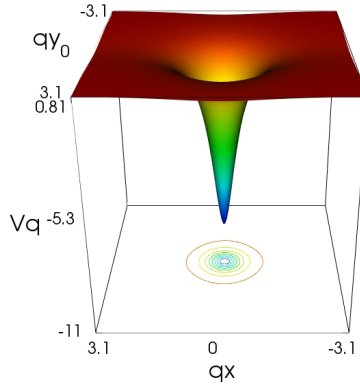
6.1.2 Αλληλεπίδραση «small-q»

Το ενεργό δυναμικό αλληλεπίδρασης της Εξ.(6.1) γενικά μπορεί να διαχωριστεί σε έναν ελκτικό όρο λόγω της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίου-φωνονίου (V_{ph}) και σε έναν απωστικό λόγω της επανακανονικοποιημένης αλληλεπίδρασης Coulomb (U^*). Η ποσότητα $\mu^* = N_0 U^*$, όπου N_0 είναι η πυκνότητα των καταστάσεων (ΠΚ) στην στάθμη Φέρμι, ονομάζεται και ψευδοδυναμικό Coulomb. Το δυναμικό U^* είναι αρκετά ασθενέστερο από το αντίστοιχο, μη-κανονικοποιημένο, δυναμικό Coulomb, U . Η επανακανονικοποίηση οφείλεται στην διαφορετική ενεργειακή κλίμακα δράσης των V_{ph} και U [147] (βλ. π.χ. και [148]). Σύμφωνα με την «small-q» θεωρία [136], το ενεργό δυναμικό σκέδασης έχει την μορφή:

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = U^* - \frac{V_{ph}}{q_c^2 + |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \quad (6.2)$$

και χαρακτηρίζεται από ένα κατώφλι, q_c , στην ορμή των ανταλλασσόμενων φωνονίων. Το κατώφλι αυτό, διαλέγει τις μικρές τιμές των κυματανυσμάτων στον ελκτικό φωνονικό όρο, αφήνοντας το απωστικό ψευδοδυναμικό Coulomb να κυριαρχεί σε μεγάλα κυματανύσματα (βλ. Σχ.6.2). Μειώνοντας το q_c , οδηγούμε το σύστημα σε μια κατάσταση «αποσύζευξης της ορμής» (Momentum Decoupling) [136]. Στην κατάσταση αυτή, το υπεραγώγιμο χάσμα μεταξύ διαφορετικών περιοχών της επιφάνειας Fermi τείνει να αποσυσχετιστεί το πλάτος

²Η Εξ.(6.1) πηγάζει από την εφαρμογή της θεωρίας μέσου-πεδίου στην ενεργή αλληλεπίδραση της μορφής: $\frac{1}{2} \sum_{n, n'} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{s_1, \dots, s_4} c_{\mathbf{k}, s_1, n}^\dagger c_{-\mathbf{k}, s_2, n}^\dagger V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{nn'} c_{-\mathbf{k}', s_3, n'} c_{\mathbf{k}', s_4, n'}$ με παραμέτρους τάξης: $\Delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}, s_1, s_2}^n = - \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{s_3, s_4} \sum_{n'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{nn'} \langle c_{-\mathbf{k}', s_3, n'} c_{\mathbf{k}', s_4, n'} \rangle$ (βλ. Κεφ.2.1).



Σχήμα 6.2: Η μορφή του ενεργού δυναμικού της «small-q» θεωρίας για διάφορες τιμές της ορμής των εμπλεκόμενων φωνονίων. Παρατηρούμε ότι η αλληλεπίδραση είναι ισχυρά ελκτική για q μικρό, ενώ γίνεται ασθενώς απωστική σε μεγάλα κυματανύσματα.

του χάσματος σταδιακά γίνεται ανάλογο της τοπικής πυκνότητας καταστάσεων (ΤΠΚ) σε κάθε k -σημείο της επιφάνειας Fermi ($N(0, \mathbf{k}_F)$). Για παράδειγμα, στην ακραία περίπτωση όπου $q_c = 0$, $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \approx \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ και η Εξ.(6.1) για $n = n'$ γίνεται: $\Delta(\mathbf{k}) \propto N(0, \mathbf{k}_F)$ [136] με $N(0, \mathbf{k}_F) \sim |\nabla \xi_{1,2}^{e,h}(\mathbf{k}_F)|^{-1}$.

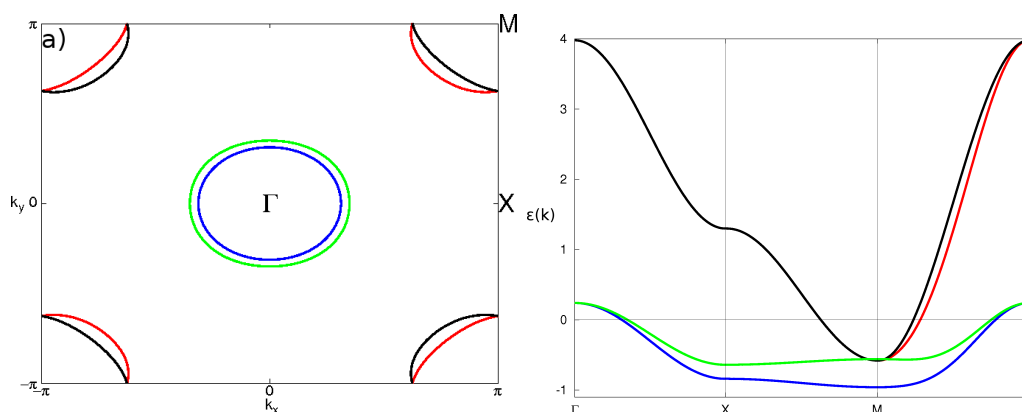
Για μικρό q_c , ο φωνονικός όρος της Εξ.(6.2) είναι μικρής εμβέλειας στον χώρο των ορμών. Κατά συνέπεια, αυτός συνεισφέρει κυρίως στην σύζευξη ηλεκτρονίων μεταξύ κοντινών περιοχών της επιφάνειας Fermi και άρα στην ίδια ενεργειακή ζώνη. Έτσι, μπορούμε να θεωρήσουμε την αλληλεπίδραση small-q ως ανεξάρτητη από τους δείκτες n, n' . Ακόμη, θα θεωρήσουμε ότι το ψευδοδυναμικό Coulomb είναι επίσης το ίδιο για κάθε ζώνη, μια προσέγγιση που γίνεται συχνά σε αντίστοιχους υπολογισμούς [149]. Άρα τελικά, το ενεργό δυναμικό της Εξ.(6.1) μπορεί να θεωρηθεί σε καλή προσέγγιση ως ανεξάρτητο από τους δείκτες των ενεργειακών ζωνών n, n' και δίνεται ακριβώς από την έκφραση της Εξ.(6.2). Στην πράξη, η προσέγγιση αυτή σημαίνει ότι θέσαμε $n = n'$ στην Εξ.(6.2). Έτσι, η λύση της Εξ.(6.1) είναι ένα «καθολικό» υπεραγωγίμο χάσμα, έγκυρο σε όλη την ζώνη Brillouin, το οποίο ωστόσο εξαρτάται από τα επιμέρους χαρακτηριστικά της κάθε ενεργειακής ζώνης, όπως π.χ. η k -κατανομή της πυκνότητας των καταστάσεων. Σε περιοχές με υψηλή πυκνότητα καταστάσεων, αναμένουμε η απόλυτη τιμή του χάσματος να είναι μεγαλύτερη σε σχέση με τις περιοχές όπου η πυκνότητα καταστάσεων είναι μικρότερη, κάτι που επιβεβαιώνεται και από τις αριθμητικές λύσεις. Αυτού του είδους η ανισοτροπία του χάσματος αποτελεί υπογραφή του μηχανισμού της «αποσύζευξης της ορμής» [136] και μπορεί να βρισκείται πίσω από την παρατήρηση πολλαπλών χασμάτων στα σχετικά πειράματα πάνω στα πνικτίδια. Τέλος, αξίζει να αναφέρουμε ότι παρόμοια τακτική έχει εφαρμοστεί με επιτυχία στο παρελθόν σε πολυζωνικούς υπολογισμούς του υπεραγωγίμου χάσματος του UPd_2Al_3 [140].

6.1.3 Πολυζωνικό Μοντέλο Ισχυρού Δεσμού

Στόχος μας είναι η ρεαλιστική περιγραφή της ηλεκτρονιακής δομής των πνικτιδίων του σιδήρου γύρω από την επιφάνεια Fermi. Για τον σκοπό αυτό, χρησιμοποιούμε ένα Μοντέλο Ισχυρού Δεσμού (ΜΙΔ) τεσσάρων ενεργειακών ζωνών το οποίο αναπαράγει επιτυχώς την φυσική των στοιχειομετρικών (ανόθευτων) υλικών, συνδυάζοντας χαρακτηριστικά από αντίστοιχα μοντέλα τα οποία έχουν εισαχθεί τα τελευταία χρόνια [150, 151]. Η ενεργειακή διασπορά κάθε ζώνης δίνεται από τον τύπο:

$$\begin{aligned}\epsilon_{1,2}^h &= -t_1^{h1,2} (\cos k_x + \cos k_y) - t_2^h \cos k_x \cos k_y - \epsilon_F^{h1,2} - \mu \\ \epsilon_{1,2}^e &= -t_1^e (\cos k_x + \cos k_y) - t_2^e \cos k_x \cos k_y - \epsilon_F^e \pm t_3^e \sin k_x \sin k_y - \mu\end{aligned}$$

όπου $t_1^e = -1.14$, $t_2^e = -0.2$, $t_3^e = 0.2$, $\epsilon_F^e = -1.5$, $t_1^{h1} = -0.3$, $t_1^{h2} = -0.2$, $t_2^h = -0.24$, $\epsilon_F^{h1} = 0.6$ και $\epsilon_F^{h2} = 0.4$.



Σχήμα 6.3: α) Η επιφάνεια Fermi για το ΜΙΔ της Εξ.(6.3) στην περίπτωση όπου το σύστημα είναι ανόθευτο ($\mu = 0$). Με κόκκινο/μαύρο (μπλε/πράσινο) διακρίνονται οι «τσέπες» ηλεκτρονίων (οπών) [145]. β) Η ενεργειακή διασπορά των τεσσάρων ζωνών κατά μήκος γραμμών υψηλής συμμετρίας.

Προκειμένου να προσομοιώσουμε την επίδραση της νόθευσης, έχουμε εισάγει ένα χημικό δυναμικό³ μ . Για $\mu = 0$, το σύστημα έχει ίσο αριθμό ηλεκτρονίων και οπών, δηλαδή οι μπάντες είναι συνολικά ημικατελιημένες από ηλεκτρόνια, όπως ακριβώς ισχύει για τα στοιχειομετρικά (ανόθευτα) πνικτίδια. Όταν $\mu > 0$ ($\mu < 0$), το σύστημα είναι νοθευμένο με ηλεκτρόνια (οπές) και οι αντίστοιχες επιφάνειες Fermi διογκώνονται/συρρικνώνονται. Με $e(h)$ συμβολίζονται οι μπάντες με χαρακτήρα ηλεκτρονίων (οπών). Η επιφάνεια Fermi και η ενεργειακή διασπορά που προκύπτει απεικονίζονται στο Σχ.6.3(α) και (β) αντίστοιχα,

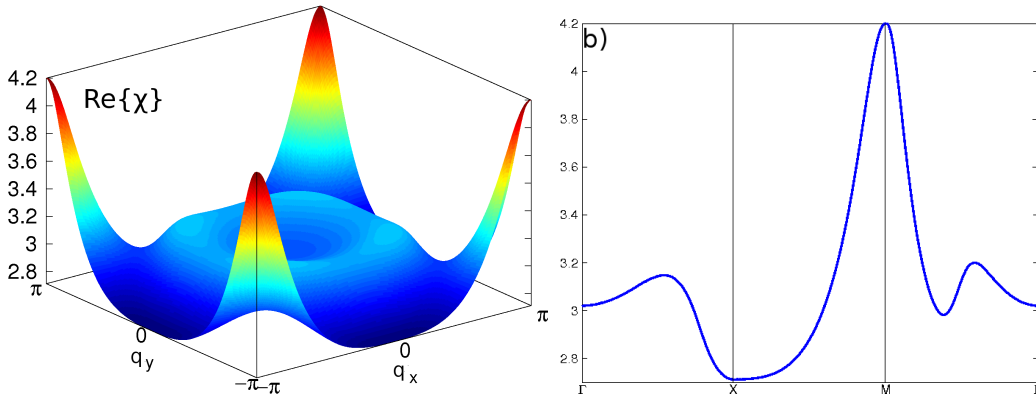
³Θεωρούμε ότι η νόθευση δεν αλλοιώνει τις τιμές των παραμέτρων του ΜΙΔ, παρά μόνο μετακινεί την στάθμη Fermi. Η πρακτική αυτή είναι κοινή σε υπολογισμούς τέτοιου τύπου και συχνά αναφέρεται ως «προσέγγιση άκαμπτης μπάντας» (rigid band approximation).

όπου και φαίνεται η καλή συμφωνία του ΜΙΔ με αντίστοιχους υπολογισμούς ενεργειακής δομής [123]. Το εν λόγω μοντέλο περιγράφει σωστά και την κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων σε κάθε κυματόνισμα Fermi, k_F , ($\sim |\nabla \epsilon_{1,2}^{e,h}(\mathbf{k}_F)|^{-1}$) όπως π.χ. φαίνεται και στο Σχ.6.7 και έχει συζητηθεί στην αναφορά [123].

Ένα κύριο χαρακτηριστικό των ανόθευτων υλικών είναι η καλή συναρμογή μεταξύ των επιφανειών Fermi γύρω από το σημείο Γ και των αντίστοιχων γύρω από το σημείο M , η οποία οδηγεί σε μια αποκλίνουσα συμπεριφορά της σπιν επιδεκτικότητας οδηγώντας το σύστημα στην αντισιδηρομαγνητική κατάσταση τύπου SDW. Προκειμένου να επιβεβαιώσουμε ότι το χαρακτηριστικό αυτό περιγράφεται σωστά από το ΜΙΔ που εισάγαμε, υπολογίστηκε η στατική σπιν επιδεκτικότητα η οποία δίνεται από την σχέση (βλ. π.χ. [151, 150]):

$$\chi(\mathbf{q}) = -2 \sum_{\mathbf{k}, n, n'} \frac{n_F[\epsilon_n(\mathbf{k})] - n_F[\epsilon_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})]}{\epsilon_n(\mathbf{k}) - \epsilon_{n'}(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \quad (6.3)$$

όπου n, n' είναι οι δείκτες των διαφορετικών ενεργειακών ζωνών, π.χ. $n = e_{1,2}, h_{1,2}$.



Σχήμα 6.4: Η σπιν επιδεκτικότητα του ΜΙΔ για $\mu = 0$ α) στην μαγνητική ζώνη Brillouin. και β) Η διασπορά της ίδιας ποσότητας σε διάφορες κατευθύνσεις υψηλής συμμετρίας [145]. Η ισχυρή κορυφή υποδηλώνει την ύπαρξη καλής συναρμογής μεταξύ των τσεπών ηλεκτρονίων-οπών στο κυματόνισμα $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

Εισάγοντας τις ενεργειακές διασπορές της Εξ.(6.3) στην παραπάνω εξίσωση υπολογίζουμε την ποσότητα αυτή, η οποία απεικονίζεται στο Σχ.6.4. Παρατηρούμε ότι η συνολική μαγνητική επιδεκτικότητα του μοντέλου μας, για $\mu = 0$, εμφανίζει μια έντονη κορυφή στο σημείο M ($\mathbf{q} = (\pi, \pi)$) και μια μικρότερη μεταξύ των σημείων $\Gamma - X$, όπως ακριβώς όπως προβλέπεται από υπολογισμούς LDA [128] και από αντίστοιχα μοντέλα που έχουν προταθεί [151, 150].

Σύμφωνα λοιπόν με την παραπάνω ανάλυση το ΜΙΔ της Εξ.(6.3) είναι αρκετό για μια ρεαλιστική περιγραφή της φερμιολογίας των πνικτιδίων και για τον ακριβή προσδιορισμό της συμμετρίας του χάσματος συναρτήσει της νόθευσης για τα υλικά αυτά.

6.1.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

Διαδικασία αριθμητικής επίλυσης

Σύμφωνα με όσα είπαμε παραπάνω, σε μηδενική θερμοκρασία η εξίσωση που επιλύουμε αυτοσυνεπώς είναι η εξής:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}'}^{|\epsilon_n(\mathbf{k})| < \omega_c} V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} \frac{\Delta_{\mathbf{k}'}}{2\sqrt{\epsilon_n^2(\mathbf{k}) + \Delta_{\mathbf{k}'}}} \quad (6.4)$$

Το δεύτερο μέλος αποτελεί ένα ολοκλήρωμα συνέλιξης στον χώρο των ορμών. Ο υπολογισμός του μπορεί να επιταχυνθεί αισθητά αν χρησιμοποιήσουμε το γνωστό θεώρημα συνέλιξης της ανάλυσης Fourier: $\int V(k - k')G(k')dk' = \mathcal{F}^{-1} \{ \mathcal{F} \{V\} \cdot \mathcal{F} \{G\} \}$. Γράφοντας το δυναμικό της Εξ.(6.2) σε μια μορφή η οποία είναι περιοδική στο τετραγωνικό πλέγμα:

$$V_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{q}} = U^* - \frac{V_{ph}}{1 + \frac{2(2 - \cos q_x - \cos q_y)}{q_c^2}} \quad (6.5)$$

μπορούμε να εκμεταλλευτούμε το θεώρημα αυτό εφαρμόζοντας μια τεχνική κυκλικής συνέλιξης μέσω μετασχηματισμών FFT [152]. Προκειμένου να επιτύχουμε μέγιστη ευκρίνεια, οι υπολογισμοί γίνονται σε ένα 512×512 \mathbf{k} -πλέγμα εφαρμόζοντας ταυτόχρονα ένα ενεργειακό κατώφλι γύρω από την επιφάνεια Fermi της τάξης του $\omega_c \sim 0.05W$, όπου W είναι το μέγιστο εύρος των τεσσάρων ενεργειακών ζωνών. Η επιλογή του ω_c προσομοιώνει το ενεργειακό κατώφλι ω_D μέσα στο οποίο συμβαίνουν οι διεργασίες σχετικές με την υπεραγωγιμότητα σε έναν φωνονιακό υπεραγωγό [148]. Στα πραγματικά υλικά $\omega_D \approx 300K$ [63] και άρα $\omega_D \sim 0.01W$. Ωστόσο, η εφαρμογή ενός τόσο μικρού κατωφλίου στους υπολογισμούς προϋποθέτει ένα πολύ πιο πυκνό πλέγμα από k -σημεία έτσι ώστε να εξασφαλίζεται η αριθμητική σταθερότητα. Ωστόσο, έχουμε ελέγξει ότι η επιλογή ενός μεγαλύτερου ω_c σε συνδυασμό με το 512×512 πλέγμα δεν επηρεάζει σχεδόν καθόλου τα τελικά αποτελέσματα για την δομή του $\Delta_{\mathbf{k}}$.

Προκειμένου να εξασφαλίσουμε ότι το $\Delta_{\mathbf{k}}$ στο οποίο συγκλίνουν οι αυτοσυνεπείς υπολογισμοί αποτελεί την πραγματική λύση του προβλήματος, οι υπολογισμοί έγιναν ξεκινώντας από διάφορες αρχικές συνθήκες, όπου και επιβεβαιώθηκε ότι η λύση που παίρνουμε είναι μοναδική και η ενεργειακά πιο συμφέρουσα για το σύστημα.

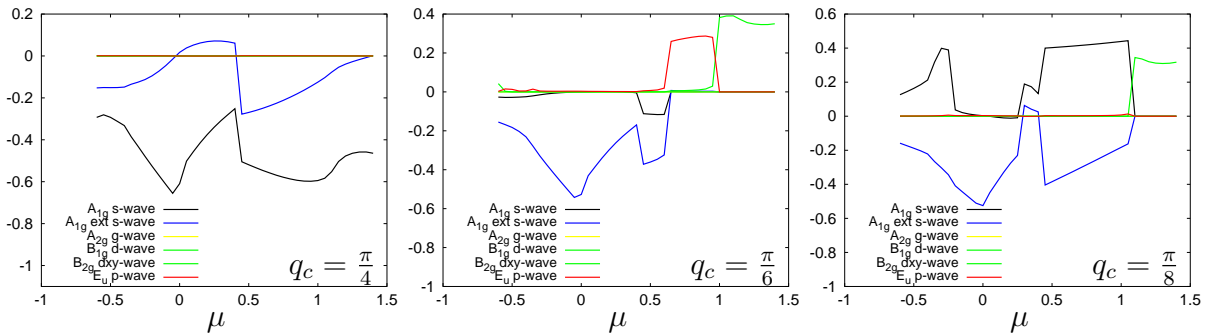
Διερευνήθηκαν διάφορες τιμές των δυναμικών V_{ph} , U^* και του κατωφλίου q_c και για τιμές του χημικού δυναμικού $\mu \in [-0.6, 1.4]$. Γενικά, η αύξηση του U^* οδηγεί σε μη συμβατικές συμμετρίες όπου το χάσμα αλλάζει πρόσημο στην επιφάνεια Fermi, ενώ όταν $U^* \geq 0.25V_{ph}$ η υπεραγωγιμότητα καταστρέφεται. Η συνθήκη αυτή γενικά εξαρτάται και από το q_c αλλά και από την επιφάνεια Fermi σε συγκεκριμένο επίπεδο νόθευσης. Ως μια αντιπροσωπευτική

περίπτωση, θα παρουσιάσουμε αποτελέσματα φιζάροντας το ψευδοδυναμικό Coulomb στην τιμή $U^* = 0.09V_{ph}$ και το ενεργό φωνονιακό δυναμικό $V_{ph} = 2$, ενώ για το κατώφλι q_c θεωρούμε τιμές από $q_c = \pi$ έως $q_c = \pi/8$ καθώς αλλάζουμε το χημικό δυναμικό.

Αποτελέσματα

Για $q_c \gtrsim \pi/5$, η λύση που βρίσκουμε για κάθε μ είναι ένα ανιστροπικό s χάσμα, δίχως αλλαγή προσήμου στην ζώνη Brillouin. Περαιτέρω μείωση του q_c οδηγεί σε ενδιαφέρουσες μεταβάσεις επαγόμενες από τη νόθευση μεταξύ διαφορετικών συμμετριών. Όταν $\pi/5 \geq q_c > \pi/8$ οι αυτοσυνεπείς λύσεις που παίρνουμε για το χάσμα, ανάλογα με τα επίπεδα νόθευσης, περιλαμβάνουν μη τετριμμένες συμμετρίες με κομβικά σημεία όπως είναι η υπέρθεση $s_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ ή οι καθαρές συμμετρίες s_{\pm} , $d_{x^2-y^2}$ και p .

Μπορούμε να κάνουμε μια ποιοτική εκτίμηση του ειδικού βάρους με το οποίο συνεισφέρει κάθε συμμετρία στο υπολογισμένο υπεραγωγίμο χάσμα εκμεταλλευόμενοι τις σχέσεις ορθοκανονικότητας μεταξύ των συναρτήσεων βάσης των μη αναγωγίσιμων αναπαραστάσεων: $\frac{1}{c} \int |f(\mathbf{k})|^2 d\mathbf{k} = 1$, όπου c μια σταθερά κανονικοποίησης, και $\int f_1^*(\mathbf{k}) f_2(\mathbf{k}) d\mathbf{k} = 0$. Έτσι, για κάθε τιμή των μ, q_c , παίρνοντας το άθροισμα στην επιφάνεια Fermi: $\sum_{\mathbf{k} \in FS} f_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}$, με $f_{\mathbf{k}}$ τον παράγοντα δομής, δηλαδή μια από τις συναρτήσεις βάσης του πίνακα της ενότητας 1.2, καταλήγουμε στο Σχ.6.5. Οφείλουμε να σημειώσουμε εδώ, ότι έχουμε αγνοήσει τον



Σχήμα 6.5: Ανάλυση του αυτοσυνεπώς υπολογισμένου υπεραγωγίμο χάσματος στις διάφορες επιτρεπόμενες συμμετρίες της ομάδας σημείου του τετραγωνικού συστήματος συναρτήσει της νόθευσης για τρεις χαρακτηριστικές τιμές του κατωφλίου q_c .

παράγοντα κανονικοποίησης c και κατά συνέπεια, οι τιμές του Σχ.6.5 δεν είναι ακριβείς, ωστόσο εξυπηρετούν στο να έχουμε μια ποιοτική αίσθηση των επικρατούσων συμμετριών.

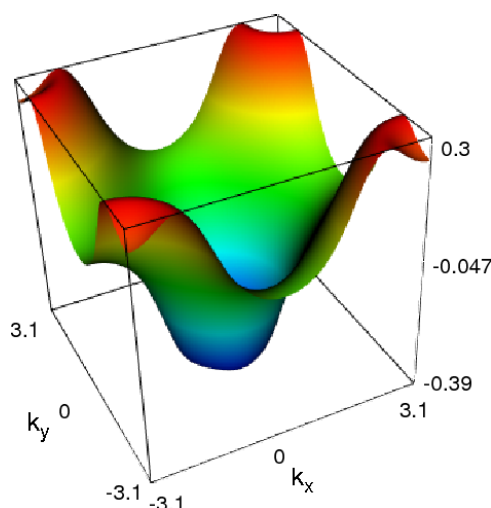
Όπως φαίνεται στο σχήμα αυτό, πράγματι για $q_c = \pi/4$ το υπεραγωγίμο χάσμα αναλύεται σε υπέρθεση των συναρτήσεων βάσης της αναπαραστάσης A_{1g} με έντονη την παρουσία της συμμετρίας s . Καθώς μειώνουμε το q_c , τα φαινόμενα αποσύζευξης της ορμής γίνονται εντονότερα με αποτέλεσμα να ευνοούνται οι μη συμβατικές συμμετρίες οι οποίες λόγω της αλλαγής προσήμου που επιτρέπουν στο υπεραγωγίμο χάσμα, βοηθούν στην ελαχιστοποίηση

6.1 Μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα από φωνόνια τύπου «small-q»

της απωστικής αλληλεπίδρασης Coulomb η οποία δρα καταστρεπτικά για την υπεραγωγιμότητα. Όταν $g_c \approx \frac{\pi}{6}$, βρίσκουμε την μεγαλύτερη ποικιλία από διαφορετικές καταστάσεις καθώς μεταβάλλουμε το μ . Για τον λόγο αυτό, παρακάτω θα ρίξουμε μια πιο προσεκτική ματιά στην περίπτωση αυτή.

Στο Σχ.6.7 απεικονίζεται η μεταβολή της επιφάνειας Fermi συναρτήσει του χημικού δυναμικού μ . Στο ίδιο γράφημα οι χρωματικές διαβαθμίσεις υποδηλώνουν την τιμή του αντίστροφου της πυκνότητας καταστάσεων σε κάθε σημείο της επιφάνειας Fermi. Επίσης στα ίδια γραφήματα φαίνονται με μπλε χρώμα οι γραμμές στις οποίες το αντίστοιχο αυτοσυνεπώς υπολογισμένο υπεραγωγίμο χάσμα μηδενίζεται.

Ξεκινώντας από την υπερνοθευμένη με ηλεκτρόνια περίπτωση, βρίσκουμε ένα ανισοτροπικό μη-συμβατικό χάσμα συμμετρίας $d_{x^2-y^2}$ για $1.4 \geq \mu \geq 1.0$ όπως φαίνεται και στο Σχ.6.8(a). Σε αυτήν την περιοχή νόθευσης, οι τσέπες οπών, οι οποίες συνεισφέρουν το μεγαλύτερο ποσοστό της πυκνότητας καταστάσεων στην στάθμη Fermi, βρίσκονται μακριά από αυτήν, αφήνοντας μόνο τα ηλεκτρόνια από τις τσέπες ηλεκτρονίων να συνεισφέρουν στην υπεραγωγιμότητα. Το χάσμα εμφανίζει κομβικά σημεία στις περιοχές της επιφάνειας Fermi όπου η πυκνότητα καταστάσεων είναι ελάχιστη (Σχ.6.7(a)). Η διασπορά της τελευταίας σε αυτές τις στάθμες νόθευσης είναι πολύ ανισοτροπική και εμφανίζει ελάχιστα στα σημεία όπου το χάσμα μηδενίζεται. Κατά συνέπεια, διατηρώντας ένα ισχυρό χάσμα πάνω από την υπόλοιπη επιφάνεια Fermi ενώ ταυτόχρονα τα σημεία αυτά είναι κομβικά η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος ελαχιστοποιείται.



Σχήμα 6.6: Ένα τυπικό, αυτοσυνεπώς υπολογισμένο, s_{\pm} υπεραγωγίμο χάσμα, προερχόμενο από φωνονικές αλληλεπιδράσεις τύπου small-q. Τα κομβικά σημεία του χάσματος αυτού εμφανίζονται ανάμεσα στις τσέπες ηλεκτρονίων και οπών με αποτέλεσμα η επιφάνεια Fermi να εξαφανίζεται πλήρως κατά την υπεραγωγίμη μετάβαση ($g_c = \pi/6$ και $\mu = -0.1$) [145].

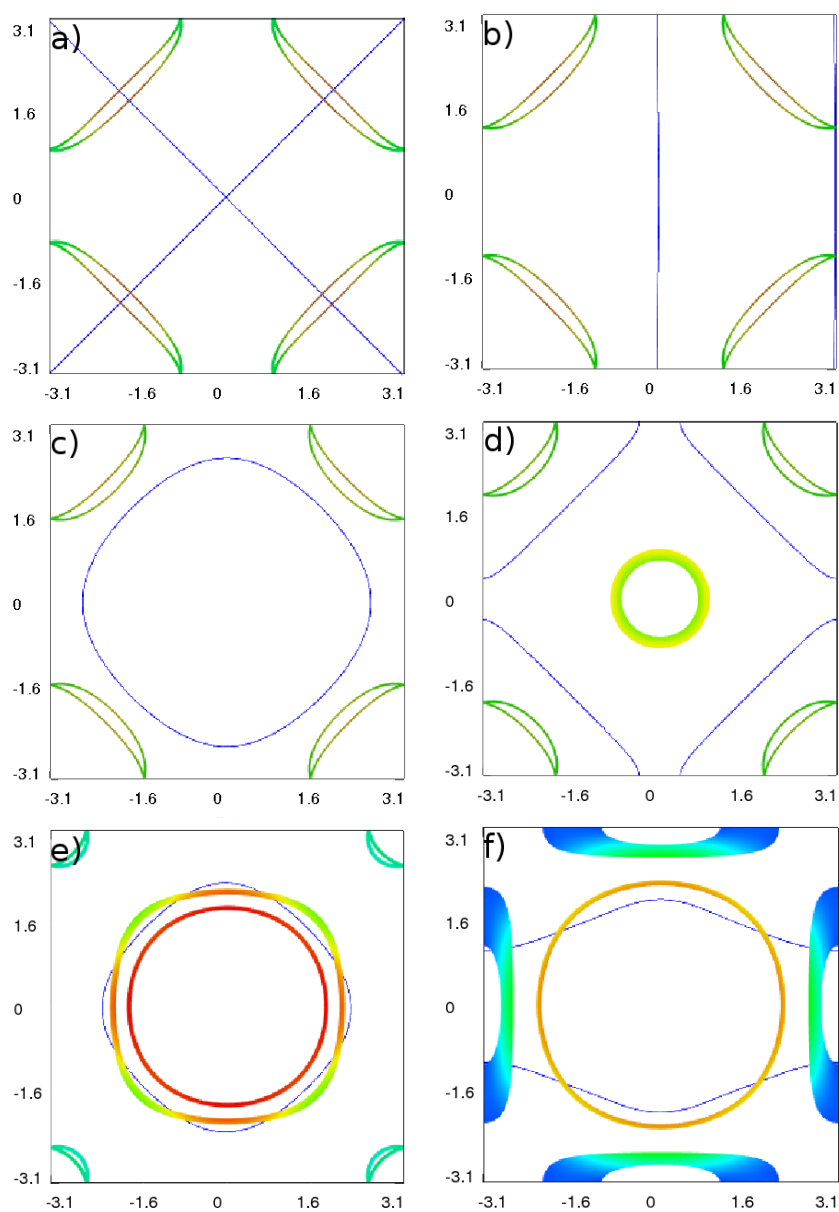
Μειώνοντας το μ οι τσέπες ηλεκτρονίων συρρικνώνονται ενώ ταυτόχρονα η πυκνότητα

καταστάσεων στην επιφάνεια Fermi γίνεται πιο ισοτροπικά κατανομημένη. Για $0.95 \geq \mu \geq 0.65$, η συμμετρία του χάσματος αλλάζει σε p -wave ($\sin k_x$ ή $\sin k_y$) με κομβικά σημεία στις περιοχές όπου οι τσέπες ηλεκτρονίων τέμνονται (Σχ.6.7 και Σχ.6.8(b)). Παρ'όλο που στα σημεία αυτά η πυκνότητα καταστάσεων είναι μέγιστη, αυτή διαφέρει περίπου κατά δυο φορές σε σχέση με την αντίστοιχη ελάχιστη τιμή της στην επιφάνεια Fermi. Έτσι, το σύστημα ελαχιστοποιεί την ενέργειά του διατηρώντας ένα χάσμα πάνω από την υπόλοιπη επιφάνεια Fermi ενώ εμφανίζει κομβικά σημεία στα σημεία αυτά. Δεδομένου ότι η υπεραγωγιμότητα στην θεωρία μας προέρχεται από σύζευξη ηλεκτρονίων στην ίδια μάντα, η συμμετρία του χάσματος συνεπάγεται μια σπιν *triplet* παράμετρο τάξης. Μια παρόμοια κατάσταση έχει ήδη προταθεί για τα πνικτίδια του σιδήρου από μια διαφορετική προσέγγιση [153]. Επίσης, για τα υλικά αυτά έχει προταθεί και μια εξωτική σπιν *singlet* p -wave παράμετρος τάξης στην περίπτωση που τα ηλεκτρόνια του ζεύγους Cooper προέρχονται από διαφορετικές ενεργειακές ζώνες [154]. Λίγο αργότερα από την πρόταση της σπιν *triplet* υπεραγωγιμότητας που βρήκαμε μέσω της θεωρίας μας, πειραματικές μετρήσεις στο πνικτίδιο LiFeAs, για το οποίο υπάρχουν ισχυρές ενδείξεις ότι είναι φωνονικός υπεραγωγός [155], δείχνουν να βρίσκουν ακριβώς αυτή την κατάσταση [156]. Τέλος, αξίζει να αναφέρουμε ότι λόγω του ότι η αναπαράσταση E_u είναι δισδιάστατη, μία ακόμη πιθανή p -wave λύση στην περιοχή αυτή είναι η $f_{\mathbf{k}} = \sin k_x \pm i \sin k_y$, η οποία οδηγεί σε χάσμα δίχως κομβικά σημεία και είναι γενικά ενεργειακά πιο συμφέρουσα από μια απλή μονοδιάστατη αναπαράσταση $\sin k_x$ ή $\sin k_y$. Όπως θα δούμε σε επόμενη ενότητα μια λύση τέτοιου τύπου είναι πιθανή για τον υπεραγωγό LiFeAs.

Στην περιοχή $0.6 \geq \mu \geq 0.25$ βρίσκουμε υπεραγωγιμότητα συμμετρίας s_{\pm} δίχως κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi. Αυτά βρίσκονται κοντά στις τσέπες ηλεκτρονίων όπως φαίνεται και στο Σχ.6.7(c). Η ανισοτροπία της πυκνότητας καταστάσεων μειώνεται ακόμα περισσότερο με αποτέλεσμα η εμφάνιση κομβικών σημείων στην επιφάνεια Fermi να μην ευνοείται.

Γύρω από την συνθήκη ημικατάλειψης, $0.2 \geq \mu \geq -0.3$, οι αυτοσυνεπείς υπολογισμοί συγκλίνουν σε ένα υπεραγωγόμο χάσμα της μορφής που απεικονίζεται στο Σχ.6.7(d). Και αυτό το χάσμα είναι τύπου s_{\pm} συμμετρίας δίχως κομβικά σημεία, όπως φαίνεται π.χ. στο Σχ.6.8(c). Σε αυτή την περιοχή νόθευσης, και οι τέσσερις μάντες κόβουν την στάθμη Fermi ενώ τα σημεία μηδενισμού του χάσματος βρίσκονται ενδιάμεσα της απόστασης μεταξύ των τσεπών ηλεκτρονίων και οπών. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στον συνδυασμό της δράσης του φαινομένου «αποσύζευξης της ορμής» λόγω της τοπικής στον χώρο των ορμών small- q φωνονιακής αλληλεπίδρασης και του απωστικού όρου Coulomb ο οποίος εκτείνεται σε μεγάλες αποστάσεις στον αντίστροφο χώρο. Ο πρώτος όρος επιβάλλει το υπεραγωγόμο χάσμα να είναι μέγιστο πάνω από τις τσέπες ηλεκτρονίων/οπών ενώ παράλληλα αυτό να μηδενίζεται ενδιάμεσα στην περιοχή όπου δεν υπάρχει επιφάνεια Fermi έτσι ώστε να μεγιστοποιείται το ενεργειακό κέρδος του συστήματος.

6.1 Μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα από φωνόνια τύπου «small-q»



Σχήμα 6.7: Η επιφάνεια Fermi χρωματισμένη με την διασπορά της ταχύτητας Fermi ($\sim DOS^{-1}$) για $q_c = \pi/6$ και $\mu = (1.0, 0.75, 0.45, 0.1, -0.4, -0.6)$ από το γράφημα a) μέχρι το f), αντίστοιχα. Κόκκινος (μπλε) χρωματισμός σημαίνει χαμηλή (υψηλή) πυκνότητα καταστάσεων. Στα ίδια γραφήματα με μπλε γραμμές διακρίνονται τα σημεία στην ζώνη Brillouin όπου το υπεραγώγιμο χάσμα μηδενίζεται (κομβικά σημεία). Γύρω από το $\mu = 0$ βρίσκουμε χάσμα συμμετρίας s_{\pm} το οποίο είναι λύση τόσο για νόθευση με ηλεκτρόνια ($\mu = 0.1$) (d), όσο και με οπές (βλ. Σχ.6.8(c)). Το s_{\pm} χάσμα αποτελεί λύση και στην υπερνοθευμένη με ηλεκτρόνια περιοχή όπου οι μπάντες οπών δεν συνεισφέρουν στην επιφάνεια Fermi (c). Περαιτέρω νόθευση με ηλεκτρόνια οδηγεί σε μια σειρά μεταβάσεων, πρώτα σε *triplet* ($\sin k_y$) (b) και στην συνέχεια σε $d_{x^2-y^2}$ (a) συμμετρίες. Για $\mu < 0$, τα κομβικά σημεία της s_{\pm} λύσης μετατοπίζονται πιο κοντά στην εξώτερη τσέπη οπών και τελικά την τέμνουν (e). Στην υπερνοθευμένη περιοχή με οπές όπου η επιφάνεια Fermi έχει την μορφή (f), το υπεραγώγιμο χάσμα είναι υπέρθεση των συμμετριών $s_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ και έχει *νηματική* μορφή [145].

Ο δεύτερος όρος, συζεύγνει το χάσμα πάνω από τις μπάντες ηλεκτρονίων και οπών (συνεισφέρει δηλαδή ως διαζωνικός όρος σύζευξης) με αποτέλεσμα την αλλαγή προσήμου μεταξύ των τσεπών ηλεκτρονίων και οπών.

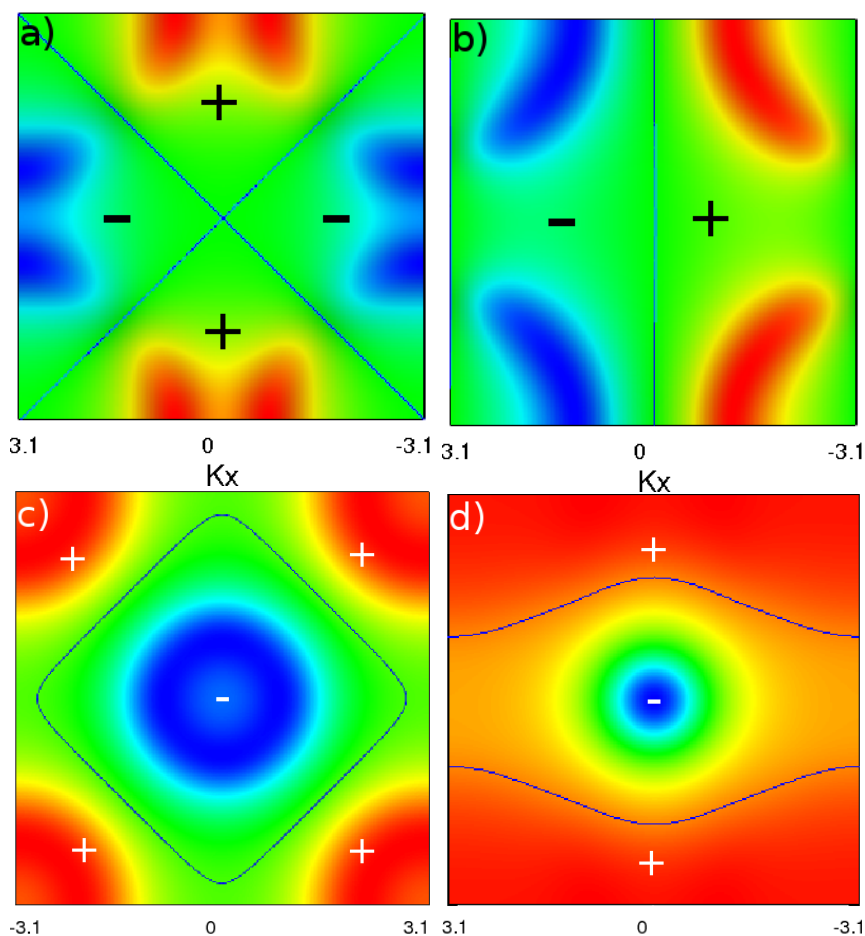
Ο μηχανισμός αυτός οδηγεί σε ένα s_{\pm} χάσμα το οποίο αλλάζει πρόσημο κατά μήκος της κατεύθυνσης $\Gamma - M$ της ζώνης Brillouin. Αυτό το χάσμα, το οποίο μπορεί να είναι είτε σχεδόν ιστροπικό ή ανιστροπικό ανάλογα και με την αντίστοιχη κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων στην επιφάνεια Fermi για δεδομένο επίπεδο νόθευσης, (π.χ. βλ. Σχ.6.6) αντιστοιχεί στο σχεδόν ιστροπικό χάσμα τύπου BCS το οποίο έχει αναφερθεί στα διάφορα σχετικά πειράματα [115, 117].

Περαιτέρω νόθευση με οπές, $-0.35 \geq \mu \geq -0.55$, έχει ως αποτέλεσμα τα κομβικά σημεία της s_{\pm} υπεραγωγιμότητας να τέμνουν την εξώτερη επιφάνεια Fermi των οπών (Σχ.6.8(c) οδηγώντας στην εμφάνιση των λεγόμενων «τυχαίων» κομβικών σημείων⁴, των οποίων η εμφάνιση έχει συζητηθεί προκειμένου να ερμηνευτούν πειραματικά αποτελέσματα τα οποία υποδηλώνουν s_{\pm} χάσμα με κομβικά σημεία σε ορισμένα πνικτίδια [157].

Τέλος, στην οριακή περίπτωση ($\mu = -0.6$) όπου η επιφάνεια Fermi έχει την μορφή του Σχ.6.7(f), η λύση για το χάσμα αποτελείται από μια υπέρθεση των συμμετριών s_{\pm} και $d_{x^2-y^2}$ με κομβικά σημεία στις περιοχές της επιφάνειας Fermi όπου η πυκνότητα καταστάσεων είναι ελάχιστη. Η σύνθετη αυτή δομή είναι σε συμφωνία με προηγούμενα θεωρητικά αποτελέσματα τα οποία υποδεικνύουν τον σχεδόν εκφυλισμό των δυο αυτών συμμετριών στα υλικά αυτά [131]. Η λύση αυτή σε συνδυασμό με τις καθαρές $d_{x^2-y^2}$, p -wave και s_{\pm} συμμετρίες που βρίσκουμε, μπορεί να προσφέρει μια πιθανή ερμηνεία για τα πειραματικά δεδομένα μετρήσεων NMR και μαγνητικού βάθους διείσδυσης τα οποία υποδεικνύουν υπεραγωγιμότητα με κομβικά σημεία στα νοθευμένα με ηλεκτρόνια αλλά και με οπές υλικά [118, 120]. Αξίζει να σημειωθεί ότι η φωνονική μας θεωρία προβλέπει μεταβάσεις από υπεραγώγιμες καταστάσεις δίχως κομβικά σημεία σε καταστάσεις με κομβικά σημεία καθώς μετακινούμαστε από την υπονοθευμένη στην υπερνοθευμένη περιοχή του διαγράμματος φάσης των υλικών αυτών (είτε η νόθευση γίνεται με οπές ή με ηλεκτρόνια). Ακριβώς αυτή η συμπεριφορά αναφέρθηκε πρόσφατα σε σχετικά πειράματα στο $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ [122].

⁴Ως τυχαία κομβικά σημεία ορίζονται τα σημεία μηδενισμού του χάσματος στην επιφάνεια Fermi τα οποία δεν προβλέπονται λόγω κάποιας συγκεκριμένης συμμετρίας

6.1 Μη-συμβατική υπεραγωγιμότητα από φωνόνια τύπου «small-q»



Σχήμα 6.8: Γραφήματα χρωματικής διαβάθμισης της μεταβολής του υπεραγωγίμου χάσματος στην ζώνη Brillouin όπως αυτό υπολογίστηκε αυτοσυνεπώς καθώς μετακινούμαστε από την περιοχή νόθευσης με ηλεκτρόνια στην περιοχή νόθευσης με οπές ($q_c = \pi/6$). Τα γραφήματα (a), (b), (c), και (d) αντιστοιχούν στις τιμές του χημικού δυναμικού: $\mu = 1.15, 0.8, -0.1,$ και -0.6 . Η επιφάνεια Fermi που αντιστοιχεί σε κάθε περίπτωση απεικονίζεται στο Σχ.6.7. Με μπλε γραμμές διακρίνονται τα σημεία στα οποία το υπεραγωγίμο χάσμα μηδενίζεται. Στην κλίμακα της χρωματικής διαβάθμισης, με κόκκινο χρώμα φαίνονται οι θετικές τιμές του μέγιστου χάσματος ενώ με μπλε οι αντίστοιχες αρνητικές [145].

Κλείνοντας την ενότητα αυτή, είναι σκόπιμο να τονίσουμε ότι η παρούσα μελέτη αποτελεί την μοναδική πρόταση για την κατανόηση των πιθανών συμμετριών του υπεραγωγίμου χάσματος στα πνικτίδια από την πλευρά μιας φωνονικής θεωρίας. Το σημαντικό εύρημα είναι ότι η παρατήρηση μη συμβατικών συμμετριών κατά τις οποίες το χάσμα αλλάζει πρόσημο στην ζώνη Brillouin και επιπλέον μπορεί να διαθέτει και κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi στα υλικά αυτά δεν σημαίνει απαραίτητα ότι ο μηχανισμός πίσω από την υπεραγωγιμότητα πηγάζει από τις διακυμάνσεις του σπιν αλλά μπορεί εξίσου εύκολα να προκύψει λόγω ανισοτροπικών φωνονικών αλληλεπιδράσεων.

Όπως δείχτηκε, ο μηχανισμός που προτείνουμε μπορεί να οδηγήσει στην επικρατούσα s_{\pm} συμμετρία για τα υλικά αυτά, ενώ ταυτόχρονα μπορεί να εξηγήσει παρατηρούμενες μεταβάσεις σε άλλες μη συμβατικές συμμετρίες με τη νόθευση. Επίσης, η παρατήρηση ενός ισχυρού ισοτοπικού φαινομένου συνάδει με φυσικό τρόπο με την φωνονική θεωρία μας. Τέλος, είναι η πρώτη φορά όπου προβλέπεται η εμφάνιση σπιν triplet υπεραγωγιμότητας εξαιτίας ενός φωνονικού μηχανισμού σε δισδιάστατα συστήματα. Είναι σημαντικό το γεγονός ότι ακριβώς αυτή η κατάσταση παρατηρήθηκε πολύ πρόσφατα στον φωνονικό υπεραγωγό LiFeAs επιβεβαιώνοντας έτσι τις προβλέψεις μας.

6.2 Ισοτοπικό φαινόμενο

Το λεγόμενο ισοτοπικό φαινόμενο στην υπεραγώγιμη κρίσιμη θερμοκρασία σχετίζεται με τον ισοτοπικό συντελεστή: α , ο οποίος ορίζεται σύμφωνα με την σχέση: $T_c \sim M^{-\alpha}$, όπου M είναι η μάζα των ιόντων του πλέγματος. Θεωρώντας ότι η μεταβολή δT_c η οποία επάγεται λόγω της μεταβολής δM στην ιονική μάζα ύστερα από την ισοτοπική αντικατάσταση $M \rightarrow M^*$ (M^* είναι η μάζα του ισότοπου), είναι μικρή σε σχέση με το ίδιο το T_c , ισχύει η σχέση: $\alpha = -\frac{M}{T_c} \frac{dT_c}{dM}$. Στην αρμονική προσέγγιση, η ιονική μάζα συνδέεται με την χαρακτηριστική συχνότητα του τρόπου ταλάντωσής της (η οποία είναι η ω_D) σύμφωνα με την σχέση: $\omega_D \sim M^{-1/2}$. Αντικαθιστώντας την σχέση αυτή στα προηγούμενα καταλήγουμε στην εξίσωση:

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{\omega_D}{T_c} \frac{dT_c}{d\omega_D} \quad (6.6)$$

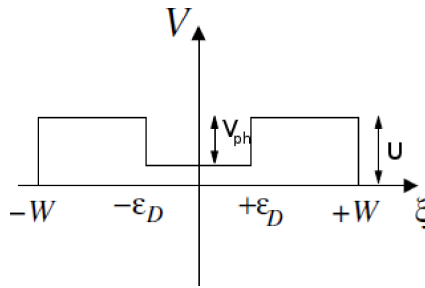
Στην συνήθη μορφή της θεωρίας BCS, ισχύει: $T_c \sim \omega_D$ και κατά συνέπεια $\alpha = 0.5$ [2]. Η τιμή του α ενδέχεται να διαφέρει αρκετά από την τιμή αυτή εάν το T_c δεν σχετίζεται γραμμικά με την ω_D . Αυτή γενικά είναι η περίπτωση στους ισχυρά συζευγμένους υπεραγωγούς όπου $\alpha < 0.5$ λόγω της ισχυρής εξάρτησης και της επανακανονικοποίησης του T_c από την συχνότητα [158]. Ωστόσο, αν θεωρήσουμε ότι η επανακανονικοποίηση αυτή είναι μικρή σε σχέση με την επίδραση που μπορεί να έχει ο όρος Coulomb στο T_c , είναι δυνατή η εύρεση μειωμένου α (έως και αρνητικού) ακόμα και μέσω μιας προσέγγισης ασθενούς σύζευξης [159]. Η προσθήκη της επίδρασης Coulomb, στην θεωρία BCS οδηγεί στο λεγόμενο μοντέλο των Anderson-Morel. Μέσω του μοντέλου αυτού, μπορούμε να εξάγουμε έναν τύπο για το T_c στην προσέγγιση ασθενούς σύζευξης, τον οποίο στην συνέχεια θα χρησιμοποιήσουμε για τον υπολογισμό του ισοτοπικού συντελεστή σύμφωνα με την Εξ.(6.6).

6.2.1 Το μοντέλο των AM για πολυζωνικούς μη-συμβατικούς υπεραγωγούς

Σε αυτή την ενότητα θα επεκτείνουμε το καθιερωμένο μοντέλο των Anderson-Morel έτσι ώστε να μπορεί να περιγράψει πολυζωνικά συστήματα και μη-συμβατική φωνονική υπεραγωγιμότητα. Ας ξεκινήσουμε από την ενεργό Χαμιλτονιανή BCS της Εξ.(6.1) κατάλληλα γραμμικοποιημένη κοντά στο T_c :

$$\Delta_r^n(\mathbf{k}) = - \sum_{\mathbf{k}', n', r'} V_{rr'}^{nn'}(\mathbf{k}\mathbf{k}') \frac{\Delta_{r'}^{n'}(\mathbf{k}')}{2\xi_{n'}(\mathbf{k}')} \tanh \frac{\xi_{n'}(\mathbf{k}')}{2T_c} \quad (6.7)$$

Στην Εξ.(6.7) $\Delta_r^n(\mathbf{k})$ είναι το υπεραγωγίμο χάσμα, $V_{rr'}^{nn'}(\mathbf{k}\mathbf{k}') = V_{rr'}^{nn'}(\mathbf{k}\mathbf{k}')$ είναι το σύνθετο ενεργό δυναμικό αλληλεπίδρασης το οποίο περιλαμβάνει τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-φωτονίου (H-Φ) και Coulomb, n, n' είναι οι δείκτες των ζωνών και $r, r' = 1, 2$ είναι δείκτες οι οποίοι καθορίζουν σε ποια από τις δυο περιοχές του μοντέλου AM ανήκει το χάσμα. Σύμφωνα με το μοντέλο αυτό, η αλληλεπίδραση Coulomb δρά σε όλη την ενεργειακή περιοχή την οποία ορίζει το εύρος των ενεργειακών ζωνών, ενώ ο όρος αλληλεπίδρασης H-Φ είναι μη μηδενικός και ελκτικός μόνο γύρω από την επιφάνεια Fermi σε μια ακτίνα εύρους $2\omega_D$. Μία απεικόνιση των περιοχών αυτών φαίνεται στο Σχ.6.9. Λόγω της μορφής του ολικού ενεργού δυναμικού το μοντέλο αυτό ονομάζεται συχνά και ως «μοντέλο διπλού τετραγωνικού πηγαδιού».



Σχήμα 6.9: Σχηματική απεικόνιση της ενεργειακής εξάρτησης του ολικού ενεργού δυναμικού αλληλεπίδρασης στο μοντέλο των AM.

Έχοντας διαχωρίσει τις ενεργειακές περιοχές στις οποίες δρουν οι δυο αυτές αλληλεπιδράσεις, μπορούμε τώρα να ορίσουμε δυο υπεραγωγίμα χάσματα· ένα για κάθε ξεχωριστή ενεργειακή περιοχή:

$$\Delta_r^n(\mathbf{k}) = \begin{cases} \Delta_1^n(\mathbf{k}) & \text{για } |\xi_{\mathbf{k}}^n| \leq \omega_D & \text{περιοχή 1} \\ \Delta_2^n(\mathbf{k}) & \text{για } \omega_D < |\xi_{\mathbf{k}}^n| < W & \text{περιοχή 2} \end{cases} \quad (6.8)$$

όπου W είναι το συνολικό εύρος των ζωνών. Σημειώνουμε εδώ, ότι υποκινούμενοι από την φαινομενολογία των πνικτιδίων, θεωρούμε κοινό T_c για όλα τα χάσματα.

Το συζευγμένο σύστημα της Εξ.(6.7) είναι γενικά πολύ σύνθετο για να λυθεί αναλυτικά στην γενική μορφή του. Ωστόσο, μια ακριβής λύση μπορεί να επιτευχθεί εφαρμόζοντας την προσέγγιση της προηγούμενης ενότητας. Δεδομένων των ιδιοτήτων της small-q αλληλεπίδρασης και του ότι ενδιαφερόμαστε για το καθολικό υπεραγώγιμο χάσμα σε όλη την ζώνη Brillouin, θέτουμε $n = n'$. Επιπλέον, θεωρούμε ότι η αλληλεπίδραση Coulomb είναι καθαρά τοπική στον ευθύ χώρο (τύπου Hubbard U) αλλά κρατάμε την πλήρη ανισοτροπία του όρου αλληλεπίδρασης H - Φ . Εφαρμόζοντας μια προσέγγιση «ασθενούς -σύζευξης», οι εξισώσεις των AM παίρνουν την μορφή:

$$\Delta_1 g_{\mathbf{k}} = \sum_{n, \mathbf{k}'_F} N_0^n \rho_{\mathbf{k}'_F}^n \left[\Delta_1 V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ef} g_{\mathbf{k}'_F} L_1 - \Delta_2 U L_2^n \right] \quad (6.9)$$

$$\Delta_2 = - \sum_{n, \mathbf{k}'_F} N_0^n \rho_{\mathbf{k}'_F}^n U \left[\Delta_1 g_{\mathbf{k}'_F} L_1 + \Delta_2 L_2 \right] \quad (6.10)$$

όπου $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ef} = \left(V_{\mathbf{k}_F, \mathbf{k}'_F}^{ph} - U \right)$ είναι το σύνθετο ενεργό δυναμικό αλληλεπίδρασης με τον πρώτο όρο την ελκτική αλληλεπίδραση H - Φ και τον δεύτερο όρο την απωστική αλληλεπίδραση Coulomb, $L_1 = \ln \frac{1.13\omega_D}{T_c}$ και $L_2 = \ln \frac{W}{\omega_D}$. $\rho_{\mathbf{k}'_F}^n = \left[N N_0^n |\nabla_{\mathbf{k}'_F} \xi_{\mathbf{k}'_F}^n| \right]^{-1}$ είναι η κανονικοποιημένη πυκνότητα καταστάσεων σε κάθε \mathbf{k} και σε κάθε μία από τις επιφάνειες Fermi των ενεργειακών ζωνών, ενώ N είναι ο αριθμός των διακριτών πλεγματικών σημείων στην ζώνη Brillouin και N_0^n είναι η πυκνότητα καταστάσεων της n -οστής μπάνας στην στάθμη Fermi. Ακόμη, έχουμε γράψει το υπεραγώγιμο χάσμα της περιοχής 1 σε ένα μέρος εξαρτώμενο από την ορμή ($|g_{\mathbf{k}}| \leq 1$) επί την μέγιστη τιμή του πλάτους του χάσματος αυτού (Δ_1). Το χάσμα στην περιοχή 2 (Δ_2) είναι ισοτροπικό (σταθερό) δεδομένου ότι το δυναμικό Coulomb στην περιοχή αυτή είναι καθαρά τοπικό.

Η συνθήκη ενός καθολικού χάσματος απλοποιεί αρκετά την κατάσταση εφόσον μας επιτρέπει να ορίσουμε την ποσότητα $N_{\mathbf{k}'_F} = \sum_n |\nabla_{\mathbf{k}'_F} \xi_{\mathbf{k}'_F}^n|^{-1}$ με αποτέλεσμα να μπορούμε να θεωρούμε στο εξής πράξεις σε όλη την επιφάνεια Fermi. Ορίζοντας την μέση τιμή μιας αυθαίρετης συνάρτησης $F(\mathbf{k})$ σε όλη την επιφάνεια Fermi ως: $\langle F(\mathbf{k}) \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}_F} F(\mathbf{k}_F)$, καταλήγουμε στην τελική μορφή των εξισώσεων του μοντέλου των AM:

$$\Delta_1 g_{\mathbf{k}} = \Delta_1 \langle V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ef} N_{\mathbf{k}'_F} g_{\mathbf{k}'_F} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_1 - \Delta_2 U \langle N_{\mathbf{k}'_F} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_2 \quad (6.11)$$

$$\Delta_2 = -\Delta_1 U \langle N_{\mathbf{k}'_F} g_{\mathbf{k}'_F} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_1 - \Delta_2 U \langle N_{\mathbf{k}'_F} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_2 \quad (6.12)$$

Από την Εξ.(6.12) βρίσκουμε:

$$\Delta_2 = -\frac{\Delta_1 U \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_1}{1 + U \langle N_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_2} \quad (6.13)$$

και αντικαθιστώντας στην Εξ.(6.11) παίρνουμε:

$$\Delta_1 g_{\mathbf{k}} = \Delta_1 \langle V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{ph} N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_1 - \Delta_1 U \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_1 + \frac{\Delta_1 U \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_1}{1 + U \langle N_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_2} U \langle N_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_2$$

Απαλείφοντας το Δ_1 και μεταφέροντας το L_1 στο αριστερό μέλος έχουμε:

$$\frac{1}{L_1} g_{\mathbf{k}} = \langle V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{ph} N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} - \frac{U \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS}}{1 + U \langle N_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} L_2} \quad (6.14)$$

Εφόσον εξ' ορισμού: $\langle N_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} = N_0$ είναι η συνολική πυκνότητα καταστάσεων στην στάθμη Fermi και το λεγόμενο «ψευδοδυναμικό» Coulomb ορίζεται στο ισοτροπικό μοντέλο AM ως: $\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu L_2}$ με $\mu = U N_0$ την αδιάστατη σταθερά σύζευξης, μπορούμε τελικά να γράψουμε την Εξ.(6.14) ως:

$$\frac{1}{L_1} g_{\mathbf{k}} = \langle V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}^{ph} N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} - U^* \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} \quad (6.15)$$

με

$$U^* = U^*(\omega_D) = \frac{U}{1 + U N_0 \ln \frac{W}{\omega_D}} \quad (6.16)$$

Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί ότι θα μπορούσαμε να καταλήξουμε ακριβώς στην ίδια εξίσωση εάν απλά χρησιμοποιούσαμε τον ενεργό όρο αλληλεπίδρασης της small-q θεωρίας στην γενική πολυζωνική εξίσωση BCS των Suhl *et al.* [146] με την συνθήκη ενός καθολικού χάσματος για την υπεραγωγιμότητα. Παρ' όλα αυτά, η ανάλυσή μας στην ενότητα αυτή χρησιμεύει στην διασαφήνιση μεταξύ της σχέσης των δυο θεωριών.

Είμαστε τώρα σε θέση να εξάγουμε μια έκφραση για το T_c , η οποία θα χρησιμεύσει στον υπολογισμό του ισοτοπικού συντελεστή. Καταρχήν, πρέπει να απαλείψουμε την k -εξάρτηση στο αριστερό μέλος της Εξ.(6.15). Η συνήθης διαδικασία είναι να αναλύσουμε το $g_{\mathbf{k}}$ σε άθροισμα κατάλληλα κανονικοποιημένων συναρτήσεων βάσης των μη αναγωγίσιμων αναπαράστασεων της συμμετρίας του κρυστάλλου. Στην ιδανική περίπτωση που το χάσμα μπορεί να αναλυθεί σε άθροισμα των παραγόντων δομής (δηλαδή η ενεργός αλληλεπίδραση είναι διαχωρίσιμη), μπορούμε πολλαπλασιάζοντας και τις δυο πλευρές της εξίσωσης με τον κατάλληλο συζυγή όρο, $g_{\mathbf{k}}^*$, και παίρνοντας τον μέσο όρο στην επιφάνεια Fermi να καταλήξουμε στο επιθυμητό αποτέλεσμα.

Στην περίπτωση που εξετάζουμε εδώ, το ενεργό δυναμικό είναι μη διαχωρίσιμο και κατά συνέπεια το χάσμα είναι και αυτό μη διαχωρίσιμο και έχει γενικά σύνθετη δομή. Ένας τρόπος να υπερβούμε αυτή την δυσκολία είναι να πολλαπλασιάσουμε και τις δυο πλευρές της Εξ.(6.15) με τον όρο: $\frac{g_{\mathbf{k}}^*}{\langle g_{\mathbf{k}}^2 \rangle_{\mathbf{k}}^{FS}}$ και μετά να πάρουμε τον μέσο όρο στην επιφάνεια Fermi:

$$\frac{\langle g_{\mathbf{k}}^2 \rangle_{\mathbf{k}}^{FS}}{L_1} = \langle g_{\mathbf{k}}^* V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{ph} N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FS} - U^* \langle g_{\mathbf{k}}^* N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FS} \quad (6.17)$$

Λύνοντας ως προς την κρίσιμη θερμοκρασία, καταλήγουμε στην γενική έκφραση:

$$T_c = 1.13\omega_D \exp \left[-\langle g_{\mathbf{k}}^2 \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} \left(\langle g_{\mathbf{k}}^* V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{ph} N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FS} - U^* \langle g_{\mathbf{k}}^* N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FS} \right)^{-1} \right] \quad (6.18)$$

Αν στην παραπάνω εξίσωση θέσουμε: $g_{\mathbf{k}} = 1$ και $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{ph} = V^{ph}$, καταλήγουμε στην γνωστή έκφραση [158]:

$$T_c = 1.13\omega_D \exp \left[-\frac{1}{\lambda - \mu^*} \right] \quad (6.19)$$

με $V^{ph} N_0 = \lambda$, $U^* N_0 = \mu^*$ και $\langle g_{\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} = 1$, $\langle N_{\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} = N_0$. Παρατηρούμε δηλαδή ότι ο όρος Coulomb δρα καταστρεπτικά για την υπεραγωγιμότητα και άρα για το υπεραγωγίμο T_c .

Στην γενική περίπτωση, όπου η συνεισφορά μη-συμβατικών όρων στο $g_{\mathbf{k}}$ είναι αρκετά ισχυρή έτσι ώστε το χάσμα $\Delta_{\mathbf{k}}$ να αλλάζει πρόσημο στην ζώνη Brillouin, ο όρος Coulomb στον εκθέτη της Εξ.(6.18) τείνει στο μηδέν, δεδομένου ότι $\langle g_{\mathbf{k}} \rangle \rightarrow 0$. Για την ακρίβεια, ο όρος αυτός είναι ανάλογος του ποσοστού της ισοτροπικότητας (δηλαδή της συνεισφοράς του s -όρου) του χάσματος. Το γενικό αποτέλεσμα που επιφέρει ένα μη συμβατικό χάσμα, είναι η αποφυγή της καταστρεπτικής δράσης του μ^* στην υπεραγωγιμότητα. Όπως έχουμε ήδη δείξει, ο μοναδικός τρόπος για να γίνει αυτό σε έναν φωνονικό υπεραγωγό είναι μέσω της αλληλεπίδρασης small-q.

6.2.2 Υπολογισμός του ισοτοπικού συντελεστή

Έχοντας βρεί την έκφραση για το T_c , μπορούμε να βρούμε έναν αναλυτικό τύπο για τον ισοτοπικό συντελεστή. Αντικαθιστώντας την Εξ.(6.18) στην Εξ.(6.6) και με την βοήθεια της σχέσης 6.16 καταλήγουμε στην γενική εξίσωση του ισοτοπικού συντελεστή για μη-συμβατική φωνονική υπεραγωγιμότητα:

$$\alpha = 0.5 \left\{ 1 - \frac{N_0 (U^*)^2 \langle g_{\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} \langle g_{\mathbf{k}}^2 \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS}}{\left(\langle g_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{ph} N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{FS} - U^* \langle g_{\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} \langle N_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \rangle_{\mathbf{k}'}^{FS} \right)^2} \right\} \quad (6.20)$$

Στην περίπτωση μιας ισοτροπικής αλληλεπίδρασης H-Φ, $g_{\mathbf{k}} = 1$ και η Εξ.(6.20) ανάγεται στην γνωστή μορφή: $\alpha = 0.5 \left\{ 1 - \left(\frac{\mu^*}{\lambda - \mu^*} \right)^2 \right\}$, όπου βλέπουμε ότι η δράση του όρου Coulomb μπορεί γενικά να οδηγήσει σε μειωμένο α . Από την άλλη μεριά, αν η υπεραγωγιμότητα εμφανίζει μια τέλεια ισοτροπική s_{\pm} συμμετρία, με την έννοια ότι πάνω από τις τσέπες οπών το χάσμα ήταν ίσο με Δ και πάνω από τις τσέπες ηλεκτρονίων ήταν ίσο με $-\Delta$ ή αντίστροφα, τότε $\langle g_{\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} \approx 0$ στον αριθμητή της Εξ.(6.20) ενώ το διπλό ολοκλήρωμα στον όρο αλληλεπίδρασης H-Φ του παρανομαστή είναι γενικά μη μηδενικό, δίνοντας $\alpha \approx 0.5$. Παρόμοιο αποτέλεσμα θα παίρναμε αν $\langle g_{\mathbf{k}} \rangle_{\mathbf{k}}^{FS} = f_{\mathbf{k}}$, με $f_{\mathbf{k}}$ οποιονδήποτε παράγοντα δομής μη-συμβατικής συμμετρίας.

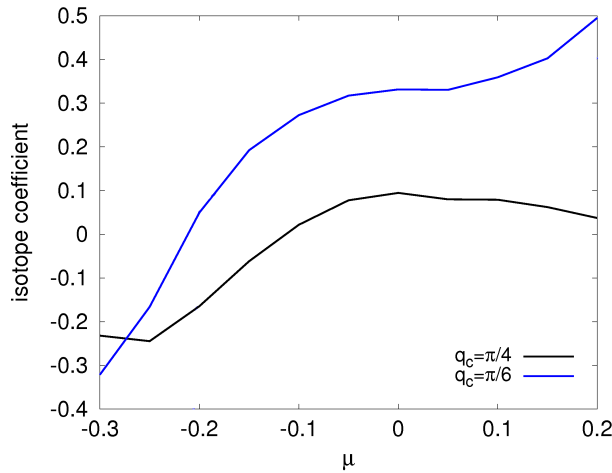
Στην ποιοτική αυτή συζήτηση έχουμε αγνοήσει πλήρως την ρεαλιστική, πολύπλοκη δομή του $\Delta_{\mathbf{k}}$ καθώς και την ανισοτροπική κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων πάνω στην επιφάνεια Fermi. Προκειμένου να μελετήσουμε την επίδραση των χαρακτηριστικών αυτών στο α , η Εξ.(6.20) επιλύθηκε αριθμητικά χρησιμοποιώντας τα αυτοσυνεπώς υπολογισμένα αποτελέσματα για την δομή του χάσματος που παρουσιάστηκαν σε προηγούμενη ενότητα. Αξίζει να τονιστεί ότι η Εξ.6.20 ισχύει για $T \rightarrow T_c$, ενώ οι υπολογισμοί για το $\Delta_{\mathbf{k}}$ που παρουσιάστηκαν έγιναν για $T = 0$. Ωστόσο, δεδομένου ότι δεν συμβαίνει κάποια μετάβαση φάσης από μια συμμετρία σε άλλη συναρτήσει της θερμοκρασίας, η συνάρτηση δομής του χάσματος $g_{\mathbf{k}}$ παραμένει ίδια τόσο για $T = 0$ όσο και για $T = T_c$. Υπολογισμοί σε πεπερασμένες θερμοκρασίες επιβεβαιώνουν ότι πράγματι δεν λαμβάνουν χώρα τέτοιου είδους μεταβάσεις.

Τα αποτελέσματα για τον ισοτοπικό συντελεστή συνοψίζονται στο Σχ.6.10, όπου και απεικονίζονται υπολογισμοί για $\mu = [-0.3, 0.2]$. Στο διάστημα αυτό, στην επιφάνεια Fermi συνεισφέρουν και οι τέσσερις ενεργειακές ζώνες όπως ακριβώς συμβαίνει και για τα νοθευμένα υλικά στα οποία οποία έχουν αναφερθεί μέχρι στιγμής σχετικές μετρήσεις του α . Όπως έχουμε αναλύσει, το υπεραγώγιμο χάσμα μετασχηματίζεται σύμφωνα με την αναπαράσταση A_{1g} (βλ. και Σχ.6.5) στην περιοχή αυτή. Το γεγονός αυτό βρίσκεται σε καλή συμφωνία με την φαινομενολογία των συγκεκριμένων υλικών αυτών για τα οποία το χάσμα θεωρείται s_{\pm} ή ανισοτροπικής s μορφής.

Παρατηρούμε ότι ο ισοτοπικός συντελεστής γενικά ακολουθεί την εξάρτηση από το μ της $s - wave$ συνιστώσας του χάσματος. Έτσι, για $q_c = \pi/4$, όπου το χάσμα έχει την μορφή ανισοτροπικής s δομής δίχως αλλαγή προσήμου (βλ. Σχ.6.5), ο α τείνει στο μηδέν για νόθευση με ηλεκτρόνια, ενώ μπορεί να είναι ακόμα και αρνητικός για νόθευση με οπές. Αντίθετα, για $q_c = \pi/6$, όπου το χάσμα αλλάζει πρόσημο στην ζώνη Brillouin με αποτέλεσμα η επίδραση του όρου Coulomb στον ισοτοπικό συντελεστή να μειώνεται, βρίσκουμε ενισχυμένο α για $\mu > 0$. Για $\mu < 0$ όπου η s συνιστώσα στο χάσμα ενισχύεται, ο α μειώνεται και τείνει ακόμα και σε αρνητικές τιμές.

Έτσι, σύμφωνα με τα αποτελέσματα αυτά, όταν $q_c = \pi/6$, στην νοθευμένη με ηλεκτρόνια

περιοχή βρίσκουμε $\alpha \approx 0.35$ για $\mu = 0.1$ και $\alpha \approx 0.4$ για $\mu = 0.15$ σε συμφωνία με τα ευρήματα των σχετικών πειραμάτων [114, 133]. Παράλληλα, για $q_c = \pi/4$, $\alpha \rightarrow 0$ καθώς $\mu \rightarrow 0.2$ αποτέλεσμα το οποίο βρίσκεται σε καλή συμφωνία με μια ακόμα ανεξήγητη πειραματική παρατήρηση στο νοθευμένο με ηλεκτρόνια SmFeAsO_{1-y} όπου $\alpha \approx 0$ [160].



Σχήμα 6.10: Ο αυτοσυνεπώς υπολογισμένος ισοτοπικός συντελεστής, α , συναρτήσει της νόθευσης και δυο χαρακτηριστικές τιμές του κατωφλίου q_c , σε αντιστοιχία και με το Σχ.6.5.

Στην νοθευμένη με οπές περιοχή, ανάλογα με την τιμή των q_c και μ , βρίσκουμε είτε αρνητικό ή θετικό ισοτοπικό εκθέτη. Έτσι, για $q_c = \pi/6$ και $\mu = -0.1$, $\alpha \approx 0.3$ μια τιμή η οποία είναι πολύ κοντά στο $\alpha \approx 0.35$ που έχει μετρηθεί στο νοθευμένο με οπές BaFeAs [114]. Αντίθετα, για μικρότερο χημικό δυναμικό $\mu = -0.25$, βρίσκουμε $\alpha \approx -0.18$ ακριβώς όπως έχει μετρηθεί για το ίδιο υλικό [134]. Παράλληλα, για $\mu = -0.2$ και $q_c = \pi/4$ βρίσκουμε και πάλι $\alpha \approx -0.18$. Αξίζει να σημειωθεί εδώ, ότι και τα δυο πειράματα για το BaKFeAs έγιναν στο ίδιο επίπεδο νόθευσης, ωστόσο τα δείγματα προετοιμάστηκαν με διαφορετικές μεθόδους. Έτσι, σύμφωνα με τα αποτελέσματα της θεωρίας μας, η αντίφαση μεταξύ των δυο μετρήσεων μπορεί να ερμηνευτεί είτε λόγω μιας μικρής αλλαγής του επιπέδου νόθευσης ή/και λόγω αλλαγής στο κυματόνισμα των εμπλεκόμενων φωνονίων εξαιτίας της διαφορετικής μεθόδου παρασκευής των δειγμάτων. Εξάλλου, η διαφορά αυτή αναμένεται να έχει επιπτώσεις και στα επίπεδα καθαρότητας των δειγμάτων. Σε πρώτης τάξης προσέγγιση⁵, η ύπαρξη τυχόν προσμίξεων στο υλικό θα έχει ως αποτέλεσμα μια μετατόπιση στο χημικό δυναμικό του συστήματος.

⁵π.χ. σε μια προσέγγιση τύπου Born

6.3 Σπιν triplet υπεραγωγιμότητα στον φωνονικό υπεραγωγό LiFeAs

Το LiFeAs αποτελεί μια ξεχωριστή περίπτωση ανάμεσα στο πλήθος των σύνθετων πνικτιδίων τα οποία έχουν μελετηθεί τα τελευταία τέσσερα χρόνια. Το υλικό αυτό παρουσιάζει υπεραγωγιμότητα στην στοιχειομετρική του σύνθεση (δίχως νόθευση) σε αντίθεση με όλα τα υπόλοιπα πνικτίδια σιδήρου-αρσενικού (FeAs), και μάλιστα με $T_c = 18$ K [161]. Ιδιαίτερο χαρακτηριστικό αποτελεί και η παντελής απουσία του αντισιδηρομαγνητισμού από το διάγραμμα φάσης του η οποία είναι συνέπεια της ξεχωριστής επιφάνειας Fermi του. Αυτή διαφέρει από τα υπόλοιπα υλικά ως προς το ότι δεν παρουσιάζει ιδιότητες συναρμογής, ενώ σε μικρή ενεργειακή απόσταση από την επιφάνεια Fermi των οπών ελλοχεύει ένα σημείο Van Hove [162].

Τα διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα όσον αφορά τον ρόλο των διακυμάνσεων του σπιν στο υλικό αυτό δεν είναι ξεκάθαρα. Μετρήσεις σκέδασης νετρονίων υποδεικνύουν ότι αυτές παρουσιάζουν γενικά διαφορετικά χαρακτηριστικά σε σχέση με τα υπόλοιπα πνικτίδια [163], ενώ πειράματα NQR και NMR αναφέρουν ότι στο υλικό αυτό οι διακυμάνσεις του σπιν είναι αρκετά ασθενέστερες [164]. Από την άλλη μεριά, η σταθερά σύζευξης ηλεκτρονίου-φωνονίου όπως εξήχθη από μετρήσεις ARPES βρέθηκε ιδιαίτερα ισχυρή, $\lambda = 1.38$, και αρκετή για να δικαιολογήσει την κρίσιμη θερμοκρασία του υλικού, γεγονός που οδηγεί στο συμπέρασμα ότι το LiFeAs είναι φωνονικός υπεραγωγός [155]. Στην άποψη αυτή συμβάλλουν και πρόσφατοι θεωρητικοί υπολογισμοί από «πρώτες αρχές» [165].

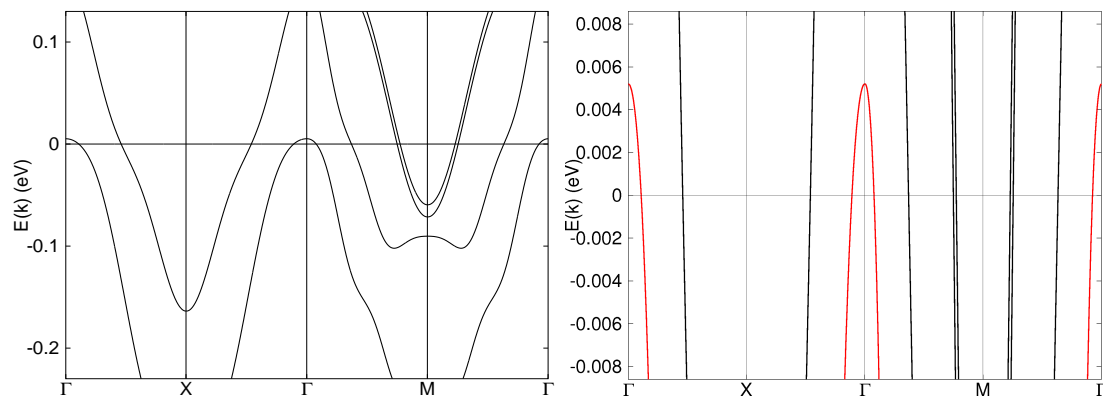
Σύμφωνα με αυτά τα δεδομένα, ο προσδιορισμός της συμμετρίας του υπεραγωγισμού χάσματος αποτελεί βασική προϋπόθεση για την κατανόηση του μηχανισμού πίσω από την υπεραγωγιμότητα στο υλικό αυτό. Ωστόσο, τα σχετικά πειράματα προς αυτή την κατεύθυνση είναι τελείως αντιφατικά. Έτσι, μετρήσεις ARPES βρίσκουν είτε ανισοτροπικό s χάσμα δίχως αλλαγή προσήμου [166], ή μη-συμβατικό s_{\pm} χάσμα χωρίς κομβικά σημεία [167] ενώ μετρήσεις φασματοσκοπίας σάρωσης σήραγγος καταλήγουν σε ένα σπιν triplet χάσμα συμμετρίας p δίχως κομβικά σημεία [168]. Ακόμη πιο μυστηριώδη είναι τα αποτελέσματα NMR μετρήσεων τα οποία αναφέρουν ότι μερικά δείγματα είναι σπιν singlet υπεραγωγοί και μερικά σπιν triplet [156]. Για την εντυπωσιακή αυτή συμπεριφορά θεωρείται ότι ευθύνεται η μικρή απόκλιση από την στοιχειομετρική συνθήκη των δειγμάτων που παρουσιάζουν την triplet κατάσταση [156].

Όπως είδαμε, η small-q φωνονική θεωρία μπορεί να αναπαράγει όλες αυτές τις συμμετρίες καθώς και μεταβάσεις μεταξύ τους με τη νόθευση. Στην ενότητα αυτή, θα εφαρμόσουμε το small-q σενάριο στο LiFeAs. Για την ρεαλιστική περιγραφή της ενεργειακής δομής του υλικού αυτού κοντά στην επιφάνεια Fermi, χρησιμοποιήσαμε δεδομένα τα οποία είναι προϊόν

προσαρμογής των πειραματικών μετρήσεων της ομάδας ARPES του IFW της Δρέσδης⁶ [169].

6.3.1 Ιδιότητες και μορφολογία της επιφάνειας Fermi

Στο Σχ.6.11(a) φαίνεται η ενεργειακή διασπορά των τεσσάρων ζωνών που κόβουν την επιφάνεια Fermi του υλικού αυτού κατά μήκος περιοχών υψηλής συμμετρίας του κρυστάλλου. Γύρω από το σημείο M παρατηρούμε ότι τέμνουν την στάθμη Fermi δυο ενεργειακές ζώνες με χαρακτήρα ηλεκτρονίων οι οποίες είναι σχεδόν εκφυλισμένες μεταξύ τους. Κοντά στο σημείο Γ τέμνουν την στάθμη Fermi δυο ζώνες οπών εκ των οποίων η εσωτερη είναι αρκετά «ρηχή» ενώ είναι σχεδόν επίπεδη πάνω από το Γ . Η μορφολογία της ζώνης αυτής, έχει ως



Σχήμα 6.11: a) Η ενεργειακή δομή του LiFeAs η οποία προέκυψε από προσαρμογή στα πειραματικά δεδομένα [169] b) Το ίδιο γράφημα στην ενεργειακή περιοχή του κατώφλιου $\omega_{log} = 8.6meV$. Με κόκκινο χρώμα φαίνεται η μπάντα οπών η οποία ευθύνεται για το σημείο Van Hove στο Γ .

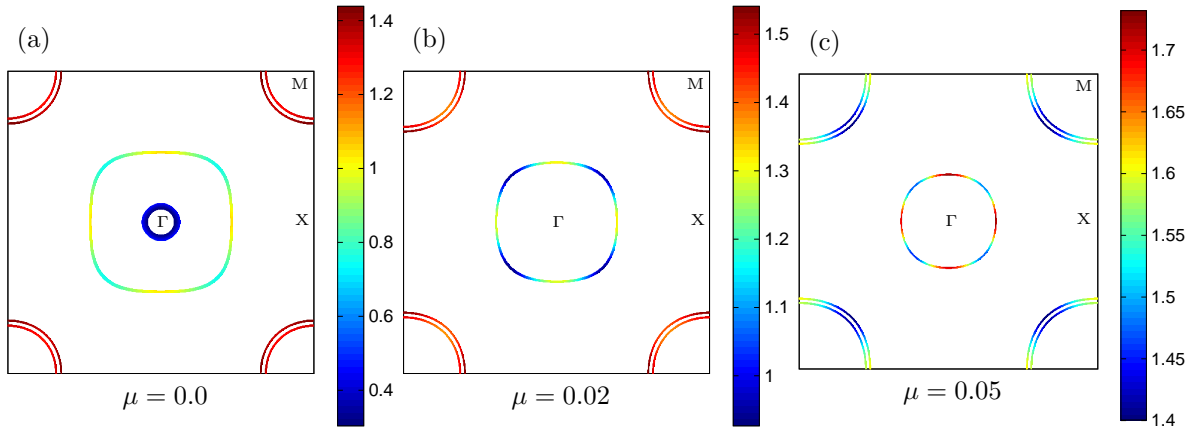
συνέπεια την ελαχιστοποίηση της ταχύτητας Fermi με αποτέλεσμα η πυκνότητα καταστάσεων ($\sim |\nabla_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}}|^{-1}$) στο σημείο αυτό να είναι πολύ μεγάλη οδηγώντας έτσι στην εμφάνιση σημείων Van Hove (βλ. και Σχ.6.12(a)). Τα σημεία αυτά απέχουν μόλις $5meV$ από την στάθμη Fermi όπως φαίνεται και στο Σχ.6.11(b), άρα η επίδρασή τους στην υπεραγωγιμότητα μπορεί να καταπιεστεί εάν το σύστημα είναι ελαφρώς νοθευμένο με ηλεκτρόνια, το οποίο στην προσέγγιση «άκαμπτης μπάντας» μπορεί να προσομοιωθεί με ένα μικρό χημικό δυναμικό, μ . Σε αντιστοιχία με τις προηγούμενες ενότητες, εισάγουμε το χημικό δυναμικό ως: $\epsilon_{i=1,2}^{e(h)}(\mu) = \epsilon_{i=1,2}^{e(h)}(0) - \mu$, όπου $\epsilon_{i=1,2}^{e(h)}(0)$ είναι η ενεργειακή διασπορά του Σχ.6.11(a).

Υπολογισμοί DFT για την ηλεκτρονιακή και την φωνονιακή δομή του LiFeAs δίνουν για την μέση ενεργό συχνότητα των φωνονίων: $\omega_{log} = 100K \approx 8.6meV$ [170]. Αυτό το ενεργειακό κατώφλι χρησιμοποιούμε και στους υπολογισμούς μας, δηλαδή επικεντρωνόμαστε

⁶Τα δεδομένα αυτά μας τα παραχώρησε ευγενικά ο επικεφαλής της ομάδας Καθ. S. Borisenko.

6.3 Σπιν triplet υπεραγωγιμότητα στον φωνονικό υπεραγωγό LiFeAs

στην ενεργειακή περιοχή $|\xi| \leq 8.6meV$ στην οποία η αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωνονίου είναι ελκτική και άρα μπορεί να οδηγήσει σε υπεραγωγιμότητα, σύμφωνα και με όσα συζητήσαμε για το μοντέλο των AM. Όπως φαίνεται στο Σχ.6.11(b), ένα χημικό δυναμικό της τάξης των $\mu \approx 0.014$ eV είναι αρκετό ώστε να αφαιρέσει τελείως την μπάντα οπών, άρα και το σημείο Van Hove από αυτό το ενεργειακό παράθυρο, ενώ για $\mu \geq 5meV$ η μπάντα αυτή δεν τέμνει την στάθμη Fermi.



Σχήμα 6.12: Η επιφάνεια Fermi του LiFeAs χρωματισμένη ανάλογα με το αντίστροφο της πυκνότητας καταστάσεων σε κάθε πλεγματικό σημείο της για τρεις τιμές του χημικού δυναμικού οι οποίες αντιστοιχούν σε ελάχιστη απόκλιση από την στοιχειομετρική συνθήκη προς την νόθευση με ηλεκτρόνια.

Καθώς το μ αυξάνει, παρατηρούμε μεταβολή στην κατανομή της πυκνότητας καταστάσεων (DOS) της επιφάνειας Fermi, όπως φαίνεται και στο Σχ.6.12. Για $\mu = 0$, η εσωτερη μπάντα οπών παρουσιάζει πολύ υψηλή DOS λόγω του σημείου Van Hove. Η εξωτερη μπάντα οπών παρουσιάζει μικρότερη DOS η οποία εμφανίζει μια ανισοτροπικότητα με μέγιστα στην κατεύθυνση $\Gamma - M$ και ελάχιστα στην κατεύθυνση $\Gamma - X$. Η ανισοτροπικότητα αυτή ενισχύεται με το μ . Οι τσέπες ηλεκτρονίων παρουσιάζουν ισοτροπικά κατανεμημένη και αρκετά ασθενή DOS όταν $\mu = 0$. Καθώς νοθεύουμε με ηλεκτρόνια, η κατανομή της DOS σε αυτές τις μπάντες γίνεται όλο και πιο ανισοτροπική, με μέγιστα στην $\Gamma - M$ κατεύθυνση. Τα χαρακτηριστικά αυτά, όπως θα δούμε, επηρεάζουν καθοριστικά την συμμετρία του υπεραγωγίμου χάσματος σύμφωνα με το small-q σενάριο.

6.3.2 Υπολογισμοί για το υπεραγωγίμο χάσμα

Για τον καθορισμό της συμμετρίας του LiFeAs, επιλύθηκε αυτοσυνεπώς η Εξ.6.4 χρησιμοποιώντας τις ενεργειακές διασπορές του Σχ.6.11 και εφαρμόζοντας το ενεργειακό κατώφλι $\omega_{log} = 8.6meV$ για διάφορες τιμές του χημικού δυναμικού στο διάστημα $\mu \in [0, 0.05]$. Ως δυναμικό αλληλεπίδρασης, χρησιμοποιήσαμε αυτό της small-q θεωρίας της Εξ.6.2. Προκει-

μένου να διερευνήσουμε τις πιθανές συμμετρίες σε κάθε στάθμη νόθευσης, έγιναν λεπτομερείς υπολογισμοί για διάφορες τιμές των $q_c \in [\pi/4, \pi/8]$, $V_{ep} \in [0, 1]$ και $U^* \in [0, 0.5]$.

Παρατηρήσαμε ότι, σε αντίθεση με τους υπολογισμούς των προηγούμενων ενοτήτων, καθώς το μ γίνεται πεπερασμένο, η ιδιαίτερη επιφάνεια Fermi του υλικού αυτού οδηγεί σε λύσεις με συμμετρίες οι οποίες είναι σχεδόν εκφυλισμένες ενεργειακά μεταξύ τους. Στο συμπέρασμα αυτό οδήγησε η παρατήρηση ότι συχνά η λύση για την συμμετρία του χάσματος στην οποία συνέκλινε ο αλγόριθμος εξαρτιόταν από τις αρχικές συνθήκες.

Προκειμένου να καθορίσουμε με ακρίβεια την σωστή θεμελιώδη κατάσταση του συστήματος, οι υπολογισμοί σε κάθε τιμή των μ, q_c, V_{ph} και U^* επαναλήφθηκαν ξεκινώντας από διαφορετικές αρχικές συνθήκες. Ως τέτοιες, χρησιμοποιήθηκαν είτε τυχαίες τιμές ή δομές με τις συμμετρίες που προβλέπονται για τετραγωνικό σύστημα (βλ. π.χ. τον πίνακα της Εν.1.2). Έτσι, για κάθε συνδυασμό παραμέτρων του προβλήματος καταλήξαμε σε ένα σετ πιθανών λύσεων. Στην συνέχεια, για κάθε λύση του σετ υπολογίστηκε η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος μέσω της Εξ.Α.17. Ως πραγματική λύση επιλέχθηκε το χάσμα που ελαχιστοποιεί την ενέργεια αυτή.

Τα αποτελέσματά μας συνοψίζονται στο Σχ.6.13. Γενικά παρατηρούμε ότι η αλληλεπίδραση Coulomb ανταγωνίζεται την ελκτική αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωνονίου, με αποτέλεσμα όταν αυτή κυριαρχεί να καταστρέφει την υπεραγωγιμότητα (λευκές περιοχές). Για μ αρκετά μικρό ώστε το σημείο Van Hove της εσώτερης τσέπης οπών να συνεισφέρει στο παράθυρο $|\xi| < \omega_{log}$, οι λύσεις που βρίσκουμε υπακούουν τις συμμετρίες της αναπαράστασης A_{1g} . Όταν $V_{ph} \gg U^*$ η λύση είναι μια ανισοτροπική s δομή δίχως αλλαγή προσήμου του χάσματος στην ζώνη Brillouin, στην οποία κατέληξαν οι συγγραφείς της αναφοράς [166].

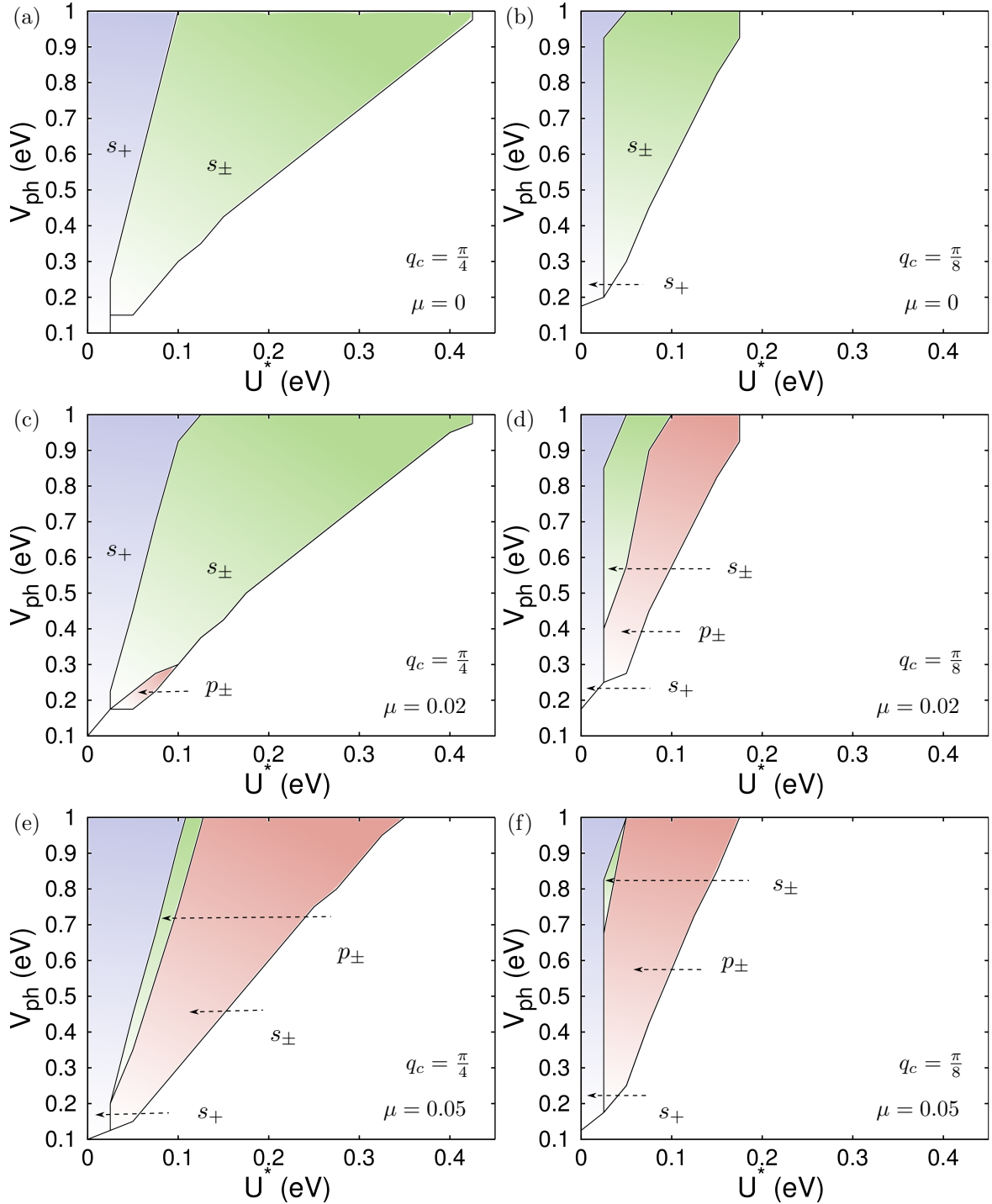
Καθώς το U^* αυξάνει, η ενεργειακά πιο συμφέρουσα συμμετρία είναι της γενικής μορφής s_{\pm} όπου η αλλαγή προσήμου στην ζώνη Brillouin βοηθά στην αποφυγή του απωστικού όρου Coulomb (βλ. και συζήτηση γύρω από την Εξ.(6.18)). Στην ίδια συμπεριφορά οδηγεί και η αύξηση του q_c , το οποίο γενικά οδηγεί σε πιο ανισοτροπικές, μη-συμβατικές δομές για το χάσμα. Λύσεις αυτού του τύπου ταιριάζουν με τα συμπεράσματα της αναφοράς [167]. Η παρουσία της υψηλής πυκνότητας καταστάσεων στο Γ αποκλείει οποιαδήποτε συμμετρία με κομβικά σημεία πάνω από την εσώτερη επιφάνεια Fermi των οπών.

Για $\mu = 0.02$ (Σχ.6.13(b)-(c)), η επίδραση της επιφάνειας αυτής στην υπεραγωγιμότητα εξαφανίζεται. Όταν ο όρος Coulomb είναι αρκετά ισχυρός, η λύση που ευνοείται είναι συμμετρίας τύπου p_{\pm} όπου το χάσμα έχει την μορφή: $\Delta_{\mathbf{k}} \approx \Delta(\sin k_x \pm i \sin k_y)$. Η λύση αυτή είναι μια triplet υπεραγώγιμη κατάσταση δίχως κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi ($E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2(\sin^2 k_x \pm \sin^2 k_y)}$), ακριβώς όπως προβλέπουν τα σχετικά πειράματα στο LiFeAs [168, 156]. Η μείωση του q_c καθιστά την triplet υπεραγωγιμότητα την ενεργειακά σταθερή λύση για ακόμα μεγαλύτερο εύρος τιμών των παραμέτρων V_{ph}, U^* . Η τάση αυτή οφείλεται και στην αύξηση της ανισοτροπίας της κατανομής της DOS πάνω στην επιφάνεια

Fermi. Η ανισοτροπία αυτή γίνεται ακόμα πιο έντονη για $\mu = 0.05$, όπου πλέον η p_{\pm} λύση καταλαμβάνει την μεγαλύτερη έκταση στα διαγράμματα φάσης του Σχ.6.13(e)-(f).

Βλέπουμε λοιπόν, ότι μικρές αλλαγές στο επίπεδο νόθευσης ή/και στο q_c οδηγούν σε αλλαγή της συμμετρίας του υπεραγωγίμου χάσματος από singlet με γενική αναπαράσταση την A_{1g} , σε triplet με αναπαράσταση την E_u ακριβώς όπως συμπεραίνουν τα σχετικά πειράματα NMR [156]. Η συμπεριφορά αυτή οφείλεται στην δράση της small-q φωνονικής αλληλεπίδρασης και δεν μπορεί να περιγραφεί από μοντέλα όπου η αλληλεπίδραση είναι μαγνητικής φύσης [171]. Η ποικιλία των συμμετριών αυτών είναι προσβάσιμη μόνο μέσω του small-q φωνονικού σεναρίου για το υλικό αυτό.

Κλείνοντας, συνοψίζουμε ότι μέσω της θεωρίας που αναπτύξαμε, αναπαράγουμε τις παρατηρούμενες συμμετρίες όπως έχουν αναφερθεί στα σχετικά πειράματα, εξηγούμε την ποικιλία των φάσεων αυτών ως μια ιδιαιτερότητα του υλικού λόγω νόθευσης και προτείνουμε την μοναδική θεωρία η οποία συνάδει με την παρατήρηση σπιν triplet υπεραγωγιμότητας σε έναν φωνονικό υπεραγωγό.



Σχήμα 6.13: Διαγράμματα φάσης για το LiFeAs συναρτήσει των ενεργών δυναμικών V_{ph} και (U^*) σύμφωνα με τους αυτοσυνεπείς αριθμητικούς υπολογισμούς μας. Παρουσιάζονται αποτελέσματα για τρεις περιπτώσεις νόθευσης: $\mu = (0, 0.02, 0.05)$ και για δυο χαρακτηριστικές τιμές του q_c . Ο συμβολισμός s_+ , s_{\pm} σημαίνει ανισοτροπική s υπεραγωγίμη συμμετρία δίχως αλλαγή προσήμου (μπλε χρώμα) και με αλλαγή προσήμου (πράσινο χρώμα), αντίστοιχα. Με κόκκινο χρώμα διακρίνουμε σπιν triplet καταστάσεις συμμετρίας p , όπου $p_{\pm}(\mathbf{k}) = \sin k_x \pm i \sin k_y$ δίχως κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi. Στις περιοχές με λευκό χρώμα η λύση που βρίσκουμε είναι μη-υπεραγωγίμη.

Κεφάλαιο 7

Συμπεράσματα

Στα πλαίσια της διατριβής, αναπτύχθηκε περαιτέρω το θεωρητικό πλαίσιο για την μελέτη του ανταγωνισμού και της συνύπαρξης ενός, εν γένει, αυθαίρετου αριθμού κβαντικών καταστάσεων συμπυκνωμένης ύλης. Ξεκινώντας από μια ενεργό Χαμιλτονιανή θεωρία και εφαρμόζοντας μια προσέγγιση μέσου-πεδίου δείξαμε πώς μπορούμε να κατηγοριοποιήσουμε όλα τα πιθανά συμπυκνώματα και να τα μελετήσουμε, επί ίσοις όροις, μέσω ενός σπινοριακού φορμαλισμού. Αναπτύχθηκαν τα κατάλληλα εργαλεία για τον αριθμητικό προσδιορισμό του διαγράμματος φάσης των συμπυκνωμάτων αυτών καθώς και για τον αυτοσυνεπή υπολογισμό πειραματικά μετρήσιμων μεγεθών τα οποία μπορούν να χρησιμεύσουν ως μέσο αναγνώρισης μιας πιθανής συνύπαρξης σε ένα πραγματικό υλικό. Η επιτυχής εφαρμογή των εργαλείων αυτών σε συγκεκριμένα προβλήματα αποδεικνύει ότι είναι εφικτή η συστηματική μελέτη πολυφασικών καταστάσεων.

Πιο συγκεκριμένα, η θεωρία εφαρμόστηκε σε δυο περιπτώσεις συνύπαρξης οι οποίες συναντώνται πολύ συχνά στα διαγράμματα φάσης πλειάδας υλικών ισχυρά συσχετισμένων φορέων. Η πρώτη περίπτωση περιλαμβάνει τα υπεραγωγία μη συμβατικά συμπυκνώματα $d_{x^2-y^2}$ σπιν singlet και π -σπιν triplet καθώς και το συμπύκνωμα ηλεκτρονίου-οπής γνωστό ως Κύμα Πυκνότητας Σπιν. Η δεύτερη περίπτωση όπου μελετήθηκε είναι η συνύπαρξη Κυμάτων Πυκνότητας Φορτίου/Σπιν και απεντοπισμένου σιδηρομαγνητισμού (ή σιδηρομαγνητισμού μπάντας). Όπως αποδεικνύουν οι αναλυτικοί και οι αριθμητικοί υπολογισμοί στην παρούσα διατριβή, παρουσία ηλεκτρονίου-οπής οι καταστάσεις αυτές αναγκαστικά συνυπάρχουν, σχηματίζοντας έτσι ένα μοτίβο από συμπυκνώματα.

Κατά την μελέτη της επίδρασης ενός μαγνητικού πεδίου στο μοτίβο φάσεων $dSC + \pi SC + SDW$, ανακαλύψαμε δυο νέες οικογένειες H-T διαγραμμάτων φάσης τα οποία εν δυνάμει μπορούν να παρατηρηθούν σε όλους τους αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς. Τα διαγράμματα φάσης αυτά περιέχουν νέες μεταβάσεις φάσης επαγόμενες από το πεδίο οι οποίες φέρουν τα χαρακτηριστικά των FFLO φάσεων, ωστόσο αφορούν μεταβάσεις είτε από συνύπαρξη $dSC + SDW$ ή από καθαρή $d_{x^2-y^2}$ υπεραγωγιμότητα σε μια κατάσταση όπου και

οι τρεις καταστάσεις τάξης συνυπάρχουν οδηγώντας έτσι στην εμφάνιση μιας νέας ανομοιογενούς σύνθετης κατάστασης της ύλης. Η μετάβαση στην φάση συνύπαρξης, βοηθά τον υπεραγωγό να επιζήσει πάνω από το προβλεπόμενο όριο Pauli, σε αναλογία με την θεωρία των FFLO. Ακόμη, υπολογίσαμε αυτοσυνεπώς για πρώτη φορά την εξάρτηση της μαγνητικής επιδεκτικότητας και του ρυθμού επανάπαυσης σπιν-πλέγματος από το μαγνητικό πεδίο, την θερμοκρασία και τη νόθευση για ένα σύστημα στο οποίο συνυπάρχουν οι καταστάσεις αυτές, προτείνοντας έτσι έναν τρόπο πειραματικής ανίχνευσής τους.

Αξίζει να σημειώσουμε ότι μέχρι την δημοσίευση των αποτελεσμάτων μας, η FFLO θεωρία αποτελούσε τον μοναδικό μηχανισμό εμφάνισης ανομοιογενούς υπεραγωγιμότητας πέρα από το όριο Pauli, για πάνω από 40 χρόνια. Η υποχρεωτική επαγωγή και αντισιδηρομαγνητισμού τύπου SDW μόνο μέσα στην επαγόμενη υπεραγώγιμη φάση αποτελεί πρόβλεψη μόνο της θεωρίας της παρούσας διατριβής. Αξιοσημείωτο είναι ότι μεγάλο μέρος των αποτελεσμάτων της παρούσας μελέτης επιβεβαιώθηκαν πειραματικά στο υλικό CeCoIn_5 , ο οποίος μέχρι το 2008 θεωρούνταν ένας πρότυπος FFLO υπεραγωγός. Λόγω της γενικότητας της προσέγγισής μας, τα αποτελέσματά μας ενδέχεται να βρίσκουν εφαρμογή σε όλα τα υλικά τα οποία είναι υποψήφιοι FFLO υπεραγωγοί. Ακόμη, αναμένουμε στα επόμενα χρόνια όπου τα εργαστηριακά προσβάσιμα μαγνητικά πεδία θα είναι μεγαλύτερα, να παρατηρηθούν τέτοιου είδους μεταβάσεις και σε ακόμη περισσότερους αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς, όπως π.χ. τα οξειδία του χαλκού ή τα πνικτίδια του σιδήρου.

Η μελέτη της συνύπαρξης του μοτίβου $CDW + SDW + FM$ παρήγαγε επίσης μια σειρά από νέα αποτελέσματα. Όπως δείχτηκε, κάτω από πολύ γενικές συνθήκες, η εφαρμογή ενός μαγνητικού πεδίου σε ένα υλικό του οποίου η θεμελιώδης κατάσταση είναι ένα CDW μπορεί να οδηγήσει σε μια σειρά μεταμαγνητικών μεταβάσεων «διπλού σκαλοπατιού» η οποία συνοδεύεται από την εμφάνιση του μοτίβου συνύπαρξης. Η μετάβαση στην φάση αυτή, σηματοδοτεί την εμφάνιση ενός SDW, λόγω του πεδίου Zeeman αποτελώντας έτσι έναν πρωτότυπο μηχανισμό επαγωγής κυμάτων πυκνότητας σπιν από το πεδίο ο οποίος δεν προϋποθέτει μονοδιάστατες τοπολογίες και την ύπαρξη τροχιακών φαινομένων. Ακόμη, μέσω της επαγωγής του μοτίβου συνύπαρξης, η CDW κατάσταση μπορεί να επιζήσει πάνω από το προβλεπόμενο όριο Pauli, ενώ όπως αποδεικνύουν οι λεπτομερείς αριθμητικοί υπολογισμοί μας, η επαγωγή του μοτίβου συνύπαρξης είναι ενεργειακά πιο συμφέρουσα από την εμφάνιση ενός επαγόμενου CDW τύπου FFLO, σε αναλογία με τα ευρήματά μας για τους αντισιδηρομαγνητικούς υπεραγωγούς. Ωστόσο, για πολύ ισχυρά πεδία και χαμηλές θερμοκρασίες, είναι δυνατή η εμφάνιση μιας ασύμμετρης φάσης τύπου FFLO, στην οποία όμως συνυπάρχουν και οι τρεις καταστάσεις τάξης. Τα αποτελέσματα αυτά υποδεικνύουν ότι η παρατήρηση μεταμαγνητικών μεταβάσεων «διπλού σκαλοπατιού» και μεταβάσεων τύπου FFLO σε μονωτές CDW ουσιαστικά είναι δυο όψεις του ίδιου νομίσματος και πηγάζουν από την ιδιαίτερη σύζευξη μεταξύ των βαθμών ελευθερίας φορτίου και σπιν στα υλικά αυτά. Επίσης, προτείναμε

μία πειραματική υπογραφή της θεωρίας μας, υπολογίζοντας αυτοσυνεπώς την οπτική μαγνητοαγωγιμότητα του συστήματος αυτού. Τέλος, αναδείξαμε ένα ιδιαίτερο χαρακτηριστικό που προκύπτει από την αλληλεπίδραση των συμπυκνωμάτων αυτών, το οποίο είναι η λεγόμενη «τήξη» μιας ισχυρής μονωτικής κατάστασης από ένα μαγνητικό πεδίο το οποίο αντιστοιχεί σε τάξεις μεγέθους μικρότερη ενέργεια, οδηγώντας έτσι στο φαινόμενο της κολοσσιαίας μαγνητοαντίστασης. Όπως δείξαμε, ανάλογα με την ισχύ των ενεργών αλληλεπιδράσεων στο κάθε κανάλι συμμετρίας, το φαινόμενο αυτό μπορεί να αναπαραχθεί σε κάποιο βαθμό από την θεωρία μας. Πράγματι, σχετικοί αυτοσυνεπείς υπολογισμοί της μαγνητοαντίστασης αποδεικνύουν ότι ένα μαγνητικό πεδίο μπορεί να επιφέρει τάξης μεγέθους μεταβολή στην αντίσταση του συστήματος κατά την μετάβαση στην φάση συνύπαρξης.

Στο δεύτερο μέρος της διατριβής μελετήσαμε συστηματικά το υπεραγωγίμο χάσμα των νεοανακαλυφθέντων υπεραγωγών πνικτιδίων του σιδήρου, μέσω ρεαλιστικών πολυζωνικών αριθμητικών υπολογισμών από την σκοπιά μιας φωνονικής θεωρίας. Τα αποτελέσματά μας συνιστούν μια πρωτότυπη θεωρητική πρόταση για την κατανόηση της συμμετρίας της υπεραγωγίμης κατάστασης των υλικών αυτών. Έτσι, τα αντιφατικά πειραματικά αποτελέσματα τα οποία αναφέρουν ένα χάσμα το οποίο αλλάζει πρόσημο και παράλληλα ένα ισχυρό ισοτοπικό φαινόμενο, μπορούν να ερμηνευθούν εάν στα υλικά αυτά θεωρήσουμε ότι δρα μια αλληλεπίδραση ηλεκτρονίου-φωτονίου τύπου small-q. Όταν και οι τέσσερις ενεργειακές ζώνες τέμνουν την στάθμη Fermi, η λύση που βρίσκουμε μέσω του φωνονικού μηχανισμού αυτού, είναι υπεραγωγιμότητα συμμετρίας s_{\pm} δίχως κομβικά σημεία, η παρατήρηση της οποίας οποίας μέχρι τώρα θεωρείτο απόδειξη της δράσης του μηχανισμού των διακυμάνσεων του σπιν. Ανάλογα με τη νόθευση, το υπολογισμένο χάσμα μπορεί να εμφανίσει και κομβικά σημεία στην επιφάνεια Fermi, σε συμφωνία με σχετικά πειράματα. Οι λύσεις που βρίσκουμε συμπεριλαμβάνουν τη νηματική $s_{\pm} + d_{x^2-y^2}$ στην νοθευμένη με οπές περιοχή ενώ $d_{x^2-y^2}$ ή ακόμα και p σπιν triplet συμμετρίες στην νοθευμένη με ηλεκτρόνια περιοχή.

Από όσο γνωρίζουμε, είναι η πρώτη φορά που υπεραγωγιμότητα σπιν triplet αναπαράγεται μέσω ενός φωνονικού μηχανισμού σε ένα δισδιάστατο σύστημα. Σύντομα μετά την δημοσίευση της εργασίας μας η κατάσταση αυτή φαίνεται να παρατηρήθηκε στο LiFeAs. Η μελέτη μας ειδικά για το υλικό αυτό, υποδεικνύει ότι το LiFeAs είναι ένας φωνονικός υπεραγωγός ο οποίος λόγω της αλληλεπίδρασης small-q και της ιδιαίτερης επιφάνειας Fermi του, εμφανίζει ένα χάσμα στο οποίο οι συμμετρίες s , s_{\pm} και p_{\pm} είναι σχεδόν εκφυλισμένες ενεργειακά. Μικρές διακυμάνσεις στην νόθευση καθιστούν μία από αυτές την ενεργειακά σταθερή, κάτι που εξηγεί την πληθώρα των αλληλοαντικρουόμενων πειραματικών αποτελεσμάτων για το υλικό αυτό. Συνολικά, τα αποτελέσματά μας δείχνουν ότι μια σειρά ανεξήγητων παρατηρήσεων στα πνικτίδια μπορεί να ερμηνευτεί μέσω μιας φωνονικής θεωρίας, ενισχύοντας έτσι την άποψη ότι ο ρόλος των φωνονίων στην υπεραγωγιμότητα των υλικών αυτών είναι ιδιαίτερα σημαντικός.

Παράρτημα Α΄

Η ελεύθερη ενέργεια στον φορμαλισμό Nambu

Σε αυτήν την παράγραφο θα εξάγουμε έναν γενικό τύπο για την ελεύθερη ενέργεια ενός συστήματος όπου συνυπάρχει ένας αυθαίρετος αριθμός παραμέτρων τάξης, ξεκινώντας από το θεώρημα των Feynman-Hellman. Η απόδειξη που ακολουθεί είναι τελείως γενική, με μοναδική προϋπόθεση ότι δουλεύουμε σε μια προσέγγιση Μέσου-Πεδίου.

Α΄.1 Το θεώρημα Feynman-Hellman

Θεωρούμε ένα σύστημα το οποίο περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή

$$\hat{H}(\lambda) = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1 \quad (\text{Α΄.1})$$

όπου το λ είναι μια παράμετρος την οποία εισάγουμε αρχικά αυθαίρετα. Στην πράξη, η λ μπορεί να είναι το δυναμικό αλληλεπίδρασης μιας διαταραχής στην αρχική Χαμιλτονιανή ή ένα δυναμικό σύζευξης αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων. Η συνάρτηση επιμερισμού του προβλήματος γράφεται ως:

$$Z(\lambda) = e^{-\beta F(\lambda)} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}(\lambda)} \right\} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1)^n \right\}$$

όπου $F(\lambda)$ η ελεύθερη ενέργεια ως συναρτησιακό του λ . Η τελευταία έκφραση έχει μια ενδιαφέρουσα ιδιότητα αν την παραγωγίσουμε:

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z(\lambda)}{\partial \lambda} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} n \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1)^{n-1} \hat{H}_1 \right\} \\ &= -\beta \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \text{Tr} \left\{ (\hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1)^n \hat{H}_1 \right\} \\ &= -\beta \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}(\lambda)} \hat{H}_1 \right\} = -\frac{\beta Z(\lambda)}{\lambda} \langle \lambda \hat{H}_1 \rangle\end{aligned}$$

Σύμφωνα και με την εξ. A'.2 έχουμε:

$$\frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} = -\frac{1}{\beta Z(\lambda)} \frac{\partial Z(\lambda)}{\partial \lambda} \quad (\text{A'.2})$$

Από τις εξισώσεις A'.2 και A'.2 καταλήγουμε στην σχέση:

$$\frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \hat{H}_1 \rangle \quad (\text{A'.3})$$

από την οποία μετά από ολοκλήρωση καταλήγουμε στην κεντρική εξίσωση του θεωρήματος των Feynman-Hellman:

$$F = F_0 + \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \hat{H}_1 \rangle \quad (\text{A'.4})$$

όπου $F = F(\lambda = 1)$ είναι η ολική ελεύθερη ενέργεια και $F_0 = F(\lambda = 0)$ είναι η ελεύθερη ενέργεια του συστήματος με Χαμιλτιανή \hat{H}_0 . Το θεώρημα Feynman-Hellman δηλώνει ότι είναι δυνατός ο υπολογισμός της συνεισφοράς στην ελεύθερη ενέργεια ενός έξτρα όρου στην αρχική Χαμιλτονιανή ο οποίος είναι ανάλογος μιας μεταβλητής λ . Η ελεύθερη ενέργεια που συνεισφέρει αυτός ο όρος ισούται με τον μέσο όρο της αναμενόμενης τιμής του ως προς την μεταβλητή λ , καθώς αυτή αυξάνεται συνεχώς. Για παράδειγμα, το λ μπορεί να είναι το πλάτος ενός δυναμικού αλληλεπίδρασης, το οποίο «ανοίγουμε» με απειροστά βήματα μέχρι την τελική τιμή του. Η ιδέα μιας αλληλεπίδρασης η οποία αυξάνει από το μηδέν έως την μέγιστη τιμή της αδιαβατικά είναι ίδια με αυτήν της «αδιαβατικής συνέχειας» η οποία είναι ο ακρογωνιαίος λίθος για την θεωρία του υγρού Fermi [3].

A'.2 Ένα συμπύκνωμα

Ας ξεκινήσουμε με μια Χαμιλτονιανή Μέσου-πεδίου που περιγράφει ένα συμπύκνωμα $A_{\mathbf{k}}$. Σε φορμαλισμό Nambu αυτή γράφεται:

$$\begin{aligned} H &= H_0 - \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \\ H &= H_0 - \sum_{\mathbf{k},n} \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}') \right\} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \\ H &= H_0 - V_{\alpha} \sum_{\mathbf{k},n} \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k}'} p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}') \right\} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

όπου κατά τα γνωστά: $A_{\mathbf{k}} = \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k}'n} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}') \right\}$, και έχουμε χωρίσει το δυναμικό αλληλεπίδρασης σε ένα πλάτος $V_{\alpha} > 0$ και σε ένα κομμάτι εξαρτώμενο γενικά από την ορμή $p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}$, με $|p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}| \leq 1$. Με τον τρόπο αυτό, το V_{α} παίζει τον ρόλο της μεταβλητής λ του θεωρήματος F-H. Έχουμε τότε:

$$\begin{aligned} \delta F &= - \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha} \frac{1}{V'_{\alpha}} \left\langle V'_{\alpha} \sum_{\mathbf{k},n} \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k}'} p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}') \right\} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \right\rangle \\ \delta F &= - \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha} \frac{1}{V'_{\alpha}} \sum_{\mathbf{k},n} \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}') \right\} \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A'.5})$$

$$\delta F = - \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha} \frac{1}{V'_{\alpha}} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \rangle \quad (\text{A'.6})$$

Όμως: $\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{T}{h} \sum_n \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\}$, άρα: $A_{\mathbf{k}'} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \rangle$ ή αλλιώς: $\sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}$, όπου $\mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} = V_{\alpha}^{-1} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}$ ένα κατάλληλο, «αντίστροφο» δυναμικό¹. Έτσι τελικά έχουμε: $\langle \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\alpha} \Psi_{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}$, την οποία αν εισάγουμε στα παραπάνω παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \delta F &= - \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha} \frac{1}{V'_{\alpha}} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} = - \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha} \frac{1}{V'_{\alpha}{}^2} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \\ \delta F &= \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha}{}^{-1} \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} = \int_0^{V_{\alpha}} dV'_{\alpha}{}^{-1} A^2 \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \end{aligned}$$

¹η εισαγωγή του δυναμικού αυτού είναι απλά μια μαθηματική διευκόλυνση. Όπως θα δούμε παρακάτω, δεν χρειάζεται να το γνωρίζουμε, αφού στο τέλος απαλείφεται. Παρ' όλα αυτά, είναι εύκολο κάνοντας χρήση του θεωρήματος συνέλιξης και της μεταφορικής συμμετρίας του δυναμικού $V_{\alpha} p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}$, να δειχτεί ότι: $\mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} = V_{\alpha}^{-1} \mathcal{F}^{-1} \{1/\mathcal{F} \{p_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha}\}\}$

όπου θέσαμε: $A_{\mathbf{k}} = A g_{\mathbf{k}}$ με $|g_{\mathbf{k}}| \leq 1$, χωρίς βλάβη της γενικότητας. Στο σημείο αυτό χρησιμοποιούμε το γεγονός ότι η παράμετρος τάξης είναι μια συνάρτηση του V_{α} . Έτσι, σε μια τυχαία τιμή του V'_{α} το πλάτος της παραμέτρου τάξης είναι $A'(V'_{\alpha})$ και ισχύει: $A(V_{\alpha}) = A$ και $A'(0) = 0$. Μπορούμε τώρα να κάνουμε μια αλλαγή μεταβλητών στο παραπάνω ολοκλήρωμα ως εξής:

$$\delta F = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \int_0^{A(V_{\alpha})} dV'_{\alpha}{}^{-1} A^2(V'_{\alpha}) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \int_0^A A'^2 \frac{dV'_{\alpha}{}^{-1}}{dA'} dA'$$

Συνεχίζουμε ολοκληρώνοντας κατά μέλη:

$$\begin{aligned} \delta F &= \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \left[\frac{A'^2}{V_{\alpha}} \right]_0^A - 2 \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \int_0^A A' \frac{1}{V_{\alpha}} dA' \\ \delta F &= \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \frac{A^2}{V_{\alpha}} - 2 \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} g_{\mathbf{k}'} \mathcal{P}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} \int_0^A A' \frac{1}{V_{\alpha}} dA' \end{aligned}$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις που εξάγαμε στην αρχή του υπολογισμού:

$$\begin{aligned} \delta F &= \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} - 2 \frac{1}{h} \int_0^A T \sum_{\mathbf{k},n} g_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} dA' \\ \delta F &= \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} - \frac{2}{h} T \sum_{\mathbf{k},n} \int_0^{A_{\mathbf{k}}} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} dA'_{\mathbf{k}} \\ \delta F &= \sum_{\mathbf{k}} A_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} A_{\mathbf{k}'} \mathcal{V}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha} - \frac{2}{h} T \sum_{i\omega_n} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A=0}} \right\} \\ \delta F &= \frac{1}{h} T \sum_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A=0}} \right\} \quad (\text{A'.7}) \end{aligned}$$

Η Εξ.(A'.7) δίνει την διαφορά στην ελεύθερη ενέργεια που επέρχεται στο σύστημα αν αυτό μεταβεί σε μια κατάσταση τάξης με παράμετρο τάξης $A_{\mathbf{k}}$ η οποία προκαλείται από ένα γενικευμένο, μη-διαχωρίσιμο ενεργό δυναμικό. Μπορούμε εύκολα να διαβάσουμε την ελεύθερη ενέργεια για την κανονική κατάσταση:

$$F_0 = -\frac{2}{h} T \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A=0} \right\} \quad (\text{A'.8})$$

και αντίστοιχα για την συμπυκνωμένη φάση:

$$F = \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \ln \hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} \quad (\text{A'.9})$$

A'.3 Πολλά συμπυκνώματα: το πρόβλημα συνύπαρξης

Υπάρχει ένας συστηματικός τρόπος για τον υπολογισμό της μεταβολής της ελεύθερης ενέργειας στην περίπτωση που ένα δεύτερο συμπύκνωμα (B) συνυπάρχει με το A . Ας υποθέσουμε ότι η Χαμιλτονιανή H'_0 περιέχει τον όρο για το συμπύκνωμα $A_{\mathbf{k}}$, δηλαδή: $H'_0 = H_0 + H$. Σύμφωνα με τα προηγούμενα, μπορούμε να προσθέσουμε σε αυτή την Χαμιλτονιανή έναν όρο: $H'_1 = \sum_{\mathbf{k}} B_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b} \Psi_{\mathbf{k}}$ και ακολουθώντας ακριβώς την ίδια μέθοδο με προηγουμένως να καταλήξουμε στην έκφραση:

$$\delta F' = F' - F = \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} B_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{b} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{B=0}} \right\}$$

Εισάγοντας την Εξ.(A'.9) έχουμε:

$$F' = \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} + \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} B_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{b} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\}$$

Η διαφορά $F' - F_0$ για δυο συνυπάρχοντα συμπυκνώματα είναι:

$$F' - F_0 = \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} + \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} B_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{b} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A=0, B=0}} \right\} \quad (\text{A'.10})$$

Η Εξ.(A'.10) μπορεί να γενικευτεί για αυθαίρετο αριθμό συμπυκνωμάτων:

$$F_c - F_0 = \sum_i \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} A_{\mathbf{k}}^i \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha}_i \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A(i,\nu_i)=0}} \right\} \quad (\text{A'.11})$$

Ο πρώτος όρος της παραπάνω εξίσωσης είναι ο όρος κενού που συναντήσαμε στην αρχή της διατριβής.

Η περίπτωση του διαχωρίσιμου δυναμικού

Για ένα διαχωρίσιμο δυναμικό ισχύουν οι σχέσεις: $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V f_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}'}$, $A_{\mathbf{k}} = A f_{\mathbf{k}}$, όπου $f_{\mathbf{k}}$ είναι ο παράγοντας δομής. Κατά συνέπεια, η εξίσωση αυτοσυνέπειας για το $A_{\mathbf{k}}$ παίρνει την μορφή: $\frac{A}{V_{\alpha}} = \frac{T}{h} \sum_{\mathbf{k}'n} f_{\mathbf{k}'} \text{Tr} \left\{ \hat{\alpha} \hat{G}(i\omega_n, \mathbf{k}') \right\}$, την οποία όταν την εισάγουμε στην Εξ.(A'.11) παίρνουμε:

$$F_c - F_0 = \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{A(i,\nu_i)=0}} \right\} \quad (\text{A'.12})$$

Άθροιση στις συχνότητες Matsubara

Χρησιμοποιώντας την Εξ.(3.12) μπορούμε να γράψουμε:

$$\begin{aligned} F_c - F_0 &= \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}}) \hat{U}_{\mathbf{k}}}{\hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger}(i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}}) \hat{U}_{\mathbf{k}}|_{A(i,\nu_i)=0}} \right\} \\ F_c - F_0 &= \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_{\mathbf{k},n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{(i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}})}{(i\omega_n - \hat{D}_{\mathbf{k}})|_{A(i,\nu_i)=0}} \right\} \\ F_c - F_0 &= \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_j \sum_{\mathbf{k},n} \ln \left[\frac{i\omega_n - E_j(\mathbf{k})}{i\omega_n - \epsilon_j(\mathbf{k})} \right] \\ F_c - F_0 &= \sum_i \frac{A_i^2}{V_i} - \frac{2T}{h} \sum_j \sum_{\mathbf{k}} \ln \frac{1 + e^{-\beta E_j(\mathbf{k})}}{1 + e^{-\beta \epsilon_j(\mathbf{k})}} \end{aligned} \quad (\text{A'.13})$$

όπου έχουμε χρησιμοποιήσει την γνωστή σχέση: $T \sum_{i\omega_n} \ln(i\omega_n - E) = T \ln(1 + e^{-\beta E})$.

A'.4 Έκφραση για πολυζωνικό σύστημα

Θα βρούμε την έκφραση της ελεύθερης ενέργειας την οποία χρησιμοποιούμε στους υπολογισμούς του Κεφ.6. Όπως είδαμε στο κεφάλαιο αυτό, η φύση του ενεργού δυναμικού της θεωρίας small-q, μας επέτρεψε να προσεγγίσουμε την γενική Εξ.(6.1) με αυτή της Εξ.(6.4), δηλαδή να θέσουμε $n = n'$. Πηγαίνοντας αντίστροφα, είναι εύκολο να δειχτεί ότι η τελευταία εξίσωση πηγάζει από την εφαρμογή της θεωρίας μέσου-πεδίου στην ενεργή αλληλεπίδραση της μορφής:

$$\frac{1}{2} \sum_n \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{s_1, \dots, s_4} c_{\mathbf{k}, s_1, n}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}, s_2, n}^{\dagger} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{-\mathbf{k}', s_3, n} c_{\mathbf{k}', s_4, n}$$

απλά ακολουθώντας τα βήματα του Κεφ.2.1 με γενικευμένες παραμέτρους τάξης:

$$\Delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}, s_1, s_2} = - \sum_{\mathbf{k}'} \sum_{s_3, s_4} \sum_n V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle c_{-\mathbf{k}', s_3, n} c_{\mathbf{k}', s_4, n} \rangle \quad (\text{A'.14})$$

Το γεγονός ότι η υπεραγωγιμότητα προέρχεται από σύζευξη στην ίδια μπάντα σημαίνει ότι η γενική Χαμιλτονιανή μέσου-πεδίου είναι διαγώνια στους δείκτες των μπαντών. Κατά συνέπεια, στον σπινωριακό φορμαλισμό του Κεφ.2.1, η εξίσωση αυτοσυνέπειας για το υπεραγώγιμο χάσμα μπορεί να γραφτεί αμέσως με την βοήθεια της Εξ.(3.8) ως:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^\alpha = -\frac{1}{h} T \sum_n \sum_{\mathbf{k}', i\omega_n} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \text{Tr} \left\{ \hat{a} \hat{G}_n(\mathbf{k}', i\omega_n) \right\} \quad (\text{A'.15})$$

με $\hat{G}_n(\mathbf{k}', i\omega_n) = [i\omega_n - \xi_n(\mathbf{k}) - \Delta_{\mathbf{k}}^\alpha \hat{a}]^{-1}$. Παρόμοια περίπτωση συναντήσαμε και την ενότητα 5.1.1 όπου εκεί η Χαμιλτονιανή ήταν διαγώνια στους δείκτες σπιν. Ακολουθώντας τα ίδια βήματα με προηγουμένως εύκολα καταλήγουμε στην έκφραση της ελεύθερης ενέργειας για την περίπτωση μας:

$$\delta F = \frac{T}{h} \sum_n \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \Delta_{\mathbf{k}}^\alpha \text{Tr} \left\{ \hat{a} \hat{G}_n(i\omega_n, \mathbf{k}) \right\} - \frac{2T}{h} \sum_n \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \ln \frac{\hat{G}_n^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})}{\hat{G}_n^{-1}(i\omega_n, \mathbf{k})|_{\Delta_{\mathbf{k}}^\alpha=0}} \right\} \quad (\text{A'.16})$$

Δεδομένου ότι οι λύσεις που μελετώνται στο συγκεκριμένο Κεφάλαιο είναι υπεραγώγιμες καταστάσεις με μηδενική συνολική ορμή κέντρου μάζας, η ελεύθερη ενέργεια παίρνει την τελική μορφή:

$$\delta F = \sum_{\mathbf{k}, n} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}}|^2}{2\sqrt{\xi_n^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi_n^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}}{2T} - T \sum_{\mathbf{k}, n, \pm} \ln \frac{1 + e^{\pm\beta\sqrt{\xi_n^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}}}{1 + e^{\pm\beta\xi_n(\mathbf{k})}} \quad (\text{A'.17})$$

όπου έχουμε συμπεριλάβει και την πιθανότητα η παράμετρος τάξης να είναι μιγαδική [4, 5]. Για παράδειγμα, μια τέτοια περίπτωση προκύπτει αν το χάσμα είναι p συμμετρίας δίχως κομβικά σημεία: $f_{\mathbf{k}} = \sin k_x \pm i \sin k_y$.

Παράρτημα Β'

Φασματική αναπαράσταση της γενικευμένης επιδεικτικότητας

Θα χρησιμοποιήσουμε την φασματική αναπαράσταση [41] για να υπολογίσουμε το άθροισμα στις συχνότητες Matsubara:

$$\chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, iq_n) = T \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iq_n) \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \quad (\text{B'.1})$$

Όπως είδαμε, η φασματική συνάρτηση της $\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n)$ σε σπινωριακό φορμαλισμό είναι:

$$\hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\hat{A}(\mathbf{k}, \omega)}{i\omega_n - \omega} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{i\omega_n - \omega} \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \hat{U}_{\mathbf{k}} \quad (\text{B'.2})$$

Αντίστοιχα, για την $\hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iq_n)$ ισχύει:

$$\hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iq_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{i\omega_n + iq_n - \epsilon} \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (\text{B'.3})$$

Μπορούμε τώρα να υπολογίσουμε το άθροισμα:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k}, iq_n) &= T \sum_{i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{G}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iq_n) \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \\ &= T \sum_{i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\mu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\epsilon}{i\omega_n + iq_n - \epsilon} \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{i\omega_n - \omega} \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \hat{U}_{\mathbf{k}} \right\} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu} \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \hat{U}_{\mathbf{k}} \right\} T \sum_{i\omega_n} \frac{1}{i\omega_n - \omega} \frac{1}{i\omega_n + iq_n - \epsilon} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \left\{ \hat{U}_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu} \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{iq_n + \omega - \epsilon} \end{aligned}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{iq_n + \omega - \epsilon} \quad (\text{B'.4})$$

όπου:

$$\hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} = \hat{U}_{\mathbf{k}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\dagger} \quad , \quad \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} = \hat{U}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\nu} \hat{U}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \quad (\text{B'.5})$$

Αναλυτική συνέχιση του παραπάνω αποτελέσματος με την βοήθεια του τύπου του Cauchy μας οδηγεί στις εξής εκφράσεις:

$$\begin{aligned} S(\mathbf{k}, q + i\delta) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{q + \omega - \epsilon + i\delta} \\ &= \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{q + \omega - \epsilon} \\ &- i\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} (n_F(\omega) - n_F(\epsilon)) \delta(q + \omega - \epsilon) \end{aligned}$$

Άρα τελικά, καταλήγουμε στους εξής γενικούς τύπους για το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της γενικευμένης δυναμικής επιδεκτικότητας στην φασματική αναπαράσταση:

$$\begin{aligned} \Re \{ \chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, q) \} &= \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \\ &\quad \times \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{q + \omega - \epsilon} \quad (\text{B'.6}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Im \{ \chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, q) \} &= -\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} \\ &\quad \times (n_F(\omega) - n_F(\epsilon)) \delta(q + \omega - \epsilon) \quad (\text{B'.7}) \end{aligned}$$

Εύκολα μπορεί να αποδείξει κανείς την εξής ταυτότητα:

$$\text{Tr} \left\{ \hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu} \hat{\Delta}(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^i, \epsilon) \hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu} \hat{\Delta}(\mathbf{k}, \omega) \right\} = \sum_i \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^i) \sum_j a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \quad (\text{B'.8})$$

με a_{ij}^{μ} το (i, j) στοιχείο του πίνακα $\hat{A}_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\mu}$ και a_{ji}^{ν} το (j, i) στοιχείο του πίνακα $\hat{A}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\nu}$. Χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση, έχουμε:

$$\begin{aligned} \Re \{ \chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, q) \} &= \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{\mathbf{k}} \sum_i \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^i) \sum_j a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \\ &\quad \times \frac{n_F(\omega) - n_F(\epsilon)}{q + \omega - \epsilon} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \sum_{\mathbf{k}} \sum_i \sum_j a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(\epsilon)}{q + E_{\mathbf{k}}^i - \epsilon} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i,j} a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} \frac{n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)}{q + E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j} \quad (\text{B'.9})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Im m \{ \chi_{\mu\nu}(\mathbf{q}, q) \} &= -\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \sum_{\mathbf{k}} \sum_i \delta(\omega - E_{\mathbf{k}}^i) \sum_j a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} \delta(\epsilon - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \\
 &\quad \times (n_F(\omega) - n_F(\epsilon)) \delta(q + \omega - \epsilon) \\
 &= -\pi \sum_{\mathbf{k}} \sum_{i,j} a_{ij}^{\mu} a_{ji}^{\nu} (n_F(E_{\mathbf{k}}^i) - n_F(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j)) \delta(q + E_{\mathbf{k}}^i - E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^j) \quad (\text{B'.10})
 \end{aligned}$$

Β'.1 Τελεστής ρεύματος

Θα εκφράσουμε τον τελεστή ρεύματος: $\mathbf{j}_{\mu}(\mathbf{q}, \tau) = -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\tau) \nabla_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{E}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(\tau)$ στον χώρο Matsubara:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{j}_{\mu}(\mathbf{q}, iq_n) &= -\frac{e}{2} \int_0^{\beta} d\tau e^{iq_n\tau} \sum_{\mathbf{k}} T \sum_{i\omega_n} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(i\omega_n) e^{i\omega_n\tau} \nabla_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{E}_{\mathbf{k}} T \sum_{i\alpha_n} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(i\alpha_n) e^{-i\alpha_n\tau} \\
 &= -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k}} T \sum_{i\omega_n} \Psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(i\omega_n) \nabla_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{E}_{\mathbf{k}} T \sum_{i\alpha_n} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(i\alpha_n) \delta_{\alpha_n, q_n + \omega_n} \\
 &= -\frac{e}{2} T \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \Psi^{\dagger}(\mathbf{k}, i\omega_n) \nabla_{\mathbf{k}}^{\mu} \hat{E}_{\mathbf{k}} \Psi(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n + iq_n) \quad (\text{B'.11})
 \end{aligned}$$

Η παραπάνω έκφραση μπορεί να γραφτεί σε τετραδιανυσματικό συμβολισμό ως:

$$\mathbf{j}_{\mu}(\tilde{\mathbf{q}}) = -\frac{e}{2} \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi^{\dagger}(\tilde{\mathbf{k}}) \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^{\mu} \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \quad (\text{B'.12})$$

όπου $\tilde{\mathbf{k}} = (\mathbf{k}, i\omega_n)$, $\tilde{\mathbf{q}} = (\mathbf{q}, iq_n)$, $\sum_{\tilde{\mathbf{k}}} = T \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n}$. Τα παραπάνω γενικεύονται εύκολα και για ποσότητες με δείκτη σπιν.

Β'.2 Θεώρημα Wick σε σπινωριακό φορμαλισμό

Συχνά στην πορεία της διατριβής, απαντώνται συναρτήσεις συσχέτισης που αποτελούνται από γινόμενο τεσσάρων τελεστών (σπινόρων) δημιουργίας/καταστροφής. Θα δείξουμε εδώ πώς μπορούμε, χρησιμοποιώντας το θεώρημα του Wick [34, 41], να καταλήξουμε σε μια τελική μορφή η οποία είναι γινόμενο συναρτήσεων Green. Ας ξεκινήσουμε από μια συνάρτηση συσχέτισης με χωρικά ισοτροπική κομβική συνάρτηση (vertex function): $\hat{\gamma}$. Ακόμη, θα υ-

ποθέσουμε την γενική περίπτωση όπου οι σπίνορες διακρίνονται και με έναν ακόμη χβαντικό αριθμό, έστω n, n', λ, μ αντίστοιχα. Τότε έχουμε:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \Psi_n^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \hat{\gamma} \Psi_{n'}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \Psi_\lambda^\dagger(\tilde{\mathbf{k}'}) \hat{\gamma} \Psi_\mu(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{q}}) \rangle \\
 &= (-1)^3 \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \hat{\gamma} \Psi_{n'}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \Psi_\lambda^\dagger(\tilde{\mathbf{k}'}) \hat{\gamma} \Psi_\mu(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{q}}) \Psi_n^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle \\
 &= - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \hat{\gamma} \langle T_\tau \Psi_{n'}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \Psi_\lambda^\dagger(\tilde{\mathbf{k}'}) \rangle \hat{\gamma} \langle T_\tau \Psi_\mu(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{q}}) \Psi_n^\dagger(\tilde{\mathbf{k}}) \rangle \\
 &= - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma} \hat{G}_{n'\lambda}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}'}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \hat{\gamma} \hat{G}_{\mu n}(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}}} \right\} \\
 &= - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{Tr} \left\{ \hat{\gamma} \hat{G}_{n'}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \hat{\gamma} \hat{G}_n(\tilde{\mathbf{k}}) \right\} \quad (\text{B'.13})
 \end{aligned}$$

Οι έξτρα χβαντικοί αριθμοί, μπορούν να προκύψουν σε προβλήματα όπου το υλικό που μελετάμε είναι πολυζωνικό, όπως π.χ. στην περίπτωση των πνικτιδίων. Για μονοζωνικό σύστημα, αρκεί να θέσουμε: $n = n' = 1$.

Ανάλογη μορφή έχουν και οι πράξεις για κομβική συνάρτηση εξαρτώμενη από την ορμή, οι οποίες συναντώνται στον υπολογισμό της αγωγιμότητας:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\mathbf{q}, iq_n) &= \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\tilde{\mathbf{q}}) = - \langle T_\tau j_\mu^p(\tilde{\mathbf{q}}) j_\nu^p(-\tilde{\mathbf{q}}) \rangle = - \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}}^\dagger \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\dagger \nabla_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}'}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}}} \rangle \\
 &= -(-1)^3 \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\dagger \nabla_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}'}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}}^\dagger \rangle \\
 &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}} \langle T_\tau \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\dagger \rangle \nabla_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}'}} \langle T_\tau \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}}} \Psi_{\tilde{\mathbf{k}}}^\dagger \rangle \\
 &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \text{Tr} \left\{ \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}} \hat{G}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}'}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \nabla_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}'}} \hat{G}(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}}} \right\} \\
 &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}} \text{Tr} \left\{ \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}} \hat{G}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}) \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}} \hat{G}(\tilde{\mathbf{k}}) \right\} \quad (\text{B'.14})
 \end{aligned}$$

$$\Pi_{\mu\nu}^{CC}(0, iq_n) = \sum_{\mathbf{k}, i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \nabla_{\mathbf{k}}^\mu \hat{E}_{\mathbf{k}} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n + iq_n) \nabla_{\mathbf{k}}^\nu \hat{E}_{\mathbf{k}} \hat{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \quad (\text{B'.15})$$

Εύκολα οι παραπάνω πράξεις γενικεύονται και για ποσότητες εξαρτώμενες από το σπιν:

$$\begin{aligned}
 \Pi_{\mu\nu}^{CC}(\mathbf{q}, iq_n) &= \sum_{\tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}'}, \sigma, \sigma'} \text{Tr} \left\{ \nabla_{\tilde{\mathbf{k}}}^\mu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}}, \sigma} \hat{G}_{\sigma\sigma'}(\tilde{\mathbf{k}} + \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}'}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}+\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}'}} \nabla_{\tilde{\mathbf{k}'}}^\nu \hat{E}_{\tilde{\mathbf{k}'}, \sigma'} \hat{G}_{\sigma\sigma'}(\tilde{\mathbf{k}}' - \tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}}) \delta_{\tilde{\mathbf{k}}'-\tilde{\mathbf{q}}, \tilde{\mathbf{k}}} \delta_{\sigma\sigma'} \right\} \\
 \Pi_{\mu\nu}^{CC}(0, iq_n) &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i\omega_n} \text{Tr} \left\{ \nabla_{\mathbf{k}}^\mu \hat{E}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n + iq_n) \nabla_{\mathbf{k}}^\nu \hat{E}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) \right\} \quad (\text{B'.16})
 \end{aligned}$$

Β'.3 Στατική μαγνητική επιδεκτικότητα του αντισιδηρομαγνητικού υπεραγωγού

Για την κάθετη επιδεκτικότητα βρέθηκε η παρακάτω έκφραση:

$$\begin{aligned}
 \chi_{\perp} = & - \sum_{k'} \left\{ \frac{\left(-2 + \tanh^2\left(\frac{E_+(k')}{2T}\right) + \tanh^2\left(\frac{E_-(k')}{2T}\right)\right) \gamma_{k'}^2 \Delta_{k'}^2}{8T \left((M_{k'}^2 + \gamma_{k'}^2) \delta_{k'}^2 - 2M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} + (\gamma_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2\right)} \right. \\
 & + \frac{16 \tanh\left(\frac{E_-(k')}{2T}\right)}{E_-(k') \left(E_+(k')^2 - E_-(k')^2\right)^3} \times \left[M_{k'}^2 \delta_{k'}^2 \left(-\frac{E_+(k')^2 - E_-(k')^2}{4} + \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2\right) \right. \\
 & - 2M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \left(-\frac{E_+(k')^2 - E_-(k')^2}{4} + \gamma_{k'}^2 + \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2\right) \Pi_{k'} \\
 & + \left(\gamma_{k'}^4 - \gamma_{k'}^2 \left(\frac{E_+(k')^2 - E_-(k')^2}{4} - 2\Delta_{k'}^2\right) \right. \\
 & \left. \left. + \Delta_{k'}^2 \left(-\frac{E_+(k')^2 - E_-(k')^2}{4} + \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2\right)\right) \Pi_{k'}^2 \right] \\
 & + \frac{\tanh\left(\frac{E_+(k')}{2T}\right)}{4E_+(k')^3 \left(E_+(k')^2 - E_-(k')^2\right)^3} \\
 & \times \left[-E_+(k')^8 - 2E_+(k')^6 \left(\frac{5(E_+(k')^2 - E_-(k')^2)}{4} - M_{k'}^2 - 2\gamma_{k'}^2 \right. \right. \\
 & \left. \left. - 2\delta_{k'}^2 - 2\Delta_{k'}^2 - \Pi_{k'}^2\right) + E_-(k')^2 \left(M_{k'}^2 - \gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2\right) \right. \\
 & \cdot \left(M_{k'}^4 + \gamma_{k'}^4 + (\delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2)^2 + 8M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} + 2(\delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2 \right. \\
 & \left. + \Pi_{k'}^4 - 2\gamma_{k'}^2 (\delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2) + 2M_{k'}^2 (\gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2) \right) \\
 & - 3E_+(k')^4 (-3M_{k'}^4 + \gamma_{k'}^4 - 10\gamma_{k'}^2 \delta_{k'}^2 + \delta_{k'}^4 + 2\gamma_{k'}^2 \Delta_{k'}^2 + 2\delta_{k'}^2 \Delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^4 \\
 & - 8M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} + 2(\gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2 - 3\Pi_{k'}^4 - 2M_{k'}^2 (\gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 \\
 & + \Delta_{k'}^2 + 3\Pi_{k'}^2) + E_-(k')^2 (3M_{k'}^2 + \gamma_{k'}^2 + \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2 + 3\Pi_{k'}^2) + E_+(k')^2 \\
 & \cdot \left(-5(M_{k'}^2 - \gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2) \left(M_{k'}^4 + \gamma_{k'}^4 + (\delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2)^2 \right. \right. \\
 & \left. \left. + 8M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} + 2(\delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2 + \Pi_{k'}^4 - 2\gamma_{k'}^2 (\delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2) \right. \right. \\
 & \left. \left. + 2M_{k'}^2 (\gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2) \right) + E_-(k')^2 \left(3M_{k'}^4 - \gamma_{k'}^4 - (\delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2)^2 \right. \right. \\
 & \left. \left. + 8M_{k'} \delta_{k'} \Delta_{k'} \Pi_{k'} + 2(\delta_{k'}^2 - \Delta_{k'}^2) \Pi_{k'}^2 + 3\Pi_{k'}^4 - 2\gamma_{k'}^2 (-5\delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2 + \Pi_{k'}^2) \right. \right. \\
 & \left. \left. + 2M_{k'}^2 (\gamma_{k'}^2 - \delta_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2 + 3\Pi_{k'}^2) \right) \right) \left. \right\}
 \end{aligned}$$

(B'.17)

Παράρτημα Γ'

Ενδιάμεσοι υπολογισμοί

Γ'.1 Εξισώσεις κίνησης για την πυκνότητα φορτίου

Η Χαμιλτονιανή μπορεί να γραφτεί στην μορφή:

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{i, j} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \quad (\Gamma'.1)$$

και αντίστοιχα:

$$\partial_t \rho_{\mathbf{q}} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_l \left(\dot{\Psi}_{\mathbf{k}, \sigma_l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma_l} + \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_l}^\dagger \dot{\Psi}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma_l} \right)$$

Ο l -στός μεταθέτης της 1ης χρονικής παραγώγου στην παραπάνω εξίσωση υπολογίζεται ως:

$$\begin{aligned} \left[\Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger, H \right] &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i, j} \left[\Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger, \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \right] \\ &= - \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i, j} \left\{ \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \left[\Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j}, \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \right] + \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \left[\hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}}, \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \right] \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} + \left[\Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger, \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \right] \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \right\} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i, j} \left\{ \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \left(\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} - 2 \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \right) + \left(-2 \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \right) \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \right\} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i, j} \left\{ \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} - 2 \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} - 2 \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \right\} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i, j} \left\{ \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} - 2 \left\{ \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger, \Psi_{\mathbf{k}', \sigma'_l}^\dagger \right\} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_j} \right\} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i, j} \Psi_{\mathbf{k}, \sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i, j}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \end{aligned}$$

Όπου χρησιμοποιήθηκαν οι ταυτότητες: $[ABC, D] = AB[C, D] + A[B, D]C + [A, D]BC$,
 $[A, B] = \{A, B\} - 2BA$.

$$\begin{aligned}
 [\Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l}, H] &= \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} [\Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l}, \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j}] = - \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \left\{ \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} [\Psi_{\mathbf{k},\sigma_j}, \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l}] \right. \\
 &+ \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger [\hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}}, \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l}] \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} + [\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger, \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l}] \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \left. \right\} \\
 &= - \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \left\{ \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \left(-2\Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \right) + \left(-\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'} + 2\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} \right) \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \right\} \\
 &= - \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \left\{ -2\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} + 2\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \right\} \\
 &= - \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \left\{ -2\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} - \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} + 2\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \right\} \\
 &= \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'}
 \end{aligned}$$

Έτσι, τελικά έχουμε:

$$\begin{aligned}
 \dot{\rho}_{\mathbf{q}} &= -i\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}',\sigma',l} \left(- \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} + \Psi_{\mathbf{k}',\sigma'_l}^\dagger \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'} \right) \\
 &= i\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}',\sigma',l} \sum_{\mathbf{k},\sigma,i,j} \left(\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{jl} \delta_{\sigma\sigma'} \Psi_{\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma'_l} - \Psi_{\mathbf{k}',\sigma'_l}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_j} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'+\mathbf{q}} \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'} \right) \\
 &= i\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{i,j} \left(\Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma_j} - \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},i,j} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma_j} \right) \\
 &= i\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \sum_{i,j} \Psi_{\mathbf{k},\sigma_i}^\dagger \left(\hat{E}_{\mathbf{k}_{i,j}} - \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},i,j} \right) \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma_j} \\
 &= i\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \left(\hat{E}_{\mathbf{k}} - \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} \right) \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}
 \end{aligned}$$

όπου εννοείται ότι $\hat{E}_{\mathbf{k}} = \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma}$. Επιστρέφοντας στην εξίσωση συνέχειας έχουμε:

$$\begin{aligned}
 i\mathbf{q} \cdot \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) - i\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \left(\hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} - \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \right) \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} &= 0 \\
 \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) &= \frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{\hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} - \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}}{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} = -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \frac{\hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} - \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma}}{\mathbf{q}} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \\
 \mathbf{j}(\mathbf{q}, t) &= -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \left[\nabla_{\mathbf{q}} \hat{E}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \right]_{\mathbf{q}=0} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} = -\frac{e}{2} \sum_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \nabla_{\mathbf{k}} \hat{E}_{\mathbf{k},\sigma} \Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma} \quad (\Gamma'.2)
 \end{aligned}$$

Γ'.2 Μετασχηματισμός Bogoliubov για το σύστημα CDW+SDW+FM

Από την Εξ.(5.10), μπορούμε να δούμε ότι οι παλιοί τελεστές δημιουργίας/καταστροφής c σχετίζονται με τους νέους μέσω των εξισώσεων:

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k},\sigma} &= u_{\mathbf{k},\sigma}^* \gamma_{\mathbf{k},\sigma} + v_{\mathbf{k},\sigma}^* \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} &= u_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} - v_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k},\sigma} \end{aligned} \quad (\Gamma'.3)$$

Θεωρώντας ότι οι όροι $u, v \in \mathbb{R}$ και παρατηρώντας ότι η $\hat{E}_{\mathbf{k}}$ είναι της γενικής μορφής: $\begin{pmatrix} a & b \\ b & \tilde{a} \end{pmatrix}$, έχουμε:

$$\begin{aligned} H &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} (u_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger + v_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger, u_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger - v_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger) \begin{pmatrix} a & b \\ b & \tilde{a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k},\sigma} + v_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \\ u_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} - v_{\mathbf{k},\sigma} \gamma_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left\{ (au_{\mathbf{k},\sigma}^2 - 2bu_{\mathbf{k},\sigma}v_{\mathbf{k},\sigma} + \tilde{a}v_{\mathbf{k},\sigma}^2) \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma} + (av_{\mathbf{k},\sigma}^2 + 2bu_{\mathbf{k},\sigma}v_{\mathbf{k},\sigma} + \tilde{a}u_{\mathbf{k},\sigma}^2) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \right. \\ &\quad \left. + \left(\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} + \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma} \right) (au_{\mathbf{k},\sigma}v_{\mathbf{k},\sigma} + bu_{\mathbf{k},\sigma}^2 - bv_{\mathbf{k},\sigma}^2 - \tilde{a}u_{\mathbf{k},\sigma}v_{\mathbf{k},\sigma}) \right\} \end{aligned} \quad (\Gamma'.4)$$

Προκειμένου ο μετασχηματισμός Bogoliubov να διαγωνοποιεί την Χαμιλτονιανή 5.6, ο τελευταίος όρος του δεξιού μέρους της παραπάνω εξίσωσης πρέπει να μηδενίζεται:

$$(a - \tilde{a}) u_{\mathbf{k},\sigma} v_{\mathbf{k},\sigma} + b (u_{\mathbf{k},\sigma}^2 - v_{\mathbf{k},\sigma}^2) = 0 \quad (\Gamma'.5)$$

Ακόμη, θέλουμε να ισχύει η σχέση που απορρέει από τις σχέσεις φερμιονικής αντιμετάθεσης: $u_{\mathbf{k},\sigma}^2 + v_{\mathbf{k},\sigma}^2 = 1$. Η παραμετρική επιλογή: $u_{\mathbf{k},\sigma} = \cos \theta_{\mathbf{k},\sigma}$ και $v_{\mathbf{k},\sigma} = \sin \theta_{\mathbf{k},\sigma}$ ικανοποιεί αυτή την συνθήκη. Έτσι, από την Εξ.(Γ'.5) οδηγούμαστε στην σχέση:

$$\tan(2\theta_{\mathbf{k},\sigma}) = -\frac{2b}{a - \tilde{a}} \Rightarrow \theta_{\mathbf{k},\sigma} = -\frac{1}{2} \arctan \frac{2b}{a - \tilde{a}} \quad (\Gamma'.6)$$

και καταλήγουμε στο σύστημα εξισώσεων:

$$u_{\mathbf{k},\sigma} v_{\mathbf{k},\sigma} = \frac{1}{2} \sin(2\theta_{\mathbf{k},\sigma}) = -\frac{b}{(a - \tilde{a}) \sqrt{1 + \frac{4b^2}{(a - \tilde{a})^2}}} \quad (\Gamma'.7)$$

$$u_{\mathbf{k},\sigma}^2 - v_{\mathbf{k},\sigma}^2 = \cos(2\theta_{\mathbf{k},\sigma}) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4b^2}{(a - \tilde{a})^2}}} \quad (\Gamma'.8)$$

$$u_{\mathbf{k},\sigma}^2 + v_{\mathbf{k},\sigma}^2 = 1 \quad (\Gamma'.9)$$

το οποίο έχει ως λύσεις:

$$u_{\mathbf{k},\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4b^2}{(a-\tilde{a})^2}}} \right) \quad , \quad v_{\mathbf{k},\sigma}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{4b^2}{(a-\tilde{a})^2}}} \right) \quad (\Gamma'.10)$$

Επιστρέφοντας στους διαγώνιους όρους της Εξ.(Γ'.4):

$$(au_{\mathbf{k},\sigma}^2 - 2bu_{\mathbf{k},\sigma}v_{\mathbf{k},\sigma} + \tilde{a}v_{\mathbf{k},\sigma}^2) = \frac{1}{2} \left(a + \tilde{a} + (a - \tilde{a})\sqrt{1 + \left(\frac{2b}{a - \tilde{a}}\right)^2} \right) \quad (\Gamma'.11)$$

$$(av_{\mathbf{k},\sigma}^2 + 2bu_{\mathbf{k},\sigma}v_{\mathbf{k},\sigma} + \tilde{a}u_{\mathbf{k},\sigma}^2) = \frac{1}{2} \left(a + \tilde{a} - (a - \tilde{a})\sqrt{1 + \left(\frac{2b}{a - \tilde{a}}\right)^2} \right) \quad (\Gamma'.12)$$

και η Χαμιλτονιανή στον χώρο των οιονεί-σωματιδίων παίρνει τελικά την μορφή:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left[\frac{1}{2} \left(a + \tilde{a} + (a - \tilde{a})\sqrt{1 + \left(\frac{2b}{a - \tilde{a}}\right)^2} \right) \gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{1}{2} \left(a + \tilde{a} - (a - \tilde{a})\sqrt{1 + \left(\frac{2b}{a - \tilde{a}}\right)^2} \right) \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma} \right] \quad (\Gamma'.13)$$

Σύμφωνα με την Εξ.(5.6), έχουμε: $\alpha = \gamma_{\mathbf{k}} + \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \sigma\tilde{F}$, $\tilde{\alpha} = -\gamma_{\mathbf{k}} + \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \sigma\tilde{F}$, $b = -(W + \sigma M)$. Αντικαθιστώντας τις τιμές αυτές στην παραπάνω σχέση καταλήγουμε στην τελική μορφή:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} [E_{\sigma+}(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k},\sigma} + E_{\sigma-}(\mathbf{k})\gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger \gamma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}] \quad (\Gamma'.14)$$

όπου οι πόλοι έχουν ως εξής:

$$E_{\sigma\pm}(\mathbf{k}) = \tilde{\delta}_{\mathbf{k}} - \sigma\tilde{F} \pm \sqrt{\gamma_{\mathbf{k}}^2 + (W + \sigma M)^2} \quad (\Gamma'.15)$$

Βιβλιογραφία

- [1] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. B **108**, 1175 (1957).
- [2] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, 2nd Ed. Dover Publications (2004).
- [3] P. Coleman, *The evolving monograph on Many Body Physics* (2010).
- [4] M. Sigrist and K. Ueda, Rev. Mod. Phys. **63**, 239 (1991).
- [5] V.P Mineev and K.V. Samokhin, *Introduction to Unconventional Superconductivity*, (Gordon & Breach, Amsterdam, 1999).
- [6] J.F. Annett, Adv. Phys. **39**, 83 (1990).
- [7] G. Grüner, *Density waves in solids*, Frontiers in Physics Vol. 89, Addison-Welsey publishing company (1994).
- [8] W.E. Pickett, *Tight Binding Method: Linear Combination of Atomic Orbitals (LCAO)*, lecture notes (2006).
- [9] G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **60**, 1129 (1988).
- [10] G. Grüner, Rev. Mod. Phys. **66**, 1 (1994).
- [11] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*, World Scientific Publishing Co. (1999).
- [12] P.G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys*, (Westview Press, 1966).
- [13] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media 2nd Ed.*, (Pergamon Press, Oxford, 1984).
- [14] B.S. Chandrasekhar, Apply. Phys. Lett. **1**, 7 (1962); A.M. Clogston, Phys. Rev. Lett. **9**, 266 (1962).
- [15] Y. Matsuda and H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 051005 (2007).

- [16] H. Won *et al.*, AIP Conf. Proc. **789**, 3 (2005).
- [17] H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 3069 (1999).
- [18] P. Fulde and R.A Ferrel, Phys. Rev. **135**, A550-A563 (1964).
- [19] A.I. Larkin and Y.N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP **20**, 762 (1965).
- [20] R. Casalbuoni and G. Nardulli, Rev. Mod. Phys. **76**, 263 (2004).
- [21] T. Takada and T. Izuyama, Prog. Theor. Phys. **41**, 635 (1968).
- [22] P. Fulde, Adv. Phys. **22**, 667 (1973).
- [23] K.Maki and H.Won, Physica B **322**, 315-317 (2002).
- [24] G.C. Psaltakis and E.W. Fenton, J. Phys. C **16**, 3913-3932 (1983).
- [25] C.N. Yang, Phys. Rev. Lett. **63**, 2144 (1989).
- [26] E. Berg *et al.*, Phys. Rev. Lett. **99**, 127003 (2007).
- [27] D.F. Agterberg and H. Tsunetsugu, Nature Physics **4**, 639 (2008).
- [28] R. Heid *et al.*, Phys. Rev. Lett. **74**, 2571 (1995); M. Georgiou, G. Varelogiannis and P. Thalmeier, EPL **82**, 67007 (2008).
- [29] M. Kenzelmann *et al.*, Science **321**, 1652 (2008).
- [30] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, Phys. Rev. Lett. **104**, 216403 (2010).
- [31] Y. Nambu, Phys. Rev. **117**, 648 (1960).
- [32] Nass M J *et al.*, Phys. Rev. B **25** 4541 (1982).
- [33] A.J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **47**, 331 (1975).
- [34] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: An Introduction* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
- [35] J. Quintanilla and A.J. Schofield Phys. Rev. B **74**, 115126 (2006); H.Yamase, Phys. Rev. B **76**, 155117 (2007).
- [36] P. Thalmeier, Z.Phys.B **100**, 387-394, (1996).
- [37] C. Nayak, Phys. Rev. B **62**, 4880 - 4889 (2000).

- [38] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov and I.E. Dzyaloshinski *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1963).
- [39] J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, W.A. Benjamin, New York, (1964).
- [40] A. Altland and B.D. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press (2006).
- [41] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, 3rd ed. (2000).
- [42] K. Maki, *Superconductivity*, Marcel Dekker Inc (1969). ch.18
- [43] M.P. Marder, *Condensed Matter Physics*, Wiley & Sons 2nd. Ed., (2010).
- [44] S. Giorgini, L.P. Pitaevskii and S. Stringari, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1215 (2008); M.A. Lewenstein *et al.*, *Adv. Phys.* **56**, 243 (2007).
- [45] A. Bianchi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 187004 (2003).
- [46] J. Singleton *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **12**, 641 (2000).
- [47] W.A. Coniglio *et al.*, *Phys. Rev. B* **83**, 224507 (2011).
- [48] A.M. Gabovich *et al.*, *Supercond. Sci. Technol.* **14**, R1-R27 (2001).
- [49] A. Aperis *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **20** 434235 (2008).
- [50] A. Aperis *et al.*, *J. Supercond. Nov. Magn.* **22**, 115 (2009).
- [51] C. Petrovic *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **13**, L337 (2001).
- [52] Settai, R. J., *Phys. Condens. Matter* **13**, L627 (2001).
- [53] Hall, D. *et al.* *Phys. Rev. B* **64**, 212508 (2001).
- [54] K. Izawa *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 057002 (2001).
- [55] C.F. Miclea *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 117001 (2006).
- [56] J. Paglione *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 246405 (2003).
- [57] C. Stock *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 087001 (2008).
- [58] A. Bianchi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 257001 (2003).
- [59] A. Bianchi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137002 (2002).

-
- [60] V.F. Mitrović *et al.*, Phys. Rev. Lett. **97**, 117002 (2006).
- [61] B.L. Young *et al.*, Phys. Rev. Lett. **98**, 036402 (2007).
- [62] E.Demler, W.Hanke and S.C.Zhang, Rev. Mod. Phys. **76**, 909 (2004).
- [63] D.C. Johnston, Adv. Phys. **59**, 803 (2010).
- [64] J.Singleton and C.Mielke, Contemp. Phys. **43**, 63 (2002).
- [65] P. Thalmeier *et al.*, arXiv:cond-mat/0409363v1.
- [66] K. Machida *et al.*, Phys. Rev. B **22** 2307 (1980).
- [67] M.Kato and K.Machida, Phys. Rev. B **37** 1510 (1987).
- [68] M.Murakami and H.Fukuyama, J. Phys. Soc. Japan **67**, 2784 (1998).
- [69] T.Maitra *et al.*, Eur. Phys. J. B **21**, 527-533 (2001).
- [70] B.Kyung, Phys. Rev. B **62**, 9083 - 9088 (2000).
- [71] S. Tsonis *et al.*, J. Phys. Condens. Matter **20** 434234 (2008).
- [72] D.F. Agterberg and M. Sigrist, Phys. Rev. Lett. **102**, 207004 (2009).
- [73] Y. Yanase and M. Sigrist, J. Phys. Soc. Jpn. **77**, 124711 (2008).
- [74] N.J. Curro, Rep. Prog. Phys. **72**, 026502 (2009).
- [75] T. Moriya, J. Phys. Soc. Japan **18** 516 (1963).
- [76] N. Bulut and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **68**, 706 (1992).
- [77] N. Bulut *et al.*, Phys. Rev. B **41**, 1797 (1990).
- [78] K. Yang and S.L. Sondhi, Phys. Rev. B **57**, 8566 (1998).
- [79] J. Spehling *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 237003 (2009).
- [80] M. Kato and K. Machida, J. Phys. Soc. Japan **56**, 2136 (1987).
- [81] K. Bechgaard *et al.*, Solid State Commun. **33**, 1119 (1980).
- [82] E. Fawcett, Rev. Mod. Phys. **60**, 209 (1988); **66** 25 (1994).
- [83] S.V. Borisenko *et al.*, Phys. Rev. Lett. **100**, 196402 (2008).

- [84] V. Brouet *et al.*, Phys. Rev. B. **77**, 235104 (2008).
- [85] A. Bianconi, Solid State Commun. **91**, 1 (1994); J.M. Tranquada *et al.*, Nature **375**, 561 (1995).
- [86] G.C. Milward, M.J. Calderon, and P.B. Littlewood, Nature, **433**, 607, (2005).
- [87] S. Chakravarty *et al.*, Phys. Rev. B **63**, 63 (2001).
- [88] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **104**, 106404 (2010).
- [89] H. Ikeda and Y. Ohashi, Phys. Rev. Lett. **81**, 3723 (1998); P. Chandra, *et al.*, Nature **417**, 831 (2002).
- [90] P. Kotetes, A. Aperis and G. Varelogiannis, arXiv:1002.2719.
- [91] A. Aperis *et al.*, Phys. Lett. B **702**, 181 (2011).
- [92] L.P. Gorkov and A.G. Lebed, J. Phys. Lett. **45**, L433 (1984); M. H?ritier, G. Montambaux and P. Lederer, J. Phys. Lett. **45**, L943 (1984).
- [93] A.G. Lebed, JETP Lett. **78**, 138 (2003).
- [94] D. Zanchi, A Bjelis and G. Montambaux, Phys. Rev. B **53**, 1240 (1996).
- [95] R.D. McDonald *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93** 076405 (2004).
- [96] G. Cao *et al.*, App. Phys. Lett. **87**, 232501 (2005).
- [97] A.P. Ramirez, J. Phys. C **9**, 8171 (1997).
- [98] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **85**,4172 (2000).
- [99] A. Aperis *et al.*, EPL **83**, 67008 (2008).
- [100] A. Aperis, G. Varelogiannis and P.B. Littlewood, J. Phys.: Conf. Ser. **150**, 042007 (2009).
- [101] Perry, Phys. Rev. Lett. **92**, 166602 (2004).
- [102] S.A. Grigera, Science **306**, 1154 (2004).
- [103] N. Harrison, M. Jaime and J.A. Mydosh, Phys. Rev. Lett. **90**, 096402 (2003).
- [104] J.A. Mydosh and P.M. Oppeneer, Rev. Mod. Phys. **83**, 1301 (2011).
- [105] P. Dowben, J. Phys. Condens. Matter **19**, 310301 (2007).

-
- [106] L. Benfatto *et al.*, Phys. Rev. B **71**, 104511 (2005).
- [107] S. Cox *et al.*, Nature Materials, **7**, 25, (2008).
- [108] K. Waku *et al.*, Phys. Rev. B **72**, 012418 (2005).
- [109] R.H. McKenzie, arXiv:cond-mat/9706235v2 (1998).
- [110] P.D. Grogoriev and D.S. Lyubshin, Phys. Rev. B **72**, 195106 (2005).
- [111] Y. Kamihara *et al.*, J. Am. Chem. Soc. **130**, 3296 (2008).
- [112] I.I. Mazin and J. Schmalian, Physica C **469**, 614 (2009).
- [113] A.D. Christianson *et al.*, Nature **456**, 930 (2008).
- [114] R.H. Liu *et al.*, Nature **459**, 64 (2009).
- [115] T.Y. Chen *et al.*, Nature **453**, 1224 (2008).
- [116] H. Ding *et al.*, EPL **83**, 47001 (2008).
- [117] T. Kondo *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 147003 (2008).
- [118] C. Martin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 247002 (2009).
- [119] L. Malone *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 140501(R) (2009).
- [120] H-J. Grafe *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 047003 (2008).
- [121] M. Yashima *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. **78**, 103702 (2009).
- [122] Y. Li *et al.*, New J. Phys. **12**, 083008 (2010).
- [123] D.J. Singh and M.H. Du, Phys. Rev. Lett. **100**, 237003 (2008);
- [124] K. Haule, J.H. Shim and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **100**, 226402 (2008).
- [125] Z.P. Yin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 047001 (2008).
- [126] D.J. Singh, Phys. Rev. B **78**, 094511 (2008).
- [127] C. Cvetkovic and Z. Tesanovic, EPL **85**, 37002 (2009).
- [128] I.I. Mazin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 057003 (2008).
- [129] Clarina de la Cruz *et al.*, Nature **453**, 899 (2008).

- [130] K. Kuroki *et al.*, Phys. Rev. Lett. **101**, 087004 (2008); Z.J Yao, J.X. Li and Z.D. Wang, New J. Phys. **11**, 025009 (2009); K. Seo, B.A. Bernevig, and J. Hu, Phys. Rev. Lett. **101**, 206404 (2008); F. Wang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **102**, 047005 (2009); R. Sknepnek *et al.*, Phys. Rev B **79**, 054511 (2009).
- [131] S. Graser *et al.*, New J. Phys. **11**, 025016 (2009).
- [132] Y. Nakai *et al.*, Phys. Rev. B **79**, 212506 (2009).
- [133] R. Khasanov *et al.*, New J. Phys. **12**, 073024 (2010).
- [134] P.M. Shirage *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 257003 (2009).
- [135] K. J. von Szczepanski and K. W. Becker, Z. Phys. B **89**, 327 (1992); M. L. Kubic and R. Zeyher, Phys. Rev. B **49**, 4395 (1994); A. A. Abrikosov, Physica C **222**, 191 (1994).
- [136] G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **57**, 13 743 (1998).
- [137] A. A. Abrikosov, Phys. Rev. B **53**, R8910 (1996); **56**, 446 (1997); A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **83**, 392 (1999); M. Weger and M. Peter, Physica C **317**, 252 (1999).
- [138] G. Varelogiannis *et al.*, Phys. Rev. B **54**, R6877 (1996); G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **57**, R732 (1998); A. Perali and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **61**, 3672 (2000).
- [139] D. F. Agterberg, V. Barzykin, and L. P. Gorkov, Phys. Rev. B **60**, 14 868 (1999).
- [140] P.M. Oppeneer and G. Varelogiannis, Phys. Rev. B **68**, 214512 (2003).
- [141] G. Varelogiannis, Phys. Rev. Lett. **88**, 117005 (2002).
- [142] Y. Suginishi and H. Shimahara, J. Phys. Soc. Jpn. **73**, 3121 (2004).
- [143] Xiao-Shan Ye, Zi-Jian Yao, and Jian-Xin Li, J. Phys.: Condens. Matter **20**, 045227 (2008).
- [144] S. Johnston *et al.*, arXiv:1101.1302 (2011).
- [145] A. Aperis *et al.*, Phys. Rev. B **83**, 092505 (2011).
- [146] H. Suhl, B.T. Matthias and L.R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
- [147] P. Morel and P.W. Anderson, Phys. Rev. **125**, 1263 (1962).

- [148] P.B. Allen and B. Mitrović, *Solid State Phys.* **37**, 1 (1982).
- [149] H.J. Choi, M.L. Cohen and S.G. Louie, *Phys. Rev. B* **73**, 104520 (2006).
- [150] S. Raghu *et al.*, *Phys. Rev. B* **77**, 220503(R) (2008).
- [151] M.M. Korshunov and I. Eremin, *Phys. Rev. B* **78**, 140509(R) (2008)
- [152] W.H.Press *et al.*, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press (2002).
- [153] P.A. Lee and X-G. Wen, *Phys. Rev. B* **78**, 144517 (2008).
- [154] X. Dai *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 057008 (2008).
- [155] A.A. Kordyuk *et al.*, *Phys. Rev. B* **83**, 134513 (2011).
- [156] S.-H. Baek *et al.*, arXiv: 1108.2592 (2011).
- [157] V. Stanev *et al.*, *Phys. Rev B* **84**, 014505 (2011).
- [158] J.P. Carbotte, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 1027 (1990).
- [159] A.Bill, V.Z. Kresin and S.A. Wolf, arXiv: 9801222 (1998).
- [160] P.M. Shirage *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 037004 (2010).
- [161] X.C. Wang *et al.*, *SS Comm.* **148**, 538 (2008).
- [162] S.V. Borisenko *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 067002 (2010).
- [163] N. Qureshi *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 117001 (2012).
- [164] Z. Li *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **79**, 083702 (2010).
- [165] B.Li *et al.* *J. Appl. Phys.* **111**, 033922 (2012).
- [166] S.V. Borisenko *et al.*, *Symmetry* **4**, 251 (2012).
- [167] K. Umezawa *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 037002 (2012).
- [168] T. Hänke *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 127001 (2012).
- [169] A. Lankau *et al.*, *Phys. Rev. B* **82**, 184518 (2010).
- [170] R.A. Jishi and H.M. Alyahyaei, *Adv. Cond. Matt. Phys.* **2010**, 804343 (2010).
- [171] P.M.R. Brydon *et al.*, *Phys. Rev. B* **83**, 060501(R) (2011).