

UNIwersYTET IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU
WYDZIAŁ FIZYKI



PRACA DOKTORSKA

wykonana w Zakładzie Stanów Elektronowych Ciała Stałego Wydziału Fizyki UAM

Uporządkowania elektronowe i ich separacje w rozszerzonych modelach Hubbarda

Konrad Jerzy Kapcia

PROMOTOR:

prof. dr hab. Stanisław Robaszkiewicz

*Zakład Stanów Elektronowych Ciała Stałego, Wydział Fizyki,
Uniwersytet im. Adama Mickiewicza w Poznaniu*

Poznań, marzec 2014

Podziękowania

Serdecznie dziękuję mojemu promotorowi, Panu Profesorowi dr. hab.

Stanisławowi Robaszkiewiczowi,

który prawie od początku moich studiów na Wydziale Fizyki UAM był moim opiekunem naukowym, a następnie podjął się opieki nad moim doktoratem. Za nieocenioną pomoc, cenne rady, owocne dyskusje i wielką życzliwość przez te wszystkie lata bardzo dziękuję, mając jednocześnie nadzieję na owocną współpracę w przyszłości.

Bardzo dziękuję Panu Profesorowi dr. hab. **Romanowi Micnasowi** za konstruktywne dyskusje i wartościowe rady, a także za krytyczne uwagi i sugestie podczas pisania tej pracy.

Dziękuję pracownikom Zakładu Stanów Elektronowych Ciała Stałego Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, w szczególności Panu prof. dr. hab. Tomaszowi Kostyrce, Panu prof. UAM dr. hab. Grzegorzowi Pawłowskiemu, Panu dr. Wojciechowi R. Czartowi oraz Panu mgr. Szymonowi Murawskiemu, za dyskusje, życzliwość i wspierającą atmosferę.

Dziękuję Władzom Dziekańskim Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, w szczególności dziekanom: Panu Profesorowi dr. hab. **Ryszardowi Naskręckiemu** oraz Panu Profesorowi dr. hab. **Antoniemu Wójcikowi**, za życzliwość i wsparcie w wielu różnych sprawach.

Dodatkowo dziękuję Panu Profesorowi dr. hab. **Stefanowi Jurdze**, dyrektorowi Centrum NanoBioMedycznego Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, za wiarę, wieczny optymizm oraz dbałość o dobre obyczaje.

Wsparcie finansowe

Autor rozprawy uzyskał środki finansowe na przygotowanie rozprawy doktorskiej z Narodowego Centrum Nauki w ramach finansowania stypendium doktorskiego pt.: „*Uporządkowania elektronowe oraz ich separacje w rozszerzonych modelach Hubbarda*” w latach 2013–2014 przyznanych w konkursie ETIUDA 1 na podstawie decyzji numer **DEC-2013/08/T/ST3/00012**.



NARODOWE CENTRUM NAUKI

Część wyników przedstawionych w pracy doktorskiej powstało w ramach projektu naukowego pt.: „*Uporządkowania elektronowe i ich separacje w rozszerzonych modelach Hubbarda*” finansowanego w latach 2011–2013 ze środków Narodowego Centrum Nauki przyznanych w konkursie PRELUDIUM 1 na podstawie decyzji numer **DEC-2011/01/N/ST3/00413**, którego kierownikiem był autor niniejszej rozprawy.

Dziękuję Komisji Europejskiej oraz Ministerstwu Nauki i Szkolnictwa Wyższego za częściowe wsparcie finansowe podczas studiów doktoranckich z Europejskiego Funduszu Społecznego — Program Operacyjny „Kapitał Ludzki” — **POKL.04.01.01-00-133/09-00** — Zintegrowany program wspierający rozwój Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu w zakresie nauk fizycznych: „*Proinnowacyjne kształcenie, kompetentna kadra, absolwenci przyszłości*” w latach 2010–2014.



Autor pracy był laureatem stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia na rok akademicki 2012/2013 dla doktorantów oraz stypendystą Fundacji Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu na rok 2013.



Ministerstwo Nauki
i Szkolnictwa Wyższego



FUNDACJA UNIWERSYTETU
IM. ADAMA MICKIEWICZA
W POZNANIU

*Wszystko zaczęło się od porządku i tak się skończy, i tak się znów zacznie,
zgodnie z prawodawcą porządku i mistyczną matematyką niebios.*

SIR THOMAS BROWNE

Zmienność jest prawem natury i dlatego dziwi tylko niezmienność.

HRABIA ROCHESTER

*Pracę tą dedykuję moim Dziadkom, Rodzicom i Siostrze,
którzy zawsze mnie wspierali.*

*Dziękuję Iwonie Ostrowskiej,
osobie szczególnie mi bliskiej,
za cierpliwość, motywację i wsparcie.*

STRESZCZENIE

PRACA DOKTORSKA

„Uporządkowania elektronowe i ich separacje w rozszerzonych modelach Hubbarda”

Konrad Jerzy Kapcia

*Zakład Stanów Elektronowych Ciała Stałego, Wydział Fizyki, Uniwersytet im. Adama
Mickiewicza w Poznaniu, ul. Umultowska 85, 61-614 Poznań, Polska **

Nadprzewodnictwo z ekstremalnie krótką długością koherencji (tj. z rozmiarem pary elektronowej rzędu wielkości efektywnego węzła sieci) cieszy się w ostatnich latach dużym zainteresowaniem, ponieważ może mieć duże znaczenie do opisu nadprzewodników wysokotemperaturowych (miedziany, bizmutaty, grupa pniktydków żelaza, fullereny, itp.) oraz innych klas „egzotycznych” nadprzewodników (nadprzewodniki ciężkofermionowe i organiczne oraz fazy Chevrela). Ponadto zjawisko elektronowej separacji fazowej (PS), w której mogą wystąpić obszary nadprzewodzące (nadciekłe) jest bardzo aktualnym tematem, gdyż może odgrywać kluczową rolę dla zachowania wielu rzeczywistych związków i materiałów oraz układów fermionów na sieciach optycznych. Dodatkowo wzajemne relacje i konkurencja pomiędzy nadprzewodnictwem (SS) i innymi rodzajami uporządkowania elektronowego (porządek ładunkowy (CO) oraz magnetyczny (F)) prowadzą do ciekawych zjawisk w wyżej wymienionych układach fizycznych.

Celem przygotowanej pracy doktorskiej było zbadanie wpływu różnych typów oddziaływań mogących występować w materii skondensowanej na wzajemną stabilność nadprzewodnictwa oraz innych konkurencyjnych uporządkowań elektronowych (porządek ładunkowy, magnetyczny, jednorodne fazy mieszane) oraz na ich relacje ze stanami z separacją faz.

Badanym w pracy modelem teoretycznym jest klasa rozszerzonych modeli Hubbarda w granicy zerowej szerokości pasma, w których oprócz oddziaływania jednowęzłowego U

*e-mail: konrad.kapcia@amu.edu.pl, kakonrad@tlen.pl

rozważyliśmy również międzywęzłowe ładunkowe I i magnetyczne (J^z , J^{xy}) oddziaływania wymienne oraz międzywęzłowe oddziaływania W gęstość-gęstość (ich zasięg jest ograniczony do najbliższych sąsiadów). W szczególności badamy różne modele nadprzewodników z całą I przeskoku pary koncentrując się na: zbadaniu właściwości fazy nadprzewodzącej i wpływu zewnętrznego pola magnetycznego (efekt paramagnetyczny), a także na analizie wpływu międzywęzłowych oddziaływań typu gęstość-gęstość oraz międzywęzłowych oddziaływań magnetycznych na wzajemne relacje i konkurencje nadprzewodnictwa z porządkami, odpowiednio, ładunkowym oraz magnetycznym. Do analizy rozważanych modeli zastosowaliśmy podejście wariacyjne, w którym wyraz jednowęzłowy jest traktowany ściśle, natomiast do wyrazów międzywęzłowych stosujemy przybliżenie pola średniego. Ponadto otrzymaliśmy w stanie podstawowym wyniki wykraczające poza przybliżenie wariacyjne (wyniki ścisłe dla łańcucha, różne wyniki przybliżone dla sieci dwu- i trójwymiarowych).

W pracy otrzymaliśmy ścisłe wyniki w granicy $d \rightarrow +\infty$ (granica dużego wymiaru przestrzennego d lub dużej liczby koordynacyjnej z) dla badanych modeli (podejście wariacyjne: pełne diagramy fazowe oraz charakterystyki termodynamiczne). Ponadto uzyskane wyniki ścisłe dla $d = 1$ i przybliżone dla różnych sieci o wymiarowości $d < +\infty$ uzupełniają rezultaty przybliżenia wariacyjnego i jakościowo są z nimi zgodne. Nasze rezultaty pokazują, że analizowane modele przewidują występowanie stanów z elektronową separacją fazową.

Właściwości badanego układu silnie zależą od stosunku wielkości oddziaływania jednowęzłowego U i całki przeskoku pary I , który jest związany z energią wiązania pary i jej ruchliwością $I_0 = zI$ (z — liczba najbliższych sąsiadów). Otrzymane wyniki dla modelu U - I ($W = 0$, $J^z = J^{xy} = 0$) pokazują, że badany układ wykazuje ciekawe zachowanie trójkrytyczne, a na diagramach fazowych oprócz faz jednorodnych (normalnej (NO) oraz nadprzewodzącej (SS)) występuje także stan z separacją faz PS:SS/NO. Przemiana SS-NO może być przemianą ciągłą lub nieciągłą. Ze zmianą rodzaju przemiany związane jest istnienie linii punktów trójkrytycznych na diagramie fazowym modelu. Analiza wpływu zewnętrznego pola magnetycznego pokazuje, że separacja ta może być indukowana zewnętrznym polem magnetycznym (efekt paramagnetyczny pola). Ponadto określiliśmy obszary występowania stanów metastabilnych na diagramach fazowych modelu i zbadaliśmy wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na te stany.

Analiza modeli U - I - W ($J^z = J^{xy} = 0$) oraz U - I - J ($W = 0$) przewiduje współistnienie w stanach z separacją fazową, odpowiednio, nadprzewodnictwa i porządku ładunkowego (PS:SS/CO) oraz nadprzewodnictwa i magnetyzmu (PS:SS/F). W szczególności otrzymujemy, że przemiany pomiędzy fazą nadprzewodzącą i innymi fazami uporządkowanymi

(przemiany SS–CO oraz SS–F) są przemianami pierwszego rodzaju dla ustalonego potencjału chemicznego, co prowadzi do występowania stanów z separacją fazową (PS:SS/CO oraz PS:SS/F, odpowiednio) w określonych zakresach koncentracji elektronowych. Na diagramach tych dwóch modeli, oprócz punktów trójkrytycznych występują inne punkty krytyczne, np. punkty bikrytyczne czy krytyczne punkty końcowe.

W pracy przedyskutowaliśmy też jakościowy wpływ skończonej wartości całki przeskoku dla pojedynczych elektronów na diagramy fazowe i właściwości badanych modeli. Zaprezentowano postać hamiltonianu efektywnego otrzymanego w ramach formalizmu rachunku zanurzeń, w dwóch skrajnych granicach: $U \ll 0$ (faworyzuje podwójne obsadzenia węzłów, redukcja pojedynczych obsadzeń) oraz $U \gg 0$ (odwrotnie — redukuje liczbę podwójnie obsadzonych węzłów). Jako zaburzenie traktowano wyraz przeskoku jednoelektronowego.

ABSTRACT

A dissertation submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of the physical sciences at the Adam Mickiewicz University in Poznań

“Electron orderings and their separations in the extended Hubbard models”

Konrad Jerzy Kapcia

*Electron States of Solids Division, Faculty of Physics, Adam Mickiewicz University in Poznań,
Umultowska 85, PL-61-614 Poznań, Poland **

There has been much interest in superconductivity with very short coherence length (i.e. with the pair size being of the order of the radius of an effective lattice site). This interest is due to its possible relevance to high temperature superconductors (cuprates, doped bismuthates, iron-based systems, fullerenes, etc.) and also to the several other exotic superconducting materials (heavy fermion systems, organic superconductors and Chevrel phases). Also, the electron phase separation (PS) phenomenon involving superconducting (superfluid) states is a very current topic, because it can play a crucial role in determining behaviour in many real compounds and strongly bounded fermion pairs on the optical lattices. In addition, the interplay and competition between superconductivity (SS) and other types of electron orderings (charge orderings (COs) or magnetism (F)) lead to interesting phenomena in the above-mentioned physical systems.

The aim of the dissertation prepared was to investigate the effects of different types of interactions that may occur in condensed matter on mutual stability of superconductivity and other competing electron orderings (charge and magnetic orderings as well as homogeneous mixed phases) and their relations with the states of phase separation.

The class of fundamental microscopic models — extended Hubbard models — has been analyzed at the atomic limit, in which apart from on-site interaction U the inter-site interactions such as density-density W , magnetic (J^z , J^{xy}) and charge exchange I interac-

*e-mail: konrad.kapcia@amu.edu.pl, kakonrad@tlen.pl

tions are considered with their range restricted to the nearest neighbours. In particular, we investigate models of superconductors with pair hopping interaction I focusing on an analysis of the superconducting phase and an influence of magnetic field (paramagnetic effect) as well as an analysis of the impact of the density-density and magnetic intersite interactions on mutual relations and competition between superconductivity and charge or magnetic orderings, respectively. The analyses of these models have been performed within the variational approach, which treats the on-site interaction term exactly and the intersite interactions within the mean-field approximation. Moreover, some ground state results beyond the variational approach have been obtained (exact results for one dimensional chain, various results for two and three dimensional lattices).

In the dissertation we obtained exact results in the limit $d \rightarrow +\infty$ (the limit of large spatial dimension d or large coordination number z) for the models considered (variational approach: overall phase diagrams and thermodynamic properties). Moreover, the exact results derived for $d = 1$ and approximated results for various lattices at $d < +\infty$ complement the results of the variational approximation and are qualitatively consistent with them. The results obtained show that the presence of electron states with phase separation is a general feature of the models analyzed.

The properties of the system are strongly dependent on the ratio of the on-site interaction U and pair hopping integral I , which is related to the relative values of the pair binding energy and the effective pair mobility $I_0 = zI$ (z — the number of nearest neighbours). The derived results for the U - I model ($W = 0$, $J^z = J^{xy} = 0$) show that analyzed system exhibits interesting tricritical behaviour and not only the homogeneous phases — superconducting (SS) and non-ordered (NO) — but also the phase separated states PS:SS/NO is present on phase diagrams of the model. The SS–NO transition can be second as well as first order. The change of the transition order is associated with the existence of the tricritical point line on the diagram. The investigations of the effects of the external magnetic field effects yields that the PS:SS/NO state can occur in higher fields than the SS phase (magnetic field induced PS, paramagnetic effect). Moreover, we have determined the regions of the metastable phases occurrence and analyzed the influence of the magnetic field on these phases.

The analysis of the U - I - W ($J^z = J^{xy} = 0$) and U - I - J ($W = 0$) models shows that the superconductivity can coexists with charge orderings and magnetism in the states with phase separation (PS:SS/CO and PS:SS/F, respectively). In particular, we have derived that transitions between the superconducting phase and other ordered phases (the SS–CO and SS–F transitions) are of the first order for fixed chemical potential and it leads to the

occurrence of the phase separation (PS:SS/CO and PS:SS/F, respectively) in the definite ranges of electron concentration. On the phase diagrams of these model, apart tricritical points, there are also present other critical points such as bicritical and critical end points.

We have also discussed the qualitative effects of the finite value of the single electron hopping integral on the phase diagrams and the thermodynamic properties of the models analyzed. We presents the effective hamiltonian derived by using the standard degenerate perturbation theory for two extreme cases: $U \ll 0$ (favouring double occupancy of lattice sites) oraz $U \gg 0$ (odwrotnie — favouring single occupancy of lattice sites). The single electron hopping term has been treated as a perturbation.

The work has been financed by National Science Centre (NCN, Poland) as a research project in the years 2011–2013, under Grant No. DEC-2011/01/N/ST3/00413 and as a doctoral scholarship in the years 2013–2014, No. DEC-2013/08/T/ST3/00012. We thank the European Commission and the Ministry of Science and Higher Education (Poland) for the partial financial support from the European Social Fund—Operational Programme “Human Capital” — POKL.04.01.01-00-133/09-00 — *“Proinnowacyjne kształcenie, kompetentna kadra, absolwenci przyszłości”* as well as the Foundation of Adam Mickiewicz University in Poznań for the support from its scholarship programme.

Spis treści

Podziękowania	iii
Streszczenie	ix
Abstract — streszczenie w języku angielskim	xiii
Spis treści	xvii
Spis rysunków	xxi
Oznaczenia i często używane skróty	xxv
1 Wstęp	1
1.1 Cel, motywacja i zakres pracy	1
1.1.1 Cel pracy	1
1.1.2 Motywacja pracy	2
1.1.3 Zakres pracy	5
1.2 Obserwacje eksperymentalne różnych uporządkowań elektronowych w ciele stałym	7
1.2.1 Nadprzewodnictwo i inne uporządkowania elektronowe	7
1.2.2 Separacja faz w materii skondensowanej	11
1.3 Hamiltonian typu rozszerzonego modelu Hubbarda	12
1.4 Ogólne relacje termodynamiczne	16
1.4.1 Funkcje termodynamiczne i podstawowe relacje	16
1.4.2 Warunki równowagi termodynamicznej układu jednorodnego . . .	21
1.4.3 Separacje faz — równowaga w układzie wielofazowym	24
1.5 Przemiany fazowe i charakterystyczne punkty na diagramach fazowych. .	27
2 Przybliżenie pola średniego	31
2.1 Rozszczepienie iloczynu operatorów typu teorii pola średniego	31
2.2 Zastosowanie do badanego modelu — przybliżenie wariacyjne.	32
2.3 Nierówność Bogolubowa i wyprowadzenie wariacyjne przybliżenia pola średniego	37
2.4 Uwagi dotyczące zastosowanego przybliżenia i metod numerycznych . . .	40

3	Prosty model nadprzewodnika z całką przeskoku pary	43
3.1	Hamiltonian modelu i podstawowe równania	43
3.1.1	Pewne wyniki analityczne ($B \neq 0$)	47
3.2	Diagramy fazowe modelu i charakterystyki termodynamiczne dla $B = 0$.	49
3.2.1	Stan podstawowy ($T = 0$)	49
3.2.1.1	Wynik ścisły dla jednowymiarowego łańcucha ($d = 1$) . . .	52
3.2.1.2	Przybliżenia wariacyjne (wynik ścisły w granicy $d \rightarrow +\infty$)	54
3.2.1.3	Przybliżenie RPA ($d = 2, 3$)	55
3.2.1.4	Rozwinięcie dla niskich koncentracji dla sieci trójwymiarowych ($d = 3$)	56
3.2.1.5	Podsumowanie wyników w stanie podstawowym	57
3.2.2	Skończone temperatury ($T > 0$)	58
3.2.2.1	Analiza przy ustalonym potencjale chemicznym	58
3.2.2.2	Analiza przy ustalonej koncentracji elektronowej	59
3.2.2.3	Parametry termodynamiczne	62
3.3	Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na fazy nadprzewodzące ($B \neq 0$)	67
3.3.1	Stan podstawowy ($T = 0$)	67
3.3.1.1	Przybliżenie wariacyjne	68
3.3.1.2	Wyjście poza przybliżenie pola średniego	69
3.3.2	Skończone temperatury ($T > 0$)	69
3.3.2.1	Diagramy fazowe	69
3.3.2.2	Parametry termodynamiczne	73
3.4	Analiza faz metastabilnych	74
3.4.1	Stan podstawowy ($T = 0$)	75
3.4.2	Skończone temperatury ($T > 0$)	76
3.4.2.1	Brak zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$)	76
3.4.2.2	Efekty zewnętrznego pola magnetycznego ($B \neq 0$)	80
3.5	Dyskusja i uwagi podsumowujące.	84
4	Nadprzewodnictwo a inne rodzaje porządku elektronowego	91
4.1	Wzajemne relacje pomiędzy nadprzewodnictwem i porządkiem ładunkowym	92
4.1.1	Analizowany model i podstawowe równania	92
4.1.2	Stan podstawowy ($T = 0$)	96
4.1.2.1	Przypadek pasma półpełnego ($n = 1$) dla dowolnego U . .	96
4.1.2.2	Dowolne koncentracje dla $U < 0$ (przybliżenie wariacyjne)	101

4.1.3	Skończone temperatury ($T > 0$). Wyniki w granicy par lokalnych ($U < 0$)	103
4.1.3.1	Diagramy fazowe	103
4.1.3.2	Charakterystyki termodynamiczne	107
4.2	Konkurencja nadprzewodnictwa z magnetyzmem	108
4.2.1	Modelowy hamiltonian i podstawowe równania	108
4.2.2	Stan podstawowy ($T = 0$)	111
4.2.3	Skończone temperatury ($T > 0$)	112
4.2.3.1	Diagramy fazowe	112
4.2.3.2	Charakterystyki termodynamiczne	115
4.3	Wpływ skończonej jednoelektronowej całki przesko- wane	115
4.4	Dyskusja i podsumowanie otrzymanych rezultatów	119
5	Zakończenie i wnioski	121
	Bibliografia	123
	Wykaz publikacji autora rozprawy	139
	Uczestnictwo autora rozprawy w konferencjach naukowych	143
	Oświadczenie autora rozprawy	147

Spis rysunków

1.1	Schematyczne wyjaśnienie konstrukcji Maxwella. Zależność energii swobodnej dla fazy jednorodnej oraz stanu z separacją faz i odpowiadająca temu zależność potencjału chemicznego od koncentracji.	27
3.1	Diagramy fazowe w stanie podstawowym dla modelu $U-I$: w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ oraz w funkcji n bez uwzględniania oraz z rozważaniem stanów z separacją faz.	53
3.2	Przebieg granicy SS–NO w funkcji n (bez uwzględniania stanów z separacją fazową) uzyskanej za pomocą metod RPA i LDE dla sieci SC, BCC oraz FCC.	56
3.3	Trójwymiarowy diagram fazowy dla modelu $U-I$ w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ i U/I_0 ($B = 0$).	59
3.4	Temperatura przemiany SS–NO w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ dla różnych wartości U/I_0 dla modelu $U-I$	59
3.5	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - n$ dla różnych wartości U/I_0 dla modelu $U-I$. . .	60
3.6	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - U/I_0$ dla modelu $U-I$ dla różnych koncentracji elektronowych n	61
3.7	Zależności temperaturowe: stosunku n_p/n , nadprzewodzącego parametru porządku $ \Delta $ oraz ciepła właściwego c/k_B dla układu przy ustalonym potencjale chemicznym $\bar{\mu}$ (model $U-I$).	63
3.8	Zależności temperaturowe: ciepła właściwego c/k_B , entropii s/k_B , względnej koncentracji par n_p/n , potencjału chemicznego $\bar{\mu}/I_0$, rozmiarów domen m_1 i m_2 dla układu przy ustalonej koncentracji elektronowej (model $U-I$). .	65
3.9	Potencjał chemiczny $\bar{\mu}/I_0$, energia swobodna f/I_0 oraz względna koncentracja par n_p/n dla $U/I_0 = 1.25$ w funkcji koncentracji n w ustalonych temperaturach (model $U-I$).	66
3.10	Diagramy fazowe w stanie podstawowym dla modelu $U-I-B$: w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ oraz w funkcji n	69
3.11	Trójwymiarowe diagramy fazowe dla modelu $U-I-B$ w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ i B/I_0 dla różnych wartości U/I_0	70
3.12	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - n$ dla modelu $U-I-B$ dla różnych U/I_0 i B/I_0 . . .	71

3.13	Diagramy fazowe $B/I_0 - k_B T/I_0$ dla modelu $U-I-B$ dla $U/I_0 = 1.25$ i różnych n	72
3.14	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - B/I_0$ dla $n = 1$ i różnych U/I_0 (model $U-I-B$).	73
3.15	Zależności temperaturowe nadprzewodzącego parametru porządku $ \Delta $, magnetyzacji m , stosunku n_p/n oraz ciepła właściwego c/k_B dla różnych $\bar{\mu}/I_0$, U/I_0 oraz B/I_0 (model $U-I-B$).	74
3.16	Diagram fazowy stanu podstawowego modelu $U-I-B$ w funkcji $\bar{\mu}$ i w funkcji n z uwzględnieniem faz metastabilnych.	75
3.17	Diagram fazowy $k_B T/I_0 - U/I_0$ dla $n = 1$ dla modelu $U-I$ z uwzględnieniem faz metastabilnych.	76
3.18	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - \bar{\mu}/I_0$ i odpowiadające im diagramy $k_B T/I_0 - n$ dla modelu $U-I$ dla różnych U/I_0 z uwzględnieniem faz metastabilnych.	79
3.19	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - \bar{\mu}/I_0$ dla różnych U/I_0 (model $U-I$) z uwzględnieniem faz metastabilnych.	80
3.20	Diagramy fazowe modelu $U-I$ dla $U/I_0 = 1.05$ jako funkcja $\bar{\mu}/I_0$ oraz n z uwzględnieniem faz metastabilnych.	81
3.21	Diagramy fazowe $B/I_0 - k_B T/I_0$ (model $U-I-B$) dla $U/I_0 = 1.05$ oraz różnych n z uwzględnieniem faz metastabilnych.	83
4.1	(a) Diagram stan podstawowego dla modelu $U-I-W$ z $n = 1$. (b) Wielkość parametru U/X , w której zachodzi przemiana z fazy uporządkowanej (SS, η S, CO, PS:NO/NO) do fazy nieuporządkowanej NO.	99
4.2	Diagram stanu podstawowego dla modelu $U-I-W$ gdy $U < 0$: (a) w funkcji potencjału chemicznego oraz (b) koncentracji.	101
4.3	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - \bar{\mu}^*/I_0$ oraz odpowiadające im diagramy $k_B T/I_0 - n$ dla $U/I_0 = -1.0$ i różnych wartości $W/I = 0.5, 1.1, 2.0$ (model $U-I-W$).	104
4.4	Diagramy fazowe: $k_B T/W_Q - \bar{\mu}^*/W_Q$ oraz $k_B T/W_Q - n$ dla $U/I_0 = -1.0$ i dowolnego $W/I < -1$ (model $U-I-W$).	105
4.5	Diagramy $k_B T/X - U/X$ w modelu $U-I-W$ dla $n = 1$	106
4.6	Temperaturowe zależności nadprzewodzącego parametru porządku $ \Delta $ oraz ładunkowego parametru porządku n_Q dla $W/I = 2.0$, $U/I_0 = -1.0$ oraz $\bar{\mu}^*/I_0 = -2.0$ (model $U-I-W$).	107
4.7	Temperaturowe zależności parametrów termodynamicznych: wielkiego potencjału termodynamicznego ω , entropii s oraz ciepła właściwego c dla $W/I = 2.0$, $U/I_0 = -1.0$ oraz $\bar{\mu}/I_0 = -2.0$ (model $U-I-W$).	108
4.8	Diagramy fazowe w stanie podstawowym dla modelu $U-I-J$: w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ oraz w funkcji n	110

4.9	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - U/I_0$ dla pasma półpełnego ($n = 1$) dla różnych wartości J/I (model $U-I-J$).	112
4.10	Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - \bar{\mu}$ oraz odpowiadające im diagramy $k_B T/I_0 - n$ dla $U/I_0 = 0$ i różnych wartości stosunku J/I (model $U-I-J$)	114
4.11	Temperaturowe zależności nadprzewodzącego parametru porządku $ \Delta $ oraz magnetyzacji m dla $J/I = 0.3$, $U/I_0 = 0.69$ oraz $n = 1$ (model $U-I-J$). . . .	115
4.12	Temperaturowe zależności parametrów termodynamicznych: koncentracji sparowanych elektronów n_p/n , entropii s oraz ciepła właściwego c dla $J/I = 0.3$, $U/I_0 = 0.69$ oraz $n = 1$ (model $U-I-J$).	116

Oznaczenia i często używane skróty

Skróty

VA — przybliżenie wariacyjne (ang. *variational approach*)

MFA — przybliżenie pola średniego (ang. *mean field approximation*)

RPA — przybliżenie faz przypadkowych (ang. *random phase approximation*)

SWA — przybliżenie fal spinowych (ang. *spin-wave approximation*)

LDE — rozwinięcie w granicy niskich koncentracji (ang. *low density expansion*)

BCS — teoria nadprzewodnictwa autorstwa J. Bardeena, L.N. Coopera i J.R. Schrieffera

SQ — dwuwymiarowa sieć kwadratowa (ang. *square*)

SC — sieć prosta (regularna) kubiczna (ang. *simple cubic*)

BCC — sieć kubiczna przestrzennie centrowana (ang. *body centered cubic*)

FCC — sieć kubiczna powierzchniowo centrowana (ang. *face centered cubic*)

eV — elektronowolt (jednostka energii)

Oznaczenia faz

NO — faza normalna, brak jakiegokolwiek uporządkowania

SS — faza nadprzewodząca z parowaniem typu s

η S — faza nadprzewodząca z parowaniem typu η

CO — faza z porządkiem ładunkowym

F — faza ferromagnetyczna (ferromagnetyczne uporządkowanie spinów)

AF — faza antyferromagnetyczna (antyferromagnetyczne uporządkowanie spinów)

PS — stan z separacją faz

Operatory

$\hat{c}_{i\sigma}^+, \hat{c}_{i\sigma}$ — operatory kreacji i anihilacji fermionu (elektronu) na węźle i o spinie σ ,

$\hat{c}_{i\sigma} = (\hat{c}_{i\sigma}^+)^\dagger$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow = 1, 2$ odpowiednio);

$\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}$ — operator liczby fermionów na węźle i o spinie σ ($\hat{n}_{i\sigma} = 0, 1$);

$\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$ — operator liczby fermionów na węźle i ($\hat{n}_i = 0, 1, 2$);

$\hat{n} = \sum_i \hat{n}_i$ — operator liczby cząstek w całym układzie;

$\hat{s}_i^z = (1/2)(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$ — operator składowej z -owej spinu na węźle i ;

$\hat{s}_i^+ = \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow}$, $\hat{s}_i^- = \hat{c}_{i\downarrow}^+ \hat{c}_{i\uparrow} = (\hat{s}_i^+)^\dagger$ — operator składowej spinu w płaszczyźnie x - y na

węzle i ;

$\hat{\rho}_i^z = (1/2)(\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow} - 1)$ — operator z -owej składowej ładunku (pseudospinu) na węzle i ;

$\hat{\rho}_i^+ = \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger$, $\hat{\rho}_i^- = \hat{c}_{i\downarrow} \hat{c}_{i\uparrow} = (\hat{\rho}_i^+)^\dagger$ — operator składowej ładunku (pseudospinu) w płaszczyźnie x - y na węzle i .

Całki (parametry) oddziaływania i zewnętrzne pola

t, t_{ij} — całka (parametr) przeskoku jednoelektronowego z węzła i do j ;

U, U_i — oddziaływanie gęstość-gęstość na węzle i ;

W, W_{ij} — oddziaływanie gęstość-gęstość (między węzłami i i j);

I, I_{ij} — międzywęzłowe wymienne oddziaływanie ładunkowe (między węzłami i i j);

J^z, J_{ij}^z — międzywęzłowe magnetyczne oddziaływanie wymienne w kierunku z (między węzłami i i j);

J^{xy}, J_{ij}^{xy} — międzywęzłowe magnetyczne oddziaływanie wymienne w płaszczyźnie x - y (między węzłami i i j);

K, K_{ij} — całka skorelowanego przeskoku (między węzłami i i j);

$X_1, X_2, \dots, X_k$ — całki (parametry) oddziaływania X pomiędzy najbliższymi (pierwszymi najbliższymi) sąsiadami (ang. *nearest-neighbour*), następnymi najbliższymi (drugimi najbliższymi) sąsiadami (ang. *next-nearest-neighbour*), ..., k -tymi najbliższymi sąsiadami (odpowiednio), gdzie $X = W, I, J^z, J^{xy}, K$ (zapis „symboliczny”), oraz $k = 1, 2, \dots$;

$X_0 = z_1 X_1 + z_2 X_2$,

$X_Q = -z_1 X_1 + z_2 X_2$, gdzie $X = W, I, J^z, J^{xy}, K$;

$X = X_1$ — w przypadku, gdy mamy do czynienia z najbliższymi sąsiadami indeks „1” pomijamy;

μ — potencjał chemiczny;

$\bar{\mu} = \mu - \frac{U}{2}$;

$\bar{\mu}^* = \mu - \frac{U}{2} - \sum_n z_n W_n$;

B^z — zewnętrzne pole magnetyczne w kierunku z ;

B^{xy} — zewnętrzne pole magnetyczne w płaszczyźnie x - y .

Wielkości i średnie termodynamiczne

N — liczba węzłów sieci;

z_n — liczba n -tych najbliższych sąsiadów ($n = 1, 2, 3, \dots$);

α — indeks podsieci ($\alpha = A, B$);

$\vec{R}_i$ — wektor wodzący węzła i ;

$\vec{Q}$ — połowa wektora sieci odwrotnej (najdłuższy wektor w pierwszej strefie Brillouina);

Z — wielka suma stanów;

ω — wielki (uogólniony) potencjał termodynamiczny na węzeł;

f — energia swobodna na węzeł;

T — temperatura absolutna;

k_B — stała Boltzmana;

$\beta = 1/(k_B T)$;

$n_j = \langle \hat{n}_j \rangle$;

$\Delta_j^* = \langle \hat{\rho}_j^+ \rangle$;

$m_j = \langle \hat{s}_j^z \rangle$;

$\xi_j^* = \langle \hat{s}_j^+ \rangle$;

$N_c = Nn = \langle \hat{n} \rangle = \sum_i n_i$ — średnia liczba cząstek w układzie;

$n = N_c/N = (1/N)\langle \hat{n} \rangle = (1/N)\sum_i \langle \hat{n}_i \rangle$ — średnia koncentracja cząstek w układzie (liczba cząstek na węzeł);

$D = \frac{1}{N} \sum_i \langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$ — ilość podwójnych obsadzeń (gęstość podwójnie obsadzonych węzłów).

Symbole matematyczne

δ_{ij} — delta Kroneckera $\delta_{ij} = 1$ gdy $i = j$ oraz $\delta_{ij} = 0$ dla $i \neq j$;

$*$ — oznacza sprzężenie zespolone;

$\dagger$ — oznacza sprzężenie hermitowskie (dla $x \in \mathbb{C}$ ($\mathbb{C}$ - ciało liczb zespolonych) $x^* = x^\dagger$);

Tr — ślad macierzy (operatora);

$\mathbf{i}$ - jednostka urojona;

$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ — komutator dwóch operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$;

$\{\hat{A}, \hat{B}\} = \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ — antykomutator dwóch operatorów $\hat{A}$ i $\hat{B}$.

Wstęp

1.1 Cel, motywacja i zakres pracy

1.1.1 Cel pracy

Celem niniejszej pracy jest zbadanie wpływu różnych typów oddziaływań międzyelektronowych występujących (ewentualnie mogących występować) w materii skondensowanej na wzajemną stabilność rozmaitych uporządkowań elektronowych takich jak: nadprzewodnictwo, porządki ładunkowy i magnetyczny oraz jednorodne fazy mieszane (które mogą być konkurencyjne względem siebie) oraz na ich relacje ze stanami z separacją faz. Chcemy zrozumieć mechanizmy fizyczne i znaleźć oddziaływania odpowiedzialne za m. in.:

- (a) powstawanie wyżej wymienionych uporządkowań w izolatorach (analizowane będą głównie modele, w których pojedyncze elektrony nie mogą się poruszać),
- (b) zmiany tych uporządkowań w funkcji wzajemnych stosunków wielkości różnych oddziaływań oraz
- (c) przemiany fazowe występujące np. w wyniku domieszkowania, zmian temperatury, w funkcji wzajemnego stosunku wielkości parametrów oddziaływania, itp.

W pracy wyznaczono diagramy fazowe oraz charakterystyki termodynamiczne dla modeli mogących opisać wyżej wymienione zjawiska.

Badanym modelem teoretycznym jest klasa rozszerzonych modeli Hubbarda [1–7] w granicy zerowej szerokości pasma, w których oprócz oddziaływania jednowęzłowego rozważymy również międzywęzłowe ładunkowe i magnetyczne oddziaływania wymienne oraz międzywęzłowe oddziaływania gęstość-gęstość. W szczególności badamy różne modele nadprzewodników z krótką długością koherencji (z całą przeskoku pary) koncentrując się na

- (i) zbadaniu właściwości fazy nadprzewodzącej oraz wpływu zewnętrznego pola magnetycznego (efekt paramagnetyczny),
- (ii) analizie wpływu międzywęzłowych oddziaływań typu gęstość-gęstość oraz międzywęzłowych oddziaływań magnetycznych na wzajemne relacje i konkurencje nadprzewodnictwa z porządkami, odpowiednio, ładunkowym oraz magnetycznym.

Zamierzamy zbadać właściwości termodynamiczne tych modeli oraz wyznaczyć ich diagramy fazowe dla dowolnych wartości potencjału chemicznego (koncentracji elektronowej) oraz dowolnych wielkości parametrów oddziaływań występujących w powyższych modelach.

Należy podkreślić, że w rozważaniach zawartych w niniejszej pracy wszystkie oddziaływania występujące w analizowanych modelach są traktowane jako parametry efektywne, zrenormalizowane przez mechanizmy mikroskopowe (np. przez silne sprzężenie elektron–fonon), których natury nie precyzujemy (por. Rozdział 1.3). Analiza tych modeli zostanie dokonana głównie za pomocą przybliżenia pola średniego (ang. *mean-field approximation*, MFA) dla wyrazów międzywęzłowych ze ścisłym traktowaniem wyrazu jednowęzłowego, tzw. przybliżenie wariacyjne (ang. *variational approach*, VA). Przybliżenie to w granicy zerowej szerokości pasma dla analizowanych modeli daje wyniki ścisłe (w większości przypadków) w granicy nieskończonej liczby wymiarów ($d \rightarrow +\infty$). Ponadto dla badanych modeli, otrzymano szereg rezultatów w stanie podstawowym wykraczających poza przybliżenie VA dla sieci o różnej wymiarowości. W szczególności dla jednowymiarowego łańcucha ($d = 1$) otrzymano wyniki ścisłe, natomiast dla dwuwymiarowej sieci kwadratowej ($d = 2$) oraz różnych sieci kubicznych ($d = 3$) wykonano analizę za pomocą przybliżenia faz przypadkowych (ang. *random phase approximation*, RPA) i przybliżenia fal spinowych (ang. *spin-wave approximation*, SWA). Dla sieci trójwymiarowych ($d = 3$) otrzymano też ścisłe wyniki w granicy niskich koncentracji (LDE, ang. *low-density expansion*), korzystając z wyrażenia na amplitudę rozpraszania dwuciałowego. Dzięki temu uzyskano pogląd na wpływ wzbudzeń kolektywnych, których nie uwzględnia przybliżenie MFA dla wyrazów międzywęzłowych. Jest to szczególnie ważne dla opisu efektów oddziaływań kwantowych w rozważanych modelach.

1.1.2 Motywacja pracy

Badania zawarte w pracy dotyczą podstawowych problemów uporządkowań elektronowych, ich separacji fazowych oraz fizyki silnie oddziałujących układów elektronowych. Temat ten jest obecnie bardzo silnie rozwijany w badaniu materii skondensowanej i jest ważny zarówno ze względów poznawczych, jak i aspektów aplikacyjnych. Wzajemne relacje pomiędzy konkurencyjnymi typami uporządkowań elektronowych mają fundamentalne znaczenie dla opisu nadprzewodników wysokotemperaturowych i wielu innych grup niekonwencjonalnych materiałów nadprzewodzących, multiferroików oraz dla szerokiej klasy związków z naprzemienną walencyjnością. Układy skorelowanych elektronów zajmują niezwykle ciekawy, zarówno z punktu widzenia teoretycznego jak i praktycznego, a jednocześnie jednak ciągle niewystarczająco dobrze poznany, obszar badań fizyki ciała stałego.

W szczególności oddziaływania międzyelektronowe są odpowiedzialne za szereg niezwykle spektakularnych i ciekawych zachowań w materii skondensowanej, takich jak na przykład powstawanie fazy nadprzewodzącej, faz uporządkowanych ładunkowo, orbitalnie lub magnetycznie, jak również faz, w których może współistnieć kilka typów uporządkowania (tzw. fazy mieszane). Fazy tych typów oraz przemiany fazowe pomiędzy nimi występują m. in. w wielu związkach pierwiastków metali przejściowych, w których powłoki elektronowe $3d$ lub $4d$ są niecałkowicie wypełnione. W związkach takich elektrony d podlegają silnym oddziaływaniom lokalnym i są silnie skorelowane lub mogą być nawet prawie zlokalizowane. Ponadto do tego mogą jeszcze dochodzić magnetyczne domieszki pierwiastków z częściowo wypełnionymi pasmami d i f . Domieszki takie tworzą dodatkowe wąskie pasma przewodnictwa w strukturze kryształu, często w obszarze przerw energetycznych kryształu bez domieszek. Wywołuje to różnego rodzaju efekty i znacznie modyfikuje zachowanie badanego materiału, dla opisu którego istotnego znaczenia nabierają korelacje elektronowe.

Przykładowo lokalizacja elektronów może wystąpić, gdy oddziaływania pomiędzy elektronami dominują nad ich energią kinetyczną, co prowadzi do stanu izolatora skorelowanego, zwanego również izolatorem Motta. Cechą charakterystyczną izolatorów Motta jest częściowo wypełnione pasmo, jednak przepływ prądu jest uniemożliwiony poprzez silne odpychanie lokalne pomiędzy elektronami. Dobrze zbadanymi zjawiskami występującymi w tej klasie materiałów są nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe (np. w miedzianach czy pniktydkach żelaza) oraz kolosalny magnetoopór (przemiana fazowa do stanu z porządkiem ferromagnetycznym, któremu towarzyszy skokowa zmiana oporności elektrycznej w tlenkach manganu). W tych dwóch przypadkach fazy uporządkowane (tzn. nadprzewodząca lub ferromagnetyczna) powstają na skutek domieszkowania izolatorów Motta, a przemiany fazowe są związane z bardzo istotną zmianą własności magnetycznych lub transportowych. W dużej grupie materiałów ważną rolę odgrywają także orbitale obsadzone przez elektrony (orbitalne stopnie swobody), które także mogą być uporządkowane. Ponadto konkurencja pomiędzy (anty-)ferromagnetyzmem oraz nadprzewodnictwem (np. w nadprzewodnikach żelazowych czy ciężkofermionowych) jest niezwykle interesującym problemem. Bardzo ciekawe jest też zagadnienie stabilności stanów z separacją faz (elektronowa separacja faz), w których w układzie mamy dwie domeny różniące się koncentracją elektronową (współistnienie w układzie dwóch faz jednorodnych). Na przykład w grupie nadprzewodników na bazie żelaza (pniktydków żelaza) i nadprzewodników ciężkofermionowych wciąż nierozstrzygnięty jednoznacznie jest problem charakteru współistnienia nadprzewodnictwa z magnetyzmem (jednorodna faza mieszana czy separacja fazowa). Ponadto wydaje się, że elektronowe separacje fazowe (nadprzewodnictwo z porządkiem ładunkowym) występują w bizmutatach oraz miedzianach (tutaj także istotne są fazy

magnetyczne). Rozszerzona dyskusja rzeczywistych materiałów, w których obserwuje się wymienione zjawiska zostanie przeprowadzona w dalszej części pracy (Rozdział 1.2).

Głównym problemem w analizie teoretycznej tych złożonych układów jest wielociałowy charakter i kwantowa natura oddziałujących ze sobą stopni swobody: ładunkowych, orbitalnych oraz magnetycznych, które nie mogą być wystarczająco dobrze opisane np. w ramach teorii zaburzeń. Wynika stąd konieczność używania zaawansowanych metod i formalizmu fizyki kwantowej wielu cząstek, które często wymagają pracochłonnych (i czasochłonnych) obliczeń numerycznych, a także pewnych (nieperturbacyjnych) przybliżeń. Zauważmy także, że nawet w ramach mechaniki klasycznej (newtonowskiej) można rozwiązać analitycznie jedynie zagadnienie dwóch oddziałujących ciał. W przypadku ciała stałego cząstek, które wzajemnie ze sobą oddziałują (kwantowo), jest zdecydowanie więcej (co najmniej rzędu liczby Avogadro $N_A \approx 6.022 \times 10^{23}$). Aby uniknąć tych komplikacji, a jednocześnie móc kontrolować wpływ poszczególnych oddziaływań między elektronami w niniejszej pracy będziemy analizować modele, w których pojedyncze elektrony nie mogą się przemieszczać pomiędzy węzłami sieci (ich ruch jest silnie ograniczony).

Podkreślimy, że w takim przypadku zastosowanie przybliżenia MFA dla wyrazów międzywęzłowych przy ścisłym traktowaniu oddziaływania jednowęzłowego (dla układu w granicy termodynamicznej) — podejście VA — pozwoli nam otrzymać wyniki, które są wynikami ścisłymi w granicy nieskończonej liczby wymiarów $d \rightarrow +\infty$ (granicy dużej liczby koordynacyjnej $z \rightarrow +\infty$). W granicy tej przybliżenie MFA jest ścisłe dla krótkozasięgowych oddziaływań X_{ij} (zarówno klasycznych jak i kwantowych) międzywęzłowych pomiędzy (pseudo-)spinami (przy odpowiednim skalowaniu oddziaływania pomiędzy najbliższymi sąsiadami X z wymiarem układu d , $X = X^*/d$, X^* — stała) [8–12]. Ponadto przybliżenie to jest ścisłe dla dowolnego wymiaru $1 \leq d \leq +\infty$, gdy oddziaływania X_{ij} są typu „ferro” i mają nieskończony zasięg (tzn. $X_{ij} = (1/N)X^*$ dla dowolnych i i j) [11]. Uzyskane wyniki w przybliżeniu VA różnią się jakościowo od rezultatów uzyskanych przy traktowaniu wyrazu jednowęzłowego U w przybliżeniu MFA (por. np. [13]).

Zauważmy ponadto, że zasadniczo nie analizowano systematycznie modeli w granicy atomowej (szczególnie w skończonych temperaturach), których diagramy fazowe, pomimo stosunkowej prostoty tych modeli, nie są oczywiste i wykazują szereg niezwykle interesujących zachowań krytycznych. Szczegółowy przegląd wyników literaturowych i ich dyskusja będzie przedstawiona w odpowiednich rozdziałach tej pracy dotyczących poszczególnych modeli.

Należy podkreślić fakt, że wyniki otrzymane za pomocą przybliżenia wariacyjnego dla modeli w granicy zerowej szerokości pasma ($t_{ij} = 0$) mogą być punktem startowym do analizy odpowiednich modeli z niezerową całką przeskoku dla pojedynczych elektronów ($t_{ij} \neq 0$). Ponadto wyniki otrzymane za pomocą przybliżenia VA mogą być również

testem dla rezultatów otrzymanych dla modeli z $t_{ij} \neq 0$ za pomocą bardziej zaawansowanych metod, takich jak np. przybliżenie dynamicznego pola średniego (DMFA, ściśle dla $d \rightarrow \infty$, $t_{ij} \neq 0$ [14]) czy (kwantowe) symulacje Monte Carlo (MC). Zauważmy także, że w przypadku analizy dla skończonej szerokości pasma $t_{ij} \neq 0$ za pomocą metod teorii pola średniego konieczne jest zastosowanie podejścia Hartree-Focka złamanej symetrii, które jest sensowne dla niewielkich wartości oddziaływania jednowęzłowego $|U|$ i nie jest przybliżeniem ścisłym nawet w granicy $d \rightarrow +\infty$ [7]. Wyniki zaprezentowane w niniejszej pracy mogą służyć także do kontroli czy dany wynik nie jest artefaktem wprowadzanym przez dane przybliżenie zastosowane dla przypadku $t_{ij} \neq 0$. Ponadto zastosowanie dla wyrazów międzywęzłowych rozszczepienia MFA zależnego od węzła (ang. *site-dependent MFA*) pozwala na analizę układów niejednorodnych oraz układów o różnym rozmiarze, a także np. układów nano- i mezoskopowych.

Pomimo faktu, że analizowane w pracy modele są (pod wieloma aspektami) uproszczone i dalekie od realistycznego opisu fizycznej struktury nadprzewodników (wysokotemperaturowych), to otrzymane wyniki mogą być użyte do jakościowej analizy danych eksperymentalnych dla realnych układów wąskopasmowych. Rezultaty niniejszej pracy mają charakter wyłącznie jakościowy, pokazujący współzależności pomiędzy parametrami modelu, mającymi swe odzwierciedlenie w konkretnych wielkościach fizycznych (np. temperatura przemiany, pole krytyczne, wielkości termodynamiczne i elektromagnetyczne). Dokonana analiza pokazuje szereg tendencji jakim powinny podlegać realistyczne układy fizyczne, gdyby wykonano odpowiednie badania eksperymentalne. Niemniej jednak w wielu miejscach otrzymane wyniki zgadzają się dość dobrze (jakościowo) z rezultatami eksperymentalnymi. Ponadto otrzymane wyniki mogą mieć też istotne znaczenie dla zrozumienia wzajemnych relacji pomiędzy konkurencyjnymi oddziaływaniami w ciele stałym oraz w zimnych gazach atomowych na sieciach optycznych. W szczególności związki wykazujące uporządkowania ładunkowe są niezwykle interesujące z punktu widzenia potencjalnych zastosowań jako szybkie przełączniki w elektronice, energetyce czy nanotechnologii. Brak oporu elektrycznego nadprzewodników oraz ich inne właściwości pozwalają na ich szerokie zastosowanie m.in. w energetyce, elektromagnesach, metrologii.

1.1.3 Zakres pracy

Rezultaty zaprezentowane w niniejszej pracy są wynikami oryginalnymi autora rozprawy i zostały w dużej części przedstawione w sześciu pracach opublikowanych (ewentualnie przyjętych do druku) w międzynarodowych czasopismach z listy filadelfijskiej [15–20], w których wszystkich jedynym lub pierwszym autorem (i jednocześnie autorem korespondencyjnym) jest autor niniejszej rozprawy (por. także „Wykaz publikacji autora rozprawy” zamieszczony na końcu pracy).

Dalej w Rozdziale 1 omówiono skrótowo różne uporządkowania elektronowe występujące w materii skondensowanej oraz wymieniono rzeczywiste materiały i związki, w których obserwuje się te uporządkowania oraz ich separacje fazowe. Następnie wprowadzono hamiltonian typu rozszerzonego modelu Hubbarda oraz przedstawiono pewne ogólne relacje termodynamiczne. Wyprowadzono ogólne wyrażenia dla układu, w którym może wystąpić separacja faz elektronowych, tzn. współistnienie dwóch faz jednorodnych zajmujących makroskopowe obszary (objętości) w układzie (tzw. domeny).

Rozdział 2 jest poświęcony przybliżeniu pola średniego i podejściu (przybliżeniu) wariacyjnemu, w którym wyrazy jednowęzłowe traktowane są ściśle, a do wyrazów międzywęzłowych stosuje się przybliżenie MFA. W rozdziale tym stosujemy to przybliżenie do wyrazów międzywęzłowych rozszerzonego modelu Hubbarda (w granicy atomowej) w najogólniejszej postaci (uwzględniamy oddziaływania ładunkowe i magnetyczne oraz zewnętrzne pola) i wyznaczamy wielką sumę stanów (w wielkim rozkładzie kanonicznym). Ponadto wyprowadzono ogólne równania niezbędne do dalszej analizy, które są wykorzystywane w kolejnych rozdziałach.

W Rozdziale 3 analizujemy prosty model nadprzewodnika z krótką długością koherencji (model U - I). Rozdział 3.1 wprowadza model nadprzewodnika z całą przeskoku pary. W Rozdziale 3.2 opisujemy wyniki otrzymane w nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$), przedstawiamy wyniki w stanie podstawowym ($T = 0$ otrzymane również za pomocą metod wykraczających poza przybliżenie pola średniego) oraz analizę w skończonych temperaturach $T > 0$ wraz z przebiegami niektórych parametrów termodynamicznych (ciepło właściwe, entropia, parametry porządku, itp.). W Rozdziale 3.3 zbadano wpływ zewnętrznego pola magnetycznego ($B \neq 0$) na zachowanie tego modelu (m. in. diagramy fazowe w $T = 0$ i $T > 0$). Rozdział 3.4 poświęcono natomiast zbadaniu występowania faz metastabilnych w obu tych przypadkach. Rozdział 3.5 stanowi podsumowanie tej części pracy i zawiera końcowe uwagi dotyczące badanego modelu U - I .

Rozdział 4 zawiera analizę uogólnień modelu z poprzedniego rozdziału, które mogą opisywać konkurencję i wzajemne relacje nadprzewodnictwa z dwoma innymi typami uporządkowań elektronowych, z którymi może ono współistnieć w rzeczywistych układach. W Rozdziale 4.1 tym porządkiem jest porządek ładunkowy, natomiast w Rozdziale 4.2 — porządek magnetyczny. Podobnie jak poprzednio, dokonujemy tu analizy stanów podstawowych (także wychodząc poza przybliżenie pola średniego) oraz zachowania w skończonych temperaturach badanych modeli w pewnych szczególnych zakresach parametrów. Rozdział 4.3 poświęcony jest jakościowej dyskusji wpływu skończonej wartości całki przeskoku pojedynczych elektronów na zachowanie się faz uporządkowanych w analizowanych modelach (szczególnie w granicach $U \ll 0$ oraz $U \gg 0$). Rozdział 4.4 stanowi krótkie podsumowanie tej części pracy.

Rozdział 5 stanowi podsumowanie pracy. Zawarto tutaj również końcową dyskusję oraz przedstawiono najważniejsze wyniki i wnioski niniejszej rozprawy.

Na końcu pracy zamieszczono „Wykaz publikacji autora rozprawy” oraz spis konferencji, na których prezentowano oryginalne wyniki autora („Uczestnictwo autora rozprawy w konferencjach naukowych”).

Rezultaty teoretyczne zaprezentowane w niniejszej pracy mają charakter podstawowy i dotyczą występowania różnorodnych uporządkowań elektronowych, w szczególności nadprzewodnictwa, (głównie) w układach wąskopasmowych. Praca stanowi jeden z kolejnych etapów badań zespołu Zakładu Stanów Elektronowych Ciała Stałego Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu nad teorią nadprzewodnictwa i uporządkowań elektronowych tlenków metalicznych, metali organicznych i związków ciężkofermionowych i innych materiałów, w których występuje niekonwencjonalny (wykraczający poza teorię BCS [21, 22]) mechanizm nadprzewodnictwa.

1.2 Obserwacje eksperymentalne różnych uporządkowań elektronowych w ciele stałym

Mechanika kwantowa opisuje zjawiska zachodzące na poziomie subatomowym, których przebieg i opis odbiega od procesów obserwowanych w codziennym życiu w skali makroskopowej możliwych do wyjaśnienia na gruncie fizyki klasycznej. Niemniej jednak część ze zjawisk kwantowych objawia się w skali makroskopowej. Tymi makroskopowymi (kolektywnymi) zjawiskami kwantowymi są m. in.: nadciekłość (bozonów (^4He) i fermionów (^3He)), nadprzewodnictwo (nadciekłość naładowanych fermionów), kondensacja Bosego-Einsteina, magnetyzm, efekt Casimira, emisja wymuszona czy kwantowy efekt Halla. Poniżej omówimy dokładniej zjawisko nadprzewodnictwa, którego opisowi teoretycznemu (w ramach analizowanych modeli) poświęcona jest niniejsza rozprawa. Na temat nadprzewodnictwa powstało wiele bardzo dobrych monografii i podręczników, kilka w języku polskim [23–25]. Jest ono również dyskutowane w wielu podręcznikach fizyki ciała stałego (na przykład [26–28]).

1.2.1 Nadprzewodnictwo i inne uporządkowania elektronowe

Zjawisko nadprzewodnictwa zachodzi w niskich temperaturach i jest ono charakterystyczne dla wielu materiałów i związków. Materiały te w pewnej temperaturze krytycznej T_c wykazują przejście fazowe do stanu nadprzewodzącego, który jest pewnym kolektywnym stanem nośników prądu, jakościowo odmiennym od stanu prawie swobodnych elektronów/dziur w „normalnym” metalu. Charakteryzuje się ono dwoma podstawowymi

cechami:

- opór materiału dla prądu stałego zanika lub jest tak mały, że prąd wzbudzony w pierścieniu nadprzewodzącym nie wykazuje mierzalnej zmiany natężenia;
- z wnętrza nadprzewodnika zostaje „wypchnięte” całkowicie pole indukcji magnetycznej — zjawisko Meissnera–Ochsenfelda (w słabym polu magnetycznym jest idealnym diamagnetykiem). Właściwości tej nie da się wyjaśnić przy prostym założeniu, że nadprzewodnik jest idealnym przewodnikiem o zerowym oporze elektrycznym.

Ze względu na sposób, w jaki nadprzewodnik reaguje na zewnętrzne silne pole magnetyczne, nadprzewodniki możemy podzielić na dwie grupy: nadprzewodniki pierwszego rodzaju i nadprzewodniki drugiego rodzaju. Nadprzewodniki, które całkowicie wypychają ze swojego wnętrza strumień pola magnetycznego aż do momentu, w którym przejdą w stan normalny, nazywamy nadprzewodnikami pierwszego rodzaju. W nadprzewodnikach drugiego rodzaju w pewnym zakresie pola (pomiędzy pierwszym (dolnym) polem krytycznym H_{c1} a drugim (górnym) polem krytycznym H_{c2}) do obszaru nadprzewodzącego zaczynają wnikać tzw. nici strumienia magnetycznego (nazywane też wirami lub worteksami), z których każda zawiera jeden kwant strumienia magnetycznego.

Zjawisko nadprzewodnictwa występuje w wielu pierwiastkach metalicznych, ich stopach, związkach międzymetalicznych i domieszkowanych półprzewodnikach. Poniżej krótko omówimy różne klasy odkrytych dotychczas materiałów nadprzewodzących. Za [23–25] możemy wyróżnić następujące grupy:

- (a) Pierwiastki metaliczne — od chwili odkrycia zjawiska w 1911 roku w całym szeregu pierwiastków, głównie metalicznych. Większość pierwiastków (ok. 55) charakteryzuje przejście do stanu nadprzewodnictwa z parowaniem sigletowym (typu s , nadprzewodniki pierwszego rodzaju). Otwartym pytaniem pozostaje czy każdy pierwiastek niemagnetyczny staje się nadprzewodnikiem w odpowiednio niskiej temperaturze. Ponadto szereg pierwiastków wykazuje nadprzewodnictwo tylko pod ciśnieniem wyższym niż ciśnienie normalne. Najwyższą temperaturę krytyczną pod normalnym ciśnieniem wykazuje niob ($T_c = 9.3$ K).
- (b) Stopy i związki metaliczne (związki o strukturze A15 i B1) — w tym nawet stopy metali, które w stanie pierwiastkowym nie są nadprzewodnikami. Materiałami o strukturze A15 (β -wolframu) są np.: V_3Si ($T_c = 15.7$ K), Nb_3Ge ($T_c = 23.2$ K) — używane głównie do wytwarzania uzwojeń magnesów nadprzewodzących. Strukturę B1 (soli NaCl) ma m. in. $NbTi$ ($T_c = 9.2$ K) użyty w konstrukcji magnesu nadprzewodzącego w LHC.
- (c) Fazy Chevrela — o ogólnym wzorze chemicznym $M_xMo_6X_8$, gdzie M oznacza pierwiastek ziemi rzadkiej lub metal, a X : S, Se lub Te. Przykładowo $PbMo_6S_8$ ma

$T_c = 15$ K i wysokie pole krytyczne rzędu 60 T

- (d) Nadprzewodniki ciężkofermionowe — są to materiały, w których występuje silne oddziaływanie kulombowskie pomiędzy elektronami, w wyniku czego w pobliżu poziomu Fermiego występuje wąskie pasmo. Elektrony w tym paśmie odpowiadają za właściwości transportowe i mają bardzo duże masy efektywne, nawet 1000-krotnie większe niż masa swobodnego elektronu. W tej grupie nadprzewodników kwazicząstkami odpowiedzialnymi za tworzenie par elektronowych są magnony. Temperatury krytyczne w tej grupie materiałów są rzędu 1 K (CeCu_2Si_2 , UPt_3 , UBe_{13} , UGe_2) [29, 30].
- (e) nadprzewodniki organiczne — możemy tutaj wyróżnić dwie grupy związków: $(\text{TMTSF})_2\text{X}$, gdzie X jest jednowartościowym nieorganicznym anionem typu PF_6^- , AsF_6^- , NbF_6^- i ClO_4^- oraz materiały typu $(\text{BEDT-TTF})_2\text{X}$, zapisywane skrótowo jako $(\text{ET})_2\text{X}$ [31–33]. Przykładowo $(\text{BEDT-TTF})_2\text{Cu}(\text{SCN})_2$ ma temperaturę krytyczną $T_c = 10$ K. Cechą charakterystyczną tych materiałów jest ich bardzo silna anizotropia strukturalna.
- (f) fulereny — związki węgla C_{60} , domieszkowane metalami alkalicznymi: M_xC_{60} ($\text{M}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$), m. in. Rb_3C_{60} ($T_c = 29.3$ K) i K_3C_{60} ($T_c = 18$ K).
- (g) nadprzewodniki wysokotemperaturowe — tlenki metali przejściowych. Charakteryzują je bardzo wysokie temperatury krytyczne oraz wysokie górne pola krytyczne. Możemy wśród nich wyróżnić dwie podgrupy:
- miedziany, do których należą m. in.: $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ z maksymalną temperaturą krytyczną $T_c = 92$ K, $\text{Tl}_2\text{Ca}_2\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{10}$ (maksymalne $T_c = 125$ K) oraz $\text{HgBa}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}-n\text{O}_{2n+2}$, $n = 1, 2, 3, 4$ z maksymalną temperaturą $T_c = 135$ K ($n = 3$) (pod wysokim ciśnieniem nawet $T_c = 165$ K). Materiały te, ze względu na swoją warstwową budowę, wykazują silną anizotropię wszystkich parametrów nadprzewodzących. Zachowanie się nośników ładunku w płaszczyznach CuO_2 ma dominujący wpływ na większość właściwości transportowych, magnetycznych i elektromagnetycznych. W fazie normalnej materiały te są słabymi przewodnikami lub izolatorami z korelacjami (antyferro-)magnetycznymi [7, 34–36].
 - bizmutaty: $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ ($T_c = 32$ K, nadprzewodnik tlenkowy, nie zawierający Cu, o najwyższej temperaturze krytycznej) oraz $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ ($T_c = 12$ K, pierwszy nadprzewodnik o strukturze perowskitu). Ich cechą charakterystyczną jest trójwymiarowa struktura sieci (w przeciwieństwie do miedzianów z struk-

turą quasi-dwuwymiarową). W fazie normalnej są diamagnetycznymi izolatorami wykazującymi porządek ładunkowy [37–42].

- (h) dwuborek magnezu — MgB_2 ($T_c = 39$ K): nadprzewodnik o bardzo prostej budowie krystalicznej o fononowym mechanizmie tworzenia par. Jest to pierwszy (2001 rok) i jak dotąd jedyny nadprzewodnik, w którym istnienie dwóch przerw energetycznych nie budzi już żadnych kontrowersji, mimo iż w ramach teorii BCS już dawno przewidywano możliwość istnienia dwóch przerw energetycznych.
- (i) nadprzewodniki na bazie żelaza — jest to grupa nadprzewodników odkryta stosunkowo niedawno. Pierwszymi związkami z tej grupy były LaFePO_{1-x} ($T_c = 5$ K, 2005 rok) oraz $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ($T_c = 26$ K, 2008 rok). Maksymalna temperatura krytyczna w tej grupie związków to $T_c = 56$ K. Ponadto materiałami nadprzewodzącymi są też $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ (maksymalne $T_c = 38$ K), a także $\text{Sr}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ (domieszkowane dziurowo) i $\text{BaFe}_{2-x}\text{Co}_x\text{As}_2$ (domieszkowane elektronowo). Nadprzewodnictwo indukowane ciśnieniem zaobserwowano też w związkach CaFe_2As_2 , SrFe_2As_2 oraz BeFe_2As_2 . Materiały te mają warstwową strukturę krystalograficzną, bardzo podobną do miedzianów. Wiele eksperymentów wskazuje, że mają złożoną strukturę wielopasmową oraz że istotną rolę w mechanizmie nadprzewodnictwa odgrywają fluktuacje antyferromagnetyczne [43–52].

Materiały z grup (a), (b) oraz (h) można traktować jako konwencjonalne nadprzewodniki, które mogą być opisane w ramach (także uogólnionych, np. wielopasmowych — przypadek (h)) teorii typu BCS [21, 22], gdzie główną rolę w parowaniu elektronów odgrywa mechanizm fononowy.

Właściwości materiałów z pozostałych grup (w szczególności grupy (e), (f), (g) i (i)), takie jak stosunkowo: niska gęstość nośników, silne korelacje elektronowe, stosunkowo duża temperatura T_c , duża głębokość wnikania λ , dodatnia krzywizna $H_{c2}(T)$ w szerokim zakresie temperatur i wartości $H_{c2}(T = 0)$ znacznie wyższe niż w konwencjonalnych nadprzewodnikach, ekstremalnie krótka długość koherencji ξ rzędu kilku stałych sieci a ($\xi/a \approx 2 - 16$), nadprzewodnictwo ekstremalnie drugiego rodzaju z parametrem Ginzburga $\kappa = \lambda/\xi$ rzędu 100, zmienny efekt izotopowy (niejasna rola sprzężenia elektron-fonon) sugerują krótkozasięgowy, prawie nieopóźniony charakter przyciągania odpowiedzialnego za parowanie nośników w tych materiałach (parowanie lokalne) [7]. Ponadto związki te (w szczególności miedziany i bizmutaty) często wykazują pseudoszczelinę energetyczną w widmie wzbudzeń jednoelektronowych powyżej T_c .

Wraz z nadprzewodnictwem w wielu wymienionych materiałach występują bądź też mają duży wpływ na fazę nadprzewodzącą inne typy porządku elektronowego. W szczególności możemy wyróżnić porządek ładunkowy, który występuje w grupach (e) oraz (g)

(szczególnie bizmutaty) oraz różne typy porządku magnetycznego współistniejące z nadprzewodnictwem w grupach związków (c),(d), (g) — miedziany oraz (i). Relacje między nimi dyskutujemy szczegółowo w Rozdziałach 1.2.2 oraz 4.4.

Warto także wspomnieć, że stany metastabilne i niestabilne zostały znalezione w wielu rzeczywistych układach fizycznych, zarówno teoretycznie jak i eksperymentalnie.

1.2.2 Separacja faz w materii skondensowanej

Stany z separacją faz, w których występuje nadprzewodnictwo zostały znalezione eksperymentalnie w wielu materiałach.

- Organiczne związki wykazują separacje nadprzewodnik–izolator pod ciśnieniem (np. $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ [31], $(\text{TMTSF})_2\text{ReO}_4$ [32]) lub jako efekt szybkiego chłodzenia podczas przejścia przez strukturę typu szkła (np. $\kappa\text{-(BEDT-TTF)}_2\text{Cu}[\text{N}(\text{CN})_2]\text{Br}$ [33]).
- Mezoskopowa separacja fazowa została zaobserwowana w rodzinie pniktydków żelaza np. $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{Fe}_2\text{As}_2$ [44, 45].
- Ponadto dla szczególnych materiałów z rodziny miedzianów: $\text{La}_2\text{CuO}_{4+\delta}$ oraz $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$ dane eksperymentalne sugerują istnienie całkowicie rozseparowanych przestrzennie faz [53–56].
- Ponadto spośród materiałów, w których występuje lokalne parowanie elektronowe, najlepszymi kandydatami do występowania stanów z separacją fazową są bizmutaty [37–41].

Poniżej wymieniono kilka wyników eksperymentalnych sugerujących możliwość wystąpienia stanów z separacją fazową w powyższych materiałach — w szczególności w $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ oraz $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ [37–41]:

- (a) przerwa w spektrum optycznym w fazie izolatora jest taka jak pseudoprzerwa w fazie nadprzewodzącej (SS) – może to świadczyć o separacji: SS/CO z lokalnymi domenami CO,
- (b) anomalny magnetoopór w fazie SS i anomalna zależność temperaturowa prądu krytycznego i krytycznego pola magnetycznego,
- (c) silna metastabilność i efekty histerezy obserwowane blisko granicy z fazą półprzewodzącą,
- (d) maksymalna temperatura przemiany zlokalizowana blisko granicy z fazą CO.

Dodajmy także, że w ultrazimnych (spolaryzowanych) gazach Fermiego spuląpkowanych w zewnętrznym potencjale harmonicznym zaobserwowano separacje polegającą na występowaniu centralnego rdzenia złożonego ze sparowanych cząstek oraz niesparowanych atomów poza obszarem rdzenia [57–60].

1.3 Hamiltonian typu rozszerzonego modelu Hubbarda

Zgodnie z tym, co zostało opisane wcześniej, w rozważaniach teoretycznych z zakresu fizyki ciała stałego bardzo istotne jest uwzględnienie oddziaływań między elektronami oraz związanych z nimi korelacji elektronowych. Ogólny hamiltonian dla elektronowego (w ogólności fermionowego) układu wielopasmowego (o zmiennej liczbie cząstek), który otrzymujemy z ogólnego hamiltonianu oddziałujących cząstek (uwzględniając tylko oddziaływania dwójkowe), w formalizmie drugiej kwantyzacji w bazie Wanniera jest postaci:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\alpha,\beta} \sum_{i,j} \sum_{\sigma} \left[t_{ij}^{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} (\mu_{\alpha} - E_{\alpha i}) \right] (\hat{c}_{\alpha i \sigma}^+ \hat{c}_{\beta j \sigma} + \hat{c}_{\beta j \sigma}^+ \hat{c}_{\alpha i \sigma}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} \hat{c}_{\alpha i \sigma}^+ \hat{c}_{\beta j \sigma'}^+ \hat{c}_{\gamma k \sigma'} \hat{c}_{\delta l \sigma}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

gdzie

$$t_{ij}^{\alpha\beta} = t_{ji}^{\alpha\beta*} = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \phi_{i,\alpha}^*(\vec{r}) T(\vec{r}) \phi_{j,\beta}(\vec{r}), \quad (1.2)$$

$$U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta} = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \phi_{i,\alpha}^*(\vec{r}) \phi_{j,\beta}^*(\vec{r}') U(\vec{r} - \vec{r}') \phi_{k,\gamma}(\vec{r}') \phi_{l,\delta}(\vec{r}). \quad (1.3)$$

Wskaźniki $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ przebiegają wszystkie pasma (ewentualnie orbitale) elektronowe, i, j, k, l — wszystkie węzły, a σ, σ' — wszystkie kierunki spinu (składowej w kierunku z , $\uparrow = 1$ (góra), $\downarrow = 2 = -\uparrow$ (dół), zapis $-\sigma$ oznacza kierunek spinu przeciwny do σ , np. $\downarrow = -\uparrow$). $t_{ij}^{\alpha\beta}$ dla $\alpha = \beta$ nazywamy jednoelektronową całką (parametrem) przeskoku w paśmie α pomiędzy węzłami i i j , zaś w przypadku $\alpha \neq \beta$ mówimy o parametrze hybrydyzacji. Wielkość $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ określa oddziaływanie między elektronami; $\phi_{i,\alpha}(\vec{r})$ jest funkcją falową Wanniera zlokalizowaną na węźle i w paśmie α . W ogólności $t_{ij}^{\alpha\beta}$, $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$, μ_{α} oraz $E_{\alpha i}$ mogą zależeć także od spinu σ , czego jednak nie będziemy rozważać. Operatory $c_{\alpha i \sigma}^+$ i $c_{\alpha i \sigma}$ ($c_{\alpha i \sigma} = (c_{\alpha i \sigma}^+)^{\dagger}$) są operatorami, odpowiednio, kreacji i anihilacji elektronu o spinie σ w stanie Wanniera opisanym funkcją $\phi_{i,\alpha}(\vec{r})$ (czyli zlokalizowanego na węźle i w paśmie α). Operatory te spełniają kanoniczne fermionowe relacje antykomutacyjne:

$$\{\hat{c}_{\alpha i \sigma}^+, \hat{c}_{\beta j \sigma'}^+\} = \{\hat{c}_{\alpha i \sigma}, \hat{c}_{\beta j \sigma'}\} = 0, \quad (1.4)$$

$$\{\hat{c}_{\alpha i \sigma}^+, \hat{c}_{\beta j \sigma'}\} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (1.5)$$

$U(\vec{r} - \vec{r}')$ to oddziaływanie dwucząstkowe (które w przypadku braku ekranowania dla elektronów ma postać $e^2/|\vec{r} - \vec{r}'|$, e — ładunek elektronu), natomiast $T(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r})$ (m — masa elektronu, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — laplasjan, $U(\vec{r})$ — pseudopotencjał, np.

pochodzący od sieci jonów). W przypadku wąskiego pasma pseudopotencjał jest niewielki i wtedy funkcje Wanniera można zastąpić przez orbitale atomowe lub ich kombinacje liniowe, chociaż ich nieortogonalność wprowadza pewne utrudnienia. μ_α oznacza potencjał chemiczny elektronów, który w każdym paśmie może być inny, natomiast energia jednowęzłowa $E_{\alpha i}$ może w ogólności zależeć od węzła i pasma elektronowego (związana jest z tzw. nieporządkiem diagonalnym). Przyjmujemy $t_{ii}^{\alpha\alpha} = 0$. Rozpatrywana przestrzeń stanów $\mathfrak{F}_{\alpha i}$ na dowolnym węźle i w każdym paśmie α ma cztery stany: $|0\rangle_{\alpha i}$ (brak elektronów), $|\uparrow\rangle_{\alpha i}$, $|\downarrow\rangle_{\alpha i}$ (jeden elektron o określonym kierunku spinu) oraz $|\uparrow\downarrow\rangle_{\alpha i}$ (dwa elektrony).

Ograniczając rozważania do jednego (pojedynczego) pasma elektronowego hamiltonian (1.1) redukuje się do postaci

$$\hat{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma,\sigma'} U_{ijkl} \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma'}^+ \hat{c}_{k\sigma'} \hat{c}_{l\sigma} - \sum_i (\mu - E_i) \hat{n}_i, \quad (1.6)$$

gdzie $\hat{n}_i = \sum_{\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}$ — operator liczby cząstek na węźle i , t_{ij} — jednoelektronowa całka przeskoku, U_{ijkl} — oddziaływanie pomiędzy elektronami, które są określone następująco

$$t_{ij} = \frac{1}{2} \int d\vec{r} \phi_i^*(\vec{r}) T(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}), \quad (1.7)$$

$$U_{ijkl} = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j^*(\vec{r}') U(\vec{r} - \vec{r}') \phi_k(\vec{r}') \phi_l(\vec{r}). \quad (1.8)$$

W tym przypadku możemy powiedzieć, że t_{ij} jest transformatą względem funkcji Wanniera $\phi_i(\vec{r})$ energii kinetycznej i oddziaływania z siecią $T(\vec{r})$, określonych w formalizmie pierwszego kwantowania. Przy przyjętych oznaczeniach szerokość pasma elektronowego dla sieci hiperkubicznej wynosi $4|t|z$ (całka przeskoku $t_{ij} = t$ ograniczona do najbliższych sąsiadów, z — liczba najbliższych sąsiadów).

Obecnie hamiltonian (1.6) zapiszemy w szczególnej postaci, gdzie w sumie $\sum_{ijkl}$ uwzględnimy tylko oddziaływania jednowęzłowe i dwuwęzłowe. Mamy

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} W_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \\ & - \sum_{i,j} I_{ij} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) - \sum_{i,j} J_{ij}^{xy} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_j^+ \hat{s}_i^-) - 2 \sum_{i,j} J_{ij}^z \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z + \\ & - B^z \sum_i \hat{s}_i^z - B^{xy} \sum_i (\hat{s}_i^+ + \hat{s}_i^-) + \sum_i (E_i - \mu) \hat{n}_i, \end{aligned} \quad (1.9)$$

gdzie ponadto wprowadziliśmy oddziaływania z zewnętrznym polem magnetycznym B^z w kierunku z oraz z polem B^{xy} w płaszczyźnie $x-y$. Wskaźniki i, j przebiegają wszystkie

węzły oraz $i \neq j$. Zasady tej będziemy się trzymać w całej pracy, chyba że będzie wyraźnie zaznaczone inaczej. Operatory występujące we wzorze (1.9) są zdefiniowane następująco:

$$\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}, \quad \hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (1.10)$$

$$\hat{\rho}_i^z = \frac{1}{2}(\hat{n}_i - 1), \quad \hat{\rho}_i^+ = (\hat{\rho}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow}^+ \quad (\hat{\rho}_i^+ \equiv \hat{\rho}_i^x + i\hat{\rho}_i^y), \quad (1.11)$$

$$\hat{s}_i^z = \frac{1}{2}(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}), \quad \hat{s}_i^+ = (\hat{s}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow} \quad (\hat{s}_i^+ \equiv \hat{s}_i^x + i\hat{s}_i^y). \quad (1.12)$$

Zarówno operatory ładunkowe (1.11) jak i spinu (1.12) możemy traktować jako składowe pewnych (bardzo szczególnych) operatorów (pseudo-)spinu $\hat{\rho}_i$ i $\hat{s}_i$, odpowiednio, o $S = 1$ (z wartościami własnymi przeskalowanymi o czynnik $\frac{1}{2}$ i dwukrotnie zdegenerowaną wartością 0 składowej z -owej). Spełniają one standardowe reguły komutacji dla operatorów momentu pędu:

$$[\hat{\rho}_i^+, \hat{\rho}_j^-] = 2\hat{\rho}_i^z \delta_{ij}, \quad [\hat{\rho}_i^z, \hat{\rho}_j^\pm] = \pm \hat{\rho}_i^\pm \delta_{ij}, \quad (1.13)$$

$$[\hat{s}_i^+, \hat{s}_j^-] = 2\hat{s}_i^z \delta_{ij}, \quad [\hat{s}_i^z, \hat{s}_j^\pm] = \pm \hat{s}_i^\pm \delta_{ij}, \quad (1.14)$$

co wynika wprost z reguł antykomutacyjnych (1.4)–(1.5) oraz definicji operatorów (1.11) oraz (1.12). Jednocześnie operatory $\hat{\rho}_i$ i $\hat{s}_i$ w ogólnym przypadku nie spełniają jednak innych właściwości standardowych operatorów momentu pędu w przestrzeni $\mathfrak{F}_i$, co jest konsekwencją ich fermionowej natury.

Dla operatorów spinu mamy także

$$\hat{s}_i \circ \hat{s}_j = \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z + \hat{s}_i^x \hat{s}_j^x + \hat{s}_i^y \hat{s}_j^y = \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z + \frac{1}{2} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_j^+ \hat{s}_i^-). \quad (1.15)$$

Dla operatorów pseudospinu (1.11) zachodzi analogiczna relacja.

W hamiltonianie (1.9) pominęliśmy jeden wyraz dwuwęzłowy postaci

$$\sum_{i,j,\sigma} K_{ij} \hat{n}_{i\sigma} (\hat{c}_{i-\sigma}^+ \hat{c}_{j-\sigma} + \hat{c}_{j-\sigma}^+ \hat{c}_{i-\sigma}), \quad (1.16)$$

który jest istotny np. w rozważaniach dotyczących nadprzewodnictwa [7, 61]. Nie będziemy się nim jednak zajmować w niniejszej pracy.

Współczynniki występujące w (1.9) oraz (1.16) są związane z wielkościami (1.8) w następujący sposób

$$\begin{aligned} U_i &= U_{iii} && \text{oddziaływanie jednowęzłowe kulombowskie,} \\ W_{ij} &= U_{ijji} - U_{ijij} && \text{oddziaływanie międzywęzłowe kulombowskie} \\ &&& \text{(gęstość-gęstość),} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{ij} &= -\frac{1}{2}U_{ijj} && \text{całka przeskoku pary elektronowej jako całości} \\
&&& \text{(ładunkowe oddziaływanie wymienne),} \\
J_{ij} &= \frac{1}{2}U_{ijij} && \text{wymienne oddziaływanie magnetyczne,} \\
K_{ij} &= U_{iiij} = U_{iiji} = U_{ijii} = U_{jiii} && \text{całka skorelowanego przeskoku.}
\end{aligned}$$

W (1.9) dokonaliśmy uogólnienia dopuszczając możliwość, że wymienne oddziaływania magnetyczne mogą być anizotropowe ($J_{ij}^z \neq J_{ij}^{xy}$, formalnie $J_{ij}^z = J_{ij}^{xy} = J_{ij}$). Anizotropia ta może być generowana np. przez oddziaływanie spin-orbita oraz występowanie niejednorodnych pól krystalicznych w ciele stałym. Wartości powyższych całek zostały oszacowane dla elektronów 3d w metalach przejściowych i wynoszą one około (dla najbliższych sąsiadów) $U = 20$ eV, $W = 6$ eV, $I = \frac{1}{40}$ eV, $J = \frac{1}{40}$ eV oraz $K = \frac{1}{2}$ eV [1]. Efekt ekranowania można uwzględnić za pomocą czynnika $\exp(-\lambda R)$ (gdzie λ – stała ekranowania), przez który mnożymy poszczególne wartości całek oddziaływania. Uwzględniając m. in. ekranowanie oddziaływań elektronów na różnych atomach przez gaz elektronów przewodnictwa lub uwzględniając wpływ elektronów rdzenia wartości te ulegają zmniejszeniu, np. $U \approx 10$ eV, $W \approx 2$ eV.

Ciało stałe składa się z elektronów i jonów tworzących zazwyczaj strukturę krystaliczną. W modelu (1.1) przyjęto, że sieć, jaką tworzą jony, jest statyczna. Niemniej jednak sprzężenie elektronów z modami bozonowymi (np. fononami, ekscytonami, magnonami) czy też z innymi podukładami elektronowymi nieuwzględnionymi wprost w (1.1), może doprowadzić do znacznej zmiany wielkości efektywnych całek oddziaływania $t_{ij}^{\alpha\beta}$ oraz $U_{ijkl}^{\alpha\beta\gamma\delta}$ pomiędzy elektronami, które będą mogły nawet przyjmować wartości ujemne. W naszych rozważaniach całki te będziemy traktować jako parametry efektywne, zrenormalizowane przez mechanizmy mikroskopowe (np. przez silne sprzężenie elektron-fonon), których natury nie precyzujemy. W tak ogólnym przypadku rozważenie dowolnych wartości i znaków tych parametrów jest istotne. Przykłady procedury uwzględniającej efekty z modami bozonowymi oraz efektów uwzględnienia większej ilości pasm można znaleźć np. w pracach [7, 62–68].

Dodajmy jeszcze, że jednym z najprostszych modeli potrafiących wyjaśnić szereg zjawisk zachodzących w materii skondensowanej, których źródłem są korelacje elektronowe, jest jednopasmowy model Hubbarda (model (1.6) z $U_i = U$ oraz $W_{ij} = I_{ij} = J_{ij}^z = J_{ij}^{xy} = K_{ij} = 0$) [1–6]. Model ten był używany do analizy takich zjawisk jak m. in. przemiana metal-izolator [1, 69], magnetyzm pasmowy [70] czy nadprzewodnictwo z lokalnym parowaniem elektronowym [7, 71, 72]. Pomimo swojej prostoty znane jest jego rozwiązanie ściśle tylko dla przypadku jednowymiarowego łańcucha ($d = 1$) [73–75] oraz ogólna metoda znajdowania ścisłych wyników w granicy $d \rightarrow +\infty$ (przybliżenie DMFA) [14], aczkolwiek w tej metodzie problematyczne jest ściśle rozwiązanie modelu

Andersona pojedynczej domieszki. Model Hubbarda jest też podstawą wielu uogólnień, takich jak uwzględnienie pozostałych całek oddziaływań, dalszych korelacji elektronowych oraz oddziaływania z innymi pasmami elektronowymi, które to uogólnienia obejmują hamiltoniany (1.1) i (1.6). Takie rozszerzone modele Hubbarda były używane do opisu nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego i uporządkowań ładunkowych (model t - U - W i jego uogólnienia) [7, 61, 71, 72, 76–78], konkurencji nadprzewodnictwa z magnetyzmem w pniktydkach żelaza i nadprzewodnikach ciężkofermionowych (np. model t - J [79–81] i jego różne modyfikacje). Szczególnymi przypadkami jakie można otrzymać z (1.1) są też model Falicova-Kimballa [82, 83] (model Hubbarda, gdzie elektrony z wyróżnionym spinem σ nie mogą się poruszać, np. $t_{ij\downarrow} = 0$, $t_{ij\uparrow} \neq 0$) i jego uogólnienia [83–87], różne modele wieloskładnikowe (np. model bozonowo-fermionowy [67, 88–90], uogólnione periodyczne modele Andersona [67, 91, 92] czy wielopasmowe (rozszerzone) modele Hubbarda [93, 94]), itd. Powyższy krótki przegląd nie wyczerpuje całej tematyki, niemniej jednak ukazuje, jak wielka różnorodność i bogactwo występuje wśród modeli opisujących materię skondensowaną, dla których punktem wyjścia był hamiltonian Hubbarda.

1.4 Ogólne relacje termodynamiczne

1.4.1 Funkcje termodynamiczne i podstawowe relacje

Niech $\hat{H}_{N_c}$ będzie hamiltonianem układu N_c cząstek znajdujących się w polu magnetycznym. Wprowadźmy hamiltonian $\hat{H} = \hat{H}_{N_c} - \mu \hat{n}$ ($\hat{n}$ – operator liczby cząstek w układzie), będący hamiltonianem układu o zmiennej liczbie cząstek w zewnętrznym polu magnetycznym (μ jest potencjałem chemicznym). Takim hamiltonianem jest hamiltonian określony wzorem (1.1). Wtedy (uogólniona) wielka suma stanów (w wielkim rozkładzie kanonicznym) określona jest wzorem

$$Z = \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H})], \quad (1.17)$$

gdzie ślad jest brany po pełnym układzie stanów w przestrzeni Focka (uwzględniającej zmienną liczbę cząstek w układzie), a $\beta = 1/(k_B T)$, k_B — stała Boltzmanna, T — temperatura w skali bezwzględnej.

Dla danego operatora $\hat{A}$ zapis $\langle \hat{A} \rangle$ oznacza kwantową średnią termodynamiczną dla tego operatora, tzn:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}) \hat{A}]}{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H})]} = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}) \hat{A}], \quad (1.18)$$

gdzie $\hat{H}$ jest hamiltonianem rozważanego układu. W powyższym wyrażeniu, podobnie jak poprzednio, ślad jest liczony po zupełnym układzie stanów w przestrzeni Focka. Mówimy, że powyższa średnia jest liczona dla rozkładu prawdopodobieństwa opisywanego hamiltonianem $\hat{H}$. W stanie podstawowym średnie termodynamiczne przechodzą w zwykłe średnie kwantowe (teoriopolowe). Oczywiście tak określona średnia jest addytywna, tzn. zachodzi równość

$$\langle \hat{A} + \hat{B} \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H})(\hat{A} + \hat{B})] = \langle \hat{A} \rangle + \langle \hat{B} \rangle. \quad (1.19)$$

Znając Z , na podstawie ogólnie znanych związków pomiędzy mechaniką statystyczną oraz termodynamiką [23, 95–100], możemy wyznaczyć (uogólniony) wielki potencjał kanoniczny Ω

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (1.20)$$

i (uogólnioną) energię swobodną F

$$F = F_{N_c} = \Omega + \mu N_c, \quad (1.21)$$

gdzie N_c oznacza średnią z operatora $\hat{n} = \sum_i \hat{n}_i$ liczoną dla rozkładu prawdopodobieństwa określonego przez hamiltonian $\hat{H}$ ($N_c = \langle \hat{n} \rangle$). Gdy układ rozważamy przy ustalonej liczbie cząstek to wtedy mamy

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{N_c}, \quad (1.22)$$

gdzie $Z_{N_c} = \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_{N_c})]$ jest sumą stanów w rozkładzie kanonicznym. Należy podkreślić, że relacja (1.21) obowiązuje zawsze, niezależnie czy układ rozpatrujemy w rozkładzie kanonicznym czy wielkim kanonicznym, natomiast należy pamiętać, że dla układu rozpatrywanego w rozkładzie kanonicznym N_c musi być całkowite, natomiast dla układu rozpatrywanego w wielkim rozkładzie kanonicznym N_c jest określone jako średnia termodynamiczna z $\hat{n}$ (jak to zostało powiedziane wcześniej).

Energia wewnętrzną układu (która również jest potencjałem termodynamicznym) będziemy nazywać wielkość

$$E = \langle \hat{H} + \mu \hat{N} \rangle, \quad (1.23)$$

Energia E związana jest z uogólnionym potencjałem Ω i entropią S relacją

$$\Omega = F - \mu N_c = E - TS - \mu N_c. \quad (1.24)$$

W ogólności różniczki zupełne potencjałów termodynamicznych E , F i Ω (bez uwzględniania zewnętrznego pola elektrycznego — por. [23, 100]) są postaci

$$dE = TdS - pdV - \vec{M} \circ d\vec{B} + \mu dN_c, \quad (1.25)$$

$$dF = -SdT - pdV - \vec{M} \circ d\vec{B} + \mu dN_c, \quad (1.26)$$

$$d\Omega = -SdV - pdV - \vec{M} \circ d\vec{B} - N_c d\mu, \quad (1.27)$$

gdzie T — temperatura, S — entropia, V — uogólniona objętość układu (w naszym przypadku wielkości tej w pewnym sensie odpowiada ilości węzłów sieci N), p — ciśnienie (uogólnione) panujące w układzie, $\vec{B}$ — pole magnetyczne w układzie, $\vec{M}$ — całkowity moment magnetyczny układu [23, 95, 96, 99, 100]. Zmienne V i p zostały wypisane wyłącznie dla porządku, w dalszej części pracy są one nieistotne. W termodynamice wszystkie wielkości występujące w powyższych relacjach traktuje się jako wielkości średnie. Zauważmy, że potencjał F jest transformacją Legendre’a potencjału Ω względem zmiennych N_c i μ .

Należy pamiętać, że zmiennymi niezależnymi dla zdefiniowanych powyżej energii swobodnej F są T , V , $\vec{B}$ oraz N_c , tzn. $F = F(T, V, \vec{B}, N_c)$, natomiast dla wielkiego potencjału termodynamicznego Ω zmienne niezależne to T , V , $\vec{B}$ oraz μ tzn. $\Omega = \Omega(T, V, \vec{B}, \mu)$. Z postaci różniczek (1.26)–(1.25) widzimy, że przy ustalonych T , V , $\vec{B}$ oraz N_c potencjał F przyjmuje wartość minimalną, natomiast przy ustalonych T , V , $\vec{B}$ oraz μ potencjał Ω jest minimalny (zasady pracy minimalnej [95, 96, 101]).

Jeśli chcielibyśmy rozważać układ przy ustalonych T , V , $\vec{M}$ oraz μ lub ustalonych T , V , $\vec{M}$ oraz N należy zdefiniować odpowiednie potencjały termodynamiczne postaci $F_{\vec{M}} = \Omega + \vec{B} \circ \vec{M}$ lub $F_{N_c, \vec{M}} = \Omega + \mu N_c + \vec{B} \circ \vec{M} = F_{N_c} + \vec{B} \circ \vec{M}$, odpowiednio.

W ogólności odpowiednie potencjały termodynamiczne są konstruowane według następującego schematu [23]:

- Niech potencjałem wyjściowym będzie potencjał wyjściowy $Q(x_1, \dots, x_n)$, którego różniczka zupełna ma postać

$$dQ = \sum_{i=1}^{i=n} X_i dx_i, \quad (1.28)$$

gdzie X_i oznacza parametry intensywne (siły uogólnione), np. ciśnienie, pole magnetyczne, temperaturę, potencjał chemiczny, a x_i — odpowiadające im (sprzężone z nimi) współrzędne uogólnione (parametry ekstensywne), np. objętość, całkowity moment magnetyczny, entropię czy ilość cząstek. Jest to potencjał właściwy dla procesów, w których kontrolowane są zmienne x_i ($i = 1, \dots, n$)

- W celu skonstruowania potencjału R , który ma być właściwy dla przypadku, gdy będzie kontrolowana pewna zmienna X_k , a nie zmienna x_k (k — pewien wskaźnik ze zbioru $\{1, \dots, K\}$), należy dokonać transformacji Legendre’a względem zmiennych

x_k oraz X_k . Potencjał R będzie zdefiniowany następująco:

$$R(x_1, \dots, X_k, \dots, x_K) = Q(x_1, \dots, x_k, \dots, x_n) - x_k X_k, \quad (1.29)$$

którego różniczka zupełna będzie postaci:

$$dR = dP - d(x_k)X_k - x_k d(X_k) = \sum_{i=1}^{i=k-1} X_i dx_i + \sum_{i=k+1}^{i=n} X_i dx_i - x_k d(X_k). \quad (1.30)$$

Podkreślmy, że w literaturze dotyczących magnetyzmu istnieje wiele niejednoznaczności związanych z terminologią termodynamiczną. Polega ona na tym, że część autorów przyjmuje, że średnia wartość hamiltonianu podukładu magnetycznego to energia wewnętrzna, a wielkość $-k_B T \ln Z$ to energia swobodna i godzą się z faktem, że zmienną niezależną w tych potencjałach jest $\vec{B}$, a nie $\vec{M}$, i że w ich różniczkach zupełnych występuje $-\vec{M} \circ d\vec{B}$, a nie $\vec{B} \circ d\vec{M}$. Tak też przyjęliśmy w naszej pracy. Niemniej jednak inni autorzy stosują terminologię klasyczną i nazywają wartość oczekiwaną hamiltonianu magnetycznego entalpią, a wielkość $-k_B T \ln Z$ potencjałem Gibbsa. Szczegółowa dyskusja tego problemu jest zawarta w książce [23] (por. też z uwagą za wzorem (1.47)).

Z postaci różniczek zupełnych (1.26)–(1.27) między innymi mamy

$$\left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, \vec{B}, N_c} = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_{V, \vec{B}, \mu} = -S, \quad (1.31)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{T, \vec{B}, N_c} = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial V} \right)_{T, \vec{B}, \mu} = -p, \quad (1.32)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \vec{B}} \right)_{T, V, N_c} = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \vec{B}} \right)_{T, \vec{V}, \mu} = -\vec{M}, \quad (1.33)$$

$$\left(\frac{\partial F}{\partial N_c} \right)_{T, V, \vec{B}} = \mu, \quad \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right)_{T, V, \vec{B}} = -N_c. \quad (1.34)$$

Wszystkie powyższe pochodne cząstkowe liczone są przy założeniu stałości wszystkich pozostałych zmiennych termodynamicznych niezależnych dla poszczególnych potencjałów termodynamicznych. Pamiętając o tym, w dalszej części pracy czasami pomijamy jawne wypisywanie, które zmienne podczas różniczkowania (cząstkowego) są stałe.

Możemy zdefiniować wielki potencjał termodynamiczny ω na węzeł oraz energię swobodną f na węzeł w sposób następujący

$$\omega = \frac{1}{N} \Omega, \quad f = \frac{1}{N} F, \quad (\text{zachodzi } f = \omega + \mu n), \quad (1.35)$$

gdzie $n = N_c/N$ (analogicznie można zdefiniować pozostałe potencjały termodynamiczne na węzeł), N — liczba węzłów w rozważanej sieci. Potencjały Ω , F są ekstensywne, nato-

miast ω oraz f — intensywne. Z faktu, że F jest funkcją jednorodną stopnia pierwszego (tzn. $F(\lambda N_c, \lambda N) = \lambda F(N_c, N)$) wynika, że f jest tylko funkcją n , mamy bowiem

$$f(N_c, N) = \frac{F(N_c, N)}{N} = \frac{NF(N_c/N, 1)}{N} = F(n, 1) \implies f = f(n),$$

gdzie przyjęliśmy $\lambda = N$ i skorzystaliśmy z faktu, że liczba węzłów N sieci jest proporcjonalna do objętości V układu.

Różniczki zupełne (1.26) i (1.27) przy ustalonej objętości (czyli $V = \text{const}$) na jeden węzeł są postaci:

$$df = -s dT - \vec{m} \circ d\vec{B} + \mu dn, \quad (1.36)$$

$$d\omega = -s dT - \vec{m} \circ d\vec{B} - n d\mu, \quad (1.37)$$

gdzie $s = S/N$, $\vec{m} = \vec{M}/N$ oraz $n = N_c/N$. W dalszej części pracy będziemy rozważać układ przy ustalonej objętości V (liczbie węzłów N).

Wzory (1.31) - (1.34) przy ustalonej objętości $V = \text{const}$, czyli ustalonej liczbie węzłów N (ustalonym rozmiarze sieci) przyjmują następujące postacie:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\vec{B}, n} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial T} \right)_{\vec{B}, \mu} = -s, \quad (1.38)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial \vec{B}} \right)_{T, n} = \left(\frac{\partial \omega}{\partial \vec{B}} \right)_{T, \mu} = -\vec{m}, \quad (1.39)$$

$$\left(\frac{\partial f}{\partial n} \right)_{T, \vec{B}} = \mu, \quad \left(\frac{\partial \omega}{\partial \mu} \right)_{T, \vec{B}} = -n. \quad (1.40)$$

co można pokazać w ścisły sposób, np.

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial N_c} = \frac{\partial}{\partial N_c}(Nf) = N \frac{\partial f}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial N_c} = \frac{\partial f}{\partial n}, \quad (1.41)$$

ponieważ zmienne N_c i N są niezależne (tzn. $\frac{\partial N_c}{\partial N} = 0$).

Z definicji pojemność cieplna na węzeł — ciepło właściwe — przy stałej objętości (ilości węzłów N) i stałym $x = n, \mu$ jest określone wzorem

$$c_x = \frac{1}{N} \left(\frac{\delta Q}{dT} \right)_{L, \vec{B}, x}, \quad (1.42)$$

gdzie δ oznacza przyrost nie będący różniczką zupełną. Korzystając ze związku (definicyjnego) pomiędzy przyrostem entropii a przyrostem energii cieplnej dostarczonej do układu

$$dS = \delta Q/T \quad (1.43)$$

oraz ze związku (1.31) otrzymujemy

$$c_x = \frac{T}{N} \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{V, \vec{B}, x} = \begin{cases} -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_{\vec{B}, n}, \\ -T \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial T^2} \right)_{\vec{B}, \mu}. \end{cases} \quad (1.44)$$

gdzie $x = n, \mu$.

1.4.2 Warunki równowagi termodynamicznej układu jednorodnego

Omówimy równowagę układu U umieszczonego we wnętrzu dużego zbiornika Z [101]. Przyjmujemy, że omawiany układ U i zbiornik Z tworzą razem układ zamknięty. Ponadto zbiornik Z znajduje się w stanie równowagi termodynamicznej opisanym za pomocą temperatury T_0 , ciśnienia p_0 , objętości V_0 , energii $\bar{E}_0$, entropii S_0 , potencjału chemicznego μ_0 , liczby cząstek N_0 , pola magnetycznego $\vec{B}_0$ oraz całkowitego momentu magnetycznego $\vec{M}$. Dla wszystkich zmian układu U zachodzą związki:

$$d\bar{E} + d\bar{E}_0 = 0, \quad dV + dV_0 = 0, \quad dN + dN_0 = 0, \quad d\vec{M} + d\vec{M}_0 = 0 \quad (1.45)$$

(wielkości $\bar{E}$, V , N , $\vec{M}$ odnoszą się do układu U), ponieważ całkowita objętość, energia, liczba cząstek i moment magnetyczny nie ulegają zmianie. Zauważmy, że w tej części pracy, inaczej niż poprzednio, liczbę cząstek oznaczamy jako N , a nie jako N_c .

Zakładamy, że wszystkie procesy zachodzące w zbiorniku Z są quasi-statyczne oraz jego parametry intensywne T_0 , p_0 , μ_0 , $\vec{B}_0$ nie zmieniają się.

Z drugiej zasady termodynamiki wynika, że dla wszystkich zmian zachodzących w układzie zamkniętym (układ U wraz ze zbiornikiem Z) jego entropia $S + S_0$ nie może maleć, to znaczy

$$dS + dS_0 \geq 0, \quad (1.46)$$

przy czym znak równości dotyczy przemian odwracalnych, zachodzących w układzie U (z założenia wszystkie przemiany w zbiorniku Z są odwracalne). Dla zbiornika Z mamy

$$d\bar{E}_0 = T_0 dS_0 - p_0 dV_0 + \mu_0 dN_0 + \vec{B}_0 \circ d\vec{M}_0. \quad (1.47)$$

Zauważmy, że energia $\bar{E}$ jest inaczej zdefiniowana niż energia E z Rozdziału 1.4.1 (wzór (1.23)). Wyraz $\vec{B} \circ d\vec{M}$ uwzględnia trzy efekty konieczne do opisu obiektów makroskopowych: (i) energię potencjalną momentu $\vec{M}$ w polu $\vec{B}$: $-\vec{M} \circ \vec{B}$; (ii) pracę wykonaną przez źródło prądu wytwarzające moment $\vec{M}$, aby podtrzymać stałą wartość $\vec{M}$ podczas włączania pola $\vec{B}$; (iii) pracę wykonaną przez źródło wytwarzające pole $\vec{B}$ przeciwko

sile elektromagnetycznej indukowanej przez porządkujące się wzdłuż pola $\vec{B}$ momenty $\vec{M}$ [23, 102]. W przypadku rozważania mikroobiektów podlegających prawom fizyki kwantowej (np. układów spinów) często nie rozważa się wkładów (i) i (ii). Niemniej jednak całkowita energia w takim przypadku, będąca sumą wkładów (i) i (iii), wynosi również $\vec{B} \circ \vec{M}$. Ściśle mówiąc pole $\vec{B}$ jest polem magnetycznym, jakie wytwarzałyby dane źródła, gdyby nie było magnesującego ośrodka (czyli w próżni) [100].

Podstawiając (1.47) do (1.46) i uwzględniając (1.45) otrzymujemy

$$d(\bar{E} - T_0 S + p_0 V - \mu_0 N - \vec{B}_0 \circ \vec{M}) \leq 0. \quad (1.48)$$

Zatem dla dowolnych procesów, zachodzących w układzie U , funkcja

$$\Phi = \bar{E} - T_0 S + p_0 V - \mu_0 N - \vec{B}_0 \circ \vec{M} \quad (1.49)$$

nie może wzrastać, a więc w stanie równowagi układu U funkcja Φ przyjmuje wartość najmniejszą.

Rozważmy teraz przemiany układu U przy ustalonej objętości $dV = 0$. Jeśli układ swobodnie wymienia ciepło ze zbiornika, tak że przy wszystkich zachodzących w układzie U przemianach jego temperatura $T = T_0$ (przemiany izotermiczne), pole magnetyczne $\vec{B} = B_0$ oraz ilość cząstek w układzie U nie ulegają zmianom to z (1.48) wynika, że

$$d(\bar{E} - TS - \vec{B} \circ \vec{M}) = dF = dF_N \leq 0. \quad (1.50)$$

Jeśli przemiany układu są izotermiczne ($T = T_0$) oraz zachodzą przy ustalonych $\vec{B} = B_0$ oraz $\mu = \mu_0$ to z (1.48) mamy

$$d(\bar{E} - TS - \vec{B} \circ \vec{M} - \mu N) = d\Omega \leq 0. \quad (1.51)$$

Definicje funkcji F oraz Ω są już zgodne z tymi z Rozdziału 1.4.1.

Otrzymaliśmy zasady pracy minimalnej dla układu, nad którym nie jest wykonywana żadna praca objętościowa. Mamy, że energia swobodna F jest minimalna dla przemian zachodzących przy stałym T , V , N oraz $\vec{B}$, natomiast wielki potencjał termodynamiczny Ω osiąga minimum dla przemian zachodzących przy stałym T , V , μ i $\vec{B}$.

Uważając Φ za funkcję zmiennych S , $\vec{M}$ i N ($V = \text{const}$) wyliczamy różniczkę pierwszego rzędu

$$\begin{aligned} d\Phi = & \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial S} \right)_{V, \vec{M}, N} dS + \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial N} \right)_{V, S, \vec{M}} dN + \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial \vec{M}} \right)_{V, S, N} d\vec{M} \\ & - T_0 dS - \mu_0 dN - \vec{B}_0 d\vec{M}, \end{aligned} \quad (1.52)$$

oraz różniczkę drugiego rzędu

$$d^2\Phi = \left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial S^2}\right)_{V,N,\vec{M}} dS^2 + \left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial N^2}\right)_{V,S,\vec{M}} dN^2 + \left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial \vec{M}^2}\right)_{V,S,N} d\vec{M}^2 \quad (1.53)$$

$$+ 2 \left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial S \partial N}\right) dS dN + 2 \left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial S \partial \vec{M}}\right) \circ dS d\vec{M} + 2 \left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial \vec{M} \partial N}\right) \circ d\vec{M} dN,$$

gdzie zastosowaliśmy skróconą notację. W układzie kartezjańskim mamy

$$\vec{M} = (M_x, M_y, M_z), \quad d\vec{M} = (dM_x, dM_y, dM_z), \quad \frac{\partial \bar{E}}{\partial \vec{M}} = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial M_x}, \frac{\partial \bar{E}}{\partial M_y}, \frac{\partial \bar{E}}{\partial M_z} \right)$$

$$\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial \vec{M}^2} d\vec{M}^2 = \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial M_i \partial M_j} dM_i dM_j \quad (i, j = x, y, z)$$

Warunkami koniecznym i dostatecznym na minimum funkcji $\Phi(S, N, \vec{M})$ są $d\Phi = 0$ i $d^2\Phi > 0$ (odpowiednio). Przy dowolnych dS , $d\vec{M}$ i dN niektóre z nich mają w szczególności postać:

$$\left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial S}\right)_{V,N,\vec{M}} = T = T_0, \quad \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial \vec{M}}\right)_{V,S,N} = \vec{B} = \vec{B}_0, \quad \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial N}\right)_{V,S,\vec{M}} = \mu = \mu_0. \quad (1.54)$$

Ponadto otrzymujemy:

$$\left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial S^2}\right)_{V,N,\vec{M}} = \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_{V,N,\vec{M}} = \frac{T}{c_n} L > 0, \quad (1.55)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial N^2}\right)_{V,S,\vec{M}} = \left(\frac{\partial \mu}{\partial N}\right)_{V,S,\vec{M}} > 0 \iff \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{V,S,\vec{M}} > 0, \quad (1.56)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \bar{E}}{\partial M_i^2}\right)_{V,S,N} = \left(\frac{\partial B_i}{\partial M_i}\right)_{V,S,N} > 0 \iff \left(\frac{\partial M_i}{\partial B_i}\right)_{V,S,N} > 0, \quad (1.57)$$

gdzie wykorzystaliśmy związek (1.44), a także fakt, że lokalnie zawsze funkcje $\mu(N)$ oraz $B_i(M_i)$ można odwrócić i znaleźć funkcje $N(\mu)$ oraz $M_i(B_i)$. Warunki dostateczne na minimum (1.55)–(1.57), to znaczy warunki trwałości stanu równowagi układu, zachodzą wtedy, gdy układ jest w stanie stabilnym (funkcja Φ osiąga minimum globalne) lub metastabilnym (funkcja Φ osiąga minimum lokalne). Jeśli powyższe warunki dostateczne nie zachodzą, w szczególności nie zachodzi warunek (1.56), to mamy do czynienia z niestabilnym stanem układu. Z (1.56) możemy otrzymać także, że przy ustalonej objętości V (liczbie węzłów N) zachodzi

$$\partial\mu/\partial n > 0. \quad (1.58)$$

Wielkość ta jest związana ze ściśliwością K następująco: $1/K = n^2(\partial\mu/\partial n)$.

1.4.3 Separacje faz — równowaga w układzie wielofazowym

Rozważmy układ w pewnej temperaturze T , w którym występuje separacja faz (w naszym przypadku będą to fazy elektronowe). Przez separację faz rozumiemy współistnienie dwóch faz jednorodnych. Oznacza to, że w jednym obszarze (obejmującym N_+ węzłów, o objętości $V_+ \sim N_+$) mamy N_c^+ cząstek (koncentracja wynosi $n_+ = N_c^+/N_+$) — faza A, natomiast drugi obszar jest domeną zajmującą N_- węzłów (o objętości $V_- \sim N_-$), w której znajduje się N_c^- cząstek (koncentracja $n_- = N_c^-/N_-$) — faza B. Tak jak poprzednio mówiliśmy, liczba węzłów $N_\pm$ zajmowanych przez daną fazę można utożsamiać z jej objętością $V_\pm$. Energia swobodna takiego układu jest równa

$$F_{PS}(N_c^+, N_c^-, N_+, N_-, T) = F_+(N_c^+, N_+, T) + F_-(N_c^-, N_-, T), \quad (1.59)$$

gdzie $F_\alpha(N_c^\alpha, N_\alpha, T)$ (dla $\alpha = +, -$) oznacza energię swobodną danej fazy jednorodnej zdefiniowaną wzorem (1.21), która jest funkcją ilości cząstek N_c^α i objętości (liczby węzłów) N_α oraz temperatury T (zmienne N_c^α i N_α są zmiennymi niezależnymi). Będziemy szukać minimum funkcji (1.59) ze względu na zmienne N_c^+ , N_c^- , N_+ , N_- przy warunkach

$$N_c^+ + N_c^- = N_c = \text{const}, \quad (1.60)$$

$$N_+ + N_- = N = \text{const} \quad (1.61)$$

(ustalona liczba cząstek N_c w układzie oraz ustalony jego rozmiar N) w danej temperaturze T (którą traktujemy tu jako parametr).

Stosując metodę mnożników Lagrange'a mamy do znalezienia minimum funkcji

$$h = F_{PS}(N_c^+, N_c^-, N_+, N_-, T) - \lambda_1(N_c^+ + N_c^- - N_c) - \lambda_2(N_+ + N_- - N), \quad (1.62)$$

przy czym zachodzą związki (1.60) - (1.61). Mamy

$$\frac{\partial h}{\partial N_c^+} = \frac{\partial F_+}{\partial N_c^+} - \lambda_1 = 0, \quad \frac{\partial h}{\partial N_c^-} = \frac{\partial F_-}{\partial N_c^-} - \lambda_1 = 0, \quad (1.63)$$

skąd zgodnie z równaniem (1.34) otrzymujemy równość potencjałów chemicznych w obu domenach

$$\frac{\partial F_+}{\partial N_c^+} = \frac{\partial F_-}{\partial N_c^-} = \lambda_1 \iff \mu_+(n_+) = \mu_-(n_-) = \lambda_1 \quad (1.64)$$

(równowaga chemiczna). Licząc pochodne po objętościach N_α mamy

$$\frac{\partial h}{\partial N_+} = \frac{\partial F_+}{\partial N_+} - \lambda_2 = 0, \quad \frac{\partial h}{\partial N_-} = \frac{\partial F_-}{\partial N_-} - \lambda_2 = 0, \quad (1.65)$$

skąd

$$\frac{\partial F_+}{\partial N_+} = \frac{\partial F_-}{\partial N_-} = \lambda_2 = -p. \quad (1.66)$$

Ponieważ N_α ($\alpha = \pm$) jest związane z objętością $V_\alpha \sim N_\alpha$ (uogólnioną objętością), możemy mówić o równości uogólnionych ciśnień p (analogia do równowagi mechanicznej). Zachodzi relacja

$$\frac{\partial F_\alpha}{\partial N_\alpha} = \frac{\partial}{\partial N_\alpha} (N_\alpha f_\alpha) = f_\alpha + N_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial n_\alpha} \frac{\partial n_\alpha}{\partial L_\alpha} = f_\alpha - \mu_\alpha n_\alpha = \omega_\alpha, \quad (1.67)$$

gdzie skorzystano z faktu, że $\frac{\partial n_\alpha}{\partial N_\alpha} = -\frac{n_\alpha}{N_\alpha}$, $\alpha = \pm$ ($n_\alpha = N_\alpha^\alpha / N_\alpha$) oraz definicji (1.35). Na mocy powyższego z (1.66) mamy

$$\omega_+(n_+) = \omega_-(n_-) = \lambda_2 \iff f(n_+) - f(n_-) = \mu_+(n_+)n_+ - \mu_-(n_-)n_-. \quad (1.68)$$

Równanie występujące po prawej stronie powyżej, przekształcone na mocy (1.64) do postaci

$$\frac{f(n_+) - f(n_-)}{n_+ - n_-} = \mu_-(n_-) \quad \left(= \mu_+(n_+) = \frac{\partial F_+}{\partial N_c^+} = \frac{\partial f_+}{\partial n_+} \right) \quad (1.69)$$

często nazywa się konstrukcją Maxwella. Jeżeli układ (dwóch) równań (1.64) i (1.68) (w danej temperaturze T) ma rozwiązanie (n_+, n_-) , $0 < n_\alpha < 2$ to w przedziale koncentracji

$$\text{Min}\{n_+, n_-\} < n < \text{Max}\{n_+, n_-\} \quad (1.70)$$

układ jest w stanie z separacją faz. Dla $n = n_+$ domena fazy A zajmuje cały układ, natomiast dla $n = n_-$ cały układ jest zajmowany przez domenę fazy B. Widzimy ponadto, że n_+ , n_- zależą wyłącznie od parametrów układu (T , całki oddziaływania), a w żaden sposób nie zależą od koncentracji n .

Równania (1.59) i (1.60) możemy zapisać w języku wielkości intensywnych (energii swobodnych na węzeł i koncentracji) w następujący sposób (dla danego T)

$$f_{PS}(n_+, n_-) = \bar{m}_1 f_+(n_+) + \bar{m}_2 f_-(n_-), \quad (1.71)$$

gdzie

$$\bar{m}_1 = \frac{1}{n_+ - n_-} n - \frac{n_-}{n_+ - n_-}, \quad \bar{m}_2 = 1 - \bar{m}_1 = \frac{n_+}{n_+ - n_-} - \frac{1}{n_+ - n_-} n, \quad (1.72)$$

określają części układu zajmowane przez domenę fazy A o koncentracji n_+ i domenę fazy B o koncentracji n_- , odpowiednio. Przy tak zdefiniowanych wielkościach mamy $n = \bar{m}_1 n_+ + \bar{m}_2 n_- = \text{const.}$

Minimalizując (1.71) ze względu na n_+ i n_- , a także zakładając, że $\text{Min}\{n_+, n_-\} < n < \text{Max}\{n_+, n_-\}$ (skąd $n_+ \neq n_-$), ponieważ $\bar{m}_1$ musi być właściwie określone, uwzględniając warunek (1.72) oraz traktując n jako parametr (wartość stałą) otrzymujemy:

$$\frac{\partial f_{PS}}{\partial n_+} = 0 \iff \mu_+(n_+) = \frac{\partial f_+}{\partial n_+} = \frac{f_+(n_+) - f_-(n_-)}{n_+ - n_-}, \quad (1.73)$$

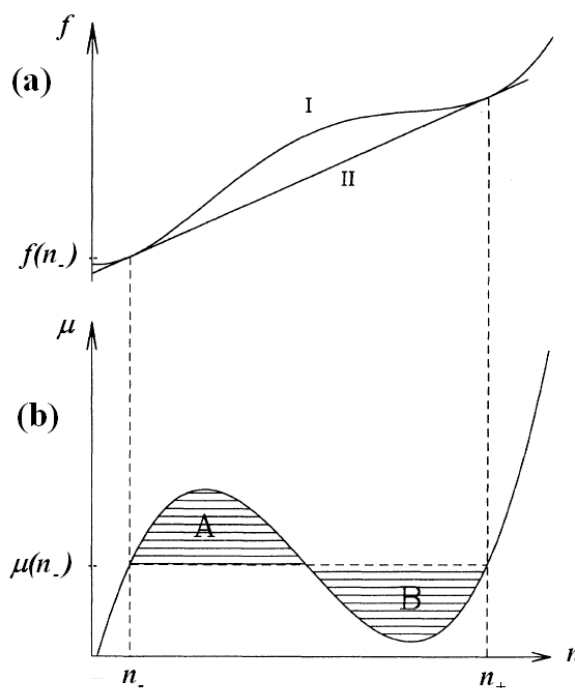
$$\frac{\partial f_{PS}}{\partial n_-} = 0 \iff \mu_-(n_-) = \frac{\partial f_-}{\partial n_-} = \frac{f_+(n_+) - f_-(n_-)}{n_+ - n_-}. \quad (1.74)$$

Otrzymany układ równań jest równoważny układowi równań (1.64) i (1.68). To (drugie) sformułowanie problemu w języku wielkości intensywnych jest korzystniejsze przy rozwiązywaniu układu w granicy termodynamicznej (tzn. $N \rightarrow \infty$ przy stałym $n = N_c/N$).

Zauważmy, że chcąc rozważać separację fazową przy ustalonej magnetyzacji m musimylibyśmy wprowadzić energię swobodną f_m jako transformację Legendre'a ze względu na magnetyczne stopnie swobody $f_m = \omega + \vec{B} \circ \vec{m}$ i powtórzyć procedurę pokazaną powyżej (z zamianą wielkości określających koncentrację ($n, n_+, n_-, N_c, N_c^+, N_c^-$) na wielkości związane z porządkiem magnetycznym ($m, m_+, m_-, M_c, M_c^+, M_c^-$) by otrzymać wartość magnetyzacji (m_+, m_-) w dwóch domenach. Natomiast jeśli chcielibyśmy rozważać układ przy ustalonych n i m i uwzględnić stany z separacją musimylibyśmy wprowadzić energię swobodną $f_{n,m}$ jako transformację Legendre'a ze względu na ładunkowe i magnetyczne stopnie swobody $f_{n,m} = \omega + \mu n + \vec{B} \circ \vec{m}$ i powtórzyć procedurę pokazaną powyżej (z dodatkowym warunkiem na stałość magnetyzacji m całego układu, oprócz warunku (1.72)) by otrzymać dwie domeny, jedną z n_+, m_+ , a drugą z n_-, m_- .

Na Rys. 1.1 przedstawiono schematyczne wyjaśnienie konstrukcji Maxwella (por. też Rys. 3.9(d)–(e)). Rys. 1.1 dotyczy sytuacji, gdy w układzie nie występują żadne fazy uporządkowane i istnieje tylko jedno rozwiązanie równania stanu układu dla danego n (parametrem rozróżniającym daną fazę jest koncentracja n). Jednocześnie widzimy, że dla danego μ może istnieć kilka rozwiązań równania stanu. W stanie z separacją faz energia f jest liniową funkcją n , a potencjał chemiczny μ jest niezależny od n i równy jest potencjałowi w domenach $\mu = \mu_- = \mu_+$. Zauważmy, że w fazie jednorodnej pomiędzy lokalnymi maksimum i minimum potencjału chemicznego w fazie jednorodnej zachodzi $\partial\mu/\partial n < 0$ (nie zachodzi warunek stabilności (1.58) i faza jednorodna w tym zakresie n jest niestabilna). Występują też dwa zakresy n w przedziale $n_- < n < n_+$, w których $\partial\mu/\partial n > 0$. Odpowiada to jednorodnym stanom (fazom) metastabilnym układu. Konstrukcja Maxwella zrównuje pola zacieniowanych obszarów A i B na Rys. 1.1.

Ponadto z postaci równania (1.68) wynika, że gdy w układzie przy ustalonym μ ($\vec{B}$) następuje przemiana związana z nieciągłą zmianą n (m) to w określonym zakresie n (m) może wystąpić stan z separacją fazową (gdy układ będziemy rozważać przy ustalonym



Rys. 1.1: Schematyczne wyjaśnienie konstrukcji Maxwella. (a) Energia swobodna f dla (I) pojedynczej fazy jednorodnej oraz (II) dla stanu z separacją fazową (dwóch faz o koncentracjach n_- i n_+) w funkcji n . (b) Schematyczny wykres potencjału chemicznego μ w funkcji koncentracji n (dla fazy jednorodnej) [104].

n (m)). Szczegółowa dyskusja problemu równowagi układu wielofazowego, konstrukcji Maxwella i jej fizycznych konsekwencji jest zawarta m. in. w pracach [98, 99, 103–106].

1.5 Przemiany fazowe i charakterystyczne punkty na diagramach fazowych

Badane układy w pracy mogą składać z jednej lub kilku faz (stan z separacją faz), które spełniają następujące wymagania: parametry intensywne mają w każdym elemencie objętości (odpowiednio dużym, por. uporządkowania dwupodsieciowe na sieciach dwudzielnych np. faza uporządkowana ładunkowo czy antyferromagnetycznie) danej fazy identyczne wartości oraz na granicy fazy (w przestrzeni rzeczywistej — na sieci) następuje skokowa zmiana co najmniej jednego parametru intensywnego (np. gęstości).

W pracy przyjmujemy następującą nomenklaturę. Będziemy rozróżniać dwa rodzaje (typy) przemian (przejsć) fazowych pomiędzy fazami jednorodnymi: przemiany pierwszego rodzaju (nieciągłe, skokowe) oraz przemiany drugiego rodzaju (ciągłe). Zgodnie z klasyfikacją przemian fazowych L. Landaua nieciągłym przemianom fazowym w skończonych temperaturach towarzyszy skokowa zmiana parametru porządku (pewnej wielkości średniej związanej z danym uporządkowaniem w układzie) [97–99]. Tę nomenklaturę możemy

stosować tylko do przemian fazowych pomiędzy fazami jednorodnymi.

Zazwyczaj nieciągłej przemianie towarzyszy także skokowa zmiana, oprócz parametru porządku, innych średnich termodynamicznych. W szczególności dla układu rozważanego przy ustalonym potencjale chemicznego μ przy przemianie pierwszego rodzaju może wystąpić nieciągła zmiana koncentracji n , co może objawić się występowaniem stanu z separacją faz na diagramie otrzymanym przy ustalonym n [98, 99] (por. też Rozdział 1.4.3). Ponadto w sąsiedztwie przemian fazowych pierwszego rodzaju pojawiają się obszary występowania faz metastabilnych (powyżej temperatury przemiany — faza „przegrzana”, a poniżej temperatury przemiany — faza „przechłodzona”).

Gdy układ rozważamy przy ustalonym n mamy do czynienia z możliwością wystąpienia stanów z separacją faz, czyli stanów, w których mogą współistnieć dwie fazy jednorodne zajmujące różne obszary (domeny) w układzie. Oprócz przemian pierwszego i drugiego rodzaju pomiędzy fazami jednorodnymi mogą wystąpić przemiany pomiędzy fazą jednorodną a stanem z separacją faz. W takim przypadku nie możemy stosować nazewnictwa, które jest zarezerwowane dla przemian pomiędzy fazami jednorodnymi. Przemiany takie są związane z ciągłym zanikiem jednej z domen w temperaturze przemiany. Przemiany takie będziemy oznaczać konsekwentnie jako przemiany „trzeciego rodzaju”, w celu odróżnienia ich od przemian wcześniej opisanych (nie mylmy ich z przemianami trzeciego rodzaju według klasyfikacji Ehrenfesta przejść fazowych [97]). Ponadto w układzie mogą wystąpić przemiany pomiędzy różnymi stanami z separacją faz, dla których możemy standardowo określić rodzaj przemiany, bowiem przemiany te są związane ze zmianą parametru porządku w jednej domenie (której jednocześnie może towarzyszyć zmiana wielkości domeny). Przemiany te mogą być pierwszego lub drugiego rodzaju w zależności od tego, jaka jest zmiana parametru porządku w jednej z domen w temperaturze przemiany (w drugiej domenie parametr porządku jest ciągły) — por. w szczególności [107, 108].

Na diagramach fazowych mogą wystąpić różne punkty krytyczne, m. in.: punkt trójkrytyczny, który jest związany ze zmianą rodzaju przemiany pomiędzy dwoma fazami; izolowany punkt krytyczny, w którym kończy się (urywa) linia pierwszego rodzaju rozdzielająca dwie fazy na diagramie fazowym; punkt bikrytyczny, w którym linia pierwszego rodzaju kończy się na linii drugiego rodzaju; czy też końcowy punkt krytyczny, w którym linia drugiego rodzaju kończy się na linii pierwszego rodzaju. Nie będziemy badać zachowania układu w pobliżu tych punktów i uzasadniać ich nazw, bowiem przekracza to istotnie zakres niniejszej pracy. Ich nazwy zaczerpnięto z literatury (dla tych, które były wcześniej określone) [107–111] lub ich natury nie precyzowano.

Podkreślimy jeszcze fakt, że przemiany fazowe w stanie podstawowym są związane ze zmianami parametrów w hamiltonianie układu i nie są przejściami temperaturowymi, zatem wprowadzone wyżej nazewnictwo nie może być stosowane w tym przypadku.

Praktycznie w całej pracy stosujemy następującą nomenklaturę i następujące oznaczenia na diagramach fazowych (chyba że wyraźnie zaznaczono inaczej):

- **czerwone linie ciągłe** oznaczają przemiany drugiego rodzaju (ciągłe),
- • • **czarne linie kropkowane** (tj. linie złożone z kropek, linie kropka-kropka) związane są z przemianami pierwszego rodzaju (nieciągłymi),
- — **zielone linie przerywane** (tj. linie kreskowane, złożone z kresek, linie kreska-kreska) oznaczają przemiany „trzeciego rodzaju” pomiędzy fazami jednorodnymi a stanami z separacją faz,
- — **niebieskie linie kropkowano-kreskowane** (linie złożone z kropek i kresek, linie kropka-kreska) związane są z liniami punktów (trój-)krytycznych, ich rzutami lub granicami występowania faz metastabilnych,
- •• na niektórych diagramach i wykresach pojawiają się też **linie kreska-kropka-kropka** .

Przybliżenie pola średniego

2.1 Rozszczepienie iloczynu operatorów typu teorii pola średniego

Dany operator $\hat{A}$ możemy przedstawić jako sumę jego wartości średniej $\langle \hat{A} \rangle$ i jego odstępstwa od tej średniej (fluktuacji) $\delta \hat{A}$:

$$\hat{A} = \langle \hat{A} \rangle + \delta \hat{A}. \quad (2.1)$$

Zatem dla iloczynu dwóch operatorów $\hat{A}\hat{B}$ otrzymujemy:

$$\hat{A}\hat{B} = (\langle \hat{A} \rangle + \delta \hat{A})(\langle \hat{B} \rangle + \delta \hat{B}) = \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \delta \hat{B} + \langle \hat{B} \rangle \delta \hat{A} + \delta \hat{A} \delta \hat{B}. \quad (2.2)$$

Zakładając, że fluktuacje operatora wokół jego wartości średniej są małe, można pominąć iloczyn $\delta \hat{A} \delta \hat{B}$. Wyznaczając z (2.1) fluktuacje $\delta \hat{A}$ oraz $\delta \hat{B}$ i podstawiając do (2.2) otrzymujemy (w przybliżeniu) następującą relację

$$\hat{A}\hat{B} \approx (\hat{A}\hat{B})_{\text{MFA}} = \hat{A}\langle \hat{B} \rangle + \langle \hat{A} \rangle \hat{B} - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle. \quad (2.3)$$

Iloczyn dwóch operatorów możemy zatem wyrazić jako sumę wyrazów zawierających jeden operator i pewną liczbę, która jest w tym przypadku średnią (termodynamiczną) wartością drugiego operatora. Widzimy jednocześnie, że przybliżenie to pomija efekty związane z fluktuacjami.

Poniżej wyprowadzimy wzory na sumy sieciowe, które występują w hamiltonianie (1.9). Dla następującej sumy mamy

$$\sum_{ij} A_{ij} \hat{B}_i \hat{B}_j \approx 2 \sum_{ij} A_{ij} b_i \hat{B}_j - \sum_{ij} A_{ij} b_i b_j, \quad (2.4)$$

gdzie $b_i = \langle \hat{B}_i \rangle$ oraz przy założeniu, że parametry oddziaływania spełniają warunki $A_{ij} = A_{ji}$. Otrzymujemy również następującą zależność

$$\sum_{ij} C_{ij} (\hat{D}_i^+ \hat{D}_j^- + \hat{D}_j^+ \hat{D}_i^-) \approx 2 \sum_{ij} C_{ij} (d_i^* \hat{D}_j^- + d_i \hat{D}_j^+) - 2 \sum_{ij} C_{ij} d_i^* d_j, \quad (2.5)$$

gdzie $d_i^* = \langle \hat{D}_i^+ \rangle$, $d_i = \langle \hat{D}_i^- \rangle$, $\hat{D}_i^+ = (\hat{D}_i^-)^\dagger$ przy założeniu, że parametry oddziaływania spełniają warunki $C_{ij} = C_{ij}^*$.

Wzory (2.4) oraz (2.5) będą przydatne w dalszych rozważaniach.

2.2 Zastosowanie do badanego modelu — przybliżenie wariacyjne

Rozważmy obecnie ogólny efektywny hamiltonian postaci (1.9) bez wyrazu kinetycznego ($t_{ij} = 0$, granica zerowej szerokości pasma, granica atomowa), to jest hamiltonian następującej postaci

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} W_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_{i,j} I_{ij} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + \\ & - \sum_{i,j} J_{ij}^{xy} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_j^+ \hat{s}_i^-) - 2 \sum_{i,j} J_{ij}^z \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z + \\ & - B^z \sum_i \hat{s}_i^z - B^{xy} \sum_i (\hat{s}_i^+ + \hat{s}_i^-) + \sum_i (E_i - \mu) \hat{n}_i. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Efektywny hamiltonian po zastosowaniu przybliżenia pola średniego (MFA) dla wyrazów międzywęzłowych i ścisłym potraktowaniu wyrazu jednowęzłowego (podejścia wariacyjne, VA) jest postaci

$$\hat{H} \approx \hat{H}_{\text{MF}} = \sum_i [\hat{H}_i + C_i], \quad (2.7)$$

gdzie hamiltonian jednowęzłowy na danym węźle i jest wyrażony wzorem

$$\hat{H}_i = U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu_i \hat{n}_i - (H_i^* \hat{\rho}_i^- + H_i \hat{\rho}_i^+) - B_i^z \hat{s}_i^z - (B_i^* \hat{s}_i^- + B_i \hat{s}_i^+). \quad (2.8)$$

Podkreślmy, że do wyrazu jednowęzłowego $\sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ nie stosujemy rozszczepienia (2.3). Zastosowanie takiego przybliżenia dla tego wyrazu może istotnie modyfikować otrzymane wyniki i jest zasadne dla niewielkich $|U|$ (przybliżenie Hartree-Focka złamanej symetrii, por. np. prace [7, 13, 71, 72]). Ponadto zastosowanie przybliżenia MFA do tego wyrazu nie daje ścisłych wyników nawet w granicy $d \rightarrow +\infty$.

Korzystając z wzorów (2.4) oraz (2.5) otrzymujemy, że pola μ_i , H_i (H_i^*), B_i^z oraz B_i (B_i^*) występujące w (2.8) dla każdego i są następujące:

$$\begin{aligned} \mu_i &= -E_i + \mu - \sum_{j \neq i} W_{ij} n_j, \\ H_i^* &= 2 \sum_{j \neq i} I_{ij} \Delta_j^*, \\ B_i^z &= 4 \sum_{j \neq i} J_{ij}^z m_j + B^z, \\ B_i^* &= 2 \sum_{j \neq i} J_{ij}^{xy} \xi_j^* + B^{xy}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

gdzie średnie: $n_j = \langle \hat{n}_j \rangle_{MF}$, $\Delta_j^* = \langle \hat{\rho}_j^+ \rangle_{MF}$, $m_j = \langle \hat{s}_j^z \rangle_{MF}$ oraz $\xi_j^* = \langle \hat{s}_j^+ \rangle_{MF}$ są określone standardowo. W rozważanym przybliżeniu są one obliczane za pomocą wzoru

$$\langle \hat{A}_i \rangle_{MF} = \frac{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_{MF}) \hat{A}_i]}{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_{MF})]} = \frac{\text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_{MF}) \hat{A}_i]}{Z_{MF}} = \frac{\text{Tr}_i [\exp(-\beta \hat{H}_{MF}) \hat{A}_i]}{Z_i}, \quad (2.10)$$

gdzie $\hat{A}$ jest dowolnym operatorem (por. też (2.35) oraz (2.36)–(2.39)).

Stałe C_i występujące w (2.7) wyrażają się natomiast wzorem

$$C_i = - \sum_{j \neq i} \left(\frac{1}{2} W_{ij} n_i n_j - 2 I_{ij} \Delta_i^* \Delta_j - 2 J_{ij}^z m_i m_j - 2 J_{ij}^{xy} \xi_i^* \xi_j \right). \quad (2.11)$$

Zauważmy, że nie nakładaliśmy żadnych warunków na zasięg oddziaływań występujących w hamiltonianie (2.6).

Macierz $\check{H}_i$ hamiltonianu jednowęzłowego $\hat{H}_i$ w bazie stanów jednowęzłowych $\mathfrak{F}_i = \{|0\rangle_i, |\uparrow\rangle_i, |\downarrow\rangle_i, |\uparrow\downarrow\rangle_i\}$ jest następująca:

$$\check{H}_i = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -H_i^* \\ 0 & -\frac{1}{2}B_i^z - \mu_i & -B_i & 0 \\ 0 & -B_i^* & \frac{1}{2}B_i^z - \mu_i & 0 \\ -H_i & 0 & 0 & U_i - 2\mu_i \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

przy czym kolumny odnoszą się do stanów „ket” $|\dots\rangle$, natomiast wiersze — do stanów „bra” $\langle \dots|$. Rozwiązując równanie sekularne dla powyższej macierzy

$$\check{H}_i - \lambda \check{I} = 0, \quad (2.13)$$

którego postać jawna jest następująca

$$[-\lambda(\bar{C} - \lambda) - |H_i^*|^2] \{(\bar{A} - \lambda)(\bar{B} - \lambda) - |B_i^*|^2\} = 0, \quad (2.14)$$

gdzie $\check{I}$ jest macierzą jednostkową, $\bar{A} = -\frac{1}{2}B_i^z - \mu_i$, $\bar{B} = \frac{1}{2}B_i^z - \mu_i$ oraz $\bar{C} = U - 2\mu_i$, znajdujemy cztery wartości własne λ_i^k ($k = 1, \dots, 4$) macierzy $\check{H}$, które są następujące

$$\lambda_i^{1/2} = \frac{1}{2} \left(U_i - 2\mu_i \pm \sqrt{(U_i - 2\mu_i)^2 + 4|H_i^*|^2} \right), \quad (2.15)$$

$$\lambda_i^{3/4} = \frac{1}{2} \left(-2\mu_i \pm \sqrt{(B_i^z)^2 + 4|B_i^*|^2} \right). \quad (2.16)$$

Wartości własne (2.15) odpowiadają podprzestrzeni $\{|0\rangle_i, |\uparrow\downarrow\rangle_i\}$, natomiast wartości własne (2.16) — podprzestrzeni $\{|\uparrow\rangle_i, |\downarrow\rangle_i\}$. Podprzestrzenie te nie „mieszają się” (macierz

$\check{H}_i$ jest macierzą blokową).

Wektory własne (znormalizowane) $|k\rangle_i$ macierzy $\check{H}_i$, odpowiadające wartościom własnym λ_i^k , w bazie $\mathfrak{F}_i$ otrzymujemy w następującej postaci

$$|1\rangle_i = (a_1, 0, 0, a_2) = a_1|0\rangle + a_2|\uparrow\downarrow\rangle \quad (2.17)$$

$$|2\rangle_i = (b_1, 0, 0, b_2) = b_1|0\rangle + b_2|\uparrow\downarrow\rangle \quad (2.18)$$

$$|3\rangle_i = (0, c_1, c_2, 0) = c_1|\uparrow\rangle + c_2|\downarrow\rangle \quad (2.19)$$

$$|4\rangle_i = (0, d_1, d_2, 0) = d_1|\uparrow\rangle + d_2|\downarrow\rangle \quad (2.20)$$

gdzie współrzędne (niezerowe) wektora $|1\rangle_i$ odpowiadającego wartości własnej $\lambda_i^1 = \frac{1}{2} \left(U_i - 2\mu_i + \sqrt{(U_i - 2\mu_i)^2 + 4|H_i^*|^2} \right)$ mają postać

$$a_1 = \frac{|H_i^*| \left(U_i - 2\mu_i - \sqrt{4|H_i^*|^2 + (U_i - 2\mu_i)^2} \right)}{H_i \sqrt{4|H_i^*|^2 + \left(U_i - 2\mu_i - \sqrt{4|H_i^*|^2 + (U_i - 2\mu_i)^2} \right)^2}}, \quad (2.21)$$

$$a_2 = \frac{2|H_i^*|}{\sqrt{4|H_i^*|^2 + \left(U_i - 2\mu_i - \sqrt{4|H_i^*|^2 + (U_i - 2\mu_i)^2} \right)^2}}, \quad (2.22)$$

współrzędne (niezerowe) wektora $|2\rangle_i$ odpowiadającego wartości własnej $\lambda_i^2 = \frac{1}{2} \left(U_i - 2\mu_i - \sqrt{(U_i - 2\mu_i)^2 + 4|H_i^*|^2} \right)$ mają postać

$$b_1 = \frac{|H_i^*| \left(U_i - 2\mu_i + \sqrt{4|H_i^*|^2 + (U_i - 2\mu_i)^2} \right)}{H_i \sqrt{4|H_i^*|^2 + \left(U_i - 2\mu_i + \sqrt{4|H_i^*|^2 + (U_i - 2\mu_i)^2} \right)^2}}, \quad (2.23)$$

$$b_2 = \frac{2|H_i^*|}{\sqrt{4|H_i^*|^2 + \left(U_i - 2\mu_i + \sqrt{4|H_i^*|^2 + (U_i - 2\mu_i)^2} \right)^2}}, \quad (2.24)$$

współrzędne (niezerowe) wektora $|3\rangle_i$ odpowiadającego wartości własnej $\lambda_i^3 = \frac{1}{2} \left(-2\mu_i + \sqrt{(B_i^z)^2 + 4|B_i^*|^2} \right)$ mają postać

$$c_1 = \frac{|B_i^*| \left(B_i^z - \sqrt{4|B_i^*|^2 + (B_i^z)^2} \right)}{B_i^* \sqrt{4|B_i^*|^2 + \left(B_i^z - \sqrt{4|B_i^*|^2 + (B_i^z)^2} \right)^2}}, \quad (2.25)$$

$$c_2 = \frac{2|B_i|}{\sqrt{4|B_i^*|^2 + \left(B_i^z - \sqrt{4|B_i^*|^2 + (B_i^z)^2} \right)^2}} \quad (2.26)$$

i w końcu współrzędne (niezerowe) wektora $|4\rangle_i$ odpowiadającego wartości własnej $\lambda_i^4 = \frac{1}{2} \left(-2\mu_i - \sqrt{(B_i^z)^2 + 4|B_i^*|^2} \right)$ mają postać

$$d_1 = \frac{|B_i^*| \left(B_i^z + \sqrt{4|B_i^*|^2 + (B_i^z)^2} \right)}{B_i^* \sqrt{4|B_i^*|^2 + \left(B_i^z + \sqrt{4|B_i^*|^2 + (B_i^z)^2} \right)^2}}, \quad (2.27)$$

$$d_2 = \frac{2|B_i^*|}{\sqrt{4|B_i^*|^2 + \left(B_i^z + \sqrt{4|B_i^*|^2 + (B_i^z)^2} \right)^2}}. \quad (2.28)$$

Uogólniona wielka suma stanów (suma stanów w wielkim rozkładzie kanonicznym) dla modelu (2.6) w podejściu VA, czyli suma stanów dla modelu (2.7), wyraża się więc wzorem

$$Z_{MF} = \text{Tr} \left[\exp(-\beta \hat{H}_{MF}) \right] = \text{Tr} \left[\exp \left(-\beta \sum_i (\hat{H}_i + C_i) \right) \right] = \prod_i Z_i \exp(-\beta C_i), \quad (2.29)$$

gdzie

$$Z_i = \text{Tr}_i \left[\exp(-\beta \hat{H}_i) \right] = \sum_{n=1}^4 \exp(-\beta \lambda_i^n), \quad (2.30)$$

jest sumą stanów dla hamiltonianu jednowęzłowego $\hat{H}_i$ określonego wzorem (2.8). Ślad Tr_i jest liczony po przestrzeni stanów $\mathfrak{F}_i$ na węźle i . Korzystając z (2.15)–(2.16) powyższe wyrażenie możemy zapisać jawnie w następujący sposób

$$Z_i = 2 \exp(\beta \mu_i) \left[\cosh \left(\beta \sqrt{|B_i^*|^2 + \left(\frac{B_i^z}{2} \right)^2} \right) + \right. \quad (2.31)$$

$$\left. + \exp \left(-\frac{\beta U}{2} \right) \cosh \left(\beta \sqrt{|H_i^*|^2 + \left(\mu_i - \frac{U}{2} \right)^2} \right) \right] \\ = 2 \exp \left(\beta \left(\mu_i - \frac{U}{2} \right) \right) \left[\exp \left(\frac{\beta U}{2} \right) \cosh \left(\beta \sqrt{|B_i^*|^2 + \left(\frac{B_i^z}{2} \right)^2} \right) + \right. \quad (2.32) \\ \left. + \cosh \left(\beta \sqrt{|H_i^*|^2 + \left(\mu_i - \frac{U}{2} \right)^2} \right) \right].$$

Znając wielką sumę stanów możemy obliczyć (uogólniony) wielki potencjał kanoniczny

$$\Omega_{MF} = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{MF} = -\frac{1}{\beta} \sum_i [\ln(Z_i) - \beta C_i] = \sum_i [\Omega_i + C_i], \quad (2.33)$$

gdzie Z_{MF} jest wyrażone za pomocą (2.29)–(2.32) oraz $\Omega_i = -\frac{1}{\beta} \ln(Z_i)$. Ponadto na mocy

(2.29) oraz (2.30) możemy także zapisać

$$\Omega_{MF} = \sum_i C_i - \frac{1}{\beta} \sum_i \left\{ \ln \left[\sum_{j=1}^4 \exp(-\beta \lambda_j^i) \right] \right\}. \quad (2.34)$$

Poszczególne średnie (w przybliżeniu VA) na danym węźle możemy obliczyć jako

$$\begin{aligned} n_i &= \langle \hat{n}_i \rangle_{MF} = -\frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial \mu_i}, & m_i &= \langle \hat{s}_i \rangle_{MF} = -\frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial B_i^z}, \\ |\Delta_i^*| &= \left| \langle \hat{\rho}_i^+ \rangle_{MF} \right| = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial |H_i^*|}, & |\xi_i^*| &= \left| \langle \hat{s}_i^+ \rangle_{MF} \right| = -\frac{1}{2} \frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial |B_i^*|}, \\ D_i &= \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle_{MF} = \frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial U_i} \end{aligned} \quad (2.35)$$

lub też alternatywnie

$$\Delta_i = \langle \hat{\rho}_i^- \rangle_{MF} = -\frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial H_i^*}, \quad \xi_i = \langle \hat{s}_i^- \rangle_{MF} = -\frac{\partial \Omega_{MF}}{\partial B_i^*}.$$

Zauważmy ponadto, że formalnie w powyższych wzorach wystarczy liczyć pochodne z Ω_i (jednowęzłowego składnika Ω_{MF}) oraz, że stałe C_i nie zależą od μ_i , H_i , B_i^z oraz B_i . Powyższe średnie możemy również obliczyć standardowo także ze wzoru (2.10) i otrzymamy wtedy

$$\begin{aligned} n_i &= \frac{1}{Z_i} \left\{ (|d_1|^2 + |d_2|^2) \exp(-\beta \lambda_4) + (|c_1|^2 + |c_2|^2) \exp(-\beta \lambda_3) + \right. \\ &\quad \left. + 2|b_2|^2 \exp(-\beta \lambda_2) + 2|a_2|^2 \exp(-\beta \lambda_1) \right\}, \end{aligned} \quad (2.36)$$

$$m_i = \frac{1}{2Z_i} \left\{ (|d_1|^2 - |d_2|^2) \exp(-\beta \lambda_4) + (|c_1|^2 - |c_2|^2) \exp(-\beta \lambda_3) \right\}, \quad (2.37)$$

$$\Delta_i^* = \frac{1}{Z_i} \{ b_2^* b_1 \exp(-\beta \lambda_2) + a_2^* a_1 \exp(-\beta \lambda_1) \}, \quad (2.38)$$

$$\xi_i^* = \frac{1}{Z_i} \{ d_2^* d_1 \exp(-\beta \lambda_4) + c_2^* c_1 \exp(-\beta \lambda_3) \}, \quad (2.39)$$

$$D_i = \frac{1}{Z_i} \{ |b_2|^2 \exp(-\beta \lambda_2) + |a_2|^2 \exp(-\beta \lambda_1) \}. \quad (2.40)$$

Zauważmy, że stałe C_i (określone wzorem (2.11)) są nieistotne przy obliczaniu średnich.

Oba sposoby obliczania średnich oczywiście dają te same wyniki, jednak przekształcenie z jednej postaci w drugą może nie być proste. Dlatego pierwszy sposób ich liczenia ze wzorów (2.35) wydaje się bardziej użyteczny i praktyczny.

Należy pamiętać, że po zastosowaniu (2.9) relacje (2.35) czy (2.36)–(2.39) są równaniami nieliniowymi, z których wyznaczamy jako rozwiązanie następujące wartości średnich: $n_i = n_{i,r}$, $m_i = m_{i,r}$, $\Delta_i^* = \Delta_{i,r}^*$ oraz $\xi_i^* = \xi_{i,r}^*$. Z równań (2.29)–(2.33) oraz (2.9) możemy wyznaczyć wartość potencjału $\Omega_{MF,r}$, gdy układ znajduje się w fazie, w której po-

szczególne średnie wynoszą $n_{i,r}$, $m_{i,r}$, $\Delta_{i,r}^*$ oraz $\xi_{i,r}^*$.

Większość wyników przedstawionych w dalszej części pracy będzie otrzymana w przybliżeniu VA, dlatego też, tam gdzie nie będzie to powodować nieporozumień, będziemy opuszczać zazwyczaj indeks „ MF ”.

2.3 Nierówność Bogolubowa i wyprowadzenie wariacyjne przybliżenia pola średniego

Wprowadzimy teraz ogólną nierówność dla dowolnego (uogólnionego) potencjału termodynamicznego Ω dowolnego układu termodynamicznego [97, 112], która została po raz pierwszy udowodniona w pracy [113], a następnie szczegółowo analizowana za pomocą formalizmu całek po trajektoriach [114].

Niech $\hat{H}$ będzie hamiltonianem pewnego układu. W takim przypadku (uogólniony) wielki potencjał kanoniczny Ω dla rozważanego definiujemy jako

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z, \text{ gdzie } Z = \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H})], \quad (2.41)$$

a ślad jest brany po pełnym układzie stanów (w odpowiedniej dla rozważanego układu przestrzeni stanów), $\beta = 1/(k_B T)$, k_B — stała Boltzmanna, T — temperatura w skali bezwzględnej.

Niech hamiltonian $\hat{H}$ układu rozkłada się na dwie części

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1. \quad (2.42)$$

$\hat{H}_0$ zazwyczaj wybieramy tak, aby możliwe było obliczenie odpowiadającej mu sumy stanów, ale w ogólności do dalszego dowodu nie jest to konieczne. Okazuje się, że zachodzi następująca relacja (zwana nierównością Bogolubowa) [97, 112]:

$$\Omega \leq \Omega_0 + \langle \hat{H}_1 \rangle_0, \quad (2.43)$$

gdzie Ω jest pewnym potencjałem termodynamicznym zdefiniowanym za pomocą (2.41) i obliczonym dla rozkładu prawdopodobieństwa opisywanego przez $\hat{H}$. Natomiast

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \ln Z_0, \text{ gdzie } Z_0 = \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_0)] \quad (2.44)$$

jest tym samym potencjałem termodynamicznym co Ω , ale obliczonym dla rozkładu praw-

dopodobieństwa opisywanego przez $\hat{H}_0$, natomiast

$$\langle \hat{H}_1 \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \text{Tr} [\exp(-\beta \hat{H}_0) \hat{H}_1] \quad (2.45)$$

oznacza średnią termodynamiczną z $\hat{H}_1$ dla rozkładu prawdopodobieństwa opisywanego przez $\hat{H}_0$ (powyższy wzór definiuje średnią $\langle \hat{A} \rangle_0$ dla dowolnego operatora $\hat{A}$ dla rozkładu prawdopodobieństwa opisywanego przez $\hat{H}_0$).

Nierówność Bogolubowa (2.43) jest bardzo pomocna, ponieważ możemy określić górną granicę Ω_{max} dla potencjału Ω układu ($\Omega \leq \Omega_{max}$).

Zauważmy, że to jaki potencjał termodynamiczny Ω należy rozważać w konkretnej sytuacji fizycznej zależy od warunków panujących w danym układzie, czyli od zdefiniowanego dla niego hamiltonianu i przestrzeni stanów (tj. rozkładu termodynamicznego). Na przykład gdy rozważamy układ przy ustalonej liczbie cząstek (rozkład kanoniczny), to potencjałem tym jest energia swobodna (ona jest związana z sumą stanów w tym rozkładzie relacją podobną do (2.41)). W dalszej części pracy będziemy rozważać układ o zmiennej liczbie cząstek z hamiltonianem określonym (2.6) (wielki rozkład kanoniczny, potencjałem jest tutaj wielki potencjał termodynamiczny związany z wielką sumą stanów relacją (2.41)).

Powyższą nierówność zastosujemy do $\hat{H}$ określonego wzorem (2.6). Najbardziej ogólna postać hamiltonianu, który rozkłada się na sumę funkcji poszczególnych operatorów (pseudo-)spinowych i który spełnia wymóg translacyjnej niezmienniczości, może być wyrażona za pomocą $4N$ parametrów: $\bar{\mu}_i$, $\bar{H}_i$ ($\bar{H}_i^*$), $\bar{B}_i^z$ oraz $\bar{B}_i$ ($\bar{B}_i^*$) dla każdego i w postaci

$$\hat{H}_0 = \sum_i \hat{H}_i^0, \quad (2.46)$$

gdzie $\hat{H}_i^0$ określone jest wzorem

$$\hat{H}_i^0 = U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu_i \hat{n}_i - (\bar{H}_i^* \hat{\rho}_i^- + \bar{H}_i \hat{\rho}_i^+) - \bar{B}_i^z \hat{s}_i^z - (\bar{B}_i^* \hat{s}_i^- + \bar{B}_i \hat{s}_i^+), \quad (2.47)$$

którego postać jest identyczna z (2.8). Pamiętajmy jednak, że w obecnym rozumowaniu nie zakładaliśmy występowania relacji (2.9) i tego nie robimy. Możemy powtórzyć procedurę z Rozdziału 2.2 w celu znalezienia Ω_0 jako funkcji $\{\bar{\mu}_i, \bar{H}_i, \bar{B}_i^z, \bar{B}_i\}_{i=1}^{i=N}$ (por. (2.34) z $C_i = 0$, gdzie λ_i^k są określone przez (2.15)–(2.16)).

Przyjmując, że $\hat{H}_1 = \hat{H} - \hat{H}_0$, możemy wyznaczyć prawą stronę nierówności (2.43) jako funkcję wyłącznie $4N$ parametrów $\{\bar{\mu}_i, \bar{H}_i, \bar{B}_i^z, \bar{B}_i\}_{i=1}^{i=N}$

$$f(\{\bar{\mu}_i, \bar{H}_i, \bar{B}_i^z, \bar{B}_i\}_{i=1}^{i=N}) = \Omega_0 + \langle \hat{H}_1 \rangle_0. \quad (2.48)$$

Zauważmy, że średnie iloczynu $\langle \hat{A}_i \hat{B}_j \rangle_0$ przy liczeniu $\langle \hat{H}_1 \rangle_0$ możemy zastąpić przez iloczyn średnich $\langle \hat{A}_i \rangle_0 \langle \hat{B}_j \rangle_0$, gdyż średnie na różnych węzłach są zmiennymi niezależnymi w rozkładzie odpowiadającym $\hat{H}_0$. Średnie te, tj. $\bar{n}_j = \langle \hat{n}_j \rangle_0$, $\bar{m}_j = \langle \hat{s}_j^z \rangle_0$, $\bar{\Delta}_j^* = \langle \hat{\rho}_j^+ \rangle_0$ oraz $\bar{\xi}_j^* = \langle \hat{s}_j^+ \rangle_0$ (liczone w rozkładzie odpowiadającym H_0 , por. (2.45)), jako funkcje parametrów $\{\bar{\mu}_i, \bar{H}_i, \bar{B}_i^z, \bar{B}_i^*\}_{i=1}^{i=N}$ wyrażają się wzorami, których forma jest podobna do (2.36)–(2.39).

Można pokazać, w ten sam sposób jak w Rozdziale 6.4 z książki [97], że w minimum funkcji f (zdefiniowanej wzorem (2.48)) ze względu na $\{\bar{\mu}_i, \bar{H}_i, \bar{B}_i^z, \bar{B}_i^*\}_{i=1}^{i=N}$, to jest przy warunkach:

$$\frac{\partial f}{\partial \bar{\mu}_i} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \bar{H}_i} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \bar{B}_i^z} = 0, \quad \frac{\partial f}{\partial \bar{B}_i^*} = 0 \quad (2.49)$$

dla każdego i zachodzą związku

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_{i,min} &= -E_i + \mu - \sum_{j \neq i} W_{ij} \bar{n}_{j,min}, \\ \bar{H}_{i,min}^* &= 2 \sum_{j \neq i} I_{ij} \bar{\Delta}_{j,min}^*, \\ \bar{B}_{i,min}^z &= 4 \sum_{j \neq i} J_{ij}^z \bar{m}_{j,min} + B^z, \\ \bar{B}_{i,min}^* &= 2 \sum_{j \neq i} J_{ij}^{xy} \bar{\xi}_{j,min}^* + B^{xy}, \end{aligned} \quad (2.50)$$

które są analogiczne do związków (2.9), przy czym $\bar{n}_{j,min} = \langle \hat{n}_j \rangle_0$, $\bar{m}_{j,min} = \langle \hat{s}_j^z \rangle_0$, $\bar{\Delta}_{j,min}^* = \langle \hat{\rho}_j^+ \rangle_0$ oraz $\bar{\Omega}_{j,min}^* = \langle \hat{s}_j^+ \rangle_0$ (w sposób jawny średnie te wyrażają się wzorami (2.36)–(2.39) z $\bar{\mu}_{i,min}, \bar{H}_{i,min}^*, \bar{B}_{i,min}^z, \bar{B}_{i,min}^*$). Ponadto w swoim minimum (lokalnym) funkcja f przyjmuje minimalną wartość f_{min} , która wynosi

$$f_{min} = f(\{\bar{\mu}_{i,min}, \bar{H}_{i,min}, \bar{B}_{i,min}^z, \bar{B}_{i,min}^*\}_{i=1}^{i=N}) = \Omega_{MF,r}, \quad (2.51)$$

gdzie $\Omega_{MF,r}$ jest określona wzorami (2.29)–(2.33) oraz (2.9).

Z powyższej dyskusji wynika więc, że potencjał $\Omega_{MF,r}$ otrzymany w przybliżeniu pola średniego (wyprowadzony w Rozdziale 2.2, przybliżony hamiltonian układu $\hat{H}_{MF}$ — wzory (2.7)–(2.9), w którym średnie wyznaczone są np. z układu równań (2.36)–(2.39)) jest najlepszym górnym ograniczeniem rzeczywistej wartości potencjału Ω (hamiltonian układu $\hat{H}$ — wzór (2.6)) z potencjałem Ω_0 odpowiadającemu niezależnym węzłom (hamiltonian układu $\hat{H}_0$ — wzory (2.46)–(2.47)). Możemy więc zapisać, że

$$\Omega \leq \Omega_{MF,r} = f_{min}. \quad (2.52)$$

Widzimy więc, że w przypadku gdy układ $4N$ równań postaci (2.36)–(2.39) ma M rozwiązań $\{n_{i,r,k}, m_{i,r,k}, \Delta_{i,r,k}^*, \xi_{i,r,k}^*\}_{k=1}^{k=M}$ ($i = 1, \dots, N$) dla których wartości potencjału Ω_{MF} wynoszą odpowiednio $\{\Omega_{MF,r,k}\}$ (tj. w przypadku gdy funkcja f ma kilka (M) minimów lokalnych) należy wybrać rozwiązanie odpowiadające najmniejszej war-

tości $\Omega_{MF,r} = \text{Min} \left\{ \left\{ \Omega_{MF,r,k} \right\}_{k=1}^{k=M} \right\}$ (należy wybrać rozwiązanie odpowiadające minimum globalnemu funkcji f). Rozwiązanie to, będące minimum globalnym funkcji f , odpowiada fazie stabilnej, natomiast pozostałe, odpowiadające minimom lokalnym funkcji f są związane z fazami metastabilnym. Podkreślimy, że rozwiązania układu (2.36)–(2.39) mogą odpowiadać również maksimum lokalnym bądź punktom siodłowym funkcji f (fazy niestabilne). W fazach stabilnych i metastabilnych muszą też zachodzić zależności wynikające z warunków dostatecznych na istnienie minimum lokalnego (warunki stabilności termodynamicznej, np. $\partial\mu/\partial n > 0$).

2.4 Uwagi dotyczące zastosowanego przybliżenia i metod numerycznych

Zauważmy, że zastosowanie dla wyrazów międzywęzłowych rozszczepienia MFA zależnego od węzła (zaprezentowanego powyżej w Rozdziale 2) pozwala na analizę układów niejednorodnych (rozumianych jako np. $n_i \neq n_j$ dla pewnych $i \neq j$, przy czym w układzie występuje pewna symetria translacyjna — dana konfiguracja na węźle powtarza się cyklicznie na sieci, można wyróżnić kilka różnych rodzajów węzłów) oraz stwarza pewne możliwości do badania układów o różnym rozmiarze: nano- i mezoskopowych.

Należy podkreślić fakt, że w stosowanym przybliżeniu wariacyjnym wyraz jednowęzłowy U jest traktowany ściśle, zatem otrzymane wyniki i główne konkluzje dla ewolucji właściwości termodynamicznych badanych w dalszej części pracy modeli (określonych za pomocą równań (3.1), (4.1) oraz (4.42)) wraz z U powinny być wiarygodne dla dowolnego U . Przybliżenie MFA użyte dla wyrazu międzywęzłowego jest najlepiej uzasadnione w przypadku gdy oddziaływania międzywęzłowe X_{ij} (czyli I_{ij} , W_{ij} , J_{ij}^{xy} oraz J_{ij}^z) są dalekozasięgowo lub liczba najbliższych sąsiadów z jest względnie duża. Powtórzmy jeszcze raz, że otrzymane za pomocą przybliżenia wariacyjnego VA wyniki są rezultatami ścisłymi w granicy $d \rightarrow +\infty$, gdzie przybliżenie MFA dla krótkozasięgowych oddziaływań międzywęzłowych X (ograniczonych do najbliższych sąsiadów) jest przybliżeniem ścisłym (przy odpowiednim skalowaniu oddziaływania z wymiarem układu d , $X = X^*/d$, X^* — stała o dowolnym znaku) [8–12, 115]. W takim przypadku wystarczy rozważać uporządkowania dwupodsieciowe na sieciach dwudzielnych (ich szczegółowa definicja przedstawiona jest w Rozdziale 4.1.1). Obejmują one fazy z możliwym przeciwległym uporządkowaniem pseudospinów na sąsiednich węzłach — fazy typu „antyferro” oraz różne fazy mieszane. Dla oddziaływań typu „ferro”, tj. $W < 0$, $I > 0$, $J^z > 0$ oraz $J^{xy} > 0$ wystarczy rozważać fazę, w której średnie (2.36)–(2.39) na każdym węźle, odpowiednio, będą takie same. Ponadto przybliżenie wariacyjne daje wyniki ścisłe w granicy termodynamicznej dla oddziaływania międzywęzłowego o nieskończonym zasięgu ($X_{ij} = (1/N)X^*$ dla dowolnych

i i j) niezależnie od wymiarowości układu $1 \leq d \leq +\infty$, gdy oddziaływania te są typu „ferro”. W przypadku oddziaływań X_{ij} dalszego zasięgu typu „antyferro”: tj. $W_{ij} > 0$, $I_{ij} < 0$, $J_{ij}^z < 0$ oraz $J_{ij}^{xy} < 0$ — zachodzi to już dla oddziaływań pomiędzy następnymi (drugimi) najbliższymi sąsiadami — sytuacja nie jest tak oczywista i konieczne może być rozważenie np. uporządkowań czteropodsieciowych w celu znalezienia ścisłego rozwiązania modelu w granicy $d \rightarrow +\infty$ [107, 108, 116, 117]. Niemniej z takim przypadkiem nie mamy do czynienia w dalszych częściach pracy.

Znaleziony układ $4N$ równań nieliniowych postaci (2.36)–(2.39) można w ogólnym przypadku rozwiązać tylko numerycznie. Oczywiście konieczne jest ograniczenie liczby znajdujących różnych średnich i nałożenia na nie pewnych warunków (np. w pracy rozważamy maksymalnie dwa rodzaje węzłów: średnie danego operatora na wszystkich węzłach danego rodzaju są takie same — uporządkowania dwupodsieciowe na sieciach dwudzielnych; prowadzi to i tak do rozwiązywania w ogólnym przypadku układu ośmiu równań). Wyznaczenie analityczne minimów funkcji (2.48) w nieuwikłanej postaci jest także niemożliwe. Jawna postać równań, które są rozwiązywane dla danego modelu, jest podana w rozdziałach dotyczących odpowiedniego modelu. Podobnie sprawa ma się z równaniami dla stanów z separacją fazową wyprowadzonych w Rozdziale 1.4.3, które też trzeba rozwiązywać numerycznie.

Obliczenia numeryczne w niniejszej pracy zostały wykonane zarówno za pomocą programów autorskich napisanych w języku C/C++ [118] przy zastosowaniu algorytmów i kodów źródłowych zaczerpniętych z [119, 120] oraz przy pomocy pakietu Mathematica [121]. Rozwiązania (układów) równań nieliniowych (wielu zmiennych) znajdowano za pomocą uogólnionej metody Newtona-Raphsona. Do wyznaczania minimum funkcji jednej zmiennej stosowano metodę Brent’a, która wykorzystuje interpolację paraboliczną. Minima funkcji wielu zmiennych znajdowano przy pomocy zmodyfikowanej metody simpleksów.

Prosty model nadprzewodnika z całką przeskoku pary

Struktura zawartości Rozdziału 3 przedstawia się następująco:

- W Rozdziale 3.1 wprowadzono badany model nadprzewodnika z całką przeskoku pary (podano równania otrzymane w przybliżeniu VA, omówiono jego właściwości).
- Rozdział 3.2 jest poświęcony szczegółowej analizie modelu w przypadku braku zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$). Dokonujemy tutaj szczegółową analizę stanu podstawowego ($T = 0$) modelu za pomocą różnych metod uzyskując wyniki dla sieci o różnych wymiarach i strukturze, a także badamy własności modelu w skończonych temperaturach ($T > 0$) w przybliżeniu wariacyjnym — zawartość pracy [15].
- W Rozdziale 3.3 analizujemy wpływ pola magnetycznego ($B \neq 0$) na zachowanie się fazy nadprzewodzącej w rozważanym modelu (zarówno dla $T = 0$ jak i dla $T > 0$). Wyniki zostały opublikowane w pracy [16].
- Rozdział 3.4 dotyczy faz metastabilnych w badanym modelu (przypadki $B = 0$ oraz $B \neq 0$). Rezultaty te opublikowano w pracach [17, 18].
- Rozdział 3.5 stanowi podsumowanie tej części pracy i zawiera końcowe uwagi dotyczące badanego modelu.

3.1 Hamiltonian modelu i podstawowe równania

Model Penson-Kolba-Hubbarda (PKH) jest jednym z koncepcyjnie najprostszych modeli, za pomocą którego można badać nadprzewodnictwo w układach wąskopasmowych z krótkozasięgowym, prawie nieopóźnionym parowaniem [122–130]. Model ten uwzględnia międzywęzłowe oddziaływanie elektronowe (oddziaływanie przeskoku par I), które odpowiada za formowanie par elektronowych i ich kondensację. Jego efekty istotnie różnią się od efektów przyciągającego $U < 0$ w modelu Hubbarda [7, 71, 72, 76, 77]. Z powodu

złożoności modelu PKH do tej pory nie udało się otrzymać ścisłych wyników dla tego modelu w ogólnym przypadku (oczywiście dla szczególnych przypadków wyniki takie daje się uzyskać). W tym rozdziale przede wszystkim zaprezentujemy ścisłe wyniki w granicy $d \rightarrow +\infty$ (przybliżenie VA) dla granicy atomowej ($t_{ij} = 0$) tego modelu. Ponadto zamieszczamy również rezultaty dla stanu podstawowego ($T = 0$, $t_{ij} = 0$) otrzymane za pomocą innych podejść (ścisłych i przybliżonych) dla sieci o skończonych wymiarach ($d \leq 3$).

Analizowany model może być rozważany jako prosty model nadprzewodnika z krótką długością koherencji, który jest uogólnieniem standardowego modelu nadprzewodnika z parowaniem lokalnym (tj. modelu bozonów z twardym rdzeniem na sieci [7, 131–134]) do przypadku skończonej energii wiązania pary (formalnie pomijamy międzywęzłowe oddziaływania kulombowskie, które uwzględnimy w Rozdziale 4.1, por. model (4.1)). Większość przedstawionych w niniejszym rozdziale wyników została opublikowana w czterech pracach [15–18].

Hamiltonian badanego modelu (nazywany dalej modelem U - I - B) jest postaci:

$$\hat{H} = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - I \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) - \mu \sum_i \hat{n}_i - B \sum_i \hat{s}_i^z, \quad (3.1)$$

gdzie stosujemy oznaczenia wprowadzone w Rozdziale 1.3 ($B \equiv B^z$; $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i\sigma}$, $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$, $\hat{\rho}_i^+ = (\hat{\rho}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger$, $\hat{s}_i^z = (1/2)(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$). W modelu tym elektrony mogą przemieszczać się pomiędzy (najbliższymi) węzłami sieci wyłącznie jako lokalna para (złożona z dwóch elektronów o przeciwnych spinach). Ruch ten jest związany z występowaniem w hamiltonianie wyrazu międzywęzłowego wymiennego oddziaływania ładunkowego (I jest całą przeskoką pary). Przyjmujemy w dalszym ciągu pracy, że $B > 0$. Założenie to nie zmniejsza ogólności zawartych w niniejszym rozdziale rozważań. Definiuje ono jedynie kierunek magnetyzacji, gdy jest ona niezerowa (por. także (3.7)). Wszystkie otrzymane niżej wyrażenia są zapisane dla dowolnego znaku B .

Model (3.1) wykazuje symetrię cząstka-dziura [7, 15, 135, 136], dlatego też otrzymane diagramy fazowe zazwyczaj będą prezentowane w zakresach $\bar{\mu} = \mu - U/2 < 0$ i $0 \leq n \leq 1$. Wzory określające relacje transformacyjne dla poszczególnych wielkości termodynamicznych są przedstawione m. in. w [15].

W reprezentacji operatorów pseudospinowych (1.11) hamiltonian (3.1) możemy zapisać jako:

$$\hat{H} = 2U \sum_i (\hat{\rho}_i^z)^2 - I \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) - \bar{\mu} \sum_i (2\hat{\rho}_i^z + 1) - B \sum_i \hat{s}_i^z - NU/2, \quad (3.2)$$

Jak już mówiliśmy w Rozdziale 1.3, oddziaływania U oraz I traktujemy jako efektywne, zakładając, że zawierają one wszystkie możliwe wkłady i renormalizacje. W tak ogólnym

przypadku należy rozważyć dowolne wartości i znaki tych parametrów modelu. Formalnie I jest jednym z nediagonalnych wyrazów oddziaływania kulombowskiego $I_{ij} = -U_{iij}$ [1, 137] i jest ono zazwyczaj ujemne $I < 0$. Niemniej jednak efektywne dodatnie oddziaływanie tego typu jest też możliwe ($I < 0$) [65–68]. Przykładowo może ono pochodzić od sprzężenia z fononami sieci krystalicznej [65, 66] lub na skutek hybrydyzacji w uogólnionym periodycznym modelu Andersona [67, 68].

Ferromagnetyczne uporządkowanie pseudospinów $\{\hat{\rho}_i\}$ w płaszczyźnie x - y odpowiada występowaniu fazy SS (nadprzewodnictwo z parowaniem typu s), podczas gdy antyferromagnetyczny porządek jest związany z fazą ηS (nadprzewodnictwo z parowaniem typu η). Niemniej jednak, w nieobecności zewnętrznego pola w kierunku płaszczyzny x - y sprzężonego z parametrem porządku (oraz I_{ij} z zasięgiem ograniczonym do najbliższych sąsiadów), model wykazuje symetrię pomiędzy przypadkami $I > 0$ oraz $I < 0$ (poza oczywistym przededefiniowaniem parametru porządku: $\Delta = \Delta_{SS} = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{\rho}_i^- \rangle$ dla $I > 0$ oraz $\Delta_{\eta S} = \frac{1}{N} \sum_i \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \langle \hat{\rho}_i^- \rangle$ dla $I < 0$, $\vec{Q}$ jest połową najmniejszego wektora sieci odwrotnej) dla sieci składających się z dwóch przenikających się podsieci (sieci dwudzielnych, np. sieć SC czy BCC). Z tego powodu w naszej analizie ograniczamy się do analizy przypadku $I > 0$, w którym może wystąpić jedynie ferromagnetyczny porządek pseudospinów w płaszczyźnie x - y w fazie nadprzewodzącej (faza SS). Należy podkreślić, że opisana powyżej symetria zostaje złamana przez wyraz związany z całką przeskoku pojedynczego elektronu $t_{ij} \neq 0$ [122, 123]. Szersza dyskusja tego problemu jest przedstawiona w Rozdziale 3.5 (por. także Rozdział 4.3).

Korzystając z wyników Rozdziału 2 (ograniczenie do rozważania wyłącznie fazy SS, $\Delta_i = \Delta$ oraz $n = n_i$ dla każdego i) wyrażenie na wielki potencjał termodynamiczny ω (na węzeł) dla modelu (3.1) ma postać

$$\omega(\bar{\mu}) = \frac{\Omega}{N} = -\bar{\mu} + 2I_0|\Delta|^2 - \frac{1}{\beta} \ln(2\bar{Z}), \quad (3.3)$$

gdzie

$$\bar{Z} = \cosh\left(\beta\sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0\Delta|^2}\right) + \exp\left(\frac{\beta U}{2}\right) \cosh\left(\frac{\beta B}{2}\right),$$

$\bar{\mu} = \mu - U/2$, $I_0 = zI$ oraz $\Delta^* = (1/N) \sum_i \langle \hat{\rho}_i^+ \rangle$. Należy podkreślić, że w tym przypadku $\bar{Z}$ nie jest wielką sumą stanów Z ($Z = 2\bar{Z} \exp(\beta\bar{\mu})$). z standardowo oznacza liczbę najbliższych sąsiadów. Energię swobodną $f = F/N = \omega + \mu n$ (na węzeł) otrzymujemy jako

$$f(n) = \bar{\mu}(n-1) + \frac{1}{2}Un + 2I_0|\Delta|^2 - \frac{1}{\beta} \ln(2\bar{Z}). \quad (3.4)$$

Warunki na parametr porządku $|\Delta|$ ($\frac{\partial \omega}{\partial |\Delta|} = 0$; okazuje się, że jest to minimum ω ze względu na $|\Delta|$ w przypadku ograniczenia do rozważania wyłącznie fazy SS — bez fazy

ηS) oraz na liczbę cząstek n ($n = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_i \rangle = -\frac{\partial \omega}{\partial \mu}$) mają następującą postać:

$$|\Delta| \left[\frac{1}{I_0} - \frac{\sinh(\beta \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2})}{\bar{Z} \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2}} \right] = 0, \quad (3.5)$$

$$\frac{\bar{\mu} \sinh(\beta \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2})}{\bar{Z} \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2}} = n - 1, \quad (3.6)$$

Równania (3.5)–(3.6) rozwiązujemy numerycznie dla $T \geq 0$ i otrzymujemy $|\Delta|$ oraz n jeśli μ jest ustalone, bądź $|\Delta|$ oraz μ gdy n jest ustalone. Są to rozwiązania dla faz jednorodnych. Oczywistym jest, że dla fazy SS parametr Δ jest wyznaczony z przyrównania do zera wyrażenia w nawiasie kwadratowym po lewej stronie równania (3.5). Powtórzmy raz jeszcze, że w celu otrzymania równań dla przypadku $I < 0$ (faworyzującym fazę ηS) należy w równaniach (3.5)–(3.6) dokonać zamiany $I_0 \rightarrow I_Q = -zI$ oraz $\Delta \rightarrow \Delta_Q$ (przy takiej zamianie struktura równań nie ulega zmianie).

Faza nadprzewodząca (SS) jest charakteryzowana przez niezerową wartość parametru porządku $|\Delta| \neq 0$, podczas gdy w fazie nieuporządkowanej (normalnej) (NO) mamy $|\Delta| = 0$. W przypadku modelu (3.1) faza NO jest izolatorem pod kątem wzbudzeń jednocząstkowych, w którym przeskok pojedynczego elektronu pomiędzy poszczególnymi węzłami sieci może nastąpić wyłącznie w wyniku wzbudzenia termicznego. W ogólności transport nośników ładunków jest dwucząstkowy (quasi „bozonowy”, ze skończoną energią wiązania takiego „bozonu”) i w przypadku gdy $n \neq 1$ lub $T > 0$ faza NO wykazuje właściwości metalu (bozonowego), tj. mówiąc kolokwialnie, przewodzi prąd. Jak zobaczymy poniżej, dla $n = 1$ i $T = 0$ faza NO jest izolatorem Motta (Rozdział 3.2.1). Zauważmy jednocześnie, że podejście VA (przybliżenie MFA) jest nieadekwatne do opisu właściwości fazy NO (dla $T > 0$) oraz wzbudzeń kolektywnych w fazie SS dla $d \leq 3$ (w przeciwieństwie do np. przybliżenia RPA).

Podkreśmy, że w całym niniejszym rozdziale, wszystkie granice fazowe, konieczne do skonstruowania kompletnego diagramu fazowego dla modelu (3.1) przy ustalonym μ (w przybliżeniu VA), zostały otrzymane numerycznie poprzez rozwiązanie układu równań (3.5)–(3.6) i porównanie wielkiego potencjału ω określonego wzorem (3.3) dla znalezionych rozwiązań (wybrano rozwiązanie odpowiadające najniższej wartości ω w przypadku, gdy układ miał więcej niż jedno rozwiązanie). W przypadku analizy przy ustalonym n porównujemy energie swobodne f określone przez (3.4). Należy także uwzględnić stany PS, których energia swobodna f_{PS} jest wyrażona przez (1.71).

Magnetyzacja m dla faz jednorodnych w przypadku modelu (3.1) może być otrzymana prosto jako

$$m = \langle \hat{s}_i^z \rangle = -\frac{\partial \Omega}{\partial B} = \frac{1}{2\bar{Z}} \exp\left(\frac{\beta U}{2}\right) \sinh\left(\frac{\beta B}{2}\right). \quad (3.7)$$

Z powyższego wzoru wynika, że w obu fazach jednorodnych (SS, NO) magnetyzacja jest niezerowa ($m \neq 0$) dla dowolnych $B \neq 0$ oraz $T > 0$. Podobnie możemy wyznaczyć średnie podwójne obsadzenie węzłów D , zdefiniowane jako $D = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle$. W stosowanym przybliżeniu VA, wyrażenie na D przyjmuje postać:

$$D = \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle = \frac{n}{2} \left[1 - \frac{1}{n\bar{Z}} \exp\left(\frac{\beta U}{2}\right) \right], \quad (3.8)$$

gdzie n i Δ wyznaczone z (3.5)–(3.6). Wprowadzamy także koncentrację lokalnie sparowanych elektronów, zdefiniowaną jako $n_p = 2D$ oraz stosunek $n_p/n = 2D/n$ (względna koncentracja par). Należy zauważyć, że D jest inną wielkością niż koncentracja kondensatu (koncentracja par elektronowych w kondensacie) $n_0 \approx |\langle \hat{\rho}^+ \rangle|^2 = |\Delta|^2$ (w przybliżeniu VA).

Przegląd dotychczasowych wyników

Do tej pory model (3.1) był intensywnie analizowany tylko w przypadku nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$). Po raz pierwszy model ten został zbadany za pomocą podejścia VA w celu analizy niestabilności izolatora Motta względem fazy nadprzewodzącej [115, 138], głównie dla przypadku półpełnego pasma ($n = 1$). Ponadto rozpatrzono wpływ diagonalnego nieporządku na temperatury krytyczne dla $U = 0$ i $n = 1$ [139], otrzymując satysfakcjonujący (pod względem jakościowym) opis kilku wyników eksperymentalnych dotyczących nadprzewodników amorficznych. Za pomocą podejścia VA wyznaczono diagramy fazowe dla modelu (3.1) jako funkcję koncentracji n (bez stanów z separacją faz) dla $B = 0$ [140, 141] oraz otrzymano pewne wyniki dla $B \neq 0$ [140].

Dopiero w pracach [15, 16] autora niniejszej rozprawy dokonano szczegółowej analizy diagramów fazowych zarówno w funkcji potencjału chemicznego μ oraz koncentracji n z jednoczesnym rozważaniem stanów z separacją faz dla $B = 0$ [15] jak i dla $B \neq 0$ [16]. Ponadto zbadano występowanie stanów metastabilnych w nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$) [17] oraz wpływ tego pola na te stany ($B \neq 0$) [18].

3.1.1 Pewne wyniki analityczne ($B \neq 0$)

Równania (3.5)–(3.6) w pewnych szczególnych przypadkach można rozwiązać analitycznie. Można otrzymać, że dla dowolnego n oraz T potencjał chemiczny $\bar{\mu} = \mu - U/2$

w fazach NO oraz SS wyraża się następującymi wzorami

$$\bar{\mu}_{NO} = \frac{U}{2} + \frac{1}{\beta} \ln \left[\frac{(n-1) \cosh\left(\frac{\beta B}{2}\right) + \sqrt{(n-1)^2 \cosh^2\left(\frac{\beta B}{2}\right) - n(n-2) \exp(-\beta U)}}{2-n} \right], \quad (3.9)$$

$$\bar{\mu}_{SS} = I_0(n-1). \quad (3.10)$$

Wyrażenie (3.9) otrzymujemy rozwiązując równanie (3.6) względem $\bar{\mu}$ przy $\Delta = 0$. Natomiast relację (3.10) otrzymujemy wyznaczając z równości (3.6) wyrażenie występujące w nawiasie kwadratowym we wzorze (3.5).

Z układu (3.5)–(3.6) możemy także wyznaczyć wyrażenie analityczne na temperaturę T_{SS} przemiany ze stanu SS do stanu NO (ściśle mówiąc niekoniecznie jest to temperatura przemiany pomiędzy fazami stabilnymi, może być ona związana także z przemianą pomiędzy fazami metastabilnymi lub niestabilnymi, czego tutaj nie rozstrzygamy). Zakładamy, że przemiana ta jest przemianą drugiego rodzaju (ciągłą) oraz że stany z separacją faz nie występują. Przechodząc do granicy $\Delta \rightarrow 0$ i korzystając z reguły de l'Hospitala, z równań (3.5) i (3.6) otrzymujemy ostatecznie wyrażenie na temperaturę T_{SS} przemiany SS–NO postaci

$$\exp\left(\frac{\beta_{SS}U}{2}\right) \cosh\left(\frac{\beta_{SS}B}{2}\right) = \frac{\sinh(\beta_{SS}|\bar{\mu}_{SS}|)}{|n-1|} - \cosh(\beta_{SS}\bar{\mu}_{SS}), \quad (3.11)$$

gdzie $\beta_{SS} = 1/(k_B T_{SS})$ [15, 140]. Z tego równania dla danych parametrów modelu (μ , U , B) otrzymujemy temperaturę przemiany T_{SS} . Wszystkie wyznaczone w Rozdziałach 3.2 oraz 3.3 granice fazowe drugiego rodzaju SS–NO spełniają równanie (3.11).

Z powyższego równania w pewnych przypadkach granicznych możemy analitycznie wyznaczyć T_{SS} jako funkcję n bądź $\bar{\mu}$, ponieważ na linii przemiany drugiego rodzaju SS–NO zachodzi relacja (3.10). Gdy $B = 0$ dla $U \rightarrow -\infty$ oraz $U = 0$ ($n < 1$) mamy

$$\frac{k_B T_{SS}}{I_0}(U \rightarrow -\infty) = 2 \frac{k_B T_{SS}}{I_0}(U = 0) = 2(n-1) \ln^{-1}\left(\frac{n}{2-n}\right). \quad (3.12)$$

Linia punktów trójkrytycznych jest opisana za pomocą następującego wyrażenia [140]

$$\operatorname{tgh}(\beta_T I_0 |n-1|) = \left(\frac{1}{|n-1| \beta_T I_0} + |n-1| \right)^{-1}, \quad (3.13)$$

gdzie $\beta_T = 1/k_B T_T$. Z równania tego dla danego $\bar{\mu}$ lub n możemy wyznaczyć temperaturę T_T , w której jest położony punkt trójkrytyczny **T**. Następnie znając np. U możemy znaleźć jego współrzędną na osi B korzystając z (3.11), gdyż punkt **T** leży na końcu linii drugiego rodzaju SS–NO.

3.2 Diagramy fazowe modelu i charakterystyki termodynamiczne w nieobecności pola magnetycznego ($B = 0$)

W niniejszym rozdziale przeanalizujemy model (3.1) w nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$) — tj. model $U-I$. Analizy wpływu zewnętrznego pola B na zachowanie badanego modelu dokonamy natomiast w Rozdziale 3.3.

3.2.1 Stan podstawowy ($T = 0$)

Obecnie zaczniemy od zbadania stanu podstawowego ($T = 0$) modelu (3.1) w nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$).

W przypadku braku w hamiltonianie (3.1) wyrazu kinetycznego dla pojedynczych elektronów ($t_{ij} = 0$), parzystość liczby cząstek na dowolnym węźle jest dobrą liczbą kwantową [122]. Dzięki temu można rozłożyć przestrzeń własną hamiltonianu (3.1) na części charakteryzowane poprzez liczbę obsadzeń na każdym węźle. W takim przypadku rozważany układ może składać się tylko z dwóch rodzajów segmentów:

- (i) segmentów „nieparzystych”, w których występuje nieparzysta ilość obsadzeń na każdym węźle, tj. $n_i = 1$ (można powiedzieć, że jest to podprzestrzeń z wykluczonymi podwójnymi obsadzeniami, podprzestrzeń stanów jednowęzłowych: $\{|\uparrow\rangle_i, |\downarrow\rangle_i\}$) oraz
- (ii) segmentów „parzystych”, w których występuje parzysta liczba obsadzeń na każdym węźle, tj. $n_i = 0$ lub $n_i = 2$ (podprzestrzeń z wykluczonymi pojedynczymi obsadzeniami, mogą wystąpić lokalne pary, podprzestrzeń stanów jednowęzłowych: $\{|0\rangle_i, |\uparrow\downarrow\rangle_i\}$).

W przypadku gdy $I \neq 0$ granica pomiędzy powyższymi dwoma rodzajami segmentów posiada pewną (dodatnią) energię, zatem w granicy termodynamicznej stan podstawowy będzie albo pojedynczym nieskończonym segmentem typu (i) albo pojedynczym nieskończonym segmentem typu (ii) (dla ustalonego μ). Tylko w przypadku, gdy wielki potencjał na węzeł (tj. potencjał chemiczny μ) w obu segmentach będzie równy, występuje możliwość współistnienia obu typów segmentów w granicy $N \rightarrow +\infty$. Objawia się to nieciągłą przemianą na diagramie stanu podstawowego.

Sytuacja jest inna, gdy ustalona jest koncentracja cząstek n . W takim przypadku stan PS może wystąpić w skończonym zakresie n . Niech energia pojedynczego połączenia (wiązania między dwoma węzłami z dwóch segmentów różnego rodzaju) pomiędzy

dwoma typami segmentów wynosi E_I . Jeśli liczba połączeń międzywęzłowych będzie rosnąć jak N^γ (gdzie $\gamma < 1$), wkład do całkowitej energii swobodnej na węzeł od granic pomiędzy segmentami będzie wynosił $N^\gamma E_I/N = E_I/N^{1-\gamma}$ i będzie on zanikał w granicy termodynamicznej (ponieważ $1 - \gamma > 0$).

W podprzestrzeni (i) z wykluczonymi podwójnie obsadzonymi węzłami (przez elektrony dla $n < 1$ lub przez dziury dla $n > 1$) iloczyn $\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- = 0$ dla dowolnego $i \neq j$, co oznacza, że wyraz przeskoku pary I nie daje żadnego wkładu. Efektywny hamiltonian (3.1) w tym przypadku ($B = 0$) przybiera formę $\hat{H}_I = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_i \hat{n}_i$ i obliczenie w $T = 0$ wielkiego potencjału $\omega_{NO} = \langle \hat{H}_I \rangle / N$ oraz energii $E_{NO} = \langle \hat{H}_I + \mu \sum_i \hat{n}_i \rangle / N$ jest oczywiste.

Jako wynik, ze wzorów (3.3) i (3.6) dla ustalonego μ i $\beta \rightarrow +\infty$, otrzymujemy:

$$\begin{aligned}\omega_{NO}^a(\bar{\mu}) &= 0 & (n = 0, \text{NO} — „pusty”), \\ \omega_{NO}^b(\bar{\mu}) &= -\bar{\mu} - \frac{U}{2} & (n = 1, \text{NO} — \text{faza Motta}), \\ \omega_{NO}^c(\bar{\mu}) &= -2\bar{\mu} & (n = 2, \text{NO} — „pełny”).\end{aligned}\tag{3.14}$$

Średnie obsadzenie węzłów może być tylko całkowite dla ustalonego μ , co może być intuicyjnie zrozumiane, gdy uwzględnimy fakt, że $\langle \hat{n}_i \rangle = 0, 1, 2$ oraz fakt, że każdy węzeł jest równoważny (nie ma żadnych oddziaływań pomiędzy różnymi węzłami w $\hat{H}_I$). Stan ω_{NO}^a (NO — „pusty”) jest stabilny względem stanu ω_{NO}^b (NO — faza Motta) jeśli $U < -2\bar{\mu}$ (oraz $\bar{\mu} < 0$), podczas gdy $\omega_{NO}^c < \omega_{NO}^b$ jeśli $U < 2\bar{\mu}$ (oraz $\bar{\mu} > 0$). Formalnie faza NO z $n = 0$ i $n = 2$ należą do podprzestrzeni (ii) — z wykluczonymi pojedynczymi obsadzeniami, niemniej jednak w tych dwóch szczególnych przypadkach wyraz przeskoku pary I także nie daje żadnego wkładu do energii.

Ze wzorów (3.4) i (3.6) w granicy $\beta \rightarrow +\infty$ ($B = 0$) otrzymujemy dla ustalonego n w fazie NO:

$$\begin{aligned}E_{NO}(n) &= 0, & \text{dla } n < 1 \quad (\bar{\mu} = -U/2), \\ E_{NO}(n) &= U(n - 1), & \text{dla } n > 1 \quad (\bar{\mu} = U/2), \\ E_{NO} &= 0, & \text{dla } n = 1 \quad (\bar{\mu} = 0).\end{aligned}\tag{3.15}$$

Taki stan podstawowy jest nieskończenie-krotnie zdegenerowany dla $N \rightarrow +\infty$ ze względu na spinowe i ładunkowe (związane z rozmieszczeniem cząstek) stopnie swobody. Dla $n \leq 1$ ($n > 1$), nN ($(2-n)N$, odpowiednio) węzłów jest pojedynczo obsadzonych przez elektrony (dziury) i spiny wszystkich cząstek są niezależne od siebie (tzn. nie są uporządkowane (ferro)magnetycznie). Moment magnetyczny na każdym (obsadzonym) węźle jest niezerowy i wynosi $\langle \hat{s}_i^z \rangle = 1/2$. Dla $n \neq 1$ nie występuje żaden porządek w rozkładzie cząstek, podczas gdy dla $n = 1$ pojawia się stan fazy Motta z jedną cząstką na węzeł (i losowym kierunkiem spinu na danym węźle). Uwzględnienie międzywęzłowych oddziaływań typu

spin-spin lub gęstość-gęstość może usunąć tę degenerację stanu podstawowego i wygenerować różne uporządkowania zarówno magnetyczne, jak i ładunkowe.

Zauważmy też, że dla $T = 0$ i $U > 0$ faza NO z $n < 1$ jest zdegenerowana ze stanem z separacją faz PS:NO/NO, w którym występują dwie domeny fazy NO z $n_- = 0$ oraz $n_+ = 1$ (dla $n > 1$ koncentracje w domenach wynoszą $n_- = 1$ oraz $n_+ = 2$). Jest to degeneracja ze względu na ładunkowe stopnie swobody (degeneracja makroskopowa, degeneracja ta jest usunięta dla $T > 0$). Jest to kolejny argument za tym, że możemy przyjąć, że faza NO z $n \neq 1$ należy również do podprzestrzeni (i) — „nieparzystej” (z wykluczonymi podwójnymi obsadzeniami), gdyż wyraz przeskoju pary I nie daje w tym przypadku żadnego wkładu do energii (formalnie do przestrzeni stanów jednowęzłowych dodajemy też stan $|0\rangle_i$). Niemniej jednak dyskusja ta jest zbędna gdy układ rozważamy przy ustalonym μ .

W podprzestrzeni (ii), w której wykluczone są pojedyncze obsadzenia węzłów, wartości własne operatorów ładunkowych wynoszą $\hat{\rho}_i^z = \pm 1/2$, $(\hat{\rho}_i^z)^2 = 1/4$ dla każdego węzła. Dlatego też, ze wzoru (3.2), efektywny hamiltonian dla tego przypadku przyjmuje następującą formę

$$\hat{H}_{II} = -I \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) - \bar{\mu} \sum_i (2\hat{\rho}_i^z + 1) \quad (3.16)$$

z warunkiem na liczbę cząstek (w języku pseudospinów — na magnetyzację w kierunku osi z) w postaci

$$\frac{1}{2}(n - 1) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{\rho}_i^z \rangle. \quad (3.17)$$

$\hat{H}_{II}$ ma formę modelu XY kwantowych spinów $S = 1/2$ w efektywnym zewnętrznym polu $\bar{\mu} = \mu - U/2$ w kierunku osi z , w którym magnetyzacja ma ustaloną wartość równą $(n - 1)/2$. Energia stanu podstawowego hamiltonianu (3.16) wyraża się wzorem

$$E_{SS}(n) = \frac{1}{N} \langle \hat{H}_{II} + \mu \sum_i \hat{n}_i \rangle = E_{XY}(n) + \frac{1}{2}Un, \quad (3.18)$$

gdzie $E_{XY}(n) = -\frac{I}{N} \langle \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) \rangle$. Wielki potencjał w tym przypadku przyjmuje postać

$$\omega_{SS}(\bar{\mu}) = E_{XY}(n(\bar{\mu})) - \bar{\mu}n(\bar{\mu}), \quad (3.19)$$

gdzie zostało podkreślone, że $\bar{\mu}$ jest zmienną niezależną.

Z poprzednich analiz [131, 132] wynika, że stan podstawowy modelu (3.16) wykazuje daleki porządek pseudospinów w płaszczyźnie x - y dla $d \geq 2$ wymiarowej sieci w całym zakresie koncentracji $0 \leq n \leq 2$. Dla $d = 1$ pojawiają się tylko korelacje w płaszczyźnie x - y krótkiego zasięgu [142]. Niemniej jednak, nawet małe oddziaływanie międzyłańcuchowe może indukować w tym przypadku porządek dalekiego zasięgu.

Faza SS występuje jeśli $E_{NO} > E_{SS}$ dla ustalonego n (jeśli $\omega_{NO} > \omega_{SS}$ dla ustalonego μ). W celu wyznaczenia granic fazowych pomiędzy fazą NO (równania (3.15) i (3.14)) oraz fazą SS (równania (3.18) i (3.19)) i określenia właściwości fazy SS dla różnych wymiarowości sieci i koncentracji elektronowej lub potencjału chemicznego, należy znaleźć rozwiązania modelu (3.16) w stanie podstawowym ($T = 0$).

Ponadto należy podkreślić, że w przypadku gdy układ jest rozpatrywany przy ustalonym n należy także rozpatrzyć stan PS:SS/NO z energią określoną wzorem (1.71), w którym jedna domena jest w fazie NO, a druga jest w fazie SS. W domenie NO $n_{NO} = 1$ (faza Motta z jednym elektronem na węzeł), podczas gdy koncentracja w domenie SS jest zależna od U/I_0 i od użytego podejścia (przybliżenia). Wynika to ze wzorów (3.14) oraz, jak zobaczymy poniżej, z rezultatów otrzymanych dla ustalonego μ .

3.2.1.1 Wynik ścisły dla jednowymiarowego łańcucha ($d = 1$)

Ścisłe rozwiązanie dla modelu (3.16) można otrzymać w $d = 1$ oraz $d = +\infty$. Dla $d = 1$ możemy użyć znanego ścisłego rozwiązania dla modelu XY w polu poprzecznym [142–147]. W takim przypadku energia stanu podstawowego (na węzeł) wynosi:

$$E_{XY}^{1D} = -2|I_0|\frac{1}{\pi} \sin \frac{\pi n}{2}, \quad (3.20)$$

gdzie $I_0 = 2I$ (gdyż $z = 2$). Ponieważ istnieje izomorfizm pomiędzy przypadkami ferromagnetycznym ($I > 0$) oraz antyferromagnetycznym ($I < 0$) dla modelu XY na sieciach naprzemiennych z oddziaływaniem ograniczonym do najbliższych sąsiadów [146, 147], wynik (3.20) jest taki sam dla obu znaków I . Na podstawie (3.18) oraz (3.20) mamy więc

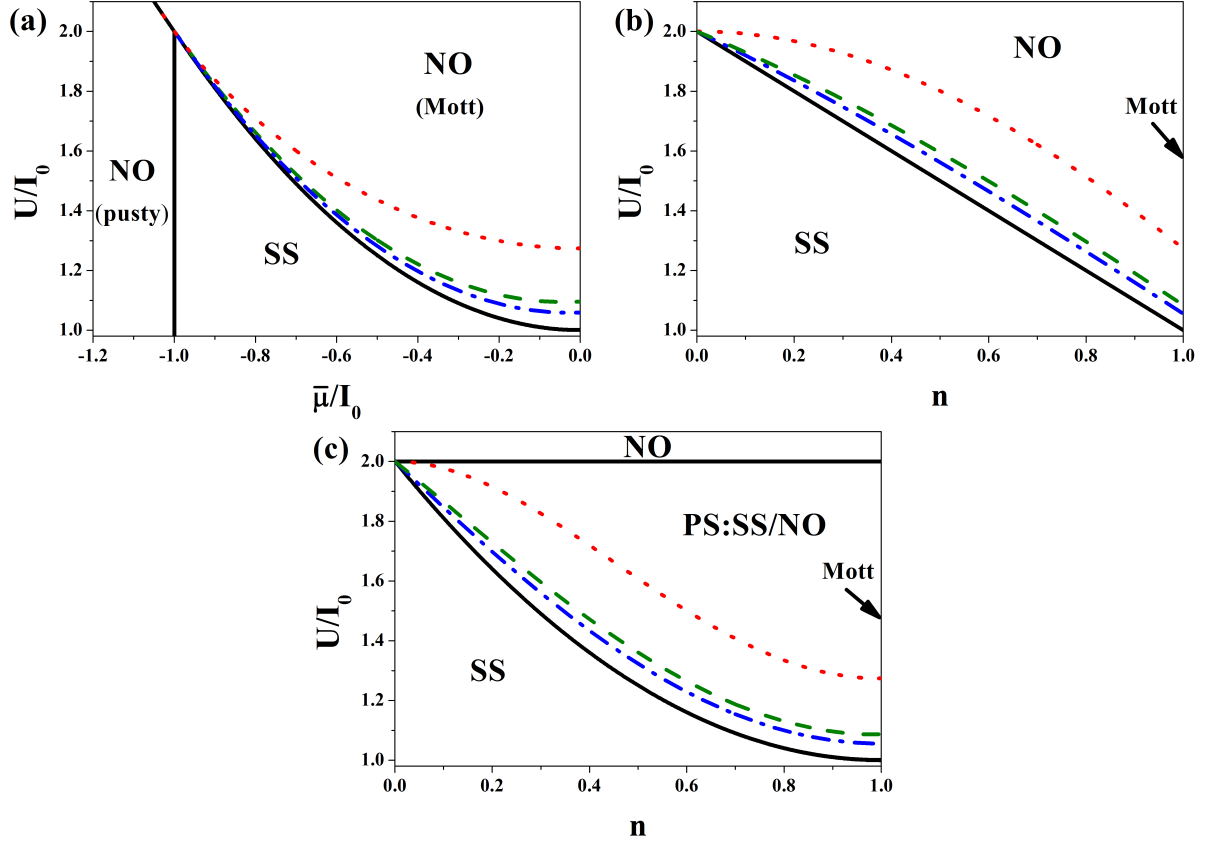
$$E_{SS}^{1D} = \frac{1}{2}Un - 2|I_0|\frac{1}{\pi} \sin \frac{\pi n}{2}. \quad (3.21)$$

Ścisłe wyrażenia na potencjał chemiczny μ oraz gęstość supercieczy j_s (parametr porządku krótkiego zasięgu) mają postacie

$$\bar{\mu}_{SS}^{1D} = \frac{\partial E_{SS}^{1D}}{\partial n} - \frac{1}{2}U = -|I_0| \cos \frac{\pi n}{2}, \quad (3.22)$$

$$j_s^{1D} = \left| \langle \hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_{i+1}^- \rangle \right| = \left| \langle \hat{\rho}_i^x \hat{\rho}_{i+1}^x + \hat{\rho}_i^y \hat{\rho}_{i+1}^y \rangle \right| = \frac{\partial E_{SS}^{1D}}{4\partial I} = \frac{1}{\pi} \sin \frac{\pi n}{2}, \quad (3.23)$$

gdzie $i + 1$ oznacza najbliższego sąsiada węzła i . Dla $I > 0$ (przypadek SS) w układzie występują korelacje ferromagnetyczne $\langle \hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_{i+1}^- \rangle > 0$, natomiast dla $I < 0$ (przypadek ηS) — antyferromagnetyczne — $\langle \hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_{i+1}^- \rangle < 0$. Z (3.22) wynika, że faza SS może występować w tylko zakresie $-1 < \bar{\mu}/|I_0| < 1$. Warunek stabilności (1.58) jest zawsze spełniony w fazie SS.



Rys. 3.1: Diagramy fazowe w stanie podstawowym dla modelu U - I : (a) w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ oraz (b) i (c) w funkcji n bez uwzględniania oraz z rozważaniem (odpowiednio) stanów z separacją faz. Linie kropkowane, przerywane, kreskowano-kropkowane oraz ciągłe oznaczają granice, odpowiednio, dla $d = 1$ (wynik ścisły), $d = 2$ (RPA, sieć kwadratowa), $d = 3$ (RPA, sieć prosta kubiczna) i $d \rightarrow +\infty$ (VA). Dla $n = 1$ faza NO (stan Motta) występuje powyżej końca linii PS-SS (panel (b)). Przemiana NO-SS dla $\bar{\mu}/I_0 = -1$ (panel (a)) jest ciągła, wszystkie pozostałe przemiany pomiędzy fazami jednorodnymi (panele (a), (b)) są nieciągłe.

Ponadto dla $|\bar{\mu}|/I_0 > 1$ model (3.16) wykazuje całkowite nasycenie w kierunku osi z (tj. $\langle \hat{\rho}_i^z \rangle = \pm 1/2$), co odpowiada fazie NO z $n = 0$ (dla $\bar{\mu}/I_0 < -1$) oraz $n = 2$ (dla $\bar{\mu}/I_0 > 1$) o energiach wyrażonych wzorami (3.14). Widzimy więc, że przybliżenie VA daje wyniki ściśle dla fazy NO przy ustalonym μ , mimo że podprzestrzeń (i) — segmentów „nieparzystych” — została formalnie rozszerzona o stan $|0\rangle_i$. A więc wyniki VA przy ustalonym n są również ściśle, ponieważ faza NO jest zdegenerowana ze stanem PS:NO/NO dla $T = 0$.

Na Rys. 3.1 przedstawiono diagramy fazowe stanu podstawowego: w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ (panel (a)) oraz w funkcji n : bez uwzględniania stanów z separacją faz (panel (b)) i z rozważaniem tych stanów (panel (c)). Dla $n = 1$ nie występuje separacja fazowa i faza NO Motta występuje dla $U/I_0 > 4/\pi$. Granice fazowe odpowiadające rozwiązaniu ścisłemu w $d = 1$ są oznaczone liniami kropkowanymi (jeśli różnią się one od otrzymanych za pomocą przybliżenia wariacyjnego). Dla faz jednorodnych mamy $\partial\mu/\partial n > 0$ w zakresie występowania stanu PS.

3.2.1.2 Przybliżenia wariacyjne (wynik ścisły w granicy $d \rightarrow +\infty$)

Dla sieci o wymiarach $1 < d < \infty$ nie ma ścisłych rozwiązań dla modelu (3.16) (poza LDE dla $d = 3$ [131, 132, 140] — por. Rozdział 3.2.1.4) i różne przybliżone podejścia są konieczne by znaleźć E_{SS} określone wzorem (3.18). Najprostszym z takich podejść jest podejście wariacyjne (VA), które dla $T = 0$ daje (graniczne przejście przy $\beta \rightarrow +\infty$ w równaniach (3.4)–(3.6) dla $\Delta \neq 0$:

$$E_{SS} = \frac{1}{2}Un - \frac{1}{2}|I_0|n(2 - n) \quad (3.24)$$

$$= \frac{1}{2}Un + \frac{1}{2}|I_0|(n - 1)^2 - \frac{I_0}{2},$$

$$|\Delta|^2 = j_s^{VA} = \frac{1}{4}n(2 - n), \quad (3.25)$$

oraz

$$\bar{\mu}_{SS} = -|I_0|(1 - n) \quad \left(n = 1 + \frac{\bar{\mu}}{|I_0|} \right). \quad (3.26)$$

Ponadto mamy

$$\omega_{SS} = -\frac{1}{8} \frac{(-2|I_0| - 2\mu - U)}{|I_0|}. \quad (3.27)$$

Równanie (3.26) implikuje, że faza SS może istnieć tylko w zakresie $-1 < \bar{\mu}/|I_0| < 1$. Zauważmy, że $n_p = 2D = n$, co oznacza, że wszystkie elektrony występujące w układzie są sparowane lokalnie w fazie SS w stanie podstawowym, podczas gdy skończona wartość $n' = n - 2n_0$ ($n_0 = |\Delta|^2$ — gęstość kondensatu) dla $T = 0$ wynika z faktu, że pary takie mają pewne właściwości bozonów z twardym rdzeniem [131] (por. właściwości i struktura operatorów $\hat{\rho}_i^\pm$).

Energia stanu PS dla $T = 0$ może być obliczona poprzez minimalizację wyrażenia (1.71). W domenie NO mamy $n_{NO} = 1$ (faza Motta), podczas gdy koncentracja n_{SS} w domenie SS jest zależna od U/I_0 i wynosi $n_{SS} = 1 \mp \sqrt{U/I_0 - 1}$ (dla $1 \leq U/I_0 \leq 2$). Odpowiada to linii przemiany nieciągłej na diagramie stanu podstawowego $U/I_0 - \bar{\mu}$ opisanej równaniem $(\bar{\mu}/I_0)^2 + 1 = U/I_0$.

Diagramy fazowe otrzymane za pomocą przybliżenia wariacyjnego są przedstawione na Rys. 3.1. Granice fazowe otrzymane w tym przybliżeniu zaznaczono liniami ciągłymi. Przemiana NO–SS dla $\bar{\mu}/I_0 = -1$ jest ciągła, wszystkie pozostałe przemiany pomiędzy fazami jednorodnymi są nieciągłe. Podobnie jak poprzednio dla faz jednorodnych otrzymujemy $\partial\mu/\partial n > 0$ w zakresie występowania stanu PS.

Dla sieci hiperkubicznej w $d = +\infty$ przybliżenie wariacyjne jest ścisłym podejściem dla modelu (3.1) (jak i dla modelu (3.16)). Oddziaływanie I musi być odpowiednio skalowane z wymiarem d ($I = I^*/d$, I^* — stała).

3.2.1.3 Przybliżenie RPA ($d = 2, 3$)

Wychodząc poza przybliżenie wariacyjne dla $1 < d < \infty$ sensownym podejściem jest przybliżenie faz przypadkowych (RPA) [131, 132, 148, 149]. Udowodniono, że przybliżenie to bardzo dobrze stosuje się do zagadnień kwantowego magnetyzmu i w pełni uwzględnia fluktuacje kwantowe, które mogą pełnić kluczową rolę w rozważanym układzie dla $d \leq 3$. Energia stanu podstawowego dla modelu (3.16) jest dana przez (3.18), gdzie $E_{XY}^{RPA}(n) = -\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} I_{\vec{k}} \langle \hat{\rho}_{\vec{k}}^+ \hat{\rho}_{\vec{k}}^- \rangle$. $\hat{\rho}_{\vec{k}}^{\pm}$ oraz $I_{\vec{k}}$ oznaczają, odpowiednio, przestrzenną transformatę Fouriera operatorów ładunkowych oraz całki przeskoku pary. Potencjał chemiczny jest wyznaczany ze związku $(n-1)/2 = (1/N) \sum_i \langle \hat{\rho}_i^z \rangle$.

Energia E_{XY}^{RPA} jest otrzymana za pomocą funkcji Greena przy użyciu twierdzenia spektralnego i zastosowaniu przybliżenia dla podłużnych funkcji korelacji [132]. W $T = 0$ otrzymuje się

$$E_{XY}^{RPA} = -\sin^2 \theta \left[\frac{R^2 I_0}{2} + \frac{R}{2N} \sum_{\vec{k}} I_{\vec{k}} \frac{B_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right] - (1 + \cos^2 \theta) \frac{R}{2N} \sum_{\vec{k}} I_{\vec{k}} \frac{A_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}, \quad (3.28)$$

gdzie $A_{\vec{k}} = R\epsilon_{\vec{k}}^0 + B_{\vec{k}}$, $B_{\vec{k}} = RI_{\vec{k}} \sin^2 \theta$, $E_{\vec{k}} = \sqrt{A_{\vec{k}}^2 - B_{\vec{k}}^2}$ jest spektrum wzbudzeń kolektywnych, $\epsilon_{\vec{k}}^0 = 2(I_0 - I_{\vec{k}})$, θ jest dane przez $\cos^2 \theta = (n-1)^2/R^2$ oraz długość pseudospinu R jest rozwiązaniem następującego układu równań samozgodnych

$$R^{-1} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{A_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} = 1 + 2\psi_0, \quad (3.29)$$

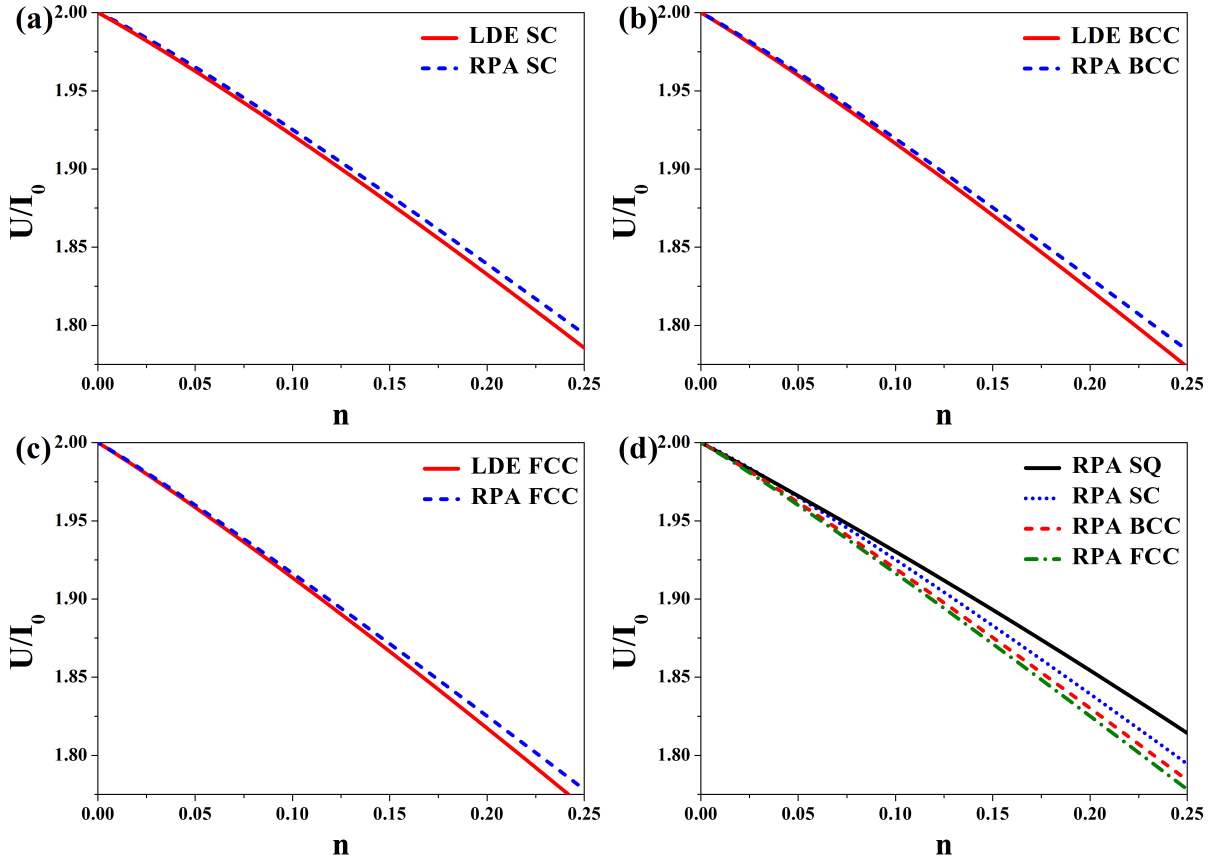
$$2\psi_0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{\epsilon_{\vec{k}}^0 + I_{\vec{k}} \sin^2 \theta}{\sqrt{(\epsilon_{\vec{k}}^0)^2 + 2I_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}}^0 \sin^2 \theta}} - 1 \right]. \quad (3.30)$$

Wynik odpowiadający przybliżeniu fal spinowych (SWA, ang. *spin wave approximation*) — będącemu rozwinięciem najniższego rzędu równania (3.29) — jest postaci $R = 1 - 2\psi_0$, gdzie $2\psi_0$ określone z (3.30) (por. także [133]).

Dla fazy SS spektrum $E_{\vec{k}}$ nie posiada przerwy i jest liniowe względem $|\vec{k}|$ dla małych $\vec{k}$. Otrzymujemy $E_{\vec{k} \rightarrow 0} = |\vec{k}|s$ z prędkością dźwięku s określoną jako $s = 2RIa\sqrt{z} \sin \theta$ ($\hbar = 1$).

Potencjał chemiczny w fazie SS w przybliżeniu RPA ma postać $\bar{\mu}_{SS}^{RPA} = I_0(n-1)$, co jest takim samym wynikiem jak w przybliżeniu wariacyjnym. Kwantowe poprawki do tego wyniku dla $\bar{\mu}_{SS}$ mogą być otrzymane podobnie jak w [132] i otrzymujemy

$$\bar{\mu}_{SS} = 2I_0 \left[\frac{n-1}{2} - \frac{\cos \theta}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{\gamma_{\vec{k}}(1 - \gamma_{\vec{k}})}{\epsilon_{\vec{k}}} \right], \quad (3.31)$$



Rys. 3.2: (a)–(c) Przebieg granicy SS–NO w funkcji n (bez uwzględniania stanów z separacją fazową) uzyskanej za pomocą metod RPA i LDE dla sieci SC (a), BCC (b) oraz FCC (c). Linie przerywane i ciągłe oznaczają, odpowiednio, wyniki RPA i LDE. Ponadto na panelu (d) zestawiono wyniki RPA otrzymane, idąc od góry, dla sieci SQ ($d = 2$) oraz SC, BCC i FCC ($d = 3$).

gdzie $\epsilon_{\vec{k}} = \sqrt{(1 - \gamma_{\vec{k}})^2 + \gamma_{\vec{k}}(1 - \gamma_{\vec{k}})\sin^2 \theta}$, $\gamma_{\vec{k}} = I_{\vec{k}}/I_0$.

Należy podkreślić, że oba przybliżenia, tj. zarówno RPA jak i SWA, dają bardzo podobne wyniki dla modelu (3.16) w stanie podstawowym [132, 133]. Otrzymane granice fazowe dla $d = 2$ (sieć kwadratowa, SQ) oraz dla $d = 3$ (sieć prosta (regularna) kubiczna, SC) zostały pokazane na Rys. 3.1, odpowiednio, za pomocą linii przerywanej oraz linii kropkowano-kreskowanej. Porównanie wyników RPA otrzymanych dla różnych sieci w $d = 2$ (SC) i $d = 3$ (sieć SC, sieć kubiczna przestrzennie centrowana — BCC oraz sieć kubiczna powierzchniowo centrowana — FCC) przedstawiono na Rys. 3.2(d) (granica SS–NO w funkcji n bez uwzględniania stanów z separacją fazową). Z Rys. 3.2(d) widać, że region stabilności fazy SS kurczy się wraz ze wzrostem liczby najbliższych sąsiadów w sieci.

3.2.1.4 Rozwinięcie dla niskich koncentracji dla sieci trójwymiarowych ($d = 3$)

W pracach [131, 132] zostało otrzymanych kilka ścisłych wyników dla stanu podstawowego modelu bozonów z twardym rdzeniem rozważanego dla różnych rodzajów sieci

o wymiarze $d = 3$. W tym celu użyto systematycznego rozwinięcia w granicy niskich koncentracji (ang. *low-density expansion*, LDE), które korzysta ze ścisłego wyrażenia na amplitudę rozpraszania dwuciałowego. Transformując wyniki pracy [132] na nasz przypadek — model (3.1) (bądź (3.16)) — w granicy $n \rightarrow 0$ otrzymujemy następujące ścisłe wyniki. Energia E_{SS}^{LDE} stanu podstawowego fazy SS jest dana przez wyrażenie

$$E_{SS}^{LDE} = \frac{1}{2}Un + E_{XY}^{LDE} = \frac{1}{2}Un - 2I_0 \left[\frac{1}{2}n - \frac{1}{4}\alpha n^2 - \frac{\gamma z^{(3/2)}}{30\pi^2} (2\alpha n)^{(5/2)} \right], \quad (3.32)$$

gdzie $\alpha = 1/C$ jest ścisłą długością rozpraszania dla rozważanego przypadku, $C = (1/N) \sum_{\vec{k}} (1 - I_{\vec{k}}/I_0)^{-1}$ — całką Watsona dla danej sieci, $\gamma = V_0/a^3$, V_0 — objętością komórki elementarnej oraz a — stałą sieci. W szczególności mamy, dla sieci SC: $C = 1.51638$, $z = 6$, $\gamma = 1$; dla sieci BCC: $C = 1.3932$, $z = 8$, $\gamma = 1/2$; oraz dla sieci FCC: $C = 1.3446$, $z = 12$, $\gamma = 1/4$.

Potencjał chemiczny ($\mu = \partial E_{SS}^{LDE} / \partial n$) w rozważanym przypadku ma postać

$$\bar{\mu}_{SS}^{LDE} = -I_0 \left[1 - \alpha n - \frac{\gamma z^{(3/2)}}{3\pi^2} \alpha^{5/2} (2n)^{3/2} \right], \quad (3.33)$$

a prędkość dźwięku $\mathfrak{s}$ jest wyrażona wzorem

$$\hbar^2 \mathfrak{s}^2 = 4I_0 I a^2 n (2 - n) \alpha \left[1 + \alpha^{3/2} \frac{2\gamma}{\sqrt{2}\pi^2} z^{3/2} n^{1/2} \right]. \quad (3.34)$$

Można zauważyć bardzo dużą zgodność pomiędzy wynikami otrzymanymi za pomocą LDE oraz RPA (dla sieci SC, BCC oraz FCC) w zakresie $n < 0.2$ (różnica względna nie przekracza 5%). Przebieg granicy SS–NO (w funkcji n bez uwzględniania stanów z separacją fazową) uzyskanej za pomocą LDE przedstawiono na Rys. 3.2 (linia ciągła) dla trzech różnych sieci ($d = 3$): SC — Rys. 3.2(a), BCC — Rys. 3.2(b) oraz FCC — Rys. 3.2(c). Na rysunkach tych liniami przerywanymi oznaczono wyniki RPA otrzymane dla tych samych sieci co prezentowane wyniki LDE. Widzimy, że granica występowania jednorodnej fazy SS otrzymana za pomocą LDE jest przesunięta lekko w dół względem tej otrzymanej za pomocą RPA (dla danej sieci). Analiza wyników LDE dla różnych sieci w $d = 3$ pokazuje, podobnie jak poprzednio w przypadku wyników RPA, że region stabilności fazy SS kurczy się wraz ze wzrostem liczby najbliższych sąsiadów w sieci.

3.2.1.5 Podsumowanie wyników w stanie podstawowym

Zasadnicza struktura diagramów fazowych dla analizowanego modelu jest podobna dla dowolnego wymiaru sieci $d \geq 1$ i niezależna od zastosowanego podejścia (przybliżenia). Występują dwa rodzaje sekwencji przemian fazowych wraz ze wzrostem U/I_0 dla

ustalonego n :

- (i) $SS \rightarrow PS \rightarrow NO$ (dla $n \neq 1$),
- (ii) $SS \rightarrow NO$ (faza Motta) (dla $n = 1$).

Efekty fluktuacji kwantowych są bardziej istotne dla sieci o niskich wymiarach i dla liniowego łańcucha ich wpływ na diagram fazowy jest najbardziej widoczny. Na skutek tych fluktuacji obszar występowania jednorodnej fazy SS maleje wraz ze wzrostem d . W granicy $d \rightarrow +\infty$, fluktuacje te są całkowicie stłumione.

W przypadku łańcucha w $d = 1$ mamy do czynienia z porządkiem krótkozasięgowym (wynik ścisły), podczas gdy pozostałe metody dla $d \geq 2$ w $T = 0$ przewidują występowanie porządku dalekozasięgowego.

Należy zauważyć też, że przemiana PS–NO dla $U/I_0 = 2$ jest niezależna od n i wymiarowości przestrzennej sieci. Obszar występowania stanu PS rozszerza się wraz ze wzrostem wymiaru układu.

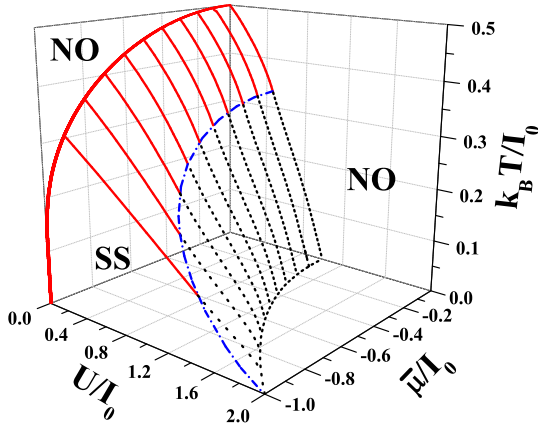
3.2.2 Skończone temperatury ($T > 0$)

3.2.2.1 Analiza przy ustalonym potencjale chemicznym

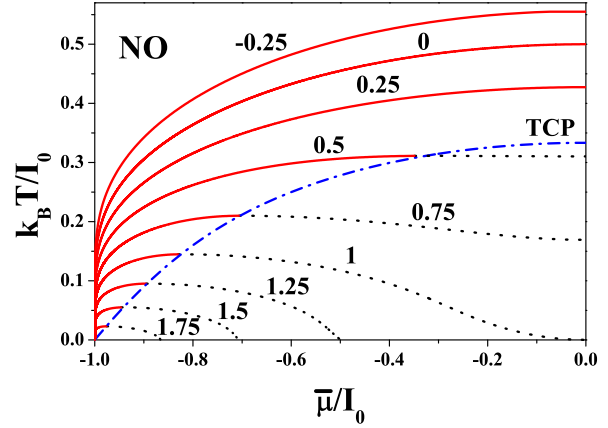
Trójwymiarowy diagram fazowy w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ i U/I_0 przedstawiono na Rys. 3.3. Przekroje tego diagramu dla ustalonych wartości parametru oddziaływania U/I_0 (tj. diagramy $k_B T/I_0 - \bar{\mu}/I_0$) są pokazane na Rys. 3.4.

Możemy wyróżnić trzy zakresy zmienności parametru oddziaływania U/I_0 :

1. Dla $U/I_0 \leq (2/3) \ln 2$ wraz ze wzrostem temperatury występuje wyłącznie przemiana fazowa drugiego rodzaju SS–NO pomiędzy fazą nadprzewodzącą i fazą normalną (nieuporządkowaną). Temperatura przemiany jest maksymalna dla $U \rightarrow -\infty$ i $\bar{\mu} = 0$ i maleje monotonicznie wraz ze wzrostem U/I_0 oraz $|\bar{\mu}|/I_0$.
2. Przedział $(2/3) \ln 2 < U/I_0 < 2$ jest najbardziej interesującym zakresem U/I_0 . W tym przedziale zależność temperatury przemiany SS–NO w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ jest niemonotoniczna i wraz ze wzrostem U/I_0 maksymalna temperatura przemiany przesuwa się w stronę większych wartości $|\bar{\mu}|/I_0$. Ponadto w tym zakresie wartości oddziaływania jednowęzłowego, przemiana SS–NO zmienia swój rodzaj z ciągłej na nieciągłą wraz ze wzrostem $|\bar{\mu}|$. Ze zmianą rodzaju przemiany jest związane występowanie punktu trójkrytycznego. W punkcie trójkrytycznym temperatura przemiany SS–NO jest maksymalna. Dla $1 < U/I_0 < 2$ linia przemiany pierwszego rodzaju kończy się w $T = 0$, natomiast dla $\frac{2}{3} \ln 2 < U/I_0 < 1$ — kończy się w $T > 0$.



Rys. 3.3: Trójwymiarowy diagram fazowy dla modelu U - I w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ i U/I_0 ($B = 0$). Linie kropkowane i ciągłe odpowiadają, odpowiednio, przemianom pierwszego i drugiego rodzaju. Linia punktów trójkrytycznych jest oznaczona za pomocą linii kropkowano-kreskowanej.



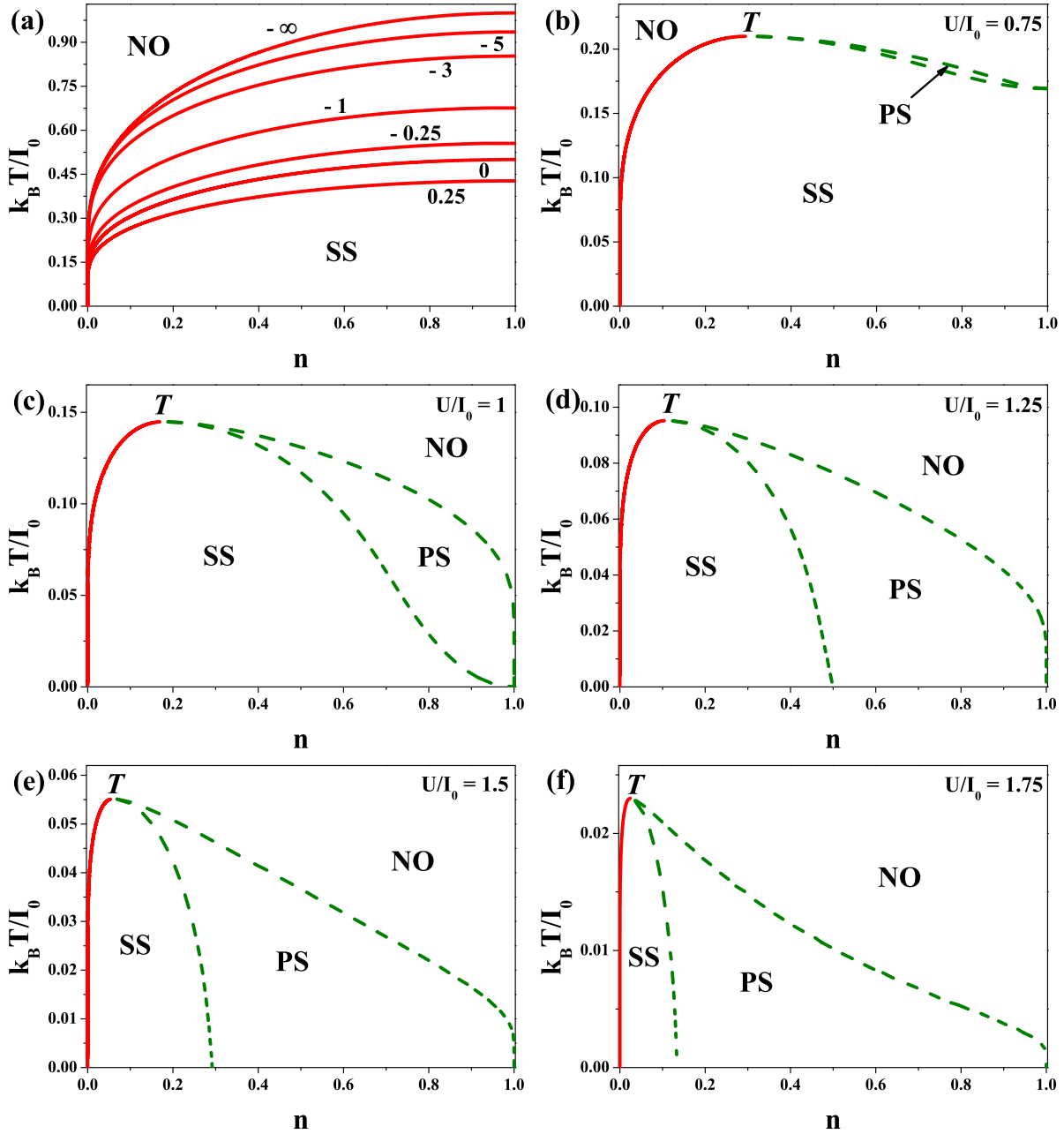
Rys. 3.4: Temperatura przemiany SS-NO w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ dla różnych U/I_0 (wartości nad krzywymi) dla modelu U - I . Linie kropkowane i ciągłe odpowiadają, odpowiednio, przemianom pierwszego i drugiego rodzaju. Linia kropkowano-kreskowana (oznaczona jako TCP) jest rzutem linii punktów trójkrytycznych na płaszczyznę $k_B T/I_0 - \bar{\mu}/I_0$.

3. Dla $2 \leq U/I_0 < +\infty$ w dowolnej temperaturze $T \geq 0$ występuje wyłącznie faza NO i wraz ze wzrostem temperatury w układzie nie ma przemian fazowych (dla $T > 0$).

3.2.2.2 Analiza przy ustalonej koncentracji elektronowej

Przykładowe diagramy fazowe w funkcji n otrzymane dla różnych wartości oddziaływania jednowęzłowego U/I_0 przedstawione są na Rys. 3.5.

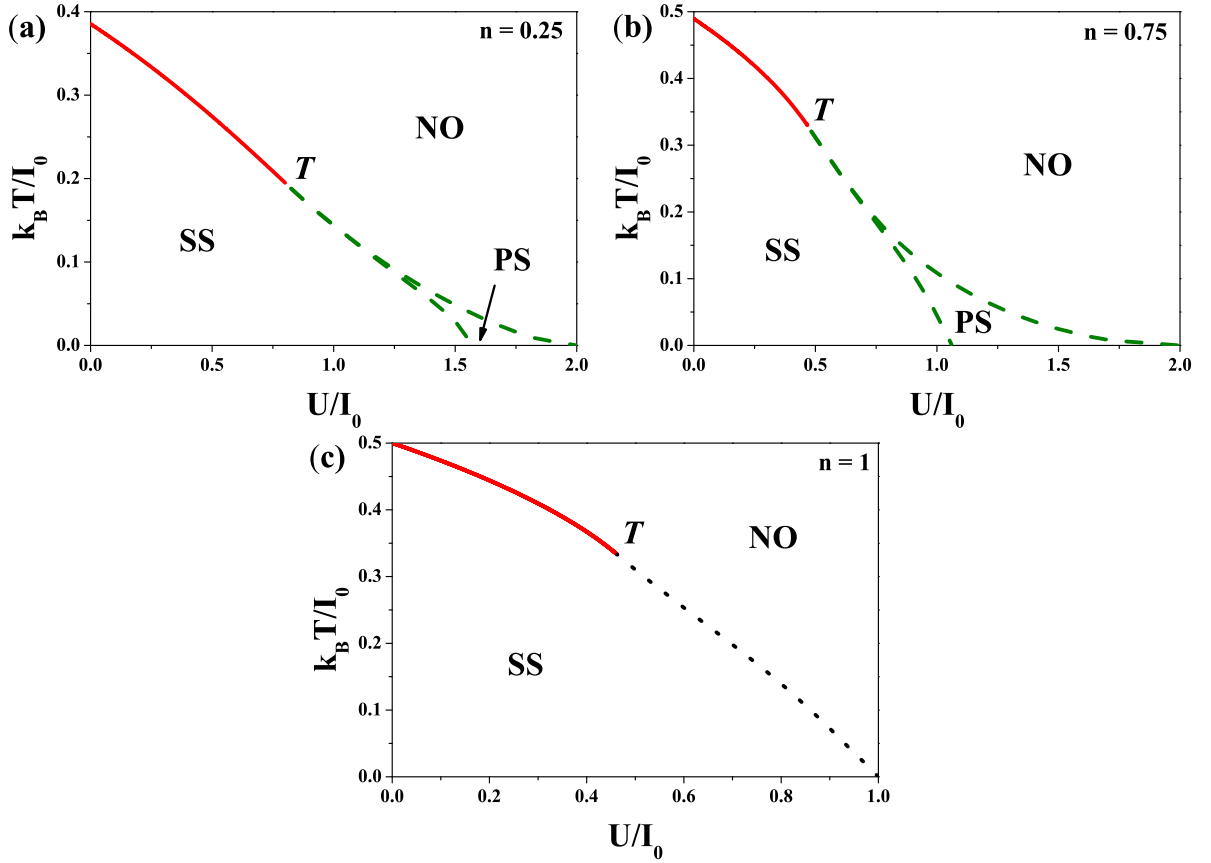
1. Dla $U/I_0 < (2/3) \ln 2$ stany PS:SS/NO nie występują i otrzymane diagramy fazowe są takie same jak te przedstawione w pracy [140]. Przemiana pomiędzy jednorodnymi fazami SS i NO, mająca miejsce wraz ze wzrostem temperatury, jest przemianą drugiego rodzaju dla dowolnego n . Temperatura przemiany SS-NO jest maksymalna dla $U \rightarrow -\infty$ oraz $n = 1$ i maleje monotonicznie wraz ze wzrostem U/I_0 i maleniem n (dla $n \leq 1$) – Rys. 3.5(a).
2. W zakresie $(2/3) \ln 2 < U/I_0 < 2$ maksymalna temperatura przemiany SS-NO przesuwana się w stronę niższych koncentracji (dla $n \leq 1$). W określonym zakresie U/I_0 i n stan PS:SS/NO jest stabilny. Dla $1 < U/I_0 < 2$ obszar występowania stanu PS rozciąga się od stanu podstawowego — Rys. 3.5(d)–(f) i Rys. 3.1(c), podczas gdy dla $(2/3) \ln 2 < U/I_0 \leq 1$ stan PS jest stabilny tylko w skończonych temperaturach ($T > 0$) — Rys. 3.5(b)–(c). Punkt krytyczny dla separacji fazowej (oznaczony jako **T**, który jest punktem trójkrytycznym) jest położony na końcu linii przemiany drugiego rodzaju SS-NO.



Rys. 3.5: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - n$ dla różnych wartości U / I_0 (jak oznaczono) dla modelu U - I . Linie ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, przemiany drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. T oznacza punkt trójkrytyczny.

3. Pomiędzy $U / I_0 = 2$ oraz $U \rightarrow +\infty$ wyłącznie faza NO jest stabilna dla dowolnego $T \geq 0$ i nie ma żadnych przemian fazowych w tym zakresie (dla $T > 0$).

Dla danego n diagramy fazowe $k_B T / I_0 - U / I_0$ dla badanego układu zaprezentowano na Rys. 3.6. Wszystkie temperatury przemian maleją wraz ze wzrostem U / I_0 . W zakresie $0 < n < 1$ diagramy są podobne do siebie i składają się z trzech obszarów (przykładowe diagramy na Rys. 3.6(a)–(b)). Obszary występowania faz SS i NO są rozdzielone granicą fazową drugiego rodzaju lub, dla większych wartości odpychania jednowęzłowego, przez



Rys. 3.6: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - U / I_0$ (dla modelu $U-I$) dla: $n = 0.25$ (a), $n = 0.75$ (b) oraz $n = 1$ (c). Linie kropkowane, ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, przemiany pierwszego rodzaju, drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. **T** oznacza punkt trójkrytyczny.

obszar występowania stanu PS:SS/NO. Dla $n = 1$ na diagramie fazowym występują wyłącznie fazy jednorodne (Rys. 3.6(c)). Punkt **T**, związany ze zmianą rodzaju przemiany, występuje dla $k_B T / I_0 = 1/3$ i $U / I_0 = (2/3) \ln 2$ (gdy $n = 1$).

Możliwe sekwencje przemian fazowych przy ustalonym n wraz ze wzrostem temperatury oraz ich rodzaje są zestawione poniżej:

- (i) SS→NO: drugiego rodzaju dla $n \neq 1$ i pierwszego albo drugiego rodzaju dla $n = 1$ (może mieć miejsce dla $U / I_0 < 2$),
- (ii) PS→NO: „trzeciego rodzaju”, może mieć miejsce tylko dla $n \neq 1$ (oraz $1 < U / I_0 < 2$),
- (iii) SS→PS→NO: obie „trzeciego rodzaju”, może mieć miejsce tylko dla $n \neq 1$ (oraz $(2/3) \ln 2 < U / I_0 < 2$).

Należy zauważyć, że temperatura zazwyczaj usuwa niejednorodności w układzie, co faworyzuje raczej występowanie faz jednorodnych niż stanów z separacją faz. W rozważanym modelu stan PS może jednak występować w temperaturach wyższych niż jednorodna

faza SS. To, raczej niezwykle zachowanie, może być związane z wzajemną konkurencją pomiędzy całą przeskoku pary elektronowej I a odpychaniem jednowęzłowym U .

3.2.2.3 Parametry termodynamiczne

Poniżej zaprezentujemy i przedyskutujemy kilka reprezentatywnych przebiegów charakterystyk termodynamicznych dla ustalonych parametrów modelu. Charakterystyki te przedstawiono na Rys. 3.7–3.9.

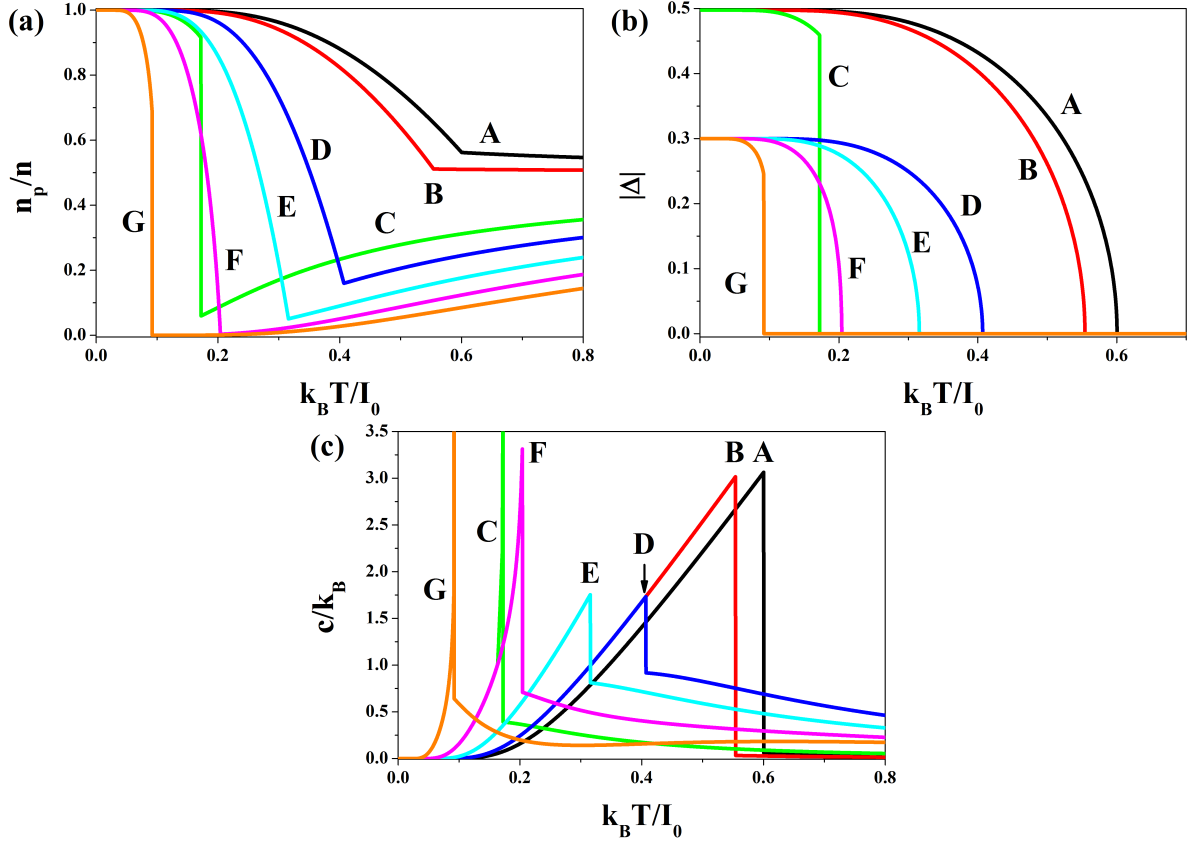
Ustalony potencjał chemiczny

W szczególności dla ustalonego $\bar{\mu}$ (Rys. 3.7), można wyróżnić dwa graniczne typy zachowania termodynamicznego dla badanego układu w sąsiedztwie temperatury T_{SS} przemiany SS–NO: (i) granica par lokalnych oraz (ii) granica rozrywania par [140, 141]. Pomiedzy tymi dwoma granicami występuje płynne przejście (zob. np. zależność n_p/n w funkcji $k_B T/I_0$ na Rys. 3.7(a)).

Należy podkreślić, że w rozważanym modelu pojedyncze cząstki współistnieją z parami w skończonych temperaturach (z wyjątkiem gdy $U \rightarrow -\infty$) i w $T > 0$ koncentracja sparowanych elektronów n_p jest zawsze mniejsza niż n , skąd wynika istnienie skończonej liczby pojedynczych cząstek $n - n_p$ w układzie. Modyfikuje to zachowanie układu w punkcie przemiany fazowej SS–NO, której właściwości w granicy par lokalnych (gdzie $n_p(T_{SS}) \lesssim n$) są inne niż w granicy rozrywania par (gdzie $n_p(T_{SS})$ jest znacząco mniejsze niż n). W temperaturze $T = 0$, niezależnie od koncentracji n (potencjału μ) i wielkości oddziaływania U/I_0 , w fazie SS wszystkie elektrony są sparowane ($n_p = n$).

Dla dużego przyciągania na węźle koncentracja sparowanych lokalnie elektronów $n_p = 2D$ nie wykazuje skokowych zmian, gdy temperatura jest obniżana poniżej T_{SS} . Liczba niesparowanych elektronów w T_{SS} praktycznie nie ulega zmianie i przemiana następuje ze stanu koherentnych par w fazie SS do stanu dynamicznie nieuporządkowanych par w fazie NO, np. linie A i B na Rys. 3.7(a) (ściśle mówiąc tylko dla $|U|/I_0 \geq 1$, $U < 0$ i $n \ll 1$ liczba niesparowanych elektronów w T_{SS} jest zanedbywalna, granica par lokalnych). W drugiej granicy, dla odpychania na węźle $U \lesssim 2I_0$, n_p wykazuje gwałtowny spadek w T_{SS} i istotnie większa część pojedynczych (tj. niesparowanych) elektronów może istnieć powyżej T_{SS} (granica rozrywania par). Gdy temperatura jest obniżana, ilość cząstek w kondensacie ulega zwiększeniu z dwóch źródeł: z kondensacji istniejących nieuporządkowanych dynamicznie par oraz na skutek wiązania i kondensacji niesparowanych elektronów. Powyżej T_{SS} istnieją jedynie nieliczne pary tworzące się spontanicznie (na skutek wzbudzeń termicznych), np. linie C, F i G na Rys. 3.7(a).

Należy zauważyć, że niezerowa wartość n_p nie oznacza, że pary lokalne są w stanie koherentnym i nawet w fazie NO wielkość n_p/n może przyjmować znaczącą wartość.



Rys. 3.7: Zależności temperaturowe (modelu U - I): (a) stosunku n_p/n , (b) nadprzewodzącego parametru porządku $|\Delta|$ oraz (c) ciepła właściwego c/k_B dla: $\bar{\mu}/I_0 = -0.1$ i odpowiednio $U/I_0 = -0.5$ (A), $U/I_0 = -0.25$ (B), $U/I_0 = 0.75$ (C); a także dla: $\bar{\mu}/I_0 = -0.8$ i odpowiednio $U/I_0 = -0.25$ (D), $U/I_0 = 0.25$ (E), $U/I_0 = 0.75$ (F) $U/I_0 = 1.25$ (G). Na panelu (c) linie C-F oraz D-B są parami nierozróżnialne w niskich temperaturach.

W granicy $T \rightarrow +\infty$ n_p rośnie do $n_p/n \rightarrow 0.5$ (w granicy tej każdy z czterech stanów na węzle jest równo prawdopodobny). Gęstość kondensatu (która może być przybliżona w podejściu VA jako $n_0 \approx |\Delta|^2$, przynajmniej dla $n \ll 1$, $n_0 \neq D$) zanika dla $T \geq T_{SS}$, ale podwójnie obsadzone stany są wciąż termicznie wzbudzone powyżej T_{SS} ($D \neq 0$).

Na Rys. 3.7(b) przedstawiono temperaturową zależność nadprzewodzącego parametru porządku Δ , gdzie wyraźnie widać nieciągłą zmianę parametru porządku podczas przemiany pierwszego rodzaju (linie C i G). Pozostałe przebiegi odpowiadają przemianom drugiego rodzaju.

Na koniec podsumujmy zachowanie ciepła właściwego przy ustalonej objętości $c = -T \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial T^2} \right)_{\bar{\mu}}$ (Rys. 3.7(c)). Ciepło c w fazie NO wykazuje względnie szerokie maksimum związane z ciągłymi zmianami krótkozasięgowego uporządkowania elektronowego (w wyższych temperaturach, niepokazanych na Rys. 3.7(c)) [140, 150]. Wąski pik w $c(T)$ (linie C i G) odpowiada przemianie pierwszego rodzaju, natomiast zachowanie typu λ (np. linie A i E) jest typowe dla przemiany drugiego rodzaju.

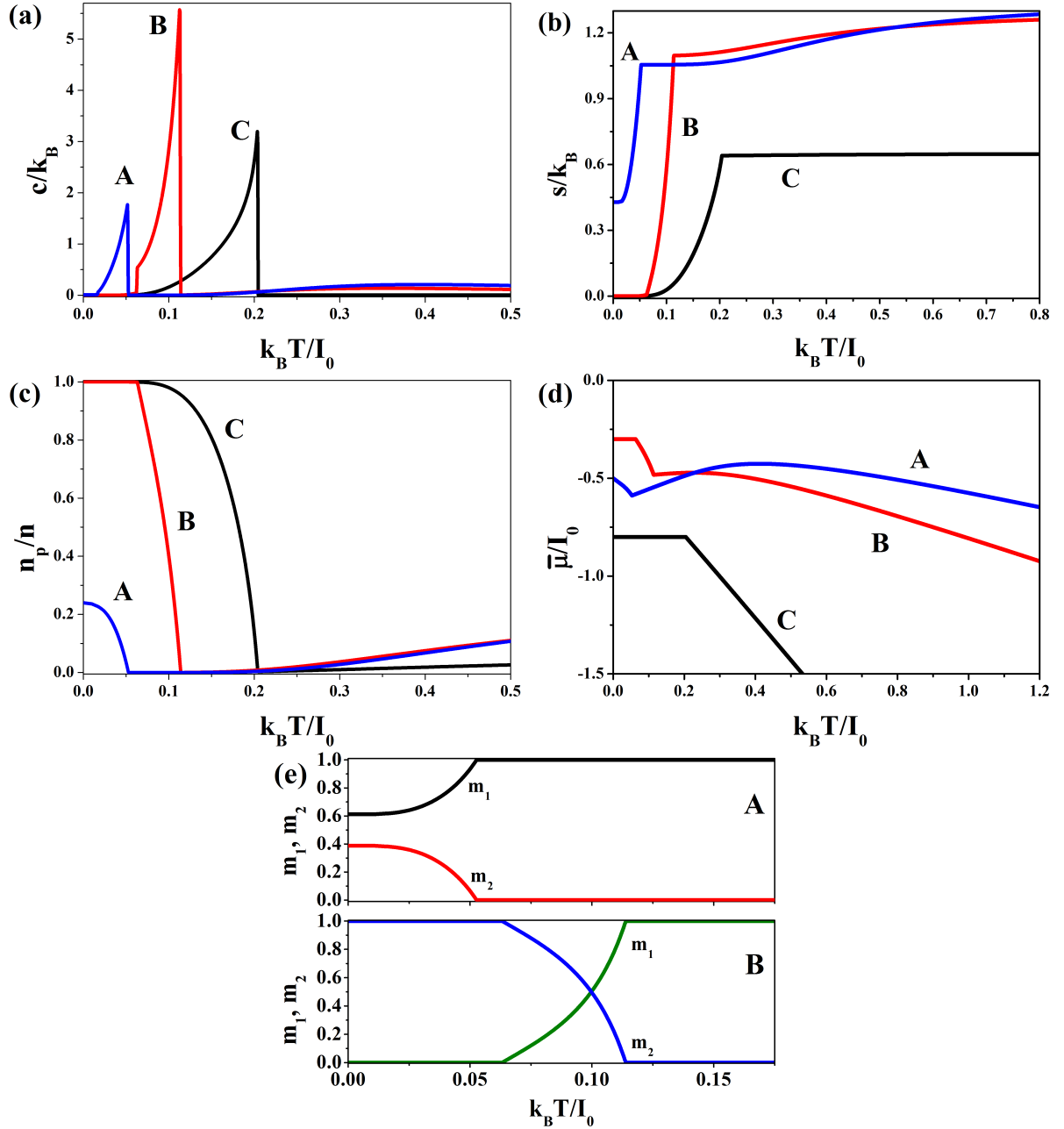
Ustalona koncentracja elektronowa

Obecnie skoncentrujemy się na właściwościach termodynamicznych układu przy ustalonym n , w szczególności w stanie PS:SS/NO, oraz ich zmianom w przemianach „trzeciego rodzaju” (Rys. 3.8 oraz Rys. 3.9). Jako przykład rozpatrzmy zależności temperaturowe następujących wielkości fizycznych: (i) ciepła właściwego $c = -T \left(\frac{\partial^2 f}{\partial T^2} \right)_n$, (ii) entropii $s = \frac{\partial f}{\partial T}$, (iii) koncentracji sparowanych elektronów n_p/n , (iv) potencjału chemicznego $\bar{\mu}/I_0$ oraz (v) objętości domen $m_1 = (n - n_-)/(n_+ - n_-)$, $m_2 = 1 - m_1$ z koncentracjami elektronowymi, odpowiednio, n_+ (faza NO) oraz n_- (faza SS). Zależności te pokazano na Rys. 3.8. Natomiast na Rys. 3.9 przedstawiono przebiegi w funkcji koncentracji elektronowej n następujących wielkości fizycznych: (a) $\bar{\mu}/I_0$, (b) f/I_0 oraz (c) n_p/n .

Charakterystyki termodynamiczne dla trzech różnych możliwych sekwencji przemian fazowych wraz ze wzrostem temperatury przedstawiono na Rys. 3.8. Linie oznaczone literą „A” odpowiadają przemianie PS→NO. W przypadku takiej przemiany ciepło właściwe c wykazuje skończony skok w temperaturze przemiany, który jest związany z ciągłością entropii s w temperaturze przemiany (Rys. 3.8(a)–(b)). Linie oznaczone literą „B” odpowiadają przypadkowi SS→PS→NO. W temperaturze przemiany „trzeciego rodzaju” SS–PS widoczny jest również skończony skok w przebiegu c , jednakże ciepło właściwe w stanie PS jest większe niż w fazie SS, w przeciwieństwie do przemiany PS–NO, gdzie skok ten ma przeciwny znak. Linie oznaczone literą „C” odpowiadają przemianie drugiego rodzaju SS→NO. Względna koncentracja sparowanych elektronów n_p/n jest przedstawiona na Rys. 3.8(c). Ponadto na Rys. 3.8(d) jest zaprezentowana temperaturowa zależność potencjału chemicznego. Widoczne jest, że potencjał $\bar{\mu}$ w fazie SS jest niezależny od temperatury (zgodnie z (3.10)). Na Rys. 3.8(e) wykreślono zależność objętości domen $m_1 = (n - n_-)/(n_+ - n_-)$, $m_2 = 1 - m_1$ z koncentracjami elektronowymi, odpowiednio, n_+ oraz n_- . W przypadku „A” domena fazy SS (z niższą koncentracją n_-) zanika w temperaturze przemiany „trzeciego rodzaju” i wyższych temperaturach w całym układzie występuje faza NO. W przypadku „B” w niskich temperaturach cały układ jest w fazie SS, następnie pojawia się faza NO w postaci domeny w stanie PS. Wraz ze wzrostem temperatury objętość domeny NO rośnie, aż w całym układzie będzie występować jednorodna faza NO.

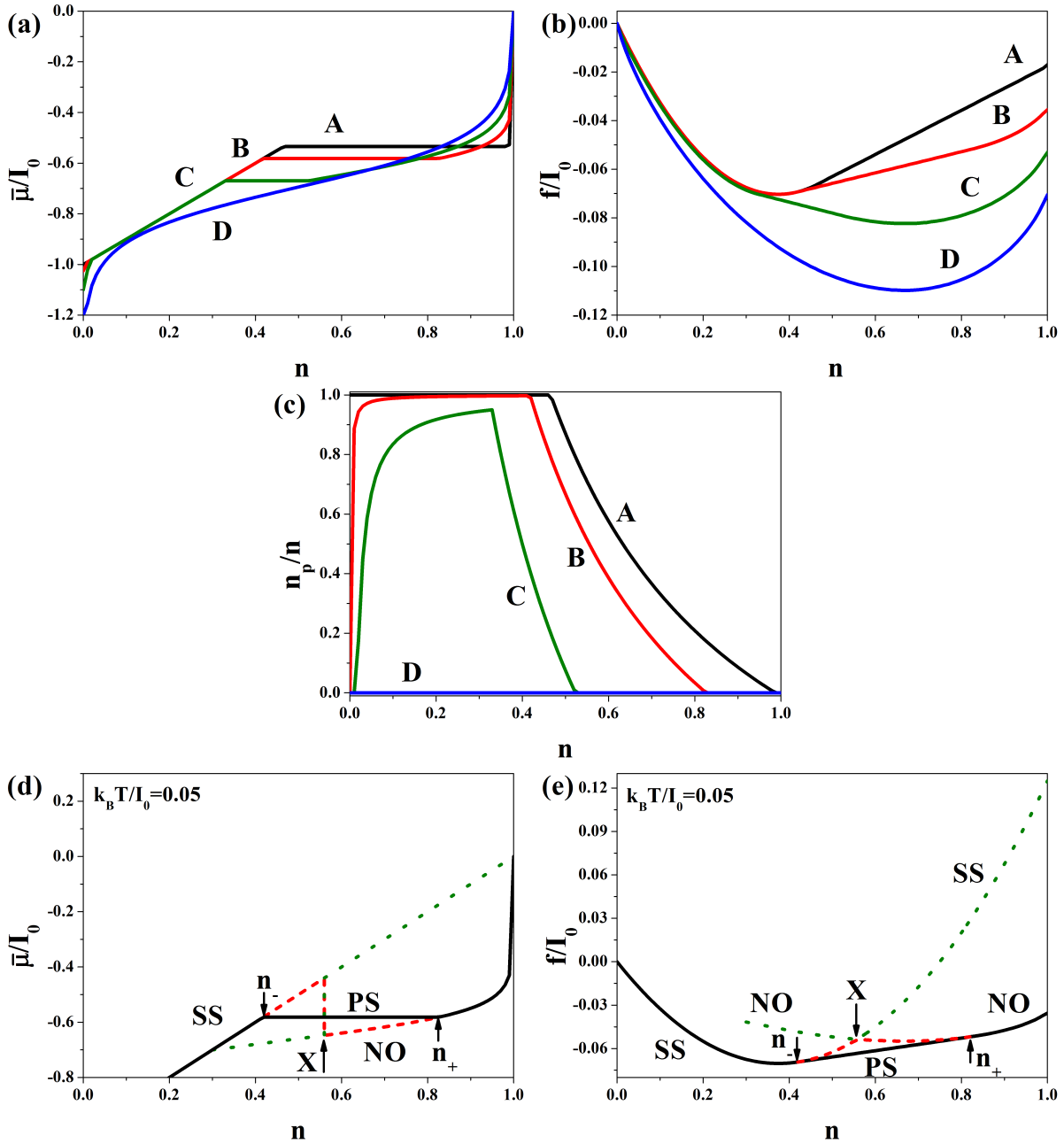
Na Rys. 3.9(a)–(c) przedstawiono zależności w funkcji koncentracji n , odpowiednio, potencjału chemicznego $\bar{\mu}/I_0$, energii swobodnej f/I_0 i względnej koncentracji sparowanych elektronów $n_p/n = 2D/n$ dla $U/I_0 = 1.25$ i kilku ustalonych temperatur ($k_B T/I_0 = 0.025$ (A), $k_B T/I_0 = 0.05$ (B), $k_B T/I_0 = 0.075$ (C) i $k_B T/I_0 = 0.1$ (D)). Na rysunkach tych uwzględniono wyłącznie fazy i stany o najniższych energiach.

Potencjał chemiczny $\bar{\mu}/I_0$ oraz energię swobodną f/I_0 jako funkcję koncentracji dla $U/I_0 = 1.25$ oraz $k_B T/I_0 = 0.05$ przedstawiono, odpowiednio, na Rys. 3.9(d) i Rys. 3.9(e).



Rys. 3.8: Zależności temperaturowe dla modelu U - I : (a) ciepła właściwego c/k_B , (b) entropii s/k_B , (c) względnej koncentracji par n_p/n , (d) potencjału chemicznego $\bar{\mu}/I_0$, oraz (e) rozmiarów domen m_1 i m_2 z koncentracjami n_+ i n_- , odpowiednio. Charakterystyki otrzymano dla: $n = 0.8$, $U/I_0 = 1.25$ (A); $n = 0.7$, $U/I_0 = 1$ (B); $n = 0.2$, $U/I_0 = 0.75$ (C).

Dla $0 < n < n_-$ faza SS jest stabilna termodynamicznie i posiada najniższą energię swobodną (linia ciągła na rysunkach), natomiast dla $1 \geq n > n_+$ takie właściwości ma faza NO. Rozwiązania układu (3.5)–(3.6) (dla $B = 0$), odpowiadające najniższej energii (fazy jednorodne z najniższymi energiami swobodnymi) są termodynamicznie (meta-)stabilne, tj. $\partial \bar{\mu} / \partial n > 0$, w swoich zakresach występowania, nawet w obszarze występowania stanu PS (oznaczone linią przerywaną na Rys. 3.9(d)–(e)). W punkcie **X** zachodzi przemiana pomiędzy fazami metastabilnymi: dla $n < n_X$ energia swobodna f_{SS} fazy SS jest niższa



Rys. 3.9: (a) potencjał chemiczny $\bar{\mu}/I_0$, (b) energia swobodna f/I_0 oraz (c) względna koncentracja par n_p/n dla $U/I_0 = 1.25$ w funkcji koncentracji n w ustalonych temperaturach: $k_B T/I_0 = 0.025$ (A), $k_B T/I_0 = 0.05$ (B), $k_B T/I_0 = 0.075$ (C), oraz $k_B T/I_0 = 0.1$ (D) (model U -I). Linie przerywane i kropkowane na panelach (d) i (e) dla $k_B T/I_0 = 0.05$ odpowiadają, odpowiednio, fazom metastabilnym z najniższą i najwyższą energią. Szczegóły w tekście.

niż energia f_{NO} fazy NO ($f_{NO} > f_{SS} > f_{PS}$), podczas gdy $f_{SS} > f_{NO} > f_{PS}$ dla $n > n_X$ (szczegółowa analiza występowania faz metastabilnych w modelu (3.1) jest przedstawiona w Rozdziale 3.4). Linie kropkowane na Rys. 3.9(d)-(e) odpowiadają fazom jednorodnym z wyższą (tj. najwyższą) energią. Należy podkreślić, że w opisywanym przypadku dla $U/I_0 = 1.25$ oraz $k_B T/I_0 = 0.05$ w całym zakresie występowania stanu PS (dla $n_- < n < n_+$) obie fazy jednorodne SS i NO są metastabilne, podczas gdy w obszarach

występowania faz jednorodnych co najwyżej jedna faza jednorodna jest metastabilna. Liniowa zależność $\bar{\mu}/I_0 = n - 1$ jest charakterystyczna dla fazy SS, podczas gdy w stanie PS:SS/NO $\bar{\mu}/I_0$ jest niezależne od n . Jest to zgodne z kwadratową zależnością $f_{SS}(n)$ i liniową zależnością $f_{PS}(n)$ od n (por. Rys. 3.9(d)–(e)).

„Anomalne” malenie potencjału chemicznego ze wzrostem koncentracji w jednorodnych fazach metastabilnych koło punktu $\mathbf{X}$ (w przypadku rozważanego modelu U - I jest to akurat nagły skok „w dół” (nieciągłość) w punkcie $\mathbf{X}$) oznacza, że jest termodynamicznie bardziej dogodnie by układ ulegał separacji na dwa podukłady z różną koncentracją (Rys. 3.9(a),(d)). Zakres koncentracji, w których stan PS występuje, można określić za pomocą tzw. konstrukcji Maxwella (Rozdział 1.4.3).

W przypadku przemian „trzeciego rodzaju” (SS–PS, PS–NO) parametry termodynamiczne takie jak $\bar{\mu}$, n_p/n , s , f są ciągłe, natomiast c wykazuje skończony skok, tak jak w przypadku przemiany drugiego rodzaju. Należy jednak pamiętać, że parametrem porządku dla przemiany „trzeciego rodzaju” jest różnica koncentracji $\delta n = n_+ - n_-$ (a nie Δ , która jest parametrem porządku nadprzewodzącego w jednej z domen) i to właśnie δn wykazuje nieciągłość (poza punktem trójkrytycznym $\mathbf{T}$) w temperaturze przemiany „trzeciego rodzaju”. Takie przemiany pojawiają się na diagramach fazowych rozważanego modelu, gdy układ jest rozważany dla ustalonego n i są związane z przemianami pierwszego rodzaju przy ustalonym μ . Zauważmy jednocześnie, że koncentracje n_- i n_+ odpowiadają wartościom koncentracji po obu stronach przemiany pierwszego rodzaju występującej przy ustalonym μ .

3.3 Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na fazy nadprzewodzące ($B \neq 0$)

W tym rozdziale zbadamy model (3.1) w obecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B \neq 0$) — tj. model U - I - B . W szczególności dokonamy analizy wpływu pola B na diagramy fazowe modelu oraz zbadamy jego wpływ na stany z separacją faz (efekt paramagnetyczny pola).

3.3.1 Stan podstawowy ($T = 0$)

Analizę stanu podstawowego dla modelu (3.1) w przypadku $B \neq 0$ przeprowadzimy analogicznie jak w Rozdziale 3.2.1 dla przypadku $B = 0$.

Diagram stanu podstawowego dla $B \neq 0$ jest pokazany na Rys. 3.10. Jest on jakościowo podobny do tego otrzymanego w przypadku $B = 0$. Podobnie jak w przypadku $B = 0$ linia przemiany pierwszego rodzaju SS–NO na diagramie $\bar{\mu}/I_0$ – $(U+B)/I_0$ odpowiada obszarowi

występowania stanu PS pomiędzy dwoma krytycznymi wartościami $(U + B)/I_0$: niższą — malejącą wraz z n oraz wyższą — niezależną od n . Poniżej prezentujemy konkretne wyrażenia na energię poszczególnych faz w stanie podstawowym.

Dla fazy NO (co odpowiada podprzestrzeni (i) z wykluczonymi podwójnymi obsadzeniami węzłów) w granicy $\beta \rightarrow +\infty$ ($B \neq 0$), ze wzorów (3.4) i (3.6), gdy n jest ustalone, podobnie jak poprzednio otrzymujemy

$$\begin{aligned} E_{NO}(n) &= -\frac{1}{2}Bn & \text{dla } n < 1 \quad 2m = n, \quad \bar{\mu} &= -\frac{1}{2}(U + B), \\ E_{NO}(n) &= U(n - 1) + \frac{1}{2}B(n - 2) & \text{dla } n > 1 \quad 2m = 2 - n, \quad \bar{\mu} &= \frac{1}{2}(U + B), \\ E_{NO}(n = 1) &= -\frac{1}{2}B & \text{dla } n = 1 \quad 2m = 1, \quad \bar{\mu} &= 0. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Takie stany NO są nieskończenie-krotnie zdegenerowane, jednak degeneracja ta w przypadku $B \neq 0$ jest degeneracją wyłącznie ze względu na ładunkowe stopnie swobody. Stany te są uporządkowane magnetycznie (nasycone „możliwie mocno”) dla $B \neq 0$. Nie są to jednak fazy ferromagnetyczne w standardowym ujęciu, gdyż porządek magnetyczny występuje tylko dla $B \neq 0$. Ponadto dla $U > 0$ faza NO z $n < 1$ jest zdegenerowana ze stanem z separacją faz PS:NO/NO. Degeneracja ta zostaje usunięta dla $T > 0$.

Jeśli natomiast μ jest ustalone mamy

$$\begin{aligned} \omega_{NO}^a(\bar{\mu}) &= 0 & (n = 0, \quad m = 2 \quad \text{NO — „pusty”}), \\ \omega_{NO}^b(\bar{\mu}) &= -\bar{\mu} - \frac{1}{2}U - \frac{1}{2}B & (n = 1, \quad m = \frac{1}{2} \quad \text{NO — faza Motta}), \\ \omega_{NO}^c(\bar{\mu}) &= -2\bar{\mu} & (n = 2, \quad m = 0 \quad \text{NO — „pełny”).} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Podkreślmy, że podobnie jak poprzednio, przybliżenie wariacyjne dla fazy NO daje wyniki ściśle dla f oraz ω w $T = 0$.

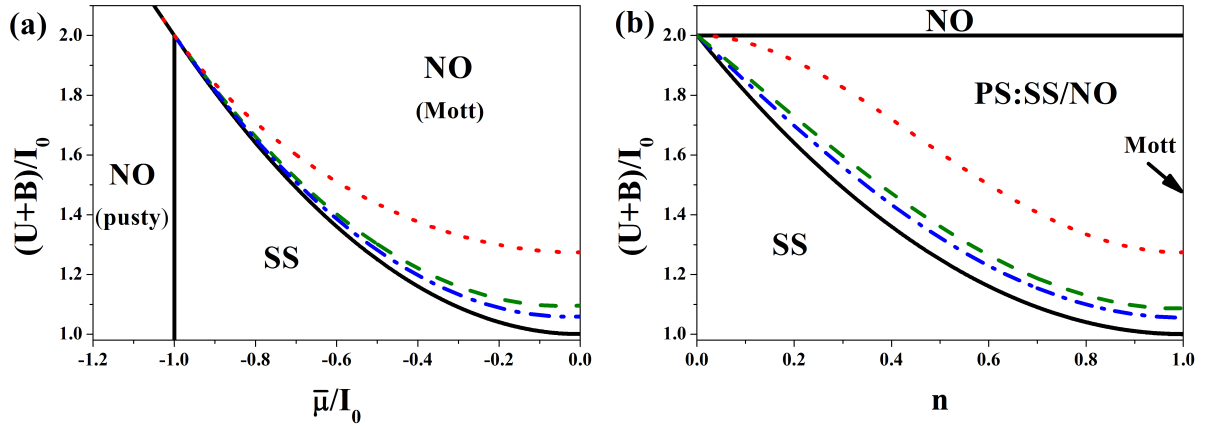
3.3.1.1 Przybliżenie wariacyjne

Energię stanu podstawowego dla fazy SS (odpowiadającej podprzestrzeni (ii) z wykluczonymi pojedynczo obsadzonymi węzłami) obliczamy podobnie jak w Rozdziale 3.2.1.2. W przybliżeniu wariacyjnym, zgodnie z tym co otrzymano poprzednio (wzór (3.24)), wynosi ona

$$E_{SS} = \frac{1}{2}Un - \frac{1}{2}|I_0|n(2 - n).$$

Ponadto $\bar{\mu} = I_0(n - 1)$, $|\Delta|^2 = (1/4)n(2 - n)$ oraz $m = 0$. Zauważmy, że zewnętrzne pole magnetyczne B nie wpływa na energię fazy SS w stanie podstawowym.

Energię w stanie podstawowym dla stanu z separacją faz obliczamy za pomocą konstrukcji Maxwella. W domenie NO mamy $n_{NO} = 1$ (faza Motta z $m = 1/2$ dla $B \neq 0$), podczas gdy koncentracja w domenie SS wynosi $n_{SS} = 1 \mp \sqrt{(U + B)/I_0 - 1}$



Rys. 3.10: Diagramy fazowe w stanie podstawowym dla modelu $U-I-B$: (a) w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ oraz (b) w funkcji n . Linie kropkowane, przerywane, kropkowo-kreskowane oraz ciągłe oznaczają granice, odpowiednio, dla $d = 1$ (wynik ścisły), $d = 2$ (RPA, sieć kwadratowa), $d = 3$ (RPA, sieć prosta kubiczna) i $d \rightarrow +\infty$ (VA). Dla $n = 1$ faza NO (stan Motta) występuje powyżej końca linii PS-SS (panel (b)). Przemiana NO-SS dla $\bar{\mu}/I_0 = -1$ (panel (a)) jest ciągła, wszystkie pozostałe przemiany pomiędzy fazami jednorodnymi są nieciągłe.

(dla $1 \leq (U+B)/I_0 \leq 2$). Odpowiada to granicy pierwszego rodzaju SS-NO na diagramie fazowym stanu podstawowego $(U+B)/I_0 - \bar{\mu}/I_0$ określonej przez równanie $(\bar{\mu}/I_0)^2 + 1 = (U+B)/I_0$.

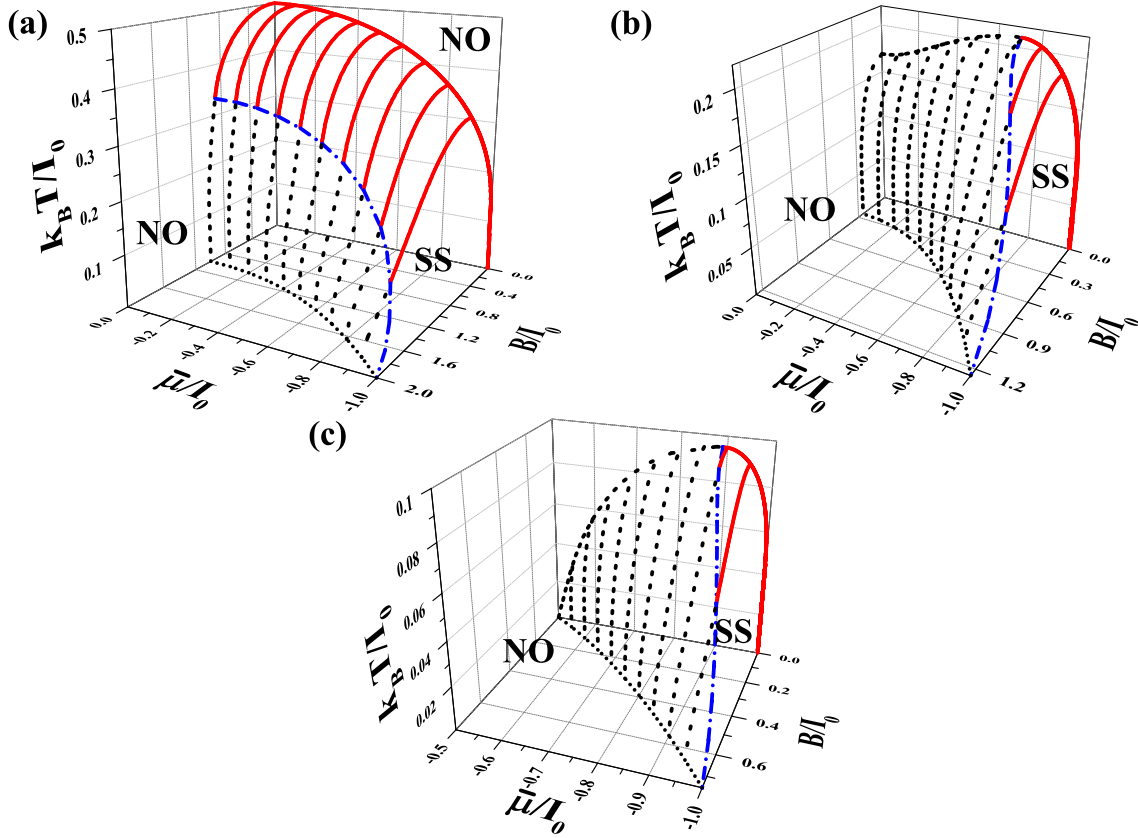
3.3.1.2 Wyjście poza przybliżenie pola średniego

Możliwe jest także otrzymanie pewnych wyników dla stanu podstawowego poza przybliżeniem wariacyjnym (będącym podejściem ścisłym dla $d = +\infty$) w wymiarach $d = 1, 2, 3$ zauważając, że jest możliwe rozłożenie przestrzeni własnej hamiltonianu (3.1) na części charakteryzowane poprzez liczbę obsadzeń na każdym węźle (postępując całkowicie analogicznie jak poprzednio w Rozdziale 3.2.1). Korzystając z wyników zawartych w Rozdziale 3.2.1 na energię fazy SS otrzymaną za pomocą różnych podjęć (wynik ścisły dla łańcucha w $d = 1$, przybliżenie RPA dla sieci prostych w $d = 2$ (sieć SQ) oraz w $d = 3$ (sieć SC) możemy otrzymać wyniki przedstawione na Rys. 3.10. Podkreślimy, że w podprzestrzeni „parzystej” (ii), tj. z wykluczonymi pojedynczo obsadzonymi węzłami, pole B nie daje żadnego wkładu do energii w stanie podstawowym, a więc obliczenia energii dla fazy SS w przypadku $B \neq 0$ są identyczne jak te z Rozdziału 3.2.1.

3.3.2 Skończone temperatury ($T > 0$)

3.3.2.1 Diagramy fazowe

Obecnie przedyskutujemy wpływ zewnętrznego pola magnetycznego B na diagramy fazowe modelu (3.1) w skończonych temperaturach. Trójwymiarowe diagramy fazowe

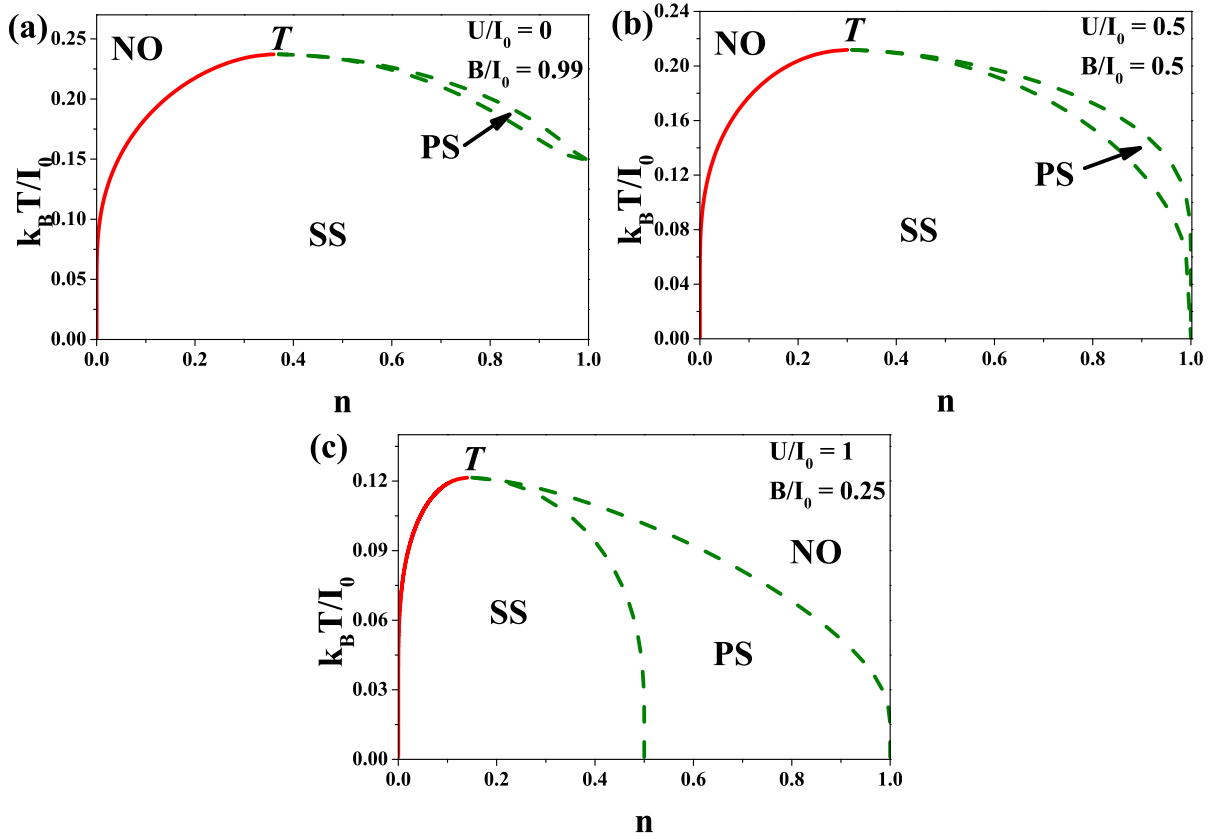


Rys. 3.11: Trójwymiarowe diagramy fazowe dla modelu U - I - B w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ i B/I_0 dla: $U/I_0 = 0$ (a), $U/I_0 = 0.75$ (b) oraz $U/I_0 = 1.25$ (c). Linie kropkowane i ciągłe odpowiadają, odpowiednio, przemianom pierwszego i drugiego rodzaju. Linie punktów trójkrytycznych są oznaczone za pomocą linii kropkowano-kreskowanych.

dla modelu U - I - B dla ustalonych wartości U/I_0 przedstawiono na Rys. 3.11. Dla $U/I_0 < (2/3)\ln(2)$ punkt trójkrytyczny $\mathbf{T}$, związany ze zmianą rodzaju przemiany, występuje wyłącznie dla $B > 0$. Dla dowolnego $\bar{\mu}/I_0 \leq 0$ w temperaturach powyżej punktu $\mathbf{T}$ przemiana SS–NO jest drugiego rodzaju (Rys. 3.11(a)). Dla $U/I_0 > (2/3)\ln(2)$ linia punktów trójkrytycznych zaczyna się już dla $B = 0$. Jeśli $(2/3)\ln 2 < U/I_0 < 1$ faza SS może wystąpić w skończonych temperaturach dla $n = 1$ (Rys. 3.11(b)), podczas gdy dla $1 < U/I_0 < 2$ faza SS może wystąpić tylko dla $\bar{\mu} \neq 0$ (Rys. 3.11(c)). W zakresie $2 < (U + B)/I_0 < +\infty$ tylko faza NO jest stabilna dla dowolnego $B \geq 0$ oraz $T \geq 0$. Dla $n = 1$ punkt trójkrytyczny $\mathbf{T}$ (jeśli istnieje) występuje dla temperatury $k_B T/I_0 = 1/3$ niezależnej od U/I_0 ani B/I_0 (por. również Rys. 3.14).

Kilka przykładów diagramów fazowych $k_B T/I_0$ – n zostało przedstawionych na Rys. 3.12. W zależności od zadanych wartości parametrów U/I_0 oraz B/I_0 , diagramy te mogą być w jednej z następujących trzech form:

- (i) tylko fazy jednorodne występują na diagramie dla dowolnego T , przemiana fazowa SS–NO jest drugiego rodzaju, temperatura przemiany maleje wraz ze wzrostem n (dla $n \leq 1$), struktura diagramu taka jak na Rys. 3.5(a);

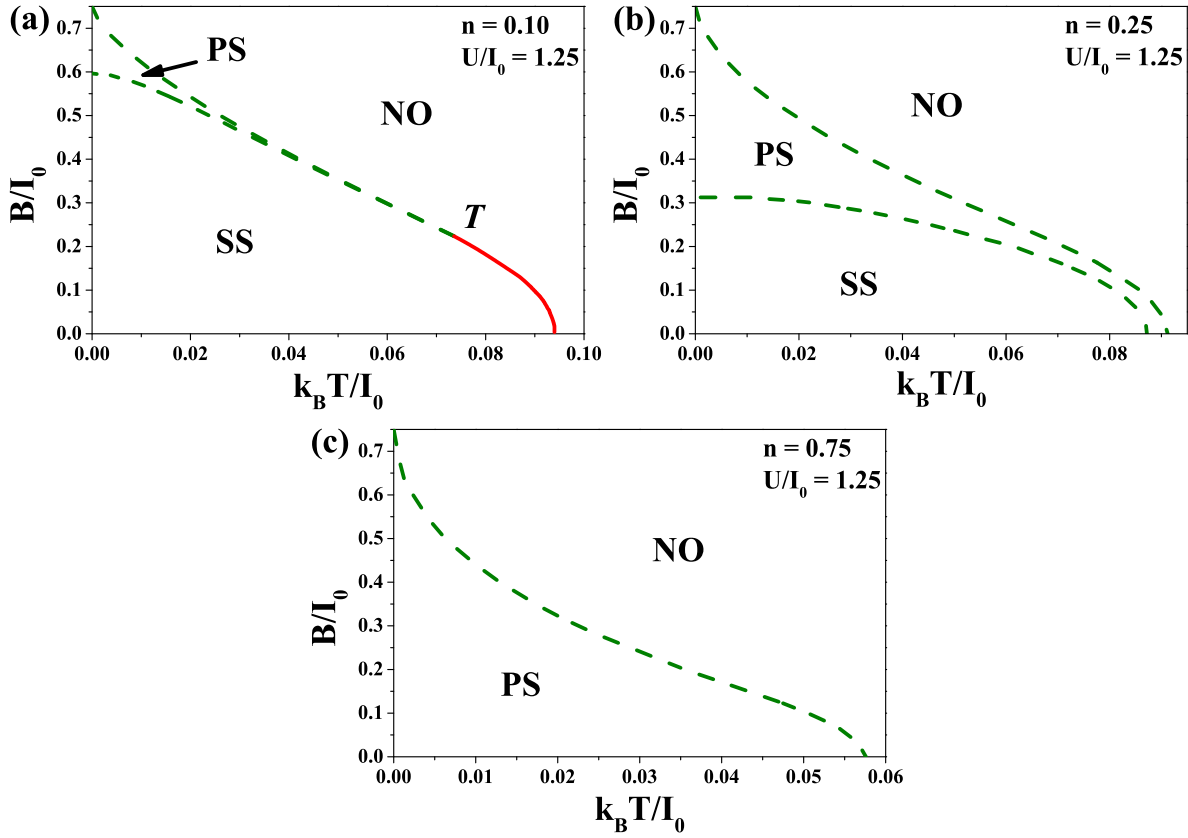


Rys. 3.12: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - n$ dla modelu U - I - B dla $U/I_0 = 0$, $B/I_0 = 0.99$ (a) (odpowiada formie (ii)); $U/I_0 = 0.5$, $B/I_0 = 0.5$ (b); oraz $U/I_0 = 1$, $B/I_0 = 0.25$ (c) (odpowiada formie (iii)). Szczegóły w tekście. Linie ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, przemiany drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. T oznacza punkt trójkrytyczny.

- (ii) stan PS:SS/NO pojawia się wyłącznie dla $T > 0$, np. Rys. 3.12(a) (w tym przypadku linia przemiany SS–NO pierwszego rodzaju kończy się dla $T > 0$ dla ustalonego $\bar{\mu}$);
- (iii) stan PS rozciąga się od $T = 0$ (możliwe tylko dla $1 < (U + B)/I_0 < 2$), np. Rys. 3.12(c) (w tym przypadku linia przemiany pierwszego rodzaju SS–NO kończy się w $T = 0$ dla ustalonego $\bar{\mu}$))

Na Rys. 3.12(b) przedstawiono sytuację graniczną pomiędzy przypadkami (ii) i (iii). Zakresy zmienności parametru B/I_0 dla kilku szczególnych wartości U/I_0 , w których występują wyżej wymienione formy (i)–(iii) diagramów fazowych, są zestawione w górnej części Tabeli 3.1.

Ponadto można wyróżnić trzy różne postacie diagramów fazowych $B/I_0 - k_B T / I_0$ otrzymanych dla ustalonych wartości koncentracji elektronowej $n \neq 1$ (oraz ustalonego U/I_0), które są przedstawione na Rys. 3.13 (wartości numeryczne dla $U/I_0 = 1.25$). Dla $U/I_0 < (2/3) \ln(2)$ tylko forma (A) (pokazana na Rys. 3.13(a)) występuje dla dowolnego $0 < n < 1$ (por. dolna część Tabeli 3.1). W takim przypadku punkt trójkrytyczny T występuje w $T > 0$. W wyższych temperaturach i niższych polach (od tych odpowiadają-

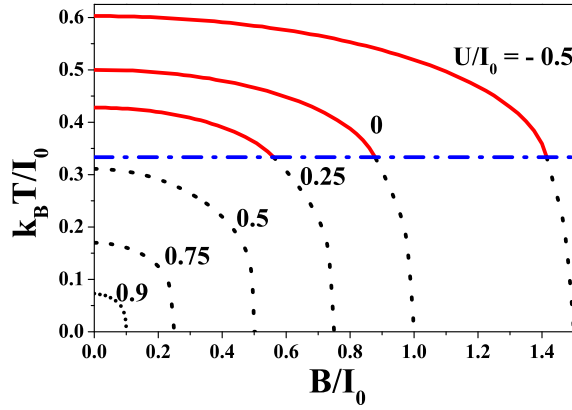


Rys. 3.13: Diagramy fazowe B/I_0 – $k_B T/I_0$ dla modelu U – I – B dla $U/I_0 = 1.25$ i $n = 0.1, 0.25, 0.75$ (odpowiadające odpowiednio formom (A)–(C) diagramów fazowych zdefiniowanych w tekście). Oznaczenia jak na Rys. 3.12.

cych punktowi **T**) przemiana SS–NO jest przemianą ciągłą (por. także Rys. 3.11(a)). W niższych temperaturach oraz wyższych polach (od tych odpowiadających punktowi **T**) obszary występowania faz SS oraz NO są rozdzielone obszarem stabilności stanu PS. W zakresie $(2/3)\ln 2 < U/I_0 < 1$ forma (A) jest realizowana wyłącznie dla odpowiednio małych n , natomiast dla większych n pojawia się forma (B), gdzie regiony występowania faz SS oraz NO na diagramie są rozdzielone obszarem stabilności stanu PS dla dowolnych: pola B i temperatury T (Rys. 3.13(b)). Dla $1 < U/I_0 < 2$ i koncentracji n dostatecznie

Tab. 3.1: Zakresy występowania różnych form diagramów fazowych dla modelu U – I – B . Formy te zdefiniowano w tekście związanym z Rys. 3.12–3.13.

Forma	$U/I_0 = 0$	$U/I_0 = 0.75$	$U/I_0 = 1.25$
(i)	$0 \leq B/I_0 < 0.88$	—	—
(ii)	$0.88 < B/I_0 < 1$	$0 \leq B/I_0 < 0.25$	—
(iii)	$1 < B/I_0 < 2$	$0.25 < B/I_0 < 1.25$	$0 \leq B/I_0 < 0.75$
(A)	$0 < n < 1$	$0 < n < 0.3$	$0 < n < 0.11$
(B)	—	$0.3 < n < 1$	$0.11 < n < 0.5$
(C)	—	—	$0.5 < n < 1$



Rys. 3.14: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - B / I_0$ (dla modelu $U-I-B$) dla $n = 1$ i różnych U / I_0 (wartości nad krzywymi). Linie kropkowane i ciągłe odpowiadają, odpowiednio, przemianom pierwszego i drugiego rodzaju. Linia kropkowo-kreskowana oznacza linię punktów trójkrytycznych dla $n = 1$.

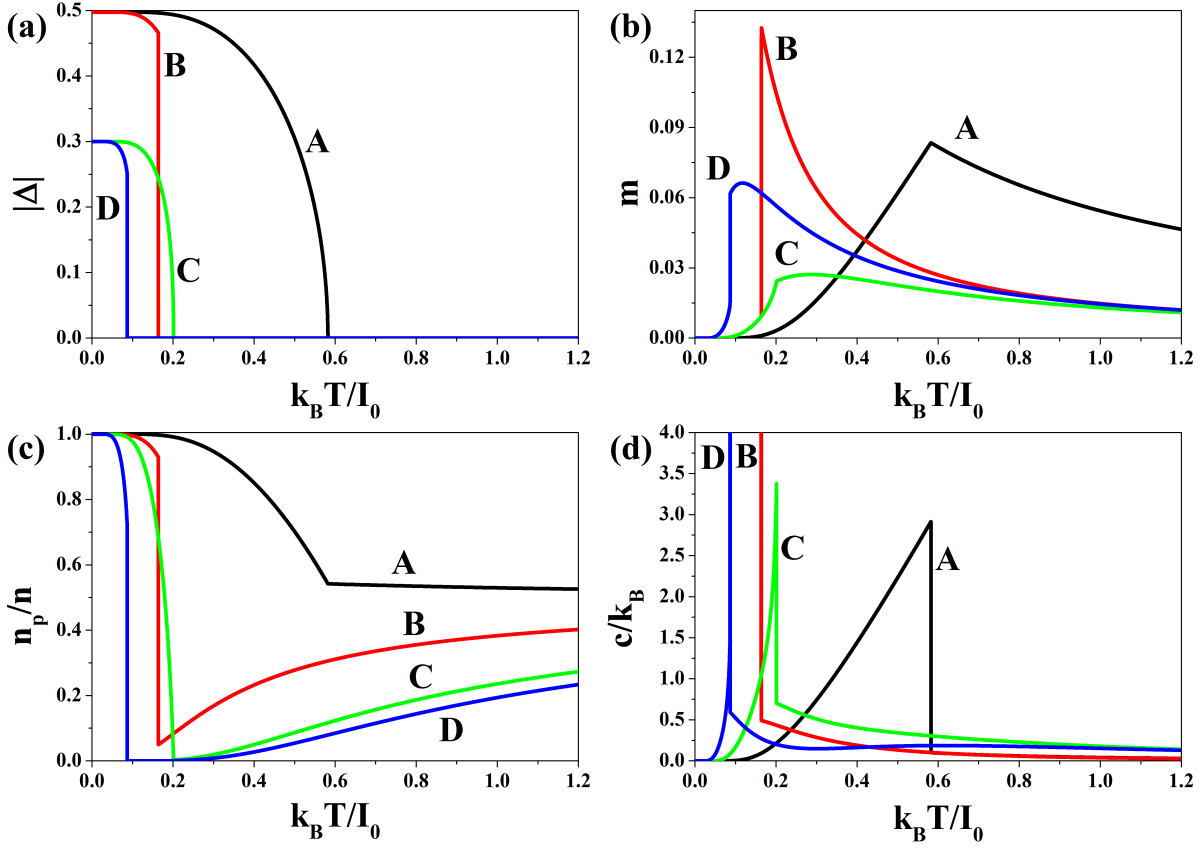
bliskiej półpełnemu wypełnieniu pasma (tj. $n = 1$) wyłącznie stan PS jest stabilny (brak jednorodnej fazy SS na diagramie fazowym, forma (C) przedstawiona na Rys. 3.13(c)). Zakresy n , w których występują wyżej wymienione formy (A)–(C) diagramów fazowych, dla kilku szczególnych wartości U / I_0 są zestawione w dolnej części Tabeli 3.1.

Diagramy fazowe otrzymane dla $n = 1$ i różnych U / I_0 przedstawiono na Rys. 3.14. W takim przypadku wyłącznie fazy jednorodne (SS, NO) pojawiają się na diagramach. Przemiana SS–NO ze wzrostem T jest przemianą drugiego rodzaju dla $k_B T / I_0 > 1/3$ (to może zachodzić tylko gdy $U / I_0 < (2/3) \ln 2$), podczas gdy dla $k_B T / I_0 < 1/3$ (oraz dowolnego $U / I_0 < 1$).

3.3.2.2 Parametry termodynamiczne

Zachowanie parametrów termodynamicznych w obecności pola magnetycznego jest podobne do tego dla $B = 0$ opisanego w Rozdziale 3.2.2.3. Na Rys. 3.15 pokazano kilka reprezentatywnych przebiegów charakterystyk termodynamicznych dla ustalonych parametrów modelu dla $B \neq 0$.

Na Rys. 3.15(a) przedstawiono temperaturową zależność nadprzewodzącego parametru porządku Δ , gdzie wyraźnie widać nieciągłą zmianę parametru porządku podczas przemiany pierwszego rodzaju (linie B i D). Pozostałe przebiegi odpowiadają przemianom drugiego rodzaju. Temperaturowe zależności magnetyzacji m zaprezentowano na Rys. 3.15(b) (w przypadku B i C linie te nie są rozróżnialne w fazie SS). Należy zauważyć, że w fazie SS m jest silnie zredukowane ($m = 0$ w $T = 0$) i rośnie wraz ze wzrostem temperatury, podczas gdy w fazie NO m maleje wraz ze wzrostem temperatury i $m = 0$ dla $T \rightarrow +\infty$ (dla $-2\bar{\mu} > U + B$ magnetyzacja m może rosnąć wraz z T w sąsiedztwie (powyżej) T_{SS} , np. linia C i D). W skończonych temperaturach $T > 0$ gdy $B \neq 0$ magnetyzacja m jest niezerowa ($m > 0$) w obu fazach jednorodnych (SS, NO) jak i w stanie PS. Ponadto okazuje



Rys. 3.15: Zależności temperaturowe (dla modelu U - I - B) (a) nadprzewodzącego parametru porządku $|\Delta|$, (b) magnetyzacji m , (c) stosunku n_p/n oraz (d) ciepła właściwego c/k_B dla $\bar{\mu}/I_0 = -0.1$, $U/I_0 = -0.5$ i $B/I_0 = 0.5$ (A), $\bar{\mu}/I_0 = -0.1$, $U/I_0 = 0.75$ i $B/I_0 = 0.1$ (B) oraz dla $\bar{\mu}/I_0 = -0.8$, $U/I_0 = 0.75$ i $B/I_0 = 0.1$ (C), $\bar{\mu}/I_0 = -0.8$, $U/I_0 = 1.25$ i $B/I_0 = 0.1$ (D).

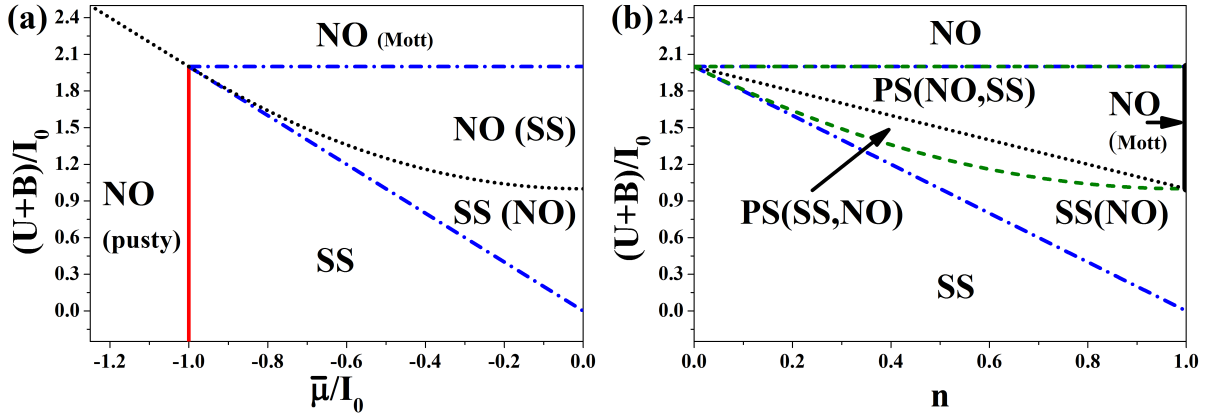
się, że m w fazie SS nie zależy od $\bar{\mu}/I_0$ (n) przy ustalonym $B/I_0 \neq 0$.

Przebiegi koncentracji sparowanych elektronów n_p oraz ciepła właściwego przy ustalonej objętości c/k_B w funkcji temperatury zostały przedstawione na Rys 3.15(c) i Rys 3.15(d), odpowiednio. Ich dyskusja jest podobna do tej przedstawionej w Rozdziale 3.2.2.3.

3.4 Analiza faz metastabilnych

W niniejszym rozdziale przeanalizujemy stany metastabilne w modelu (3.1) i określimy ich obszary występowania na diagramach fazowych w przypadkach $B = 0$ oraz $B \neq 0$ (w przybliżeniu wariacyjnym VA).

Przypomnijmy, że rozwiązanie układu równań samozgodnych (3.5)–(3.6) odpowiada fazie metastabilnej, jeśli odpowiada ono lokalnemu minimum wielkiego potencjału ω (lub energii swobodnej f) ze względu na Δ oraz warunek stabilności $\partial\mu/\partial n > 0$ jest spełniony. W przeciwnym wypadku mówimy, że faza jest niestabilna. Stabilna faza jednorodna to faza metastabilna odpowiadająca najmniejszej energii swobodnej spośród wszystkich faz



Rys. 3.16: Diagram fazowy stanu podstawowego modelu U - I - B w funkcji $\bar{\mu}$ (a) i w funkcji n (b) z uwzględnieniem faz metastabilnych ($\bar{\mu} = \mu - U/2$). Szczegóły w tekście (Rozdział 3.4.1).

metastabilnych oraz stanów z separacją faz, jeśli takie istnieją. Z tego powodu w naszym przypadku niezwykle istotne jest znalezienie wszystkich rozwiązań dla faz jednorodnych, dla których potencjał ω (energia f) ma minimum lokalne ze względu na $|\Delta|$, jeśli układ jest rozważany przy ustalonym μ (ustalonym n).

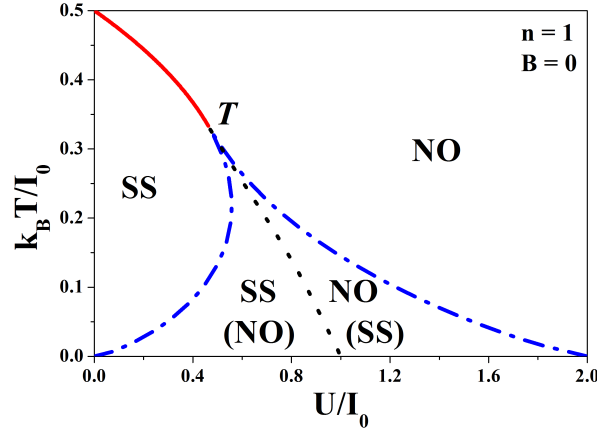
Możemy wyróżnić sześć różnych obszarów występujących na diagramach fazowych modelu (3.1) uwzględniających fazy metastabilne. W obszarach (1)–(6), zdefiniowanych poniżej, mamy:

- (1) wyłącznie faza NO jest stabilna;
- (2) wyłącznie faza SS jest stabilna;
- (3) NO(SS) — faza SS jest metastabilna w obszarze stabilności fazy NO (stan PS:SS/NO nie występuje);
- (4) SS(NO) — odwrotnie niż poprzednio, faza NO jest metastabilna w obszarze stabilności fazy SS;
- (5) PS(NO,SS) — stan PS:SS/NO ma najniższą energię, obie fazy jednorodne są metastabilne, faza SS ma wyższą energię niż faza NO ($f_{NO} > f_{SS} > f_{PS}$);
- (6) PS(SS,NO) — podobnie jak w obszarze (5) stan PS:SS/NO ma najniższą energię, ale tym razem faza NO ma wyższą energię niż faza SS ($f_{SS} > f_{NO} > f_{PS}$).

Powyższe oznaczenia będą stosowane zamiennie w całym niniejszym rozdziale oraz na Rys. 3.16–3.21 (ze względu na czytelność rysunków).

3.4.1 Stan podstawowy ($T = 0$)

Diagramy stanu podstawowego z uwzględnieniem faz metastabilnych otrzymane w przybliżeniu VA są przedstawione na Rys. 3.16. Należy podkreślić fakt, że fazy metastabilne występują wyłącznie gdy $T > 0$. Granice występowania faz metastabilnych przedstawione na Rys. 3.16 są formalnie przedłużeniem odpowiednich granic dla infinitezmal-



Rys. 3.17: Diagram fazowy $k_B T / I_0 - U / I_0$ dla $n = 1$ i $B = 0$ (model U - I) z uwzględnieniem faz metastabilnych. Linie kropkowane i ciągłe odpowiadają, odpowiednio, przemianom pierwszego i drugiego rodzaju. Linie kropkowo-kreskowane oznaczają granice występowania faz metastabilnych (nazwy faz metastabilnych w nawiasach). **T** oznacza punkt trójkrytyczny.

nie małych $T > 0$. Dla $T = 0$ tylko jedna faza (stan) może być stabilna. Jak pokazaliśmy wcześniej Rozdziale 3.3, w stanie podstawowym nieciągła przemiana SS–NO występuje dla $(U + B)/I_0 = (\bar{\mu}/I_0)^2 + 1$ (dla ustalonego $|\bar{\mu}|/I_0 < 1$), podczas gdy ciągła przemiana SS–NO zachodzi dla $|\bar{\mu}|/I_0 = 1$ oraz $(U + B)/I_0 < 2$. Obszar występowania stanu PS:SS/NO jest wyznaczony przez warunki: $(U + B)/I_0 \leq 2$ oraz $|n - 1|^2 \leq (U + B)/I_0 - 1$ ($n \neq 1$). Dla $n = 1$ i $(U + B)/I_0 = 1$ występuje nieciągła przemiana SS–NO. Przedłużenie (do $T = 0$) linii nieciągłej przemiany pomiędzy fazami metastabilnymi (tj. SS oraz NO) jest opisane równaniem $(U + B)/I_0 = 1 + |1 - n|$ (dla ustalonego n). Granice obszarów, w których fazy jednorodne są metastabilne w pobliżu $T = 0$, są następujące

- faza NO: $(U + B)/I_0 = 2|\bar{\mu}|/I_0$ oraz $|\bar{\mu}|/I_0 < 1$ (lub $(U + B)/I_0 = 2|n - 1|$, $0 \leq n \leq 1$)
- faza SS: $(U + B)/I_0 = 2$ oraz $|\bar{\mu}|/I_0 < 1$ (lub $0 \leq n \leq 1$)

Zauważmy, że dla fazy SS warunek $\partial\mu/\partial n > 0$ jest spełniony w $T = 0$ (w szczególności w zakresie występowania stanu PS), podczas gdy $\partial\mu/\partial n = 0$ w fazie NO (por. Rozdział 3.3.1).

3.4.2 Skończone temperatury ($T > 0$)

3.4.2.1 Brak zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$)

Dyskusję zachowania się faz metastabilnych w skończonych temperaturach $T > 0$ rozpoczniemy od przypadku, w którym zewnętrzne pole magnetyczne nie występuje ($B = 0$). W takim przypadku dla $U/I_0 < 0$ (granica par lokalnych) fazy metastabilne nie występują

i zachowanie układu oraz diagramy fazowe dla rozważanego modelu są takie jak przedstawiono w Rozdziale 3.2. Wraz ze wzrostem temperatury występuje tylko przemiana drugiego rodzaju SS–NO. Temperatura przemiany jest maksymalna dla $U \rightarrow -\infty$ oraz $\bar{\mu} = 0$ ($n = 1$) i maleje monotonicznie wraz ze wzrostem $\bar{\mu} = |n - 1|$. Dla $U/I_0 > 2$ tylko faza NO jest stabilna, nie występują żadne fazy metastabilne oraz żadne przemiany wraz ze wzrostem temperatury. Poniżej zaprezentujemy analizę faz metastabilnych w modelu (3.1) w zakresie $0 < U/I_0 < 2$ ($B = 0$), którą rozpoczniemy od przypadku $n = 1$.

Pasmo wypełnione w połowie ($n = 1$, $B = 0$)

Na Rys. 3.17 zaprezentowano diagram fazowy dla półpełnego pasma ($n = 1$, $\bar{\mu} = 0$, $B = 0$), na którym uwzględniono fazy metastabilne. Możemy wyróżnić cztery zakresy odpychania jednowęzłowego ($0 < U/I_0 < 2$), dla których występuje różne zachowanie badanego układu:

- (i) $0 < U/I_0 < (2/3) \ln 2$: występuje przemiana SS–NO drugiego rodzaju, w niskich temperaturach faza NO jest metastabilna;
- (ii) $(2/3) \ln 2 < U/I_0 < 0.557$: przemiana SS–NO jest przemianą pierwszego rodzaju (jest to prawda w całym zakresie $(2/3) \ln 2 < U/I_0 < 1$). Powyżej temperatury przemiany faza SS jest metastabilna, podczas gdy faza NO jest metastabilna poniżej (blisko, w sąsiedztwie) temperatury przemiany. W niskich temperaturach występuje drugi obszar metastabilności fazy NO;
- (iii) $0.557 < U/I_0 < 1$: występuje jeden obszar metastabilności fazy NO, który rozciąga się od $T = 0$;
- (iv) $1 < U/I_0 < 2$: nie zachodzą żadne przemiany wraz ze wzrostem temperatury, wyłącznie faza NO jest stabilna. W odpowiednio niskich temperaturach faza SS jest metastabilna.

Znając wyniki dla modelu (3.1) dla $n = 1$ można łatwo otrzymać wyniki dla modelu U – W , w którym $W > 0$ [107, 108, 150–153]. W takim przypadku, na diagramie fazowym faza SS odpowiada fazie CO uporządkowanej ładunkowo [150, 153] (postać diagramu uwzględniająca tylko fazy stabilne jak na Rys. 4.5(a)). Dla $W < 0$ [106, 153] diagram fazowy jest również podobnej postaci (występuje jednak wyłącznie przemiana „trzeciego rodzaju” PS:NO/NO–NO, postać diagramu uwzględniająca tylko fazy stabilne jak na Rys. 4.5(b)), przy czym fazie SS odpowiada stan PS:NO/NO, a fazami metastabilnymi są dwie fazy NO o różnych koncentracjach n_+ i n_- . Ponadto z Rys. 3.17, za pomocą uogólnionej transformacji $U \leftrightarrow -U$ [7, 76, 77, 135, 136], można otrzymać diagram fazowy dla modelu U – J [154, 155]. W takiej sytuacji faza SS odpowiada fazie uporządkowanej

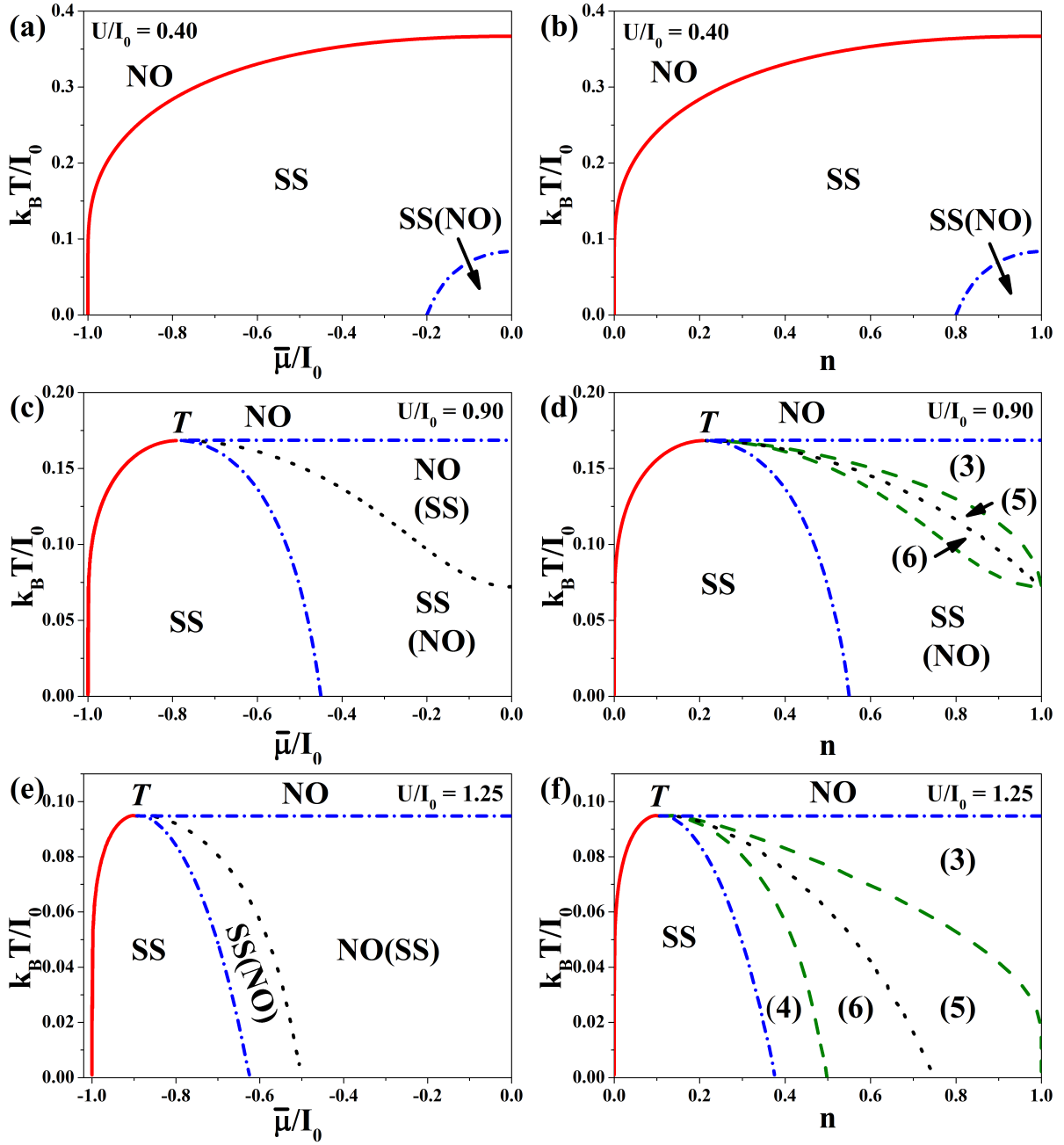
ferromagnetycznie wraz z jednoczesną zamianą $U \rightarrow -U$ na diagramie z Rys. 3.17. Podkreślimy, że wymienione wyżej relacje pomiędzy modelami dotyczą wyłącznie wyników otrzymanych w podejściu VA (względnie wyników otrzymanych dla granicy $d \rightarrow +\infty$).

Dowolne koncentracje elektronowe ($B = 0$)

Poniżej zostały zebrane wyniki dla dowolnej koncentracji n (oraz dowolnego potencjału chemicznego $\bar{\mu} = \mu - U/2$). Na Rys. 3.18–3.20 przedstawiono kilka przykładowych diagramów fazowych z zaznaczeniem obszarów występowania faz metastabilnych ($B = 0$). Ich dyskusję przeprowadzimy w kolejności zakresów U/I_0 wymienionych wcześniej.

- (i) $0 < U/I_0 < (2/3) \ln 2$. Diagram fazowy dla $U/I_0 = 0.4$ jest przedstawiony na Rys. 3.18(a)–(b). Przemiana SS–NO pomiędzy stabilnymi fazami jednorodnymi jest ciągła i jej temperatura maleje monotonicznie wraz ze wzrostem U/I_0 i ze wzrostem $|\bar{\mu}|/I_0 = |n - 1|$. Ponadto, w odpowiednio niskich temperaturach faza NO jest metastabilna (w okolicach $n = 1$, $\bar{\mu} = 0$).
- (ii)/(iii) $(2/3) \ln 2 < U/I_0 < 1$. Wraz ze wzrostem U/I_0 w sąsiedztwie $n = 1$ ($\bar{\mu} = 0$) przemiana SS–NO zmienia swój charakter z ciągłej na nieciągłą i punkt trójkrytyczny **T** pojawia się na diagramie fazowym (Rys. 3.18(c)–(d) dla $U/I_0 = 0.9$ oraz Rys. 3.19). Jest dość oczywiste, że w sąsiedztwie przemiany SS–NO pierwszego rodzaju znajdują się obszary występowania faz metastabilnych: powyżej temperatury przemiany faza SS jest metastabilna (obszar (3) — NO(SS)), podczas gdy poniżej temperatury przemiany faza NO jest metastabilna (obszar (4) — SS(NO)). Linia przemiany pierwszego rodzaju SS–NO (na diagramie dla ustalonego $\bar{\mu}$) rozszczepia się na dwie linie przemian „trzeciego rodzaju” (na diagramach dla ustalonego n) i stan PS:SS/NO jest stabilny dla $T > 0$ w pewnym zakresie parametrów modelu (pomiędzy liniami „trzeciego rodzaju”, dla $n \neq 1$). W obszarze stabilności stanu PS (w którym stan PS ma najniższą energię f_{PS}) znajduje się linia przemiany pierwszego rodzaju NO–SS pomiędzy dwoma stanami metastabilnymi (dla $T > 0$). Powyżej tej linii faza SS ma najwyższą energię ($f_{SS} > f_{NO} > f_{PS}$, obszar (5)), natomiast poniżej tej linii faza NO ma najwyższą energię ($f_{NO} > f_{SS} > f_{PS}$, obszar (6)), por. także Rys. 3.21. Linia przemiany pierwszego rodzaju pomiędzy fazami metastabilnymi kończy się dla $n = 1$ oraz $T > 0$. Ponadto, jedna faza metastabilna (SS lub NO) może istnieć w obszarze stabilności faz jednorodnych (NO lub SS, odpowiednio dla ustalonego n (gdzie nie występuje stan PS), por. Rys. 3.18(d) — obszary (3) i (4).

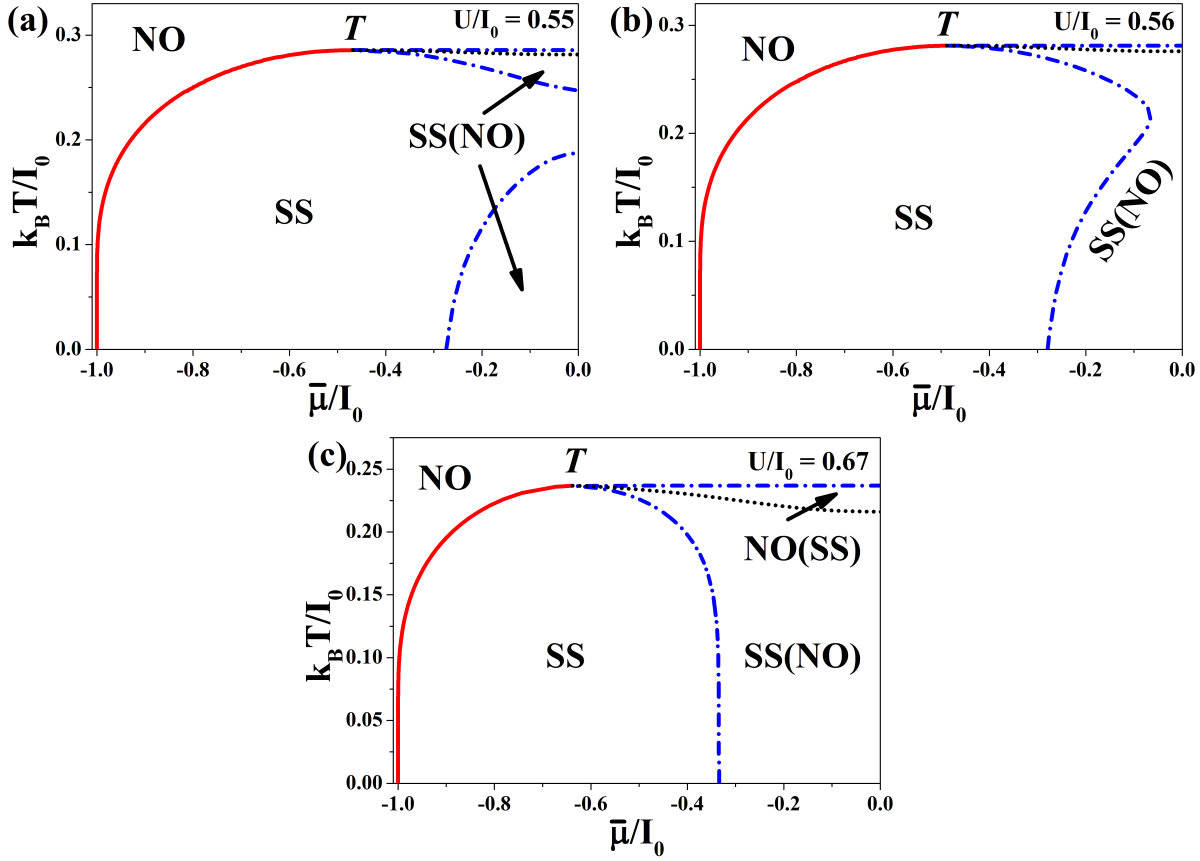
Jedyną różnicą pomiędzy przypadkami (ii) i (iii) jest to, że dla $U/I_0 < 0.557$ na diagramie dla ustalonego U/I_0 występuje oddzielny region metastabilności fazy NO



Rys. 3.18: Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - \bar{\mu}/I_0$ (lewa kolumna) i odpowiadające im diagramy $k_B T/I_0 - n$ (prawa kolumna) dla modelu $U-I$ ($B = 0$) dla różnych $U/I_0 = 0.4, 0.9, 1.25$ (jak oznaczono) z uwzględnieniem faz metastabilnych. Linie kropkowane, ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, przemiany pierwszego, drugiego i „trzeciego” rodzaju. Linie kropkowano-kreskowane oznaczają granice występowania faz metastabilnych (nazwy faz metastabilnych w nawiasach). T oznacza punkt trójkrytyczny. Oznaczenia (1)–(6) zdefiniowano na początku Rozdziału 3.4.

w odpowiednio niskich temperaturach. Dla $U/I_0 \approx 0.557$ obszar ten łączy się z obszarem metastabilności fazy NO w wyższych temperaturach (por. Rys. 3.17 oraz Rys. 3.19(a)–(b)).

Podkreślmy także, że dla $U/I_0 > 0.666$ granica stabilności fazy NO maleje monotonicznie wraz ze wzrostem n (Rys. 3.19(b)–(c)).



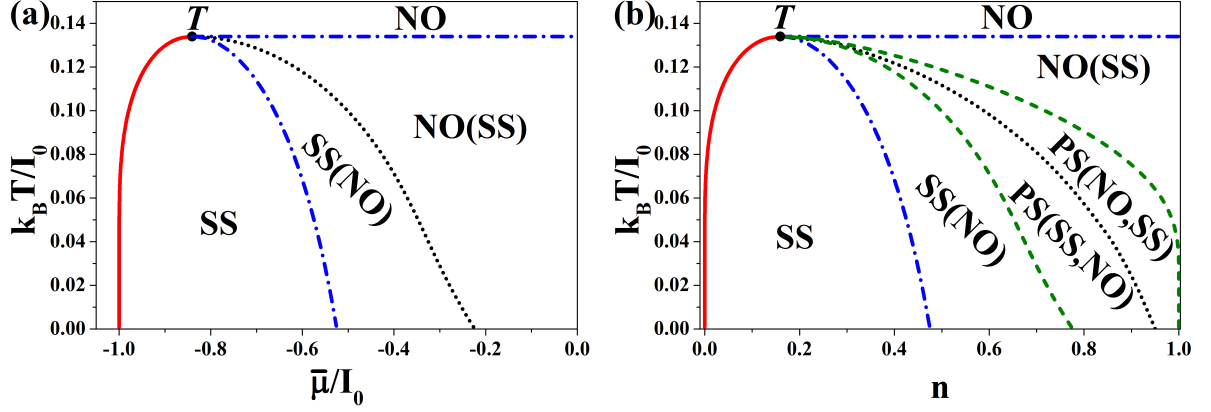
Rys. 3.19: Diagramy fazowe $k_B T/I_0 - \bar{\mu}/I_0$ dla $U/I_0 = 0.55, 0.56, 0.67$ (jak oznaczono, $B = 0$) z uwzględnieniem faz metastabilnych (model $U-I$). Powyżej linii pierwszego rodzaju SS–NO występuje wąski obszar metastabilności fazy SS (nie zaznaczony wprost). Oznaczenia jak na Rys. 3.17.

- (iv) $1 < U/I_0 < 2$. Przykładowe diagramy fazowe są pokazane na Rys. 3.18(e)–(f) (dla $U/I_0 = 1.25$) oraz Rys. 3.20 (dla $U/I_0 = 1.05$). Linia przemiany SS–NO pierwszego rodzaju pomiędzy fazami stabilnymi dla ustalonego $\bar{\mu}$ (oraz metastabilnymi fazami dla ustalonego n) kończy się w $T = 0$ i $\bar{\mu} < 0$ ($n < 1$). Obszar stabilności stanu PS rozciąga się od stanu podstawowego. Pozostała dyskusja jest podobna do tej w przypadku (ii)/(iii).

Termodynamiczne właściwości modelu były analizowane w Rozdziałach 3.2.2.3 oraz 3.3.2.2. W szczególności zachowanie parametrów termodynamicznych w stanie PS oraz w fazach metastabilnych było szeroko dyskutowane w Rozdziale 3.2.2.3.

3.4.2.2 Efekty zewnętrznego pola magnetycznego ($B \neq 0$)

Obecnie przedyskutujemy wpływ zewnętrznego pola magnetycznego $B \neq 0$ na fazy metastabilne i diagramy fazowe modelu (3.1). Szczegółową analizę przeprowadzimy najpierw w zakresie $1 < U/I_0 < 2$. Diagramy fazowe dla $U/I_0 = 1.05$ zostały przedstawione na Rys. 3.20, a ich dyskusję dla $B = 0$ przeprowadziliśmy powyżej. Przejdźmy obecnie do dyskusji zachowania modelu (3.1) dla $U/I_0 = 1.05$ wraz ze wzrostem $n \leq 1$ w polu $B \neq 0$.



Rys. 3.20: Diagramy fazowe modelu U - I dla $U/I_0 = 1.05$ jako funkcja (a) $\bar{\mu}/I_0$ oraz (b) n z uwzględnieniem faz metastabilnych. Oznaczenia jak na Rys. 3.18.

Na Rys. 3.21 przedstawiono kilka przykładowych diagramów fazowych w płaszczyźnie $B/I_0 - k_B T/I_0$ otrzymanych dla $U/I_0 = 1.05$ i ustalonego n ($n = 0.15, 0.40, 0.50, 0.80, 1.00$). Możemy wyróżnić pięć istotnie różnych przypadków, które są wymienione poniżej.

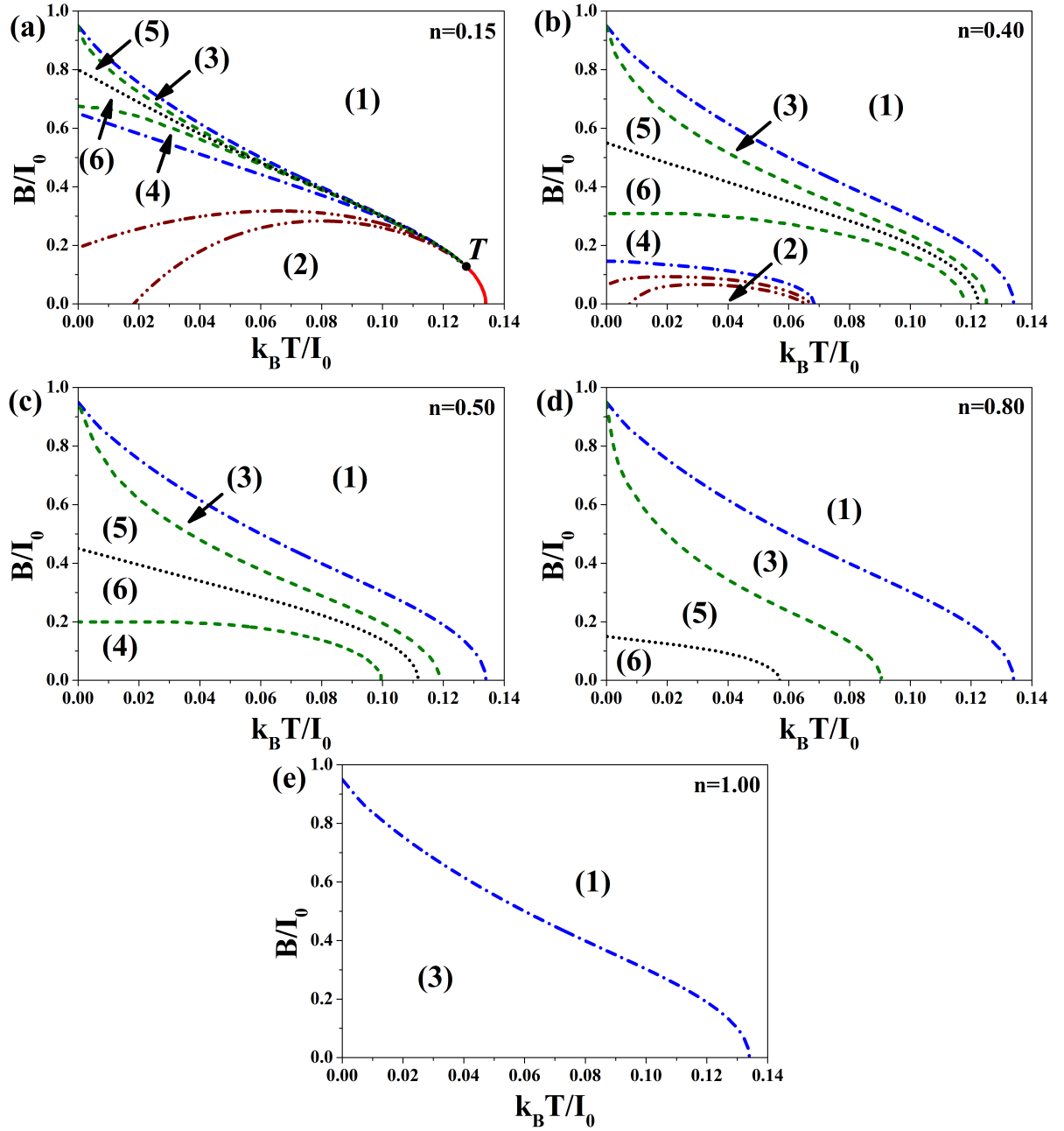
- (i) Dla małych n ($0 < n < 0.159$) punkt trójkrytyczny $\mathbf{T}$ jest obecny na diagramie (Rys. 3.21(a)). Wraz ze wzrostem n współrzędna $k_B T/I_0$ punktu $\mathbf{T}$ rośnie, natomiast współrzędna B/I_0 maleje. Dla $n_1 = 0.159$ punkt $\mathbf{T}$ jest położony na osi $B = 0$.
- (ii) Dla większych n ($0.159 < n < 0.475$) wszystkie linie, które pozostały na diagramie fazowym (tj. dwie linie „trzeciego rodzaju”, jedna linia przemiany pierwszego rodzaju pomiędzy fazami metastabilnymi oraz dwie granice występowania faz metastabilnych) kończą się dla $B = 0$ i nie mają żadnych punktów wspólnych (Rys. 3.21(b)). Wraz ze wzrostem n linie te przesuwają się w stronę mniejszych wartości B/I_0 oraz $k_B T/I_0$ i ostatecznie trzy z nich, po kolei, zanikają w sposób ciągły w punkcie $(k_B T/I_0, B/I_0) = (0, 0)$, natomiast pozostałe dwie, tj. granica „trzeciego rodzaju” PS–NO oraz granica stabilności fazy SS, kończą się dla $B/I_0 = 0.95$ i $T = 0$. Pierwsza zanika granica metastabilności fazy NO dla $n_2 = 0.475$.
- (iii) Dla $0.475 < n < 0.776$ w żadnym obszarze faza NO nie jest niestabilna. Dla $n_3 = 0.776$ zanika jedna z linii „trzeciego rodzaju” (Rys. 3.21(c)).
- (iv) Dla $0.776 < n < 0.950$ obszar stabilności fazy SS nie występuje (faza SS może już być tylko metastabilna) i w niskich temperaturach (i polach) może występować tylko stan PS (Rys. 3.21(d)).
- (v) Dla $n_4 = 0.950$ granica pierwszego rodzaju pomiędzy fazami metastabilnymi zanika i dla $0.950 < n < 1$ poniżej linii PS–NO występuje tylko region (5), który kurczy się (w stronę niższych temperatur) wraz ze wzrostem n . Dla $n = 1$ stan PS nie

występuje na diagramie, nie ma przemian fazowych wraz ze wzrostem temperatury, tylko faza SS jest metastabilna w pewnym zakresie B/I_0 i $k_B T/I_0$ (Rys. 3.21(e)).

Należy podkreślić, że granica metastabilności (górną) fazy SS jest niezależna od n (jak i od $\bar{\mu}$), ponieważ linia ta jest rzutem linii punktów trójkrytycznych (na płaszczyznę $B/I_0 - k_B T/I_0$ w przypadku diagramów $B/I_0 - k_B T/I_0$). Dla niskich koncentracji n , gdy na diagramach występuje punkt **T**, granica ta nie istnieje dla małych B/I_0 , gdzie zachodzi przemiana drugiego rodzaju SS–NO (Rys. 3.21(a)).

Nie wszystkie wymienione powyżej zachowania (i)–(v) (oraz przedstawione na Rys. 3.21(a)–(e)) występują dla mniejszych wartości $U/I_0 < 1$. Ponadto cztery nowe typy diagramów fazowych pojawiają się w przedziale $0 < U/I_0 < 1$. Dwa z nich, które oznaczamy jako (i'') oraz (ii''), są diagramami, których struktura jest bardzo podobna do (i) oraz (ii), odpowiednio. Jediną różnicą jest, że w przypadkach (i'') oraz (ii'') oba końce granicy metastabilności fazy NO znajdują się w $T > 0$ (i $B = 0$). W takich przypadkach faza NO jest niestabilna (region (2)) tylko w pewnych $T > 0$, por. dolna linia kreska-kropka na Rys. 3.21(a,b)). Ponadto granica metastabilności fazy NO może być też niemonotoniczna (nie tak jak w przypadkach (i) oraz (ii)) i kończyć się w $T = 0$ i $B > 0$. Mamy zatem dodatkowo jeszcze dwa nowe typy: (i') oraz (ii'), w których koniec granicy metastabilności fazy NO znajduje się w $T = 0$ i $B > 0$ (por. górna linia kreska-kropka na Rys. 3.21(a,b))). Występuje ciągłe przejście od typów (i) i (ii) do (i'') i (ii'') (przez (i') i (ii')), parami odpowiednio. W szczególności, wraz ze wzrostem $n < 1$, występują następujące sekwencje struktur diagramów fazowych (niektóre z nich w bardzo wąskich zakresach parametrów modelu):

- (a) dla $U/I_0 < 0$ występuje tylko przypadek (i);
- (b) dla $0 < U/I_0 < 0.462$ występują przypadki (i), (i'), (i'')
(ponieważ przemiana SS–NO jest zawsze drugiego rodzaju dla $B = 0$ oraz $U/I_0 < \frac{2}{3} \ln 2$, por. Rys. 3.21(a) oraz Rys. 3.3);
- (c) dla $0.462 < U/I_0 < 0.482$ występują przypadki (i), (i'), (i'') oraz (ii'')
(dla $\frac{2}{3} \ln 2 < U/I_0$ punkt trójkrytyczny **T** może pojawiać się dla $B = 0$ na diagramach);
- (d) dla $0.482 < U/I_0 < 0.557$ występują przypadki (i), (i'), (ii') oraz (ii'')
(punkt **T** dla $B = 0$ przesuwają się w stronę niższych koncentracji n wraz ze wzrostem $U/I_0 > \frac{2}{3} \ln 2$);
- (e) dla $0.557 < U/I_0 < 0.566$ występują przypadki (i), (i'), (ii'), (ii'') oraz (iii)
(dla $U/I_0 > 0.557$ faza NO jest metastabilna dla dowolnego T blisko $n = 1$ dla $B = 0$ (Rys. 3.19(b)) i dlatego pojawia się przypadek (iii));



Rys. 3.21: Diagramy fazowe $B/I_0 - k_B T/I_0$ (model $U-I-B$) dla $U/I_0 = 1.05$ oraz $n = 0.15, 0.40, 0.50, 0.80, 1.00$ (jak oznaczono) z uwzględnieniem faz metastabilnych. Oznaczenia jak na Rys. 3.18. Linie kreska-kropka-kropka schematycznie oznaczają położenie granicy metastabilności fazy NO (dla innych wartości U/I_0 i n niż pokazano). Szczegóły w tekście.

(f) dla $0.566 < U/I_0 < 0.666$ występują przypadki (i), (ii), (ii'), (ii'') oraz (iii);

(g) dla $0.666 < U/I_0 < 1$ występują przypadki (i), (ii), (ii') oraz (iii)

(granica metastabilności fazy NO jest monotoniczna gdy $B = 0$ dla $U/I_0 > 0.666$, Rys. 3.19(c)).

Granica metastabilności fazy NO zanika w sposób ciągły do punktu położonego w $T = 0$ i $B = 0$ (zmiana z typu (ii') do typu (iii)) lub położonego w $T > 0$ i $B = 0$ (zmiana z typu (ii'') do typu (iii)). W przeciwieństwie do dyskutowanego wcześniej zakresu $1 < U/I_0 < 2$,

w przypadku zakresu $U/I_0 < 1$ (tj. dla wyżej wymienionych przypadków (a)–(g)), linia „trzeciego rodzaju” PS–SS oraz linia pierwszego rodzaju SS–NO pomiędzy fazami metastabilnymi (por. Rys. 3.21(a)–(b)) łączą się razem w $n = 1$, i dla $n = 1$ oraz $k_B T/I_0 < 1/3$ występuje przemiana pierwszego rodzaju SS–NO — Rys. 3.14 (w sąsiedztwie której występują obszary metastabilności odpowiednich faz). Dla $n = 1$ stan PS nie występuje.

Należy podkreślić, że wyznaczone obszary występowania faz metastabilnych mogą być mniejsze niż są one w rzeczywistości (w przybliżeniu VA) na skutek skończonej dokładności przy wyznaczaniu minimów lokalnych odpowiednich potencjałów termodynamicznych. Kwestia ta może mieć istotne znaczenie dla występowania typu (ii’), w szczególności w zakresie $0.666 < U/I_0 < 2$.

Jak duże znaczenie ma dokładne znalezienie zakresu parametrów modelu, w którym występuje lokalne minimum $\omega(f)$ za względu na Δ (tj. znalezienie rozwiązań układu (3.5)–(3.6) odpowiadających fazom metastabilnym) widać z porównania Rys. 3.17 oraz wyników pracy [153]. W pracy [153] nie znaleziono płytkich minimów funkcji $\omega(f)$ i otrzymane obszary występowania metastabilnych faz NO oraz CO (która odpowiada fazie SS w naszym przypadku) dla $n = 1$ są silnie zredukowane w porównaniu z tymi przedstawionymi na Rys. 3.17.

Zauważmy ponadto, że z przedstawionej tutaj analizy wynika, że linie przemian fazowych pierwszego rodzaju wyznaczone w pracy [140] odpowiadają liniom przemian pierwszego rodzaju SS–NO pomiędzy fazami metastabilnymi w funkcji koncentracji n .

3.5 Dyskusja i uwagi podsumowujące

W Rozdziale 3 zbadano prosty model nadprzewodnika z krótką długością koherencji (tj. takiego nadprzewodnika, w którym rozmiar pary elektronowej jest rzędu efektywnego rozmiaru węzła sieci), zarówno bez pola jak i w zewnętrznym polu magnetycznym (analizowany był jednak jedynie efekt paramagnetyczny). Rozważano sytuację, w której ruchliwość pojedynczych elektronów jest znacznie mniejsza od ruchliwości pary jako całości i może być zaniedbana. Ponadto paramagnetyczne pole krytyczne jest proporcjonalne do energii wiązania pary (przynajmniej w granicy niskich koncentracji) [140]. Jednocześnie zaniedbaliśmy pozostałe oddziaływania pomiędzy elektronami. Wyznaczono diagramy fazowe oraz charakterystyki termodynamiczne dla modelu (3.1) (zarówno dla $B = 0$ jak i dla $B \neq 0$) dla ustalonego μ oraz ustalonego n , a ponadto określono zakresy występowania stanów z separacją faz oraz faz metastabilnych w badanym modelu.

Właściwości badanego układu silnie zależą od stosunku U/I_0 , który jest związany z energią wiązania pary E_b i efektywną ruchliwością pary t_p . Dla pojedynczej pary w układzie, tj. dla $n \rightarrow 0$, mamy $E_b = -E(q = 0) = -U + 2I_0$ oraz $t_p = \frac{1}{4} \frac{\partial E(q)}{\partial q} \big|_{q=0} = I$, a masa

efektywna pary wynosi $m_p^* = 1/(4t_p) = 1/(4I)$ (gdy $B = 0$) [140]. Wynik ten jest ścisły dla $n \rightarrow 0$ i wzrost koncentracji n może zmieniać E_b . Szerokość pasma par elektronowych wynosi $4t_p z = 4Iz$. Możemy wyróżnić dwa graniczne typy zachowania termodynamicznego dla badanego układu w sąsiedztwie temperatury T_{SS} przemiany SS–NO: (i) granica par lokalnych oraz (ii) granica rozrywania par.

W granicy par lokalnych (odpowiednio duże przyciągające U i małe B) energia wiązania par jest duża i pary te są silnie związane. W takim przypadku oba oddziaływania: jednowęzłowe U oraz międzywęzłowe I „współpracują” i temperatura przemiany jest określona przez ruchliwość par (tj. przez I). Przemiana SS–NO jest przemianą drugiego rodzaju i zachodzi do fazy NO, będącej stanem dynamicznie nieuporządkowanych par lokalnych (dla $T > T_{SS}$). Dla $U \rightarrow -\infty$ badany model jest równoważny z modelem bozonów z twardym rdzeniem i w takim przypadku efekt paramagnetyczny pola nie występuje.

Odpychające U utrudnia parowanie na węzłach i konkuruje z I . Dla znacznych wartości U oraz B ($(U + B)/I_0 \gtrsim 1$) właściwości układu ulegają radykalnej zmianie. Obszar ten możemy nazwać granicą rozrywania par. W granicy tej temperatura przemiany T_{SS} jest określona przez wzbudzenia powodujące rozrywanie par (sterowanych przez U oraz B , które niszczą pary) i generalnie powyżej (ale dostatecznie blisko) temperatury przemiany $T \gtrsim T_{SS}$ w układzie nie ma bądź występuje niewielka liczba („prekursorowych”) par elektronowych.

Jak pokazaliśmy wcześniej (Rozdział 3.2) wzrost U ($B = 0$) powoduje:

- (i) dla ustalonego μ : zmianę rodzaju przemiany SS–NO z ciągłej (drugiego rodzaju) na nieciągłą (pierwszego rodzaju), a następnie zniszczenie nadprzewodnictwa w układzie;
- (ii) dla ustalonego n : stabilizuje stan z separacją faz PS:SS/NO w określonym zakresie koncentracji $2/3 \ln 2 < U/I_0 < 2$. W zakresie $(2/3) \ln 2 < U/I_0 < 1$ stan PS występuje tylko dla $T > 0$, podczas gdy dla $1 < U/I_0 < 2$ stan PS pojawia się już w $T = 0$;
- (iii) przesuwanie się maksimum temperatury T_{SS} przemiany SS–NO w stronę niższych koncentracji ($n < 1$).

Pole magnetyczne $B \neq 0$ ma istotny wpływ na zachowanie fazy nadprzewodzącej. Zasadniczo wzrost B powoduje kurczenie się obszarów występowania nadprzewodnictwa (jako fazy jednorodnej SS bądź jako domeny w stanie PS:SS/NO). Jest to efekt podobny do tego jaki wywołuje wzrost U . Z przedstawionej wcześniej analizy (Rozdział 3.3) mamy:

- (iv) dla ustalonego μ , jeśli dla $B = 0$ przemiana SS–NO jest drugiego rodzaju, wzrost B powoduje najpierw zmianę rodzaju przemiany z ciągłej na nieciągłą, a następnie zniszczenie nadprzewodnictwa w układzie;

- (v) dla ustalonego n stabilizuje stan z separacją faz PS:SS/NO w określonym zakresie koncentracji (może się ona pojawić w układzie jeśli nawet dla $B = 0$ nie występowała — separacja indukowana polem);
- (vi) dla ustalonego n możemy wyróżnić pięć różnych struktur diagramów fazowych przedstawionych na Rys. 3.13 (3 dla $n \neq 1$) i Rys. 3.14 (2 dla $n = 1$) lub dwanaście jeśli uwzględnimy fazy metastabilne (5 + 4 dla $n \neq 1$ i 3 dla $n = 1$).

Wyżej wymienione zachowania związane są z występowaniem punktu trójkrytycznego $\mathbf{T}$ na diagramach fazowych modelu (3.1). Ponadto znaleźliśmy (Rozdział 3.4), że:

- (vii) granica metastabilności fazy SS nie zależy od n ani $\bar{\mu}$ dla $|\bar{\mu}|$ ($|1 - n|$) mniejszych od tych dla punktu $\mathbf{T}$, rozwiązania dla jednorodnej fazy SS istnieją tylko dla temperatur poniżej temperatury punktu $\mathbf{T}$;
- (viii) rozwiązania dla jednorodnej fazy NO istnieją dla dowolnych parametrów modelu. Poza obszarami, w których faza NO jest (meta-)stabilna, faza ta jest niestabilna;
- (ix) dwie jednorodne fazy metastabilne mogą występować w obszarach stabilności stanu PS:SS/NO. Pomiędzy stanami metastabilnymi może zachodzić przemiana pierwszego rodzaju.

Wiarygodność podejścia wariacyjnego w skończonych wymiarach ($d < +\infty$)

Porównując wyniki otrzymane dla $T = 0$ za pomocą podejścia VA z tymi uzyskanymi innymi metodami (ściśle dla liniowego łańcucha ($d = 1$), RPA dla sieci kwadratowej ($d = 2$) oraz sieci kubicznej ($d = 3$)) widać, że generalna struktura diagramu fazowego jest podobna. Wynika stąd, że podejście VA może dawać jakościowo dobre wyniki dla sieci o skończonej wymiarowości. Niemniej, trzeba podkreślić, że w skończonych wymiarach na skutek fluktuacji kwantowych związanych z oddziaływaniami przeskoku pary I_{ij} obszary występowania jednorodnej fazy SS są większe w porównaniu z tymi otrzymanymi w przybliżeniu VA. Ponadto, dla liniowego łańcucha występuje tylko porządek krótkiego zasięgu w $T = 0$, w przeciwieństwie do wyników VA i RPA (SWA) w $d \geq 2$, gdzie obecny jest porządek dalekiego zasięgu.

Podkreślimy, że dla $d < +\infty$ podejście VA przeszacowuje temperatury przemian (co jest rzeczą oczywistą, gdyż mamy do czynienia z przybliżeniem MFA dla wyrazów międzywęzłowych) i daje niewłaściwą ich zależność funkcyjną od n ($k_B T_{SS} \sim -1/\ln(n/2)$ dla $n \ll 1$, $B = 0$, por. (3.11)). Dla idealnego gazu Bosego w $d = 3$ ze spektrum k^2 (granica $U \ll 0$ i $n \ll 1$ analizowanego modelu (3.1)) zależność temperatury przemiany SS–NO od koncentracji jest następująca: $T_{SS} \sim n^{2/3}$. Zależność ta może być otrzymana np. za pomocą przybliżenia RPA, nawet dla skończonych wartości U/I_0 [131]. Przybliżenie RPA

przewiduje również występowanie punktu trójkrytycznego w skończonych temperaturach dla $d = 3$, co potwierdza, że podejście VA może dawać satysfakcjonujące (jakościowo) wyniki w skończonych temperaturach także dla sieci o skończonych wymiarowościach. Wyniki RPA dla $d = 2$ i $T > 0$ są zgodne z twierdzeniem Mermin-Wagnera [156], które dowodzi braku dalekiego porządku dla $d \leq 2$ w $T > 0$. Dla $d = 2$ wraz ze wzrostem temperatury występuje przejście fazowe typu Kosterlitz-Thoulessa [157–159].

Efekty skończonej wartości jednoelektronowej całki przeskoku ($t_{ij} \neq 0$)

Analizowany model (3.1) może opisywać układy, w których ruchliwość pojedynczych elektronów (całka przeskoku pojedynczego elektronu) jest dużo mniejsza niż ruchliwość par (energia kinetyczna par) i może zostać pominięta w pierwszym przybliżeniu. Obecnie przedyskutujemy efekty skończonej szerokości pasma ($t_{ij} \neq 0$). Obecność wyrazu przeskoku jednoelektronowego $\sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma})$ łamie symetrię pomiędzy przypadkiem $I > 0$ (faworyzującym fazę SS) a przypadkiem $I < 0$ (faworyzującym fazę η S) — por. także dyskusja zawarta w Rozdziale 4.3. Diagramy fazowe dla modelu Pensona-Kolba-Hubbarda są znacznie bardziej skomplikowane niż te które otrzymaliśmy dla modelu (3.1) [122–130, 137, 160–164], już nawet w stanie podstawowym. Można sądzić, że małe skończone t_{ij} nie zmodyfikuje jakościowo diagramów fazowych przynajmniej dla przypadku $k_B T_{SS} > \sum_j 4t_{ij}^2/|U|$. Głównym efektem (dla $|U| \gg t_{ij}$, $U < 0$) jest renormalizacja oddziaływania przeskoku pary $I_{ij} \rightarrow I_{ij} + 4t_{ij}^2/|U|$ i pojawienie się efektywnego odpychania międzywęzłowego gęstość-gęstość $W_{ij} = 4t_{ij}^2/|U|$ [76, 77, 137, 141]. Dla $U < 0$ i $I < 0$ może także wystąpić porządek ładunkowy [41, 123, 127, 128, 165]. Dla $U > 0$ i obu znaków I wyraz t_{ij} generuje korelacje antyferromagnetyczne (konkurujące z jednowęzłowymi korelacjami nadprzewodzącymi typu s lub η i zewnętrznym polem magnetycznym B , mogące niszczyć nadprzewodnictwo) [7, 70, 81, 141, 166–168], które mogą bardzo istotnie zmienić diagramy fazowe i właściwości stanu normalnego (nienadprzewodzącego), w szczególności dla dużych wartości t_{ij} . W takim przypadku konieczne jest rozważenie różnych stanów uporządkowanych magnetycznie. Ponadto kilka stanów z separacją fazową (w których występują domeny nadprzewodzące, uporządkowane ładunkowo lub magnetycznie) może być stabilne dla $n \neq 1$. Dla większych wartości t_{ij} badania stanu podstawowego modelu PKH na sieciach hiperkubicznych były wykonane za pomocą przybliżenia Hartree-Focka (HFA) złamanej symetrii oraz przybliżenia pola średniego dla uwięzionych bozonów (ang. *slave-boson mean field approximation*, SBMFA) [123]. Dla $d = 1$ na diagramach fazowych w $T = 0$ otrzymanych za pomocą metod teorii pola w granicy ciągłej oraz metody ścisłej diagonalizacji [127, 128] występuje co najmniej dziewięć różnych faz m. in. różne stany nadprzewodzące, stany uporządkowane antyferromagnetycznie (na wiązańach) oraz fale gęstości ładunku, jak również fazy mieszane ze współistniejącym porządkiem na węzłach

i wiązaniach. Obszary stabilności faz z porządkiem na wiązaniach kurczą się wraz ze wzrostem wymiarowości sieci i dla $d \rightarrow +\infty$ na diagramach fazowych występują tylko fazy z porządkiem na węzłach. Należy podkreślić, że granice fazowe dla $T = 0$ i $n = 1$ otrzymane za pomocą przybliżeń HFA i SBMFA ($t_{ij} \neq 0$) są zgodne z wynikami otrzymanymi w niniejszej rozprawie w przybliżeniu VA (dla przemiany SS–NO: $U/I_0 = 1$), nawet dla względnie dużych wartości t_{ij} (szczególnie dla $I > 0$) [123]. Oczywistym jest, że w przypadku $t_{ij} \neq 0$ przemiana następuje do antyferromagnetycznie uporządkowanego stanu Motta.

Efekty pola. Efekt paramagnetyczny a efekt diamagnetyczny

W nadprzewodnikach II-go rodzaju są dwa zasadniczo różne mechanizmy rozrywania par przez przyłożone pole magnetyczne: efekt orbitalny (diamagnetyczny) i efekt paramagnetyczny. Pierwszy jest związany z powstawaniem sieci wirów Abrikosova. Natomiast drugi jest wywołany poprzez rozszczepienie pary elektronowej (pary Coopera) w stanie singletowym na skutek oddziaływania typu Zeemana spinów elektronów z polem. Na ostateczną wartość drugiego pola krytycznego H_{c2} w rzeczywistych układach w ogólności mają wpływ oba te mechanizmy. Względne znaczenie tych dwóch efektów może być opisane za pomocą parametru α (parametr Maki’ego) [169]. Parametr ten jest zdefiniowany jako

$$\alpha = \sqrt{2}H_{c2}^{orb}(T = 0)/H_P(T = 0), \quad (3.37)$$

gdzie H_{c2}^{orb} jest górnym polem krytycznym w nieobecności wyrazu Zeemana (uwzględniając tylko efekt orbitalny), natomiast H_P jest polem krytycznym wywołanym wyłącznie przez ten wyraz (paramagnetyzm Pauliego). Dla $\alpha \ll 1$ (konwencjonalne nadprzewodniki niskotemperaturowe) efekt orbitalny jest dominujący, natomiast dla materiałów, gdzie występują elektrony z dużą masą efektywną (układy wąskopasmowe), parametr $\alpha > 1$ i mechanizm paramagnetyczny staje się istotny. Spośród wielu materiałów, w których $\alpha > 1$, możemy jako przykładowe wymienić następujące: CeCoIn_5 , $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu(NCS)}_2$, $\alpha\text{-(ET)}_2\text{NH}_4\text{Hg(SCN)}_4$, $\kappa\text{-(ET)}_2\text{Cu[N(CN)}_2\text{]Br}$ and $\lambda\text{-(BETS)}_2\text{GaCl}_4$. Zauważmy ponadto, że dla układów oddziałujących fermionów na niewirujących sieciach optycznych może wystąpić tylko efekt paramagnetyczny.

W analizowanym modelu (3.1) pole magnetyczne oddziałuje ze spinami elektronowymi wyłącznie poprzez wyraz Zeemana. Problem wkładu efektu orbitalnego poprzez wyraz I [124, 129, 141, 160] na właściwości i diagramy fazowe modelu (3.1) zostawiamy do przyszłej analizy. Wydaje się jednak, że efekt diamagnetyczny pola dla $U < 0$ powinien być jakościowo podobny do tego dla $U \rightarrow -\infty$ [132, 165] (dla skończonego $U < 0$ efekt ten będzie słabszy, ponieważ pary elektronowe mają skończoną energię wiązania).

Zauważmy ponadto, że temperaturowa zależność górnego pola krytycznego w niekonwencjonalnych nadprzewodnikach ma pozytywną krzywiznę, co jest zgodne z otrzymanymi przez nas wynikami (granica PS:SS/NO–NO np. na Rys. 3.13). Niemniej jednak własności stanu PS:SS/NO są całkowicie inne od tych dla stanu mieszanego (Abrikosova-Shubnikova) występującego w nadprzewodnikach drugiego rodzaju: brak kwantyzacji strumienia pola magnetycznego, brak sieci wirów, itd. Stan ten jest raczej bliższy stanowi pośredniemu w nadprzewodnikach pierwszego rodzaju. Tak zdefiniowane „górne pole krytyczne” (w $T = 0$) jest niezależne od koncentracji n i zależy tylko od U , podczas gdy „dolne pole krytyczne” maleje wraz ze wzrostem n .

Ostatnie eksperymenty na ultrazimnych (spolaryzowanych) gazach Fermiego spulapkowanych w zewnętrznym potencjale harmonicznym mogą stanowić alternatywną drogę analizy wpływu efektu Zeemana na nadprzewodnictwo cząstek fermionowych. W takich układach zaobserwowano separacje polegającą na występowaniu centralnego rdzenia złożonego ze sparowanych cząstek oraz niesparowanych atomów poza obszarem rdzenia [57–60].

Inne uwagi

Istotnym zagadnieniem jest zbadanie wpływu międzywęzłowych oddziaływań gęstość-gęstość [107, 108, 150–153, 170] i oddziaływań magnetycznych [154, 155, 171–173] na diagramy fazowe modelu (3.1). Analizie tego problemu jest poświęcony następny rozdział. Zauważmy, że z wcześniejszej dyskusji wynika, że oddziaływania te możemy traktować w pierwszym przybliżeniu jako oddziaływania efektywne, pochodzące od całki przeskoku pojedynczych elektronów (przynajmniej w przypadku gdy $t_{ij} \ll |U|$, por. Rozdział 4.3).

Konkurencja i wzajemne relacje pomiędzy nadprzewodnictwem i innymi rodzajami uporządkowania elektronowego

Obecnie rozważymy konkurencję i wzajemne relacje nadprzewodnictwa (z krótką długością koherencji) z dwoma innymi typami uporządkowań elektronowych, z którymi może ono współistnieć lub konkurować w rzeczywistych układach. Tymi uporządkowaniami są:

- (i) porządek ładunkowy (współistnienie z nadprzewodnictwem w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych, np. miedziany, bizmutaty) oraz
- (ii) porządek magnetyczny (współistnienie z nadprzewodnictwem np. w grupie nadprzewodników żelazowych czy nadprzewodników ciężkofermionowych, może też być istotne znaczenia dla właściwości fazy nadprzewodzącej w miedzianach).

Wyniki zawarte w niniejszym rozdziale zostały częściowo opublikowane w dwóch pracach autora rozprawy [19, 20]. Konkurencja pomiędzy magnetyzmem i porządkiem ładunkowym w niniejszej rozprawie nie będzie analizowana. Nie mniej jednak jest to również niezwykle interesujący problem (model U - W - J , który był badany np. dla izolatorów [111, 117, 174–177]).

Struktura zawartości Rozdziału 4 przedstawia się następująco:

- Rozdział 4.1 jest poświęcony analizie konkurencji i wzajemnych relacji nadprzewodnictwa i uporządkowań ładunkowych w pewnym szczególnym rozszerzonym modelu Hubbarda w granicy atomowej. Szczegółowo analizujemy przypadek $n = 1$ za pomocą różnych metod uzyskując wyniki dla sieci o różnych wymiarach i strukturze. Ponadto badamy przypadek $U < 0$ dla dowolnej koncentracji elektronowej (dla $T \geq 0$) — znaczne rozszerzenie wyników opublikowanych w pracy [19].
- W Rozdziale 4.2 zajmujemy się konkurencją nadprzewodnictwa i magnetyzmu. Analizujemy przypadek $n = 1$ (wyniki zawarto w [20]) oraz prezentujemy przykładowe rezultaty dla $n \neq 1$ — znaczące rozszerzenie wyników opublikowanych w pracy [20].

- Rozdział 4.3 poświęcony jest jakościowej dyskusji wpływu skończonej wartości całki przeskoku pojedynczych elektronów na zachowanie się faz uporządkowanych w badanych modelach (szczególnie w granicach $U \ll 0$ oraz $U \gg 0$).
- Rozdział 4.4 jest krótkim podsumowaniem rezultatów tej części pracy.

4.1 Konkurencja i wzajemne relacje pomiędzy nadprzewodnictwem i porządkiem ładunkowym

4.1.1 Analizowany model i podstawowe równania

W tym rozdziale (Rozdział 4.1) skoncentrujemy się na analizie wzajemnych relacji i konkurencji pomiędzy nadprzewodnictwem i porządkiem ładunkowym. W tym celu zbadamy modelowy układ opisywany następującym hamiltonianem (model U - I - W):

$$\hat{H} = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - I \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + \frac{1}{2} W \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (4.1)$$

gdzie $\hat{n}_i = \sum_\sigma \hat{n}_{i\sigma}$, $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$, $\hat{\rho}_i^+ = (\hat{\rho}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger$, zgodnie z definicjami wprowadzonymi w Rozdziale 1.3.

Podobnie jak poprzednio rozważane modele, model (4.1) wykazuje symetrię cząstka-dziura, dlatego też otrzymane diagramy fazowe zazwyczaj będą prezentowane w zakresach $\bar{\mu}^* = \mu - U/2 - W_0 < 0$ i $0 \leq n \leq 1$. Ponadto model ten wykazuje, tak jak model (3.1) również symetrię pomiędzy przypadkami $I > 0$ (faworyzujący fazę SS) oraz $I < 0$ (faworyzujący fazę η S) dlatego też w dalszej analizie ograniczymy się zasadniczo wyłącznie do przypadku $I > 0$.

W reprezentacji operatorów pseudospinowych (1.11) hamiltonian (4.1) możemy zapisać jako

$$\begin{aligned} \hat{H} = & 2U \sum_i (\hat{\rho}_i^z)^2 + 2 \sum_{i,j} W_{ij} \hat{\rho}_i^z \hat{\rho}_j^z - \sum_{i,j} I_{ij} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + \\ & + \sum_i 2 \left[W_0 - \mu + \frac{1}{2} U \right] \hat{\rho}_i^z + N \left(\frac{1}{2} W_0 - \mu \right). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Zatem hamiltonian (4.1) jest równoważny z modelem Heisenberga (4.2) dla spinu $\hat{\rho}_i^z$ ($S = 1$, „trójstanowego”) z anizotropią jednojonową w kierunku osi z i dwukrotnie zdegenerowaną wartością 0 składowej z -owej spinu $\hat{\rho}_i^z$ na węźle w zewnętrznym polu magnetycznym $\bar{\mu}^* = \mu - \frac{U}{2} - W_0$. Należy podkreślić, że dla $n = 1$ zewnętrzne pole zanika ($\bar{\mu}^* = 0$, mamy bowiem $\mu = \frac{U}{2} + W_0$ dla $n = 1$). Warunek na liczbę cząstek (w języku

pseudospinów — na magnetyzację w kierunku osi z) jest postaci (podobnej do (3.17)):

$$\frac{1}{2}(n-1) = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{\rho}_i^z \rangle. \quad (4.3)$$

Rozważmy teraz uporządkowania dwupodsieciowe na sieci dwudzielnej (by móc analizować m. in. uporządkowania ładunkowe dla $W > 0$ w podejściu VA). Zakładamy, że sieć, na której zdefiniowaliśmy hamiltonian, jest siecią dwudzielną, tzn. że wszystkie węzły będące najbliższymi sąsiadami każdego węzła leżącego w podsieci A należą do podsieci B i odwrotnie, wszystkie węzły będące najbliższymi sąsiadami każdego węzła leżącego w podsieci B należą do podsieci A . Przykładami takich sieci dwudzielnych są dwuwymiarowa sieć kwadratowa (SQ) oraz trójwymiarowe sieci regularna prosta (SC) i regularna przestrzennie centrowana (BCC). Wyniki, które otrzymaliśmy wcześniej w Rozdziale 2.2, możemy zastosować do przypadku uporządkowań dwupodsieciowych, tzn. takiej sytuacji, gdzie średnia termodynamiczna operatora wielkości fizycznej na danym węźle zależy tylko od podsieci (A lub B), do której należy dany węzeł i dla węzłów w danej podsieci średnie te są identyczne, tzn.

$$\langle \hat{\theta}_i \rangle = \phi_i = \phi_\alpha \text{ dla } i \in \alpha = \begin{cases} \phi_A & \text{dla } i \in A, \\ \phi_B & \text{dla } i \in B, \end{cases}$$

gdzie $\alpha = A, B$, $\hat{\theta}_i = \hat{n}_i, \hat{\rho}_i^+, \hat{s}_i^z, \hat{s}_i^+$ i wtedy odpowiednio $\phi = n, \Delta^*, m, \xi^*$ (zapis „symboliczny”). Ponadto $U_i = U_\alpha$ i $E_i = E_\alpha$ dla $i \in \alpha$. Pamiętajmy, że ograniczyliśmy także zasięg oddziaływań występujących w hamiltonianie (4.1) do najbliższych sąsiadów. Wielki potencjał termodynamiczny ω dla hamiltonianu (4.1) w rozważanym obecnie przypadku (na mocy wyników Rozdziału 2.2) przyjmuje więc postać:

$$\omega = C - \frac{1}{2\beta} \ln (4\bar{Z}_A \bar{Z}_B), \quad (4.4)$$

gdzie

$$C = -\bar{\mu} + \frac{1}{2}W_0(n_A + n_B) - \frac{1}{2}W_0n_A n_B + I_0(\Delta_A^* \Delta_B + \Delta_A \Delta_B^*) \quad (4.5)$$

oraz

$$\bar{Z}_A = \exp\left(\frac{\beta U}{2}\right) + \cosh\left[\beta\sqrt{4|I_0\Delta_B|^2 + (\bar{\mu} - W_0n_B)^2}\right], \quad (4.6)$$

$$\bar{Z}_B = \exp\left(\frac{\beta U}{2}\right) + \cosh\left[\beta\sqrt{4|I_0\Delta_A|^2 + (\bar{\mu} - W_0n_A)^2}\right], \quad (4.7)$$

a także $\bar{\mu} = \mu - U/2$. Podobnie jak poprzednio $\bar{Z}_A$ i $\bar{Z}_B$ zdefiniowane powyżej nie są sumami stanów dla hamiltonianów (przybliżonych) określonych dla węzłów w danej podsieci.

Dla modelu (4.1) równania (2.35) na odpowiednie średnie na mocy wyników z Rozdziału 2 są postaci (pamiętajmy, że ograniczamy się tylko do uporządkowań dwupodsieciovych na sieciach naprzemiennych, co w przypadku modelu (4.1), w którym oddziaływania są ograniczone do najbliższych sąsiadów jest zasadne):

$$n_A - 1 = \frac{(\bar{\mu} - n_B W_0) \sinh \left(\beta \sqrt{4|I_0 \Delta_B|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_B)^2} \right)}{\bar{Z}_A \sqrt{[4|I_0 \Delta_B|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_B)^2]}}, \quad (4.8)$$

$$n_B - 1 = \frac{(\bar{\mu} - n_A W_0) \sinh \left(\beta \sqrt{4|I_0 \Delta_A|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_A)^2} \right)}{\bar{Z}_B \sqrt{[4|I_0 \Delta_A|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_A)^2]}}, \quad (4.9)$$

$$\Delta_A^* = \frac{\Delta_B^* I_0 \sinh \left(\beta \sqrt{[4|I_0 \Delta_B|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_B)^2]} \right)}{\bar{Z}_A \sqrt{[4|I_0 \Delta_B|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_B)^2]}}, \quad (4.10)$$

$$\Delta_B^* = \frac{\Delta_A^* I_0 \sinh \left(\beta \sqrt{[4|I_0 \Delta_A|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_A)^2]} \right)}{\bar{Z}_B \sqrt{[4|I_0 \Delta_A|^2 + (\bar{\mu} - W_0 n_A)^2]}}, \quad (4.11)$$

gdzie $\bar{\mu} = \mu - U/2$.

Całkowita koncentracja n i parametry porządku n_Q , Δ oraz Δ_Q są związane ze średnimi występującymi powyżej w następujący sposób:

$$n = \frac{1}{2} (n_A + n_B), \quad n_Q = \frac{1}{2} (n_A - n_B), \quad (4.12)$$

$$\Delta = \Delta_{SS} = \frac{1}{2} (\Delta_A + \Delta_B), \quad \Delta_Q = \Delta_{\eta S} = \frac{1}{2} (\Delta_A - \Delta_B). \quad (4.13)$$

Tak zdefiniowane parametry porządku n_Q , Δ oraz Δ_Q będą identyfikować jednorodne fazy uporządkowane mogące wystąpić w badanym układzie (dla $I > 0$):

- (i) w fazie nadprzewodzącej (SS) mamy: $\Delta \neq 0$, $\Delta_Q = 0$, $n_Q = 0$;
- (ii) w fazie uporządkowanej ładunkowo (CO) — $\Delta = 0$, $\Delta_Q = 0$, $n_Q \neq 0$;
- (iii) w fazie mieszanej (M) — $\Delta \neq 0$, $\Delta_Q \neq 0$, $n_Q \neq 0$ (współistnienie porządku ładunkowego i nadprzewodnictwa);
- (iv) w fazie nieuporządkowanej (NO) — $\Delta = 0$, $\Delta_Q = 0$, $n_Q = 0$.

W przypadku rozważania przeciwnego znaku I (tj. $I < 0$) należy zamienić w tych definicjach Δ z Δ_Q (w szczególności w definicji fazy M) i zamiast fazy SS będziemy mieli do czynienia wszędzie z fazą nadprzewodzącą ηS (w której $\Delta = 0$, $\Delta_Q \neq 0$, $n_Q = 0$).

Przegląd dotychczasowych wyników

Model (4.1) był analizowany głównie w granicy $U \rightarrow -\infty$. W granicy tej model (4.1) jest równoważny z modelem bozonów z twardym rdzeniem na sieci [131–134, 178–182].

Ponadto w tej granicy model (4.1) może być otrzymany jako efektywny hamiltonian z rozszerzonego modelu Hubbarda za pomocą rachunku zaburzeń [7, 41, 76, 77, 141, 165] (por. także Rozdział 4.3). Otrzymane wyniki w przybliżeniu VA przewidują współistnienie nadprzewodnictwa z porządkiem ładunkowym, zarówno w postaci jednorodnej fazy mieszanej [7, 76, 77, 141] jak i stanach z separacją fazową [41, 165, 178, 179]. Model bozonów z twardym rdzeniem na sieci badano za pomocą przybliżeń MFA oraz SWA, rozwinięcia stochastycznego i porównano je z wynikami otrzymanymi za pomocą sumowania diagramów drabinkowych [133]. Ponadto dla sieci dwuwymiarowych i trójwymiarowych wykonano kwantowe symulacje Monte Carlo: [134] ($d = 2$) oraz [183] ($d = 2, 3$). Za pomocą przybliżenia RPA zbadano wpływ anizotropii oddziaływań na diagramy fazowe modelu dla sieci o różnych wymiarach ($d = 1, 2, 3$) [131]. Ponadto określono termodynamiczne i elektrodynamiczne właściwości modelu za pomocą przybliżenia RPA i formalizmu reakcji liniowej [132]. Obecnie intensywnie badane są też modele złożone z dwóch bądź wielu podukładów bozonów z twardym rdzeniem (modele wielopasmowe) [184, 185].

Dla skończonych wartości U model (4.1) analizowany był tylko w pracy [19] autora rozprawy ($U < 0$).

Wyniki dla przypadku $I = 0$. Model (4.1) był bardzo szeroko analizowany zarówno dla przypadku $W = 0$ (model U - I , przegląd wyników — Rozdział 3.1) jak i dla przypadku $I = 0$ (model U - W). Poniżej dokonamy krótkiego przeglądu prac, w których analizowany był model U - W .

Dla $W > 0$ stosując metodę macierzy przejścia (transferu), wyznaczono ściśle charakterystyki termodynamiczne dla pasma półpełnego ($n = 1$) [13, 62, 186, 187] oraz szczególnego przypadku $U \rightarrow \infty$ dla $n = 1/2$ [186]. Ponadto określono jego stan podstawowy oraz diagramy fazowe za pomocą przybliżenia pola średniego ze ścisłym traktowaniem członu jednowęzłowego przy ustalonej koncentracji [62, 150]. Znaleziono również ściśle rozwiązanie (równania rozwiązano numerycznie) dla przypadku jednowymiarowego ($d = 1$) łańcucha [170, 188]. W tym przypadku ($d = 1$) zbadano też wpływ zewnętrznego pola magnetycznego [189]. Model U - W analizowano też na sieci Bethego [190, 191]. Otrzymano także ściśle wyniki dla stanu podstawowego przy ustalonym potencjale chemicznym [117, 192–196] (dla dowolnego wymiaru sieci d). Ponadto analizowano model na dwuwymiarowej sieci kwadratowej ($d = 2$) za pomocą symulacji Monte-Carlo [197–199] i uogólnionego algorytmu Wanga-Landaua [200]. Dla $W_1 < 0$ model U - W był analizowany w przybliżeniu MFA [106], a także na sieci Bethego [190, 191].

Analizowano także wpływ oddziaływań gęstość-gęstość pomiędzy dalszymi sąsiadami ($W_2 \neq 0$) na właściwości modelu. Dla $n = 1$ otrzymano ścisły diagram stanu podstawowego w całym zakresie zmienności parametrów modelu (dla $W > 0$, $d = 1, 2$) [63, 117].

Rozważano również granicę $U \rightarrow -\infty$, $W > 0$ (zastosowano przybliżenie pola średniego) [201]. Na mocy równoważności modelu Isinga rozważanego przy ustalonej magnetyzacji z modelem U - W w tej granicy otrzymujemy odpowiednie wyniki w rozważanym przez nas modelu. Badano również uporządkowania czteropodsieciowe w granicy $U \rightarrow -\infty$, gdzie otrzymano pewne charakterystyki przy ustalonym potencjale chemicznym (również użyto przybliżenia pola średniego) [116]. W przybliżeniu VA (głównie dla $W_2 < 0$) określono zakresy występowania stanów z separacją faz [107, 108, 153] oraz zbadano wpływ $W_2 < 0$ dla przypadku jednowymiarowego $d = 1$ [202].

Przeanalizowano również (wstępnie) występowanie faz metastabilnych w modelu U - W [153].

4.1.2 Stan podstawowy ($T = 0$)

4.1.2.1 Przypadek pasma półpełnego ($n = 1$) dla dowolnego U

W celu uzyskania pewnych zerotemperaturowych wyników w skończonych wymiarach ($d = 1, 2, 3$) oraz $d \rightarrow +\infty$ dla modelu (4.1) w przypadku $n = 1$ możemy użyć metody wykorzystanej w Rozdziałach 3.2.1 oraz 3.3.1. Podobnie jak poprzednio, w nieobecności wyrazu kinetycznego dla pojedynczych elektronów ($t_{ij} = 0$), parzystość liczby cząstek na dowolnym węźle jest dobrą liczbą kwantową. Dzięki temu można rozłożyć przestrzeń własną hamiltonianu (4.1) na części charakteryzowane poprzez liczbę obsadzeń na każdym węźle. W takim przypadku rozważany układ składa się dwóch rodzajów segmentów (por. Rozdział 3.2.1): (i) segmentów, w których nie występują pary (podprzestrzeni z wykluczonymi podwójnymi obsadzeniami) oraz (ii) segmentów, w których występują lokalne pary (podprzestrzeni z wykluczonymi pojedynczymi obsadzeniami). Niemniej jednak wyniki takie, w przeciwieństwie do modelu (3.1), możemy otrzymać tylko dla $n = 1$.

W przypadku podprzestrzeni (i) z wykluczonymi podwójnie obsadzonymi węzłami mamy $\hat{\rho}_i^z = 0$ dla każdego węzła (tylko w przypadku gdy $n = 1$, poniższych wyników nie otrzymalibyśmy dla $n \neq 1$). Ponadto, podobnie jak w Rozdziale 3.2.1 iloczyn $\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- = 0$ dla dowolnego $i \neq j$, co oznacza, że wyraz przeskoku pary I nie daje żadnego wkładu. A zatem hamiltonian (4.2) w tej podprzestrzeni przyjmuje tożsamościowo postać

$$\hat{H}_I \equiv N \left(\frac{1}{2} W_0 - \mu \right) \quad (4.14)$$

i energia swobodna na węzeł dla $n = 1$ wynosi:

$$E_{NO} = E_I = \frac{1}{N} \langle \hat{H}_I + \mu \sum_i \hat{n}_i \rangle = \frac{1}{2} W_0. \quad (4.15)$$

Odpowiada to fazie nieuporządkowanej (NO) izolatora Motta z jednym elektronem na

węzeł ($\hat{n}_i = 1$ dla każdego i).

W podprzestrzeni (ii), w której wykluczone są pojedyncze obsadzenia węzłów, wartości własne operatorów ładunkowych wynoszą $\hat{\rho}_i^z = \pm 1/2$ oraz $(\hat{\rho}_i^z)^2 = 1/4$ dla każdego węzła. Zatem model (4.2) w tej podprzestrzeni przyjmuje postać (dla $n = 1$ zewnętrzne pole zanika, tzn. $\mu = U/2 + W_0$):

$$\hat{H}_{II} = N \left[\frac{1}{2}U - \mu + \frac{1}{2}W_0 \right] + \hat{H}_{XXZ}, \quad (4.16)$$

gdzie $\hat{H}_{XXZ}$ jest anizotropowym modelem Heisenberga dla spinu $S = 1/2$ postaci

$$\hat{H}_{XXZ} = -I \sum_{i,j} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + 2W \sum_{i,j} \hat{\rho}_i^z \hat{\rho}_j^z. \quad (4.17)$$

Energia swobodna na węzeł w tym przypadku ($n = 1$) wynosi

$$E_{II} = \frac{1}{N} \langle \hat{H}_I + \mu \sum_i \hat{n}_i \rangle = U/2 + \frac{1}{2}W_0 + \frac{1}{N} \langle \hat{H}_{XXZ} \rangle. \quad (4.18)$$

A zatem problem sprowadza się do wyznaczenia energii na jeden węzeł w anizotropowym modelu Heisenberga dla spinu $S = 1/2$ z anizotropią γ :

$$E_{XXZ} = \frac{1}{N} \langle \hat{H}_{XXZ} \rangle, \quad \gamma = -W/|I|. \quad (4.19)$$

W powyższym rozumowaniu musieliśmy skorzystać z faktu, że $n = 1$. W przeciwnym wypadku musielibyśmy rozważać anizotropowy model Heisenberga dla spinu $S = 1/2$ w zewnętrznym polu magnetycznym, dla którego nie znaleziono do tej pory ścisłego rozwiązania dla $d = 1$ (poza szczególnymi przypadkami: $J^{xy} = J^z$ (izotropowy), $J^{xy} = 0$, $J^z \neq 0$ (model Isinga), $J^{xy} \neq 0$, $J^z = 0$ (model XY)).

Wyniki ścisłe dla jednowymiarowego łańcucha ($d = 1$)

W przypadku jednowymiarowego łańcucha ($d = 1$) stan podstawowy oraz pierwsze stany wzbudzone hamiltonianu (4.17) zostały wyznaczone za pomocą metody Bethego, co pozwoliło wyznaczyć ściśle energię tych stanów. Metoda Bethego wyraża energię (4.19) za pomocą rozwiązań pewnych równań całkowych [143, 203–207]. Używając wyników zawartych w [203, 204] do naszego przypadku otrzymujemy:

(a) $-1 < \gamma < 1$

$$\bar{E}_{SS/\eta S} = E_{XXZ} = 2|I_0| \left\{ -\frac{1}{4}\gamma - \sin \theta \int_0^\infty \left(1 - \frac{\tanh \omega \theta}{\tanh \omega \pi} \right) d\omega \right\}, \quad (4.20)$$

gdzie $\gamma = -\cos \theta$, $0 < \theta < \pi$. Występuje tutaj porządek bliskiego zasięgu składowych w płaszczyźnie x - y pseudospinów $\hat{\rho}_i$ odpowiadający fazom SS/ η S w zależności od znaku I : SS dla $I > 0$, η S dla $I < 0$). W szczególności dla $\gamma = 0$ otrzymujemy $E_{XXZ} = 2|I_0|/\pi$ (por. Rozdział 3.2.1.1).

(b) $\gamma = -1$

$$E_{XXZ} = \left(\frac{1}{2} - 2 \ln 2\right)|I_0| = -0.8863|I_0|. \quad (4.21)$$

Tutaj także występuje porządek bliskiego zasięgu w płaszczyźnie x - y . Zauważmy ponadto, że w rozważanym modelu dla $-1 \leq \gamma < 1$, pomimo że nie występuje porządek dalekiego zasięgu pseudospinów $\hat{\rho}_i$ w kierunku z , może wystąpić ładunkowy porządek bliskiego zasięgu (antyferromagnetyczne korelacje $\rho^z = \langle \hat{\rho}_i^z \hat{\rho}_{i+1}^z \rangle = -\frac{\partial E_{XXZ}}{4\partial W} < 0$): np. dla $\gamma = 0$ mamy $\rho^z = -\frac{1}{\pi^2}$, dla $\gamma = -1$ — $\rho^z = -0.148$. Parametr porządku bliskiego zasięgu w płaszczyźnie x - y jest zdefiniowany alogicznie jak we wzorze (3.23): $\rho^{xy} = |\langle \hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_{i+1}^- \rangle| = |\langle \hat{\rho}_i^x \hat{\rho}_{i+1}^x + \hat{\rho}_i^y \hat{\rho}_{i+1}^y \rangle| = \frac{\partial E_{XXZ}}{4\partial I}$.

(c) $\gamma < -1$

$$\bar{E}_{CO} = E_{XXZ} = 2|I_0| \left\{ \frac{1}{4}|\gamma| - \sinh \phi \left[\sum_{n=1}^{\infty} (1 - \tanh n\phi) + \frac{1}{2} \right] \right\}, \quad (4.22)$$

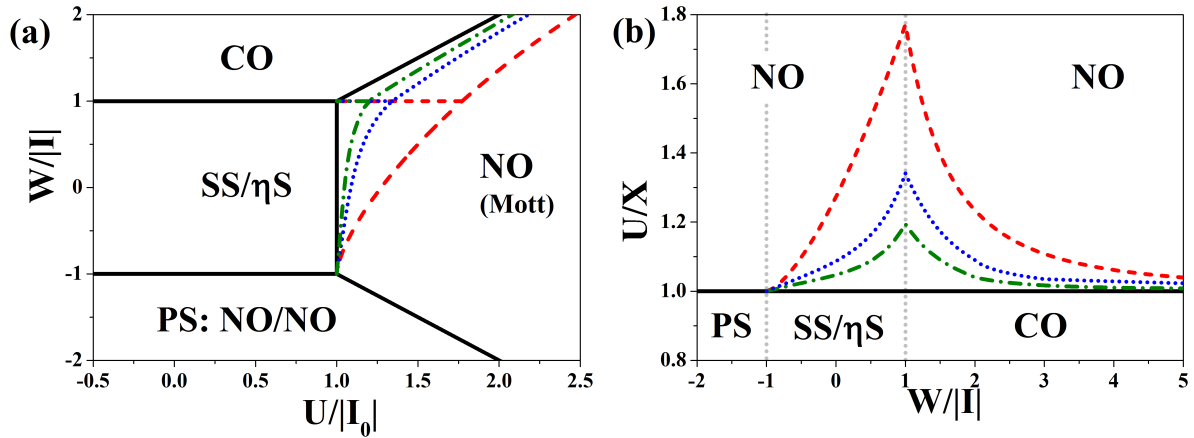
gdzie $\gamma = -\cosh \phi$, $\phi > 0$. Dla tego zakresu parametru γ występuje antyferromagnetyczny porządek dalekiego zasięgu pseudospinów $\hat{\rho}_i$ w kierunku z odpowiadający fazie CO (co jest zgodne z wynikami pracy [170], model U - W jako granica $W/I \rightarrow +\infty$ rozważanego modelu). Dla $-\infty < \gamma < -1$ istotny wpływ na właściwości tej fazy mają również kwantowe korelacje w płaszczyźnie x - y . W granicy $\gamma \rightarrow -\infty$ otrzymujemy

$$\bar{E}_{CO} = E_{XXZ} = -W_0/2. \quad (4.23)$$

(d) $\gamma \geq 1$

$$\bar{E}_{PS} = E_{XXZ} = W_0/2. \quad (4.24)$$

W tym przypadku stan podstawowy modelu (4.17) jest ferromagnetyczny (daleki porządek w kierunku z). Biorąc pod uwagę warunek (4.3) wnioskujemy, że dla $n = 1$ oraz $\gamma \geq 1$ stan podstawowy modelu (4.1) jest zdegenerowany (gdyż $\hat{\rho}_i^z = \pm 1/2$) i w granicy termodynamicznej wykazuje separację fazową PS:NO/NO, tj. wszystkie podwójnie obsadzone węzły (tj. tam gdzie $\hat{\rho}_i^z = +1/2$) wykazują tendencję do przylegania jedno do drugich (na skutek $W < 0$) i w układzie powstaje domena o koncentracji $n_+ = 2$ ($\hat{\rho}_i^z = +1/2$) zajmującą połowę objętości (węzłów) sieci (druga jest „pusta” o $n_- = 0$ oraz odpowiada drugiej połowie węzłów z $\hat{\rho}_i^z = -1/2$). Oczywiście granica pomiędzy powyższymi dwoma domenami posiada pewną (dodatnią) ener-



Rys. 4.1: (a) Diagram stan podstawowego dla modelu U - I - W z $n = 1$. (b) Wielkość parametru U/X , w której zachodzi przemiana z fazy uporządkowanej (SS, η S, CO, PS:NO/NO) do fazy nieuporządkowanej NO, gdzie $X = \text{Max}\{I_0, I_Q, W_0, W_Q\}$ jest parametrem (dodatnim) istotnym dla danej fazy uporządkowanej. Linie przerywane, kropkowane, kropkowo-przerywane i ciągłe oznaczają, odpowiednio, wyniki dla $d = 1$ (wynik ścisły), $d = 2$ (SWA, sieć SQ), $d = 3$ (SWA, sieć SC) oraz $d \rightarrow +\infty$ (VA) (tam gdzie różnią się one od siebie).

gię, niemniej na mocy dyskusji z Rozdziału 3.2.1 jej wkład do całkowitej energii będzie zanikał w granicy termodynamicznej. Ponadto nie występuje tutaj porządek bliskiego zasięgu w płaszczyźnie x - y .

Przybliżone wyniki dla sieci o skończonych wymiarach ($d = 1, 2, 3$)

Znając energie E_{XXZ} stanu podstawowego anizotropowego modelu Heisenberga (4.17) wyznaczonego za pomocą różnych metod dla sieci o różnej wymiarowości możemy również określić diagramy fazowe dla modelu (4.1) dla $n = 1$ w tych przypadkach. Wybrane

Tab. 4.1: Energia $E_{XXZ}/|I_0|$ w modelu Heisenberga (4.17) dla różnych wartości anizotropii $\gamma = -W/|I|$ otrzymana za pomocą różnych metod dla sieci o różnych wymiarowościach.

Metoda	$d = 1$		
	$\gamma = 1$	$\gamma = 0$	$\gamma = -1$
Wynik ścisły [142, 143, 203–207]	-0.5	-0.6366	-0.8863
CCM [208, 209]	-0.5	-0.6377	-0.8863
MFA	-0.5		

Metoda	$d = 2$ (SQ)			$d = 3$ (SC)		
	$\gamma = 1$	$\gamma = 0$	$\gamma = -1$	$\gamma = 1$	$\gamma = 0$	$\gamma = -1$
RPA [131, 132]	-0.5	-0.5432	-0.6580	-0.5	-0.5252	-0.5973
SWA [131, 132, 209, 210]	-0.5	-0.5418	-0.6705	-0.5	-0.5252	-0.5973
CCM [208, 209]	-0.5	-0.5489	-0.6697	-0.5	-0.5280	-0.6017
VMC/QMC [208, 211]	-0.5	-0.5488	-0.6694			
MFA	-0.5					

wartości energii E_{XXZ} otrzymane za pomocą różnych metod: wyniki ścisłe, przybliżenia RPA, SWA, VA, metodami Monte Carlo: wariacyjnymi (VCM) oraz kwantowymi (QMC), a także metodą połączonych klastrów (ang. *cluster coupled method*, CCM) dla różnych wymiarów ($d = 1, 2, 3$) i $\gamma = -1, 0, 1$ zestawiono w Tabeli 4.1.

Ścisłe wyniki dla $d \rightarrow +\infty$ (podejście wariacyjne)

Stosując przybliżenie VA do hamiltonianu (4.1) otrzymujemy następujące wyrażenia dla energii ($E_{II} = \langle \frac{1}{N} \langle \hat{H}_{II} + \mu \sum_i \hat{n}_i \rangle \rangle$) w fazach wymienionych powyżej ($T = 0$, $n = 1$):

$$E_{NO} = \frac{1}{2}W_0, \quad (4.25)$$

$$E_{SS} = \frac{1}{2}(U - I_0 + W_0), \quad (4.26)$$

$$E_{\eta S} = \frac{1}{2}(U - I_Q + W_0), \quad (4.27)$$

$$E_{CO} = \frac{1}{2}U, \quad (4.28)$$

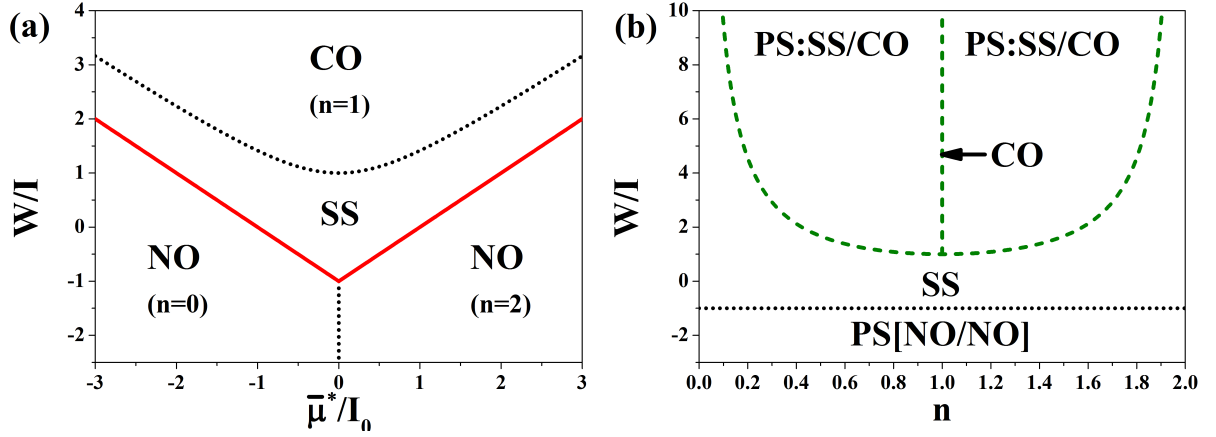
$$E_{PS} = \frac{1}{2}(U - 2W_Q), \quad (4.29)$$

gdzie $I_0 = zI$, $I_Q = -zI$, $W_0 = zW$, $W_Q = -zW$.

Porównując energie E_{II} (faz uporządkowanych w odpowiednich zakresach γ) oraz energię E_I fazy NO można skonstruować ścisły diagram stanu podstawowego dla jednowymiarowego modelu (4.1) w przypadku pasma półpełnego ($n = 1$) przedstawiony na Rys. 4.1(a). Natomiast na Rys. 4.1(b) zaprezentowano wykres wielkości U/X , w której zachodzi przemiana z fazy uporządkowanej lub stanu PS (tj. SS, ηS , CO, PS:NO/NO) do fazy nieuporządkowanej NO, gdzie $X = \text{Max}\{I_0, I_Q, W_0, W_Q\}$ jest parametrem (dodatnim) istotnym dla danej fazy uporządkowanej lub stanu PS, odpowiednio. Ponadto na Rys. 4.1 przedstawiono wyniki otrzymane w przybliżeniu SWA dla sieci kwadratowej ($d = 2$) oraz sieci kubicznej ($d = 3$), a także — dla porównania — wyniki otrzymane w przybliżeniu VA (ściśle dla $d \rightarrow +\infty$).

Uwagi podsumowujące

Widzimy, że w stanie podstawowym efekty fluktuacji kwantowych związanych z międzywęzłowym wyrazem I mają największy wpływ dla liniowego łańcucha ($d = 1$) dla $W/|I| = 1$. Ich wpływ na diagramy fazowe maleje wraz ze wzrostem d (podobnie jak w przypadku modelu U - I , Rozdziały 3.2.1 oraz 3.3.1). Obszary występowania uporządkowanych faz jednorodnych (SS, ηS , CO) rosną wraz z maleniem d . Dla $d = 1$ występuje tylko krótkozasięgowy porządek nadprzewodzący w fazach SS i ηS , natomiast porządek dalekiego zasięgu jest w nich obecny dla $d \geq 2$. W granicy $d \rightarrow +\infty$ fluktuacje kwantowe



Rys. 4.2: Diagram stanu podstawowego dla modelu U - I - W gdy $U < 0$: (a) w funkcji potencjału chemicznego $\bar{\mu}^*/I_0$ oraz (b) koncentracji n . $\bar{\mu}^* = \mu - U/2 - W_0$.

nie są obecne. W fazie CO porządek ładunkowy jest porządkiem dalekiego zasięgu dla $d \geq 1$ ($T = 0$).

4.1.2.2 Dowlone koncentracje dla $U < 0$ (przybliżenie wariacyjne)

Dokonamy teraz analizy stanu podstawowego modelu (4.1) dla $U < 0$ dla dowolnych μ i n w podejściu wariacyjnym ($I > 0$).

Na podstawie analizy dokonanej w Rozdziale 3.2.1 oraz [107, 108] dla $U < 0$ na diagramie fazowym modelu (4.1) rozważanym przy ustalonym $\bar{\mu}^*$ mogą wystąpić niżej wymienione fazy, których potencjały termodynamiczne ω są następujące:

$$\omega_{NO}^a = 0 \quad (n = 0) \quad (4.30)$$

$$\omega_{NO}^b = \frac{1}{2}U - \frac{1}{2}W_0 - \mu \quad (n = 1) \quad (4.31)$$

$$\omega_{NO}^c = U - 2W_0 - 2\mu \quad (n = 2) \quad (4.32)$$

$$\omega_{SS} = -\frac{(-2I_0 - 2\mu + U)^2}{8(I_0 + W_0)} \quad \left(n = 1 + \frac{\mu - \frac{U}{2} - W_0}{I_0 + W_0} \right) \quad (4.33)$$

$$\omega_{CO} = \frac{1}{2}U - \mu \quad (n = 1) \quad (4.34)$$

Powyższe wyniki otrzymaliśmy jako granicę $\beta \rightarrow +\infty$ równań (4.4)–(4.11). Porównując powyższe potencjały ω otrzymujemy diagram fazowy przedstawiony na Rys. 4.2(a). Granica fazowa NO–SS określona jest wzorem $\frac{W_0}{I_0} = \frac{|\bar{\mu}^*|}{I_0} - 1$. Jest to przemiana ciągła (koncentracja n nie wykazuje nieciągłości). Przemiana SS–CO zachodzi dla $\left(\frac{W_0}{I_0}\right)^2 = \left(\frac{\bar{\mu}^*}{I_0}\right)^2 + 1$ i jest przemianą nieciągłą, w której występuje nieciągłe zachowanie m. in. koncentracji z wartości $n_{SS} = 1 \mp \sqrt{\frac{W_0 - I_0}{W_0 + I_0}}$ w fazie SS (dla $n \leq 1$ odpowiednio) do wartości $n_{CO} = 1$ w fazie CO. Ponadto nieciągła przemiana NO–NO zachodzi dla $\bar{\mu}^* = 0$ (i $W/I < -1$).

Możemy też otrzymać wyrażenia na energie (swobodne) fazy jednorodnych. Dla

($n < 1$) mamy

$$E_{NO} = \frac{1}{2}Un + \frac{1}{2}W_0n^2 \quad (4.35)$$

$$E_{SS} = \frac{1}{2}Un + \frac{1}{2}(I_0 + W_0)(n - 1)^2 - \frac{1}{2}I_0 + \frac{1}{2}W_0(2n - 1) \quad (4.36)$$

$$E_{CO} = \frac{1}{2}Un \quad (4.37)$$

$$E_M = E_{SS} - \frac{1}{2} \left[\sqrt{W_0 + I_0(1 - n)} - \sqrt{W_0 - I_0} \right]^2 \quad (4.38)$$

Zauważmy, że w fazie M potencjał chemiczny wynosi $\mu_M = U/2 + W_0 \mp \sqrt{W_0^2 - I_0^2}$ (dla $n \leq 1$ odpowiednio) co oznacza, że faza M na diagramie przedstawionym na Rys. 4.2(a) może wystąpić wyłącznie na granicy SS–CO. Jak zobaczymy poniżej, w $T = 0$ faza ta ma taką samą energię co stan PS:SS/CO.

Zgodnie z tym co powiedzieliśmy wcześniej, nieciągłym przemianom przy ustalonym μ odpowiadają obszary występowania stanów z separacją fazową przy ustalonym n . W obecnie rozważanym przypadku mogą wystąpić zatem dwa takie stany (i) PS:SS/CO z koncentracjami w domenach $n_{SS} = 1 \mp \sqrt{\frac{W_0 - I_0}{W_0 + I_0}}$ ($n \leq 1$ odpowiednio) i $n_{CO} = 1$ oraz (ii) PS:NO/NO z koncentracjami w domenach $n_{NO}^a = 0$ i $n_{NO}^c = 2$. Ich energie będą więc wynosić ($n < 1$):

$$E_{PS}[SS/CO] = \frac{1}{2}Un + (1 - n)\sqrt{W_0^2 - I_0^2} + W_0(n - 1), \quad (4.39)$$

$$E_{PS}[NO/NO] = \left(\frac{1}{2}U + W_0 \right) n. \quad (4.40)$$

Porównując energie (4.35)–(4.40) otrzymujemy diagram przedstawiony na Rys. 4.2(b). Dla $W/I < -1$ występuje stan PS:NO/NO. Jednorodna faza CO ma najniższą energię dla $W/I > 1$ i $n = 1$. Granica SS–PS:SS/CO jest określona wzorem $\frac{W}{I} = \frac{1+(1-n)^2}{1-(1-n)^2}$. Zauważmy, że w granicy $W \rightarrow +\infty$ koncentracja w domenie SS $n_{SS} \rightarrow 0$ ($n < 1$) lub $n_{SS} \rightarrow 2$ ($n > 1$). W przedziale $-1 < W/I < 1$ faza SS ma najniższą energię. Ponadto $E_M = E_{PS}[SS/CO]$ w całym zakresie występowania stanu PS:SS/CO.

Zauważmy, że dla $U \rightarrow -\infty$ otrzymane wyniki (w funkcji n) są zgodne z tymi przedstawionymi w pracy [41]. Ponadto wyniki w tej granicy otrzymane za pomocą przybliżenia RPA ($d = 1, 2, 3$) [7, 131, 132] potwierdzają strukturę diagramu przedstawionego na Rys. 4.2(b). Zasadnicza różnica pomiędzy rezultatami RPA i VA jest taka, że dla $d = 1, 2, 3$ istnieje pewna skończona koncentracja $n_c > 0$, taka że dla $n < n_c$ może występować wyłącznie faza SS ($W/I > 0$) (w VA otrzymujemy, że $n_c = 0$). Podkreślimy także, że w pracach [7, 76, 131, 132] nie rozważano możliwości wystąpienia stanów z separacją fazową (PS:SS/CO) dla $W > 0$.

4.1.3 Skończone temperatury ($T > 0$). Wyniki w granicy par lokalnych ($U < 0$)

4.1.3.1 Diagramy fazowe

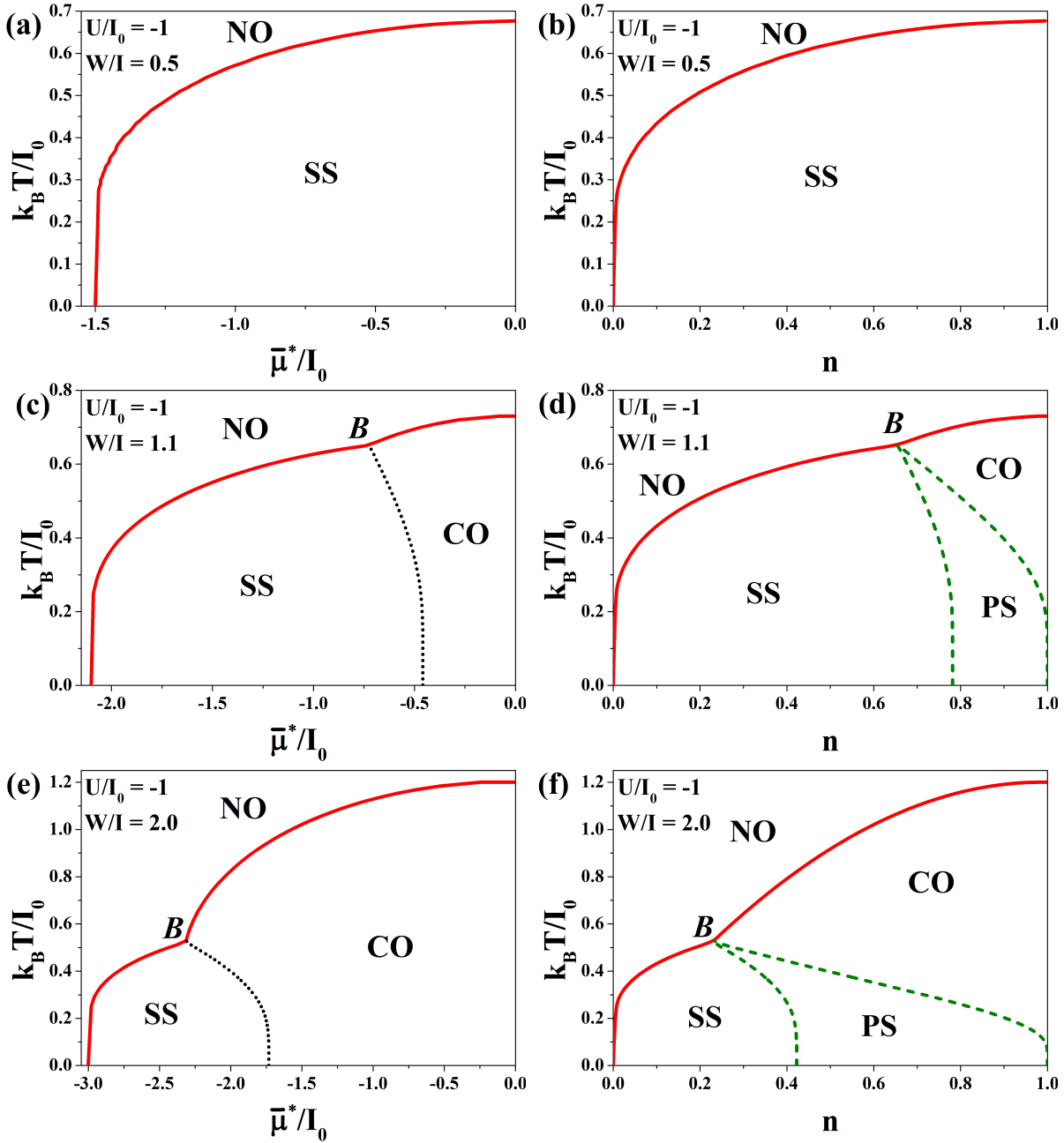
Dla dowolnego $U \leq 0$ i ustalonego $W > 0$ (jak i $W < 0$) diagramy fazowe dla modelu (4.1) są jakościowo podobne, temperatury wszystkich przemian fazowych (pierwszego rodzaju, drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”) maleją monotonicznie wraz ze wzrostem U i w przybliżeniu VA dla $U = 0$ temperatury przemian są dwa razy mniejsze niż te w granicy $U \rightarrow -\infty$, co może zostać zapisane symbolicznie

$$k_B T_c(U \rightarrow -\infty) = 2k_B T_c(U = 0), \quad (4.41)$$

gdzie T_c oznacza temperaturę przemiany (która może być jedną z następujących: SS–NO, SS–CO, CO–NO, PS:SS/NO–CO, PS:SS/NO–SS oraz PS:NO/NO–NO). Dla przemian CO–NO, SS–NO, oraz PS:NO/NO–NO możemy otrzymać wyrażenie analityczne na temperatury tych przemian jako funkcji n [15, 106–108, 140, 150]. Wyrażenia dla temperatur przemian SS–NO (podzielone przez I_0) i PS:NO/NO–NO (podzielone przez W_Q) mają tę samą postać [15, 106, 140]. Dla $W/I = -1$ temperatury te są takie same (por. także (3.12)).

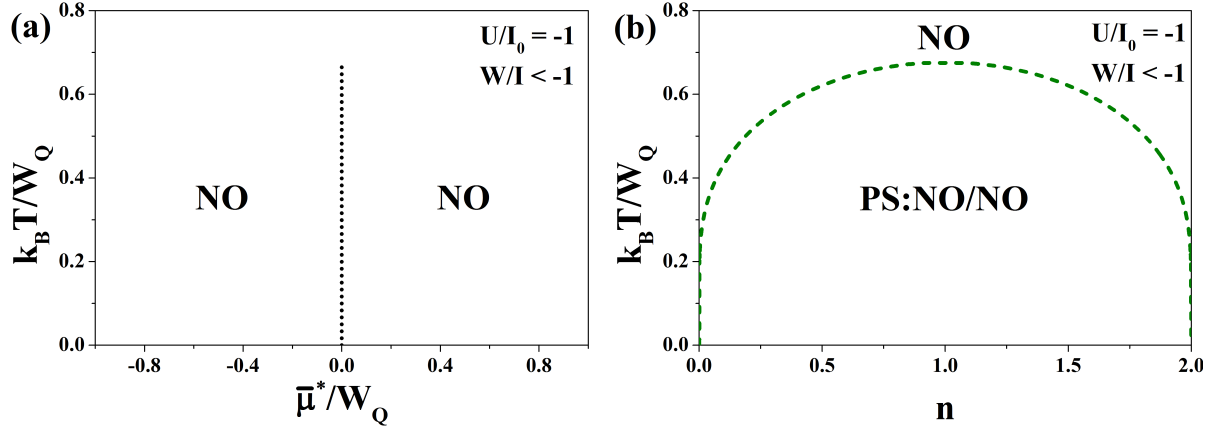
Dla przyciągania jednowęzłowego $U < 0$ (granica lokalnego parowania), struktura diagramów fazowych dla modelu (4.1) zależy wyłącznie od stosunku W/I (por. Rys 4.2 oraz Rys. 4.3). Możemy wyróżnić trzy zakresy wartości W/I , w których układ wykazuje zasadniczo inne zachowania:

- (i) $-1 < W/I < 1$. Na Rys. 4.3(a),(b) zaprezentowane są przykładowe diagramy fazowe dla $W/I = 0.5$. Dla $U < 0$ i $-1 < W/I < 1$ wraz ze wzrostem temperatury występuje wyłącznie przemiana drugiego rodzaju SS–NO. W przypadku, gdy analizujemy układ przy ustalonym n , dla tego zakresu parametrów modelu, stany z separacją faz nie występują i diagramy fazowe mają tę samą strukturę jak te otrzymane w Rozdziale 3.2 (por. też [15, 16, 140]). Przemiana pomiędzy jednorodnymi fazami SS i NO jest przemianą drugiego rodzaju dla dowolnego $\bar{\mu}^*$ oraz n i maleje monotonicznie wraz ze wzrostem $\bar{\mu}/I_0$ oraz $|1 - n|$.
- (ii) $W/I > 1$. Kilka przykładowych diagramów w tym przypadku jest zaprezentowanych na Rys. 4.3(c)–(f). Dla $W/I = 1$ fazy SS, CO oraz M są zdegenerowane dla $n = 1$. Dla $W/I > 1$ trzy fazy jednorodne (SS, CO, NO) mogą być stabilne. Przemiany SS–NO oraz CO–NO są przemianami drugiego rodzaju i ich temperatury są malejącymi funkcjami $|\bar{\mu}|$ oraz $|1 - n|$. Przemiana SS–CO jest nieciągła dla ustalonego $\bar{\mu}^*$,



Rys. 4.3: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - \bar{\mu}^* / I_0$ (lewa kolumna) oraz odpowiadające im diagramy $k_B T / I_0 - n$ (prawa kolumna) modelu U - I - W dla $U / I_0 = -1.0$ i różnych wartości $W / I = 0.5, 1.1, 2.0$ (jak oznaczono). Linie kropkowane, ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, granice pierwszego rodzaju, drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. **B** oznacza punkt bikrytyczny.

w związku z czym stan z separacją faz PS:SS/CO jest stabilny w pewnym zakresie n . Wszystkie linie przemian zbiegają się w punkcie bikrytycznym **B**. Wraz ze wzrostem W , punkt **B** przesuwają się wzdłuż granicy pomiędzy fazami SS oraz NO w stronę większych $\bar{\mu}^*$ ($|1 - n|$). Jest to związane z tym, że w podejściu VA temperatura przemiany SS–NO jest niezależna od W (dla ustalonego n). Region występowania fazy CO jest powiększany, podczas gdy region stabilności fazy SS jest redukowany



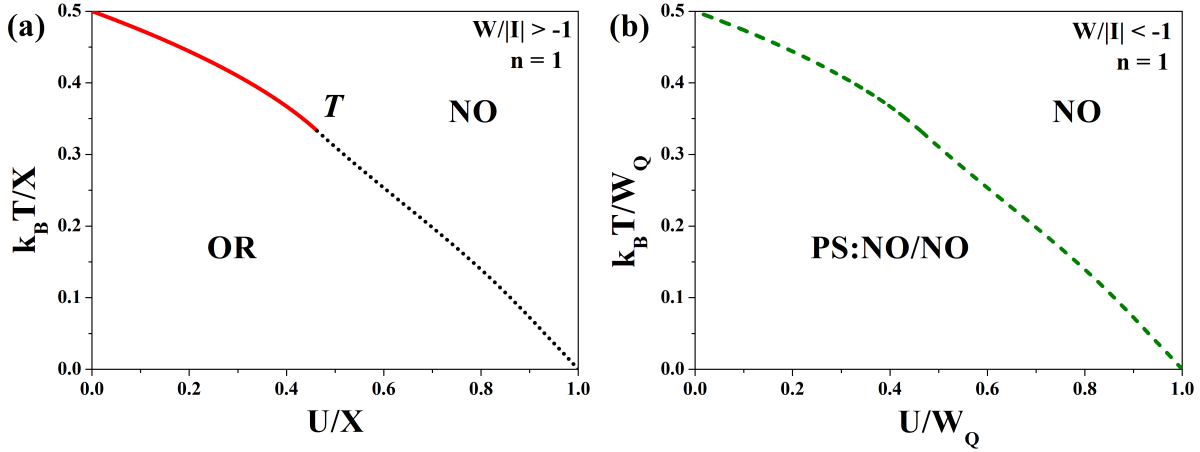
Rys. 4.4: Diagramy fazowe: $k_B T / W_Q - \bar{\mu}^* / W_Q$ (a) oraz $k_B T / W_Q - n$ (b) modelu U - I - W dla $U/I_0 = -1.0$ i dowolnego $W/I < -1$. Linie kropkowane i przerywane oznaczają, odpowiednio, granice pierwszego rodzaju, i „trzeciego rodzaju”.

przez wzrost stosunku W/I . Temperatuzy przemian pierwszego rodzaju SS–CO jak również „trzeciego rodzaju” SS–PS oraz PS–CO rosną wraz ze wzrostem $\bar{\mu}^*$ oraz $|1 - n|$, odpowiednio.

Należy podkreślić, że dla W_{ij} ograniczonych do najbliższych sąsiadów ($W_2 = 0$) stan PS jest ściśle zdegenerowany w temperaturze $T = 0$ z fazą M w całym zakresie stabilności obu tych stanów [41, 165]. Degeneracja ta jest usunięta w $T > 0$, nawet dla $W_2 = 0$ i stan PS:SS/CO pojawia się na diagramach fazowych. Ponadto dla $W_2 < 0$ mogą wystąpić też różne stany z separacją faz, np. PS:CO/NO oraz PS:CO/CO [107, 108, 152, 153]. Odpychające oddziaływanie $W_2 > 0$ pomiędzy następnymi najbliższymi sąsiadami destabilizuje stan PS na rzecz fazy M, podczas gdy przyciągające $W_2 < 0$ zwiększa region stabilności stanu PS i eliminuje fazę M z diagramów fazowych.

- (iii) $W/I < -1$. Dla $W = -1$ i $n = 1$ faza SS ma tę samą energię co stan z separacją faz PS:NO/NO (dwóch faz NO o różnych koncentracjach). Dla $W/I < -1$ w odpowiednio niskich temperaturach na diagramach fazowych w funkcji n występuje wyłącznie stan z separacją faz PS:NO/NO (stan kropli elektronowych) [41, 106, 153, 165] i dla $U < 0$ diagramy fazowe w funkcji n mają podobną strukturę jak te otrzymane w pracy [106] (faza SS w ogóle nie występuje). W przypadku rozważania układu przy ustalonym $\bar{\mu}^*$ w skończonych temperaturach mogą wystąpić wyłącznie przemiany pierwszego rodzaju pomiędzy dwiema fazami NO (dla $\bar{\mu}^* = 0$).

Dla danego $U/W_Q < 0$ diagramy $k_B T / W_Q - n$ (w zakresie $W/I < -1$, Rys. 4.4(b)) mają dokładnie tę samą postać co diagramy $k_B T / I_0 - n$ dla danego $U/I_0 < 0$ (w zakresie $-1 < W/I < 1$ przedstawione w Rozdziale 3.2.2, Rys. 3.5(a)), przy czym fazie SS (występującej dla $-1 < W/I < 1$) odpowiada stan PS:NO/NO (podana właści-

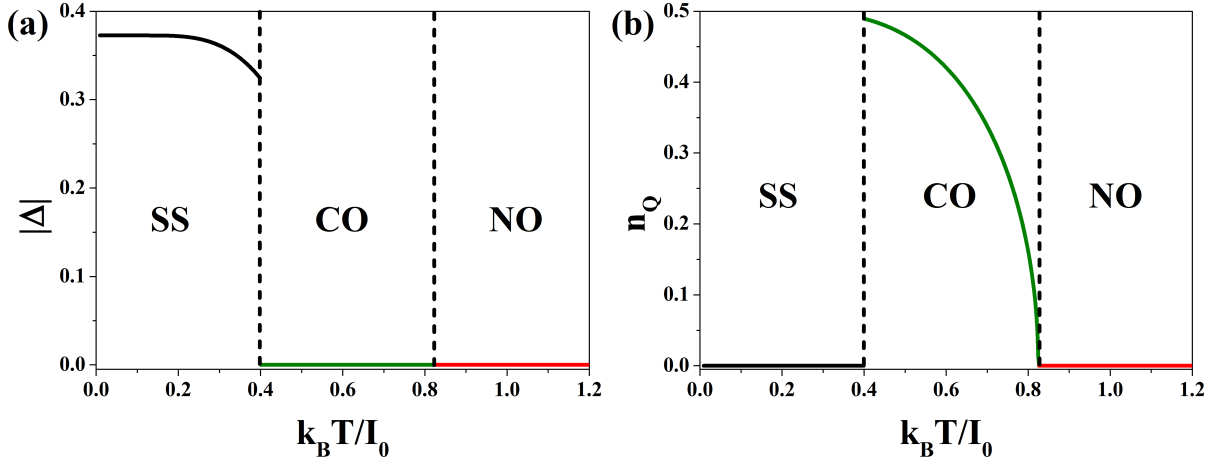


Rys. 4.5: Diagramy $k_B T/X - U/X$ w modelu $U-I-W$ dla $n = 1$ oraz: (a) $W/|I| > -1$ lub (b) $W/|I| < -1$. $X = \text{Max}\{I_0, I_Q, W_0, W_Q\}$. Panel (a): OR oznacza obszar występowania odpowiedniej fazy uporządkowanej (SS gdy $X = I_0$, ηS gdy $X = I_Q$ lub CO gdy $X = W_0$). Gdy $X = W_Q$ odpowiedni diagram przedstawiony jest na panelu (b). Linie kropkowane, ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, granice pierwszego rodzaju, drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. T oznacza punkt trójkrytyczny.

wość zachodzi tylko dla wyników otrzymanych w podejściu VA). Podkreślmy, że stwierdzenie to nie jest jednak prawdziwe dla diagramów w funkcji potencjału chemicznego. W takim przypadku dla $W/I < -1$ w odpowiednio niskich temperaturach na diagramach $k_B T/I_0 - \bar{\mu}^*/W_Q$ występuje wyłącznie przemiana pierwszego rodzaju pomiędzy dwoma fazami: NO oraz NO położona dokładnie w $\bar{\mu}^* = 0$ (Rys. 4.4(a)).

Na Rys. 4.5 przedstawiono diagramy fazowe $k_B T/X - U/X$ modelu (4.1) dla $n = 1$ ($X = \text{Max}\{I_0, I_Q, W_0, W_Q\}$). W przypadku gdy $W/|I| > -1$ (Rys. 4.5(a)) na diagramie występuje punkt trójkrytyczny T i przemiana z fazy uporządkowanej (OR), która może być fazą SS, ηS lub CO, do fazy NO jest pierwszego rodzaju (w niskich temperaturach) lub drugiego rodzaju (w wyższych temperaturach). Dla $-1 < W/|I| < 1$ fazą uporządkowaną jest faza nadprzewodząca (SS gdy $I > 0$ lub ηS dla $I < 0$), natomiast dla $W/|I| > 1$ na diagramie będzie występować faza CO. Dla $W/|I| > 1$ zachodzi wyłącznie przemiana „trzeciego rodzaju” PS:NO/NO–NO. Zauważmy, że dla wyżej wymienionych przypadków granice przemian fazowych na diagramach (w zmiennych $k_B T/X - U/X$) położone są dokładnie w tych samych miejscach. Temperatury tych przemian maleją wraz ze wzrostem U/X . Nie badamy jednak tutaj zachowania odpowiednich faz metastabilnych, które niekoniecznie musi być podobne w wymienionych wyżej przypadkach. Zagadnieniem tym dla modelu $U-I-W$ w niniejszej pracy nie będziemy się zajmować.

Wszystkie zawarte wyniki w niniejszym rozdziale dotyczą przypadku przyciągania na węźle ($U < 0$). Następnym krokiem jest zbadanie przypadku odpychającego U ($U > 0$). Szczegółowa analiza tego zakresu U zostanie zawarta w osobnej pracy [212]. Poniżej stre-



Rys. 4.6: Temperaturowe zależności (a) nadprzewodzącego parametru porządku $|\Delta|$ oraz (b) ładunkowego parametru porządku n_Q dla $W/I = 2.0$, $U/I_0 = -1.0$ oraz $\bar{\mu}/I_0 = -2.0$ (model U - I - W).

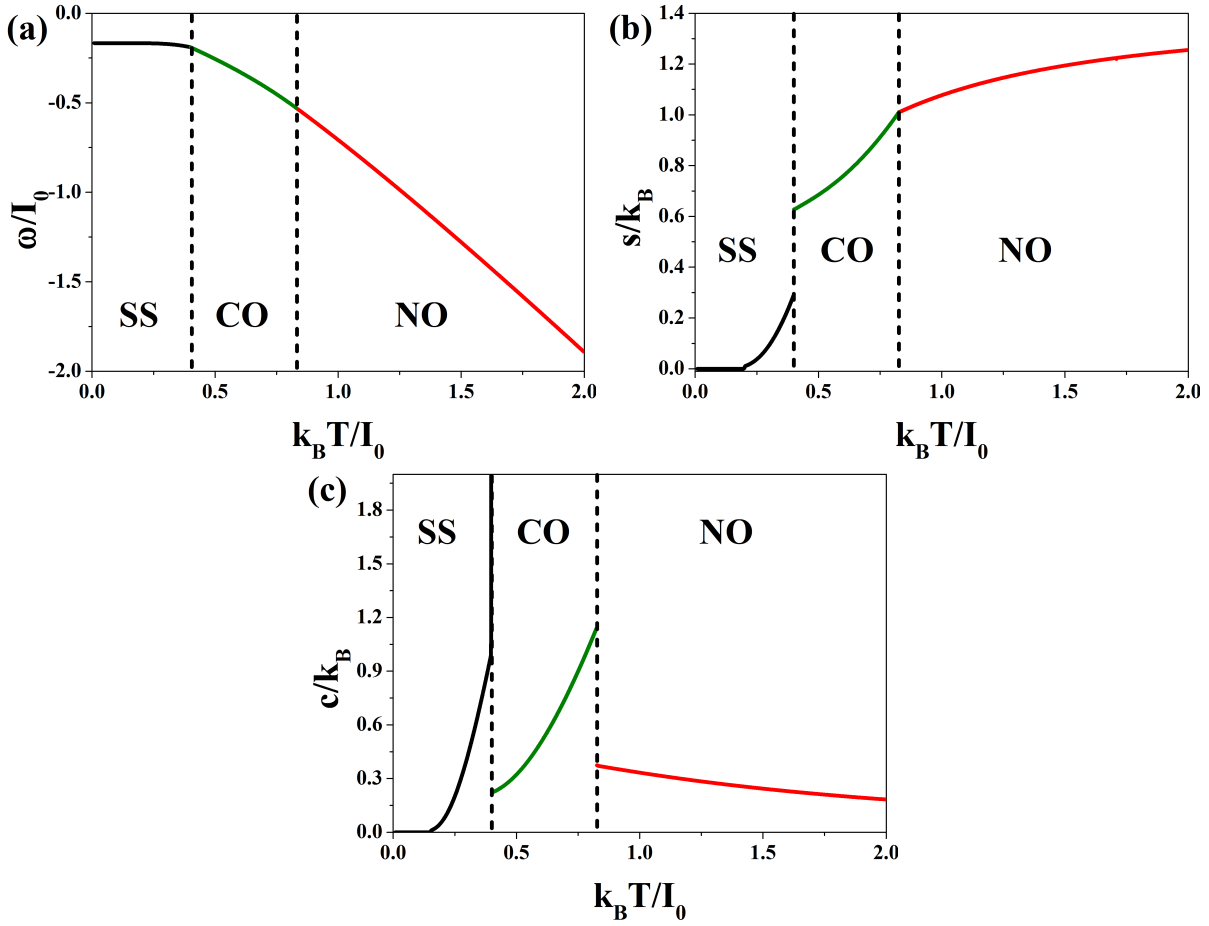
ścimy wstępne wyniki naszych obliczeń dla tego przypadku. Otóż w takim przypadku na diagramach fazowych może wystąpić np. kilka różnych faz CO lub wiele różnych stanów z separacją fazową typu SS/CO (przynajmniej dwa), SS/NO oraz NO/NO (przynajmniej dwa). Obszary stabilności stanów PS tego samego typu mogą być rozłączne (tak jak np. w pracach [107, 108]) lub mogą zachodzić przemiany pomiędzy różnymi stanami PS (np. PS:NO/NO–PS:NO/NO bądź PS:SS/CO–PS:CO/NO). W granicy $U \rightarrow +\infty$ faza SS nie jest stabilna w dowolnych temperaturach, jedyną stabilną fazą jest faza CO i model (4.1) redukuje się do modelu U - W [150, 151, 170].

4.1.3.2 Charakterystyki termodynamiczne

Na Rys. 4.6–4.7 zaprezentowano przykładowe przebiegi kilku wielkości termodynamicznych w modelu U - I - W dla następujących parametrów modelu: $W/I = 2.0$, $U/I_0 = -1.0$ oraz $\bar{\mu}^*/I_0 = -2.0$.

Na Rys 4.6(a) przedstawiono temperaturową zależność nadprzewodzącego parametru porządku Δ , natomiast na Rys 4.6(b) — temperaturową zależność ładunkowego parametru porządku n_Q . Widzimy, że w tym przypadku przemiana SS–CO jest przemianą pierwszego rodzaju (oba parametry porządku wykazują nieciągłość w temperaturze przemiany), natomiast przemiana CO–NO jest przemianą drugiego rodzaju.

Zachowania wielkiego potencjału termodynamicznego ω , entropii s oraz ciepła właściwego c dla tych samych parametrów modelu są przedstawione na Rys. 4.7. Są one standardowe dla wymienionych rodzajów przemian i ich dyskusja jest podobna do tej w Rozdziale 3.2.2.



Rys. 4.7: Temperaturowe zależności parametrów termodynamicznych: (a) wielkiego potencjału termodynamicznego ω , (b) entropii s oraz (c) ciepła właściwego c dla $W/I = 2.0$, $U/I_0 = -1.0$ oraz $\bar{\mu}/I_0 = -2.0$ (model $U-I-W$).

4.2 Konkurencja nadprzewodnictwa z magnetyzmem

4.2.1 Modelowy hamiltonian i podstawowe równania

W niniejszym rozdziale (Rozdział 4.2) dokonamy analizy konkurencji nadprzewodnictwa i porządku magnetycznego. Jednym z prostszych modeli mogących opisać to zjawisko jest uogólnienie modelu (3.1) poprzez dodanie wyrazu opisującego oddziaływania magnetyczne pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Badany hamiltonian jest więc następującej postaci (model $U-I-J$):

$$\begin{aligned} \hat{H} = & U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - I \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + \\ & - 2J^z \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z - J_{ij}^{xy} \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_j^+ \hat{s}_i^-) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \end{aligned} \quad (4.42)$$

gdzie $\hat{n}_i = \sum_{\sigma} \hat{n}_{i\sigma}$, $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}$, $\hat{\rho}_i^+ = (\hat{\rho}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow}^+$, $\hat{s}_i^z = (1/2)(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$, $\hat{s}_i^+ = (\hat{s}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow}$, zgodnie z definicjami wprowadzonymi w Rozdziale 1.3.

Podobnie jak poprzednio rozważane modele, model (4.1) wykazuje symetrię cząstka-dziura, dlatego też otrzymane diagramy fazowe zazwyczaj będą prezentowane w zakresach $\bar{\mu} = \mu - U/2 < 0$ i $0 \leq n \leq 1$. Ponadto model ten wykazuje też, tak jak modele (3.1) oraz (4.1) symetrię pomiędzy przypadkami $I > 0$ (faworyzujący fazę SS) oraz $I < 0$ (faworyzujący fazę ηS) dlatego też w dalszej analizie ograniczymy się zasadniczo wyłącznie do przypadku $I > 0$.

Ponadto analogiczna symetria zachodzi dla spinowych stopni swobody. W nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego w kierunku osi z — $B^z = 0$ (w kierunku płaszczyzny $x-y$ — $B^{xy} = 0$) oraz J_{ij}^z (J_{ij}^{xy}), model (4.42) wykazuje symetrię pomiędzy przypadkami $J^z > 0$ (faworyzującym fazę ferromagnetyczną F) oraz $J^z < 0$ (faworyzującym fazę antyferromagnetyczną AF) ($J^{xy} > 0$ oraz $J^{xy} < 0$) dla sieci dwudzielnych. Oczywistym jest przededefiniowanie parametru porządku: $m = m_F = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{s}_i^z \rangle$ dla $J^z > 0$ oraz $m_Q = m_{AF} = \frac{1}{N} \sum_i \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \langle \hat{s}_i^z \rangle$ dla $J^z < 0$, gdzie $\vec{Q}$ jest połową najmniejszego wektora sieci odwrotnej ($\xi^* = \xi_F^* = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{s}_i^+ \rangle$ dla $J^{xy} > 0$ oraz $\xi_Q^* = \xi_{AF}^* = \frac{1}{N} \sum_i \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \langle \hat{s}_i^+ \rangle$ dla $J^{xy} < 0$). Symetrie te zostają złamane przez skończoną wartość całki przeskoku pojedynczego elektronu $t_{ij} \neq 0$ [213–218] (por. także Rozdział 4.3). W dalszym ciągu nasze rozważania ograniczamy do przypadku $J^z > 0$ oraz $J^{xy} > 0$.

Korzystając z wyników Rozdziału 2, wyrażenie na wielki potencjał termodynamiczny ω dla modelu (3.1) w wielkim rozkładzie kanonicznym (ograniczenie do rozważania wyłącznie fazy SS oraz faz uporządkowanych ferromagnetycznie, $\Delta_i = \Delta$, $m_i = m$, $\xi_i = \xi$, $n = n_i$ dla każdego i) w przybliżeniu VA ma postać

$$\omega = -\bar{\mu} + 2I_0|\Delta|^2 + 2J_0^z m^2 + 2J_0^{xy} |\xi^*|^2 - \frac{1}{\beta} \ln(2\bar{Z}), \quad (4.43)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \bar{Z} &= \cosh\left(\beta\sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0\Delta|^2}\right) + \exp\left(\frac{\beta U}{2}\right) \cosh\left(2\beta\sqrt{(J_0^z)^2 m^2 + |J_0^{xy}\xi|^2}\right) \\ \Delta^* &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{\rho}_i^+ \rangle, \quad m = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{s}_i^z \rangle, \quad \xi^* = \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{s}_i^+ \rangle, \end{aligned} \quad (4.44)$$

$\bar{\mu} = \mu - U/2$, $I_0 = zI$, $J_0^z = zJ^z$, $J_0^{xy} = zJ^{xy}$, $\beta = 1/(k_B T)$ oraz z oznacza liczbę najbliższych sąsiadów.

Warunki na liczbę cząstek n oraz na parametry porządku $|\Delta|$, m , $|\xi|$ ($n = -\frac{\partial \omega}{\partial \mu}$, $\frac{\partial \omega}{\partial |\Delta|} = 0$, $\frac{\partial \omega}{\partial m} = 0$, $\frac{\partial \omega}{\partial |\xi|} = 0$; okazuje się, że jest to minimum ω ze względu na $|\Delta|$, m , $|\xi|$) mają następującą postać:

$$\frac{\bar{\mu} \sinh \left(\beta \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2} \right)}{\bar{Z} \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2}} = n - 1, \quad (4.45)$$

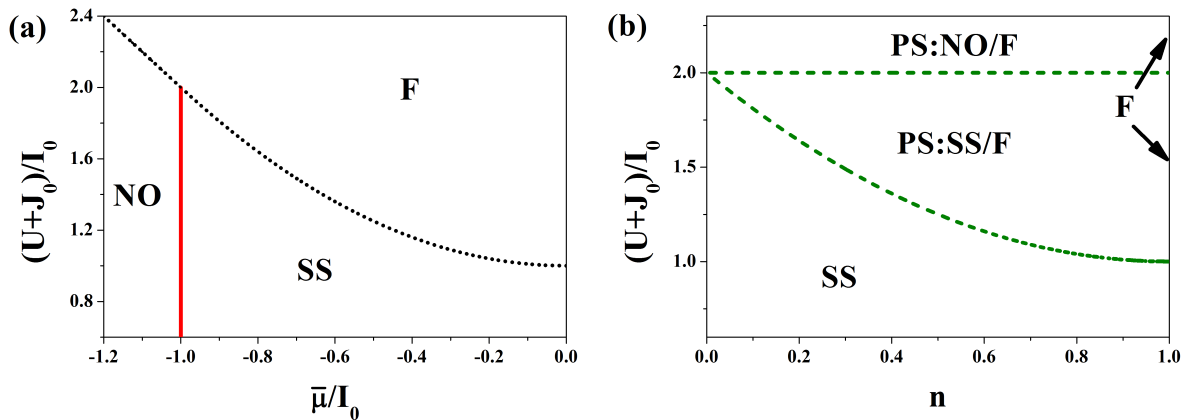
$$|\Delta| \left[\frac{1}{I_0} - \frac{\sinh \left(\beta \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2} \right)}{\bar{Z} \sqrt{\bar{\mu}^2 + 4|I_0 \Delta|^2}} \right] = 0, \quad (4.46)$$

$$m \left[\frac{2}{J_0^z} - \frac{\exp \left(\frac{\beta U}{2} \right) \sinh \left(2\beta \sqrt{(J_0^z)^2 m^2 + |J_0^{xy} \xi|^2} \right)}{\bar{Z} \sqrt{(J_0^z)^2 m^2 + |J_0^{xy} \xi|^2}} \right] = 0. \quad (4.47)$$

$$|\xi| \left[\frac{2}{J_0^{xy}} - \frac{\exp \left(\frac{\beta U}{2} \right) \sinh \left(2\beta \sqrt{(J_0^z)^2 m^2 + |J_0^{xy} \xi|^2} \right)}{\bar{Z} \sqrt{(J_0^z)^2 m^2 + |J_0^{xy} \xi|^2}} \right] = 0. \quad (4.48)$$

Rozwiązując układ (4.45)–(4.48) dla $T \geq 0$ otrzymujemy, że granica pomiędzy fazą z porządkiem magnetycznym w kierunku z (dla $J^z > J^{xy}$: $|m| \neq 0$, $|\xi| = 0$) oraz fazą z porządkiem magnetycznym w kierunku $x-y$ (dla $J^{xy} > J^z$: $m = 0$, $|\xi| \neq 0$) występuje dla $J^{xy}/J^z = 1$. Tylko dla przypadku izotropowego $J^{xy}/J^z = 1$ oba parametry porządku magnetycznego mogą być niezerowe: $m \neq 0$, $|\xi| \neq 0$ (oba rodzaje porządku magnetycznego są ściśle zdegenerowane i tylko wartość $m^2 + |\xi|^2$ może być otrzymana z (4.45)–(4.48)).

W dalszym ciągu naszych rozważań wprowadzamy oznaczenie $J = \text{Max}\{J^z, J^{xy}\}$, $J_0 = zJ$ i przyjmujemy, że $J^z > J^{xy}$ ($J > 0$). Pamiętajmy jednak, że na mocy powyższych dyskusji z uzyskanych dla tego przypadku wyników możemy zawsze otrzymać wyniki w przybliżeniu VA dla dowolnych J^z , J^{xy} . W fazie (ferro-) magnetycznej (F) mamy: $m \neq 0$, $\Delta = 0$, natomiast w fazie SS zachodzi: $\Delta \neq 0$ oraz $m = 0$. Układ równań (4.45)–(4.48) nie ma stabilnych rozwiązań, gdzie $\Delta \neq 0$ i $m \neq 0$. Oznacza to, że jednorodna faza



Rys. 4.8: Diagramy fazowe w stanie podstawowym dla modelu U - I - J : (a) w funkcji $\bar{\mu}/I_0$ oraz (b) w funkcji n . Linie kropkowane, ciągłe oraz przerywane oznaczają granice pierwszego rodzaju, drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. Dla $n = 1$ faza F (stan Motta) występuje powyżej końca linii PS–SS (panel (b)).

mieszana, w której występowałyby oba typy porządku, nie pojawia się na diagramach fazowych modelu U - I - J .

Przegląd dotychczasowych wyników

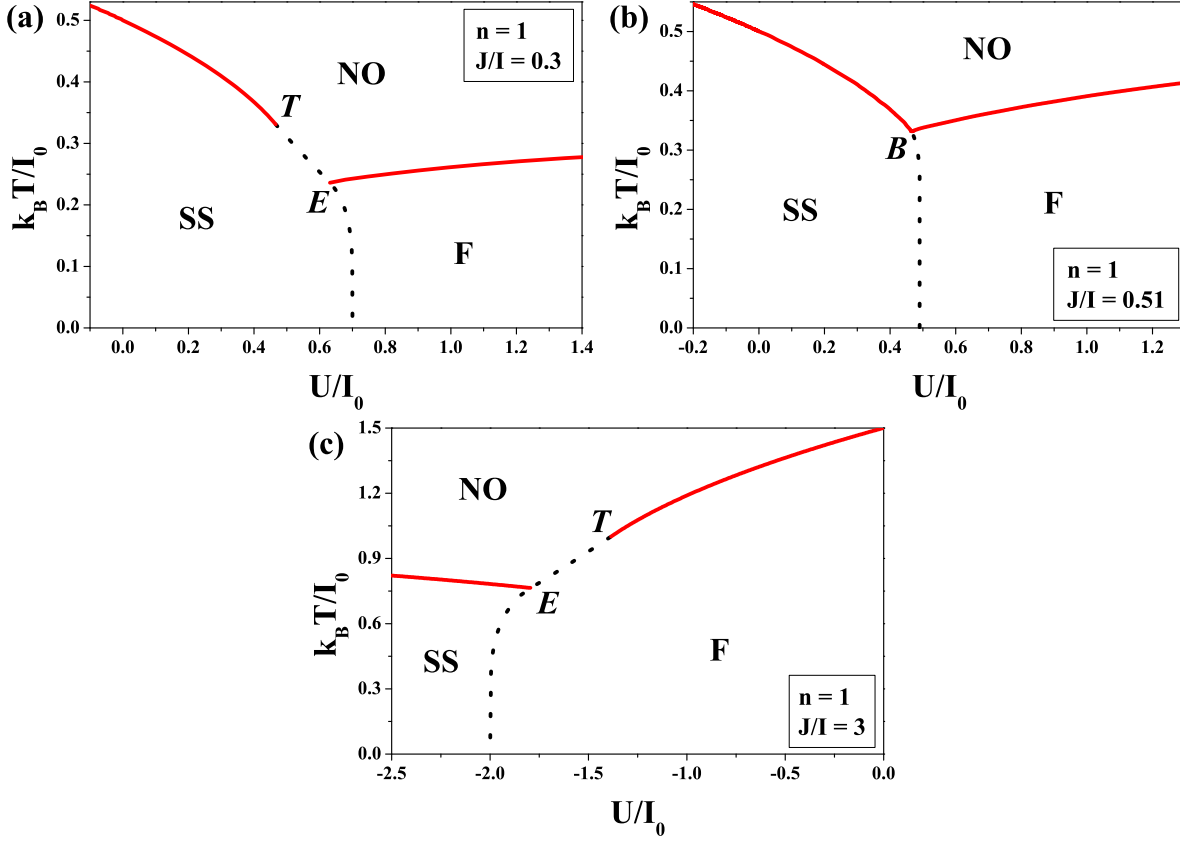
Do tej pory model (4.42) w ogólnym przypadku był rozważany wyłącznie przez autora niniejszej rozprawy (w przybliżeniu VA) dla $n = 1$ [20]. Model ten był bardzo szeroko analizowany dla przypadku $W = 0$ (model U - I , przegląd wyników — Rozdział 3.1). Ponadto otrzymano wyniki dla modelu U - J (przypadek $I = 0$ hamiltonianu (4.42)) [154, 155, 171–173], w szczególności dla jednowymiarowego łańcucha [171, 172], w przybliżeniu VA [154, 155] oraz za pomocą symulacji Monte Carlo [155, 173]. Okazuje się, że przemiana F–NO może być przemianą pierwszego lub drugiego rodzaju, czemu towarzyszy występowanie linii punktów trójkrytycznych na diagramie fazowym modelu U - J . Rezultaty te przewidują również istnienie separacji fazowych typu PS:NO/F w szerokim zakresie koncentracji elektronowej.

4.2.2 Stan podstawowy ($T = 0$)

Struktura diagram stanu podstawowego modelu (4.42) otrzymanego w przybliżeniu VA jest bardzo podobna do diagramów przedstawionych na Rys. 3.1 oraz 3.10 [219] i jest on przedstawiony na Rys. 4.8.

Na diagramach w funkcji $\bar{\mu}$ zamiast fazy NO z $n = 1$ występuje faza ferromagnetyczna F z $n = 1$ i $\omega_F = -\bar{\mu} - U/2 - J_0/2$ ($m = 1/2$) (na osi pionowej występuje wielkość $(U + J_0)/I_0$). Na diagramach przy ustalonej koncentracji n mamy dwie zmiany ($n \neq 1$): zamiast stanu PS:SS/NO pojawia się stan PS:SS/F oraz zamiast fazy NO występuje stan PS:NO/F (w domenie fazy F koncentracja wynosi $n_+ = 1$). Jednorodna faza F jest niestabilna dla $n \neq 1$ ($E_F = -\frac{1}{2}J_0n^2$, $\mu = -J_0n$, $\frac{\partial\mu}{\partial n} < 0$) i występuje wyłącznie dla $n = 1$ oraz $(U + J_0)/I_0 > 1$.

Analogicznie jak w Rozdziale 3.2.1 możemy otrzymać dla fazy SS wyniki ścisłe (dla $d = 1$ oraz $d \rightarrow +\infty$) i rezultaty przybliżone dla $d < +\infty$. Ponadto wykorzystując wyniki Rozdziału 4.1.2.1 do fazy F z $n = 1$ (tutaj dla spinowych stopni swobody $\hat{s}_i$) otrzymujemy wyniki (ściśle i przybliżone) dla dowolnego stosunku $\gamma = J^z/|J^{xy}|$ i odpowiednich $d \leq +\infty$. Niemniej jednak szczegółowej analizy tego zagadnienia nie przedstawiamy w niniejszej pracy i opublikujemy ją w osobnym artykule.



Rys. 4.9: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - U / I_0$ dla pasma półpełnego ($n = 1$) dla (a) $J/I = 0.3$, (b) $J/I = 0.51$ oraz (c) $J/I = 3$ (model U - I - J). Linie kropkowane i ciągłe oznaczają, odpowiednio, przemiany pierwszego i drugiego rodzaju. T , E oraz B oznaczają, odpowiednio, punkty trójkrytyczne, punkty bikrytyczne oraz krytyczne punkty końcowe.

4.2.3 Skończone temperatury ($T > 0$)

4.2.3.1 Diagramy fazowe

Przypadek pasma wypełnionego w połowie ($n = 1$)

Kilka reprezentatywnych diagramów fazowych dla modelu (4.42) otrzymanych dla różnych wartości stosunku J/I dla pasma półpełnego ($n = 1$) przedstawiono na Rys. 4.9.

Diagram fazowy $k_B T / I_0 - U / I_0$ dla $J/I = 0.3$ jest pokazany na Rys. 4.9(a). Na tym diagramie dwie uporządkowane fazy: faza SS oraz faza F są rozdzielone przez linię pierwszego rodzaju. Oba parametry porządku: Δ i m wykazują nieciągłość w punkcie przemiany SS-F (por. także Rys. 4.11). Wraz ze wzrostem U / I_0 temperatura przemiany SS-NO maleje od $k_B T / I_0 = 1$ dla $U / I_0 \rightarrow -\infty$. Dla $U / I_0 = (2/3) \ln 2 \simeq 0.462$ oraz $k_B T / I_0 = 1/3$ przemiana SS-NO zmienia swój typ z ciągłej na nieciągłą. Z tym faktem związane jest pojawienie się punktu trójkrytycznego T na diagramie fazowym. Temperatura przemiany F-NO jest słabo zależna od U / I_0 i rośnie do $k_B T / I_0 = 0.3$ ($k_B T / J_0 = 1$) dla $U / I_0 \rightarrow +\infty$. Linia przemiany drugiego rodzaju F-NO kończy się w krytycznym punkcie końcowym E leżącym

na granicy pierwszego rodzaju występowania fazy SS. Możliwe sekwencje przemian wraz ze wzrostem temperatury i ich rodzaje dla $J/I = 0.3$ są zestawione poniżej:

- (i) SS→NO: drugiego rodzaju dla $U/I_0 < 0.46$ oraz pierwszego rodzaju dla $0.46 < U/I_0 < 0.63$,
- (ii) SS→F→NO: pierwszego rodzaju oraz drugiego rodzaju, odpowiednio, dla $0.63 < U/I_0 < 0.7$,
- (iii) F→NO: drugiego rodzaju dla $U/I_0 > 0.7$.

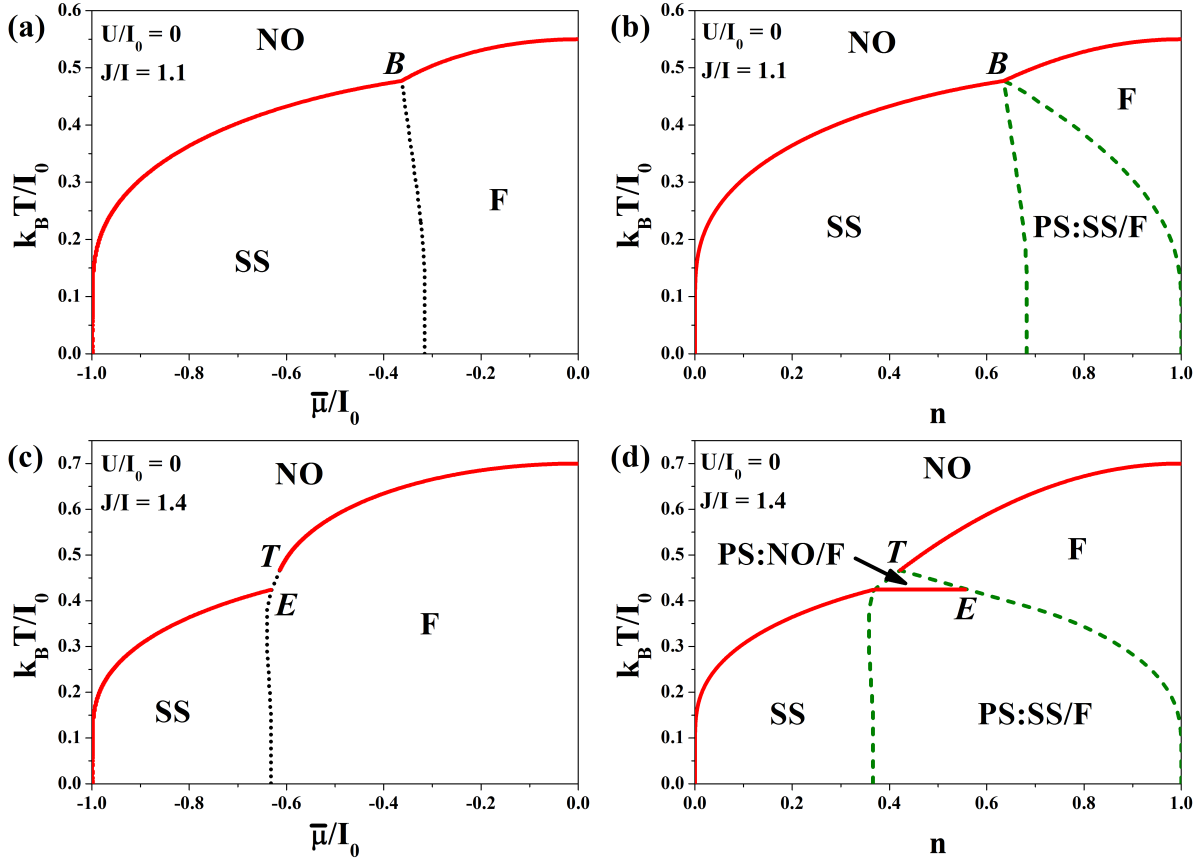
Diagram fazowy dla $J/I = 0.51$ jest jakościowo inny niż ten dla $J/I = 0.3$. Dla $J/I = 0.51$ układ wykazuje zachowanie bikrytyczne (Rys. 4.9(b)) w odróżnieniu od zachowania trójkrytycznego (i występowania punktu **E**) dla $J/I = 0.3$. Podobnie jak poprzednio, przemiana SS–F jest pierwszego rodzaju, natomiast przemiany SS–NO i F–NO są przemianami ciągłymi. Dwie linie przemian drugiego rodzaju i jedna linia przemiany pierwszego rodzaju spotykają się w punkcie bikrytycznym **B**.

Rozważany układ dla $n = 1$ wykazuje zachowanie trójkrytyczne dla $J/I < 0.5$, podczas gdy zachowanie bikrytyczne występuje dla $0.5 < J/I < 2$. Dla $J/I > 2$ układ ponownie wykazuje zachowanie trójkrytyczne, przy czym punkt trójkrytyczny **T** jest związany ze zmianą rodzaju przemiany F–NO i jest położony dla $U/J_0 = -(2/3) \ln 2 \simeq -0.462$ i $k_B T/J_0 = 1/3$ (Rys. 4.9(c)). Dla $J/I > 2$ przemiana F–NO może być ciągła (dla $U/J_0 > -(2/3) \ln 2$) jak również nieciągła (dla $U/J_0 < -(2/3) \ln 2$). Zauważmy, że osie na Rys. 4.9 są znormalizowane do I_0 (nie do J_0).

Podkreślimy, że dla dowolnego J/I wraz ze wzrostem U/I_0 , temperatura przemiany SS–NO maleje monotonicznie od $k_B T/I_0 = 1$ (dla $U \rightarrow -\infty$), podczas gdy temperatura przemiany F–NO jest rosnącą funkcją U/I_0 (do jej maksimum $k_B T/J_0 = 1$ dla $U \rightarrow +\infty$). Jest to związane z tym, że przyciągające U ułatwia parowanie elektronów na węzle co faworyzuje nadprzewodnictwo. Natomiast odpychające U powoduje, że na węzłach występują pojedyncze spiny, co ułatwia wystąpienie porządku magnetycznego.

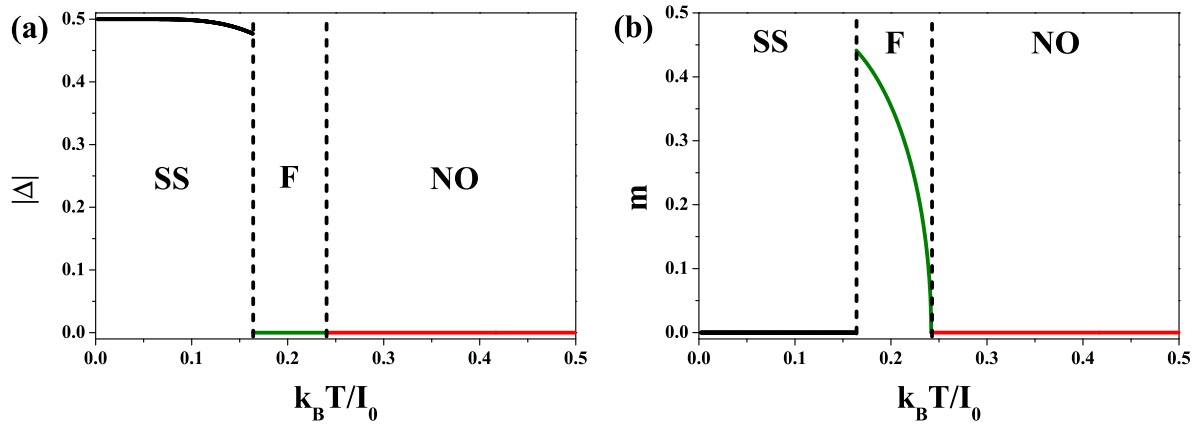
Przykładowe wyniki dla dowolnych koncentracji ($n \neq 1$, $U/I_0 = 0$)

Do tego momentu wszystkie zawarte wyniki w niniejszym rozdziale dotyczyły przypadku półpełnego pasma ($n = 1$). Następnym krokiem jest zbadanie modelu (4.42) dla $n \neq 1$. Szczegółowa analiza tego zagadnienia zostanie zawarta w osobnej pracy [219]. Wstępne wyniki dla $n \neq 1$ przewidują występowanie stanu z separacją faz PS:SS/F, w którym współistnieją domeny nadprzewodzące i magnetyczne. Na Rys. 4.10 przedstawiono przykładowe diagramy dla $U/I_0 = 0$ i dwóch wartości stosunku J/I : $J/I = 1.1$ oraz $J/I = 1.4$. Otrzymaliśmy, że:



Rys. 4.10: Diagramy fazowe $k_B T / I_0 - \bar{\mu}$ (lewa kolumna) oraz odpowiadające im diagramy $k_B T / I_0 - n$ (prawa kolumna) dla $U / I_0 = 0$ i różnych wartości stosunku J / I (jak oznaczono) (model U - I - J). Linie kropkowane, ciągłe i przerywane oznaczają, odpowiednio, granice pierwszego rodzaju, drugiego rodzaju i „trzeciego rodzaju”. T, E oraz B oznaczają punkty krytyczne.

- (i) Dla $J / I < 1$ faza F jest stabilna, na diagramie występuje tylko faza SS i diagramy fazowe mają tę samą strukturę co te przedstawione w Rozdziale 3.2.2. Przemiana SS–NO jest przemianą drugiego rodzaju.
- (ii) Dla $J / I > 1$ na diagramie pojawia się faza F i przemiana F–NO, podobnie jak przemiana SS–NO, jest drugiego rodzaju. Natomiast przemiana SS–F jest przemianą pierwszego rodzaju dla ustalonego μ (Rys. 4.10(a)), co powoduje, że na diagramach w funkcji n występuje stan PS:SS/NO (Rys. 4.10(b)).
- (iii) Ponadto dla większych J / I przemiana F–NO może być także przemianą pierwszego rodzaju dla ustalonego μ (Rys. 4.10(c)) i w pewnym zakresie parametrów modelu może występować stan PS:NO/F (Rys. 4.10(d)). Zauważmy, że przemiana pomiędzy dwoma stanami z separacją faz PS:SS/F–PS:NO/F jest przemianą drugiego rodzaju, gdyż jest związana z ciągłym zanikiem parametru nadprzewodzącego Δ w jednej z domen (por. też [107, 108]).



Rys. 4.11: Temperaturowe zależności (a) nadprzewodzącego parametru porządku $|\Delta|$ oraz (b) magnetyzacji m dla $J/I = 0.3$, $U/I_0 = 0.69$ oraz $n = 1$ (model U - I - J).

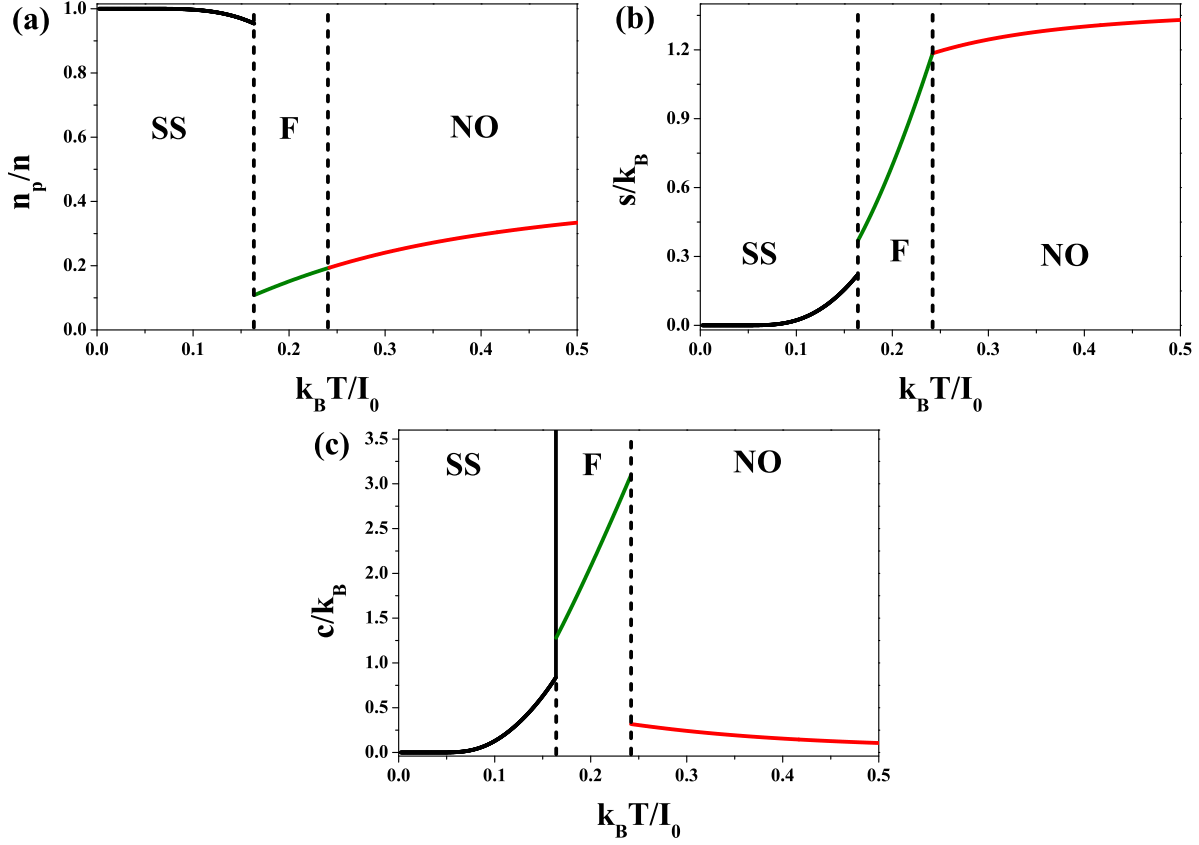
Na diagramach fazowych mogą występować różne rodzaje punktów krytycznych — oprócz punktów trójkrytycznych (**T**) — także punkty bikrytyczne (**B**) oraz krytyczne punkty końcowe (**E**)).

4.2.3.2 Charakterystyki termodynamiczne

Na Rys. 4.11–4.12 zaprezentowano przebiegi kilku wielkości termodynamicznych w modelu U - I - J dla następujących parametrów modelu: $J/I = 0.3$, $U/I_0 = 0.69$ oraz $n = 1$. Na Rys. 4.11(a) przedstawiono temperaturową zależność nadprzewodzącego parametru porządku Δ , natomiast na Rys. 4.11(b) — temperaturową zależność magnetyzacji m . Widzimy, że w tym przypadku przemiana SS–F jest przemianą pierwszego rodzaju (oba parametry porządku wykazują nieciągłość w temperaturze przemiany), natomiast przemiana F–NO jest przemianą drugiego rodzaju. Zachowania względnej koncentracji sparowanych elektronów n_p/n , entropii s oraz ciepła właściwego c dla tych samych parametrów modelu są przedstawione na Rys. 4.12. Są one standardowe dla wymienionych rodzajów przemian i ich dyskusja jest podobna do tej z Rozdziału 3.2.2.

4.3 Wpływ skończonej wartości jednoelektronowej całki przeskoku na fazy uporządkowane ($t_{ij} \neq 0$)

W celu jakościowej dyskusji efektów skończonej wartości jednoelektronowej całki przeskoku ($t_{ij} \neq 0$) na fazy uporządkowane zastosujemy teorię rachunku zaburzeń do modelu (1.9). Jako zaburzenie traktować będziemy wyraz przeskoku jednoelektronowego $\sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma})$, co jest równoważne założeniu, że $|t_{ij}| \ll |U|$. Wyjściowy



Rys. 4.12: Temperaturowe zależności parametrów termodynamicznych: (a) koncentracji sparowanych elektronów n_p/n , (b) entropii s oraz (c) ciepła właściwego c dla $J/I = 0.3$, $U/I_0 = 0.69$ oraz $n = 1$ (model U - I - J).

model (1.9) (z $U = U_i$ dla każdego i) postaci

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} W_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \\
 & - \sum_{i,j} I_{ij} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) - \sum_{i,j} J_{ij}^{xy} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_j^+ \hat{s}_i^-) - 2 \sum_{i,j} J_{ij}^z \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z + \\
 & - B^z \sum_i \hat{s}_i^z - B^{xy} \sum_i (\hat{s}_i^+ + \hat{s}_i^-) + \sum_i (E_i - \mu) \hat{n}_i,
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

rozważymy obecnie w dwóch skrajnych granicach: $U \ll 0$ (faworyzuje podwójne obsadzenia węzłów, redukcja pojedynczych obsadzeń) oraz $U \gg 0$ (odwrotnie — redukuje liczbę podwójnie obsadzonych węzłów).

Granica dużego przyciągającego $U \ll 0$

W granicy $U \ll 0$ możemy zaniedbać oddziaływania magnetyczne występujące w (4.49), ponieważ występowanie jednej cząstki na węźle jest silnie zredukowane. Model (4.49) w takim przypadku redukuje się do (uogólnionego) modelu Pensona-Kolba-

Hubbarda:

$$\begin{aligned} \hat{H}_d = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} W_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \\ & - \sum_{i,j} I_{ij} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + \sum_i (E_i - \mu) \hat{n}_i, \end{aligned} \quad (4.50)$$

W granicy silnego przyciągania na węzle $-V = -U + |I| \gg |t|$ (oddziaływania tylko pomiędzy najbliższymi węzłami, $U \ll 0$) w widmie wzbudzeń jednocząstkowych występuje duża przerwa rzędu $|V|$ dla dowolnego n (jeśli $k_B T \ll |V|$). Jest to równoważne stwierdzeniu, że poziom Fermiego dla $U < 0$ jest znajduje się blisko swojego położenia dla $n = 1$ ($\mu = U/2 + zW$). Dzięki temu możemy użyć standardowej teorii rachunku zaburzeń dla układów z degeneracją [220, 221], by otrzymać efektywny hamiltonian w rozważanej granicy dla dowolnego n . Uwzględniając wyrazy do drugiego rzędu w $t_{ij}/|V_{ij}|$ z (4.50) otrzymujemy następujący hamiltonian efektywny (przynajmniej gdy $|t_{ij}| \ll |U|$, $|t_{ij}| \ll |I_{ij}|$ i $U < 0$, por. również [7, 41, 76, 77, 141]):

$$\hat{H}_d = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{W}_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_{i,j} \bar{I}_{ij} (\hat{\rho}_i^+ \hat{\rho}_j^- + \hat{\rho}_j^+ \hat{\rho}_i^-) + \sum_i (E_i - \bar{\mu}) \hat{n}_i, \quad (4.51)$$

gdzie

$$\begin{aligned} V_{ij}^d &= U - |I_{ij}|, & J_{ij}^d &= \frac{4t_{ij}^2}{|V_{ij}^d|}, & \bar{\mu} &= \mu - \frac{1}{2}U + \sum_j J_{ij}^d, \\ \bar{W}_{ij} &= W_{ij} + J_{ij}^d, & \bar{I}_{ij} &= I_{ij} + J_{ij}^d. \end{aligned}$$

W granicy $U \rightarrow +\infty$ przestrzeń stanów na danym węzle składa się wyłącznie z $|0\rangle_i$ oraz $|\uparrow\downarrow\rangle_i$. Wtedy też operatory $\{\hat{\rho}_i\}$ są standardowymi operatorami spinu $S = 1/2$.

Rozwinięcie do piątego rzędu w $t_{ij}/|U|$ ($I_{ij} = 0$, $W_{ij} = 0$) przedstawiono w pracy [141].

Granica dużego odpychającego $U \gg 0$

W granicy $U \gg |t|, |I|, W$ w widmie wzbudzeń jednocząstkowych występuje duża przerwa energetyczna rzędu $V = U - |I| - W$. Używając standardowego rachunku zaburzeń (przypadek z degeneracją) dla $n = 1$ (oraz $W_{ij} = J_{ij}^z = J_{ij}^{xy} = 0$) z (4.49) otrzymujemy [79–81]:

$$\hat{H}_s = 2 \sum_{i,j} J_{ij}^s \left(\hat{s}_i \circ \hat{s}_j - \frac{1}{4} \right), \quad (4.52)$$

gdzie

$$J_{ij}^s = \frac{4t_{ij}^2}{V_{ij}^s}, \quad V_{ij}^s = U - |I_{ij}|, \quad (4.53)$$

gdzie wzięliśmy pod uwagę, że $\hat{n}_i = 1$ (podwójne obsadzenia wykluczone, przestrzeń stanów jednowęzłowych $\{|\uparrow\rangle_i, |\downarrow\rangle_i\}$). Ponadto pominęliśmy wyrazy (1.9) związane z oddziaływaniem z zewnętrznym polem magnetycznym ($B^z = 0$, $B^{xy} = 0$). W takim przypadku operatory $\{\hat{s}_i\}$ są standardowymi operatorami spinu $S = 1/2$.

Dla dowolnego n (czyli dla $n \neq 1$) (por. też [79–81]) w granicy $U \gg 0$ z (4.49) w ogólnym przypadku ($B^z = 0$, $B^{xy} = 0$) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \hat{H}_s = & \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \bar{W}_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j + \sum_i (E_i - \bar{\mu}) \hat{n}_i \\ & - \sum_{i,j} \bar{J}_{ij}^{xy} (\hat{s}_i^+ \hat{s}_j^- + \hat{s}_j^+ \hat{s}_i^-) - 2 \sum_{i,j} \bar{J}_{ij}^z \hat{s}_i^z \hat{s}_j^z, \end{aligned} \quad (4.54)$$

gdzie $\hat{c}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}(1 - \hat{n}_{i-\sigma})$, $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{i\sigma}$, $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$, $\hat{s}_i^z = (1/2)(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$, $\hat{s}_i^+ = (\hat{s}_i^-)^\dagger = \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{i\downarrow}$, oraz

$$\begin{aligned} V_{ij}^s &= U - |I_{ij}| - W_{ij}, & J_{ij}^s &= \frac{4t_{ij}^2}{V_{ij}^s}, \\ \bar{W}_{ij} &= W_{ij} - J_{ij}^s, & \bar{J}_{ij}^{xy} &= J_{ij}^{xy} - J_{ij}^s, & \bar{J}_{ij}^z &= J_{ij}^z - J_{ij}^s. \end{aligned}$$

Operatory $\{\hat{s}_i\}$ posiadają właściwości operatorów (1.12), przy czym wartość 0 składowej z -owej nie jest zdegenerowana. Można powiedzieć, że wyrazy międzywęzłowe hamiltonianu (4.54) są wyrazami hamiltonianu wyjściowego (1.9) w przestrzeni z wykluczonym podwójnym obsadzeniem węzłów (ściśle dopiero w granicy $U \rightarrow +\infty$ przestrzeń stanów na danym węźle składa się z $|0\rangle_i$, $|\uparrow\rangle_i$ oraz $|\downarrow\rangle_i$). W przypadku $U \gg 0$ oczywistym jest także, że w hamiltonianie (4.54) nie pojawia się wyraz proporcjonalny do I_{ij} (występujący w (1.9)), ponieważ występowanie dwóch cząstek na danym węźle jest silnie zredukowane w tej granicy.

Z wyprowadzonych wyżej relacji widzimy, że niezerowa wartość jednocząstkowej całki przeskoku $t_{ij} \neq 0$:

- łamie symetrię pomiędzy przypadkami $I_{ij} > 0$ oraz $I_{ij} < 0$, stabilizując fazę SS i konkurując z fazą ηS (ponieważ $J_{ij}^d > 0$), por. też [122–130, 137, 160–164];
- łamie symetrię pomiędzy przypadkami $J_{ij}^\alpha > 0$ oraz $J_{ij}^\alpha < 0$ ($\alpha = z, xy$), stabilizując fazę antyferromagnetyczną AF i konkurując z fazą ferromagnetyczną F (ponieważ $J_{ij}^s > 0$), por. też [213–218];
- odmiennie wpływa na porządek ładunkowy w obu przypadkach granicznych: dla $U < 0$ stabilizuje fazę CO, podczas gdy dla $U > 0$ może ją destabilizować.

Oczywiście powyższa (jakościowa) analiza nie wyczerpuje problemu, bowiem ogranicza się tylko do skrajnych przypadków. W ogólności, w określonych zakresach wielkości oddziaływań, koncentracji nośników i struktury sieci mogą wystąpić na diagramach fazowych inne fazy, nie występujące dla $t_{ij} = 0$ [7], np. fazy nadprzewodzące z parowaniem typu s^* (międzywęzłowe typu s), d czy p , cała grupa różnych faz uporządkowanych ferrimagnetycznie, uporządkowanych na wiązaniach ($d = 1$) czy faz uporządkowanych nematycznie ($d = 2$), itd. Niemniej jednak, powyższa analiza ukazuje jakościowo, w sposób przybliżony, efekty jakie może wywoływać $t_{ij} \neq 0$ (por. również dyskusja w Rozdziale 3.5).

4.4 Dyskusja i podsumowanie otrzymanych rezultatów

Analiza modeli U - I - W oraz U - I - J , która została przedstawiona w Rozdziale 4, przewiduje współistnienie w stanach z separacją fazową, odpowiednio, nadprzewodnictwa i porządku ładunkowego (PS:SS/CO) oraz nadprzewodnictwa i magnetyzmu (PS:SS/F). W szczególności otrzymujemy, że przemiany pomiędzy fazą nadprzewodzącą i innymi fazami uporządkowanymi (przemiany SS–CO oraz SS–F) są przemianami pierwszego rodzaju dla ustalonego potencjału chemicznego, co prowadzi do występowania stanów z separacją fazową (PS:SS/CO oraz PS:SS/F, odpowiednio) w określonych zakresach koncentracji elektronowych. Na diagramach tych dwóch modeli, oprócz punktów trójkrytycznych występują inne punkty krytyczne, np. punkty bikrytyczne czy krytyczne punkty końcowe.

Zastosowanie modelu U - I - W dla $U < 0$ wydaje się być uzasadnione w nadprzewodnikach z lokalnym parowaniem elektronowym z grupy bizmutatów: $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$ oraz $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$. Szczególnie struktura diagramów przedstawionych na Rys. 4.3(c)–(f) jest podobna do struktury diagramów otrzymanych doświadczalnie [37–42]. Zauważmy, że teoria par lokalnych może tłumaczyć m. in. następujące zachowania w tej grupie związków: występowanie przerwy energetycznej w widmie wzbudzeń jednocząstkowych w fazie izolatora uporządkowanego ładunkowo; silnie niemonotoniczną zależność temperatury krytycznej od koncentracji nośników, której maksymalna wartość jest w okolicach granicy występowania fazy CO; krótką długość koherencji i silne nadprzewodnictwo drugiego rodzaju [7].

Ponadto wzajemne relacje (tj. współistnienie, separacja lub konkurencja) pomiędzy nadprzewodnictwem i porządkiem magnetycznym są kluczowe do zrozumienia bogatej fizyki miedzianów [7, 34–36], związków ciężkofermionowych [29, 30], przewodników organicznych [31–33] oraz pniktydków żelaza [43–52]. Warto podkreślić, że diagramy fazowe

dla tych materiałów zawierają fazę magnetyczną, metaliczną (nieuporządkowaną) i nadprzewodzącą. Jednocześnie są one zadziwiająco podobne w płaszczyźnie „ciśnienie” — temperatura. Jako „ciśnienie” należy tutaj rozumieć wewnętrzne „ciśnienie chemiczne”, tj. np. koncentrację domieszek lub zewnętrznie przyłożone ciśnienie hydrostatyczne. Zauważmy też, że struktura tych diagramów fazowych, pomimo że są to materiały o skomplikowanej strukturze wielopasmowej, jest podobna do struktury diagramów, które zostały otrzymane dla rozważanego przez nas prostego modelu efektywnego U - I - J , przedstawionych na Rys. 4.10(a)–(d). Niemniej jednak w nadprzewodnikach na bazie żelaza wciąż otwartym problemem jest charakter współistnienia nadprzewodnictwa z magnetyzmem: czy jest to jednorodna faza mieszana [47, 48], elektronowa separacja fazowa [44–46], a może chemiczna separacja faz [49, 50].

Zakończenie i wnioski

Podjęte w rozprawie problemy dotyczyły teorii nadprzewodnictwa i uporządkowań elektronowych tlenków metali, metali organicznych i innych niekonwencjonalnych materiałów nadprzewodzących z krótką długością koherencji. Celem niniejszej pracy było zbadanie właściwości termodynamicznych i wyznaczenie diagramów fazowych wybranych modeli nadprzewodników z lokalnym parowaniem elektronowym, w których występuje oddziaływanie typu przeskoiku pary elektronowej, a ruchliwość pojedynczych elektronów jest silnie zredukowana oraz określenie zmian właściwości tych układów przy przejściu od granicy par lokalnych ($U \rightarrow -\infty$, nadprzewodnictwo naładowanych bozonów z twardym rdzeniem na sieci) do granicy rozrywania par ($U > 0$, nadprzewodnictwo „typu BCS”). W szczególności bardzo dużo uwagi poświęciliśmy zachowaniu stanów z separacją faz, w których jedna z domen była nadprzewodząca (PS:SS/NO, PS:SS/CO, PS:SS/F).

Praca złożona była z czterech części:

- (1) Rozdział 1 był krótkim wstępem nawiązującym do podstawowych zagadnień eksperymentu i teorii nadprzewodnictwa układów wąskopasmowych, a także wprowadzał w zagadnienia poruszane w pracy.
- (2) W Rozdziale 2 zastosowano formalizm teorii pola średniego do rozszerzonego modelu Hubbarda w granicy atomowej ($t_{ij} = 0$) i wyprowadzono równania, które były wykorzystywane w dalszej części.
- (3) W Rozdziale 3 zbadano prosty model nadprzewodnika z całką przeskoiku pary (model U - I - B). Przeanalizowano wpływ pola magnetycznego B na właściwości tego modelu (efekt paramagnetyczny) oraz określone zostały także zakresy występowania faz metastabilnych.
- (4) Rozdział 4 został poświęcony zbadaniu konkurencji i wzajemnych relacji pomiędzy nadprzewodnictwem oraz porządkiem ładunkowym i magnetycznym (modele: U - I - W oraz U - I - J).

Do analizy rozważanych modeli zastosowaliśmy podejście wariacyjne (VA), w którym wyraz jednowęzłowy U jest traktowany ściśle, natomiast do wyrazów międzywęzłowych stosujemy przybliżenie pola średniego. Otrzymane wyniki dla badanych modeli są ściśle w granicy $d \rightarrow +\infty$ (w granicy termodynamicznej). Ponadto w stanie podstawowym uzyskaliśmy szereg rezultatów ścisłych oraz wyników przybliżonych (RPA, SWA, LDE, itd.) wychodzących poza przybliżenie VA. Na mocy dyskusji przeprowadzonej w Roz-

działach 2.4, 3.2.1, 3.5 oraz 4.1.2 widzimy, że przybliżenie VA może być także użyte do (jakościowej) analizy diagramów układów o skończonym wymiarze. Ponadto wyniki symulacji Monte Carlo dla modelu U - I - J z oddziaływaniami typu Isinga na sieci SQ ($d = 2$) [155, 173] pokazują, że przybliżenie VA całkiem dobrze (w sensie jakościowym) przewiduje zachowanie faz magnetycznych w rozważanych modelach.

Pomimo faktu, że badane modele są (pod kilkoma aspektami) uproszczone, mogą być one użyteczne do jakościowej analizy danych eksperymentalnych dla rzeczywistych układów wąskopasmowych oraz mogą zostać zastosowane do lepszego zrozumienia zachowania się różnych klas materiałów wymienionych w Rozdziale 1.2. W szczególności nasze wyniki przewidują występowanie stanów z elektronową separacją fazową, w których jedna z domen była nadprzewodząca oraz opisują ich możliwą ewolucję ze zmianą temperatury, koncentracji cząstek, pola magnetycznego i innych parametrów modelu.

Najważniejszymi rezultatami niniejszej pracy są:

- Otrzymanie ścisłych wyników w granicy $d \rightarrow +\infty$ (przybliżenie wariacyjne) dla badanych modeli: U - I - B , U - I - W oraz U - I - J (pełnych diagramów fazowych oraz charakterystyk termodynamicznych).
- Uzyskanie wyników ścisłych dla $d = 1$ i szeregu przybliżonych (RPA, SWA, LDE, itd.) dla sieci o wymiarowości $d < +\infty$, które wychodzą poza przybliżenie VA oraz uzupełniają rezultaty tego przybliżenia (diagramy fazowe są jakościowo zgodne).
- Pokazanie, że badane modele przewidują występowanie stanów z elektronową separacją fazową, w których występują domeny nadprzewodzące (PS:SS/NO, PS:SS/CO, PS:SS/F). Separacja ta może być także indukowana zewnętrznym polem magnetycznym (efekt paramagnetyczny pola).
- Określenie obszarów występowania stanów metastabilnych i wpływu na nie zewnętrznego pola magnetycznego w modelu U - I - B .
- Przewidywanie współistnienia w stanach z separacją fazową: nadprzewodnictwa i porządku ładunkowego (PS/SS:CO w modelu U - I - W) oraz nadprzewodnictwa i magnetyzmu (PS/SS:F w modelu U - I - J).

Szczegółowa dyskusja otrzymanych wyników i ich odniesienie do realnych układów zawarta jest w Rozdziałach 3.5 i 4.4 (por. też Rozdział 1.2).

Oczywistym jest, że występowanie stanów z separacją fazową jest charakterystyczne dla krótkozasięgowej natury oddziaływań występujących w badanych układach. Gdyby uwzględnić (nieekranowane) dalekozasięgowe oddziaływania kulombowskie, makroskopowa separacja fazowa naładowanych cząstek jest utrudniona [41]. W takim przypadku może wystąpić tzw. sfrustrowana separacja fazowa (mezo- lub nanoskopowa) wraz z formacją bardzo różnorodnych tekstur [222–225].

Bibliografia

- [1] J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands*, Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences, Vol. **276** (1963), No. 1364, 238–257.
- [2] J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands. II. The degenerate band case*, Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences, Vol. **277** (1964), No. 1369, 237–259.
- [3] J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands. III. An improved solution*, Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences, Vol. **281** (1964), No. 1386, 401–419.
- [4] J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands. IV. The atomic representation*, Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences, Vol. **285** (1965), No. 1403, 542–560.
- [5] J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands. V. A perturbation expansion about the atomic limit*, Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences, Vol. **296** (1967), No. 1444, 82–99.
- [6] J. Hubbard, *Electron correlations in narrow energy bands. VI. The connexion with many-body perturbation theory*, Proceedings of the Royal Society of London Series A – Mathematical and Physical Sciences, Vol. **296** (1967), No. 1444, 100–112.
- [7] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, *Superconductivity in narrow-band systems with local nonretarded attractive interactions*, Reviews of Modern Physics, Vol. **62** (1990), No. 1, 113–171.
- [8] R. Brout, *Statistical mechanical theory of ferromagnetism. High density behavior*, Physical Review, Vol. **118** (1960), No. 4, 1009–1019.
- [9] C.J. Thompson, H. Silver, *The classical limit of n -vector spin models*, Communications in Mathematical Physics, Vol. **33** (1973), No. 1, 53–60.
- [10] C.J. Thompson, *Ising model in the high density limit*, Communications in Mathematical Physics, Vol. **36** (1974), No. 4, 255–262.
- [11] P.A. Pearce, C.J. Thompson, *The anisotropic Heisenberg model in the long-range interaction limit*, Communications in Mathematical Physics, Vol. **41** (1975), No. 2, 191–201.
- [12] P.A. Pearce, C.J. Thompson, *The high density limit for lattice spin models*, Communica-

- tions in Mathematical Physics, Vol. **58** (1978), No. 2, 131–138.
- [13] J. Jędrzejewski, *Electron charge ordering in the extended Hubbard model*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, Vol. **48** (1982), No. 3, 219–225.
- [14] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg, *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*, Reviews of Modern Physics, Vol. **68** (1996), No. 1, 13–125.
- [15] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, R. Micnas, *Phase separation in a lattice model of a superconductor with pair hopping*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **24** (2012), No. 21, 215601.
- [16] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *The magnetic field induced phase separation in a model of a superconductor with local electron pairing*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **25** (2013), No. 6, 065603.
- [17] K. Kapcia, *Metastability and phase separation in a simple model of a superconductor with extremely short coherence length*, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism (2013), przyjęta do druku, dostępna on-line, DOI: 10.1007/s10948-013-2409-8.
- [18] K. Kapcia, *Superconductivity, metastability and magnetic field induced phase separation in the atomic limit of the Penson-Kolb-Hubbard model*, Acta Physica Polonica A (2014), w recenzji.
- [19] K. Kapcia, *Interplay and competition between superconductivity and charge orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model with pair hopping and on-site attraction*, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. **26** (2013), No. 8, 2647–2650.
- [20] K. Kapcia, *Some properties of the model of a superconductor with pair hopping and magnetic interactions at half-filling*, Acta Physica Polonica A, Vol. **121** (2012), No. 4, 733–737.
- [21] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, *Microscopic theory of superconductivity*, Physical Review, Vol. **106** (1957), No. 1, 162–164.
- [22] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, *Theory of superconductivity*, Physical Review, Vol. **108** (1957), No. 5, 1175–1204.
- [23] A. Szewczyk, A. Wiśniewski, R. Puźniak, H. Szymczak, *Magnetyzm i nadprzewodnictwo*, Wydanie I, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2012.
- [24] M. Cyrot, D. Pavuna, *Wstęp do nadprzewodnictwa. Nadprzewodniki wysokotemperaturowe*, Wydanie I, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1996.
- [25] J. Stankowski, B. Czyżak, *Nadprzewodnictwo*, Wydanie II, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa, 1999.
- [26] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Fizyka ciała stałego*, Wydanie I, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1986.

- [27] C. Kittel, *Wstęp do fizyki ciała stałego*, Wydanie I, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1999.
- [28] J.M. Ziman, *Wstęp do teorii ciała stałego*, Wydanie I, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1977.
- [29] N.D. Mathur, F.M. Grosche, S.R. Julian, I.R. Walker, D.M. Freye, R.K.W. Haselwimmer, G.G. Lonzarich, *Magnetically mediated superconductivity in heavy fermion compounds*, Nature, Vol. **394** (1998), No. 6688, 39–43.
- [30] S.S. Saxena, P. Agarwal, K. Ahilan, F.M. Grosche, R.K.W. Haselwimmer, M.J. Steiner, E. Pugh, I.R. Walker, S.R. Julian, P. Monthoux, G.G. Lonzarich, A. Huxley, I. Sheikin, D. Braithwaite, J. Flouquet, *Superconductivity on the border of itinerant-electron ferromagnetism in UGe_2* , Nature, Vol. **406** (2000), No. 6796, 587–592.
- [31] A.V. Kornilov, V.M. Pudalov, Y. Kitaoka, K. Ishida, G.-Q. Zheng, T. Mito, J.S. Qualls, *Macroscopically inhomogeneous state at the boundary between the superconducting, antiferromagnetic, and metallic phases in quasi-one-dimensional $(TMTSF)_2PF_6$* , Physical Review B, Vol. **69** (2004), No. 22, 224404 (1–10).
- [32] C.V. Colin, B. Salameh, C.R. Pasquier, K. Bechgaard, *Upper critical field divergence induced by mesoscopic phase separation in the organic superconductor $(TMTSF)_2ReO_4$* , Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **20** (2008), No. 43, 434230 (1–5).
- [33] O.J. Taylor, A. Carrington, J.A. Schlueter, *Superconductor-insulator phase separation induced by rapid cooling of $\kappa\text{-(bedt-ttf)}_2\text{Cu}[\text{n}(\text{cn})_2]\text{Br}$* , Physical Review B, Vol. **77** (2008), No. 6, 060503 (1–4).
- [34] J. Orenstein, A.J. Millis, *Advances in the physics of high-temperature superconductivity*, Science, Vol. **288** (2000), No. 5465, 468–474.
- [35] J. Xu, S. Tan, L. Pi, Y. Zhang, *Coexistence and competition between superconductivity and magnetism in $La_{2-x}Sr_xCu_{0.94}M_{0.06}O_4$ ($M=Mn$ and Ru)*, Journal of Applied Physics, Vol. **104** (2008), No. 6, 063914 (1–10).
- [36] X. Yao, Y. Jin, M. Li, Z. Li, G. Cao, S. Cao, J. Zhang, *Coexistence of superconductivity and ferromagnetism in $La_{1.85}Sr_{0.15}CuO_4$ - $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ matrix composites*, Journal of Alloys and Compounds, Vol. **509** (2011), No. 18, 5472–5476.
- [37] C.M. Varma, *Missing valence states, diamagnetic insulators, and superconductors*, Physical Review Letters, Vol. **61** (1988), No. 23, 2713–2716.
- [38] A. Aharony, A. Auerbach, *Multicritical phase diagram and random field effects in superconducting bismuthates*, Physical Review Letters, Vol. **70** (1993), No. 12, 1874–1877.
- [39] A. Taraphder, H. R. Krishnamurthy, R. Pandit, T. V. Ramakrishnan, *Exotic physics in the negative- U , extended-Hubbard model for barium bismuthates?*, EPL (Europhysics Letters), Vol. **21** (1993), No. 1, 79.

- [40] A. Taraphder, H.R. Krishnamurthy, R. Pandit, T.V. Ramakrishnan, *Negative- U extended Hubbard model for doped barium bismuthates*, Physical Review B, Vol. **52** (1995), No. 2, 1368–1388.
- [41] S. Robaszkiewicz, G. Pawłowski, *Superconductivity, charge orderings and phase separations in systems with local electron pairing*, Acta Physica Polonica A, Vol. **90** (1996), No. 3, 569–586.
- [42] A. Taraphder, R. Pandit, H.R. Krishnamurthy, T.V. Ramakrishnan, *The exotic barium bismuthates*, International Journal of Modern Physics B, Vol. **10** (1996), No. 8, 863–955.
- [43] D.C. Johnston, *The puzzle of high temperature superconductivity in layered iron pnictides and chalcogenides*, Advances in Physics, Vol. **59** (2010), No. 6, 803–1061.
- [44] J.T. Park, D.S. Inosov, Ch. Niedermayer, G.L. Sun, D. Haug, N.B. Christensen, R. Dinnebier, A.V. Boris, A.J. Drew, L. Schulz, T. Shapoval, U. Wolff, V. Neu, X. Yang, C.T. Lin, B. Keimer, V. Hinkov, *Electronic phase separation in the slightly underdoped iron pnictide superconductor $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$* , Physical Review Letters, Vol. **102** (2009), No. 11, 117006 (1–4).
- [45] A. Ricci, N. Poccia, G. Campi, B. Joseph, G. Arrighetti, L. Barba, M. Reynolds, M. Burghammer, H. Takeya, Y. Mizuguchi, Y. Takano, M. Colapietro, N.L. Saini, A. Bianconi, *Nanoscale phase separation in the iron chalcogenide superconductor $K_{0.8}Fe_{1.6}Se_2$ as seen via scanning nanofocused x-ray diffraction*, Physical Review B, Vol. **84** (2011), No. 6, 060511 (1–4).
- [46] S. Avci, O. Chmaissem, D.Y. Chung, S. Rosenkranz, E.A. Goremychkin, J.P. Castellan, I.S. Todorov, J.A. Schlueter, H. Claus, A. Daoud-Aladine, D.D. Khalyavin, M.G. Kanatzidis, R. Osborn, *Phase diagram of $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$* , Physical Review B, Vol. **85** (2012), No. 18, 184507(1–12).
- [47] E. Wiesenmayer, H. Luetkens, G. Pascua, R. Khasanov, A. Amato, H. Potts, B. Banusch, H.-H. Klauss, D. Johrendt, *Microscopic coexistence of superconductivity and magnetism in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$* , Physical Review Letters, Vol. **107** (2011), No. 23, 237001 (1–4).
- [48] S. Maiti, R.M. Fernandes, A.V. Chubukov, *Gap nodes induced by coexistence with anti-ferromagnetism in iron-based superconductors*, Physical Review B, Vol. **85** (2012), No. 14, 144527 (1–11).
- [49] X. He, G. Li, J. Zhang, A.B. Karki, R. Jin, B.C. Sales, A.S. Sefat, M.A. McGuire, D. Mandrus, E.W. Plummer, *Nanoscale chemical phase separation in $FeTe_{0.55}Se_{0.45}$ as seen via scanning tunneling spectroscopy*, Physical Review B, Vol. **83** (2011), No. 22, 220502 (1–4).
- [50] S. Landsgesell, D. Abou-Ras, D. Alber, K. Prokeš, T. Wolf, *Direct evidence of chemical and crystallographic phase separation in $K_{0.65}Fe_{1.74}Se_2$* , Physical Review B, Vol. **86** (2012), No. 22, 224502 (1–5).
- [51] H. Luo, Z. Yamani, Y. Chen, X. Lu, M. Wang, S. Li, T.A. Maier, S. Danilkin, D.T. Adroja,

- P. Dai, *Electron doping evolution of the anisotropic spin excitations in $\text{BaFe}_{2-x}\text{Ni}_x\text{As}_2$* , Physical Review B, Vol. **86** (2012), No. 2, 024508 (1–10).
- [52] C. Dong, H. Wang, Z. Li, J. Chen, H.Q. Yuan, M. Fang, *Revised phase diagram for the $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ system with fewer excess Fe atoms*, Physical Review B, Vol. **84** (2011), No. 22, 224506 (1–6).
- [53] L. Udby, N.H. Andersen, F.C. Chou, N.B. Christensen, S.B. Emery, K. Lefmann, J.W. Lynn, H.E. Mohottala, C. Niedermayer, B.O. Wells, *Magnetic ordering in electronically phase-separated $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+y}$: Neutron diffraction experiments*, Physical Review B, Vol. **80** (2009), No. 1, 014505 (1–5).
- [54] A.T. Savici, Y. Fudamoto, I.M. Gat, T. Ito, M.I. Larkin, Y.J. Uemura, G.M. Luke, K.M. Kojima, Y.S. Lee, M.A. Kastner, R.J. Birgeneau, K. Yamada, *Muon spin relaxation studies of incommensurate magnetism and superconductivity in stage-4 $\text{La}_2\text{CuO}_{4.11}$ and $\text{La}_{1.88}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$* , Physical Review B, Vol. **66** (2002), No. 1, 014524 (1–14).
- [55] H.E. Mohottala, B.O. Wells, N.I. Budnick, W.A. Hines, C. Niedermayer, L. Udby, C. Bernhard, A.R. Moodenbaugh, F.-C. Chou, *Phase separation in superoxygenated $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+y}$* , Nature Materials, Vol. **5** (2006), No. 5, 377–382.
- [56] S.H. Pan, J.P. O’Neal, R.L. Badzey, C. Chamon, H. Ding, J.R. Engelbrecht, Z. Wang, H. Eisaki, S. Uchida, A.K. Gupta, K.-W. Ng, E.W. Hudson, K.M. Lang, J.C. Davis, *Microscopic electronic inhomogeneity in the high- T_c superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$* , Nature, Vol. **413** (2001), No. 6853, 282–285.
- [57] M.W. Zwierlein, J.R. Abo-Shaeer, A. Schirotzek, C.H. Schunck, W. Ketterle, *Vortices and superfluidity in a strongly interacting Fermi gas*, Nature, Vol. **435** (2005), No. 7045, 1047–1051.
- [58] M.W. Zwierlein, A. Schirotzek, C.H. Schunck, W. Ketterle, *Fermionic superfluidity with imbalanced spin populations*, Science, Vol. **311** (2006), No. 5760, 492–496.
- [59] G.B. Partridge, W. Li, R.I. Kamar, Y.-A. Liao, R.G. Hulet, *Pairing and phase separation in a polarized Fermi gas*, Science, Vol. **311** (2006), No. 5760, 503–505.
- [60] Y.-I. Shin, A. Schirotzek, C.H. Schunck, W. Ketterle, *Realization of a strongly interacting bose-fermi mixture from a two-component fermi gas*, Physical Review Letters, Vol. **101** (2008), No. 7, 070404 (1–4).
- [61] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, *Superconductivity in a narrow-band system with intersite electron pairing in two dimensions. II. Effects of nearest-neighbor exchange and correlated hopping*, Physical Review B, Vol. **39** (1989), No. 16, 11653–11662.
- [62] R.A. Bari, *Effects of short-range interactions on electron-charge ordering and lattice distortions in the localized state*, Physical Review B, Vol. **3** (1971), No. 8, 2662–2670.
- [63] S. Robaszkiewicz, T. Kostyrko, *The influence of electron-electron and electron-phonon*

- interactions on electron charge orderings in quasi-one-dimensional systems*, Physica B+C, Vol. **112** (1982), No. 3, 389–405.
- [64] H. De Raedt, T. Schneider, M.P. Sørensen, *Superconductivity in hubbard models coupled to non-fermionic degrees of freedom*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, Vol. **79** (1990), No. 3, 327–332.
- [65] E. Fradkin, J.E. Hirsch, *Phase diagram of one-dimensional electron-phonon systems. I. the Su-Schrieffer-Heeger model*, Physical Review B, Vol. **27** (1983), No. 3, 1680–1697.
- [66] K. Miyake, T. Matsuura, H. Jichu, Y. Nagaoka, *A model for Cooper pairing in heavy fermion superconductor*, Progress of Theoretical Physics, Vol. **72** (1984), No. 6, 1063–1080.
- [67] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, J. Ranninger, *Superconductivity in the generalized periodic Anderson model with strong local attraction*, Physical Review B, Vol. **36** (1987), No. 1, 180–201.
- [68] C. Bastide, C. Lacroix, *The Anderson lattice in the weak-hopping limit: Superconductivity induced by dynamic interactions*, Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. **21** (1988), No. 19, 3557–3576.
- [69] N. F. Mott, *Metal-insulator transition*, Reviews of Modern Physics, Vol. **40** (1968), No. 4, 677–683.
- [70] D.R. Penn, *Stability theory of the magnetic phases for a simple model of the transition metals*, Physical Review, Vol. **142** (1966), No. 2, 350–365.
- [71] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, K.A. Chao, *Hartree theory for the negative- U extended Hubbard model: Ground state*, Physical Review B, Vol. **24** (1981), No. 7, 4018–4024.
- [72] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, K.A. Chao, *Hartree theory for the negative- U extended Hubbard model. II. Finite temperature*, Physical Review B, Vol. **26** (1982), No. 7, 3915–3922.
- [73] E.H. Lieb, F.Y. Wu, *Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension*, Physical Review Letters, Vol. **20** (1968), No. 25, 1445–1448.
- [74] E. Lieb, D. Mattis, *Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels*, Physical Review, Vol. **125** (1962), 164–172.
- [75] F.H.L Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, V.E. Korepin, *The one-dimensional Hubbard model*, Wydanie I, Cambridge University Press, 2005.
- [76] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, K.A. Chao, *Thermodynamic properties of the extended Hubbard model with strong intra-atomic attraction and an arbitrary electron density*, Physical Review B, Vol. **23** (1981), No. 3, 1447–1458.
- [77] S. Robaszkiewicz, R. Micnas, K.A. Chao, *Chemical potential and order parameter of extended Hubbard model with strong intra-atomic attraction*, Physical Review B, Vol. **24** (1981),

- No. 3, 1579–1582.
- [78] R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz, S. Tabor, *Superconductivity in a narrow-band system with intersite electron pairing in two dimensions: A mean-field study*, Physical Review B, Vol. **37** (1988), 9410–9422.
- [79] K.A. Chao, J. Spalek, A.M. Oleś, *Kinetic exchange interaction in a narrow S-band*, Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. **10** (1977), No. 10, L271–L276.
- [80] K.A. Chao, J. Spalek, A.M. Oleś, *Canonical perturbation expansion of the Hubbard model*, Physical Review B, Vol. **18** (1978), No. 7, 3453–3464.
- [81] J. Spalek, *t-J model then and now: A personal perspective from the pioneering times*, Acta Physica Polonica A, Vol. **111** (2007), No. 4, 409–424.
- [82] L.M. Falicov, J.C. Kimball, *Simple model for semiconductor-metal transitions: Smb_6 and transition-metal oxides*, Physical Review Letters, Vol. **22** (1969), No. 19, 997–999.
- [83] J.K. Freericks, V. Zlatić, *Exact dynamical mean-field theory of the Falicov-Kimball model*, Reviews of Modern Physics, Vol. **75** (2003), No. 4, 1333–1382.
- [84] R. Lemański, J.K. Freericks, G. Banach, *Charge stripes due to electron correlations in the two-dimensional spinless Falicov-Kimball model*, Journal of Statistical Physics, Vol. **116** (2004), No. 1-4, 699–718.
- [85] R. Lemański, J. Wrzodak, *Ground-state phase diagrams of the generalized Falicov-Kimball model with Hund coupling*, Physical Review B, Vol. **78** (2008), No. 8, 085118 (1–9).
- [86] J. Wrzodak, R. Lemański, *Energy spectrum analysis and finite temperature properties of the Falicov-Kimball model with Hund coupling at half filling*, Physical Review B, Vol. **82** (2010), No. 19, 195118 (1–9).
- [87] R. Lemański, K. Ziegler, *Gapless metallic charge-density-wave phase driven by strong electron correlations*, Physical Review B, Vol. **89** (2014), No. 7, 075104 (1–9).
- [88] R. Friedberg, T.D. Lee, *Boson-Fermion model of superconductivity*, Physics Letters A, Vol. **138** (1989), No. 8, 423–427.
- [89] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, A. Bussmann-Holder, *Two-component scenarios for non-conventional (exotic) superconductors*, Structure and Bonding, Vol. **114** (2005), 13–69.
- [90] J. Krzyszcak, T. Domański, K.I. Wysokiński, R. Micnas, S. Robaszkiewicz, *Real space inhomogeneities in high temperature superconductors: The perspective of the two-component model*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **22** (2010), No. 25, 255702 (1–11).
- [91] P.W. Anderson, *Localized magnetic states in metals*, Physical Review, Vol. **124** (1961), No. 1, 41–53.
- [92] O. Howczak, J. Spalek, *Anderson lattice with explicit kondo coupling revisited: Metamagnetism and the field-induced suppression of the heavy fermion state*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **24** (2012), No. 20, 205602 (1–14).

- [93] R. Putz, B. Ehlers, L. Lilly, A. Muramatsu, W. Hanke, *Superconducting pairing of the extended multiband Hubbard model: A weak-coupling study*, Physical Review B, Vol. **41** (1990), No. 1, 853–856.
- [94] T. Schickling, F. Gebhard, J. Bünnemann, *Antiferromagnetic order in multiband Hubbard models for iron pnictides*, Physical Review Letters, Vol. **106** (2011), No. 14, 146402 (1–4).
- [95] I. Danielewicz-Ferchmin, A.R. Ferchmin, *Ciepło. Część I. Termodynamika*, Wydanie III, Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Poznań, 1999.
- [96] I. Danielewicz-Ferchmin, A.R. Ferchmin, *Ciepło. Część II: bodźce i przepływy, równanie stanu, rozkłady kanoniczne*, Wydanie I, Wydawnictwo Naukowe Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, Poznań, 2000.
- [97] J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, M.E.J. Newman, *Zjawiska krytyczne. Wstęp do teorii grupy renormalizacji*, Wydanie I, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 1998.
- [98] K. Huang, *Mechanika statystyczna*, Wydanie I, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1978.
- [99] L.D. Landau, J.M. Lifszyc, *Fizyka statystyczna*, Wydanie II, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2012, Część 1 i 2.
- [100] L.D. Landau, J.M. Lifszyc, *Elektrodynamika ośrodków ciągłych*, Wydanie II zmienione, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2012, Część 1 i 2.
- [101] A.I. Anselm, *Podstawy fizyki statystycznej i termodynamiki*, Wydanie I, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1978.
- [102] R.P. Feynman, R.B. Leighton, M. Sands, *Feynmana wykłady z fizyki*, Wydanie V uaktualnione, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2007, Tom 1-3.
- [103] W. Ufnalski, *Równowagi i diagramy fazowe. Algorytmy obliczeń, interpretacje i symulacje komputerowe*, Wydanie I, Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa, 2008.
- [104] E. Arrigoni, G.C. Strinati, *Doping-induced incommensurate antiferromagnetism in a Mott-Hubbard insulator*, Physical Review B, Vol. **44** (1991), No. 14, 7455–7465.
- [105] M. Bąk, *Mixed phase and bound states in the phase diagram of the extended Hubbard model*, Acta Physica Polonica A, Vol. **106** (2004), No. 5, 637–646.
- [106] R.J. Bursill, C.J. Thompson, *Variational bounds for lattice fermion models II. Extended Hubbard model in the atomic limit*, Journal of Physics A: Mathematical and General, Vol. **26** (1993), No. 18, 4497–4511.
- [107] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *The effects of the next-nearest-neighbour density-density interaction in the atomic limit of the extended Hubbard model*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **23** (2011), No. 10, 105601 (1–12).
- [108] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *The effects of the next-nearest-neighbour density-density in-*

- teraction in the atomic limit of the extended Hubbard model (*Journal of Physics Condensed Matter* (2011) 23 (105601)), *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. **23** (2011), No. 24, 249802 (1).
- [109] W. Hoston, A.N. Berker, *Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling*, *Physical Review Letters*, Vol. **67** (1991), No. 8, 1027–1030.
- [110] C. Ekiz, M. Keskin, *Multicritical phase diagrams of the Blume-Emery-Griffiths model with repulsive biquadratic coupling including metastable phases*, *Physical Review B*, Vol. **66** (2002), No. 5, 054105 (1–11).
- [111] K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, *Interplay between charge and magnetic orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model for strong on-site repulsion*, *Acta Physica Polonica A*, Vol. **121** (2012), No. 5-6, 1032–1034.
- [112] J. Łopuszański, A. Pawlikowski, *Fizyka statystyczna*, Wydanie I, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1969.
- [113] R. Peierls, *On a minimum property of the free energy*, *Physical Review*, Vol. **54** (1938), No. 11, 918–919.
- [114] R.P. Feynman, *Slow electrons in a polar crystal*, *Physical Review*, Vol. **97** (1955), No. 3, 660–665.
- [115] R.A. Bari, *Superconductivity, ferroelectricity, and the Mott insulator*, *Physical Review B*, Vol. **7** (1973), No. 5, 2128–2132.
- [116] S. Katsura, S. Fujimori, *Magnetization process and the critical field of the ising model with first- and second-neighbour interactions*, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, Vol. **7** (1974), No. 14, 2506–2520.
- [117] J. Jędrzejewski, *Phase diagrams of extended Hubbard models in the atomic limit*, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, Vol. **205** (1994), No. 4, 702–717.
- [118] S. Prata, *Szkoła programowania. Język C++*, Wydanie V, Wydawnictwo Helion, 2006.
- [119] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical recipes in C. The art of scientific computing*, Wydanie II, Cambridge University Press, 1992.
- [120] Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, Wydanie VI, Wydawnictwa Naukowo-Techniczne, Warszawa, 2007.
- [121] S. Wolfram, *Mathematica: a system for doing mathematics by computer*, Wydanie II, Addison-Wesley Publishing Company, 1991.
- [122] A. Hui, S. Doniach, *Penson-Kolb-Hubbard model: A study of the competition between single-particle and pair hopping in one dimension*, *Physical Review B*, Vol. **48** (1993), No. 4, 2063–2073.
- [123] S. Robaszkiewicz, B.R. Bułka, *Superconductivity in the Hubbard model with pair hopping*,

- Physical Review B, Vol. **59** (1999), No. 9, 6430–6437.
- [124] M. Mierzejewski, M.M. Maška, *Critical field in a superconductivity model with local pairs*, Physical Review B, Vol. **69** (2004), No. 5, 054502 (1–7).
- [125] A. Ptok, M.M. Maška, M. Mierzejewski, *The Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov phase in the presence of pair hopping interaction*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **21** (2009), No. 29, 295601 (1–9).
- [126] A. Ptok, M.M. Maška, M. Mierzejewski, *Coexistence of superconductivity and incommensurate magnetic order*, Physical Review B, Vol. **84** (2011), No. 9, 094526 (1–6).
- [127] G.I. Japaridze, E. Müller-Hartmann, *Bond-located ordering in the one-dimensional Penson-Kolb-Hubbard model*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **9** (1997), No. 47, 10509–10519.
- [128] G.I. Japaridze, A.P. Kampf, M. Sekania, P. Kakashvili, Ph. Brune, *η -pairing superconductivity in the Hubbard chain with pair hopping*, Physical Review B, Vol. **65** (2001), No. 1, 014518 (1–10).
- [129] S. Robaszkiewicz, W.R. Czar, *Superconductivity in the two-dimensional extended Hubbard model with pair-hopping interaction*, Acta Physica Polonica B, Vol. **32** (2001), No. 10 SPEC. ISS., 3267–3272.
- [130] W.R. Czar, S. Robaszkiewicz, *Superconducting properties of the η -pairing state in the Penson-Kolb-Hubbard model*, Acta Physica Polonica A, Vol. **106** (2004), No. 5, 709–713.
- [131] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, *Thermodynamics of local-pair superconductors with anisotropic lattice structures*, Physical Review B, Vol. **45** (1992), No. 17, 9900–9914.
- [132] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, T. Kostyrko, *Thermodynamic and electromagnetic properties of hard-core charged bosons on a lattice*, Physical Review B, Vol. **52** (1995), No. 9, 6863–6879.
- [133] K. Bernardet, G.G. Batrouni, J.-L. Meunier, G. Schmid, M. Troyer, A. Dorneich, *Analytical and numerical study of hardcore bosons in two dimensions*, Physical Review B, Vol. **65** (2002), No. 10, 104519 (1–10).
- [134] G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, A. Dorneich, *Finite-temperature phase diagram of hard-core bosons in two dimensions*, Physical Review Letters, Vol. **88** (2002), No. 16, 1672081–1672084.
- [135] H. Shiba, *Thermodynamic properties of the one-dimensional half-filled-band Hubbard model. II: Application of the grand canonical method*, Progress of Theoretical Physics, Vol. **48** (1972), No. 6, 2171–2186.
- [136] E.H. Lieb, *Two theorems on the Hubbard model*, Physical Review Letters, Vol. **62** (1989), No. 10, 1201–1204.
- [137] J.E. Hirsch, *Bose decondensation versus pair unbinding in short-coherence-length super-*

- conductors*, Physica C: Superconductivity and its applications, Vol. **179** (1991), No. 4-6, 317–332.
- [138] W.-C. Ho, J.H. Barry, *Tricritical behavior and phase diagrams of the Bari model for Mott insulator-superconductor transitions*, Physical Review B, Vol. **16** (1977), No. 7, 3172–3181.
- [139] C. Wiecko, R. Allub, *Superconductivity and random disorder in the zero-bandwidth limit*, Physical Review B, Vol. **35** (1987), No. 4, 2041–2044.
- [140] S. Robaszkiewicz, G. Pawłowski, *Effects of finite pair binding energy in a model of a superconductor with local electron pairing*, Physica C: Superconductivity and its applications, Vol. **210** (1993), No. 1-2, 61–79.
- [141] S. Robaszkiewicz, *Pseudospin models of superconductors with very short coherence length*, Acta Physica Polonica A, Vol. **85** (1994), No. 1, 117–131.
- [142] E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, Annals of Physics, Vol. **16** (1961), No. 3, 407–466.
- [143] S. Katsura, *Statistical mechanics of the anisotropic linear Heisenberg model*, Physical Review, Vol. **127** (1962), No. 5, 1508–1518.
- [144] Th. Niemeijer, *Some exact calculations on a chain of spins 1/2*, Physica, Vol. **36** (1967), No. 3, 377–419.
- [145] Y. Tsuchida, A. Oguchi, K. Kanai, *One-dimensional anisotropic exchange-coupled chain with $S = 1/2$* , Progress of Theoretical Physics, Vol. **56** (1976), No. 4, 1011–1020.
- [146] W.H. Kleiner, *Space-time symmetry of transport coefficients*, Physical Review, Vol. **142** (1966), No. 2, 318–326.
- [147] J.S. Semura, D.L. Huber, *Low-temperature behavior of the planar Heisenberg ferromagnet*, Physical Review B, Vol. **7** (1973), No. 5, 2154–2162.
- [148] P.W. Anderson, *Random-phase approximation in the theory of superconductivity*, Physical Review, Vol. **112** (1958), No. 6, 1900–1916.
- [149] F. Englert, *Theory of a Heisenberg ferromagnet in the random phase approximation*, Physical Review Letters, Vol. **5** (1960), No. 3, 102–103.
- [150] R. Micnas, S. Robaszkiewicz, K.A. Chao, *Multicritical behavior of the extended Hubbard model in the zero-bandwidth limit*, Physical Review B, Vol. **29** (1984), No. 5, 2784–2789.
- [151] S. Robaszkiewicz, *The charge-ordered state in an extended Hubbard model*, Physica Status Solidi (b), Vol. **59** (1973), No. 1, K63–K65.
- [152] K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, *Charge orderings and phase separations in the atomic limit of the extended Hubbard model with intersite density-density interactions*, Acta Physica Polonica A, Vol. **118** (2010), No. 2, 350–352.
- [153] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *Stable and metastable phases in the atomic limit of the*

- extended Hubbard model with intersite density-density interactions*, Acta Physica Polonica A, Vol. **121** (2012), No. 5-6, 1029–1031.
- [154] W. Kłobus, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *Magnetic orderings and phase separations in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model with intersite magnetic interactions*, Acta Physica Polonica A, Vol. **118** (2010), No. 2, 353–355.
- [155] S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz, *On the phase diagram of the zero-bandwidth extended Hubbard model with intersite magnetic interactions for strong on-site repulsion limit*, Acta Physica Polonica A, Vol. **121** (2012), No. 5-6, 1035–1037.
- [156] N.D. Mermin, H. Wagner, *Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models*, Physical Review Letters, Vol. **17** (1966), No. 22, 1133–1136.
- [157] V.L. Berezinskii, *Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems possessing a continuous symmetry group. II. Quantum systems*, Soviet Physics JETP, Vol. **32** (1970), No. 3, 610–616.
- [158] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, *Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (Application of dislocation theory)*, Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. **5** (1972), No. 11, L124–L126.
- [159] J.M. Kosterlitz, D.J. Thouless, *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*, Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. **6** (1973), No. 7, 1181–1203.
- [160] W.R. Czar, S. Robaszkiewicz, *Thermodynamic and electromagnetic properties of the Penson-Kolb model*, Physical Review B, Vol. **64** (2001), No. 10, 104511 (1–11).
- [161] S. Robaszkiewicz, W.R. Czar, *Properties of the η -pairing phase of the Penson-Kolb model*, Physica Status Solidi (B) Basic Research, Vol. **236** (2003), No. 2, 416–419.
- [162] A. Montorsi, D.K. Campbell, *Rigorous results on superconducting ground states for attractive extended Hubbard models*, Physical Review B, Vol. **53** (1996), No. 9, 5153–5156.
- [163] F. Dolcini, A. Montorsi, *Temperature and filling dependence of the superconducting π phase in the Penson-Kolb-Hubbard model*, Physical Review B, Vol. **62** (2000), No. 4, 2315–2320.
- [164] K. Ziegler, *Spin-1/2 fermions: Crossover from weak to strong attractive interaction*, Laser Physics, Vol. **15** (2005), No. 4, 650–655.
- [165] G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz, *Superconducting properties and phase separation effects in systems with local pairing*, Acta Physica Polonica A, Vol. **91** (1997), No. 2, 409–413.
- [166] P.G.J. van Dongen, C. Leinung, *Mott-Hubbard transition in a magnetic field*, Annalen der Physik (Leipzig), Vol. **6** (1997), No. 1, 45–67.
- [167] A. Kujawa-Cichy, *On the BCS-BEC crossover in the spin-polarized attractive Hubbard model at $T = 0$* , Acta Physica Polonica A, Vol. **118** (2010), No. 2, 423–425.

- [168] A. Kujawa-Cichy, R. Micnas, *Stability of superfluid phases in the 2D spin-polarized attractive Hubbard model*, EPL, Vol. **95** (2011), No. 3, 37003 (1–6).
- [169] K. Maki, *Effect of Pauli paramagnetism on magnetic properties of high-field superconductors*, Physical Review, Vol. **148** (1966), No. 1, 362–369.
- [170] F. Mancini, F.P. Mancini, *One-dimensional extended Hubbard model in the atomic limit*, Physical Review E, Vol. **77** (2008), No. 6, 061120 (1–22).
- [171] F. Mancini, E. Plekhanov, G. Sica, *$T = 0$ phase diagram of the 1D Hubbard model with magnetic interactions in the narrow band limit*, Central European Journal of Physics, Vol. **10** (2012), No. 3, 609–614.
- [172] F. Mancini, E. Plekhanov, G. Sica, *Exact solution of the 1D Hubbard model in the atomic limit with inter-site magnetic coupling*, European Physical Journal B, Vol. **86** (2013), No. 5, 224 (1–17).
- [173] S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz, *Phase diagram of two dimensional extended Hubbard model with inter-site magnetic interactions — a Monte Carlo study*, Acta Physica Polonica A (2014), w recenzji.
- [174] S. Robaszkiewicz, *Magnetism and charge-ordering in the localized state*, Physica Status Solidi (b), Vol. **70** (1975), No. 1, K51–K54.
- [175] S. Robaszkiewicz, *Magnetism and charge orderings in Mott insulators*, Acta Physica Polonica A, Vol. **55** (1979), No. 4, 453–469.
- [176] U. Brandt, J. Stolze, *Ground states of extended Hubbard models in the atomic limit*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, Vol. **62** (1986), No. 4, 433–441.
- [177] F. Mancini, E. Plekhanov, G. Sica, *Spin and charge orderings in the atomic limit of the U - V - J model*, Journal of Physics: Conference Series, Vol. **391** (2012), No. 1, 012148 (1–5).
- [178] T. Gerisch, A. Rieckers, *Limiting Gibbs states and phase transitions of a bipartite mean-field Hubbard model*, Journal of Statistical Physics, Vol. **91** (1998), No. 3-4, 759–785.
- [179] T. Gerisch, R. Münzner, A. Rieckers, *Canonical versus grand-canonical free energies and phase diagrams of a bipolaronic superconductor model*, Journal of Statistical Physics, Vol. **93** (1998), No. 5-6, 1021–1049.
- [180] N.H. Lindner, A. Auerbach, *Conductivity of hard core bosons: A paradigm of a bad metal*, Physical Review B, Vol. **81** (2010), No. 5, 054512 (1–14).
- [181] S.D. Huber, N.H. Lindner, *Topological transitions for lattice bosons in a magnetic field*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, Vol. **108** (2011), No. 50, 19925–19930.
- [182] I.V. Stasyuk, O. Vorobyov, *Energy spectrum and phase diagrams of two-sublattice hard-core boson model*, Condensed Matter Physics, Vol. **16** (2013), No. 2, 23005 (1–9).
- [183] J. Carrasquilla, M. Rigol, *Superfluid to normal phase transition in strongly correlated*

- bosons in two and three dimensions*, Physical Review A, Vol. **86** (2012), No. 4, 043629 (1–12).
- [184] Y. Nakano, T. Ishima, N. Kobayashi, T. Yamamoto, I. Ichinose, T. Matsui, *Finite-temperature phase diagram of two-component bosons in a cubic optical lattice: Three-dimensional t - J model of hard-core bosons*, Physical Review A, Vol. **85** (2012), No. 2, 023617 (1–10).
- [185] Y. Kuno, K. Kataoka, I. Ichinose, *Effective field theories for two-component repulsive bosons on lattice and their phase diagrams*, Physical Review B, Vol. **87** (2013), No. 1, 014518 (1–12).
- [186] G. Beni, P. Pincus, *Thermodynamics of an extended Hubbard model chain. I: Atomic limit for the half-filled band*, Physical Review B, Vol. **9** (1974), No. 7, 2963–2970.
- [187] R.S. Tu, T.A. Kaplan, *Effect of interatomic interactions on the zero-bandwidth Hubbard hamiltonian*, Physica Status Solidi (B) Basic Research, Vol. **63** (1974), No. 2, 659–662.
- [188] F. Mancini, *The extended Hubbard model in the ionic limit*, European Physical Journal B, Vol. **47** (2005), No. 4, 527–540.
- [189] F. Mancini, F.P. Mancini, *Extended Hubbard model in the presence of a magnetic field*, European Physical Journal B, Vol. **68** (2009), No. 3, 341–351.
- [190] F. Mancini, F.P. Mancini, A. Naddeo, *Role of the attractive intersite interaction in the extended Hubbard model*, European Physical Journal B, Vol. **68** (2009), No. 3, 309–315.
- [191] F. Mancini, F.P. Mancini, *Different orderings in the narrow-band limit of the extended Hubbard model on the Bethe lattice*, European Physical Journal B, Vol. **73** (2010), No. 4, 581–595.
- [192] S.A. Pirogov, Ya.G. Sinai, *Phase diagrams of classical lattice systems*, Theoretical and Mathematical Physics, Vol. **25** (1975), No. 3, 1185–1192 (English).
- [193] S.A. Pirogov, Ya.G. Sinai, *Phase diagrams of classical lattice systems continuation*, Theoretical and Mathematical Physics, Vol. **26** (1976), No. 1, 39–49 (English).
- [194] J. Jędrzejewski, *On the phase diagram of the extended Hubbard model*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, Vol. **59** (1985), No. 3, 325–332.
- [195] C. Borgs, J. Jędrzejewski, R. Kotecký, *The staggered charge-order phase of the extended Hubbard model in the atomic limit*, Journal of Physics A: Mathematical and General, Vol. **29** (1996), No. 4, 733–747.
- [196] J. Fröhlich, L. Rey-Bellet, D. Ueltschi, *Quantum lattice models at intermediate temperature*, Communications in Mathematical Physics, Vol. **224** (2001), No. 1, 33–63.
- [197] T. Misawa, Y. Yamaji, M. Imada, *Tricritical behavior in charge-order system*, Journal of the Physical Society of Japan, Vol. **75** (2006), No. 6, 064705 (1–20).
- [198] G. Pawłowski, *Charge orderings in the atomic limit of the extended Hubbard model*, Euro-

- pean Physical Journal B, Vol. **53** (2006), No. 4, 471–479.
- [199] G. Pawłowski, T. Kaźmierczak, *Phase separation and critical phenomena in the charge ordered system*, Solid State Communications, Vol. **145** (2008), No. 3, 109–113.
- [200] G. Ganzenmüller, G. Pawłowski, *Flat histogram Monte Carlo sampling for mechanical variables and conjugate thermodynamic fields with example applications to strongly correlated electronic systems*, Physical Review E, Vol. **78** (2008), No. 3, 036703 (1–11).
- [201] J.M. Kincaid, E.G.D. Cohen, *Phase diagrams of liquid helium mixtures and metamagnets: Experiment and mean field theory*, Physics Reports, Vol. **22** (1975), No. 2, 57–143.
- [202] F. Mancini, E. Plekhanov, G. Sica, *Exact solution of the 1D Hubbard model with NN and NNN interactions in the narrow-band limit*, European Physical Journal B, Vol. **86** (2013), No. 10, 408 (1–12).
- [203] J. Des Cloizeaux, M. Gaudin, *Anisotropic linear magnetic chain*, Journal of Mathematical Physics, Vol. **7** (1966), No. 8, 1384–1400.
- [204] J. Des Cloizeaux, *A soluble Fermi-gas model. Validity of transformations of the Bogoliubov type*, Journal of Mathematical Physics, Vol. **7** (1966), No. 12, 2136–2144.
- [205] C.N. Yang, C.P. Yang, *One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. I. Proof of Bethe's hypothesis for ground state in a finite system*, Physical Review, Vol. **150** (1966), No. 1, 321–327.
- [206] C.N. Yang, C.P. Yang, *One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. II. Properties of the ground-state energy per lattice site for an infinite system*, Physical Review, Vol. **150** (1966), No. 1, 327–339.
- [207] C.N. Yang, C.P. Yang, *One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. III. Applications*, Physical Review, Vol. **151** (1966), No. 1, 258–264.
- [208] D.J.J. Farnell, S.E. Krüger, J.B. Parkinson, *Coupled-cluster treatment of the XY-model*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **9** (1997), No. 36, 7601–7608.
- [209] R.F. Bishop, D.J.J. Farnell, S.E. Krüger, J.B. Parkinson, J. Richter, C. Zeng, *High-order coupled cluster method calculations for the ground- and excited-state properties of the spin-half XXZ model*, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **12** (2000), No. 30, 6887–6902.
- [210] E. Manousakis, *The spin- Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides*, Reviews of Modern Physics, Vol. **63** (1991), No. 1, 1–62.
- [211] A.W. Sandvik, *Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model*, Physical Review B, Vol. **56** (1997), No. 18, 11678–11690.
- [212] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, *Superconductivity, charge orderings and electron phase separation in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model*, w przygotowaniu.
- [213] G.I. Japaridze, E. Müller-Hartmann, *Triplet superconductivity in a one-dimensional ferromagnetic t - J model*, Physical Review B, Vol. **61** (2000), No. 13, 9019–9027.

- [214] C. Dziurzik, G.I. Japaridze, A. Schadschneider, J. Zittartz, *Triplet superconductivity vs. easy-plane ferromagnetism in a 1D itinerant electron system with transverse spin anisotropy*, European Physical Journal B, Vol. **37** (2004), No. 4, 453–463.
- [215] C. Dziurzik, G.I. Japaridze, A. Schadschneider, I. Titvinidze, J. Zittartz, *Triplet superconductivity in a 1D itinerant electron system with transverse spin anisotropy*, European Physical Journal B, Vol. **51** (2006), No. 1, 41–51.
- [216] W.R. Czar, S. Robaszkiewicz, *Properties of the extended Hubbard model with transverse (XY-type) spin-exchange interaction*, Physica Status Solidi (B) Basic Research, Vol. **243** (2006), No. 1, 151–154.
- [217] W.R. Czar, S. Robaszkiewicz, *Electron orderings of half-filled extended Hubbard models with spin-and charge-exchange interaction*, Acta Physica Polonica A, Vol. **109** (2006), No. 4-5, 577–582.
- [218] W.R. Czar, S. Robaszkiewicz, *Properties of extended Hubbard models with anisotropic spin-exchange interaction*, Materials Science Poland, Vol. **25** (2007), No. 2, 485–489.
- [219] K. Karcia, S. Robaszkiewicz, *The simple effective model for a description of interplay between superconductivity and magnetism in real compounds*, w przygotowaniu.
- [220] T. Kato, *On the convergence of the perturbation method. I*, Progress of Theoretical Physics, Vol. **4** (1949), No. 4, 514–523.
- [221] M. Takahashi, *Half-filled Hubbard model at low temperature*, Journal of Physics C: Solid State Physics, Vol. **10** (1977), No. 8, 1289–1301.
- [222] V.J. Emery, S.A. Kivelson, *Frustrated electronic phase separation and high-temperature superconductors*, Physica C: Superconductivity and its applications, Vol. **209** (1993), No. 4, 597–621.
- [223] J. Lorenzana, C. Castellani, C. Di Castro, *Phase separation frustrated by the long-range Coulomb interaction. I. Theory*, Physical Review B, Vol. **64** (2001), No. 23, 235127 (1–15).
- [224] J. Lorenzana, C. Castellani, C. Di Castro, *Phase separation frustrated by the long-range Coulomb interaction. II. Applications*, Physical Review B, Vol. **64** (2001), No. 23, 235128 (1–11).
- [225] V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, *Mesoscopic phase separation in anisotropic superconductors*, Physical Review B, Vol. **70** (2004), No. 22, 224516 (1–12).

Wykaz publikacji autora rozprawy

Wyróżnione publikacje, których numer jest pogrubiony i znajduje się w ramce (np. **6.**), są w ścisłym związku z niniejszą pracą doktorską

Prace naukowe w czasopismach z tzw. listy filadelfijskiej:

1. R. Puźniak, A. Wiśniewski, A. Szewczyk, **K. Kapcia**, J. Jun, N. D. Zhigadlo, S. M. Kazakov, J. Karpiński,
„Anisotropic upper critical field of chemically substituted MgB₂ single crystals studied by torque magnetometry”,
Physica C: Superconductivity and its Applications, Vol. **460 - 462**, Part 1, 616-617 (2007)
— praca doświadczalna.
2. **K. Kapcia**, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz,
„Charge orderings and phase separations in the atomic limit of the extended Hubbard model with intersite density-density interactions”,
Acta Physica Polonica A, Vol. **118**, No. 2, 350-352 (2010)
— model U - W .
3. W. Kłobus, **K. Kapcia**, S. Robaszkiewicz,
„Magnetic orderings and phase separations in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model with intersite magnetic interactions”,
Acta Physica Polonica A, Vol. **118**, No. 2, 353-355 (2010)
— model U - J .
4. G. Grabecki, K. A. Kolwas, J. Wrobel, **K. Kapcia**, R. Puzniak, R. Jakiela, M. Aleszkiewicz, T. Dietl, G. Springholz, G. Bauer,
„Contact superconductivity in In-PbTe junctions”,
Journal of Applied Physics, Vol. **108**, No. 5, 053714 (1-9) (2010)
— praca doświadczalna.
5. **K. Kapcia**, S. Robaszkiewicz,
„The effects of the next-nearest neighbour density-density interaction in the atomic limit of the extended Hubbard model”,
Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **23**, No. 10, 105601 (1-12) (2011);
Erratum: Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **23**, No. 24, 249802 (1) (2011)
— model U - W .

- 6. K. Kapcia,**
„Some properties of the model of a superconductor with pair hopping and magnetic interactions at half-filling”,
Acta Physica Polonica A, Vol. **121**, No. 4, 733-737 (2012)
— model U - I - J .
- 7. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, R. Micnas,**
„Phase separation in a lattice model of a superconductor with pair hopping”,
Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **24**, No. 21, 215601 (1-15) (2012)
— model U - I .
- 8. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz,**
„Stable and metastable phases in the atomic limit of the extended Hubbard model with intersite density–density interactions”,
Acta Physica Polonica A, Vol. **121**, No. 5-6, 1029-1031 (2012)
— model U - W .
- 9. K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz,**
„Interplay between charge and magnetic orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model for strong on-site repulsion”,
Acta Physica Polonica A, Vol. **121**, No. 5-6, 1032-1034 (2012)
— model U - W - J .
- 10. S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz,**
„On the phase diagram of the zero-bandwidth extended Hubbard model with intersite magnetic interactions for strong on-site repulsion limit”,
Acta Physica Polonica A, Vol. **121**, No. 5-6, 1035-1037 (2012)
— model U - J .
- 11. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz,**
„The magnetic field induced phase separation in a model of a superconductor with local electron pairing”,
Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. **25**, No. 6, 065603 (1-8) (2013)
— model U - I - B .
- 12. K. Kapcia,**
„Interplay and competition between superconductivity and charge orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model with pair hopping and on-site attraction”,
Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. **26**, No. 8, 2647-2650 (2013)
— model U - I - W .
- 13. K. Kapcia,**
„Metastability and phase separation in a simple model of a superconductor with extremely

short coherence length”

Journal of Superconductivity and Novel Magnetism (2013), przyjęta do druku, dostępna on-line, DOI: 10.1007/s10948-013-2409-8

— model $U-I$.

14. K. Kapcia,

„Superconductivity, metastability and magnetic field induced phase separation in the atomic limit of the Penson-Kolb-Hubbard model”

Acta Physica Polonica A (2014), w recenzji

— model $U-I-B$.

15. S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz,

„Phase diagram of two dimensional extended Hubbard model with inter-site magnetic interactions — a Monte Carlo study”

Acta Physica Polonica A (2014), w recenzji

— model $U-J$.

Publikacje w przygotowaniu:

16. K. Kapcia, S. Murawski, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz

„Magnetic orderings and phase separations in a simple model of narrow-band insulators”, planowane wysłanie pracy do Physical Review B

— model $U-J$.

17. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz

„The simple effective model for a description of interplay between superconductivity and magnetism in real compounds”

— model $U-I-J$.

18. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz

„Superconductivity, charge orderings and electron phase separation in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model”

— model $U-I-W$.

Inne publikacje:

- K. Kapcia, „55. Spotkanie w Lindau”, Postępy fizyki 4/2006, 182-183 (2006).
- K. Kapcia, „Refleksje z 55. Spotkania Laureatów Nagrody Nobla z Młodymi Naukowcami w Lindau”, Fizyka w szkole 1/2006, 61-62 (2006).

Uczestnictwo autora rozprawy w konferencjach naukowych

Adnotacja „referat” oznacza wystąpienie ustne autora rozprawy na konferencji (wyróżnione również ramką, np. [8.]), „poster” — prezentację wyników w formie plakatu podczas sesji posterowej.

- (i) The European Conference Physics of Magnetism 2008, Poznań, Polska, 24–27 czerwca 2008r.:
 - 1. K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, „*Charge orderings, superconductivity and phase separations in a zero-bandwidth extended Hubbard model*” — poster
 - 2. W. Kłobus, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Magnetic orderings in the Hubbard model with anisotropic spin-exchange interactions in the zero-bandwidth limit*” — poster
- (ii) XXIV International Conference of Physics Students, Split, Chorwacja, 10–18 sierpnia 2009r.:
 - 3. K. Kapcia, „*Charge ordering and phase separations in the atomic limit of the extended Hubbard model*” — **referat**
- (iii) XIV Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa: *Nadprzewodnictwo i niejednorodne układy skondensowane*, Ostrów Wielkopolski, 13–17 października 2009r.:
 - [4.] K. Kapcia, „*The effects of the next-nearest neighbor density-density interaction in the atomic limit of the extended Hubbard model*” — **referat** wygłoszony podczas Sesji Młodych (jako wyróżnienie za zaprezentowany poster)
 - 5. K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, „*The effects of the next-nearest neighbor density-density interaction in the atomic limit of the extended Hubbard model*” — poster
 - 6. W. Kłobus, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Electron orderings and phase separations in a simple model of magnetic insulators*” — poster
- (iv) International School and Conference on the Physics of Semiconductors, Krynica-Zdrój, Polska, 19–24 czerwca 2010r.:
 - 7. K.A. Kolwas, G. Grabecki, J. Wróbel, K. Kapcia, R. Puźniak, R. Jakiela, M. Aleszkiewicz, T. Dietl, G. Springholz, G. Bauer, „*Interface Superconductivity in In/PbTe Superconductor-Semiconductor Hybrid Structures*” — poster
- (v) XXV International Conference of Physics Students, Graz, Austria, 17–23 sierpnia 2010r.:
 - [8.] K. Kapcia, „*Phase separation and superconductivity in the atomic limit of the extended Hubbard model*” — **referat**

- (vi) XXXIV International Conference of Theoretical Physics: Correlations and coherence at different scales, Ustroń, Polska, 3–8 sierpnia 2010r.:
- [9.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Phase separations in a model of magnetic superconductor with short coherence length*” — **referat**
 - 10. K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, „*Competition between charge and magnetic orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model*” — poster
- (vii) 1st Summer Symposium on Nanomaterials and their application to Biology and Medicine, Poznań, Polska, 13–16 czerwca 2011r.:
- 11. K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, „*Interplay between charge and magnetic orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model*” — poster
 - 12. S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz, „*On the phase diagram of the zero-bandwidth Hubbard model with intersite magnetic interactions*” — poster
- (viii) The European Conference Physics of Magnetism 2011, Poznań, Polska, 27 czerwca – 1 lipca 2011r.:
- 13. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Stable and metastable phases in the atomic limit of the extended Hubbard model with intersite density-density interactions*” — poster
 - 14. K. Kapcia, W. Kłobus, S. Robaszkiewicz, „*Interplay between charge and magnetic orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model for strong on-site repulsion*” — poster
 - 15. W. Kłobus, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Exact results for the zero-bandwidth extended Hubbard model with intersite charge and magnetic interactions*” — poster
 - 16. S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz, „*On the phase diagram of the zero-bandwidth extended Hubbard model with intersite magnetic interactions for strong on-site repulsion limit*” — poster
- (ix) International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces, Praga, Czechy, 3–8 lipca 2011r.:
- 17. G. Grabecki, K. Kolwas, J. Wróbel, K. Kapcia, R. Puźniak, R. Jakiela, M. Aleszkiewicz, T. Dietl, G. Springholz, G. Bauer, „*Interface superconductivity between indium and lead telluride*” — współautor referatu
- (x) „100 years of superconductivity, 25 years of High-temperature superconductivity”, Cambridge, Wielka Brytania, 11–12 lipca 2011r.: (organizator: Institute of Physics IOP)
- [18.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*The interplay between superconductivity, magnetism and phase separations in a model of magnetic superconductor with short coherence length*” — **referat**
- (xi) XXVI International Conference for Physics Students, Budapeszt, Węgry, 10–18 sierpnia 2011r.:
- [19.] K. Kapcia, „*The interplay between homogeneous phases and phase separated states in the atomic limit of the extended Hubbard models*” — **referat**
 - 20. K. Kapcia, „*Inhomogeneous states in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard models with intersite competitive interactions*” — poster

-
- (xii) XLI Zjazd Fizyków Polskich, Lublin, Polska, 4–9 września 2011r.:
 - 21. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Uporządkowania elektronowe i ich separacje w układach wąskopasmowych*” — poster
 - (xiii) XV Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa „100 lat nadprzewodnictwa”, Kazimierz Dolny, Polska, 9–13 października 2011r.:
 - [22.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz „*The interplay between superconductivity and magnetism in a model of magnetic superconductor with pair hopping*” — **referat**
 - (xiv) XVI Training Course in the Physics of Strongly Correlated Systems, Vietri sul Mare (Salerno), Włochy, 3–14 października 2011r.:
 - 23. S. Murawski, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, G. Pawłowski, „*On the phase diagram of the zero-bandwidth extended Hubbard model with intersite magnetic interactions for strong on-site repulsion limit*” — poster
 - (xv) International Summer School on New Trends on Computational Approaches for Many-Body Systems, Sherbrooke, Kanada, 28 maja – 8 czerwca 2012r.:
 - 24. S. Murawski, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, G. Pawłowski, „*On the phase diagram of the zero-bandwidth Hubbard model with intersite magnetic interactions*” — poster
 - (xvi) 2nd Summer Symposium on Nanomaterials and their application to Biology and Medicine, Poznań, Polska, 20–24 czerwca 2012r.:
 - 25. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*The phase separations in a model of superconductor with extremely short coherence length*” — poster
 - (xvii) Ampere NMR School, Poznań, Poland, 24–30 czerwca 2012r.:
 - 26. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*The phase separations and superconductivity in the extended Hubbard model in the atomic limit*” — poster
 - 27. S. Murawski, K. Kapcia, G. Pawłowski, S. Robaszkiewicz, „*Electron ordering in U-J extended Hubbard model in the atomic limit*” — poster
 - (xviii) „The New Generation in Strongly Correlated Electron Systems” — NGSCES 2012, Portorož, Słowenia, 25–29 czerwca 2012r.:
 - 28. K. Kapcia, A. Ammaricci, M. Capone, S. Robaszkiewicz, „*Phase separation and charge orderings in the extended Hubbard models*” — poster
 - (xix) „Phase separation and superstripes in high temperature superconductors and related material” — SUPERSTRIPES 2012, Erice, Sycylia, Włochy 11–17 lipca 2012r.:
 - [29.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Interplay and competition between superconductivity and charge orderings in the zero-bandwidth limit of the extended Hubbard model with pair hopping*” — **referat**
 - (xx) XXVI International Conference of Physics Students, Utrecht, Holandia, 4–10 sierpnia 2012r.:
 - [30.] K. Kapcia, „*The magnetic field induced phase separation in a model of a superconductor with local electron pairing*” — **referat**
 - (xxi) XXXVI International Conference of Theoretical Physics: Correlations and coherence at different scales, Ustroń, Polska, 13–18 września 2012r.:

- [31.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Interplay and competition between superconductivity and charge orderings in the model of a superconductor with pair hopping*” — **referat**
- (xxii) „Quantum in Complex Matter: Superconductivity, Magnetism and Ferroelectricity” — SUPERSTRIPES 2013, Ischia, Włochy, 27 maja – 1 czerwca 2013r.:
- [32.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*The magnetic field induced phase separation in a model of a superconductor with local electron pairing*” — **referat**
- (xxiii) 3rd Summer Symposium on Nanomaterials and their application to Biology and Medicine, Poznań, Polska, 16–19 czerwca 2013r.:
33. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*The magnetic field induced phase separation in a model of a superconductor with extremely short coherence length*” — poster
- (xxiv) XLII Zjazd Fizyków Polskich, Poznań, Polska, 8-13 sierpnia 2013r.:
34. K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*Separacja faz w modelu nadprzewodnika z krótką długością koherencji indukowana polem magnetycznym*” — poster
- (xxv) XVI National Conference on Superconductivity and Strongly Correlated Systems: „Unconventional superconductivity and strongly correlated systems”, Zakopane, Polska, 7–12 października 2013r.:
- [35.] K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, „*The magnetic field induced phase separation in the zerobandwidth limit of the extended Hubbard model with pair hopping*” — **referat**
36. S. Murawski, K. Kapcia, S. Robaszkiewicz, G. Pawłowski, „*Phase diagram of two dimensional extended Hubbard model with intersite magnetic interactions, a Monte Carlo study*” — poster

OŚWIADCZENIE

Ja, niżej podpisany

Konrad Jerzy KAPCIA,

doktorant w Zakładzie Stanów Elektronowych Ciała Stałego Wydziału Fizyki
Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu

oświadczam, że przedkładaną rozprawę doktorską pt:

***„Uporządkowania elektronowe i ich separacje
w rozszerzonych modelach Hubbarda”***

napisałem samodzielnie. Oznacza to, że przy pisaniu rozprawy, poza niezbędnymi konsultacjami, nie korzystałem z pomocy innych osób, a w szczególności nie zlecałem opracowania rozprawy lub jej części innym osobom, ani nie odpisywałem tej rozprawy lub jej części od innych osób.

Oświadczam również, że egzemplarz rozprawy doktorskiej w formie wydruku komputerowego jest zgodny z egzemplarzem rozprawy doktorskiej w formie elektronicznej.

Jednocześnie przyjmuję do wiadomości, że gdyby powyższe oświadczenie okazało się nieprawdziwe, decyzja o nadaniu mi stopnia naukowego doktora zostanie cofnięta.

.....

Poznań, dnia 12 marca 2014r.

