



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΩΝ ΜΑΘΗΜΑ-
ΤΙΚΩΝ ΚΑΙ ΦΥΣΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΕΚΕΦΕ
ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΤΑΚΩΝ
ΙΝΣΤΙΤΟΥΤΟ ΠΥΡΗΝΙΚΗΣ ΦΥΣΙΚΗΣ



ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ ΣΠΟΥΔΩΝ
«ΦΥΣΙΚΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ»

Διαχωρισμός βαθμών
ελευθερίας σε συστήματα
ισχυρά συσχετισμένων
ηλεκτρονίων

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ
του Κούρτη Στέφανου

Ερευνητική Επίβλεψη: *Ακαδημαϊκός Επιβλέπων:*
M. Daghofer *Κ. Παρασκευαΐδης*

Αθήνα, Οκτώβριος 2012

Σύνοψη

Αντικείμενο αυτής της διπλωματικής εργασίας είναι ο διαχωρισμός των ηλεκτρονίων (ή ακριβέστερα οπών) σε νέους βαθμούς ελευθερίας, οι οποίοι αποτελούν τμήματα των αρχικών στοιχειωδών σωματιδίων, και η μελέτη των χαμηλοδιάστατων, ισχυρά συσχετισμένων συστημάτων συμπυκνωμένης ύλης στα οποία ο διαχωρισμός προκύπτει. Ύστερα από αναλυτικό καθορισμό των σημαντικών παραμέτρων και μοντελοποίηση των σχετικών συστημάτων, η αριθμητική μέθοδος επακριβούς διαγωνοποίησης χρησιμοποιείται με σκοπό την επίλυση του δεδομένου προβλήματος για πεπερασμένα μοντέλα και την ερμηνεία ή την πρόβλεψη πειραματικών αποτελεσμάτων.

Η διαστατικότητα του εκάστοτε μελετούμενου συστήματος καθορίζει σε μεγάλο βαθμό τις παρατηρούμενες ιδιότητές του. Για το λόγο αυτό, η εργασία αυτή είναι χωρισμένη σε δύο μέρη, αφιερωμένα σε συστήματα μίας και δύο διαστάσεων αντίστοιχα. Στο πρώτο μέρος, ύστερα από σύντομη εισαγωγή της φυσικής των μονωτών Mott, παρουσιάζεται ο διαχωρισμός φορτίου - σπιν και ερμηνεύονται τα σχετικά πειραματικά αποτελέσματα μέσω κατάλληλης μεταχείρισης των μονοδιάστατων μοντέλων Hubbard και t - J . Στη συνέχεια εισάγεται το νέο φαινόμενο του διαχωρισμού σπιν - τροχιακού και συζητούνται τα πρόσφατα σχετικά πειραματικά δεδομένα με βάση την αναλογία με το διαχωρισμό φορτίου - σπιν. Σκοπός του δεύτερου μέρους είναι η παρουσίαση των ισχυρά συσχετισμένων τοπολογικών καταστάσεων, οι οποίες αποτελούν εξαιρετικά νέο και πολλά υποσχόμενο πεδίο έρευνας. Αρχικά συνοψίζονται ορισμένες απαραίτητες έννοιες από τη φυσική των κβαντικών φαινομένων Hall και τον κλάδο των τοπολογικών μονωτών, οι οποίες σχηματίζουν το γενικό πλαίσιο των νέων θεωρητικών αποτελεσμάτων της τελευταίας ενότητας.

Ασφαλώς, η εργασία αυτή δεν αποτελεί πλήρη επισκόπηση όλων των περιπτώσεων διαχωρισμού βαθμών ελευθερίας στη συμπυκνωμένη ύλη. Θέματα όπως η τοπολογία σε μία διάσταση, τα κβαντικά υγρά σπιν, ο κβαντικός πάγος σπιν και ο διαχωρισμός σε τριδιάστατα συστήματα δεν καλύπτονται.

Abstract

The subject of this thesis is the separation of electrons (or, more accurately, holes) in new degrees of freedom, which are fractions of the original elementary particles, and the study of the low-dimensional, strongly correlated condensed-matter systems in which the separation occurs. After analytic determination of the important parameters and modelling of the relevant systems, the numerical method of exact diagonalization is used for the solution of each given problem for finite-size models and the explanation or the prediction of experimental results

The dimensionality of the studied system defines to a great extent its observable quantities. For this reason, this thesis is divided into two parts, dealing with one- and two-dimensional systems respectively. In the first part, after a brief introduction to the physics of Mott insulators, spin - charge separation is presented and the relevant experimental results are explained via an appropriate treatment of one-dimensional Hubbard and t - J models. Next, the new phenomenon of spin - orbital separation is introduced and the recent relevant experimental results are explained through the analogy to spin - charge separation. The purpose of the second part is the introduction to strongly correlated topological states, which constitute a very new and promising field of research. First, some necessary concepts of quantum Hall physics and the field of topological insulators are reviewed, which form the general framework for the new theoretical results presented in the last section.

This thesis is of course not a full account of all the cases of separation of degrees of freedom in condensed matter. Topics like topology in one dimension, quantum spin liquids, quantum spin ice and separation in three-dimensional systems are not covered.

Ευχαριστίες

Η καθοδήγηση της M. Daghofer και οι συζητήσεις με τον J. van den Brink διαμόρφωσαν καθοριστικά την εργασία αυτή. Σημαντική επιρροή στην κατανόηση θεμελιωδών εννοιών του γράφοντα κατά τη διάρκεια του προγράμματος μεταπτυχιακών σπουδών είχαν οι διδάσκοντες του ΔΠΜΣ «Φυσική και Τεχνολογικές Εφαρμογές» μέσω διαλέξεων και συζητήσεων, καθώς και οι φοιτητές του προγράμματος με τη συμμετοχή τους σε αυτές. Συγκεκριμένα, η διαρκής ενθάρρυνση του Κ. Παρασκευαΐδη, τόσο κατά τις προπτυχιακές όσο και κατά τις μεταπτυχιακές σπουδές, κινητοποίησε επιστημονικά το γράφοντα πολλάκις. Οι υποδείξεις του Γ. Βαρελογιάννη, καθώς και η καθοδήγηση των Α. Απέρη και Π. Κοτετέ, κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας για το προπτυχιακό πρόγραμμα της ΣΕΜΦΕ αλλά και μετέπειτα, αποτέλεσαν και αποτελούν χρήσιμες κατευθυντήριες γραμμές, οι οποίες επηρέασαν και την εργασία αυτή. Η συζήτηση ορισμένων εννοιολογικών λεπτομερειών βελτιώθηκε από συνομιλίες με τους L. Ament, V. Bisogni, S. Johnston, J. W. F. Venderbos και I. Ρουσοχατζάκη. Για όλες αυτές τις ωφέλιμες συνεισφορές, ευχαριστώ θερμά καθέναν από τους παραπάνω συναδέλφους και διδάσκοντες.

Περιεχόμενα

1 Διαχωρισμός βαθμών ελευθερίας σε μία διάσταση	7
1.1 Μονωτές Mott και μοντέλο Hubbard	8
1.2 Σχετικές πειραματικές μέθοδοι	12
1.3 Διαχωρισμός φορτίου - σπιν	16
1.4 Διαχωρισμός σπιν - τροχιακού	20
2 Διαχωρισμός βαθμών ελευθερίας σε δύο διαστάσεις	22
2.1 Κβαντικά φαινόμενα Hall	23
2.1.1 Αχέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall	23
2.1.2 Κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall	28
2.2 Καταστάσεις τοπολογικής τάξης	32
2.2.1 Τοπολογικοί μονωτές	32
2.2.2 Τοπολογία και αλληλεπιδράσεις	34
2.2.3 Κλασματικοί μονωτές Chern	36
Σύνοψη και συμπεράσματα	44
A' Από το μοντέλο Hubbard στο μοντέλο t-J	46
B' Θεωρία συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X	52
Γ' Μέθοδος Lanczos	61
Βιβλιογραφία	64

Κεφάλαιο 1

Διαχωρισμός βαθμών ελευθερίας σε μία διάσταση

Εισαγωγή

Μονοδιάστατα ηλεκτρονικά συστήματα προσελκύουν διαρκώς επιστημονικό ενδιαφέρον, καθώς η περιορισμένη κινητικότητα οδηγεί συχνά σε ασυνήθιστα φαινόμενα. Από τη θεωρητική σκοπιά, τα μονοδιάστατα ισχυρά συσχετισμένα συστήματα είναι επιπλέον πιο προσιτά όσον αφορά στη μοντελοποίηση και επομένως πιο απλά για σύγκριση θεωρητικών αποτελεσμάτων με πειράματα. Επιπλέον, η διαθεσιμότητα προσεγγιστικά μονοδιάστατων πραγματικών συστημάτων αυξάνεται διαρκώς τις τελευταίες δεκαετίες, καθιστώντας τη μελέτη μονοδιάστατων συστημάτων ολοένα πιο χρήσιμη.

Ο διαχωρισμός των βαθμών ελευθερίας σε μονοδιάστατα συστήματα αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων προέκυψε αρχικά στη μελέτη του μοντέλου Luttinger, το οποίο εφευρέθηκε για την περιγραφή μονοδιάστατων μεταλλικών συστημάτων. Ωστόσο, η πιθανότητα παρατήρησης του διαχωρισμού των ηλεκτρονίων έγινε σημαντικότερη ύστερα από την εισαγωγή του μοντέλου Hubbard για την περιγραφή της μονωτικής συμπεριφοράς ορισμένων ισχυρά συσχετισμένων συστημάτων. Η ακριβής επίλυση του μοντέλου αυτού υπέδειξε τους τμηματικούς βαθμούς ελευθερίας που προκύπτουν από το διαχωρισμό και μετέπειτα προσεγγιστικές λύσεις προέβλεψαν την επίδραση του διαχωρισμού σε πειραματικά μετρούμενες ποσότητες. Το εντυπωσιακό φαινόμενο του διαχωρισμού των βαθμών ελευθερίας φορτίου και σπιν του ηλεκτρονίου παρατηρήθηκε αργότερα σε υλικά με ιδιότητες που προσεγγίζονται με ακρίβεια από μονοδιάστατα μοντέλα.

Σημειώνεται ότι περισσότεροι από ένας τύποι διαχωρισμού των ηλεκτρονίων είναι δυνατοί σε μία διάσταση. Για παράδειγμα, η αλληλεπίδραση με ταλαντώσεις του πλέγματος είναι δυνατό να οδηγήσει σε μη τετριμμένο διαχωρισμό των

ηλεκτρονίων σε περισσότερα από δύο τμήματα, ενώ τοπολογικά μη τετριμμένες καταστάσεις σε μονοδιάστατα συστήματα έχουν συχνά τμηματικές διεγέρσεις. Παρακάτω θα παρουσιαστεί μόνο ο διαχωρισμός του βαθμού ελευθερίας του σπιν του ηλεκτρονίου, καθότι όχι μόνο αποτελεί το βασικότερο και απλούστερο παράδειγμα αλλά και υπεισέρχεται με νέους τρόπους στη σημερινή έρευνα, όπως θα φανεί στην τελευταία ενότητα του κεφαλαίου σχετικά με το διαχωρισμό σπιν - τροχιακού.

1.1 Μονωτές Mott και μοντέλο Hubbard

Η θεωρία ενεργειακών ζωνών αποτελεί ένα από τα σημαντικότερα θεωρητικά εργαλεία για την περιγραφή συστημάτων στερεάς κατάστασης. Παρότι πρόκειται για θεωρία μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων, όλα τα θεμελιώδη είδη στερεών - μέταλλα, μονωτές και ημιαγωγοί - μπορούν να προκύψουν, ανάλογα με τις τιμές των φυσικών παραμέτρων του εκάστοτε μελετούμενου προβλήματος. Ωστόσο, η επίδραση των αλληλεπιδράσεων είναι σε ορισμένες περιπτώσεις καθοριστικής σημασίας και για το λόγο αυτό οι προβλέψεις της θεωρίας ενεργειακών ζωνών μπορεί να είναι εσφαλμένες. Για παράδειγμα, η θεωρία προβλέπει ότι το μονοξείδιο του κοβαλτίου (CoO) είναι μέταλλο, ενώ στην πραγματικότητα αποδεικνύεται ότι είναι μονωτής. Γίνεται λοιπόν κατανοητό ότι σε ορισμένες μονωτικές καταστάσεις το ενεργειακό χάσμα προέρχεται από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων.

Η μετάβαση από τη μεταλλική κατάσταση ελευθέρων ηλεκτρονίων σε μονωτική κατάσταση με την εισαγωγή της άπωσης Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων ονομάζεται μετάβαση Mott και τα σχετικά μονωτικά υλικά μονωτές Mott. Παρόλο που η παρατήρηση [1] και η ποιοτική περιγραφή [2] του φαινομένου προέκυψαν σχεδόν ταυτόχρονα, η βαθύτερη κατανόησή του επήλθε ύστερα από την εισαγωγή του μοντέλου Hubbard [3], το οποίο θεωρείται το απλούστερο μοντέλο για την ακριβή περιγραφή της μετάβασης Mott. Σε φορμαλισμό δεύτερης χβάντωσης, το μοντέλο Hubbard για ένα κρυσταλλικό πλέγμα με N θέσεις μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\mathcal{H}_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.1)$$

Οι τελεστές $c_{i\sigma}$, $c_{i\sigma}^\dagger$ και $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ καταστρέφουν, δημιουργούν και απαριθμούν αλληλεπιδρώντα ηλεκτρόνια με σπιν $\sigma = \uparrow, \downarrow$ στην πλεγματική θέση \mathbf{R}_i . Τα ηλεκτρόνια μεταπηδούν μεταξύ γειτονικών θέσεων $\langle i, j \rangle$ στο πλέγμα με κινητική ενέργεια ανάλογη του ολοκληρώματος μεταπήδησης t . Η αλληλεπίδραση

συνίσταται σε ενεργειακό κόστος U για ηλεκτρόνια με αντίθετο σπιν στην ίδια πλεγματοική θέση.

Ο πρώτος όρος είναι ουσιαστικά το μοντέλο ισχυρού δεσμού, το οποίο αποτελεί τον ακρογωνιαίο λίθο της θεωρίας ενεργειακών ζωνών, και οι λύσεις του είναι οι συναρτήσεις Wannier. Ο δεύτερος όρος αντιπροσωπεύει την θωρακισμένη άπωση Coulomb μέσα σε κάποιο υλικό. Το φαινόμενο της θωράκισης οφείλεται στο θετικά φορτισμένο νέφος που ακολουθεί τα ηλεκτρόνια μέσα στο υλικό και επανακανονικοποιεί το φορτίο τους. Το μέγεθος αυτής της επανακανονικοποίησης είναι κατά κανόνα άγνωστο. Το κατά πόσο η παραδοχή μιας ηλεκτροστατικής αλληλεπίδρασης μηδενικής εμβέλειας είναι βάσιμη ή όχι εξαρτάται από το εκάστοτε σύστημα, καθώς και από τις ιδιότητες προς προσδιορισμό. Σε ορισμένες περιπτώσεις, ιδιότητες σχετικών υλικών μπορούν να εξηγηθούν μόνο με την εισαγωγή αλληλεπιδράσεων μεγαλύτερης εμβέλειας. Τα αποτελέσματα αυτού του μέρους της παρούσας μελέτης δεν επηρεάζονται σημαντικά από την εμβέλεια της αλληλεπίδρασης Coulomb και για το λόγο αυτό θα μελετηθεί το μοντέλο Hubbard στην απλούστερη δυνατή μορφή 1.1.

Το μοντέλο Hubbard δείχνει παραπλανητικά απλό. Η ακριβής αναλυτική επίλυσή του στο θερμοδυναμικό όριο είναι δυνατή μόνο σε μία διάσταση [4]. Παρόλα αυτά, αρκετά συμπεράσματα για τις ιδιότητες του μοντέλου μπορούν να εξαχθούν με χρήση κατάλληλων προσεγγίσεων. Δραστική απλοποίηση του προβλήματος μπορεί να γίνει στα όρια $t \ll U$ και $t \gg U$, όπου ο κινητικός όρος ή ο όρος αλληλεπίδρασης αντίστοιχα μπορεί να θεωρηθεί ως διαταραχή.

Στο όριο μη αλληλεπιδρώντων σωματιδίων $t \gg U$ τα ιδιοζεύγη της χαμιλτονιανής είναι γνωστά και όλες οι ιδιότητες του συστήματος μπορούν να προσδιοριστούν μέσω της θεωρίας υγρού Fermi. Ξεκινώντας με μη αλληλεπιδρώντα σωματίδια ($U = 0$), η χαμιλτονιανή διαγωνοποιείται εύκολα με χρήση του μετασχηματισμού Fourier από το χώρο των πλεγματοικών θέσεων στο χώρο των κρυσταλλικών ορμών. Η χαμιλτονιανή τότε γίνεται (παραλείποντας τους δείκτες σπιν για απλότητα)

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^{\dagger} c_{\mathbf{k}}, \quad (1.2)$$

όπου $\epsilon_{\mathbf{k}}$ είναι οι ιδιοενέργειες και $c_i = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}}$. Από τον ορισμό του καθυστερημένου διαδότη στο χώρο των ορμών σε αυτή την περίπτωση προκύπτει

$$G_0^R(\mathbf{k}, t - t') \equiv -i\theta(t - t') \left\langle \left\{ c_{\mathbf{k}}(t), c_{\mathbf{k}}^{\dagger}(t') \right\} \right\rangle = -i\theta(t - t') e^{-i\epsilon_{\mathbf{k}}(t-t')}, \quad (1.3)$$

όπου με $\langle \dots \rangle$ συμβολίζεται η αναμενόμενη τιμή και με $\{ \dots \}$ ο αντιμεταθέτης $\{A, B\} = AB + BA$. Με μετασχηματισμό Fourier από χρόνο σε συχνότητα προκύπτει η καθυστερημένη συνάρτηση Green

$$G_0^R(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} + i\eta}, \quad (1.4)$$

όπου ένα απειροστό φανταστικό μέρος η προστέθηκε στην ιδιοτιμή $\epsilon_{\mathbf{k}}$, για αποφυγή αποκλίσεων των ολοκληρωμάτων. Η φασματική συνάρτηση, η οποία μετράται σε πειράματα φωτοεκπομπής ή φασματοσκοπίας φαινομένου σήραγγας, δίνεται από τη σχέση

$$A_0(\mathbf{k}, \omega) \equiv -2\Im G_0^R(\mathbf{k}, \omega) = 2\pi\delta(\omega - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (1.5)$$

όπου χρησιμοποιήθηκε η ταυτότητα $\lim_{\eta \rightarrow 0} \Im \frac{1}{x+i\eta} = -\pi\delta(x)$. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων απλά διευρύνουν τη συνάρτηση Dirac, εφόσον το μέγεθός τους παραμένει στο διαταρακτικό όριο. Θεωρώντας μια τυπική ενεργειακή ζώνη ισχυρού δεσμού $\epsilon_{\mathbf{k}}$ και ολοκληρώνοντας την αντίστοιχη $A(\mathbf{k}, \omega)$ ως προς \mathbf{k} προκύπτει η ολοκληρωμένη φασματική συνάρτηση $A(\omega)$. Από τη μορφή της $A(\mathbf{k}, \omega)$ γίνεται φανερό ότι το φασματικό βάρος της $A(\omega)$ θα είναι συγκεντρωμένο σε μία μόνο περιοχή ενεργειών, εύρους ίσου με το εύρος της ενεργειακής ζώνης.

Το όριο $t \ll U$ ονομάζεται ατομικό όριο, αφού το σύστημα μπορεί να περιγραφεί από τις καταστάσεις μίας μόνο πλεγματοτικής θέσης. Η φασματική συνάρτηση μπορεί να υπολογιστεί ακριβώς όταν $t = 0$ μέσω της εξίσωσης κίνησης για τον καθυστερημένο διαδότη

$$\begin{aligned} i\partial_t G_{ij}^R(t-t') &= \delta(t-t') \left\langle \left\{ c_{i\sigma}(t), c_{j\sigma}^\dagger(t') \right\} \right\rangle + \theta(t-t') \left\langle \left\{ \partial_t c_{i\sigma}(t), c_{j\sigma}^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ &= \delta(t-t')\delta_{ij} + \theta(t-t') \left\langle \left\{ \{c_{i\sigma}, \mathcal{H}\}, c_{j\sigma}^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ &= \delta(t-t')\delta_{ij} + U\theta(t-t') \left\langle \left\{ c_{i\sigma}n_{i-\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger(t') \right\} \right\rangle \\ &= \delta(t-t')\delta_{ij} + U\Sigma_{ij}^R(t-t'), \end{aligned} \quad (1.6)$$

όπου χρησιμοποιήθηκε η σχέση $\{c_{i\sigma}, \mathcal{H}\} = U c_{i\sigma} n_{i-\sigma}$. Στο χώρο των συχνοτήτων η παραπάνω εξίσωση εκφράζεται ως εξής:

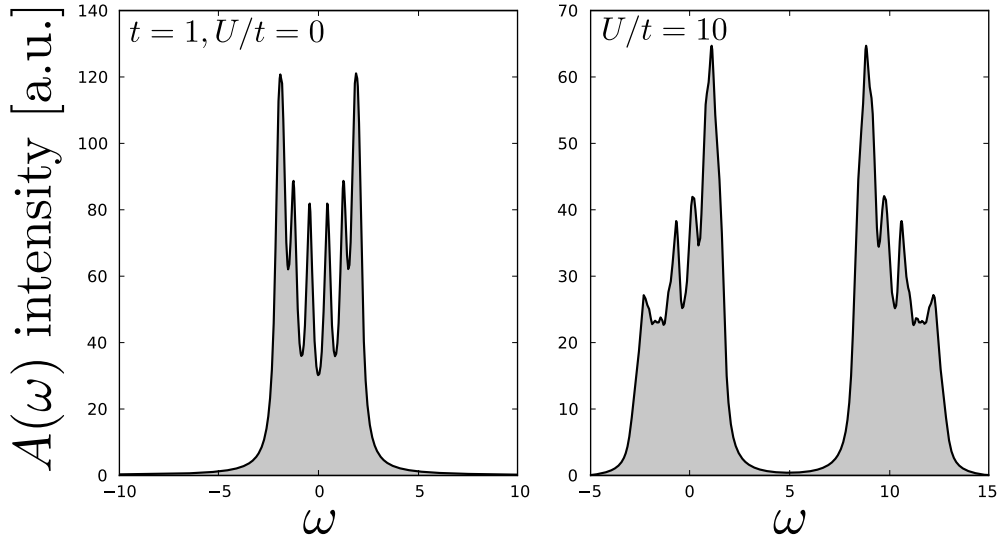
$$\omega G_{ij}^R(\omega) = \delta_{ij} + U\Sigma_{ij}^R(\omega). \quad (1.7)$$

Η εξίσωση κίνησης για τη συνάρτηση αναμονής $\Sigma_{ij}^R(t-t')$, η οποία είναι ουσιαστικά η αυτενέργεια των ηλεκτρονίων, είναι

$$\begin{aligned} \partial_t \Sigma_{ij}^R(t-t') &= \delta(t-t')\delta_{ij}\langle n_{i-\sigma} \rangle + \theta(t-t') \left\langle \left\{ \{c_{i\sigma}, H\}n_{i-\sigma}, c_{j\sigma}^\dagger \right\} \right\rangle \\ &= \delta(t-t')\delta_{ij}\langle n_{i-\sigma} \rangle + U\Sigma_{ij}^R(t-t'), \end{aligned} \quad (1.8)$$

αφού $\{n_{i\sigma}, \mathcal{H}\} = 0$ και $n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma}$. Η εξίσωση κίνησης επιλύεται με μετασχηματισμό Fourier και η λύση είναι

$$\Sigma_{ij}^R(\omega) = \delta_{ij} \frac{\langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - U}, \quad (1.9)$$



Σχήμα 1.1: Φασματική συνάρτηση του μοντέλου Hubbard στο όριο (a) μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων και (b) ισχυρά αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων. Η φασματική συνάρτηση υπολογίστηκε με τη μέθοδο επακριβούς διαγωνοποίησης για μια περιοδική αλυσίδα 14 θέσεων. Για την απεικόνιση των καμπυλών έγινε συνέλιξη του φάσματος με συναρτήσεις Lorentz εύρους $\delta/t = 0.2$.

επομένως προκύπτει η συνάρτηση Green

$$G_{ij}^R(\omega) = \delta_{ij} \left[\frac{1}{\omega} + \frac{U \langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - U} \right] = \delta_{ij} \left[\frac{1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega} + \frac{\langle n_{i-\sigma} \rangle}{\omega - U} \right]. \quad (1.10)$$

Η φασματική συνάρτηση είναι λοιπόν

$$A(\omega) = 2\pi(1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle)\delta(\omega) + 2\pi\langle n_{i-\sigma} \rangle\delta(\omega - U). \quad (1.11)$$

Είναι φανερό ότι το φασματικό βάρος σε αυτή την περίπτωση είναι χωρισμένο σε δύο περιοχές, διαχωρισμένες μεταξύ τους από ένα ενεργειακό χάσμα $\Delta \simeq U$. Διαταραχές, οι οποίες σε αυτή την περίπτωση είναι σχετικές με τη μεταπήδηση ηλεκτρονίων, διευρύνουν τις συναρτήσεις Dirac.

Οι φασματικές συναρτήσεις για $t \gg U$ και $t \ll U$, υπολογισμένες με τη μέθοδο επακριβούς διαγωνοποίησης, δίνονται στο σχήμα 1.1. Στην περίπτωση $t \ll U$ οι δύο περιοχές της φασματικής συνάρτησης καλούνται κατώτερη και ανώτερη ζώνη Hubbard και το χάσμα μεγέθους $\sim U$ που τις διαχωρίζει ονομάζεται χάσμα Mott.

Η θεμελιώδης κατάσταση του μοντέλου Hubbard σε μία διάσταση για οποιαδήποτε τιμή $U > 0$ εξαρτάται μόνο από τους αριθμούς των ηλεκτρονίων με σπιν

↑ και σπιν ↓, N_\uparrow και N_\downarrow αντίστοιχα. Αποδεικνύεται ότι όταν $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$, όταν δηλαδή το σύστημα είναι ημιπλήρες με ηλεκτρόνια, η θεμελιώδης κατάσταση είναι μονωτική, ενώ για οποιεσδήποτε άλλες τιμές η θεμελιώδης κατάσταση είναι μεταλλική [4]. Η ακριβής λύση του μοντέλου Hubbard σε μία διάσταση υποδεικνύει επίσης τους πιθανούς τύπους διεγέρσεων πάνω από τη θεμελιώδη κατάσταση.

Η ακριβής λύση είναι ωστόσο δύσχρηστη, όσον αφορά στον υπολογισμό παρατηρήσιμων μεγεθών. Στην περίπτωση που η θωρακισμένη αλληλεπίδραση Coulomb είναι αρκετά μεγαλύτερη από την κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων, το διαταρακτικό ανάπτυγμα μπορεί να οδηγήσει σε καλή προσέγγιση των θεμελιωδών διεγέρσεων γύρω από μια συγκεκριμένη περιοχή ενεργειών, όταν το σύστημα είναι σχεδόν ημιπλήρες. Ακολουθώντας αυτή τη μέθοδο (βλ. παράρτημα A') καταλήγει κανείς στο μοντέλο t - J

$$\mathcal{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \text{h.c.}) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.12)$$

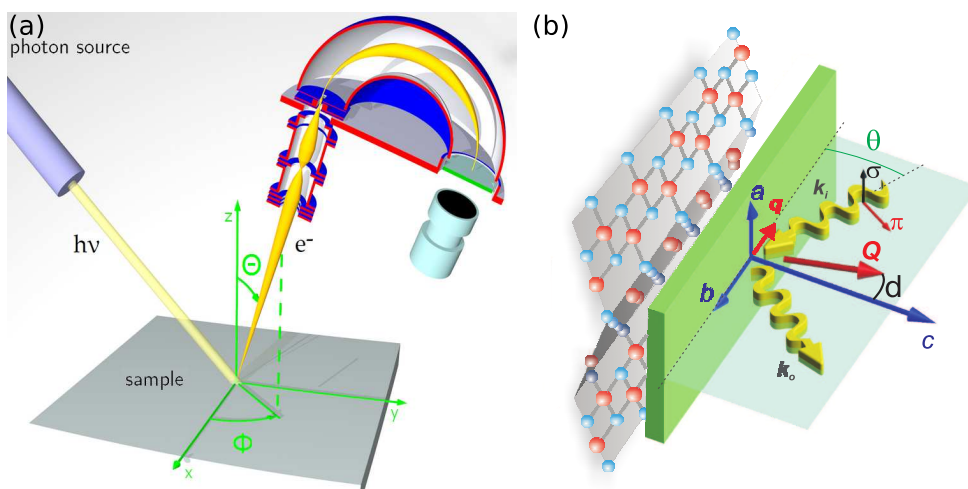
όπου οι τελεστές $\tilde{c}_{i\sigma}, \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger$ συμβολίζουν φερμιονικούς τελεστές καταστροφής και δημιουργίας αντίστοιχα, προβεβλημένους στον υπόχωρο \mathcal{S} των καταστάσεων με το πολύ μονά κατηλειμμένες θέσεις. Ο πρώτος όρος είναι επομένως κινητικός, ενώ ο δεύτερος είναι ο αντισιδηρομαγνητικός όρος Heisenberg.

Μερικές άμεσες παρατηρήσεις σχετικά με το μοντέλο t - J υποδεικνύουν ορισμένες σημαντικές λεπτομέρειες. Όταν καταρχάς το πλέγμα είναι ακριβώς ημιπλήρες, μόνο ο όρος Heisenberg είναι μη μηδενικός. Αυτό υποδεικνύει ότι το ημιπλήρες μοντέλο t - J , και κατά προσέγγιση το ημιπλήρες μοντέλο Hubbard στο όριο $t \ll U$, έχουν την ίδια θεμελιώδη κατάσταση με το μοντέλο Heisenberg, δηλαδή την αντισιδηρομαγνητική χβαντική κατάσταση Néel¹. Επιπλέον, μετασχηματισμός ηλεκτρονίου - οπής αφήνει το φάσμα ιδιοτιμών του μοντέλου αναλλοίωτο. Ο μετασχηματισμός αυτός μετατρέπει κάθε οπή σε διπλή κατάληψη. Επομένως, το μοντέλο t - J μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την περιγραφή και των δύο ζωνών Hubbard, εφόσον καθεμία από αυτές μελετάται μεμονωμένα.

1.2 Σχετικές πειραματικές μέθοδοι

Στην προηγούμενη παράγραφο έγινε φανερό ότι ορισμένα βασικά χαρακτηριστικά της μετάβασης Mott και συνεπώς των αντίστοιχων υλικών εντοπίζονται στο σχήμα της φασματικής συνάρτησης. Προχωρώντας ένα βήμα παραπέρα,

¹Κύρια διαφορά μεταξύ των θεμελιωδών καταστάσεων του μοντέλου Heisenberg και του ημιπλήρους μοντέλου Hubbard στο όριο $t \ll U$ είναι οι χβαντικές διακυμάνσεις που εμπεριέχονται σε αυτές.

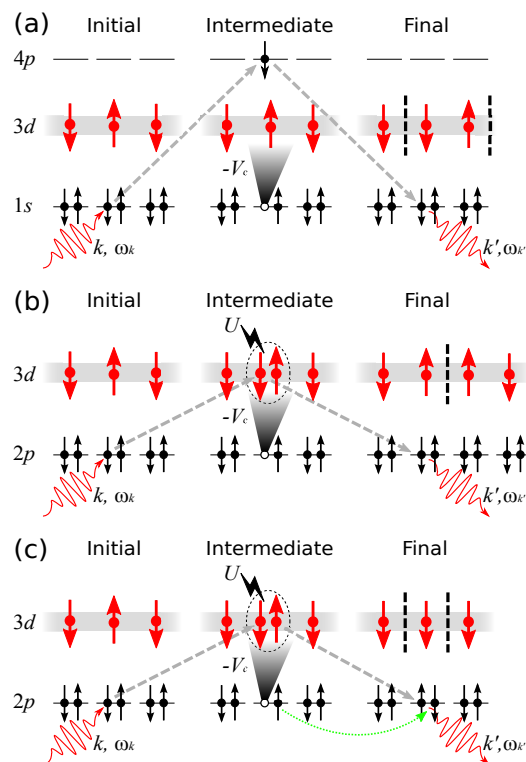


Σχήμα 1.2: Σχηματική απεικόνιση διάταξης πειραμάτων φασματοσκοπίας (a) φωτοεκπομπής (πηγή: wikipedia) και (b) συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X (πηγή: V. Bisogni). Η μεταφορά ορμής καθορίζεται από τις γωνίες πρόσπτωσης και ανάκλασης, ενώ η μεταφορά ενέργειας μετράται από τον κατάλληλο για κάθε πείραμα ανιχνευτή.

περαιτέρω ιδιότητες των σχετικών συστημάτων μπορούν να εξαχθούν από συγκεκριμένα χαρακτηριστικά της φασματικής συνάρτησης. Επομένως, για σύγκριση πειραματικών δεδομένων με τη θεωρία, μια πειραματική μέθοδος για τον προσδιορισμό της φασματικής συνάρτησης είναι απαραίτητη. Η παραδοσιακή μέθοδος για το σκοπό αυτό είναι η φασματοσκοπία φωτοεκπομπής. Η φασματοσκοπία αυτή βασίζεται στο φωτοηλεκτρικό φαινόμενο: φωτόνια με ενέργεια συγκρίσιμη με την ενέργεια ιονισμού ηλεκτρονίων της υποστοιβάδας σθένους προκαλούν εκπομπή φωτοηλεκτρονίων, των οποίων η ενέργεια και η ορμή είναι τα μετρήσιμα μεγέθη. Στην επόμενη παράγραφο πειραματικά αποτελέσματα θα συγκριθούν με αριθμητικούς υπολογισμούς της φασματικής συνάρτησης.

Μια επιπλέον μέθοδος χρήσιμη για τον εντοπισμό διαχωρισμού βαθμών ελευθερίας, καθότι δύναται να διακρίνει τη ξεχωριστή διασπορά βαθμών ελευθερίας σπιν, φορτίου και τροχιακού, είναι η φασματοσκοπία συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X. Η μέθοδος αυτή είναι σχετικά νέα, αφού κατέστη δυνατή λόγω της τεχνολογικής ανάπτυξης στον τομέα της ακτινοβολίας συγχρότρου. Αναλυτική περιγραφή της μεθόδου γίνεται από τους Ament *et al.* [5]. Παρακάτω περιγράφονται συνοπτικά τα βασικά στοιχεία της μεθόδου, καθώς και της θεωρητικής περιγραφής της. Μια μαθηματικά πιο ακριβής εξαγωγή της σχετικής θεωρίας δίνεται στο παράρτημα B'.

Η διαδικασία που λαμβάνει χώρα κατά τη φασματοσκοπία συντονισμένης α-



Σχήμα 1.3: Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας διέγερσης - αποδιέγερσης σε πειράματα (a) έμμεσης και (b,c) άμεσης συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X. Οι διεγέρσεις στην τελική κατάσταση είναι σπινόνια. Στο σχήμα (c) η σύζευξη σπιν - τροχιάς (διαστιγμένο βέλος) οδηγεί σε μεταβολή του συνολικού χβαντικού αριθμού σπιν της ζώνης σθένους της αλυσίδας. Πηγή: [6]

νελαστικής σκέδασης ακτίνων X χωρίζεται σε δύο στάδια. Αρχικά, φωτόνια ακτίνων X διεγείρουν ηλεκτρόνια των χαμηλών στοιβάδων των ατόμων του υλικού που μελετάται σε ημικατελημμένες ή άδειες στοιβάδες υψηλής ενέργειας, αφήνοντας μία οπή στο σύστημα. Όταν ένα διεγερμένο ηλεκτρόνιο εισάγεται στη στοιβάδα σθένους, η διαδικασία καλείται άμεση, αφού το ηλεκτρόνιο εισάγεται απευθείας στην καθοριστικότερη για της ιδιότητες του υλικού στοιβάδα, ενώ όταν καταλήγει σε υψηλότερες στάθμες η διαδικασία καλείται έμμεση. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στη συνέχεια περιορίζονται στη μετάβαση $2p \rightarrow 3d$, η οποία για οξείδια στοιχείων μετάβασης είναι άμεση. Στην ενδιάμεση κατάσταση, η οπή στη στάθμη χαμηλής ενέργειας διαταράσσει το σύστημα για χρονικά διαστήματα της τάξης των 10^{-15} s. Στη συνέχεια, ένα ηλεκτρόνιο επανασυνδέεται με την οπή, εκπέμποντας ένα φωτόνιο με ενέργεια και ορμή δια-

φορετικές από αυτές του εισερχομένου φωτονίου. Οι διαφορές ενέργειας και ορμής μεταξύ φωτονίων των εισερχόμενων και εξερχόμενων δεσμών είναι οι πειραματικά προσδιοριζόμενες ποσότητες. Η διαδικασία συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X απεικονίζονται στο σχήμα 1.3.

Η διαφορική ενεργός διατομή που αντιστοιχεί στα φάσματα συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X δίνεται από τη σχέση Kramers - Heisenberg [7]

$$w \propto \sum_f |F_{fg}|^2 \delta(E_f - E_g - \Delta\omega), \quad (1.13)$$

όπου η άθροιση γίνεται σε όλες τις πιθανές τελικές κβαντομηχανικές ιδιοκαταστάσεις $|f\rangle$ του μοντέλου t - J με ιδιοενέργειες E_f . Ο παράγοντας $|F_{fg}|^2$ είναι η πιθανότητα μετάβασης από την αρχική ιδιοκατάσταση $|g\rangle$ με ιδιοενέργεια E_g στην τελική κατάσταση $|f\rangle$ με μεταφορά ενέργειας $\Delta\omega$ και ορμής $q \equiv k_g - k_f$, όπως αυτή δίνεται από θεωρία διαταραχών δεύτερης τάξης, και είναι:

$$F_{fg}(\omega_{\text{in}}) \equiv \sum_n \frac{\langle f | \hat{D}^\dagger | n \rangle \langle n | \hat{D} | g \rangle}{E_g - E_n + \omega_{\text{in}} + i\Gamma}. \quad (1.14)$$

Η συχνότητα ω_{in} ονομάζεται συχνότητα αποσυντονισμού και είναι πειραματικά ελεγχόμενη παράμετρος, η οποία επιτρέπει τον (απο)συντονισμό από τις ενέργειες μετάβασης $E_n - E_g$ στις διεγερμένες ενδιάμεσες καταστάσεις $|n\rangle$. Η παράμετρος Γ είναι ο αντίστροφος χρόνος ζωής των ενδιάμεσων καταστάσεων. Η μετάβαση προκαλείται από το διπολικό τελεστή

$$\hat{D} = \sum_{j\sigma}^N e^{ikR_j} \hat{d}_{j\sigma}^\dagger \hat{p}_{j\sigma}, \quad (1.15)$$

όπου οι τελεστές $\hat{p}_{j\sigma}$ και $\hat{d}_{j\sigma}^\dagger$ δημιουργούν μία οπή με σπιν σ στη θέση R_j στην υποστοιβάδα $2p$ και ένα ηλεκτρόνιο με σπιν σ στη θέση R_j στην υποστοιβάδα $3d$ αντίστοιχα. Η διαταραχή στην ενδιάμεση κατάσταση μπορεί να συμπεριληφθεί ως ένας επιπλέον όρος στη χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H}_{\text{core}} = -V_c \sum_{j\sigma\sigma'}^N \hat{n}_{j\sigma} \hat{n}_{j\sigma'}^p, \quad (1.16)$$

ο οποίος περιγράφει την έλξη μεγέθους V_c που δέχονται τα ηλεκτρόνια στη θέση όπου εισάγεται η οπή². Οι τελεστές $\hat{n}_{j\sigma}$ και $\hat{n}_{j\sigma}^p$ καταμετρούν ηλεκτρόνια

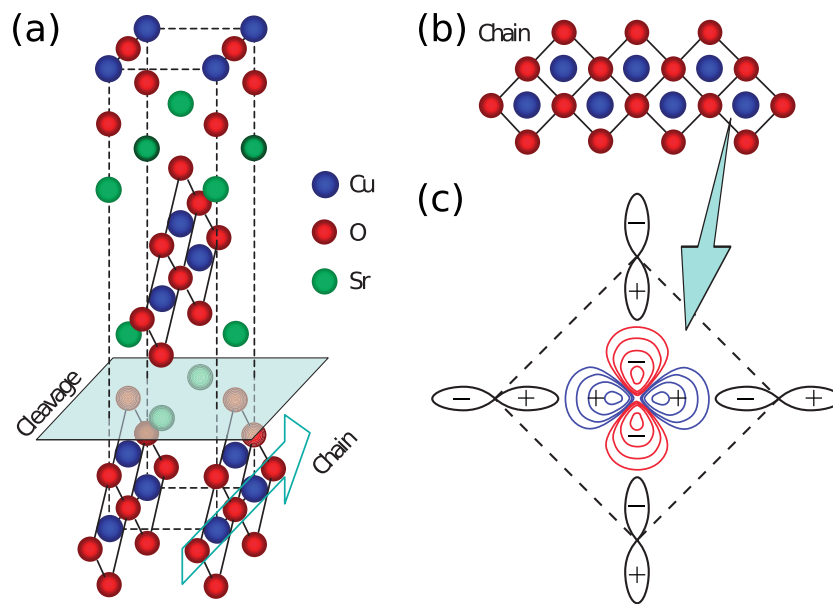
²Η οπή αυτή θεωρείται ακίνητη, αφού η πιθανότητα μεταπήδησής της στο χρονικό διάστημα $\sim 1/\Gamma$ είναι μηδαμινή.

σθένους και οπές στη στάθμη χαμηλής ενέργειας αντίστοιχα, στη θέση R_j με σπιν σ .

Όπως φαίνεται στο σχήμα 1.3, υπάρχουν δύο δυνατοί τρόποι αποδιέγερσης κατά την άμεση διαδικασία. Λόγω της ισχυρής σύζευξης σπιν - τροχιάς, το σπιν του ηλεκτρονίου που επανασυνδέεται με την οπή χαμηλής ενέργειας μπορεί να διαφέρει από το σπιν του διεγερμένου ηλεκτρονίου. Η περίπτωση αυτή έχει μάλιστα την μεγαλύτερη συνεισφορά στο μετρούμενο σήμα, τουλάχιστον στη μαγνητική ενεργειακή περιοχή, αφού οι διεγέρσεις δημιουργούνται μέσω διαδικασίας «μηδενικής» τάξης, αφού δηλαδή δεν απαιτείται σκέδαση από το ελκτικό δυναμικό της οπής χαμηλής ενέργειας [6].

1.3 Διαχωρισμός φορτίου - σπιν

Μία από τις εντυπωσιακότερες συνέπειες της ισχυρής αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων στους μονωτές Mott είναι ο διαχωρισμός των βαθμών ελευθερίας φορτίου και σπιν των ηλεκτρονίων σε μονοδιάστατα συστήματα³. Ο διαχωρι-



Σχήμα 1.4: Σχηματική απεικόνιση (a) του Sr₂CuO₃, (b) της προκύπτουσας αλυσίδας μέσα σε αυτό και (c) της διάταξης των τροχιακών στην αλυσίδα, η οποία οδηγεί στο σχηματισμό των Zhang - Rice singlets. Πηγή: [8]

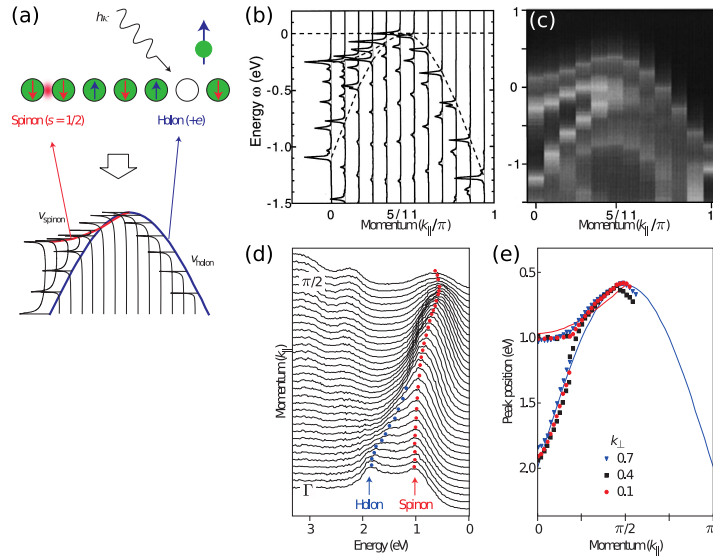
³Το κατά πόσο ο ίδιος διαχωρισμός συμβαίνει σε διδιάστατα συστήματα αποτελεί ενεργό πεδίο έρευνας.

σμός προβλέφθηκε αρχικά θεωρητικά [4] και ύστερα ανακαλύφθηκε πειραματικά με τη μέθοδο της φασματοσκοπίας φωτοεκπομπής [9, 10, 8]. Τα σχετικά υλικά, π.χ. SrCuO_2 , Sr_2CuO_3 κ.α., ανήκουν στην κατηγορία μονοδιάστατων συστημάτων της οικογένειας των οξειδίων του χαλκού⁴. Λόγω του παρατηρούμενου διαχωρισμού φορτίου - σπιν, καθώς και της συνάφειας με τους διδιάστατους συγγενείς της οικογένειας, δηλαδή με τους υπεραγωγούς υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας οξειδίων του χαλκού, τα υλικά αυτά είναι εξαιρετικά ενδιαφέροντα. Σε αυτή την παράγραφο θα παρουσιαστούν συνοπτικά τα βασικά στοιχεία για την ερμηνεία του διαχωρισμού φορτίου - σπιν στο Sr_2CuO_3 , του οποίου η κρυσταλλική γεωμετρία δίνεται στο σχήμα 1.4, μέσω των ιδιοτήτων του μοντέλου t - J .

Προτού παρουσιαστεί ο διαχωρισμός φορτίου - σπιν, θα πρέπει αρχικά να δικαιολογηθεί η καταλληλότητα του μοντέλου t - J για την περιγραφή του Sr_2CuO_3 . Όπως φαίνεται στο σχήμα 1.4, η κρυσταλλική δομή του υλικού είναι τριδιάστατη. Ωστόσο, οι ιδιότητες μεταφοράς, καθώς και η αποκρίσεις σε πειράματα φασματοσκοπίας, καθορίζονται κατά κύριο λόγο από τα ηλεκτρόνια της υποστοιβάδας $3d$ των ατόμων χαλκού. Τα αντίστοιχα τροχιακά είναι υβριδισμένα με τα τροχιακά $2p$ των ατόμων οξυγόνου, σχηματίζοντας συνολικά αλυσίδες πλακετών CuO_2 . Θεωρώντας, στην απλούστερη περίπτωση, μόνο το τροχιακό $d_{x^2-y^2}$, αποδεικνύεται ότι ο υβριδισμός οδηγεί σε μια νέα δέσμια κατάσταση μεταξύ οπών στο κεντρικό άτομο Cu της κάθε πλακέτας και οπών στα γειτονικά άτομα O [11]. Το προκύπτον οιονεί-σωματίδιο ονομάζεται Zhang - Rice singlet και είναι αρκετά συμπαγές, ώστε να μεταπηδά από πλακέτα σε πλακέτα. Γίνεται επομένως φανερό ότι το σύστημα αντιπροσωπεύεται απλά από μια αλυσίδα πλεγματικών θέσεων, τόσο για τα οιονεί-σωματίδια, όσο και για τα σπιν, τα οποία βρίσκονται πάντα στο κέντρο της κάθε πλακέτας.

Ο διαχωρισμός φορτίου - σπιν εμφανίζεται στη φασματική συνάρτηση $A(\mathbf{k}, \omega)$ των μοντέλων Hubbard και t - J , η οποία αντιστοιχεί σε πειράματα φωτοεκπομπής. Το κυριότερο στοιχείο που υποδεικνύει το διαχωρισμό είναι η ύπαρξη δύο σαφώς καθορισμένων κλάδων ενεργειακής διασποράς στην $A(\mathbf{k}, \omega)$. Η συμπεριφορά αυτή εξηγείται προσεγγιστικά, αν θεωρηθεί ότι η οπή, η οποία παραμένει στο σύστημα ύστερα από τη φωτοεκπομπή, διαχωρίζεται σε δύο ανεξάρτητα διαδιδόμενους βαθμούς ελευθερίας φορτίου και σπιν [12, 9, 13]. Οι βαθμοί ελευθερίας αυτοί αποτελούν καλά ορισμένα οιονεί-σωματίδια, τα οποία καλούνται αντιφορτίονια και σπινόνια αντίστοιχα. Για τη σύγκριση της θεωρίας με τα πειραματικά αποτελέσματα απαιτείται συνεπώς ο υπολογισμός της φασματικής

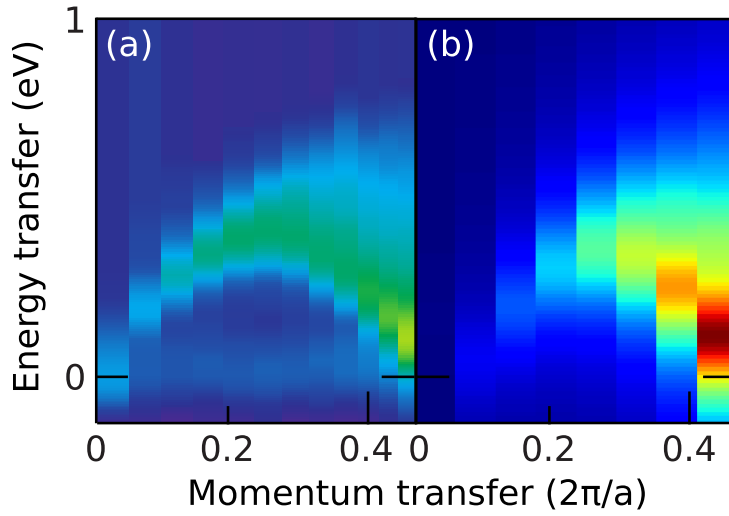
⁴Τα υλικά αυτά καλούνται καταχρηστικά μονωτές Mott, αφού ανάμεσα στις δύο ζώνες Hubbard υπάρχει μια ακόμα ενεργειακή ζώνη, η οποία αντιστοιχεί στα τροχιακά $2p$ του οξυγόνου. Παρότι, όπως θα φανεί στην επόμενη παράγραφο, το σχετικό ενεργό μοντέλο χαμηλών ενεργειών είναι και πάλι το μοντέλο t - J , κατά μια πιο σωστή κατηγοριοποίηση τα οξείδια του χαλκού είναι μονωτές μεταφοράς φορτίου.



Σχήμα 1.5: (a) Σχηματική απεικόνιση της διαδικασίας φωτοεκπομπής, καθώς και της αντίστοιχης φασματικής συνάρτησης, για το διαχωρισμό φορτίου - σπιν, σύγκριση μεταξύ (b) αριθμητικής επίλυσης του μοντέλου t - J με σταθερές $t = 0.6$ eV και $J = 0.2$ eV και (c) πειραματικά παρατηρούμενης φασματικής συνάρτησης, (d) προσδιορισμός των κλάδων ενεργειακής διασποράς αντιφορτιονίων και σπινονίων και (e) σύγκριση μεταξύ πειράματος και ενεργού θεωρίας ανεξάρτητων αντιφορτιονίων και σπινονίων με σταθερές $t = 0.65$ eV και $J = 0.27$ eV για το μονοδιάστατο υλικό Sr_2CuO_3 . Πηγές: (a, d, e) [8], (b, c) [10]

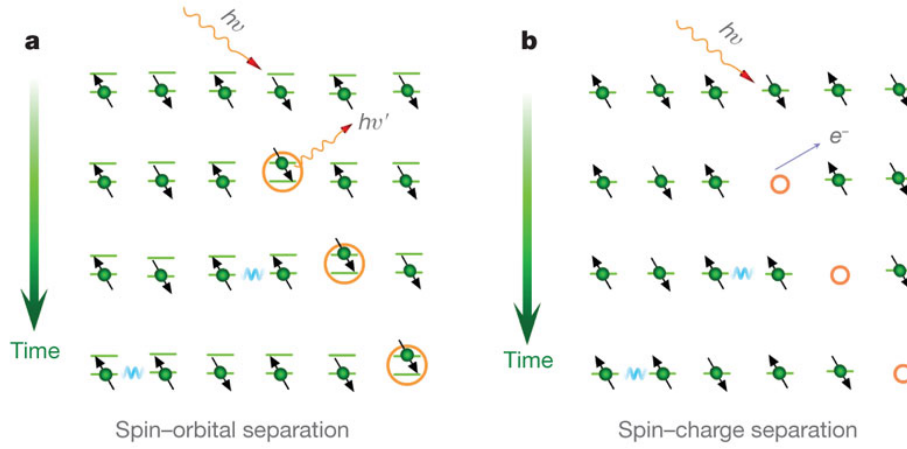
συνάρτησης του μοντέλου t - J , για περιπτώσεις στις οποίες η θεωρία διαταραχών δεν ισχύει και δεν υπάρχουν γνωστές αναλυτικές εκφράσεις. Η φασματική συνάρτηση μπορεί τότε να υπολογιστεί αριθμητικά για πεπερασμένα συστήματα. Μια τέτοια σύγκριση για το μονοδιάστατο υλικό Sr_2CuO_3 παρουσιάζεται στο σχήμα 1.5. Παρόλο που το μέγεθος του συστήματος που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση είναι μικρό, τα αποτελέσματα συνάδουν με τις πειραματικές παρατηρήσεις. Η συμφωνία αυτή υποδεικνύει τη χρησιμότητα των μοντέλων Hubbard και t - J για την περιγραφή αυτού του συστήματος, την καταλληλότητα της αριθμητικής μεθόδου για τον υπολογισμό της φασματικής συνάρτησης, καθώς και την εγκυρότητα της ενεργού θεωρίας ελεύθερα διαδιδόμενων διεγέρσεων, η οποία καταδεικνύει το διαχωρισμό του ηλεκτρονίου σε δύο νέες οντότητες.

Οι δύο ενεργειακοί κλάδοι που εμφανίζονται στη φασματική συνάρτηση είναι σαφής ένδειξη του διαχωρισμού φορτίου - σπιν. Παρόλα αυτά, είναι ενδιαφέρον



Σχήμα 1.6: Σύγκριση μεταξύ (a) πειράματος (πηγή: [14]) και (b) θεωρίας συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X για το υλικό Sr_2CuO_3 . Για τα θεωρητικά αποτελέσματα χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος επακριβούς διαγωνοποίησης και το φάσμα υπολογίστηκε για το μοντέλο t - J με σταθερές $J = 0.25 \text{ eV}$ και $t = 0.6 \text{ eV}$, οι οποίες συνάδουν με προηγούμενα πειραματικά αποτελέσματα, σε μια περιοδική αλυσίδα 16 θέσεων. Σημειώνεται ότι οι χρωματικοί κώδικες είναι διαφορετικοί και ότι στην περίπτωση των πειραματικών αποτελεσμάτων η χρωματική κλίμακα είναι λογαριθμική, ώστε να απομονωθεί καλύτερα η διασπορά των σπινονίων από το υπόβαθρο.

να απομονωθεί η διασπορά ενός από τους δύο τμηματικούς βαθμούς ελευθερίας. Η άμεση συντονισμένη ανελαστική σκέδαση ακτίνων X παρέχει αυτή τη δυνατότητα. Θεωρώντας ότι η κύρια συνεισφορά προέρχεται από τη διαδικασία που απεικονίζεται στο σχήμα 1.3(c), παρατηρεί κανείς ότι οι διεγέρσεις στην τελική κατάσταση είναι σπινόνια. Η εικόνα αυτή επιβεβαιώνεται από πειράματα στο Sr_2CuO_3 . Στο σχήμα 1.6 παρουσιάζεται μια ποιοτική σύγκριση μεταξύ θεωρίας και πειράματος. Σημειώνεται ότι τα φάσματα του σχήματος 1.6 θυμίζουν τα αντίστοιχα φάσματα ανελαστικής σκέδασης νετρονίων. Ο λόγος για αυτό είναι ότι η τελική κατάσταση της διαδικασίας που απεικονίζεται στο σχήμα 1.3(c) είναι παρόμοια με αυτή που προκύπτει ύστερα από την ανελαστική σκέδαση νετρονίων. Η διαφορά συνίσταται στον πεπερασμένο χρόνο ζωής της ενδιάμεσης κατάστασης της συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ηλεκτρονίων, ο οποίος επηρεάζει τις διεγέρσεις και επομένως το μετρούμενο φάσμα [6].



Σχήμα 1.7: Σχηματική απεικόνιση (a) διαχωρισμού σπιν - τροχιακού σε πειράματα άμεσης συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X και (b) διαχωρισμού φορτίου - σπιν σε πειράματα φασματοσκοπίας φωτοεκπομπής. Γίνεται φανερή η αντιστοιχία μεταξύ των δύο πειραματικών διαδικασιών. Πηγή: [14]

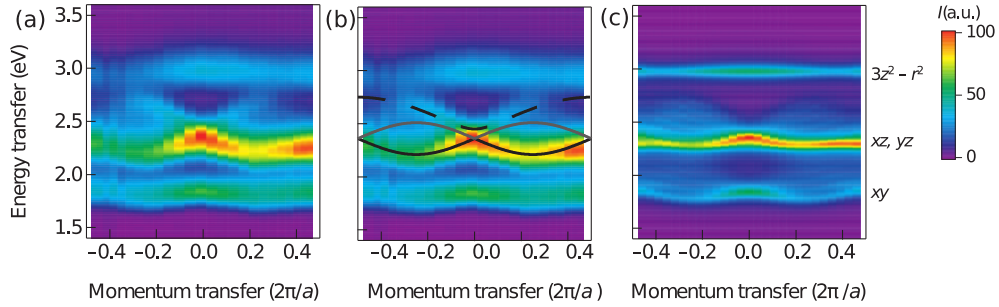
1.4 Διαχωρισμός σπιν - τροχιακού

Σε ορισμένα ηλεκτρονικά συστήματα, στα οποία περισσότερα από ένα τροχιακά παίζουν ρόλο στις παρατηρούμενες ιδιότητες, είναι δυνατός ο περαιτέρω διαχωρισμός των βαθμών ελευθερίας των ηλεκτρονίων. Συγκεκριμένα, διεγέρσεις των βαθμών ελευθερίας σπιν και τροχιακού του ηλεκτρονίου μπορούν να διαδοθούν ανεξάρτητα μέσα στον κρύσταλλο. Ωστόσο, για τη δημιουργία και την παρατήρηση τέτοιων διεγέρσεων απαιτείται μια κατάλληλη πειραματική μέθοδος, ικανή να απεικονίσει τη διασπορά των διαφορετικών βαθμών ελευθερίας. Η φασματοσκοπία ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X διακρίνει τη ξεχωριστή διασπορά βαθμών ελευθερίας σπιν, φορτίου και τροχιακού.

Προτού παρουσιαστεί η ποσοτική σύγκριση μεταξύ θεωρίας και πειράματος, αξίζει να περιγραφεί σχηματικά η διαδικασία που οδηγεί στο διαχωρισμό. Όπως φαίνεται στο σχήμα 1.7, η διέγερση ενός ηλεκτρονίου σε κάποιο τροχιακό ανώτερης ενέργειας οδηγεί σε μια κατάσταση παρόμοια με την φωτοεκπομπή ενός ηλεκτρονίου στο μοντέλο t - J . Η ισοδυναμία αυτή, η οποία αποδεικνύεται και μαθηματικά [15, 16], οδηγεί σε ένα ενεργό μοντέλο Kugel' - Khomskii της μορφής

$$\mathcal{H}_{\text{KK}} = -J_0 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \text{h.c.}) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.17)$$

όπου J_0 είναι η το ολοκλήρωμα μεταπήδησης της τροχιακής διέγερσης και J η συνθήκης σταθερά ανταλλαγής Heisenberg. Σημειώνεται ότι και οι δύο αυ-



Σχήμα 1.8: (a) Φάσμα συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X για το μονοδιάστατο υλικό Sr_2CuO_3 . (b) Σύγκριση με θεωρητικά προβλεπόμενη ενεργειακή διασπορά των διεγέρσεων για το τροχιακό xz . (c) Θεωρητική πρόβλεψη για το διαχωρισμό σπιν - τροχιακού. Για τον υπολογισμό της φασματικής συνάρτησης χρησιμοποιήθηκε το μοντέλο Kugel' - Khomskii της εξ. 1.17 για περιοδική αλυσίδα 28 θέσεων, με σταθερές $J_0 = 0.075$ eV και $J = 0.25$ eV. Πηγή: [14]

τές ποσότητες μπορούν να εξαχθούν από ανεξάρτητες πειραματικές μετρήσεις. Μέσω αυτής της περιγραφής, γίνεται φανερό ότι η τροχιακή διέγερση λαμβάνει ρόλο αντίστοιχο με αυτό του αντιφορτιονίου στο διαχωρισμό φορτίου - σπιν.

Η σύγκριση του μοντέλου με τα πειραματικά αποτελέσματα παρουσιάζεται στο σχήμα 1.8. Παρόλο που η αριθμητική προσομοίωση συνάδει με τα πειραματικά αποτελέσματα, σε αυτή την περίπτωση οι δύο κλάδοι δεν είναι σαφώς καθορισμένοι, σε αντίθεση με το διαχωρισμό φορτίου - σπιν. Η αιτία για αυτή τη διαφοροποίηση είναι η διαφορά μεταξύ των λόγων $J_0/J \sim 2$ και $t/J \sim 1/3$. Ωστόσο, αποδεικνύεται ότι το παρατηρούμενο φάσμα είναι ουσιαστικά η συνέλιξη των φασμάτων των δύο ανεξάρτητων διεγέρσεων [13].

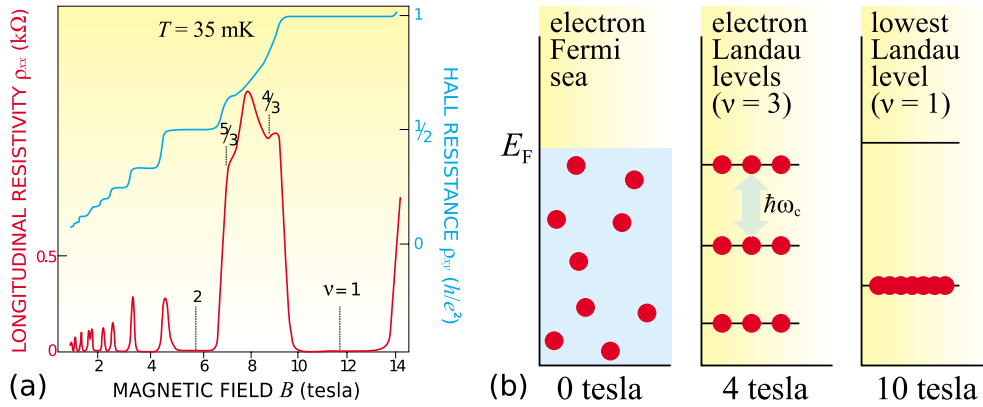
Κεφάλαιο 2

Διαχωρισμός βαθμών ελευθερίας σε δύο διαστάσεις

Εισαγωγή

Η φυσική συμπυκνωμένης ύλης των διδιάστατων συστημάτων είναι εξαιρετικά πλούσια σε μη συμβατικά φαινόμενα. Από την υπεραγωγιμότητα υψηλής κρίσιμης θερμοκρασίας των οξειδίων του χαλκού ως την κολοσσιαία μαγνητοαντίσταση των οξειδίων του μαγγανίου συναντά κανείς πληθώρα εκπληκτικών ιδιοτήτων, πολλές από τις οποίες παραμένουν ανεξήγητες ακόμη και σήμερα. Ένα από αυτά τα φαινόμενα είναι το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall, το οποίο συνίσταται σε κβαντισμένη μακροσκοπικά παρατηρούμενη αγωγιμότητα Hall, και αποτελεί αναμφίβολα μια από τις δραματικότερες μακροσκοπικές εκφάνσεις της κβαντικής φύσης της ύλης. Η ερμηνεία της ανακάλυψης αυτής επέκτεινε την έννοια της κατάστασης τάξης πέρα από τη συμβατική αντιμετώπιση της θεωρίας Landau και υπέδειξε τη σημασία της τοπολογίας που διέπει κάθε κβαντομηχανικό σύστημα. Έκτοτε, η έννοια του τοπολογικού αναλλοιώτου υπεισέρχεται διαρκώς σε πειραματικές παρατηρήσεις και θεωρητικές προβλέψεις, γεγονός που είχε ως αποτέλεσμα τη δημιουργία του κλάδου έρευνας της συμπυκνωμένης ύλης των τοπολογικών μονωτών.

Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των βαθμών ελευθερίας, που υπεισέρχονται στη φυσική των διδιάστατων συστημάτων, είναι σαφώς ένας από τους λόγους για την πολλαπλότητα αλλά και την πολυπλοκότητα των ενδιαφερόντων φαινομένων. Το κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall είναι συνέπεια της αλληλεπίδρασης μεταξύ ηλεκτρονίων και οι προκύπτουσες κβαντικές καταστάσεις έχουν μοναδικές ιδιότητες προερχόμενες από την αλληλεπίδραση αυτή. Επόμενο βήμα αποτελεί η εύρεση φυσικών συστημάτων, στα οποία το ενεργειακό χάσμα που διαφυλάσσει τις ιδιότητες της μη τετριμμένης τοπολογίας προστατεύεται με τη σειρά



Σχήμα 2.1: (a) Πειραματική παρατήρηση του ακέραιου χβαντικού φαινομένου Hall κατά μετρήσεις μεταφοράς σε ημιαγώγιμες μικροσυσκευές. (b) Ποιοτική περιγραφή του φαινομένου: τα ηλεκτρόνια οργανώνονται σε στάθμες Landau, καθένα από τις οποίες συνεισφέρει ένα χβάντο αγωγιμότητας Hall όταν είναι πλήρης. Πηγή: [24]

του από ισχυρές αλληλεπιδράσεις, όπως στην περίπτωση των μονωτών Mott του προηγούμενου κεφαλαίου. Οι επιθυμητές καταστάσεις είναι λοιπόν ισχυρά συσχετισμένες τοπολογικές φάσεις, οι οποίες είναι και το μείζον αντικείμενο του κεφαλαίου αυτού.

2.1 Κβαντικά φαινόμενα Hall

2.1.1 Ακέραιο χβαντικό φαινόμενο Hall

Το ακέραιο χβαντικό φαινόμενο Hall ανακαλύφθηκε το 1980, κατά την πειραματική μελέτη του διδιάστατου αερίου ηλεκτρονίων που σχηματίζεται σε ημιαγώγιμες μικροσυσκευές [17]. Συνίσταται στην εξαιρετικά ακριβή χβάντωση της αγωγιμότητας Hall σ_{xy} ανεξαρτήτως πειραματικών λεπτομερειών. Η ανακάλυψη αυτή πυροδότησε πληθώρα θεωρητικών και πειραματικών εργασιών, ορισμένες από τις οποίες κατέληξαν σε θεμελιώδη αποτελέσματα για την κατανόηση της στερεάς κατάστασης. Ένα από αυτά αποτελεί η ερμηνεία της αγωγιμότητας Hall ως αναλλοίωτης ποσότητας, η οποία αντιπροσωπεύει την τοπολογία του υπό μελέτη συστήματος [18]. Καθότι παίζει σημαντικό ρόλο στα αποτελέσματα αυτού του κεφαλαίου, η έννοια του τοπολογικού αναλλοιώτου παρουσιάζεται συνοπτικά στη συνέχεια. Πιο εμπεριστατωμένες αναλύσεις μπορούν να βρεθούν στη βιβλιογραφία [19, 20, 21, 22, 23].

Έστω διδιάστατο αέριο μη αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων, περιορισμένων

στην περιοχή $[0, L_x] \times [0, L_y]$ του επιπέδου xy , μέσα σε ομογενές μαγνητικό πεδίο επαγωγής $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{z}}$ κάθετα στο επίπεδο του ηλεκτρονικού συστήματος. Η χαμιλτονιανή που περιγράφει το κάθε ηλεκτρόνιο είναι

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} + \mathbf{A}(\mathbf{r})]^2, \quad (2.1)$$

όπου η μαγνητική επαγωγή δίνεται από το διανυσματικό δυναμικό \mathbf{A} μέσω της σχέσης $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Στο εξής θα χρησιμοποιηθεί για ευκολία η συμμετρική βαθμίδα $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (\mathbf{B} \times \mathbf{r})/2$, χωρίς η επιλογή αυτή να επηρεάζει τα τελικά αποτελέσματα.

Εφόσον το μαγνητικό πεδίο είναι ομογενές, το διανυσματικό πεδίο εξαρτάται από τη θέση \mathbf{r} . Αυτό σημαίνει ότι η χαμιλτονιανή δεν είναι συμμετρική ως προς μετατοπίσεις $T_{\mathbf{R}} = \exp[(i/\hbar)\mathbf{R} \cdot \mathbf{p}]$, παρότι το φυσικό σύστημα δε σπάει αυτή τη συμμετρία. Για την επαναφορά της συμμετρίας, μπορούν να οριστούν νέοι μαγνητικοί τελεστές μετατόπισης [25, 26]

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{R} \cdot \mathbf{\Pi}}, \quad (2.2)$$

όπου οι τελεστές που σχηματίζουν το διάνυσμα $\mathbf{\Pi}$ καλούνται δυναμικοί τελεστές ορμής και είναι

$$\Pi_j = p_j + eA_j, \quad j = x, y \quad (2.3)$$

και $p_j = -i\partial/\partial j$, $j = x, y$. Οι δυναμικοί τελεστές ορμής μετατίθενται με τη χαμιλτονιανή:

$$[\mathcal{T}_{\mathbf{R}}, \mathcal{H}] = 0, \quad (2.4)$$

αλλά όχι μεταξύ τους:

$$\mathcal{T}_{\mathbf{R}_a} \mathcal{T}_{\mathbf{R}_b} = \mathcal{T}_{\mathbf{R}_b} \mathcal{T}_{\mathbf{R}_a} \exp \left[-2\pi i \frac{eB}{h} (\mathbf{R}_a \times \mathbf{R}_b) \cdot \hat{\mathbf{z}} \right] = \mathcal{T}_{\mathbf{R}_b} \mathcal{T}_{\mathbf{R}_a} \exp[-2\pi i \phi], \quad (2.5)$$

αφού $[\mathbf{R}_a \cdot \mathbf{\Pi}, \mathbf{R}_b \cdot \mathbf{\Pi}] = [\Pi_x, \Pi_y](\mathbf{R}_a \times \mathbf{R}_b) \cdot \hat{\mathbf{z}}$ και $[\Pi_x, \Pi_y] = ie\hbar B$. Από την τελευταία έκφραση γίνεται φανερό ότι, όταν η μαγνητική ροή ϕ παίρνει ακέραιες τιμές, οι μαγνητικοί τελεστές μετατόπισης μετατίθενται. Επιπλέον, είναι δυνατό να οριστεί η μονάδα μήκους $l = \sqrt{\hbar/eB}$ για τα διανύσματα μετατόπισης, η οποία ονομάζεται μαγνητικό μήκος. Μετατοπίσεις $l + \delta l$ στην κατεύθυνση x ή y είναι ισοδύναμες με μετατοπίσεις δl στην ίδια κατεύθυνση. Προκύπτει λοιπόν ότι η παρουσία του μαγνητικού πεδίου δημιουργεί ένα ενεργό τετραγωνικό πλέγμα Bravais με πλεγματική σταθερά $\sqrt{\hbar/eB}$.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, οι τελεστές $\mathcal{T}_{\mathbf{R}}$ και η χαμιλτονιανή έχουν κοινές ιδιοσυναρτήσεις ψ , κατ' αντιστοιχία με την περίπτωση ηλεκτρονίων Bloch. Οι

εξισώσεις ιδιοτιμών για τους μαγνητικούς τελεστές μετατόπισης είναι

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_{a\hat{x}}\psi &= e^{i\kappa_x a}\psi \\ \mathcal{T}_{b\hat{y}}\psi &= e^{i\kappa_y b}\psi,\end{aligned}\quad (2.6)$$

όπου κ_j , $j = x, y$ είναι οι συνιστώσες της μαγνητικής κρυσταλλικής ορμής $\boldsymbol{\kappa}$, περιορισμένες στη μαγνητική ζώνη Brillouin $[0, 0] \leq [\kappa_x, \kappa_y] \leq [2\pi/L_x, 2\pi/L_y]$. Αυτό σημαίνει ότι οι ιδιοσυναρτήσεις μπορούν να γραφούν σε μορφή Bloch ως

$$\psi_{\kappa_x\kappa_y}(x, y) = e^{i\kappa_x x + i\kappa_y y} u_{\kappa_x\kappa_y}(x, y), \quad (2.7)$$

όπου οι $u_{\kappa_x\kappa_y}(x, y)$ ακολουθούν τις γενικευμένες συνθήκες Bloch

$$\begin{aligned}u_{\kappa_x\kappa_y}(x + al, y) &= e^{-i\pi y/l} u_{\kappa_x\kappa_y}(x, y) \\ u_{\kappa_x\kappa_y}(x, y + bl) &= e^{i\pi x/l} u_{\kappa_x\kappa_y}(x, y).\end{aligned}\quad (2.8)$$

Οι ιδιοσυναρτήσεις $\psi_{\kappa_x\kappa_y}$ σχηματίζουν το χώρο Hilbert του προβλήματος.

Για τον υπολογισμό της αγωγιμότητας Hall χρησιμοποιείται ο τύπος γραμμικής απόκρισης του Kubo [27]

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2\hbar}{L_x L_y} \sum_{n>0} \frac{\langle 0|v_x|n\rangle \langle n|v_y|0\rangle - \langle 0|v_y|n\rangle \langle n|v_x|0\rangle}{(E_n - E_0)^2}, \quad (2.9)$$

όπου με $|0\rangle$ και $|n\rangle$ συμβολίζονται η θεμελιώδης και οι διεγερμένες καταστάσεις με ενέργειες E_0 και E_n αντίστοιχα. Οι συνιστώσες του τελεστή ταχύτητας δίνονται από τον τελεστή δυναμικής ορμής μέσω της σχέσης $\mathbf{v} = \mathbf{\Pi}/m$. Για τον υπολογισμό των στοιχείων πίνακα χρειάζεται να γίνει ολοκλήρωση μόνο στη θεμελιώδη μαγνητική κυψελίδα. Κάνοντας τον μοναδιαίο μετασχηματισμό

$$u(\mathbf{r}) = e^{-i\boldsymbol{\kappa}\cdot\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

η αγωγιμότητα Hall μπορεί να γραφεί ως

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{L_x L_y \hbar} \sum_{n>0} \frac{\langle u_0|\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\kappa_x}|u_n\rangle \langle u_n|\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\kappa_y}|u_0\rangle - \langle u_0|\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\kappa_y}|u_n\rangle \langle u_n|\frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\kappa_x}|u_0\rangle}{(E_n - E_0)^2}, \quad (2.11)$$

όπου με $\tilde{\mathcal{H}}$ συμβολίζεται η μετασχηματισμένη χαμιλτονιανή

$$\tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}[\mathbf{p} + \hbar\boldsymbol{\kappa} + \mathbf{A}(\mathbf{r})]^2 \quad (2.12)$$

και οι καταστάσεις $|u_0\rangle, |u_n\rangle$ αντιστοιχούν στις κυματοσυναρτήσεις u_0, u_n αντίστοιχα. Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα

$$\left\langle u_n \left| \frac{\partial\tilde{\mathcal{H}}}{\partial\kappa_j} \right| u_0 \right\rangle = (E_0 - E_n) \left\langle u_n \left| \frac{\partial u_0}{\partial\kappa_j} \right\rangle, \quad j = x, y \quad (2.13)$$

και τη σχέση πληρότητας του χώρου Hilbert, προκύπτει η ακόλουθη σχέση για την αγωγιμότητα Hall:

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2}{\hbar} \left[\left\langle \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_x} \left| \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_y} \left| \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_x} \right\rangle \right], \quad (2.14)$$

όπου έχουν οριστεί οι γωνίες $\varphi_j = \kappa_j/L_j$, $j = x, y$.

Σε αυτό το σημείο, μερικά σχόλια είναι χρήσιμα για την ταύτιση της αγωγιμότητας Hall με τη χαρακτηριστική τοπολογικά αναλλοίωτη ποσότητα του συστήματος. Από τη μορφή (2.11) της αγωγιμότητας Hall είναι φανερό ότι η θεμελιώδης κατάσταση πρέπει να παραμένει πάντα διαχωρισμένη ενεργειακά από καταστάσεις υψηλότερης ενέργειας μέσω ενός ενεργειακού χάσματος, αφού στην αντίθετη περίπτωση ο τύπος γραμμικής απόκλισης αποκλίνει¹. Το πείραμα υποδεικνύει ότι η απαίτηση αυτή ικανοποιείται στις πειραματικές διατάξεις παρατήρησης του φαινομένου Hall, όπως μπορεί κανείς να συμπεράνει από τη μηδενική αγωγιμότητα σ_{xx} στο σχήμα 2.1, ενώ η επιτυχής θεωρητική περιγραφή μέσω των επιπέδων Landau προϋποθέτει ενεργειακό χάσμα οποτεδήποτε ένα επίπεδο Landau είναι πλήρες. Επίσης, αποδεικνύεται [21] ότι η αγωγιμότητα Hall παραμένει αμετάβλητη κατά τη μεταβολή των γωνιών φ_x, φ_y . Το γεγονός αυτό γίνεται διαισθητικά κατανοητό λαμβάνοντας υπ' όψιν ότι η θεμελιώδης κατάσταση δεν περιέχει συσχετισμούς μεγάλης εμβέλειας, επομένως αλλαγές στις συνοριακές συνθήκες, οι οποίες αντιπροσωπεύονται από τις γωνίες φ_x, φ_y , δεν επηρεάζουν τον όγκο του συστήματος. Τέλος, όταν η θεμελιώδης κατάσταση είναι διαχωρισμένη ενεργειακά από τις υπόλοιπες καταστάσεις και μη εκφυλισμένη, τότε μεταβολή των γωνιών φ_x, φ_y κατά 2π οδηγεί αναγκαστικά σε μια θεμελιώδη κατάσταση, η οποία διαφέρει το πολύ κατά έναν παράγοντα φάσης από την αρχική. Η φάση αυτή ονομάζεται φάση Berry [28] και, αφότου προβλέφθηκε, η σημαντικότητά της αναγνωρίστηκε σε πληθώρα πειραμάτων². Η συνθήκη αυτή μπορεί να γραφεί ως

$$\begin{aligned} |u_0(2\pi, \varphi_y)\rangle &= e^{i\lambda(\varphi_y)} |u_0(0, \varphi_y)\rangle \\ |u_0(\varphi_y, 2\pi)\rangle &= e^{i\mu(\varphi_x)} |u_0(\varphi_y, 0)\rangle. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Επομένως, ισχύει ότι

$$|u_0(2\pi, 2\pi)\rangle = e^{i[\lambda(0)+\mu(2\pi)]} |u_0(0, 0)\rangle = e^{i[\lambda(2\pi)+\mu(0)]} |u_0(0, 0)\rangle \quad (2.16)$$

και άρα

$$\lambda(2\pi) - \lambda(0) - \mu(2\pi) + \mu(0) = 2\pi n, \quad (2.17)$$

¹ Η απόκλιση αυτή είναι αναμενόμενη για μεταλλικά συστήματα χωρίς ατέλειες.

² Για αναλυτική παρουσίαση των συνεπειών της φάσης Berry βλ. [29]

όπου n ακέραιος.

Λαμβάνοντας υπ' όψιν τα παραπάνω, η έκφραση (2.14) για την αγωγιμότητα Hall μπορεί να αντικατασταθεί από τη μέση τιμή της για όλες τις γωνίες φ_x, φ_y :

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} = \bar{\sigma}_{xy} &= \frac{e^2}{2\pi i \hbar} \int \int_0^{2\pi} d\varphi_x d\varphi_y \left[\left\langle \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_y} \middle| \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_x} \middle| \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_y} \right\rangle \right] \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \left(\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_y}{2\pi i} \left[\left\langle u_0 \middle| \frac{\partial}{\partial \varphi_y} \middle| u_0 \right\rangle \right]_{\varphi_x=0}^{\varphi_x=2\pi} - \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi_x}{2\pi i} \left[\left\langle u_0 \middle| \frac{\partial}{\partial \varphi_x} \middle| u_0 \right\rangle \right]_{\varphi_y=0}^{\varphi_y=2\pi} \right) \\ &= \frac{e^2}{2\pi \hbar} [\lambda(2\pi) - \lambda(0) - \mu(2\pi) + \mu(0)] = \frac{e^2}{\hbar} n\end{aligned}\quad (2.18)$$

όπου για τη μετάβαση από την πρώτη στη δεύτερη γραμμή χρησιμοποιήθηκε η σχέση

$$\left\langle \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_y} \middle| \frac{\partial u_0}{\partial \varphi_x} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial \varphi_y} \left(\left\langle u_0 \middle| \frac{\partial}{\partial \varphi_x} \middle| u_0 \right\rangle \right) - \left\langle u_0 \middle| \frac{\partial^2}{\partial \varphi_y \partial \varphi_x} \middle| u_0 \right\rangle, \quad (2.19)$$

ή ισοδύναμα το θεώρημα Green. Ο ακέραιος n είναι γνωστός από τον κλάδο της τοπολογίας ως ο πρώτος αριθμός Chern.

Η τυπική επίλυση της χαμιλτονιανής (2.1) οδηγεί στα επίπεδα Landau (βλ. σχήμα 2.1), τα οποία είναι ο παραδοσιακός τρόπος περιγραφής των συστημάτων διδιάστατου ηλεκτρονικού αερίου. Το αξιοσημείωτο αποτέλεσμα της χβάντωσης της αγωγιμότητας Hall ισχύει ωστόσο γενικότερα για ενεργειακές ζώνες συστημάτων με κατάλληλη τοπολογία. Τέτοιου είδους ζώνες εμφανίζονται για παράδειγμα στο μοντέλο Hofstadter για ηλεκτρόνια Bloch σε δύο διαστάσεις παρουσία ομογενούς μαγνητικού πεδίου κάθετου στο πλέγμα [30]. Η χβάντωση της αγωγιμότητας Hall και το εντυπωσιακό διάγραμμα φάσης του μοντέλου αυτού επιβεβαιώθηκαν αργότερα πειραματικά [31]. Ορισμένα νεότερα παραδείγματα θα παρουσιαστούν στην παράγραφο 2.2. Μία ακόμα σημαντική παρατήρηση είναι ότι οι υπολογισμοί αυτής της υποενότητας αφορούν σε μία μεμονωμένη και ακριβώς πλήρη ενεργειακή ζώνη. Ωστόσο, στο πείραμα η αγωγιμότητα Hall παρουσιάζει πλατό για ένα εύρος τιμών της πλήρωσης του κάθε επιπέδου Landau (βλ. σχήμα 2.1). Τα πλατό αυτά οφείλονται σε εντοπισμένες ηλεκτρονικές καταστάσεις γύρω από ατέλειες, η ύπαρξη των οποίων διευρύνει τα επίπεδα Landau σε πραγματικά συστήματα [32]. Προκύπτει λοιπόν ότι οι ατέλειες της πειραματικής διάταξης είναι απαραίτητες για την παρατήρηση του ακέραιου χβαντικού φαινομένου Hall. Τέλος, σημειώνεται ότι οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων δεν παίζουν μείζονα ρόλο στο ακέραιο χβαντικό φαινόμενο Hall, αφού η σημαντική ενεργειακή κλίμακα είναι αυτή των ατελειών.

2.1.2 Κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall

Το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall παρατηρήθηκε για εύρος τιμών του μαγνητικού πεδίου, οι οποίες αντιστοιχούν σε διαφορετικούς αριθμούς πλήρων επιπέδων Landau. Καθώς οι χρησιμοποιούμενες μικροδιατάξεις περιείχαν ολοένα μικρότερες συγκεντρώσεις ατελειών, νέα πλατό Hall εμφανίστηκαν στις μετρήσεις, τα οποία προέκυψαν γύρω από κλασματικές πληρώσεις επιπέδων Landau [33]. Το φαινόμενο αυτό ονομάστηκε κλασματικό φαινόμενο Hall και η μελέτη του αποτελεί ενεργό πεδίο έρευνας μέχρι σήμερα.

Σε αντίθεση με το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall, για το κλασματικό φαινόμενο οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ηλεκτρονίων είναι απαραίτητο συστατικό, ενώ οι ατέλειες δρουν ενάντια σε αυτό. Το κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall ανήκει επομένως στην κατηγορία των προβλημάτων πολλών συσχετισμένων σωμάτων, γεγονός που αχυρώνει την απλή εικόνα των επιπέδων Landau, και για αυτό το λόγο η ακριβής επίλυσή του αποτελεί εξαιρετικά δύσκολη πρόκληση. Αριθμητικές προσομοιώσεις αποτέλεσαν και αποτελούν συνεπώς ένα από τα βασικότερα εργαλεία για την αντιμετώπιση του προβλήματος. Στη συνέχεια παρουσιάζονται περιληπτικά ορισμένα σημαντικά αποτελέσματα σχετικά με το υπόλοιπο της εργασίας.

Παρόλο που η κλασματική περίπτωση είναι σημαντικά πολυπλοκότερη από την ακέραια, ορισμένα συμπεράσματα της προηγούμενης υποενότητας μπορούν να γενικευθούν απευθείας. Θεωρώντας γεωμετρία όμοια με αυτή της προηγούμενης υποενότητας, η σχετική χαμιλτονιανή για το πρόβλημα N αλληλεπιδρώντων ηλεκτρονίων γράφεται

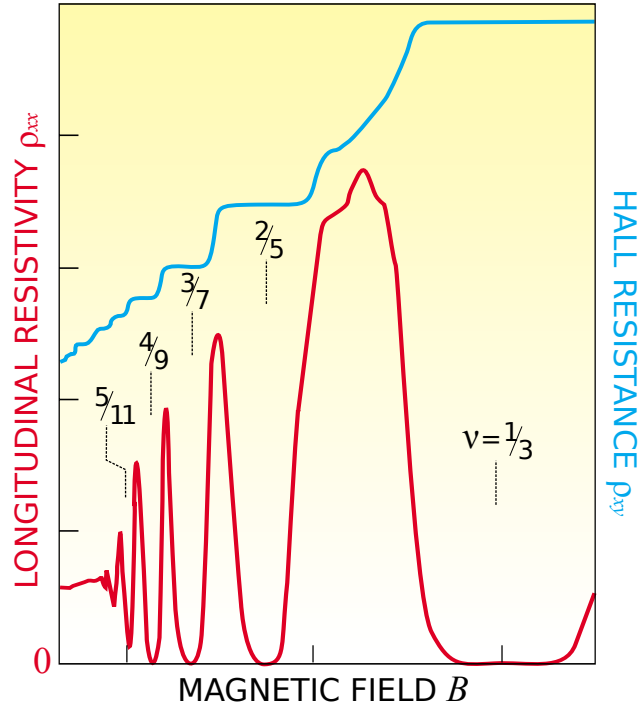
$$\mathcal{H}_N = \frac{1}{2m} \sum_{j=1}^N [\mathbf{p}_j + \mathbf{A}(\mathbf{r}_j)]^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad (2.20)$$

όπου V η άπωση Coulomb μεταξύ ηλεκτρονίων. Οι ιδιοκαταστάσεις αυτής της χαμιλτονιανής $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ είναι γενικά άγνωστες. Παρόλα αυτά, οι μονοσωματιδιακοί μαγνητικοί τελεστές μετατόπισης (B'.9) μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τον ορισμό νέων τελεστών

$$\hat{T}(\mathbf{a}) \equiv \prod_{j=1}^N \mathcal{T}_j(\mathbf{a}), \quad (2.21)$$

οι οποίοι αποτελούν τους κατάλληλους πολυσωματιδιακούς μαγνητικούς τελεστές μετατόπισης για την κυματοσυνάρτηση ψ .

Στην περίπτωση του ακεραίου κβαντικού φαινομένου Hall, η μαγνητική ροή $\phi = L_x L_y eB/h$ είναι ακέραιος αριθμός N_s και ισοδυναμεί με τον αριθμό μονοσωματιδιακών καταστάσεων σε ένα επίπεδο Landau και επομένως,



Σχήμα 2.2: Πειραματική παρατήρηση του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall κατά μετρήσεις μεταφοράς σε ημιαγωγικές μικροσυσκευές. Πηγή: [24]

υποθέτοντας για απλότητα ότι πρόκειται για το χαμηλότερο επίπεδο, ισχύει $N = N_s$. Στην παρούσα περίπτωση, ο αριθμός των ηλεκτρονίων είναι ρητό κλάσμα $N = (p/q)N_s$ των διαθέσιμων καταστάσεων. Οι συνοριακές συνθήκες

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_j(L_x \hat{\mathbf{x}})\psi &= \psi \\ \mathcal{T}_j(L_y \hat{\mathbf{y}})\psi &= \psi, \end{aligned} \quad (2.22)$$

οι οποίες είναι όμοιες με τις συνθήκες (2.6) στην περίπτωση που $a = L_x$ και $b = L_y$, ικανοποιούνται από τους πολυσωματιδιακούς τελεστές $\hat{T}(L_x \hat{\mathbf{x}}/N_s)$ και $\hat{T}(L_y \hat{\mathbf{y}}/N_s)$. Οι τελεστές αυτοί μετατίθενται με τη χαμιλτονιανή και επομένως είναι χρήσιμο να αναζητηθούν τα κοινά τους ιδιοζεύγη. Έστω λοιπόν κατάσταση ψ_0 , η οποία αποτελεί θεμελιώδη κατάσταση της χαμιλτονιανής και ιδιοκατάσταση του τελεστή $\hat{T}(L_y \hat{\mathbf{y}}/N_s)$. Ωστόσο, οι τελεστές $\hat{T}(L_x \hat{\mathbf{x}}/N_s)$ και $\hat{T}(L_y \hat{\mathbf{y}}/N_s)$ δεν μετατίθενται μεταξύ τους:

$$\hat{T}(L_x \hat{\mathbf{x}}/N_s)\hat{T}(L_y \hat{\mathbf{y}}/N_s) = \hat{T}(L_y \hat{\mathbf{y}}/N_s)\hat{T}(L_x \hat{\mathbf{x}}/N_s)e^{-2\pi ip/q}. \quad (2.23)$$

Επομένως, γίνεται φανερό ότι η θεμελιώδης κατάσταση πρέπει να είναι q -πλά

εκφυλισμένη, αφού οι ιδιοσυναρτήσεις

$$\psi_n \equiv [\hat{T}(L_x \hat{\mathbf{x}}/N_s)]^n \psi_0, \quad n = 1, \dots, q - 1 \quad (2.24)$$

είναι επίσης θεμελιώδεις καταστάσεις της χαμιλτονιανής.

Η αναγκαιότητα για εκφυλισμό της θεμελιώδους κατάστασης στο κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall μπορεί επίσης να γίνει εμφανής μέσω του τοπολογικού αναλλοιώτου³. Η ανάλυση της προηγούμενης υποενοότητας υποδεικνύει ότι η αγωγιμότητα Hall μπορεί να είναι μόνο ακέραιο πολλαπλάσιο της σταθεράς e^2/h , όταν η θεμελιώδης κατάσταση είναι μοναδική. Γίνεται επομένως φανερό ότι για να προκύψουν κλασματικές τιμές για την αγωγιμότητα Hall, η θεμελιώδης κατάσταση θα πρέπει να είναι εκφυλισμένη. Λαμβάνοντας το γεγονός αυτό υπ' όψιν, αποδεικνύεται ότι η αγωγιμότητα Hall στην περίπτωση εκφυλισμού της θεμελιώδους κατάστασης πρέπει να είναι ο μέσος όρος των τιμών που προκύπτουν από τον τύπο Kubo για καθεμιά από τις εκφυλισμένες καταστάσεις [21], δηλαδή

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{2\pi i h d} \sum_{j=1}^d \iint_0^{2\pi} d\varphi_x d\varphi_y \left[\left\langle \frac{\partial \psi_j}{\partial \varphi_y} \middle| \frac{\partial \psi_j}{\partial \varphi_x} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \psi_j}{\partial \varphi_x} \middle| \frac{\partial \psi_j}{\partial \varphi_y} \right\rangle \right], \quad (2.25)$$

όπου d είναι ο βαθμός εκφυλισμού και η άθροιση γίνεται στις εκφυλισμένες θεμελιώδεις καταστάσεις $|\psi_j\rangle$. Σημειώνεται ότι, παρόλο που η αγωγιμότητα Hall λαμβάνει κλασματικές τιμές, ο πρώτος αριθμός Chern είναι πάντα ακέραιος. Αυτό σημαίνει ότι η κβαντισμένη κλασματική αγωγιμότητα Hall αποτελεί τοπολογικό αναλλοίωτο διαφορετικού χαρακτήρα από αυτό του ακεραίου κβαντικού φαινομένου Hall.

Πληθώρα θεωρητικών προσεγγίσεων έχει χρησιμοποιηθεί για την ποιοτική κατανόηση του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall. Μια από τις ευρύτερα χρησιμοποιούμενες μεθόδους είναι η απόπειρα εύρεσης κατάλληλων κυματοσυναρτήσεων μέσω της αρχής μεταβολών, οι οποίες εμπεριέχουν τις απαραίτητες ιδιότητες για την εμφάνιση του φαινομένου, και η σύγκρισή τους με αριθμητικές προσομοιώσεις για πεπερασμένα συστήματα. Η πρώτη κυματοσυνάρτηση που προτάθηκε για την εξήγηση του κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall είναι η κυματοσυνάρτηση Laughlin [36]. Στη συνέχεια, η κυματοσυνάρτηση αυτή γενικεύθηκε και μια ολόκληρη ιεραρχία από κυματοσυναρτήσεις εφευρέθηκε για την ερμηνεία του φαινομένου σε διάφορες κλασματικές πληρώσεις του πρώτου επιπέδου Landau [37]. Όπως και στην περίπτωση του ακεραίου κβαντικού φαινομένου Hall, το κλασματικό φαινόμενο προκύπτει και για ηλεκτρόνια κινούμενα σε διδιάστατο πλέγμα, όταν ληφθεί υπ' όψιν η αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων [38].

³Ο βαθμός του εκφυλισμού εξαρτάται από την τοπολογία του συστήματος, βλ. [34, 35]

Καθότι η αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρονίων παίζει σημαντικό ρόλο για το κλασματικό κβαντικό φαινόμενο Hall, αναμένεται διαφοροποίηση του ενεργειακού φάσματος σε σχέση με την περίπτωση του μη αλληλεπιδρώντος αερίου ηλεκτρονίων. Σε αυτή την περίπτωση, η παρουσία ενεργειακού χάσματος πάνω από την εκφυλισμένη θεμελιώδη κατάσταση δεν είναι εκ των προτέρων δεδομένη. Ωστόσο, και σε αυτή την περίπτωση η πειραματικά μετρούμενη αγωγιμότητα σ_{xx} μηδενίζεται οποτεδήποτε η αγωγιμότητα Hall παρουσιάζει πλατό. Από την πλευρά της θεωρίας, η ύπαρξη ενεργειακού χάσματος μεταξύ θεμελιώδους και διεγερμένων καταστάσεων υποστηρίζεται από θεωρία διαταραχών [39, 40], υπολογισμό των διεγέρσεων της κυματοσυνάρτησης Laughlin [36], καθώς και από αριθμητική επίλυση του προβλήματος [41].

Αποδεικνύεται ότι οι διεγέρσεις οιονεί-σωματιδίων σε μια θεμελιώδη κατάσταση που περιγράφεται από την κυματοσυνάρτηση Laughlin έχουν κλασματικό φορτίο $\nu = 1/m$, όπου m περιττός ακέραιος [36]. Επίσης, τα οιονεί-σωματίδια των διεγέρσεων ακολουθούν στατιστική διαφορετική από τις στατιστικές Fermi - Dirac και Bose - Einstein. Η στατιστική αυτή καλείται κλασματική στατιστική [42, 43, 44, 45, 46, 47] και προκύπτει λόγω της γενικευμένης αρχής Pauli που ακολουθούν τα οιονεί-σωματίδια, τα οποία καλούνται ανυόνια⁴ [42]. Έστω ένα σύστημα N όμοιων σωματιδίων σε μια περιορισμένη περιοχή συμπυκνωμένης ύλης. Οι καταστάσεις που αντιστοιχούν στις κυματοσυναρτήσεις $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ του συστήματος μπορούν να γραφούν ως $|\psi\rangle = |\mathbf{r}_1\rangle \otimes |\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_N\rangle$, όπου \mathbf{r}_i η θέση του i -οστού σωματιδίου. Η διάσταση του χώρου Hilbert του μονοσωματιδιακού μέρους d_n εξαρτάται γενικά από το συνολικό αριθμό n των σωματιδίων, κατά τρόπο συμβατό με τη στατιστικής των σωματιδίων. Επομένως, μπορεί κανείς να ορίσει την ποσότητα

$$\beta \equiv -\frac{d_{n+\Delta_n} - d_n}{\Delta_n}, \quad (2.26)$$

η οποία περιγράφει τη μεταβολή της διάστασης του μονοσωματιδιακού χώρου Hilbert καθώς μεταβάλλεται ο συνολικός αριθμός των σωματιδίων. Η παράμετρος β ονομάζεται στατιστική αλληλεπίδραση ή γενικευμένος παράγοντας Pauli. Η σχέση (2.26) μπορεί να γραφεί ισοδύναμα $d_n - d_1 = -\beta(n - 1)$, όπου d_1 ο μονοσωματιδιακός χώρος Hilbert για ένα μόνο σωματίδιο σε πεπερασμένη περιοχή συμπυκνωμένης ύλης. Έστω D_n η διάσταση του πολυσωματιδιακού χώρου Fock n σωματιδίων. Τότε

$$D_n = \binom{d_n + n - 1}{n} = \binom{d_1 + (1 - \beta)(n - 1)}{n}. \quad (2.27)$$

⁴Ο αγγλικός όρος “anyon” αποτελεί όνομα περιγραφικό της ιδιότητας των αντίστοιχων κυματοσυναρτήσεων να αποκτούν οποιαδήποτε (“any”) φάση κατά την εναλλαγή των θέσεων δύο σωματιδίων.

Είναι φανερό ότι για τις τιμές $\beta = 0, 1$ προκύπτουν οι διαστάσεις για χώρους Fock n μποζονίων και φερμιονίων αντίστοιχα. Ο παράγοντας β επιτρέπει τη συνεχή μετάβαση από μποζονική σε φερμιονική στατιστική. Το κλασματικό φορτίο και ο ανυονικός χαρακτήρας των διεγέρσεων στις καταστάσεις κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall επιβεβαιώνεται από συμβατά αποτελέσματα αριθμητικών προσομοιώσεων [48, 47] και υποστηρίζεται από πειραματικές ενδείξεις [49, 50, 51, 52, 53, 54].

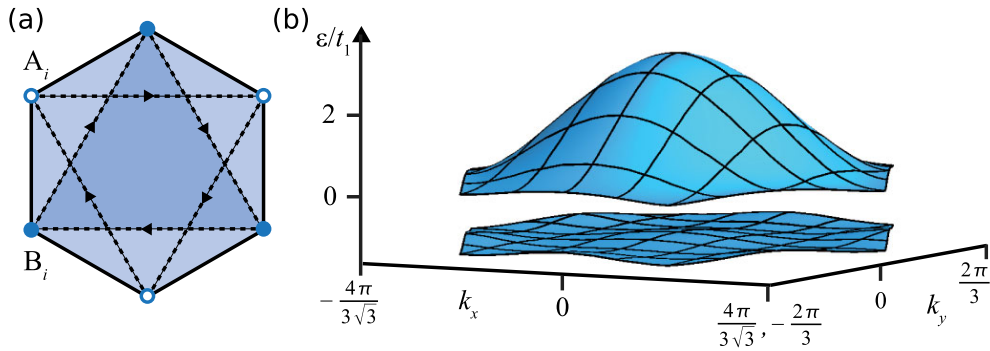
2.2 Καταστάσεις τοπολογικής τάξης

2.2.1 Τοπολογικοί μονωτές

Η θεμελιώδης κατάσταση του ακέραιου κβαντικού φαινομένου Hall αποτελεί το πρώτο ιστορικά παράδειγμα μιας κατάστασης συμπυκνωμένης ύλης, η οποία δεν χαρακτηρίζεται από καμία τοπική ή μακροσκοπική παράμετρο τάξης, αλλά αντίθετα από μια τοπολογικά αναλλοίωτη ποσότητα. Καταστάσεις αυτού του είδους ονομάζονται καταστάσεις τοπολογικής τάξης. Τα πειράματα κβαντικού φαινομένου Hall απαιτούν ωστόσο εξαιρετικά χαμηλές θερμοκρασίες και ισχυρά μαγνητικά πεδία. Η πιθανότητα για τεχνολογικές εφαρμογές βασισμένες στα φαινόμενα αυτά είναι συνεπώς δραστικά περιορισμένη. Τα τελευταία χρόνια καταβάλλεται έντονη προσπάθεια για παράκαμψη των περιορισμών αυτών, τόσο σε θεωρητικό όσο και σε πειραματικό επίπεδο. Σε αυτή την παράγραφο συνοψίζονται ορισμένα σημαντικά στοιχεία, ώστε να τοποθετηθεί η επόμενη υποενότητα στο κατάλληλο πλαίσιο.

Το πρώτο βήμα προς αυτή την κατεύθυνση είναι το μοντέλο Haldane στο διδιάστατο εξαγωνικό πλέγμα τύπου κηρήθρας [56]. Σε αυτό το μοντέλο, ηλεκτρόνια χωρίς σπιν⁵ μεταπηδούν μεταξύ πλησιέστερων και δεύτερων πλησιέστερων γειτόνων του πλέγματος, ενώ κάθε κυψελίδα διαπερνάται από κατανομή μαγνητικού πεδίου $\mathbf{B}(\mathbf{r})$, τέτοια ώστε η συνολική μαγνητική ροή διαμέσου της κυψελίδας να είναι μηδενική. Το μαγνητικό πεδίο υπεισέρχεται στο ολοκλήρωμα μεταπήδησης μεταξύ δευτέρων πλησιέστερων γειτόνων ως φάση Aharonov - Bohm. Παρότι συνολικά το σύστημα δεν διαπερνάται από μαγνητική ροή, η συμμετρία αντιστροφής χρόνου σπάει, λόγω της χειριρότητας της φάσης που αποσπά η ηλεκτρονική κυματοσυνάρτηση όταν ένα ηλεκτρόνιο μεταπηδά κυκλικά μέσω δευτέρων πλησιέστερων γειτόνων, καταλήγοντας στην αρχική θέση. Το μοντέλο Haldane εμφανίζει το ακέραιο κβαντικό φαινόμενο Hall χωρίς την ύπαρξη συνολικής μαγνητικής επαγωγής. Παρότι το μοντέλο Haldane δεν απο-

⁵Η απουσία του βαθμού ελευθερίας σπιν από το πρόβλημα μπορεί να προέλθει από το “πάγωμα” λόγω προσανατολισμού σε κάποιο μαγνητικό υπόβαθρο, όπως θα γίνει κατανοητό στην επόμενη υποενότητα.



Σχήμα 2.3: (a) Το μοντέλο Haldane. Μεταπήδηση κατά (αντ. αντίθετα με) την κατεύθυνση των βελών συνεπάγεται πολλαπλασιασμό της ηλεκτρονικής κυματοσυνάρτησης με παράγοντα φάσης $e^{i\phi}$, όπου $\phi = +2\pi/3$ (αντ. $\phi = -2\pi/3$). (b) Ενεργειακή διασπορά για $t/(4t') = 3\sqrt{3}/43$, όπου t, t' τα ολοκληρώματα μεταπήδησης για πλησιέστερους και επόμενους πλησιέστερους γείτονες αντίστοιχα. Πηγή: [55]

τελεί ρεαλιστική περιγραφή κάποιου φυσικού συστήματος, η σημασία του είναι καίρια, αφού απέδειξε κατ' αρχήν τη δυνατότητα για χβαντικές καταστάσεις Hall χωρίς εφαρμογή μαγνητικού πεδίου. Τα συστήματα τα οποία εμφανίζουν αυτή τη συμπεριφορά ονομάζονται μονωτές Chern, λόγω της μη τετριμμένης τοπολογίας των ενεργειακών τους ζωνών. Οι ενεργειακές ζώνες αυτές καλούνται ενεργειακές ζώνες Chern.

Μια λογική τροποποίηση του μοντέλου Haldane είναι η επέκτασή του σε περιπτώσεις όπου η συμμετρία αντιστροφής χρόνου διατηρείται. Ο πιο ευθύς τρόπος για την επίτευξη αυτού του σκοπού είναι η υπέρθεση δύο αντιγράφων του συστήματος, καθένα από τα οποία αφορά σε ένα είδος σπιν. Αυτή ακριβώς η θεώρηση οδήγησε στο μοντέλο Kane - Mele [57, 58]. Καθότι καθένα από τα δύο είδη σπιν συνεισφέρει χβαντισμένη αγωγιμότητα Hall ίδιου μέτρου αλλά αντίθετου προσήμου, συνολικά η αγωγιμότητα Hall είναι μηδενική, αλλά η διαφορά των συνεισφορών μπορεί να θεωρηθεί ως μια νέα, χαρακτηριστική, τοπολογικά αναλλοίωτη ποσότητα του μοντέλου. Το φαινόμενο αυτό ονομάστηκε χβαντικό φαινόμενο Hall του σπιν. Ύστερα από μια πειραματικά πιο προσιτή θεωρητική πρόταση [59], επήλθε η παρατήρηση του φαινομένου σε ειδικά διαμορφωμένα χβαντικά πηγάδια δυναμικού, τα οποία δημιουργούνται σε διεπαφές $\text{HgTe}/(\text{Hg,Cd})\text{Te}$ [60]. Η ανακάλυψη αυτή επισφράγισε την παρουσία τοπολογικών καταστάσεων σε συστήματα στερεάς κατάστασης πέραν των συσκευών χβαντικού φαινομένου Hall.

2.2.2 Τοπολογία και αλληλεπιδράσεις

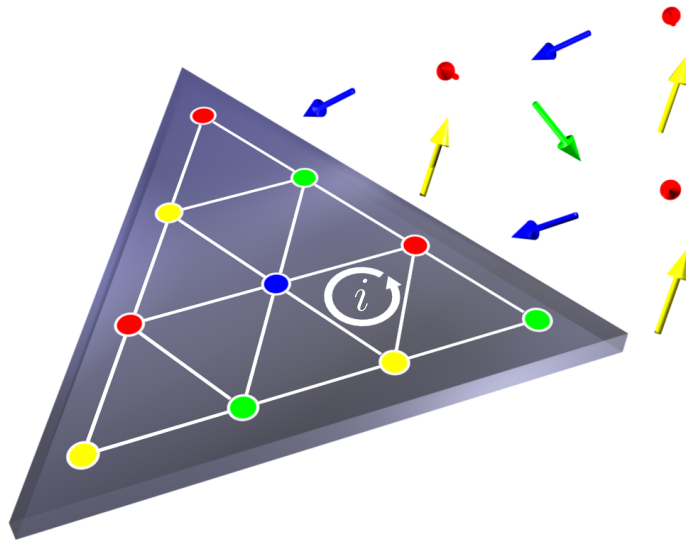
Μέχρι σήμερα η ανίχνευση καταστάσεων τοπολογικής τάξης έχει επιτευχθεί μόνο σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες. Μία ιδέα για την παρατήρηση καταστάσεων τοπολογικής τάξης σε υψηλότερες θερμοκρασίες είναι η αναζήτηση καταστάσεων, οι οποίες βασίζονται σε μηχανισμούς ενεργειακής κλίμακας μεγαλύτερης από αυτής των θερμικών διακυμάνσεων. Οι ισχυρές αλληλεπιδράσεις μεταξύ σωματιδίων αποτελούν το διασθητικά αμεσότερο υποψήφιο τέτοιο μηχανισμό σε συστήματα συμπυκνωμένης ύλης. Ένα ελκυστικό χαρακτηριστικό αυτής της προσέγγισης είναι ότι κάποιες τοπολογικές καταστάσεις είναι πιθανό να εμφανιστούν αυθόρμητα, όπως ορισμένες καταστάσεις τάξης Landau εμφανίζονται με αυθόρμητο σπάσιμο κάποιας συμμετρίας.

Σε τέτοιου είδους καταστάσεις μπορεί να οδηγηθεί κανείς αν, αντί της αλληλεπίδρασης ηλεκτρονίων με μαγνητικό πεδίο, θεωρήσει για παράδειγμα την αλληλεπίδραση ανταλλαγής J απεντοπισμένων ηλεκτρονίων με εντοπισμένα σπιν. Το μοντέλο που περιγράφει αυτή την αλληλεπίδραση είναι το μοντέλο πλέγματος Kondo

$$\mathcal{H}_{\text{Kondo}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) - J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot c_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta}, \quad (2.28)$$

όπου t το ολοκλήρωμα μεταπήδησης μεταξύ πλησιέστερων γειτόνων $\langle i, j \rangle$, J το μέγεθος της αλληλεπίδρασης ανταλλαγής και $\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}$ το διάνυσμα των πινάκων Pauli. Οι τελεστές $c_{i\alpha}^\dagger, c_{i\alpha}$ δημιουργούν και καταστρέφουν αντίστοιχα ηλεκτρόνια στη θέση i με σπιν α . Το μοντέλο αυτό έχει χρησιμοποιηθεί με επιτυχία για την περιγραφή ιδιοτήτων υλικών όπως ορισμένα οξειδία του μαγγανίου, καθώς και υλικών βαρέων φερμιονίων.

Όταν $J \rightarrow \infty$, το σπιν των ηλεκτρονίων παραμένει προσανατολισμένο παράλληλα στο εντοπισμένο σπιν σε κάθε πλεγματική θέση και επομένως ο βαθμός ελευθερίας σπιν “παγώνει”. Σε αυτή την περίπτωση, αν το μαγνητικό υπόβαθρο που δημιουργείται από τα εντοπισμένα σπιν θεωρηθεί σταθερό, είναι δυνατό να προκύψει αυτόματα μια υλοποίηση είτε του μοντέλου Hofstadter, είτε του μοντέλου Haldane. Στη σιδηρομαγνητική κατάσταση του μοντέλου, η κίνηση των απεντοπισμένων ηλεκτρονίων είναι ισοδύναμη με κίνηση σε ομογενές μαγνητικό πεδίο και επομένως η κβάντωση της αγωγιμότητας Hall αποτελεί λογικό επακόλουθο, σύμφωνα με τα επιχειρήματα που οδηγούν στην κβάντωση της αγωγιμότητας Hall στο μοντέλο Hofstadter [61]. Πιο ενδιαφέρουσες είναι οι μη συνεπίπεδες μαγνητικές καταστάσεις, οι οποίες εμφανίζονται σε πλέγματα με τα οποία οι τυπικές συγγραμμικές καταστάσεις τάξης είναι γεωμετρικά ασύμβατες. Για παράδειγμα, το διάγραμμα φάσεων του μοντέλου Kondo στο τριγωνικό πλέγμα ως συνάρτηση του μεγέθους της αλληλεπίδρασης και του χημικού δυναμικού εμφανίζει πολλές ενδιαφέρουσες μαγνητικές φάσεις [62]. Σε μία από αυτές, τα εντοπισμένα σπιν σχηματίζουν μια χειρική διάταξη με μοναδιαία κυψε-



Σχήμα 2.4: Απεικόνιση της χειρικής, μη συνεπίπεδης κατάστασης σπιν και του αντίστοιχου μοντέλου ισχυρού δεσμού με κατάλληλες φάσεις στα ολοκληρώματα μεταπήδησης. Πηγή: [64]

λίδα τεσσάρων πλεγματικών θέσεων, η οποία απεικονίζεται στο σχήμα 2.4. Σε αυτή την περίπτωση, τα απεντοπισμένα ηλεκτρόνια εμφανίζουν ακέραια κβαντισμένη αγωγιμότητα Hall [63]. Επίσης, η συνολική μαγνητική ροή διαμέσου της κυψελίδας είναι μηδενική. Επομένως, σε αυτό το σύστημα προκύπτει αυθόρμητα μια υλοποίηση του μοντέλου Haldane και άρα μια κατάσταση μονωτή Chern. Σημειώνεται ότι η συνθήκη $J \rightarrow \infty$ δεν είναι απαραίτητη. Μάλιστα αποδεικνύεται ότι σε ορισμένα συστήματα η χαλάρωση της συνθήκης αυτής οδηγεί σε πιο ανθεκτικές καταστάσεις μονωτή Chern.

Η παρουσία παρόμοιων καταστάσεων σε πιο ρεαλιστικά μοντέλα, τα οποία συμπεριλαμβάνουν περισσότερα χαρακτηριστικά πραγματικών συστημάτων, αποτελεί ενδιαφέρουσα πιθανότητα. Ένα τέτοιο γενικευμένο μοντέλο Hubbard στο τριγωνικό πλέγμα, το οποίο λαμβάνει υπ' όψιν τα τροχιακά της υποστοιβάδας $3d$ των οξειδίων μετάλλων μετάπτωσης και όλες τις σχετικές αλληλεπιδράσεις Coulomb, μελετήθηκε πρόσφατα [65, 66, 64]. Γύρω από ορισμένες τιμές πλήρωσης του μοντέλου και λόγω της ιεραρχίας των αλληλεπιδράσεων και της συμμετρίας του πλέγματος, ορισμένα από τα ηλεκτρόνια της υποστοιβάδας σθένους σχηματίζουν ενεργά εντοπισμένα σπιν και καταλαμβάνουν επίπεδα χαμηλότερης ενέργειας, ενώ τα υπόλοιπα παραμένουν απεντοπισμένα και αλληλεπιδρούν με τα ενεργά σπιν μέσω του κανόνα Hund. Το πρόβλημα γίνεται τότε ισοδύναμο με το μοντέλο πλέγματος Kondo και επομένως προκύπτει και πάλι ένας αυθόρμητος μονωτής Chern.

Περαιτέρω προοπτικές για την ανακάλυψη χρήσιμων τοπολογικών καταστάσεων σε συσχετισμένα συστήματα προτείνονται διαρκώς. Η εισαγωγή αλληλεπιδράσεων τύπου Hubbard στο μοντέλο Kane - Mele είναι μία από αυτές, αλλά η υλοποίηση πειραματικών συστημάτων που υλοποιούν την πρόταση αυτή αποτελεί δύσκολη πρόκληση. Μια ακόμα ελκυστική πρόταση αποτελούν ορισμένες μη συμβατικές καταστάσεις κυμάτων πυκνότητας φορτίου [67], οι οποίες έχουν μη τετριμμένο τοπολογικό χαρακτήρα και έχουν προταθεί για την εξήγηση ανιγματικών φαινομένων σε ενδιαφέροντα υλικά, όπως τα οξειδία του χαλκού [68, 69].

2.2.3 Κλασματικοί μονωτές Chern

Το μοντέλο Haldane αποτελεί μέχρι σήμερα το απλούστερο μοντέλο, στο οποίο μια τοπολογικά μη τετριμμένη κατάσταση υλοποιείται αυθόρμητα. Πρόσφατα διερευνάται εντατικά η επίδραση αλληλεπιδράσεων σε μοντέλα τύπου Haldane [70, 71, 55, 72, 73, 74, 75, 66, 64]. Όταν σε αυτά τα μοντέλα συμπεριληφθεί μια θωρακισμένη αλληλεπίδραση Coulomb, προκύπτει μια σειρά από τοπολογικές καταστάσεις, οι οποίες έχουν παρόμοιες ιδιότητες με καταστάσεις κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall. Οι καταστάσεις αυτές καλούνται συνήθως κλασματικοί μονωτές Chern, καθότι προκύπτουν για κλασματικές πληρώσεις ενεργειακών ζωνών Chern. Το επιστημονικό ενδιαφέρον γύρω από τις καταστάσεις κλασματικών μονωτών Chern είναι αυξημένο, αφού ενεργειακές ζώνες με αριθμό Chern $C > 1$ ίσως υποστηρίζουν μη Αβελιανές τοπολογικές καταστάσεις [76, 77, 78, 79, 80, 81], οι οποίες είναι μείζονος σημασίας για το πεδίο των κβαντικών υπολογιστών [82].

Οι χαμιλτονιανές που εμφανίζονται στη μελέτη των κλασματικών μονωτών Chern είναι τυπικά της μορφής

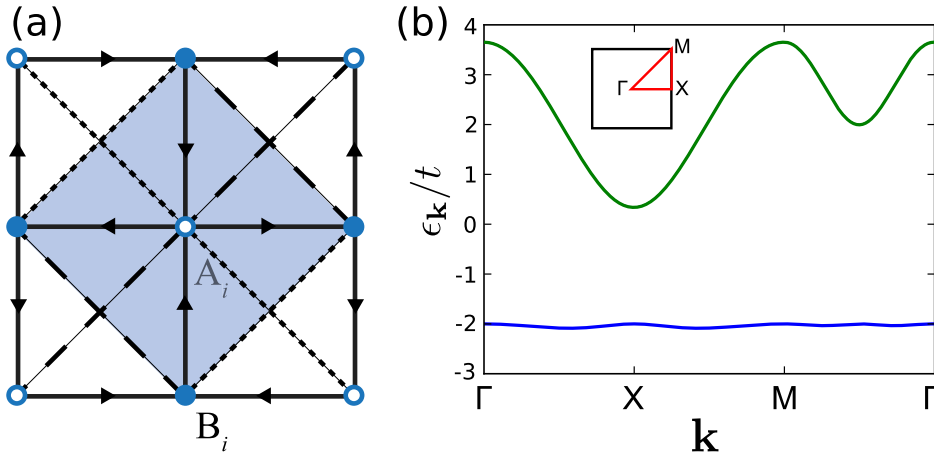
$$\mathcal{H}_{\text{FCI}} = \mathcal{H}_{\text{kin}} + \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (2.29)$$

όπου \mathcal{H}_{kin} είναι ένας κινητικός όρος τύπου ισχυρού δεσμού, ο οποίος δίνει ενεργειακές ζώνες Chern, και ο όρος \mathcal{H}_{int} περιγράφει τη θωρακισμένη αλληλεπίδραση Coulomb.

Για την παρουσίαση ορισμένων συγκεκριμένων χαρακτηριστικών των κλασματικών μονωτών Chern, ως κινητικός όρος \mathcal{H}_{kin} θα χρησιμοποιηθεί το μοντέλο χειρικής ροής π [83]

$$\mathcal{H}_{\text{kin}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (e^{\pm i\pi/4} c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) \pm t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}) - t'' \sum_{\langle\langle\langle i,j \rangle\rangle\rangle} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}), \quad (2.30)$$

όπου οι αγκύλες $\langle \dots \rangle$, $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ και $\langle\langle\langle \dots \rangle\rangle\rangle$ συμβολίζουν πλησιέστερους, επόμενους πλησιέστερους και τρίτους πλησιέστερους γείτονες αντίστοιχα και καθένα



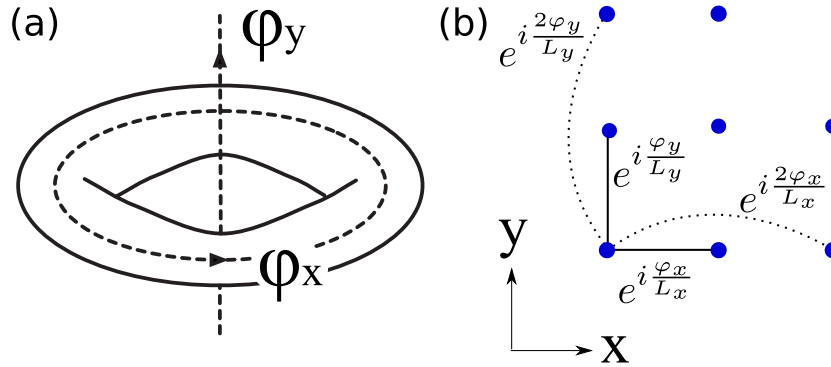
Σχήμα 2.5: (a) Σχηματική απεικόνιση του μοντέλου χειρικής ροής π (εξ. 2.30). Μεταπήδηση μεταξύ πλησιεστέρων γειτονικών θέσεων κατά (αντ. αντίθετα με) την κατεύθυνση των βελών συνεπάγεται πολλαπλασιασμό της ηλεκτρονικής κυματοσυνάρτησης με παράγοντα φάσης $e^{i\phi}$, όπου $\phi = +\pi/4$ (αντ. $\phi = -\pi/4$). Οι διακεκομμένες (αντ. διαστιγμένες) γραμμές υποδεικνύουν αρνητικό (αντ. θετικό) πρόσημο για το ολοκλήρωμα μεταπήδησης επόμενων πλησιεστέρων γειτόνων. Οι μεταπήδησεις μεταξύ τρίτων πλησιεστέρων γειτόνων έχουν παραλειφθεί. Πηγή: [55] (b) Ενεργειακή διασπορά του μοντέλου για τις τιμές παραμέτρων $t'/t = 1/(2 + \sqrt{2})$, $t''/t = 1/(2 + 2\sqrt{2})$ και $t = 1$.

από τα πρόσημα αντιστοιχεί σε μία από τις δύο θέσεις της θεμελιώδους κυψελίδας του πλέγματος (βλ. σχήμα 2.5). Οι μεταπήδησεις t' και t'' καθορίζουν την ομαλότητα της χαμηλότερης ενεργειακής ζώνης. Η ομαλότητα αυτή επηρεάζει το χάσμα μεταξύ θεμελιωδών και διεγερμένων καταστάσεων [84]. Η επίδραση αυτή δε θα συζητηθεί παρακάτω και επομένως οι τιμές $t'/t = 1/(2 + \sqrt{2})$, $t''/t = 1/(2 + 2\sqrt{2})$ και $t = 1$ θα θεωρηθούν σταθερές.

Ο όρος αλληλεπίδρασης \mathcal{H}_{int} συνίσταται σε άπωση V μεταξύ πλησιέστερων γειτόνων, η οποία γράφεται

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j. \quad (2.31)$$

Η συνολική χαμιλτονιανή μελετήθηκε πρόσφατα και βρέθηκε ότι η θεμελιώδης κατάστασή της παρουσιάζει ιδιότητες αντίστοιχες με αυτές μιας κατάστασης κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall [71, 55, 74]. Παρακάτω θα παρουσιαστούν τα ήδη γνωστά, καθώς και ορισμένα περαιτέρω χαρακτηριστικά του μοντέλου. Οι υπολογισμοί έγιναν με τη μέθοδο επακριβούς διαγωνοποίησης για πεπερασμένα συστήματα με περιοδικές συνθήκες.

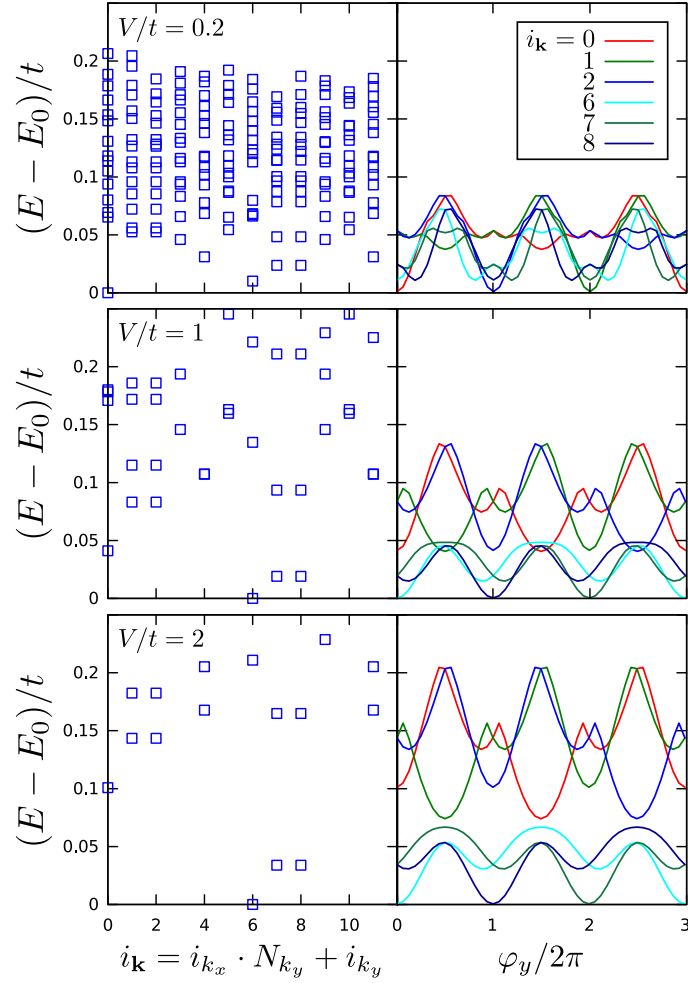


Σχήμα 2.6: (a) Πεδιακές γραμμές που αντιπροσωπεύουν τη μαγνητική ροή ϕ_x και ϕ_y κατά τις διευθύνσεις x και y αντίστοιχα. (b) Εισαγωγή μαγνητικής ροής σε διακριτό τόρο.

Εκφυλισμός και ροή ιδιοενεργειών

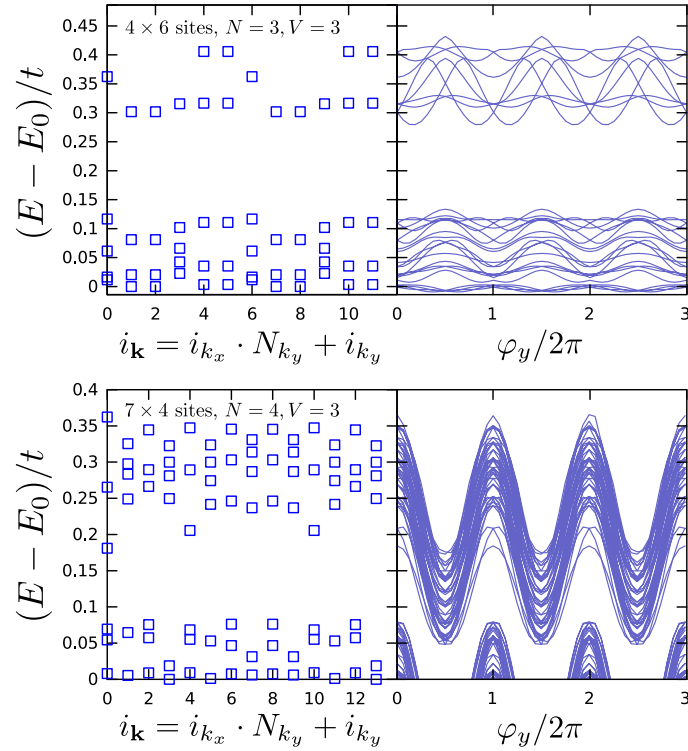
Όπως συζητήθηκε στην υποενότητα 2.1.2, η θεμελιώδης κατάσταση του κλασματικού χβαντικού φαινομένου Hall σε ένα συμμετρικό ως προς μετατοπίσεις σύστημα είναι εκφυλισμένη. Ο ίδιος εκφυλισμός αναμένεται να ισχύει και στην περίπτωση ενός κλασματικού μονωτή Chern, αφού ανάλογες συμμετρίες με αυτές του κλασματικού χβαντικού φαινομένου Hall μπορούν να βρεθούν όταν τα ηλεκτρόνια κινούνται σε πλέγμα [85]. Ο βαθμός του εκφυλισμού καθορίζεται από τον παρονομαστή του κλάσματος πλήρωσης $\nu = p/q$, όπου p, q ακέραιοι. Η εμφάνιση μιας τριπλά εκφυλισμένης θεμελιώδους κατάστασης ως συνάρτηση της αλληλεπίδρασης πλησιεστέρων γειτόνων V του μοντέλου \mathcal{H}_{FCI} της εξίσωσης 2.29 για $\nu = 1/3$ παρουσιάζεται στο σχήμα 2.7.

Ο εκφυλισμός δεν είναι ωστόσο επαρκές κριτήριο για τον αναμφίβολο προσδιορισμό μιας χβαντομηχανικής κατάστασης πολλών σωματιδίων σε ένα περιοδικό πλέγμα, αφού αποτελεί γενικότερο φαινόμενο [86]. Ένα στοιχείο του φάσματος ιδιοτιμών, το οποίο μπορεί να διακρίνει τοπολογικά μη τετριμμένες καταστάσεις, είναι η ροή των ιδιοτιμών κατά την εισαγωγή μαγνητικής ροής διαμέσου του συστήματος. Σε γεωμετρία διδιάστατου τόρου, η μαγνητική ροή εισάγεται κατά τις δύο διευθύνσεις, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 2.6. Όταν η συμμετρία μετατόπισης του συστήματος είναι διακριτή, η μαγνητική ροή εισάγεται στα ολοκληρώματα μεταπήδησης, κατ'αντιστοιχία με τις φάσεις Aharonov - Bohm. Οι κυματοσυναρτήσεις καταστάσεων κλασματικού χβαντικού φαινομένου Hall, που αντιστοιχούν σε εκφυλισμένες ιδιοτιμές, αναμένεται να είναι τοπολογικά συζυγείς ως προς την εισαγωγή μαγνητικής ροής [40]. Αυτό σημαίνει ότι εισαγωγή ενός χβάντου μαγνητικής ροής ισοδυναμεί με απεικόνιση μιας κυματοσυνάρτησης της πολλαπλότητας της θεμελιώδους κατάστασης σε



Σχήμα 2.7: Εκφυλισμός και ροή ιδιοενεργειών στο μοντέλο \mathcal{H}_{FCI} της εξίσωσης 2.29 για διάφορες τιμές της αλληλεπίδρασης V . Τα φάσματα υπολογίστηκαν για ένα σύστημα 4×3 μοναδιαίων κυψελίδων με 4 ηλεκτρόνια. Αριστερά οι ιδιοτιμές δίνονται ως συνάρτηση της κρυσταλλικής ορμής, η οποία αποτελεί καλό κβαντικό αριθμό.

μία άλλη. Σε πεπερασμένα συστήματα, το γεγονός αυτό έχει αντίκτυπο στις εκφυλισμένες ιδιοτιμές, αφού αυτές δεν είναι ακριβώς ίσες [35]. Το αποτέλεσμα είναι η ροή των ιδιοενεργειών, οι οποίες αντικαθιστούν η μία την άλλη κατά την εισαγωγή ενός κβάντου μαγνητικής ροής. Όπως φαίνεται στο σχήμα 2.7, η συμπεριφορά αυτή παρατηρείται για το παρόν μοντέλο κλασματικού μονωτή Chern.



Σχήμα 2.8: Εκφυλισμός και ροή ιδιοενεργειών στο μοντέλο \mathcal{H}_{FCI} της εξίσωσης 2.29 για οιονεί-οπές που εισάγονται με (a) επιμήκυνση του συστήματος κατά τη μία διεύθυνση και (b) αφαίρεση ηλεκτρονίων. Η διάσταση του υπόχωρου χαμηλής ενέργειας είναι (a) 40 και (b) 35, επιβεβαιώνοντας την εξ. 2.32

Κλασματική στατιστική

Ένα επιπλέον καθοριστικό χαρακτηριστικό των κλασματικών χβαντικών καταστάσεων Hall είναι το κλασματικό φορτίο και η κλασματική στατιστική των φορτισμένων διεγέρσεων. Σε ένα πεπερασμένο περιοδικό πλέγμα οι διεγέρσεις αυτές μπορούν να εισαχθούν με απόκλιση από το ακριβές κλάσμα πλήρωσης της ενεργειακής ζώνης Chern. Αυτό μπορεί να γίνει είτε με μεταβολή του μεγέθους του συστήματος, διατηρώντας τον αριθμό των ηλεκτρονίων, είτε με αφαίρεση ηλεκτρονίων από το σύστημα. Όπως συζητήθηκε στην υποενότητα 2.1.2, η στατιστική των διεγέρσεων αυτών μπορεί να θεωρηθεί ως επακόλουθο μιας γενικευμένης αρχής Pauli, την οποία τα οιονεί-σωματίδια ακολουθούν, και να εντοπιστεί στη διάσταση ενός υπόχωρου χαμηλής ενέργειας του συνολικού χώρου Fock του προβλήματος για πεπερασμένα συστήματα.

Αποδεικνύεται ότι η διάσταση του υπόχωρου χαμηλής ενέργειας για καταστάσεις κλασματικού χβαντικού φαινομένου Hall πλήρωσης $\nu = 1/q$ με οιονεί-

οπές σε διδιάστατα πλεγματοειδή συστήματα δίνεται από τον αριθμό των $(1, q)$ -επιτρεπόμενων διαμερίσεων [74, 85]. Έτσι, για οιονεί-οπές μέσα σε μια κατάσταση κλασματικού κβαντικού φαινομένου Hall πλήρωσης $\nu = 1/3$, η διάσταση του υπόχωρου χαμηλής ενέργειας είναι

$$\mathcal{N}_{1/3} = N_L \frac{(N_L - 2N - 1)!}{N!(N_L - 3N)!}, \quad (2.32)$$

όπου N_L ο αριθμός των μοναδιαίων κυψελίδων και N ο αριθμός των ηλεκτρονίων. Η έκφραση αυτή είναι ισοδύναμη με αυτή της εξίσωσης 2.27. Στο σχήμα 2.8 παρουσιάζονται αποτελέσματα τα οποία επιβεβαιώνουν αυτό τον κανόνα και επομένως τεκμηριώνουν με έναν ακόμα τρόπο την κατάσταση κλασματικού μονωτή Chern.

Παρότι η στατιστική των οιονεί-σωματιδίων των κλασματικών τοπολογικών καταστάσεων μπορεί να φαίνεται απλά σαν μια μαθηματική κατασκευή, ο πειραματικός εντοπισμός των συνεπειών της αποτελεί ενδιαφέρουσα προοπτική, όπως υποδηλώνουν πρόσφατα πειράματα συμβολομετρίας [54]. Η προοπτική αυτή είναι ενθαρρυντική για την επίτευξη ελέγχου ανυονικών καταστάσεων, ορισμένες από τις οποίες πληρούν της προϋποθέσεις για ανεκτικούς σε σφάλματα κβαντικούς υπολογισμούς [82].

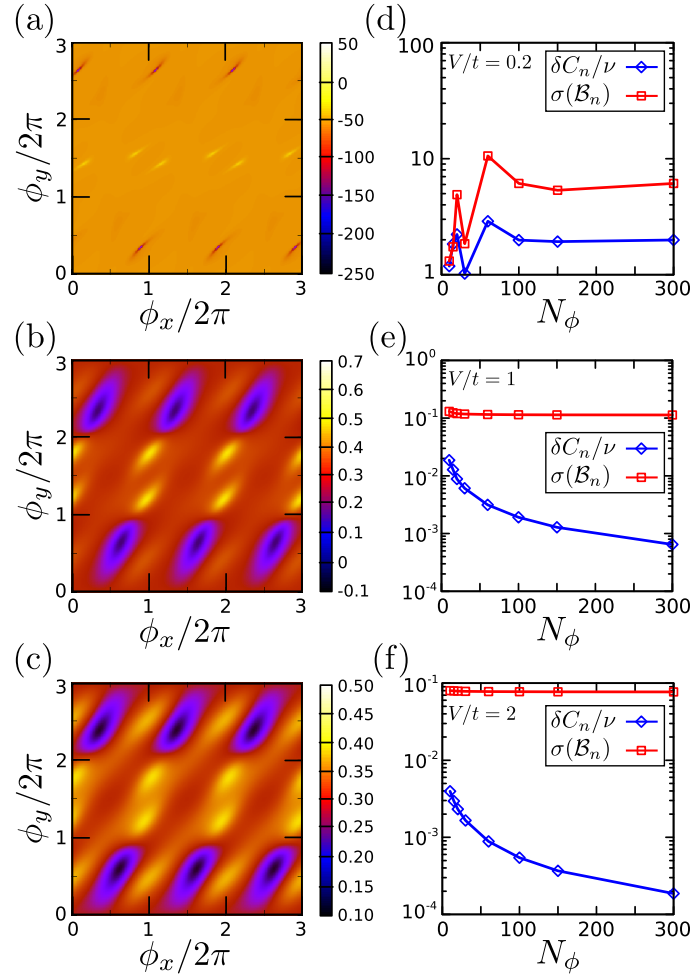
Τοπολογικό αναλλοίωτο

Παρόλη τη χρησιμότητά τους για την αναγνώριση ιδιοτήτων των αντίστοιχων ιδιοκαταστάσεων, οι ιδιότητες των ιδιοτιμών αποτελούν έμμεσο κριτήριο για την ταυτοποίηση μιας κβαντομηχανικής κατάστασης. Για τον αναμφίβολο προσδιορισμό μιας τοπολογικά μη τετριμμένης κατάστασης απαιτείται υπολογισμός του τοπολογικού αναλλοιώτου. Για καταστάσεις κλασματικών μονωτών Chern η απαίτηση αυτή σημαίνει ακριβή κβάντωση του αριθμού Chern της θεμελιώδους κατάστασης και ισότητά του με το κλάσμα πλήρωσης.

Ο ορισμός του αριθμού Chern δίνεται στην εξίσωση 2.25, σε μονάδες της θεμελιώδους φυσικής σταθεράς e^2/h . Μια εναλλακτική έκφραση του τύπου Kubo για τον αριθμό Chern C είναι

$$C = \frac{N_L}{\pi q} \sum_{n=1}^q \sum_{n' \neq n} \iint_0^{2\pi} d\varphi_x d\varphi_y \mathfrak{S} \frac{\langle n | \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{kin}}}{\partial \varphi_y} | n' \rangle \langle n' | \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{kin}}}{\partial \varphi_x} | n \rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_{n'})^2}, \quad (2.33)$$

όπου N_L είναι ο αριθμός των πλεγματοειδών θέσεων, q ο βαθμός εκφυλισμού της θεμελιώδους κατάστασης (= παρονομαστής του κλάσματος πλήρωσης), $|n\rangle$ οι εκφυλισμένες θεμελιώδεις καταστάσεις, $|n'\rangle$ οι διεγερμένες καταστάσεις και $\varphi_i, i = x, y$, η μαγνητική ροή κατά τους άξονες x και y . Η ολοκληρωτέα



Σχήμα 2.9: (a - c) Καμπυλότητα Berry και (d - f) σχετική διακύμανση του αριθμού Chern και τυπική απόκλιση της καμπυλότητας Berry για διαφορετικές τιμές της αλληλεπίδρασης V .

ποσότητα ονομάζεται καμπυλότητα Berry και εκφράζει την καμπυλότητα της χαμιλτονιανής $\mathcal{H}_{\text{kin}}(\varphi_x, \varphi_y)$ ως προς τις γωνιακές παραμέτρους φ_x και φ_y ⁶.

Η καμπυλότητα Berry και η ακρίβεια της κβάντωσης του αριθμού Chern στην περίπτωση $\nu = 1/3$ παρουσιάζονται στο σχήμα 2.9 για διαφορετικές τιμές της αλληλεπίδρασης V . Γίνεται φανερό ότι, καθώς η ισχύς της αλληλεπίδρασης αυξάνεται, τόσο η σχετική διακύμανση του αριθμού Chern όσο και η τυπική

⁶Υπενθυμίζεται ότι οι γωνίες φ_x και φ_y εκφράζουν τη μαγνητική ροή διαμέσου του συστήματος και οι αντίστοιχοι παράγοντες φάσης εισάγονται στα ολοκληρώματα μεταπήδησης, βλ. σχήμα 2.6

απόκλιση της καμπυλότητας Berry γύρω από την τιμή $C = \nu$ μειώνονται. Επίσης, παρατηρείται ότι, όταν η αλληλεπίδραση είναι αρκετά ισχυρή, η τυπική απόκλιση της καμπυλότητας Berry παραμένει σταθερή και επομένως η αριθμητική ολοκλήρωση που οδηγεί στον αριθμό Chern προσεγγίζει όλο και καλύτερα την ακριβή τιμή καθώς η διαμέριση της επιφάνειας γίνεται ολοένα λεπτότερη. Οι παρατηρήσεις αυτές επιβεβαιώνουν αρχικά ότι η φάση κλασματικού μονωτή Chern εμφανίζεται σε αυτό το σύστημα και στη συνέχεια καθορίζουν ορισμένα χαρακτηριστικά της φάσης αυτής, συγκεκριμένα την ομαλότητα της καμπυλότητας Berry και την ακριβή κβάντωση του αριθμού Chern σε πεπερασμένα συστήματα μικρού μεγέθους.

Σημειώνεται ότι, παρόλο που εδώ παρουσιάζονται μόνο ενδεικτικά αποτελέσματα, εκτενής ανάλυση της επίδρασης του μεγέθους του συστήματος για αυτό το μοντέλο [74], καθώς και για ένα ισοδύναμο μοντέλο στο τριγωνικό πλέγμα [64], επιβεβαιώνουν όλα τα αποτελέσματα αυτής της παραγράφου. Τέλος, πρόσφατα αποτελέσματα επιδεικνύουν άμεσα την τοπολογική «προστασία» των καταστάσεων κλασματικών μονωτών Chern ενάντια σε ατέλειες του πλέγματος [87] ή του μαγνητικού υποβάθρου [64].

Σύνοψη και συμπεράσματα

Στην εργασία αυτή μελετήθηκε ο διαχωρισμός ηλεκτρονίων (ή ακριβέστερα οπών) σε τμηματικά οιονεί-σωματίδια, ο οποίος προκύπτει λόγω της ισχυρής ηλεκτρονικής αλληλεπίδρασης, σε συστήματα συμπυκνωμένης ύλης κατάλληλα για εφαρμογές υψηλής τεχνολογίας. Ανάλογα με τη διαστατικότητα και την τοπολογία του εκάστοτε υλικού προκύπτουν διαφορετικοί νέοι βαθμοί ελευθερίας με μη συμβατικές ιδιότητες. Ο πειραματικός έλεγχος και η βαθύτερη κατανόηση των σχετικών φαινομένων αποτελούν εξίσου δύσκολες προκλήσεις, οι οποίες είναι αλληλένδετες. Για το λόγο αυτό καταβλήθηκε προσπάθεια για τη μετάφραση των θεωρητικών προβλέψεων σε πειραματικά παρατηρούμενα χαρακτηριστικά.

Ο διαχωρισμός φορτίου - σπιν στους μονοδιάστατους μονωτές Mott εξηγείται μέσω της μελέτης του μοντέλου Hubbard και των παραγώγων του και η σχετική φυσική γίνεται διαισθητικά απλούστερη μέσω κατάλληλων ενεργών μοντέλων για τις κλασματικές διεγέρσεις, καθεμία από τις οποίες μεταφέρει είτε το σπιν είτε το φορτίο μιας οπής και ονομάζεται σπινόνιο ή αντιφορτίονιο αντίστοιχα. Τα πειραματικά αποτελέσματα που υποδεικνύουν το διαχωρισμό ερμηνεύθηκαν μέσω μοντελοποιήσεων και αριθμητικών προσομοιώσεων των αντίστοιχων μικροσκοπικών διαδικασιών και δικαιολογήθηκε η αντίληψη των προκυπτόντων τμηματικών βαθμών ελευθερίας ως καλά ορισμένων οιονεί-σωματιδίων. Επιπλέον, παρουσιάστηκε ο διαχωρισμός σπιν - τροχιακού και με κατάλληλη μεταχείριση των θεωρητικών αποτελεσμάτων για το διαχωρισμό φορτίου - σπιν εξάχθηκε το σχετικό ενεργό μοντέλο, το οποίο συμφωνεί ικανοποιητικά με το πείραμα. Πέρα από την κατανόηση του μηχανισμού μέσω του οποίου μπορεί να προκύψει ο διαχωρισμός, τα αποτελέσματα του κεφαλαίου αυτού έχουν αντίκτυπο στον τομέα της σπιντρονικής, στον οποίο γίνεται συχνά αναφορά σε ρεύματα σπινονίων για την αντικατάσταση του συμβατικού ρεύματος ηλεκτρονίων σε συμβατικές ηλεκτρονικές συσκευές.

Τα κβαντικά φαινόμενα Hall αποτελούν ανακαλύψεις υψίστης σημασίας για τη μελέτη της συμπυκνωμένης ύλης, αφού μέσω αυτών αναγνωρίστηκε η σημασία της έννοιας του τοπολογικού αναλλοιώτου. Οι πρώτες αυτές τοπολογικά μη τετριμμένες καταστάσεις οδήγησαν, μέσω του μοντέλου Haldane, στην πρόβλεψη και τη μετέπειτα ανακάλυψη των τοπολογικών μονωτών. Η ταυτόχρονη

επίδραση ισχυρών αλληλεπιδράσεων και τοπολογίας είναι το επόμενο λογικό βήμα για την περαιτέρω κατανόηση και εκμετάλλευση των σύνθετων ιδιοτήτων των φάσεων αυτών. Οι διδιάστατοι κλασματικοί μονωτές Chern αποτελούν το εφαλτήριο προς αυτή την κατεύθυνση. Η ακριβώς κβαντισμένη αγωγιμότητα Hall και η στατιστική των οιονεί-σωματιδίων σε αυτές τις καταστάσεις είναι μερικές από τις θεωρητικές προβλέψεις που παρατέθηκαν, των οποίων η παρατήρηση είναι επιθυμητή. Η ύπαρξη τέτοιων ισχυρά συσχετισμένων καταστάσεων τοπολογικής τάξης συνεπάγεται ιδιότητες προερχόμενες από τη μη τετριμμένη τοπολογία σε υψηλές θερμοκρασίες και παρέχει το ενδεχόμενο για μια νέα εποχή τεχνολογικών εφαρμογών.

Παράρτημα Α΄

Από το μοντέλο Hubbard στο μοντέλο t - J

Το μοντέλο Hubbard, όπως ορίστηκε στην εξ. 1.1, είναι

$$\mathcal{H} = \hat{T} + \hat{V} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \text{h.c.}) + U \sum_{i=1}^N n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (\text{A'.1})$$

Στο όριο $t \ll U$, ο τομέας χαμηλών ενεργειών του μοντέλου μπορεί να περιγραφεί μέσω θεωρίας διαταραχών, η οποία μπορεί να εφαρμοστεί μέσω ενός κανονικού μετασχηματισμού Schrieffer - Wolff. Όταν το σύστημα είναι ημιπλήρες, ο μετασχηματισμός καταλήγει στο μοντέλο Heisenberg, ενώ όταν το σύστημα είναι σχεδόν αλλά όχι ακριβώς ημιπλήρες, ο μετασχηματισμός καταλήγει στο μοντέλο t - J . Στις επόμενες παραγράφους παρουσιάζεται συνοπτικά αυτός ο μετασχηματισμός.

Η διαδικασία βασίζεται στο διαχωρισμό του χώρου Fock σε δύο υπόχωρους \mathcal{S} και \mathcal{D} , οι οποίοι περιέχουν τις καταστάσεις με μηδενικές ή μονές και διπλές καταλήψεις των πλεγματικών θέσεων αντίστοιχα. Ο όρος μεταπήδησης \hat{T} μπορεί να χωριστεί σε τρία μέρη προσθέτοντας και αφαιρώντας κατάλληλους βοηθητικούς όρους. Η διαδικασία αυτή θα επιτρέψει την προβολή της χαμιλτο-

νιανής στον υπόχωρο \mathcal{S} . Έχουμε:

$$\begin{aligned}
-t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} &= -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - 2t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \\
&\quad + 2t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} - t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \\
&\quad + t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \\
&= -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + 2\hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} - \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma}) \\
&\quad - t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (\hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma}) \\
&\quad - t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} - \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma}) \\
&= -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - \hat{n}_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - \hat{n}_{j-\sigma}) + \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \quad (\text{A'.2}) \\
&\quad - t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - \hat{n}_{j-\sigma}) \quad (\text{A'.3}) \\
&\quad - t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (1 - \hat{n}_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma}. \quad (\text{A'.4})
\end{aligned}$$

Οι δύο όροι στην (A'.2) περιγράφουν διαδικασίες οι οποίες διατηρούν τους αριθμούς μονών και διπλών καταλήψεων, ενώ οι (A'.3) και (A'.4) περιγράφουν διαδικασίες κατά τις οποίες ο αριθμός διπλών καταλήψεων αυξάνεται ή μειώνεται αντίστοιχα. Επομένως, οι τελεστές \hat{T}_0, \hat{T}_+ και \hat{T}_- ορίζονται από τις (A'.2), (A'.3) και (A'.4) αντίστοιχα. Στο όριο $U \gg t$ ο τελεστής $\mathcal{H}_1 = \hat{T}_+ + \hat{T}_-$ μπορεί να αντιμετωπιστεί ως διαταραχή στον όρο $\mathcal{H}_0 = \hat{T}_0 + \hat{V}$. Σε αυτό το όριο, όταν το σύστημα είναι πλήρες κατά το ήμισυ ή λιγότερο, δεν υπάρχουν διπλές καταλήψεις και επομένως όλοι οι όροι που εξαρτώνται από διπλά κατηλειμμένες θέσεις είναι μηδενικοί. Όταν το σύστημα είναι πλήρες κατά παραπάνω από το ήμισυ, η δράση του τελεστή \hat{V} θα δώσει τουλάχιστον U . Αυτό σημαίνει ότι ο όρος \hat{V} είναι ο πρωτεύων όρος για τον καθορισμό της ενέργειας του συστήματος, ενώ όλοι οι υπόλοιποι όροι είναι $\propto t$ και επομένως πολύ μικρότεροι.

Για τον υπολογισμό της ενεργού χαμιλτονιανής \mathcal{H}_{eff} χρησιμοποιείται ο με-

τασχηματισμός

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{eff}} &= e^{\hat{S}} \hat{H} e^{-\hat{S}} = \mathcal{H} + [\hat{S}, \mathcal{H}] + \frac{1}{2!} [\hat{S}, [\hat{S}, \mathcal{H}]] + \dots \\ &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 + [\hat{S}, \mathcal{H}_0] + [\hat{S}, \mathcal{H}_1] + \frac{1}{2!} [\hat{S}, [\hat{S}, \mathcal{H}_0]] + \dots,\end{aligned}\quad (\text{A'.5})$$

όπου ο τελεστής \hat{S} καθορίζεται από τη συνθήκη $\mathcal{H}_1 + [\hat{S}, \mathcal{H}_0] = 0$. Η ενεργός χαμιλτονιανή λαμβάνει τη μορφή

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_0 + \frac{1}{2} [\hat{S}, \mathcal{H}_1] + \mathcal{O}(t^3). \quad (\text{A'.6})$$

Θα αποδειχθεί τώρα ότι ο κατάλληλος τελεστής \hat{S} είναι

$$\hat{S} = \frac{1}{U} (a^+ \hat{T}_+ + a^- \hat{T}_-). \quad (\text{A'.7})$$

Η συνθήκη για τον τελεστή \hat{S} μπορεί να γραφεί ισοδύναμα ως εξής:

$$\frac{1}{U} (a^+ [\hat{T}_+, \mathcal{H}_0] + a^- [\hat{T}_-, \mathcal{H}_0]) = -(\hat{T}_+ + \hat{T}_-). \quad (\text{A'.8})$$

Για την απόδειξη θα σχηματιστούν τα στοιχεία πίνακα με δύο ιδιοκαταστάσεις του \mathcal{H}_0 . Εφόσον οι τελεστές \hat{T}_\pm προβάλλουν στους υπόχωρους \mathcal{D} και \mathcal{S} , τα διαγώνια στοιχεία πίνακα θα είναι μηδενικά. Τα μη μηδενικά στοιχεία πίνακα είναι

$$\frac{1}{U} (a^+ \langle d | [\hat{T}_+, \mathcal{H}_0] | s \rangle + a^- \langle d | [\hat{T}_-, \mathcal{H}_0] | s \rangle) = -(\langle d | \hat{T}_+ | s \rangle + \langle d | \hat{T}_- | s \rangle) \quad (\text{A'.9})$$

$$\frac{1}{U} (a^+ \langle s | [\hat{T}_+, \mathcal{H}_0] | d \rangle + a^- \langle s | [\hat{T}_-, \mathcal{H}_0] | d \rangle) = -(\langle s | \hat{T}_+ | d \rangle + \langle s | \hat{T}_- | d \rangle). \quad (\text{A'.10})$$

Επειδή $T_+ |d\rangle = T_- |s\rangle = 0$, οι μισοί παραπάνω όροι είναι μηδενικοί. Αντικαθιστώντας τον τελεστή \mathcal{H}_0 με τις ιδιοτιμές του προκύπτει

$$a^+ = \frac{U}{E_s - E_d} = -a^-. \quad (\text{A'.11})$$

Παρόλο που οι ιδιοτιμές E_s και E_d δεν είναι γνωστές, στο όριο $U/t \gg 1$ το ενεργειακό χάσμα μεταξύ καταστάσεων με μόνο μονές και διπλές καταλήψεις είναι $\Delta \simeq n_d U$, όπου n_d είναι ο αριθμός των διπλών καταλήψεων. Οι τελεστές

που ορίστηκαν παραπάνω προκαλούν τη μετάβαση από καταστάσεις με μόνο μόνες καταλήψεις σε καταστάσεις με το πολύ μία διπλή κατάληψη και αντίστροφα. Επομένως $n_d = 1$ και $E_d - E_s = U$. Άρα $a^+ = -1 = -a^-$ και

$$\hat{S} = -\frac{1}{U}(\hat{T}_+ - \hat{T}_-). \quad (\text{A'.12})$$

Σε αυτό το σημείο είναι χρήσιμο να αποδειχθεί η ακόλουθη ταυτότητα:

$$\hat{n}_i \hat{n}_j + 4\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -2 \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{j\sigma}, \quad i \neq j. \quad (\text{A'.13})$$

Ο τελεστής σπιν σε μορφή διανύσματος είναι

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \\ -i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} + i c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} \\ c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \end{pmatrix}, \quad (\text{A'.14})$$

και άρα το γινόμενο δύο τελεστών σπιν είναι

$$\begin{aligned} 4\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \\ &\quad + 2c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow} + 2c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}. \end{aligned} \quad (\text{A'.15})$$

Οι τελεστές απαρίθμησης είναι

$$\begin{aligned} \hat{n}_i \hat{n}_j &= (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow})(\hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{j\downarrow}) = \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{j\downarrow} + \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + \hat{n}_{i\downarrow} \hat{n}_{j\uparrow} \\ &= c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}. \end{aligned} \quad (\text{A'.16})$$

Προσθέτοντας τα δύο παραπάνω αποτελέσματα και μεταθέτοντας προκύπτει η επιθυμητή ταυτότητα

$$\begin{aligned} \hat{n}_i \hat{n}_j + 4\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j &= -2(c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\downarrow} + c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{j\downarrow}) \\ &= -2 \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} c_{j\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{A'.17})$$

Από τα παραπάνω προκύπτει επίσης η εξίσου χρήσιμη ακόλουθη ταυτότητα

$$4\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \hat{n}_i \hat{n}_j = -2 \sum_{\sigma} (\hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{i\sigma} - c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{j\sigma}). \quad (\text{A'.18})$$

Όταν το σύστημα είναι ημιπλήρες, $\langle \hat{n}_i \rangle = \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = 1$. Στο όριο $U/t \gg 1$, ο όρος \mathcal{H}_0 είναι μηδενικός, αφού μόνο οι μη διαγώνιοι όροι, οι οποίοι οδηγούν σε «απαγορευμένες» καταστάσεις με διπλές καταλήψεις, είναι μη

μηδενικοί. Οι μόνες διαδικασίες που επιτρέπονται είναι εικονικές διπλές μεταπηδήσεις ηλεκτρονίων με αντίθετα σπιν μεταξύ γειτονικών θέσεων. Οι διαδικασίες αυτές είναι ουσιαστικά διπλές εναλλαγές σπιν, οι οποίες περιγράφονται από το μοντέλο Heisenberg. Ξεκινώντας από το μεταθέτη $[\hat{S}, \hat{H}_1]$, παρατηρείται ότι

$$[\hat{S}, \hat{H}_1] = \frac{1}{U} [\hat{T}_+, \hat{T}_-]. \quad (\text{A'.19})$$

Αναπτύσσοντας το μεταθέτη πλήρως προκύπτει

$$\begin{aligned} [\hat{T}_+, \hat{T}_-] = & t^2 \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \sum_{\langle i',j' \rangle, \sigma'} \left[\hat{n}_{i-\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} (1 - \hat{n}_{j-\sigma}) (1 - \hat{n}_{i'-\sigma'}) c_{i'\sigma'}^\dagger c_{j'\sigma'} \hat{n}_{j'-\sigma'} \right. \\ & \left. - (1 - \hat{n}_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{i'-\sigma'} c_{i'\sigma'}^\dagger c_{j'\sigma'} (1 - \hat{n}_{j'-\sigma'}) \right] \end{aligned} \quad (\text{A'.20})$$

Ο πρώτος όρος στα αθροίσματα είναι μη μηδενικός μόνο όταν δρα σε καταστάσεις με διπλές καταλήψεις. Παρατηρώντας το δεύτερο όρο, γίνεται φανερό ότι περιγράφει τις ενδιαφέρουσες εικονικές διαδικασίες. Οι τελεστές μέσα στις παρενθέσεις αποτελούν απλά προβολές στον υπόχωρο \mathcal{S} . Επίσης, $i' = j$, γιατί διαφορετικά η θέση i' θα είναι διπλά κατηλειμμένη ύστερα από τη διαδικασία. Τέλος, $i = j'$, αφού όλες οι θέσεις είναι ήδη μονά κατηλειμμένες. Με τους παραπάνω περιορισμούς κατά νου, η ενεργός χαμιλτονιανή γίνεται

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = -\frac{t^2}{U} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{j-\sigma'} c_{j'\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} \quad (\text{A'.21})$$

Με μερικές ακόμα αναδιατάξεις και αγνοώντας όρους εκτός του υπόχωρου \mathcal{S} προκύπτει

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{j-\sigma'} c_{j'\sigma'}^\dagger c_{i\sigma'} &= \\ &= \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}) \\ &= \sum_{\sigma} [\hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{i\sigma} - \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{j\sigma} (\hat{n}_{i\sigma} - c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}) + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}] \\ &= \sum_{\sigma} (\hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma}) \\ &= \sum_{\sigma} (\hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} - c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{j\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger \hat{n}_{j-\sigma}) \\ &= \sum_{\sigma} (\hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{i\sigma} - c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{j\sigma}). \end{aligned} \quad (\text{A'.22})$$

Χρησιμοποιώντας το αποτέλεσμα της (A'.18), προκύπτει το επιθυμητό αποτέλεσμα:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_j}{4} \right), \quad (\text{A'.23})$$

όπου $J = 2t^2 a^- / U = 2t^2 / U$ και $\hat{n}_i \hat{n}_j = 1$ για το ημιπλήρες σύστημα.

Νοθεύοντας το σύστημα με οπές, περαιτέρω όροι πρέπει να ληφθούν υπ' όψιν. Ο επιπλέον κινητικός όρος είναι

$$\hat{T}_0^S = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}, \quad (\text{A'.24})$$

όπου οι προβολές έχουν παραληφθεί. Επίσης, διαδικασίες κατά τις οποίες ηλεκτρόνια μεταπηδούν από μία θέση j' σε μία μη γειτονική, μη κατηλειμμένη θέση i είναι δυνατόν να συμβούν. Αυτές περιγράφονται από τον όρο

$$\hat{\mathcal{J}} = -\frac{t^2}{U} \sum_{ijj',\sigma\sigma'}^{i \neq j'} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \hat{n}_{j-\sigma} \hat{n}_{j-\sigma'} c_{j'\sigma'}^\dagger c_{j'\sigma'}. \quad (\text{A'.25})$$

Το τελικό αποτέλεσμα είναι το μοντέλο t - J :

$$\hat{H}_{t-J} = \hat{T}_0^S + \mathcal{H}_H + \hat{\mathcal{J}}. \quad (\text{A'.26})$$

Συχνά, ο όρος $\hat{\mathcal{J}}$ παραλείπεται, αφού στις συνήθεις περιπτώσεις είναι ο μικρότερος από τους τρεις όρους. Τότε το μοντέλο t - J γράφεται στην ακόλουθη συνοπτική μορφή:

$$\mathcal{H}_{t-J} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \text{h.c.}) + J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (\text{A'.27})$$

όπου $\tilde{c}_{i\sigma}, \tilde{c}_{i\sigma}^\dagger$ είναι οι προβολές των φερμιονικών τελεστών καταστροφής και δημιουργίας στον υπόχωρο \mathcal{S} .

Παράρτημα Β΄

Θεωρία συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X

Η περιγραφή της συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X ξεκινά θεωρώντας την αλληλεπίδραση μεταξύ ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και ηλεκτρονίων σε κβαντικό επίπεδο. Η χαμιλτονιανή για το ηλεκτρονικό σύστημα N ατόμων ενός κρυσταλλικού μονοατομικού στερεού μπορεί να γραφεί ως

$$\mathcal{H}_0^{(e)} = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i^2 + \frac{e\hbar}{4m^2c^2} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\sigma}_i [\nabla\phi(\mathbf{r}_i) \times \mathbf{p}_i] + \mathcal{H}_C, \quad (\text{B'.1})$$

όπου $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i, \boldsymbol{\sigma}_i$ είναι οι τελεστές θέσης, ορμής και σπιν του i -οστού ηλεκτρονίου αντίστοιχα. Ο δεύτερος όρος στο δεξί μέλος είναι η σύζευξη σπιν - τροχιακού στο i -οστό άτομο, η οποία εξαρτάται από το ηλεκτρικό δυναμικό ϕ . Ο όρος \mathcal{H}_C περιλαμβάνει όλες τις υπόλοιπες αλληλεπιδράσεις του συστήματος, οι οποίες δε σχετίζονται με τη συγκεκριμένη διαδικασία.

Τα εισερχόμενα φωτόνια ακτίνων X αντιπροσωπεύονται από ένα ηλεκτρομαγνητικό πεδίο με διανυσματικό δυναμικό $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. Το ηλεκτρικό πεδίο στη θέση \mathbf{r} είναι $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\dot{\mathbf{A}}$. Η αλληλεπίδραση μεταξύ αυτού ηλεκτρομαγνητικού πεδίου και του συστήματος ηλεκτρονίων είναι

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{int}} = & -\frac{e}{2mc} \sum_i [\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \cdot \mathbf{p}_i + \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)] + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_i \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_i) \\ & + \frac{e\hbar}{4m^2c^3} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \dot{\mathbf{A}}(\mathbf{r}_i) \times \left[\mathbf{p}_i - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \right] - \frac{e\hbar}{2mc} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_i) \\ & - \frac{e^2\hbar}{4m^2c^3} \sum_i \boldsymbol{\sigma}_i \cdot [\nabla\phi \times \mathbf{A}(\mathbf{r}_i)]. \end{aligned} \quad (\text{B'.2})$$

Το διανυσματικό δυναμικό σε φορμαλισμό δεύτερης κβάντωσης γράφεται ως σειρά Fourier:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_{\mathbf{k}}}} (\varepsilon a_{\mathbf{k}\varepsilon} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - i\omega_{\mathbf{k}}t} - \varepsilon^* a_{\mathbf{k}\varepsilon}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\omega_{\mathbf{k}}t}), \quad (\text{B'.3})$$

όπου με $a_{\mathbf{k}\varepsilon}^\dagger, a_{\mathbf{k}\varepsilon}$ συμβολίζονται οι τελεστές δημιουργίας και καταστροφής φωτονίων με ορμή \mathbf{k} , ενέργεια $\omega_{\mathbf{k}}$ και διάνυσμα πόλωσης ε , και V είναι ο όγκος του συστήματος. Λαμβάνοντας υπ' όψιν το φωτονικό μέρος

$$\mathcal{H}_0^{(\text{ph})} = \sum_{\mathbf{k}, \varepsilon} \left(\frac{1}{2} + a_{\mathbf{k}\varepsilon}^\dagger a_{\mathbf{k}\varepsilon} \right) \hbar\omega_{\mathbf{k}}, \quad (\text{B'.4})$$

η συνολική χαμιλτονιανή παίρνει τη μορφή

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0^{(\text{e})} + \mathcal{H}_0^{(\text{ph})} + \mathcal{H}_{\text{int}}. \quad (\text{B'.5})$$

Στη συνέχεια ο όρος αλληλεπίδρασης αντιμετωπίζεται ως διαταραχή.

Η αρχική κατάσταση της διαδικασίας συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X συμβολίζεται με $|I\rangle \equiv |g; \mathbf{k}, \varepsilon\rangle$, όπου το μέρος $|g\rangle$ περιγράφει την αρχική κατάσταση του ηλεκτρονικού συστήματος, ενώ με $|\mathbf{k}, \varepsilon\rangle$ συμβολίζονται οι καταστάσεις εισερχομένων φωτονίων με ορμή \mathbf{k} και διάνυσμα πόλωσης ε . Ύστερα από τη διέγερση, το σύστημα παραμένει για πεπερασμένο χρόνο σε μια ενδιάμεση κατάσταση $|M\rangle \equiv |m; 0\rangle$, στην οποία όλα τα εισερχόμενα φωτόνια έχουν απορροφηθεί κατά τη διέγερση ηλεκτρονίων από στοιβάδες χαμηλής ενέργειας στην υποστοιβάδα σθένους ή σε κάποια υποστοιβάδα υψηλότερης ενέργειας. Στη συνέχεια το σύστημα αποδιεγείρεται και καταλήγει σε κάποια τελική κατάσταση $|F\rangle \equiv |f; \mathbf{k}', \varepsilon'\rangle$ με τα ηλεκτρόνια στην κατάσταση $|f\rangle$ και εξερχόμενα φωτόνια στην κατάσταση ορμής και πόλωσης $|\mathbf{k}', \varepsilon'\rangle$. Κατά τη διαδικασία, στο ηλεκτρονικό σύστημα μεταφέρονται ορμή $\hbar\mathbf{q} = \hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{k}'$ και $\hbar\omega = \hbar\omega_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{k}'}$ ανά ηλεκτρόνιο. Επίσης, η διαφορά του διανύσματος πόλωσης μεταξύ εισερχομένων και εξερχομένων φωτονίων μεταφράζεται σε μεταβολή της τροχιακής στροφορμής των ηλεκτρονίων.

Λαμβάνοντας υπ' όψιν τα παραπάνω, ο ρυθμός μετάβασης για τη διαδικασία συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X μπορεί να υπολογιστεί μέσω θεωρίας διαταραχών δεύτερης τάξης και είναι

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_F \left| \langle F | \mathcal{H}_{\text{int}} | I \rangle + \sum_M \frac{\langle F | \mathcal{H}_{\text{int}} | M \rangle \langle M | \mathcal{H}_{\text{int}} | I \rangle}{E_I - E_M} \right|^2 \delta(E_F - E_I). \quad (\text{B'.6})$$

Από τον ορισμό της εξ. (B'.3) για το διανυσματικό δυναμικό παρατηρεί κανείς ότι οι τετραγωνικοί ως προς \mathbf{A} όροι συνεισφέρουν σημαντικά μόνο στον όρο

πρώτης τάξης, ενώ όροι ανάλογοι του γινομένου $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ συνεισφέρουν μόνο στον όρο δεύτερης τάξης. Καθότι ο συντονισμός $E_F - E_I \simeq 0$ είναι απαραίτητη πειραματική συνθήκη, ο όρος δεύτερης τάξης του διαταρακτικού αναπτύγματος είναι κατά κανόνα πολύ μεγαλύτερος από τον όρο πρώτης τάξης. Επίσης, γραμμικοί ως προς \mathbf{A} όροι που περιέχουν τον τελεστή σπιν σ_i είναι κατά πολύ μικρότεροι του όρου $\propto \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$. Για τους παραπάνω λόγους, μόνο ο πρώτος όρος της εξ. (B'.2) είναι καθοριστικός, ενώ οι υπόλοιποι μπορούν να αγνοηθούν.

Με αντικατάσταση της \mathcal{H}_{int} και αναδιάταξη ο ρυθμός μετάβασης λαμβάνει τη μορφή

$$w = \frac{\pi \hbar e^4 \omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'}}{2V^2 \epsilon_0^2} \sum_f |F_{fg}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}', \omega_{\mathbf{k}}, \omega_{\mathbf{k}'})|^2 \delta(E_f - E_g + \hbar\omega), \quad (\text{B'.7})$$

όπου έχει οριστεί το εύρος σκέδασης

$$F_{fg}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}', \omega_{\mathbf{k}}, \omega_{\mathbf{k}'}) = \sum_m \frac{\langle f | \hat{\mathcal{D}}^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{\mathcal{D}} | g \rangle}{E_g + \hbar\omega_{\mathbf{k}} - E_m + i\Gamma} \quad (\text{B'.8})$$

και οι διπολικοί τελεστές μετάβασης

$$\hat{\mathcal{D}} = \frac{1}{im\omega_{\mathbf{k}}} \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{p}_i. \quad (\text{B'.9})$$

Ορίζοντας τη συνάρτηση Green

$$G(\omega_{\mathbf{k}}) = \sum_m \frac{|m\rangle \langle m|}{E_g + \hbar\omega_{\mathbf{k}} + i\Gamma - E_m}, \quad (\text{B'.10})$$

το εύρος σκέδασης γίνεται

$$F_{fg} = \langle f | \hat{\mathcal{D}}^\dagger G(\omega_{\mathbf{k}}) \hat{\mathcal{D}} | g \rangle. \quad (\text{B'.11})$$

Χρησιμοποιήθηκαν επίσης οι σχέσεις $E_I = E_g + \hbar\omega_{\mathbf{k}}$ και $E_F - E_I = E_f - E_g + \hbar\omega_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_{\mathbf{k}} = E_f - E_g + \hbar\omega$. Η βάση των φωτονικών καταστάσεων, καθώς και οι φωτονικοί τελεστές, παραλείπονται για συντομία. Η παράμετρος Γ είναι ο αντίστροφος χρόνος ζωής των ενδιάμεσων καταστάσεων $|m\rangle$. Η φυσική της σημασία συνίσταται στην απόσβεση του χρόνου κατά τον οποίο το σύστημα βρίσκεται σε διεγερμένες καταστάσεις, έτσι ώστε να ληφθούν υπ' όψιν διαδικασίες που δεν ανιχνεύονται μέσω ακτίνων X, όπως για παράδειγμα η αποδιέγερση μέσω του φαινομένου Auger. Ακόμα, η συνάρτηση Dirac που εμφανίζεται στην έκφραση για το ρυθμό μετάβασης αντικαθίσταται από μία συνάρτηση Lorentz, έτσι ώστε να ληφθούν υπ' όψιν ο πεπερασμένος χρόνος

ζωής της τελικής κατάστασης, καθώς και η ακρίβεια του οργάνου μέτρησης. Εν τέλει, ο ρυθμός μετάβασης γίνεται

$$w = \frac{\pi \hbar e^4 \omega_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}'}}{2V^2 \epsilon_0^2} \sum_f |F_{fg}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \boldsymbol{\epsilon}, \boldsymbol{\epsilon}', \omega_{\mathbf{k}}, \omega_{\mathbf{k}'})|^2 \frac{\Gamma_f / \pi}{(E_f + \hbar\omega - E_g)^2 + \Gamma_f^2 / 4}. \quad (\text{B'.12})$$

Τα πειραματικά μετρούμενα φάσματα μοντελοποιούνται με χρήση αυτής της έκφρασης.

Ορισμένες απλοποιήσεις διευκολύνουν τους περαιτέρω υπολογισμούς, χωρίς βλάβη της γενικότητας. Αρχικά, οι διπολικοί τελεστές μετάβασης της εξ. (B'.9) μπορούν να απλοποιηθούν με χρήση της ταυτότητας $[\frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \mathbf{r}] = \frac{im}{\hbar} \mathbf{p}$. Για παράδειγμα, το στοιχείο πίνακα μεταξύ κάποιας αρχικής και κάποιας ενδιάμεσης κατάστασης είναι

$$\begin{aligned} \langle m | \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} | g \rangle &= \frac{im}{\hbar} \left(\langle m | \frac{p^2}{2m} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} | g \rangle - \langle m | \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} \frac{p^2}{2m} | g \rangle \right) \\ &= \frac{im}{\hbar} (E_m - E_g) \langle m | \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} | g \rangle \simeq im\omega_{\mathbf{k}} \langle m | \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} | g \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B'.13})$$

αφού κοντά στο συντονισμό ισχύει $E_m - E_g \simeq \hbar\omega_{\mathbf{k}}$. Ο τελεστής τότε γίνεται

$$\hat{\mathcal{D}} = \sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{r}_i = -i\boldsymbol{\epsilon} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \left(\sum_{i=1}^N e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \right). \quad (\text{B'.14})$$

Ακόμα, η συνδυασμένη δράση των τελεστών $\hat{\mathcal{D}}, \hat{\mathcal{D}}^\dagger$ επιτρέπει τη μεταπήδηση οπών σε στάθμες χαμηλής ενέργειας μεταξύ ατόμων. Στην πραγματικότητα, τέτοιες μεταπήδησεις είναι απίθανες, αφού ο ρυθμός μετάβασης είναι χαμηλός και το διαθέσιμο χρονικό διάστημα εξαιρετικά σύντομο (~ 1 fs), και για αυτό το λόγο θα αγνοηθούν. Γίνεται επίσης φανερό ότι κατά αυτό τον τρόπο οι ηλεκτρονικές καταστάσεις αποτελούν γινόμενο ενός εντοπισμένου μονοσωματιδιακού μέρους, το οποίο αντιπροσωπεύει την ακίνητη οπή, και του πολυσωματιδιακού μέρους των ισχυρά συσχετισμένων ηλεκτρονίων της υποστοιβάδας σθένους. Το πρόβλημα πολλών σωματιδίων της υποστοιβάδας σθένους παρουσιάζεται στο κυρίως μέρος της εργασίας. Στη συνέχεια περιγράφεται λεπτομερώς ο υπολογισμός του εντοπισμένου μέρους του φάσματος συντονισμένης ανελαστικής σκέδασης ακτίνων X και για απλότητα θεωρείται μόνο το αντίστοιχο μέρος των κβαντομηχανικών καταστάσεων. Με αυτές τις παρατηρήσεις, το

εύρος σκέδασης λαμβάνει τη μορφή

$$\begin{aligned}
F_{fg} &\simeq \sum_{i,m} \frac{\langle f | \boldsymbol{\epsilon}'^* \nabla_{\mathbf{k}'} e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}_i} | m \rangle \langle m | \boldsymbol{\epsilon} \nabla_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} | g \rangle}{E_g + \hbar\omega_{\mathbf{k}} - E_m + i\Gamma} \\
&\equiv \sum_{i,m} \frac{\langle f | \hat{D}^\dagger | m \rangle \langle m | \hat{D} | g \rangle}{E_g + \hbar\omega_{\mathbf{k}} - E_m + i\Gamma}, \tag{B'.15}
\end{aligned}$$

όπου οι καταστάσεις αφορούν πλέον μόνο στην εντοπισμένη οπή.

Το επόμενο βήμα είναι ο υπολογισμός των στοιχείων πίνακα. Αρχικά, το εκθετικό $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ αναπτύσσεται μέσω της ταυτότητας

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = 4\pi \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L i^L j_L(kr) Y_{LM}^*(\theta_{\hat{\mathbf{k}}}, \phi_{\hat{\mathbf{k}}}) \cdot Y_{LM}(\theta_{\hat{\mathbf{r}}}, \phi_{\hat{\mathbf{r}}}) \tag{B'.16}$$

σε σφαιρικές αρμονικές $Y_{LM}(\theta_{\hat{\mathbf{r}}}, \phi_{\hat{\mathbf{r}}})$ και συναρτήσεις Bessel $j_L(kr)$. Σε ατομικές καταστάσεις χαμηλής ενέργειας και μη μηδενική τροχιακή στροφορμή το τροχιακό και το σπιν των ηλεκτρονίων είναι συζευγμένα. Για το λόγο αυτό οι καταστάσεις περιγράφονται μέσω της ολικής στροφορμής ως $|g\rangle \equiv |n_g j_g j_g^z\rangle$, $|f\rangle \equiv |n_f j_f j_f^z\rangle$ και $|m\rangle \equiv |n_m j_m j_m^z\rangle$. Σε όρους τροχιακής στροφορμής και σπιν, οι καταστάσεις μπορούν να γραφούν ως

$$\begin{aligned}
|n_g j_g j_g^z\rangle &= \sum_{l_g^z s_g^z} C_{l_g l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}^{j_g j_g^z} |n_g l_g l_g^z \frac{1}{2} s_g^z\rangle \\
|n_f j_f j_f^z\rangle &= \sum_{l_f^z s_f^z} C_{l_f l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}^{j_f j_f^z} |n_f l_f l_f^z \frac{1}{2} s_f^z\rangle \\
|n_m j_m j_m^z\rangle &= \sum_{l_m^z s_m^z} C_{l_m l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} |n_m l_m l_m^z \frac{1}{2} s_m^z\rangle, \tag{B'.17}
\end{aligned}$$

με χρήση των κατάλληλων συντελεστών Clebsch - Gordan. Οι αντίστοιχες κυματοσυναρτήσεις είναι

$$\begin{aligned}
\psi_g(\mathbf{r}) &= R_{n_g l_g}(r) \sum_{l_g^z s_g^z} C_{l_g l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}^{j_g j_g^z} Y_{l_g l_g^z}(\theta, \phi) \chi_{s_g^z} \\
\psi_f(\mathbf{r}) &= R_{n_f l_f}(r) \sum_{l_f^z s_f^z} C_{l_f l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}^{j_f j_f^z} Y_{l_f l_f^z}(\theta, \phi) \chi_{s_f^z} \\
\psi_m(\mathbf{r}) &= R_{n_m l_m}(r) \sum_{l_m^z s_m^z} C_{l_m l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} Y_{l_m l_m^z}(\theta, \phi) \chi_{s_m^z}, \tag{B'.18}
\end{aligned}$$

όπου οι σταθερές έχουν ενσωματωθεί στα ακτινικά μέρη R_{nl} . Τα στοιχεία πίνακα είναι λοιπόν για την απορρόφηση

$$\begin{aligned} \langle m | \hat{D} | g \rangle &= 4\pi\epsilon \sum_{L=0}^{\infty} i^L \int_0^{\infty} dr_i r_i^2 j_L R_{n_m l_m} R_{n_g l_g} \sum_{M=-L}^L \nabla_{\mathbf{k}} Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{k}}) \times \\ &\times \sum_{\substack{l_g^z s_g^z \\ l_g^z l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}} C_{l_g^z l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}^{j_g j_g^z} \int_0^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l_m l_m^z}^* Y_{LM} Y_{l_g l_g^z} \end{aligned} \quad (\text{B'.19})$$

και για την επανεκπομπή

$$\begin{aligned} \langle f | \hat{D}^\dagger | m \rangle &= 4\pi\epsilon'^* \sum_{L'=0}^{\infty} (-i)^{L'} \int_0^{\infty} dr_i r_i^2 j_{L'} R_{n_f l_f} R_{n_m l_m} \sum_{M'=-L'}^{L'} \nabla_{\mathbf{k}'} Y_{L'M'}(\hat{\mathbf{k}}') \times \\ &\times \sum_{\substack{l_f^z s_f^z \\ l_f^z l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}} C_{l_f^z l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}^{j_f j_f^z} \sum_{\substack{l_m^z s_m^z \\ l_m^z l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}} C_{l_m^z l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} \int_0^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l_f l_f^z}^* Y_{L'M'}^* Y_{l_m l_m^z}. \end{aligned} \quad (\text{B'.20})$$

Τα μέρη σπιν των καταστάσεων έχουν παραλειφθεί για συντομία. Είναι ωστόσο σημαντικό να σημειωθεί ότι λόγω της σύζευξης σπιν - τροχιακού, η τελική κατάσταση σπιν μπορεί να διαφέρει από την αρχική.

Για τον υπολογισμό των ακτινικών ολοκληρωμάτων, χρησιμοποιείται η ιδιότητα $Y_{lm}^* = (-1)^m Y_{l-m}$ και οι ταυτότητες

$$\begin{aligned} \int_0^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l_m - l_m^z} Y_{LM} Y_{l_g l_g^z} &= (-1)^{-l_g^z} \sqrt{\frac{(2l_m + 1)(2L + 1)}{4\pi(2l_g + 1)}} C_{l_m 0; L 0}^{l_g 0} C_{l_m - l_m^z; L M}^{l_g - l_g^z} \\ &= (-1)^{M - l_g^z} \sqrt{\frac{(2l_g + 1)(2L + 1)}{4\pi(2l_m + 1)}} C_{l_g 0; L 0}^{l_m 0} C_{l_g l_g^z; L M}^{l_m l_m^z} \end{aligned} \quad (\text{B'.21})$$

$$\begin{aligned} \int_0^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l_f - l_f^z} Y_{L' - M'} Y_{l_m l_m^z} &= (-1)^{-l_m^z} \sqrt{\frac{(2l_f + 1)(2L' + 1)}{4\pi(2l_n + 1)}} C_{l_f 0; L' 0}^{l_m 0} C_{l_f - l_f^z; L' - M'}^{l_m - l_m^z} \\ &= (-1)^{-M' - l_m^z} \sqrt{\frac{(2l_m + 1)(2L' + 1)}{4\pi(2l_f + 1)}} C_{l_m 0; L' 0}^{l_f 0} C_{l_m l_m^z; L' - M'}^{l_f l_f^z}. \end{aligned} \quad (\text{B'.22})$$

Επίσης, ορίζονται οι διανυσματικές σφαιρικές αρμονικές

$$\mathbf{Y}_{LM}(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\sqrt{L(L+1)}} \nabla_{\mathbf{k}} Y_{LM}(\hat{\mathbf{k}}). \quad (\text{B'.23})$$

Με αντικατάσταση των παραπάνω στις σχέσεις των εξ. (B'.19) και (B'.20) προκύπτουν οι ακόλουθες εκφράσεις για τα στοιχεία πίνακα:

$$\langle m|\hat{D}|g\rangle = \sum_{L=0}^{\infty} P_{mg}^L(kr_i) \sum_M (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}_{LM}^*) \sum_{\substack{l_g^z s_g^z \\ l_m^z s_m^z}} C_{l_g l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}^{j_g j_g^z} C_{l_m l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} C_{l_g l_g^z; LM}^{l_m l_m^z} \quad (\text{B'.24})$$

$$\langle f|\hat{D}^\dagger|m\rangle = \sum_{L'=0}^{\infty} P_{fm}^{L'}(k'r_i) \sum_{M'} (-1)^{M'} (\boldsymbol{\epsilon}' \cdot \mathbf{Y}_{L'M'}^*) \sum_{\substack{l_m^z s_m^z \\ l_f^z s_f^z}} C_{l_m l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} C_{l_f l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}^{j_f j_f^z} C_{l_m l_m^z; L'-M'}^{l_f l_f^z}, \quad (\text{B'.25})$$

όπου οι παράγοντες εξαρτώμενοι από ορμή και θέση, καθώς και οι διάφορες σταθερές, έχουν ενσωματωθεί στους παράγοντες P_{mg}^L και $P_{fm}^{L'}$.

Στις παραπάνω εκφράσεις γεωμετρικοί παράγοντες, όπως π.χ. η πόλωση, είναι αναμειγμένοι με τους δυναμικούς παράγοντες, δηλαδή τους παράγοντες εξαρτώμενους από μεταφορά ενέργειας και ορμής. Είναι επιθυμητό να διαχωριστούν οι γεωμετρικοί παράγοντες από τις δυναμικές ποσότητες, οι οποίες συνιστούν τα θεμελιώδη εύρη σκέδασης. Σε δεύτερη κβάντωση οι τελεστές μετάβασης που ορίστηκαν στην εξ. (B'.15) είναι

$$\hat{D} = \sum_{m,g} c_m^\dagger \langle m|\hat{D}|g\rangle c_g = \sum_{\substack{j_m j_m^z \\ j_m^z j_m^z}} c_{j_m j_m^z}^\dagger \langle j_m j_m^z|\hat{D}|j_g j_g^z\rangle c_{j_g j_g^z} \quad (\text{B'.26})$$

$$\hat{D}^\dagger = \sum_{f,m} c_f^\dagger \langle f|\hat{D}^\dagger|m\rangle c_m = \sum_{\substack{j_f j_m \\ j_f^z j_m^z}} c_{j_f j_f^z}^\dagger \langle j_f j_f^z|\hat{D}^\dagger|j_m j_m^z\rangle c_{j_m j_m^z}. \quad (\text{B'.27})$$

Οι τελεστές $c_{jj^z}^\dagger, c_{jj^z}$ δημιουργούν και καταστρέφουν αντίστοιχα ηλεκτρονικές καταστάσεις με ολική στροφορμή j και προβολή κατά τον άξονα z j^z . Οι τελεστές αυτοί μπορούν να αντιμετωπιστούν ως σφαιρικοί ταυστικοί τελεστές βαθμού j [88], όπως μπορεί κανείς να δει από τις σχέσεις μετάθεσης με τους τελεστές ολικής στροφορμής. Είναι λοιπόν δυνατό να χρησιμοποιηθεί άλγεβρα ταυστών για να αποσυζευχθούν και στη συνέχεια να συζευχθούν σε κάποια πιο βολική μορφή.

Η διαδικασία ξεκινά με αποσύζευξη των τελεστών δημιουργίας και καταστροφής σε μέρη τροχιακού και σπιν. Αυτό γίνεται χρησιμοποιώντας τους υπάρχοντες συντελεστές Clebsch - Gordan, οι οποίοι παρουσιάζονται στις εκφράσεις για τα στοιχεία πίνακα, για το σχηματισμό των αντίστροφων ταυστι-

κών γινομένων

$$\sum_{j_g j_g^z} C_{l_g l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}^{j_g j_g^z} C_{j_g j_g^z} = u_{l_g l_g^z} v_{\frac{1}{2} s_g^z} \quad (\text{B'.28})$$

$$\sum_{j_m j_m^z} C_{l_m l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} C_{j_m j_m^z}^\dagger = u_{l_m l_m^z}^\dagger v_{\frac{1}{2} s_m^z}^\dagger \quad (\text{B'.29})$$

$$\sum_{j_f j_f^z} C_{l_f l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}^{j_f j_f^z} C_{j_f j_f^z}^\dagger = u_{l_f l_f^z}^\dagger v_{\frac{1}{2} s_f^z}^\dagger. \quad (\text{B'.30})$$

Οι νέοι τελεστές u και v δρουν στα μέρη σπιν και τροχιακού του χώρου Hilbert αντίστοιχα. Χρησιμοποιώντας τους υπόλοιπους συντελεστές Clebsch - Gordan, οι τροχιακοί συντελεστές μπορούν να συζευχθούν, σχηματίζοντας τον τελεστή διέγερσης

$$\begin{aligned} \sum_{l_g^z l_m^z} C_{l_g l_g^z; LM}^{l_m l_m^z} u_{l_m l_m^z}^\dagger u_{l_g l_g^z} &= \sqrt{\frac{2l_m + 1}{2L + 1}} \sum_{l_g^z l_m^z} (-1)^{l_g - l_g^z} C_{l_m l_m^z; l_g - l_g^z}^{LM} u_{l_m l_m^z}^\dagger u_{l_g l_g^z} \\ &= \sqrt{\frac{2l_m + 1}{2L + 1}} \sum_{l_g^z l_m^z} C_{l_m l_m^z; l_g - l_g^z}^{LM} u_{l_m l_m^z}^\dagger \tilde{u}_{l_g - l_g^z} \equiv \sqrt{\frac{2l_m + 1}{2L + 1}} T_M^L \end{aligned} \quad (\text{B'.31})$$

και όμοια τον τελεστή αποδιέγερσης

$$\sum_{l_m^z l_f^z} C_{l_m l_m^z; L' - M'}^{l_f l_f^z} u_{l_f l_f^z}^\dagger u_{l_m l_m^z} = \sqrt{\frac{2l_f + 1}{2L' + 1}} T_{-M'}^{L'} \quad (\text{B'.32})$$

Ενσωματώνοντας τους τελεστές σπιν με τον ίδιο τρόπο, προκύπτουν τελικά οι πλήρεις τελεστές διέγερσης και αποδιέγερσης, οι οποίοι συμβολίζονται με \tilde{T} .

Σε αυτό το σημείο, το εύρος σχέδασης γράφεται ως εξής:

$$f_{LL'} = R^{LL'} \langle f | \sum_{M'} (\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y}_{L'M'}) \tilde{T}_{M'}^{L'} G(\omega_{\mathbf{k}}) \sum_M (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}_{LM}^*) \tilde{T}_M^L | g \rangle, \quad (\text{B'.33})$$

όπου οι παράγοντες εξαρτώμενοι από ορμή και θέση, καθώς και οι εναπομείναντες παράγοντες εξαρτώμενοι από τροχιακές στροφορμές, έχουν ενσωματωθεί στον παράγοντα $R^{LL'}$. Τα εσωτερικά γινόμενα $\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y}_{L'M'}$ και $\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}_{LM}^*$ αποτελούν επίσης ταυιστές βαθμών L' και L αντίστοιχα. Επομένως, το εύρος σχέδασης μπορεί να γραφεί ως το γινόμενο δύο εσωτερικών γινομένων ταυιστών, δηλαδή

$$f_{LL'} = R^{LL'} \langle f | [(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y})^{L'} \cdot \tilde{T}^{L'}] \cdot [(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}^*)^L \cdot G(\omega_{\mathbf{k}}) \tilde{T}^L] | g \rangle. \quad (\text{B'.34})$$

Τα εσωτερικά γινόμενα μπορούν να αναδιαταχθούν χρησιμοποιώντας την ταυτότητα [89]

$$\begin{aligned}
& [(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y})^{L'} \cdot \tilde{T}^{L'}] \cdot [(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}^*)^L \cdot G(\omega_{\mathbf{k}}) \tilde{T}^L] = \\
& = \sum_{z=|L-L'|}^{L+L'} \sqrt{\frac{2z+1}{(2L'+1)(2L+1)}} [(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y})^{L'}, (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}^*)^L]^z \cdot [\tilde{T}^{L'}, G(\omega_{\mathbf{k}}) \tilde{T}^L]^z \\
& = \sum_{z=|L-L'|}^{L+L'} \sum_{\zeta=-z}^z \sqrt{\frac{2z+1}{(2L'+1)(2L+1)}} [(\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y})^{L'}, (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}^*)^L]_{\zeta}^z \cdot [\tilde{T}^{L'}, G(\omega_{\mathbf{k}}) \tilde{T}^L]_{\zeta}^z.
\end{aligned} \tag{B'.35}$$

Με αυτή τη διαδικασία, το εύρος σκέδασης λαμβάνει τελικά την ακόλουθη κομψή μορφή:

$$f_{LL'} = \sum_z \sum_{\zeta=-z}^z \mathcal{T}_{\zeta}^z(\boldsymbol{\epsilon}', \boldsymbol{\epsilon}, \hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) \langle f | F_{\zeta}^z(k', k, r) | g \rangle, \tag{B'.36}$$

όπου ο παράγοντας

$$\mathcal{T}_{\zeta}^z(\boldsymbol{\epsilon}', \boldsymbol{\epsilon}, \hat{\mathbf{k}}', \hat{\mathbf{k}}) = \sum_{MM'} C_{L'M';LM}^{z\zeta} [\boldsymbol{\epsilon}'^* \cdot \mathbf{Y}_{L'M'}(\mathbf{k}')] [\boldsymbol{\epsilon} \cdot \mathbf{Y}_{LM}^*(\mathbf{k})] \tag{B'.37}$$

περιέχει όλα τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά. Οι συνιστώσες του ενεργού τελεστή F^z είναι

$$F_{\zeta}^z(k', k, r) = \sum_{MM'} C_{L'M';LM}^{z\zeta} \tilde{T}_{M'}^{L'} G(\omega_{\mathbf{k}}) \tilde{T}_M^L. \tag{B'.38}$$

Επαναφέροντας τελικά τους ηλεκτρονικούς τελεστές δημιουργίας και καταστροφής με την αντίστροφη διαδικασία, προκύπτει η ακόλουθη έκφραση για τις συνιστώσες F_{ζ}^z :

$$F_{\zeta}^z(k', k, r) = \sum_{\text{all } j, j^z} S_{\zeta}^z c_{j_f j_f^z}^{\dagger} c_{j_m j_m^z} G(\omega_{\mathbf{k}}) c_{j_m j_m^z}^{\dagger} c_{j_g j_g^z}, \tag{B'.39}$$

όπου

$$S_{\zeta}^z = \sum_{\substack{M, M' \\ \text{all } l^z, s^z}} C_{L'M';LM}^{z\zeta} C_{l_f l_f^z; \frac{1}{2} s_f^z}^{j_f j_f^z} \left(C_{l_m l_m^z; \frac{1}{2} s_m^z}^{j_m j_m^z} \right)^2 C_{l_g l_g^z; \frac{1}{2} s_g^z}^{j_g j_g^z} C_{l_g l_g^z; LM}^{l_m l_m^z} C_{l_m l_m^z; L'-M'}^{l_f l_f^z}. \tag{B'.40}$$

Παράρτημα Γ'

Μέθοδος Lanczos

Οι περισσότερες περιπτώσεις συστημάτων ισχυρά συσχετισμένων σωματιδίων είναι αδύνατο να λυθούν αναλυτικά. Μερικές φορές έξυπνες απλοποιήσεις είναι δυνατό να παρέχουν μια καλή προσέγγιση της λύσης σε κάποιο όριο. Παρόλα αυτά, η ακριβής λύση είναι ενίοτε αναγκαία, είτε για δοκιμή της αποτελεσματικότητας κάποιας νέας προσεγγιστικής μεθόδου, είτε ως μοναδική λύση ενός κατά τα άλλα άλυτου προβλήματος. Σε αυτές τις περιπτώσεις, αριθμητικές προσομοιώσεις πεπερασμένων συστημάτων αποτελούν την κύρια μέθοδο εξαγωγής φυσικών συμπερασμάτων. Ο πιο ευθύς τρόπος προσομοίωσης είναι η κατασκευή ή της χαμιλτονιανής ενός όσο το δυνατόν ρεαλιστικού μοντέλου ενός φυσικού συστήματος σε μορφή πίνακα και η μετέπειτα διαγωνοποίησή της. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούνται για αυτό το σκοπό ονομάζονται μέθοδοι επακριβούς διαγωνοποίησης. Η μέθοδος Lanczos είναι η απλούστερη από αυτές.

Η μέθοδος Lanczos [90, 91] ξεκινά με την επιλογή ενός τυχαίου μοναδιαίου διανύσματος $|c_0\rangle$, εκφρασμένου στο χώρο Fock του εκάστοτε προβλήματος. Η διαδικασία συνίσταται σε διαδοχικές δράσεις της χαμιλτονιανής στο $|c_0\rangle$ και στα διανύσματα που παράγονται από αυτό. Ύστερα από την πρώτη δράση προκύπτει το διάνυσμα

$$\mathcal{H} |c_0\rangle = \epsilon_0 |c_0\rangle + |\tilde{c}_1\rangle. \quad (\Gamma'.1)$$

Το παραγόμενο διάνυσμα είναι αναπτυγμένο σε δύο συνιστώσες, μία παράλληλη στο $|c_0\rangle$ και μία κάθετη σε αυτό. Στη συνέχεια, η χαμιλτονιανή δρα πάνω στο διάνυσμα $|c_1\rangle$, το οποίο είναι το μοναδιαίο διάνυσμα στην κατεύθυνση του $|\tilde{c}_1\rangle$ ¹. Και πάλι το προκύπτον διάνυσμα χωρίζεται σε δύο συνιστώσες. Η συνιστώσα κάθετη στο $|c_1\rangle$ μπορεί να χωριστεί σε δύο περαιτέρω συνιστώσες, μία παράλληλη στο $|c_0\rangle$ και μία κάθετη σε αυτό. Επομένως είναι

$$\mathcal{H} |c_1\rangle = \epsilon_1 |c_1\rangle + k_1 |c_0\rangle + |\tilde{c}_2\rangle. \quad (\Gamma'.2)$$

¹Φυσικά το αρχικό διάνυσμα απαιτείται να μην είναι ιδιοδιάνυσμα της χαμιλτονιανής. Αν αυτό συμβεί, η διαδικασία σταματά απευθείας, αφού δεν προκύπτει η καμία συνιστώσα $|\tilde{c}_1\rangle$.

Με αυτό τον τρόπο έχει οριστεί ένα τρίτο διάνυσμα, κάθετο στα προηγούμενα δύο. Από τη διαδικασία προκύπτουν τα στοιχεία πίνακα

$$\epsilon_0 = \langle c_0 | \mathcal{H} | c_0 \rangle, \quad \epsilon_1 = \langle c_1 | \mathcal{H} | c_1 \rangle, \quad k_1 = \langle c_0 | \mathcal{H} | c_1 \rangle. \quad (\Gamma'.3)$$

Η διαδικασία επαναλαμβάνεται με αυτό τον τρόπο. Το n -οστό διάνυσμα δίνει

$$\mathcal{H} | c_n \rangle = \epsilon_n | c_n \rangle + k_n | c_{n-1} \rangle + |\tilde{c}_{n+1} \rangle. \quad (\Gamma'.4)$$

Η διαδικασία μπορεί να διακοπεί για $n \leq N - 1$, όπου N είναι η διάσταση του χώρου Fock. Η προσεγγιστική βάση που ορίζεται από τα διανύσματα $|c_0\rangle, |c_1\rangle, \dots, |c_{n+1}\rangle$ ονομάζεται βάση Lanczos και σε αυτή τη βάση η χαμιλτονιανή μπορεί να γραφεί ως τριδιαγώνιος πίνακας:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & k_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ k_1 & \epsilon_1 & k_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & \epsilon_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \epsilon_{n-1} & k_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & k_{n-1} & \epsilon_n & k_n \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & k_n & \epsilon_{n+1} \end{pmatrix}. \quad (\Gamma'.5)$$

Τυπικές αριθμητικές μέθοδοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη διαγωνοποίηση αυτού του πίνακα. Τα ιδιοδιανύσματα της χαμιλτονιανής μπορούν να γραφούν συναρτήσει των διανυσμάτων Lanczos ως

$$|\phi_j\rangle = \sum_{i=0}^{n+1} |c_i\rangle \langle c_i | \phi_j \rangle, \quad j = 1, \dots, n+1. \quad (\Gamma'.6)$$

Χρησιμοποιώντας τα εσωτερικά γινόμενα $\langle c_i | \phi_j \rangle$, καθεμία από τις δύο βάσεις μπορεί να απεικονιστεί στην άλλη.

Για μια δεδομένη χαμιλτονιανή, η βάση Lanczos προσδιορίζεται πλήρως από την επιλογή του αρχικού διανύσματος και τον αριθμό των επαναλήψεων. Το διάνυσμα Lanczos $|c_1\rangle$ βρέθηκε δρώντας με τη χαμιλτονιανή πάνω στο $|c_0\rangle$. Με μία ακόμη δράση προκύπτει

$$\hat{H}^2 |c_0\rangle = \hat{H}(\epsilon_0 |c_0\rangle + |\tilde{c}_1\rangle) = \epsilon_0^2 |c_0\rangle + |\tilde{c}_1\rangle (\epsilon_1 |c_1\rangle + k_1 |c_0\rangle + |\tilde{c}_2\rangle). \quad (\Gamma'.7)$$

Συνάγεται λοιπόν ότι για το διάνυσμα $|c_\nu\rangle$ χρειάζεται ουσιαστικά να υπολογιστούν μόνο τα διανύσματα $\hat{H}^\mu |c_0\rangle$ για $\mu = 1, \dots, \nu$. Για το λόγο αυτό, η μέθοδος Lanczos ανήκει στις λεγόμενες μεθόδους δύναμης.

Η διαδικασία Lanczos συγκλίνει εξαιρετικά γρήγορα, τυπικά για $n \lesssim 100$, ακόμα και για χώρους Fock με $N \sim 10^6$. Όταν οι υπολογισμοί γίνονται με ακρίβεια μηχανής, τα διανύσματα Lanczos χάνουν σταδιακά την ορθογωνιότητά τους. Σε ορισμένες περιπτώσεις απαιτείται η επαναορθογωνοποίηση των διανυσμάτων για την αποφυγή εσφαλμένων αποτελεσμάτων. Επίσης, η μέθοδος Lanczos αποτυγχάνει να προσδιορίσει τον αριθμό εκφυλισμένων καταστάσεων, παρόλο που υπολογίζει σωστά την ενέργειά τους. Για τον προσδιορισμό του εκφυλισμού μπορούν να χρησιμοποιηθούν είτε κατάλληλες γενικεύσεις της μεθόδου Lanczos, είτε διαφορετικές μέθοδοι επακριβούς διαγωνοποίησης. Οι περιορισμοί αυτοί δεν επηρεάζουν τους υπολογισμούς που περιλαμβάνονται σε αυτή την εργασία.

Βιβλιογραφία

- [1] J. H. de Boer and E. J. W. Verwey, Proceedings of the Physical Society **49**, 59 (1937).
- [2] N. F. Mott and R. Peierls, Proceedings of the Physical Society **49**, 72 (1937).
- [3] J. Hubbard, Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **276**, 238 (1963).
- [4] E. Lieb and F. Wu, Physical Review Letters **20**, 1445 (1968).
- [5] L. J. P. Ament *et al.*, Reviews of Modern Physics **83**, 705 (2011).
- [6] S. Kourtis, J. van den Brink, and M. Daghofer, Physical Review B **85**, 064423 (2012).
- [7] H. A. Kramers and W. Heisenberg, Zeitschrift für Physik **31**, 681 (1925).
- [8] B. J. Kim *et al.*, Nature Physics **2**, 397 (2006).
- [9] C. Kim *et al.*, Physical Review Letters **77**, 4054 (1996).
- [10] C. Kim *et al.*, Physical Review B **56**, 15589 (1997).
- [11] F. C. Zhang and T. M. Rice, Physical Review B **37**, 3759 (1988).
- [12] M. Ogata and H. Shiba, Physical Review B **41**, 2326 (1990).
- [13] H. Suzuura and N. Nagaosa, Physical Review B **56**, 3548 (1997).
- [14] J. Schlappa *et al.*, Nature **485**, 82 (2012).
- [15] A. Oleś, G. Khaliullin, P. Horsch, and L. Feiner, Physical Review B **72**, 214431 (2005).
- [16] K. Wohlfeld, M. Daghofer, S. Nishimoto, and G. Khaliullin, Physical Review Letters **107**, 147201 (2011).

- [17] K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Physical Review Letters* **45**, 494 (1980).
- [18] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, *Physical Review Letters* **49**, 405 (1982).
- [19] B. Simon, *Physical Review Letters* **51**, 2167 (1983).
- [20] M. Kohmoto, *Annals of Physics* **354**, 343 (1985).
- [21] Q. Niu and D. J. Thouless, *Physical Review B* **31**, 3372 (1985).
- [22] J. E. Avron, D. Osadchy, and R. Seiler, *Physics Today* **56**, 38 (2003).
- [23] B. Douçot and V. Pasquier, in *The Quantum Hall Effect*, Vol. 45 of *Progress in Mathematical Physics*, edited by B. Douçot, V. Pasquier, B. Duplantier, and V. Rivasseau (Birkhäuser, Paris, 2005), pp. 23–53.
- [24] J. K. Jain, *Physics Today* **53**, 39 (2000).
- [25] E. Brown, *Physical Review* **133**, A1038 (1964).
- [26] J. Zak, *Physical Review* **134**, A1602 (1964).
- [27] R. Kubo, *Journal of the Physical Society of Japan* **12**, 570 (1957).
- [28] M. V. Berry, *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **392**, 45 (1984).
- [29] D. Xiao, M. C. Chang, and Q. Niu, *Reviews of Modern Physics* **82**, 1959 (2010).
- [30] D. R. Hofstadter, *Physical Review B* **14**, 2239 (1976).
- [31] C. Albrecht *et al.*, *Physical Review Letters* **86**, 147 (2001).
- [32] R. E. Prange, *Physical Review B* **23**, 4802 (1981).
- [33] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard, *Physical Review Letters* **48**, 1559 (1982).
- [34] F. D. M. Haldane and E. H. Rezayi, *Physical Review B* **31**, 2529 (1985).
- [35] X.-G. Wen and Q. Niu, *Physical Review B* **41**, 9377 (1990).
- [36] R. B. Laughlin, *Physical Review B* **27**, 3383 (1983).

- [37] F. D. M. Haldane, Physical Review Letters **51**, 605 (1983).
- [38] G. S. Kliros and N. D'Ambrumenil, Journal of Physics C: Solid State Physics **3**, 4241 (1991).
- [39] R. Tao and D. J. Thouless, Physical Review B **28**, 1142 (1983).
- [40] R. Tao and Y. S. Wu, Physical Review B **30**, 1097 (1984).
- [41] W. P. Su, Physical Review B **30**, 1069 (1984).
- [42] F. Wilczek, Physical Review Letters **49**, 957 (1982).
- [43] D. P. Arovas, J. R. Schrieffer, and F. Wilczek, Physical Review Letters **53**, 722 (1984).
- [44] B. I. Halperin, Physical Review Letters **52**, 1583 (1984).
- [45] R. Tao and Y. S. Wu, Physical Review B **31**, 6859 (1985).
- [46] F. D. M. Haldane, Physical Review Letters **67**, 937 (1991).
- [47] M. D. Johnson and G. S. Canright, Physical Review B **49**, 2947 (1994).
- [48] S. He, X. C. Xie, and F. C. Zhang, Physical Review Letters **68**, 3460 (1992).
- [49] V. J. Goldman and B. Su, Science (New York, N.Y.) **267**, 1010 (1995).
- [50] R. de Picciotto *et al.*, Nature **389**, 162 (1997).
- [51] L. Saminadayar, D. C. Glattli, Y. Jin, and B. Etienne, Physical Review Letters **79**, 2526 (1997).
- [52] F. Camino, W. Zhou, and V. Goldman, Physical Review B **72**, 075342 (2005).
- [53] E.-A. Kim, M. Lawler, S. Vishveshwara, and E. Fradkin, Physical Review Letters **95**, 176402 (2005).
- [54] S. An *et al.*, arXiv:1112.3400v1 (2011).
- [55] T. Neupert, L. Santos, C. Chamon, and C. Mudry, Physical Review Letters **106**, 236804 (2011).
- [56] F. D. M. Haldane, Physical Review Letters **61**, 2821 (1988).

- [57] C. L. Kane and E. J. Mele, Physical Review Letters **95**, 226801 (2005).
- [58] C. L. Kane and E. J. Mele, Physical Review Letters **95**, 146802 (2005).
- [59] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, Science (New York, N.Y.) **314**, 1757 (2006).
- [60] M. König *et al.*, Science (New York, N.Y.) **318**, 766 (2007).
- [61] K. Ohgushi, S. Murakami, and N. Nagaosa, Physical Review B **62**, 6065 (2000).
- [62] Y. Akagi and Y. Motome, Journal of the Physical Society of Japan **79**, 083711 (2010).
- [63] I. Martin and C. D. Batista, Physical Review Letters **101**, 156402 (2008).
- [64] S. Kourtis, J. W. F. Venderbos, and M. Daghofer, arXiv:1208.3481v1 (2012).
- [65] J. W. F. Venderbos, M. Daghofer, and J. van den Brink, Physical Review Letters **107**, 116401 (2011).
- [66] J. W. F. Venderbos, S. Kourtis, J. van den Brink, and M. Daghofer, Physical Review Letters **108**, 126405 (2012).
- [67] C. Nayak, Physical Review B **62**, 4880 (2000).
- [68] S. Tewari, C. Zhang, V. Yakovenko, and S. Das Sarma, Physical Review Letters **100**, 217004 (2008).
- [69] P. Kotetes and G. Varelogiannis, Physical Review Letters **104**, 106404 (2010).
- [70] E. Tang, J.-W. Mei, and X.-G. Wen, Physical Review Letters **106**, 236802 (2011).
- [71] K. Sun, Z. Gu, H. Katsura, and S. Das Sarma, Physical Review Letters **106**, 236803 (2011).
- [72] D. N. Sheng, Z.-C. Gu, K. Sun, and L. Sheng, Nature communications **2**, 389 (2011).
- [73] Y.-F. Wang, Z.-C. Gu, C.-D. Gong, and D. N. Sheng, Physical Review Letters **107**, 146803 (2011).

- [74] N. Regnault and B. A. Bernevig, *Physical Review X* **1**, 021014 (2011).
- [75] Y. L. Wu, B. A. Bernevig, and N. Regnault, *Physical Review B* **85**, 075116 (2012).
- [76] M. Trescher and E. J. Bergholtz, arXiv:1205.2245v3 (2012).
- [77] S. Yang, Z.-C. Gu, K. Sun, and S. Das Sarma, arXiv:1205.5792 (2012).
- [78] Y.-F. Wang, H. Yao, C.-D. Gong, and D. N. Sheng, arXiv:1204.1697 (2012).
- [79] Z. Liu, E. J. Bergholtz, H. Fan, and A. Läuchli, arXiv:1206.3759v2 (2012).
- [80] A. Sterdyniak, C. Repellin, B. A. Bernevig, and N. Regnault, arXiv:1207.6385v1 (2012).
- [81] A. Läuchli, Z. Liu, E. J. Bergholtz, and R. Moessner, arXiv:1207.6094v1 (2012).
- [82] C. Nayak, A. Stern, M. Freedman, and S. Das Sarma, *Reviews of Modern Physics* **80**, 1083 (2008).
- [83] X.-G. Wen, F. Wilczek, and A. Zee, *Physical Review B* **39**, 11413 (1989).
- [84] A. G. Grushin, T. Neupert, C. Chamon, and C. Mudry, arXiv:1207.4097v1 (2012).
- [85] B. A. Bernevig and N. Regnault, *Physical Review B* **85**, 075128 (2012).
- [86] M. Oshikawa, *Physical Review Letters* **84**, 1535 (2000).
- [87] S. Yang, K. Sun, and S. Das Sarma, *Physical Review B* **85**, 205124 (2012).
- [88] B. Judd, *Second quantization and atomic spectroscopy, G. H. Dieke memorial lectures* (Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1967).
- [89] D. Varshalovich, A. Moskalev, and V. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum* (World Scientific, Singapore, 1988).
- [90] C. Lanczos, *Journal Of Research Of The National Bureau Of Standards* **45**, 255 (1950).
- [91] C. Lanczos, *Journal Of Research Of The National Bureau Of Standards* **49**, 33 (1952).