

POLITECHNIKA WROCLAWSKA
INSTYTUT FIZYKI

Mateusz Krzyżosiak

Termodynamika złożonych układów nadprzewodzących

Praca doktorska przygotowana pod kierunkiem
dra hab. Ryszarda Gonczarka, prof. PWr

Wrocław 2005

*Serdecznie dziękuję Profesorowi Ryszardowi Gonczarkowi
za wszechstronną pomoc merytoryczną oraz życzliwość.*

Spis treści

1	Wstęp	4
2	Rozszerzony scenariusz Van Hove’a	8
2.1	Motywacja	8
2.2	Metoda transformacji konforemnej	10
2.2.1	Ortonormalizacja wektorów bazy przestrzeni odwrotnej	10
2.2.2	Uogólniona transformacja konforemna. Jądro gęstości stanów	12
2.3	Przykłady zastosowań formalizmu	16
2.3.1	Paraboliczna relacja dyspersyjna	16
2.3.2	Jednopasmowy model Hubbarda	17
2.4	Niekompatybilność standardowego scenariusza Van Hove’a	19
2.4.1	Równanie na szczelinę, temperatura krytyczna, skok ciepła właściwego, efekt izotopowy	19
2.4.2	Jednopasmowy model Hubbarda ze sparowaniem typu d oraz p	23
2.5	Podsumowanie	25
3	Klasyfikacja parametru porządku ze względu na elementy symetrii grupy C_{4v}	27
3.1	Model	27
3.2	Metoda kolejnych transformacji przestrzeni odwrotnej	30
3.2.1	Pierwsza transformacja	30
3.2.2	Druga transformacja	31
3.2.3	Trzecia transformacja	32
3.2.4	Jądro gęstości stanów	33

3.3	Oddziaływanie parujące	34
3.3.1	Dopuszczalne postaci oddziaływania parującego	36
3.3.2	Parametr porządku i podstawowe równania	37
3.4	Podsumowanie	40
4	Pewne uniwersalne relacje pomiędzy szczeliną a funkcjami termodynamicznymi	41
4.1	Równanie na szczelinę	41
4.2	Szczelina energetyczna jako funkcja parametru sprzężenia	45
4.3	Uniwersalne relacje	47
4.4	Rekonstrukcja szczeliny energetycznej	50
4.5	Wartość krytyczna indukcji magnetycznej	51
4.6	Uwaga o przypadku McMillana	51
4.7	Zastosowanie relacji do nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego	52
4.8	Podsumowanie	54
5	Osobliwa ciecz Fermiego	55
5.1	Wprowadzenie	55
5.2	Hamiltonian	56
5.3	Metoda Bogolubowa	58
5.4	Suma statystyczna	59
5.4.1	Faza normalna	62
5.4.2	Faza nadprzewodząca	62
5.5	Termodynamika	63
5.5.1	Faza normalna	64
5.5.2	Faza nadprzewodząca	64
5.6	Rezultaty dla osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s .	65
5.6.1	Faza normalna	66
5.6.2	Faza nadprzewodząca	66
5.6.3	Wyniki numeryczne i dyskusja	69
5.7	Odpowiedź na pole magnetyczne	76
5.7.1	Podatność spinowa	78
5.7.2	Londonowska głębokość wnikania	82
5.7.3	Pole krytyczne	85
5.7.4	Prąd krytyczny	86

5.8 Podsumowanie	88
6 Podsumowanie	91
A Harmoniki fourierowskie jako funkcje bazowe reprezentacji nie- przywiedlnych grupy C_{4v}	94
A.1 Klasyfikacja harmonik fourierowskich	94
A.2 Własności symetrii komponentów oddziaływania parującego . .	98
B Dominujące typy zderzeń binarnych cząstek o pędach leżących w pobliżu powierzchni Fermiego	99
C Niestabilności Landaua–Pomeranczuka	102
Bibliografia	104

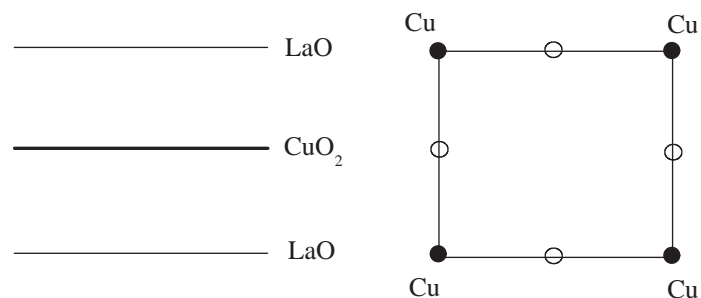
Rozdział 1

Wstęp

Odkrycie nadprzewodnictwa w LaBaCuO (LBCO) dokonane przez Bednorza i Müllera w roku 1986 stanowiło przełom w badaniach nad tym zjawiskiem. Wydarzenie to zapoczątkowało okres intensywnej pracy zmierzającej do uzyskania związków o jak najwyższych temperaturach krytycznych, które pozwoliłyby na wykorzystanie ich olbrzymiego potencjału aplikacyjnego. Wkrótce, wykorzystując efekty związane z ciśnieniem, początkową wartość temperatury krytycznej w LBCO (35 K) podniesiono do 50 K, a w roku 1987 nadprzewodnictwo zaobserwowano w związku $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ w temperaturze 90 K, a więc powyżej temperatury ciekłego azotu. Modyfikując strukturę krystaliczną oraz wykorzystując efekty związane z ciśnieniem otrzymano później nadprzewodniki o temperaturach krytycznych rzędu 160 K [1].

Większość nadprzewodników wysokotemperaturowych zawiera płaszczyzny miedziowo-tlenowe, w których każdy atom miedzi otoczony jest czterema atomami tlenu tworząc strukturę o symetrii grupy punktowej C_{4v} . Płaszczyzny te oddzielone są od siebie tlenowymi warstwami nieprzewodzącymi (por. Rysunek 1.1). W fazie normalnej przewodnictwo elektryczne w kierunkach równoległych do płaszczyzn miedziowo-tlenowych jest znacznie większe niż w kierunku do nich prostopadłym. Wartość temperatury krytycznej zmienia się znacznie w zależności od składu związku, ale jest generalnie tym wyższa im więcej płaszczyzn miedziowo-tlenowych zawartych jest w komórce elementarnej, co czyni je zasadniczym elementem struktury nadprzewodników wysokotemperaturowych.

Odkrycie nadprzewodników wysokotemperaturowych oraz intensywne badania eksperymentalne ich własności i budowy stanowiły impuls dla dynamicznego

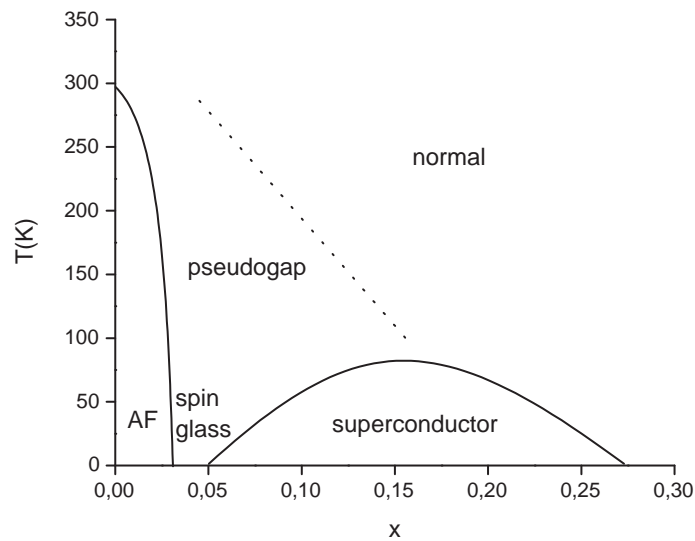


Rysunek 1.1: Schemat struktury krystalicznej $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$. Lewa część rysunku: struktura warstw wzdłuż osi c ; prawa część: struktura płaszczyzny miedziowo-tlenowej [1].

rozwoju teorii stawiających sobie za cel opis zjawiska oraz jego mechanizmów. Zaproponowano szereg podejść począwszy od modyfikacji teorii Bardeena, Coopera i Schrieffera (BCS) poprzez modele fluktuacji spinowych, teorię rezonującego wiązania walencyjnego (RVB) aż do koncepcji wstęg (*stripes*) [1]. Wśród nich istotne miejsce zajmują podejścia oparte na scenariuszu Van Hove'a, w ramach którego możliwa jest analiza własności termodynamicznych nadprzewodników wysokotemperaturowych w oparciu o efektywny hamiltonian z oddziaływaniem w kanale parującym rozpatrywanym w ramach teorii BCS [2]. Scenariusz Van Hove'a, dotyczący zakresu dużych koncentracji nośników ładunku w tzw. reżimie naddomieszkowania, wiąże się z uwzględnieniem osobliwości w postaci funkcji gęstości stanów kwazicząstek, której obecność implikuje wysokie wartości temperatury krytycznej.

Odkrycie dokonane przez Bednorza i Müllera rozpoczęło również nowy etap w dziedzinie badań cieczy kwantowych [3, 4]. Na Rysunku 1.2 przedstawiono schematyczny diagram fazowy temperatura–koncentracja domieszek dla nadprzewodnika wysokotemperaturowego, np. $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO). Z diagramu tego wynika, że materiał niedomieszkowany jest antyferromagnetycznym izolatorem. Dla koncentracji domieszek na poziomie kilku procent układ albo przechodzi do fazy nieuporządkowanej o charakterze szkła spinowego zanim osiągnie stan nadprzewodzący (jak w przypadku LSCO), albo bezpośrednio przechodzi do fazy nadprzewodzącej, jak to ma miejsce dla YBCO. Faza nadprzewodząca może być realizowana gdy ułamek molowy domieszek osiągnie wartość ok. 0,05. Następnie, wraz ze wzrostem koncentracji domieszek, temperatura krytyczna

rośnie aż do momentu osiągnięcia optymalnego poziomu domieszkowania x_{opt} , odpowiadającego maksymalnej temperaturze krytycznej T_c . Dalsze wprowadzanie domieszek powoduje spadek temperatury krytycznej, a przy ok. 27% koncentracji domieszek nadprzewodnictwo znika. Optymalny poziom domieszkowania dzieli płaszczyznę diagramu fazowego na dwa obszary: poddomieszkowania ($x < x_{\text{opt}}$) oraz naddomieszkowania ($x > x_{\text{opt}}$). Na diagramie fazowym nadprzewodników wysokotemperaturowych, w obszarze poddomieszkowania, poza stanem nadprzewodzącym występuje również stan z tzw. pseudoszczeliną. Według jednego z dyskutowanych scenariuszy w temperaturze T^* , oddzielającej fazę normalną od fazy z pseudoszczeliną, pojawiają się wirtualne wzbudzenia do stanu związanego par Coopera a przejście do fazy nadprzewodzącej odbywa się dopiero w rezultacie dalszego obniżenia temperatury do wartości temperatury krytycznej T_c .



Rysunek 1.2: Diagram fazowy nadprzewodników zawierających płaszczyzny miedziowo-tlenowe. AF oznacza fazę antyferromagnetycznego izolatora, natomiast x — poziom domieszkowania (ułamek molowy domieszek). Linia kropkowana oznacza linię przejścia (*crossover line*) pomiędzy normalną fazą metaliczną a fazą pseudoszczeliny [1].

Ponadto w nadprzewodnikach poddomieszkowanych średnia klasyczna odległość między nośnikami ładunku jest większa od długości koherencji, co może wskazywać na możliwość unifikacji przejścia do stanu nadprzewodzącego z jednej

strony oraz kondensacji Bosego-Einsteina par Coopera z drugiej. W przypadku konwencjonalnych nadprzewodników metalicznych, gdy długość koherencji jest znacznie większa od średniej odległości między elektronami, obszar przestrzeni zajmowany przez pojedynczą parę Coopera jest jednocześnie przenikany przez wiele innych. Dlatego wówczas stanu nadprzewodzącego nie można uważać za kondensat Bosego-Einsteina par Coopera jako bozonów [3].

W niniejszej pracy przedstawiono niektóre aspekty zjawiska nadprzewodnictwa w złożonych układach jakimi są nadprzewodniki wysokotemperaturowe. Zasadniczą część rozprawy rozpoczyna rozdział drugi, w którym rozwinięto metodę tzw. rozszerzonego scenariusza Van Hove'a dla naddomieszkowanych układów nadprzewodzących z anizotropowym parametrem porządku oraz dowolną różniczkowalną relacją dyspersyjną. Rozdział trzeci stanowi ilustrację zastosowania metody rozszerzonego scenariusza Van Hove'a do identyfikacji typu symetrii sparowania z uwzględnieniem własności symetrii grupy punktowej C_{4v} . W rozdziale czwartym przedstawiono pewne uniwersalne relacje pomiędzy szczyliną energetyczną a funkcjami termodynamicznymi, ciepłem właściwym oraz krytycznym polem magnetycznym dla szerokiej klasy układów nadprzewodzących, uwzględniając również efekty silnego sprzężenia. Rozdział piąty zawiera wyniki badań modelu osobliwej cieczy Fermiego obejmujących termodynamikę układu (w szczególności charakter przejścia fazowego pomiędzy fazą normalną a fazą nadprzewodzącą) oraz jego odpowiedź na zewnętrzne pole magnetyczne. Rozprawę kończy rozdział zawierający podsumowanie zaprezentowanych rezultatów.

Rozdział 2

Rozszerzony scenariusz Van Hove'a

2.1 Motywacja

W wielu opisach teoretycznych zjawiska nadprzewodnictwa w materiałach nadprzewodzących nowej generacji uważa się, że wzrost temperatury krytycznej może być wyjaśniony w ramach scenariusza Van Hove'a z konwencjonalnymi mechanizmami parującymi, takimi jak oddziaływanie elektron-fonon i fluktuacje spinowe [5–22].

W przedstawionych w dalszej części rozdziału rozważaniach zakładamy, że mechanizm nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w materiałach zawierających płaszczyzny miedziowo-tlenowe oparty jest na zjawisku tworzenia par Coopera fermionów (elektronów lub dziur) poprzez wymianę wirtualnych bozonów (fononów, magnonów, plazmonów lub ekscytonów). Ponadto równanie na szczelinę energetyczną, które może być uzyskane w formalizmie matsubarowskich funkcji Greena, ma następującą ogólną postać

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{\Delta_{\mathbf{p}'}}{E_{\mathbf{p}'}} \operatorname{tgh} \frac{E_{\mathbf{p}'}}{2T}, \quad (2.1)$$

gdzie $V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ jest efektywnym potencjałem parującym, $E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\xi_{\mathbf{p}}^2 + \Delta_{\mathbf{p}}^2}$, $\xi_{\mathbf{p}} = \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu$ oraz energia cząstki $\epsilon_{\mathbf{p}}$ i potencjał chemiczny μ mierzone są od poziomu Fermiego. Równanie to uzupełnione jest innym równaniem

$$2n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{E_{\mathbf{p}}} \operatorname{tgh} \frac{E_{\mathbf{p}}}{2T} \right), \quad (2.2)$$

które pozwala określić potencjał chemiczny fazy nadprzewodzącej w zależności od temperatury przy ustalonym wypełnieniu pasma. Postać potencjału parującego $V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ determinuje postać parametru porządku (szczeliny energetycznej $\Delta_{\mathbf{p}}$), który w ogólności jest wielkością anizotropową, a jego struktura określa postać równania (2.1) także w granicy $T \rightarrow T_c$, w przeciwieństwie do przypadku czysto izotropowego sparowania typu s .

W większości rozważań wykorzystujących scenariusz Van Hove'a sumowanie po wektorze pędu \mathbf{p} z dwuwymiarowej przestrzeni zastępuje się przez całkowanie po energii ξ zgodnie z relacją $\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \dots = \int d\xi \nu(\xi) \dots$. Gęstość stanów $\nu(\xi)$ wyraża się wzorem [18–20]

$$\nu(\xi) = \frac{a^2}{4\pi^2} \int_{\xi=\xi_{\mathbf{p}}} \frac{df}{|\nabla_{\mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}}|}, \quad (2.3)$$

gdzie a oznacza stałą sieciową, df jest elementem powierzchni Fermiego. Osobliwości Van Hove'a w funkcji gęstości stanów odpowiadają płaskim obszarom relacji dyspersyjnej $\xi_{\mathbf{p}}$, dla których $\nabla_{\mathbf{p}} \xi_{\mathbf{p}} = 0$. Wyznaczone lub wprost zapostulowane postaci funkcji gęstości stanów wykorzystywane w scenariuszu Van Hove'a charakteryzują się występowaniem osobliwości bądź też wąskiego maksimum zlokalizowanego na poziomie Fermiego lub w jego pobliżu. Obecność osobliwości w funkcji gęstości stanów implikuje istotny wzrost temperatury krytycznej T_c w nadprzewodnikach z płaszczyznami miedziowo-tlenowymi [11, 12, 15, 17, 18, 20–30]. Zauważmy jednak, że w takim podejściu liczba stopni swobody cząstki w dwuwymiarowej przestrzeni odwrotnej (p_1, p_2) zostaje zredukowana do jednego, tj. energii cząstki ξ . Ta słabość standardowego scenariusza Van Hove'a manifestuje się w przypadku układów nadprzewodzących z anizotropowym parametrem porządku. Dlatego, w rozważaniach dotyczących nadprzewodników ze sparowaniem o symetrii np. typu p lub d , należy zachować oprócz współrzędnej ξ także i drugą współrzędną, np. kąt biegunowy φ . Uwaga ta dotyczy również przypadku silnego sprzężenia [30].

W celu ominięcia tej trudności dla nadprzewodników z warstwami płaszczyzn miedziowo-tlenowych i parametrem porządku typu d zaproponowano [31] zastąpienie funkcji gęstości stanów $\nu(\xi)$ funkcją $\tilde{\nu}(\xi, \theta)$, będącą rozwinięciem funkcji gęstości stanów w szereg Fouriera względem kąta θ zawartego pomiędzy jedną z głównych osi krystalograficznych leżącą w płaszczyźnie warstw a wektorem pędu cząstki leżącym na powierzchni Fermiego. Dla uproszczenia do

rachunków włączono jedynie dwa pierwsze wyrazy rozwinięcia, które spełniały warunki symetrii grupy C_{4v} płaszczyzn miedziowo-tlenowych. W celu znalezienia współczynników rozwinięcia wykorzystano gęstość stanów na kwazijedno- i kwazidwuwymiarowych częściach zamkniętej i w przybliżeniu cylindrycznej powierzchni Fermiego. Jednakże takie podejście wydaje się nie być spójnym, ponieważ funkcja $\tilde{\nu}(\xi, \theta)$, uśredniona po kącie θ , powinna redukować się do funkcji gęstości stanów $\nu(\xi)$ w przypadku zastosowania tej metody do zagadnienia z czystym sparowaniem typu s .

W niniejszym rozdziale prezentujemy formalizm oparty na metodzie transformacji konforemnej przestrzeni pędów, który może być traktowany jako rozszerzenie standardowego scenariusza Van Hove'a z zachowaniem rzeczywistej liczby stopni swobody. Formalizm ten pozwala na standaryzację modeli nadprzewodnictwa oraz zaznaczenie roli relacji dyspersyjnej w klasyfikacji układów nadprzewodzących. W sposób bezpośredni pozwala również na wykazanie, że podejścia ograniczone do jednego stopnia swobody nie mogą być skutecznie zastosowane do układów nadprzewodzących z anizotropowym parametrem porządku.

2.2 Metoda transformacji konforemnej

Przedmiotem rozważań jest efektywny jednopasmowy model z jednocząstkową relacją dyspersyjną $\xi = \xi(p_1, p_2)$, będącą różniczkowalną funkcją wektora pędu $\mathbf{p} = p_1 \mathbf{e}_1 + p_2 \mathbf{e}_2$. Ponadto zakładamy, że rozważana relacja dyspersyjna została zrenormalizowana za pomocą operatora masowego i uwzględnia, w sposób samouzgodniony, dwucząstkowe oddziaływania występujące w kanale cząstka-dziura. Wersory $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ tworzą bazę dwuwymiarowej przestrzeni pędów. Powierzchnia (linia) Fermiego określona jest równaniem $\xi(\mathbf{p}) - \mu(0) = 0$, gdzie $\mu(0)$ oznacza potencjał chemiczny w $T = 0$.

2.2.1 Ortonormalizacja wektorów bazy przestrzeni odwrotnej

Dla anizotropowego dwuwymiarowego układu z siecią odwrotną o symetrii równoległoboku baza $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ nie jest ortonormalna. Wykonując ortonormalizują-

cą transformację liniową \mathbf{D} , reprezentowaną przez macierz 2×2 , zachowującą topologię przestrzeni odwrotnej, przestrzeń pędów może być przekształcona w taki sposób, że nowa przestrzeń z ortonormalną bazą $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$, gdzie $\mathbf{f}_i = \mathbf{D}_{i1}\mathbf{e}_1 + \mathbf{D}_{i2}\mathbf{e}_2$, ma symetrię kwadratu. W przekształconej przestrzeni wektor $\mathbf{p} = p_1\mathbf{e}_1 + p_2\mathbf{e}_2$ zostaje zastąpiony równoważnym wektorem $\mathbf{p}' = p_1\mathbf{f}_1 + p_2\mathbf{f}_2$. Ponieważ $\mathbf{p}' = p'_1\mathbf{e}_1 + p'_2\mathbf{e}_2$, wprowadzone składowe spełniają relację $p_i = \mathbf{D}_{1i}^{-1}p'_1 + \mathbf{D}_{2i}^{-1}p'_2$, gdzie \mathbf{D}^{-1} oznacza macierz odwrotną. Zatem relacja dyspersyjna, jako funkcja składowych wektora pędu p'_1, p'_2 określonych w układzie ortonormalnym, przyjmuje postać

$$\xi = \xi \left(\mathbf{D}_{11}^{-1}p'_1 + \mathbf{D}_{21}^{-1}p'_2, \mathbf{D}_{12}^{-1}p'_1 + \mathbf{D}_{22}^{-1}p'_2 \right).$$

W dalszych rozważaniach zakładamy, że dla badanych układów nadprzewodzących potencjał chemiczny w sposób pomijalny zależy od temperatury, zatem energia cząstki ξ mierzona jest od poziomu Fermiego. Kładąc $\xi = \text{const}$ znaleźć można linie izoenergetyczne (w szczególności, dla $\xi = 0$, otrzymujemy linię Fermiego). Kształt tych linii może być w ogólności dowolny, chociaż powinien zawsze odzwierciedlać symetrię układu. Z drugiej strony należy pamiętać, że po wykonaniu transformacji przestrzeni odwrotnej, sumowanie lub całkowanie w nowym układzie współrzędnych wymaga włączenia jakobianu przekształcenia \mathbf{D} w postaci

$$J(\mathbf{p}') = \left| \frac{\partial p_i}{\partial p'_j} \right|,$$

który w tym przypadku ma wartość stałą $J(\mathbf{p}') = \det(\mathbf{D}^{-1})$. Rozważając układ anizotropowy, w którym wektory bazy $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ nie są ortonormalne i nie są tej samej długości, bez straty ogólności można założyć, że $|\mathbf{e}_1| = 1$. Wówczas przekształcenie ortonormalizujące opisywane jest macierzą

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\cot \alpha & \frac{1}{|\mathbf{e}_2| \sin \alpha} \end{bmatrix}, \quad (2.4)$$

gdzie α jest kątem pomiędzy wektorami $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$, a jakobian przekształcenia $J(p'_1, p'_2) = |\mathbf{e}_2| \sin \alpha$. Wykonawszy przekształcenie (2.4) dysponujemy układem współrzędnych z ortonormalną bazą $\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2$.

Na przykład, jeżeli w początkowym układzie relacja dyspersyjna jest paraboliczna, tj.

$$\xi(p_1, p_2) = \frac{1}{2m^*} (p_1^2 + p_2^2) - \mu,$$

gdzie m^* oznacza masę efektywną, a μ potencjał chemiczny, to w przekształconym układzie współrzędnych

$$\xi(p'_1, p'_2) = \frac{1}{2m^*} \left[(p'_1)^2 + 2p'_1 p'_2 |\mathbf{e}_2| \cos \alpha + (p'_2)^2 |\mathbf{e}_2|^2 \right] - \mu.$$

Po obrocie układu współrzędnych o kąt $\beta = \frac{1}{2} \arctg \left(\frac{2|\mathbf{e}_2| \cos \alpha}{1 - |\mathbf{e}_2|^2} \right)$ relacja dyspersyjna upraszcza się do postaci

$$\xi(p'_1, p'_2) = \frac{1}{2m_1} (p'_1)^2 + \frac{1}{2m_2} (p'_2)^2 - \mu, \quad (2.5)$$

gdzie m_1 oraz m_2 są pewnymi parametrami o wymiarze masy. Jakobian obrotu układu współrzędnych jest zawsze równy 1. Zatem w nowym kartezjańskim układzie współrzędnych linie stałej energii są koncentrycznymi elipsami. Podniesienie symetrii układu współrzędnych implikuje zatem zmianę postaci zależności dyspersyjnej, która staje się bardziej skomplikowana. Właściwości symetrii układu współrzędnych, związane z symetrią sieci krystalicznej, mogą być więc wkomponowane w postać relacji dyspersyjnej.

2.2.2 Uogólniona transformacja konforemna. Jądro gęstości stanów

Kolejnym, zasadniczym krokiem formalizmu jest konstrukcja nowego ortonormalnego układu współrzędnych, w którym ξ jest jedną ze współrzędnych. Ponieważ wektor $\nabla \xi$ jest prostopadły do linii stałej energii, jego współrzędne spełniają następujący warunek

$$\frac{dp_1}{\partial \xi / \partial p_1} = \frac{dp_2}{\partial \xi / \partial p_2}. \quad (2.6)$$

Z kolei, na mocy twierdzenia Picarda, równanie różniczkowe

$$\frac{dp_1}{dp_2} = \frac{\partial \xi / \partial p_1}{\partial \xi / \partial p_2},$$

ma zawsze rozwiązanie, którym jest jednoparametrowa rodzina krzywych całkowych $\phi = \phi(p_1, p_2)$, a linie $\phi(p_1, p_2) = C$, gdzie C jest stałą, nazywane są izoklinami. Definiując różniczkową formę Pfaffa

$$D \Xi(p_1, p_2) = -\frac{\partial \xi}{\partial p_2} dp_1 + \frac{\partial \xi}{\partial p_1} dp_2,$$

równanie (2.6) może być zapisane jako równanie Pfaffa $D\Xi(p_1, p_2) = 0$. Dla równania Pfaffa dwóch niezależnych zmiennych zawsze istnieje czynnik całkujący $\gamma = \gamma(p_1, p_2)$, taki że wyrażenie

$$\gamma(p_1, p_2)D\Xi(p_1, p_2) = d\phi(p_1, p_2),$$

tzn. jest różniczką zupełną. Zatem

$$-\gamma(p_1, p_2)\frac{\partial\xi}{\partial p_2} = \frac{\partial\phi}{\partial p_1} \quad \text{oraz} \quad \gamma(p_1, p_2)\frac{\partial\xi}{\partial p_1} = \frac{\partial\phi}{\partial p_2}, \quad (2.7)$$

i stąd gradienty $\nabla\xi$ oraz $\nabla\phi$, definiujące kierunki prostopadłe odpowiednio do linii izoenergetycznych oraz izoklin, spełniają warunek

$$\nabla\xi \cdot \nabla\phi = \frac{\partial\xi}{\partial p_1} \frac{\partial\phi}{\partial p_1} + \frac{\partial\xi}{\partial p_2} \frac{\partial\phi}{\partial p_2} = 0,$$

który zapewnia, że wprowadzony krzywoliniowy układ współrzędnych (ξ, ϕ) jest ortogonalny. W ogólności współrzędna ξ , która jest energią kwazicząstki, może się zmieniać w zakresie określonym przez szerokość pasma przewodnictwa, natomiast zakres zmienności współrzędnej ϕ może być określony w sposób dowolny, w szczególności może być również nieskończony.

W celu uproszczenia formalizmu można, wykorzystując funkcje trygonometryczne, dokonać formalnej zamiany zmiennej ϕ na współrzędną kątową φ standardowego układu współrzędnych biegunowych. Wówczas zakres zmienności nowo wprowadzonej zmiennej staje się ograniczony. Ponadto dla każdej różniczkowalnej funkcji $\varphi(\phi)$ zachodzi związek

$$\nabla\varphi = \frac{d\varphi}{d\phi} \nabla\phi,$$

który zapewnia, że układ współrzędnych (ξ, φ) jest również ortogonalny, ponieważ $\nabla\xi \cdot \nabla\varphi = 0$.

Ponadto, wykorzystując symetrię układu, która jest bezpośrednio odzwierciedlona w postaci relacji dyspersyjnej, można ograniczyć rozważania do reprezentatywnego obszaru przestrzeni (p_1, p_2) i ustalić zakres zmienności współrzędnej φ tak, aby odpowiadał pełnemu obrotowi, tj. $0 \leq \varphi < 2\pi$. Wówczas lokalnie, w wydzielonych obszarach przestrzeni (p_1, p_2) , współrzędne p_1 oraz p_2 wyrazić można w funkcji współrzędnych ξ oraz φ , ponieważ obie funkcje $\xi(p_1, p_2)$ oraz $\varphi(p_1, p_2)$ są różniczkowalne. Jednakże, w zaprezentowanym podejściu, formuły

dla p_1 oraz p_2 mogą być uzyskane analitycznie jedynie dla kilku szczególnych postaci relacji dyspersyjnej, choć w sposób numeryczny mogą być znalezione zawsze.

W teorii funkcji analitycznych standardowa transformacja konforemna zadana jest przez jednowartościową funkcję analityczną o wartościach zespolonych, której części rzeczywista i zespolona definiują odpowiednio linie izoenergetyczne oraz izokliny, spełniając jednocześnie równania Cauchy-Riemanna. Ponieważ w przedstawionej metodzie nie żąda się, aby

$$\frac{\partial \xi}{\partial p_1} = \frac{\partial \phi}{\partial p_2} \quad \text{oraz} \quad \frac{\partial \xi}{\partial p_2} = -\frac{\partial \phi}{\partial p_1},$$

a równania Cauchy-Riemanna spełnione są jedynie w szczególnym przypadku, gdy czynnik całkujący $\gamma(p_1, p_2) \equiv 1$, stanowi ona uogólnienie standardowej transformacji konforemnej. W ramach przedstawionego formalizmu funkcja $\phi(p_1, p_2)$ nie jest zadana i musi być znaleziona dla ustalonej postaci relacji dyspersyjnej $\xi(p_1, p_2)$, tak aby spełnione były równania (2.7). Wyrażenia $\gamma(p_1, p_2)$ i konsekwentnie $\phi(p_1, p_2)$ są więc określone z dokładnością do stałej multiplikatywnej.

Przedstawiona metoda pozwala zatem na przeniesienie rozważań z przestrzeni odwrotnej z dwuwymiarowym kartezjańskim układem współrzędnych (p_1, p_2) do dwuwymiarowego ortogonalnego układu współrzędnych krzywoliniowych (ξ, ϕ) , wykorzystując zadaną relację dyspersyjną $\xi = \xi(p_1, p_2)$ oraz zależność $\phi = \phi(p_1, p_2)$, która musi być znaleziona. Uogólniona transformacja konforemna wprowadza lokalne zmiany gęstości stanów w przestrzeni (ξ, ϕ) , które scharakteryzowane są przez jakobian

$$J(\xi, \phi) = \begin{vmatrix} \frac{\partial p_1}{\partial \xi} & \frac{\partial p_1}{\partial \phi} \\ \frac{\partial p_2}{\partial \xi} & \frac{\partial p_2}{\partial \phi} \end{vmatrix}. \quad (2.8)$$

W ogólności jakobian musi być wyznaczany lokalnie, co zapewni jego jednowartościowość.

Zastępując więc sumowanie po kwantowomechanicznych stanach w przestrzeni pędów całkowaniem po energii cząstki, należy również uwzględnić całkowanie po zmiennej ϕ

$$\sum_{\mathbf{p}} \dots = \frac{2}{(2\pi)^2} \int d\xi \int d\phi J(\xi, \phi) \dots, \quad (2.9)$$

obejmujące cały zakres jej zmienności. Aby sprowadzić formułę (2.9) do postaci wykorzystywanej w standardowym scenariuszu Van Hove'a definiujemy średnią gęstość stanów w przestrzeni (ξ, ϕ) dla ustalonej wartości energii jako $\nu(\xi) = \frac{2}{(2\pi)^2} \int d\phi J(\xi, \phi)$. Wówczas $\nu(\xi)$ jest dokładnie tą gęstością stanów, którą określa wzór (2.3). W przypadku, gdy zasadnicze wyrażenie podcałkowe (oznaczone jako „...”) w równaniu (2.9) nie zależy od zmiennej ϕ , prawa strona tego równania sprowadza się do postaci postulowanej w standardowym scenariuszu Van Hove'a oraz

$$\frac{2}{(2\pi)^2} \int d\xi \int d\phi J(\xi, \phi) \dots = \int d\xi \nu(\xi) \dots$$

Jednak w przypadku, gdy wyrażenie podcałkowe jest funkcją zarówno ξ jak i ϕ , np. dla nadprzewodników ze sparowaniem typu p lub d , należy wziąć pod uwagę, że w ogólności

$$\int d\phi \mathcal{K}(\xi, \phi) \dots \neq \frac{1}{\int d\phi'} \int d\phi' \mathcal{K}(\xi, \phi') \int d\phi \dots, \quad (2.10)$$

gdzie

$$\mathcal{K}(\xi, \phi) = \frac{2}{(2\pi)^2} J(\xi, \phi) \quad (2.11)$$

jest jądrem gęstości stanów, które opisuje efekt lokalnej deformacji lub modyfikacji stanów kwantowomechanicznych w przestrzeni (ξ, ϕ) będący skutkiem wykonanych transformacji przestrzeni odwrotnej. Ponadto, całkowanie po prawej stronie nierówności (2.10) zależy od wyboru zmiennej ϕ . Dlatego, jak wspomniano już wcześniej, w niektórych podejściach jako zmienną tę wybiera się współrzędną kątową $0 \leq \varphi < 2\pi$ układu współrzędnych biegunowych. Taki wybór zapewnia, że

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \mathcal{K}(\xi, \varphi) \dots = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \nu(\xi) \dots \quad (2.12)$$

również jedynie wtedy, gdy wyrażenie podcałkowe nie zależy od zmiennej φ a gęstość stanów zdefiniowana jest jako wartość średnia funkcji jądra gęstości stanów dla ustalonej wartości energii ξ

$$\nu(\xi) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \mathcal{K}(\xi, \varphi), \quad (2.13)$$

co dowodzi faktu, że standardowy scenariusz Van Hove'a nie może być zastosowany do nadprzewodników ze sparowaniem innym niż typu s .

2.3 Przykłady zastosowań formalizmu

2.3.1 Paraboliczna relacja dyspersyjna

Opisana w podrozdziale 2.2.1 metoda pozwala na transformację parabolicznego spektrum energii z nieortogonalnej przestrzeni pędów do przestrzeni o symetrii kwadratu. Zgodnie z równaniem (2.5), relację dyspersyjną można zapisać w postaci

$$\xi(k_1, k_2) + \mu = \mu^* (k_1^2 + \varrho k_2^2),$$

gdzie $k_i = ap_i$, $\mu^* = (2m_1 a^2)^{-1}$, $\varrho = m_1/m_2$ oraz a jest stałą sieci. Rozwiązanie równania Pfaffa (2.6) prowadzi do związku $k_2 k_1^{-\varrho} = \phi$. Zgodnie z symetrią problemu, która odpowiada grupie C_{2v} , rozważania można ograniczyć do ćwiartki $k_1, k_2 \geq 0$, co implikuje $k_2 k_1^{-\varrho} \geq 0$ dla dowolnych k_1, k_2 oraz $\varrho \neq 0$, tak że zmienną ϕ można przyjąć jako $\phi = \operatorname{tg} \varphi$, gdzie $0 \leq \varphi \leq \pi/2$.

Ponieważ, w ogólności, rozwiązanie problemu dla dowolnego ϱ nie może być znalezione w sposób analityczny, rozważmy przypadki $\varrho = 1$ oraz $\varrho = \frac{1}{2}$. Dla $\varrho = 1$ mamy

$$k_1 = \sqrt{\frac{\xi + \mu}{\mu^*}} \cos \varphi, \quad k_2 = \sqrt{\frac{\xi + \mu}{\mu^*}} \sin \varphi$$

oraz $\mathcal{K}(\xi, \varphi) = m^*/2\pi^2$, $\nu(\xi) = m^*/\pi$, gdzie $m_1 = m_2 = m^*$. Zatem $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ oraz $\nu(\xi)$ są stałe i postać funkcji $\nu(\xi)$ jest taka sama jak w innych podejściach.

W przypadku $\varrho = \frac{1}{2}$ otrzymujemy

$$k_1 = \frac{1}{4} \left(\sqrt{\operatorname{tg}^4 \varphi + 16 \frac{\xi + \mu}{\mu^*}} - \operatorname{tg}^2 \varphi \right),$$

$$k_2 = \frac{1}{2} \operatorname{tg} \varphi \left(\sqrt{\operatorname{tg}^4 \varphi + 16 \frac{\xi + \mu}{\mu^*}} - \operatorname{tg}^2 \varphi \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Znajdując jacobian (2.8) przekształcenia otrzymujemy funkcję jądra gęstości stanów w postaci

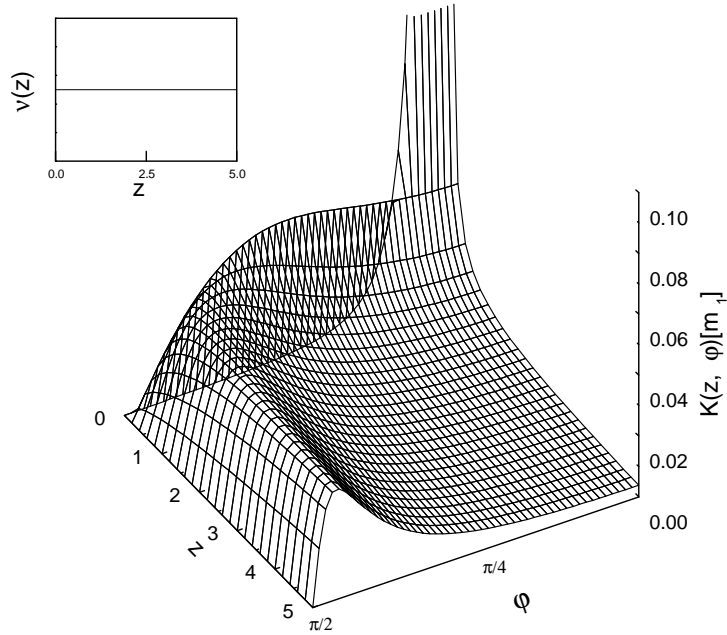
$$\mathcal{K}(\xi, \varphi) = \frac{m_1}{\pi^2} \frac{\left(\sqrt{\operatorname{tg}^4 \varphi + 16 \frac{\xi + \mu}{\mu^*}} - \operatorname{tg}^2 \varphi \right)^{\frac{1}{2}}}{\sqrt{\operatorname{tg}^4 \varphi + 16 \frac{\xi + \mu}{\mu^*}}} (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi). \quad (2.14)$$

$\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ jest skomplikowaną funkcją zmiennych ξ oraz φ (por. Rysunek 2.1), przyjmującą na granicach rozważanego obszaru wartości $\mathcal{K}(\xi, 0) = \frac{m_1}{2\pi^2} \left(\frac{\mu^*}{\xi + \mu} \right)^{\frac{1}{4}}$

oraz $\mathcal{K}(\xi, \frac{\pi}{2}) = 0$. Odpowiadająca jądro (2.14) funkcja gęstości stanów

$$\nu(\xi) = \frac{1}{\pi} \sqrt{m_1 m_2}$$

jest niezależna od ξ (por. Rysunek 2.1, wstawka).



Rysunek 2.1: Jądro gęstości stanów $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ oraz funkcja gęstości stanów $\nu(\xi)$ (wstawka) dla przestrzeni odwrotnej o symetrii równoległoboku i parabolicznego spektrum energetycznego (oznaczenie $z = (\xi + \mu)/\mu^*$) [32].

2.3.2 Jednopasmowy model Hubbarda

Ponieważ nośniki w pasmie przewodnictwa w naprzewodnikach wysokotemperaturowych zawierających płaszczyzny miedziowo-tlenowe mogą być opisane w ramach modelu ciasnego wiązania [14, 15], relacja dyspersyjna dla płaskiej sieci kwadratowej [16] może być przyjęta w postaci

$$\xi(p_1, p_2) = -2t_0 [\cos(p_1 a) + \rho \cos(p_2 a)] - \mu,$$

uwzględniającej przeskok do najbliższych sąsiednich węzłów sieci. Wartość dodatniego parametru ρ pozwala na wprowadzenie asymetrii w wartościach całek

przeskoku, wynikającej np. z zaburzenia symetrii kwadratu w strukturze płaszczyzn miedziowo-tlenowych. Parametr obsadzenia μ ustala przesunięcie poziomu Fermiego w przypadku domieszkowania oraz niepołówkowego wypełnienia pasma i jest identyfikowany z potencjałem chemicznym [11, 12, 24]. Definiując, jak poprzednio, zmienne $k_i = ap_i$ znajdujemy rozwiązanie równania Pfaffa w postaci $\left(\operatorname{tg} \frac{k_2}{2}\right) \left(\operatorname{tg} \frac{k_1}{2}\right)^{-\rho} = \phi$. Metodami analitycznymi rozwiązanie problemu znaleźć można zaledwie dla kilku wartości parametru ρ , np. $\rho = 1$ oraz $\rho = \frac{1}{2}$. W celu ilustracji metody rozważmy przypadek $\rho = 1$. Po pewnych przekształceniach algebraicznych [33] otrzymujemy

$$k_i = 2 \operatorname{arc} \operatorname{tg} \left[\frac{z(1 + \phi^2) + \sqrt{(1 + \phi^2)^2 z^2 + 4\phi^2(4 - z^2)}}{2(2 - z)\phi^{2(2-i)}} \right]^{\frac{1}{2}},$$

gdzie $i = 1, 2$. Biorąc pod uwagę symetrię problemu odpowiadającą grupie C_{4v} , rozważania ograniczyć można do ćwiartki $k_1, k_2 \geq 0$. Wprowadzając oznaczenia $z = (\xi + \mu)/2t_0$, $\phi = \operatorname{tg} \varphi$, mamy $|z| \leq 2$ oraz $\phi \geq 0$, czyli $0 \leq \varphi < \pi/2$. Obliczając jacobian przekształcenia znajdujemy funkcję jądra gęstości stanów w postaci

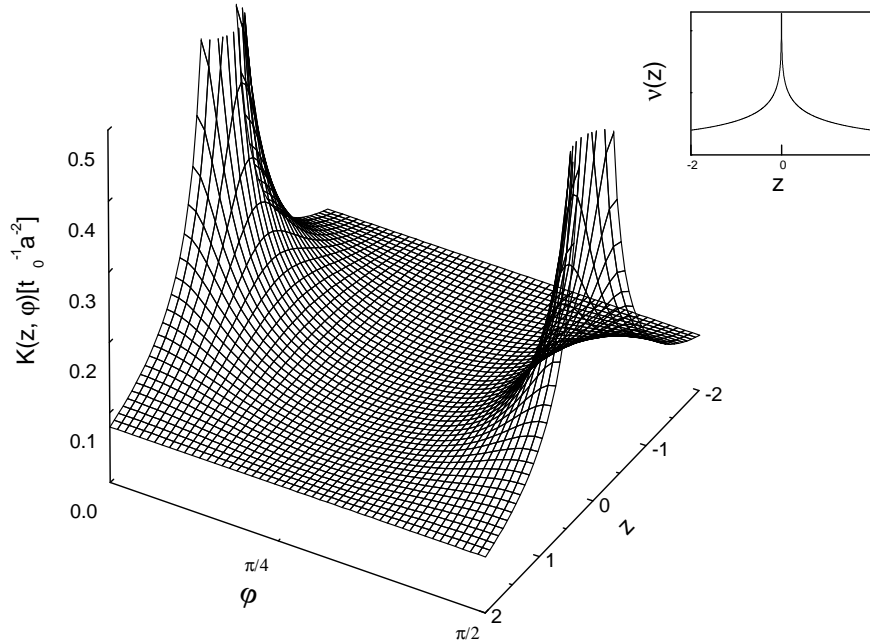
$$\mathcal{K}(\xi, \varphi) = \frac{1}{2\pi^2 t_0 a^2} \frac{1 + \operatorname{tg}^2 \varphi}{\sqrt{z^2(1 - \operatorname{tg}^2 \varphi)^2 + 16 \operatorname{tg}^2 \varphi}}, \quad (2.15)$$

spełniająca warunek $\mathcal{K}(\xi, \frac{\pi}{2} - \varphi) = \mathcal{K}(\xi, \varphi)$. Ponadto, gdy $\varphi \rightarrow \pi/2$, funkcja $\mathcal{K}(\xi, \varphi) \sim z^{-1}$ i ma osobliwość jedynie gdy $z \rightarrow 0$ (por. Rysunek 2.2). Osobliwość ta nie znika po wykonaniu uśrednienia ze względu na zmienną φ , a więc jest zawsze obecna w funkcji gęstości stanów $\nu(\xi)$ jako osobliwość Van Hove'a [11, 12, 17] (por. Rysunek 2.2, wstawka). Istotnie, całkowanie funkcji jądra gęstości stanów (2.15) po kącie φ prowadzi do

$$\nu(\xi) = \frac{2}{\pi^2 t_0 a^2} \frac{1}{\sqrt{8 - z^2 + 4\sqrt{4 - z^2}}} \mathbf{F} \left(\frac{\pi}{2}, \left(\frac{8\sqrt{4 - z^2}}{8 - z^2 + 4\sqrt{4 - z^2}} \right)^{\frac{1}{2}} \right), \quad (2.16)$$

gdzie $\mathbf{F}(\psi, \kappa)$ oznacza całkę eliptyczną pierwszego rodzaju [18, 33]. W granicy $\kappa \rightarrow 1$ rozwinięcie funkcji $\mathbf{F}(\psi, \kappa)$ w szereg prowadzi do znanego [17–20, 33] rezultatu

$$\nu(\xi) = \frac{1}{\pi^2 t_0 a^2} \ln \frac{16t_0}{|\xi + \mu|}.$$



Rysunek 2.2: Jądro gęstości stanów $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ oraz funkcja gęstości stanów $\nu(\xi)$ (wstawka) dla jednopasmowego modelu Hubbarda [32].

2.4 Niekompatybilność standardowego scenariusza Van Hove'a

2.4.1 Równanie na szczelinę, temperatura krytyczna, skok ciepła właściwego, efekt izotopowy

W niniejszym podrozdziale zostaną bezpośrednio wskazane różnice pomiędzy wynikami otrzymanymi w ramach standardowego scenariusza Van Hove'a oraz przedstawionej metody uogólnionej transformacji konforemnej. W równaniu na szczelinę (2.1) zakładamy, że efektywny potencjał parujący może być zapisany w sfaktoryzowanej postaci $V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} = f v(\mathbf{p}) v(\mathbf{p}')$, gdzie $v(\mathbf{p})$ jest parzystą funkcją wektora pędu dla antysymetrycznego (singletowego) sparowania oraz nieparzystą funkcją wektora pędu dla sparowania symetrycznego (trypletowego) [34]. Ponadto, podobnie jak poprzednio, zakładamy, że oddziaływania dwucząstkowe w kanale cząstka-dziura mogą być efektywnie sprowadzone do odpowiednich oddziaływań jednocząstkowych, a zatem mogą być uwzględnione

w równaniu na szczelinę i innych równaniach poprzez relację dyspersyjną $\xi_{\mathbf{p}}$ albo mogą być włączone do parującego kanału oddziaływania. Po wykonaniu uogólnionej transformacji konforemnej funkcja $v(\mathbf{p})$ staje się funkcją zmiennych ξ oraz φ i może być rozwinięta w szereg Fouriera względem zmiennej φ

$$v(\mathbf{p}) = \sum_{l=0}^{\infty} v_l(\xi) \cos(l\varphi + \alpha_l),$$

przy czym $\alpha_0 = 0$. Zauważmy, że współczynniki $v_l(\xi)$ o indeksach nieparzystych (parzystych) muszą znikać dla antysymetrycznego (symetrycznego) sparowania spinowego ze względu na zakaz Pauliego. Parametr porządku dla czystego sparowania typu s , p , d itd. może być zatem przyjęty w postaci

$$\Delta(\xi, \varphi) = \Delta(T)v_l(\xi)D_l(\xi, \varphi). \quad (2.17)$$

Ponadto zakłada się, że

$$\int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\xi}{2\omega_c} v_l(\xi) = 1 \quad \text{oraz} \quad \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |D_l(\xi, \varphi)|^2 = 1,$$

gdzie ω_c jest energią obciążenia. Postać funkcji $D_l(\xi, \varphi)$ zależy od symetrii oddziaływania parującego (Tabela 2.1) a występujące w niej parametry α_l , które w ogólności mogą być funkcjami zmiennej ξ , powinny być wyznaczone z warunku stabilności. Dla sparowania typu d stany stabilne realizowane są dla $\alpha_2 = 0$ oraz $\alpha_2 = \pi/2$ a po wykonaniu odwrotnej transformacji konforemnej parametr porządku jest proporcjonalny odpowiednio do funkcji $(\cos p_1 a - \cos p_2 a)$ (symetria $x^2 - y^2$) oraz $\sin p_1 a \sin p_2 a$ (symetria xy). Natomiast w przypadku sparowania typu p parametr porządku w stanach z $\alpha_1 = 0$ oraz $\alpha_1 = \pi/2$ jest proporcjonalny odpowiednio do $\sin p_1 a$ i $\sin p_2 a$. Wszystkie te funkcje, wraz z funkcją tożsamościowo równą 1, stanowią bazę reprezentacji nieprzywiedlnych grupy C_{4v} i każda z nich jest parzystą lub nieparzystą funkcją wektora pędu, niezmienniczą względem translacji o wektor sieci odwrotnej [34, 35].

Równanie na szczelinę (2.1) w standaryzowanej postaci, wspólnej dla modeli nadprzewodnictwa z dowolną relacją dyspersyjną i czystym typem symetrii oddziaływania parującego, może być zapisane jako

$$\begin{aligned} \Delta(\xi, \varphi) &= f v_l(\xi) \cos(l\varphi + \alpha_l) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\xi'}{2\omega_c} \mathcal{K}(\xi', \varphi') v_l(\xi') \cos(l\varphi' + \alpha_l) \\ &\quad \times \frac{\Delta(\xi', \varphi')}{E(\xi', \varphi')} \operatorname{tgh} \frac{E(\xi', \varphi')}{2T}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

<i>typ sparowania</i>	$D_l(\xi, \varphi)$
s	1
p	$\pm\sqrt{2} \cos(\varphi + \alpha_1)$
d	$\pm\sqrt{2} \cos(2\varphi + \alpha_2)$
\vdots	\vdots
l	$\pm\sqrt{2} \cos(l\varphi + \alpha_l)$

Tabela 2.1: Postać funkcji $D_l(\xi, \varphi)$ w zależności od typu symetrii oddziaływania parującego.

gdzie $E(\xi, \varphi) = \sqrt{\xi^2 + \Delta^2(\xi, \varphi)}$. W szczególności, dla modelu BCS, $l = 0$, mamy $v_0(\xi) = 1$, $\Delta(\xi, \varphi) = \Delta(T)$, $\mathcal{K}(\xi, \varphi) = 2\pi\nu(0)$ oraz stała sprzężenia $\lambda = f\nu(0)$.

Ponadto, w większości rozważanych układów, można założyć, że nie znikający współczynnik $v_l(\xi)$ zmienia się nieznacznie w zakresie energii objętych oddziaływaniem parującym. Można wówczas położyć $v_l(\xi) \equiv 1$ i przyjąć, że parametr porządku jest niezależny od zmiennej ξ , tj. $D(\xi, \varphi) \equiv D(0, \varphi)$, a stany stabilne odpowiadają ustalonym wartościom α_l . Zauważmy, że w standardowym przybliżeniu dla efektywnego przyciągania elektron-elektron, dominujący ujemny wyraz rozwinięcia w szereg jest stały, niezależny od zmiennych ξ, ξ' i znika gdy $|\xi|, |\xi'| > \omega_c$, gdzie ω_c jest energią obciążenia [24].

Wykorzystując metody algebraiczne rozwinięte w pracach [34, 36] oraz kładąc $\xi = 2T_c u$ znajdujemy równanie

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \int_0^{\omega_c/2T_c} \frac{du}{u} [v_l^2(2T_c u) I_2(2T_c u) - 1] \operatorname{tgh} u, \quad (2.19)$$

które pozwala na znalezienie temperatury krytycznej w odniesieniu do wartości otrzymanej w przypadku BCS, gdy $v_l(\xi) = 1$ oraz $\nu(\xi) = \nu_0$, gdzie

$$\nu_0 = \int_{-\omega_c}^{\omega_c} \frac{d\xi}{2\omega_c} \nu(\xi).$$

Ponadto formuła

$$\frac{\Delta C(T_c)}{4\nu_0 T_c} = - \frac{\int_0^{\omega_c/2T_c} du v_l^2(2T_c u) I_2(2T_c u) \frac{d}{du} \operatorname{tgh} u}{\int_0^{\omega_c/2T_c} \frac{du}{u} v_l^4(2T_c u) I_4(2T_c u) \frac{d}{du} \frac{\operatorname{tgh} u}{u}} \quad (2.20)$$

pozwała na wyznaczenie wartości skoku ciepła właściwego.

Obserwowany w układach nadprzewodzących efekt izotopowy, tj. zależność temperatury krytycznej od masy izotopu, scharakteryzowany jest przez wartość wykładnika

$$\alpha = -\frac{\partial \ln T_c}{\partial \ln M}.$$

Korzystając z relacji $T_{c0}M^{1/2} = \text{const}$, gdzie T_{c0} jest wartością temperatury krytycznej w standardowym modelu BCS, otrzymujemy

$$\alpha = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \ln T_{c0}}{\partial \ln T_c} \right)^{-1},$$

a następnie, korzystając z równania (2.19), znajdujemy

$$\alpha = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \left[v_l^2(\omega_c) I_2(\omega_c) - 1 \right] \operatorname{tgh} \frac{\omega_c}{2T_c} \right\}^{-1}, \quad (2.21)$$

gdzie pozostałe mniejsze wyrazy zostały pominięte [37]. W standardowym modelu BCS mamy $\alpha = 1/2$.

W równaniach (2.19), (2.20) oraz (2.21)

$$I_{2n}(\xi) = \frac{1}{2\nu_0} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \left[\mathcal{K}(\xi, \varphi) |D_l(\xi, \varphi)|^{2n} + \mathcal{K}(-\xi, \varphi) |D_l(-\xi, \varphi)|^{2n} \right]. \quad (2.22)$$

Formuły (2.19)–(2.21), pozwalające na obliczenie charakterystycznych w modelach nadprzewodnictwa wartości T_c/T_{c0} , $\Delta C(T_c)/C_N(T_c)$ oraz α , zostały otrzymane w ramach metody uogólnionej transformacji konforemnej dla nadprzewodników z anizotropowym parametrem porządku. W przypadku standardowego scenariusza Van Hove'a formuły te zachowują swoją postać, ale funkcje $I_{2n}(\xi)$ przyjmują postać

$$I_{2n}(\xi) = \frac{1}{2\nu_0} \left[\nu(\xi) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |D_l(\xi, \varphi)|^{2n} + \nu(-\xi) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |D_l(-\xi, \varphi)|^{2n} \right]. \quad (2.23)$$

Ponadto, gdy spełniony jest warunek

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |D_l(\xi, \varphi)|^{2n} = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |D_l(-\xi, \varphi)|^{2n},$$

upraszczają się one do postaci

$$I_{2n}(\xi) = I_0(\xi) \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} |D_l(\xi, \varphi)|^{2n},$$

gdzie $I_0(\xi) = \frac{1}{2}[\nu(\xi) + \nu(-\xi)]$. Zauważmy jeszcze, że dla czystego sparowania o symetrii l (por. Tabela 2.1) mamy

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} [\pm\sqrt{2} \cos(l\varphi + \alpha_l)]^{2n} = \frac{1}{2^n} \binom{2n}{n}$$

dla każdego $l = 1, 2, 3, \dots$ i dowolnego α_l . W szczególności, dla $n = 2$ całka ta jest równa $3/2$.

Formuły (2.19), (2.20) oraz (2.21) wraz z równaniami (2.22) i (2.23) ujawniają fundamentalne różnice pomiędzy rezultatami uzyskanymi w ramach metody uogólnionej transformacji konforemnej a wynikami otrzymanymi w ramach standardowego scenariusza Van Hove'a. W drugim z tych formalizmów, wyrażenia $I_2(\xi)$ oraz $I_4(\xi)$ w formułach (2.19)–(2.21) zastąpione są odpowiednio wyrażeniami $I_0(\xi)$ oraz $\frac{3}{2}I_0(\xi)$ dla każdego czystego anizotropowego sparowania (por. Tabela 2.1), niezależnie od wartości l . Takie uproszczenie, będące bezpośrednią konsekwencją standardowego scenariusza Van Hove'a, powoduje, że wyznaczone ze wzorów (2.19), (2.20) oraz (2.21) wartości T_c/T_{c0} , $\Delta C(T_c)/C_N(T_c)$ oraz α są identyczne dla wszystkich typów symetrii anizotropowego parametru porządku.

2.4.2 Jednopasmowy model Hubbarda ze sparowaniem typu d oraz p

Aby bardziej szczegółowo scharakteryzować różnice między metodą uogólnionej transformacji konforemnej a standardowym scenariuszem Van Hove'a, przedstawione zostaną rezultaty analityczne otrzymane dla jednopasmowego modelu Hubbarda przedyskutowanego w rozdziale 2.3.2. W granicy $|z| \ll 1$, gdzie $z = (\xi - \mu)/2t_0$, funkcja jądra gęstości stanów (2.15) może być zapisana w postaci

$$\mathcal{K}(\xi, \varphi) = \frac{1}{2\pi^2 t_0 a^2} \frac{1}{\sqrt{z^2 \cos^2 2\varphi + 4 \sin^2 2\varphi}}.$$

Wówczas dla sparowania typu d funkcja $I_2(\xi)$ zdefiniowana równaniem (2.22) wyraża się przez zupełne całki eliptyczne

$$\begin{aligned} I_2(\xi) = & \frac{1}{2\nu_0 \pi^3 t_0 a^2} \sum_{s \in \{-, +\}} \frac{1}{4 - z_s^2} \left[4 \cos^2 \alpha_2 \mathbf{F} \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\sqrt{4 - z_s^2}}{2} \right) \right. \\ & \left. + 4 \sin^2 \alpha_2 \mathbf{E} \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\sqrt{4 - z_s^2}}{2} \right) - \sin^2 \alpha_2 z_s^2 \mathbf{F} \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\sqrt{4 - z_s^2}}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

$$- 4 \cos^2 \alpha_2 \mathbf{E} \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\sqrt{4 - z_s^2}}{2} \right) \Big],$$

gdzie $z_{\pm} = (\pm\xi + t_2)/2t_0$, natomiast $\mathbf{E}(\psi, \kappa)$ jest zupełną całką eliptyczną drugiego rodzaju. Z drugiej strony, w ramach standardowego scenariusza Van Hove'a (por. równanie (2.23)), otrzymujemy

$$I_2(\xi) = \frac{1}{4\nu_0\pi^3 t_0 a^2} \sum_{s \in \{-, +\}} \mathbf{F} \left(\frac{\pi}{2}, \frac{\sqrt{4 - z_s^2}}{2} \right).$$

Mimo, że dla sparowania typu p rezultaty nie mogą być zapisane za pomocą całek eliptycznych, również i w tym przypadku można wykazać różnice między obydwoma dyskutowanymi metodami. Dla wszystkich typów anizotropowego sparowania (por. Tabela 2.1) standardowy scenariusz Van Hove'a prowadzi do rezultatu

$$I_2(\xi) \equiv I_0(\xi) = \frac{1}{2\nu_0} [\langle \mathcal{K}(-\xi, \varphi) \rangle + \langle \mathcal{K}(\xi, \varphi) \rangle] = \frac{1}{2\nu_0} [\nu(-\xi) + \nu(\xi)],$$

gdzie $\langle \dots \rangle$ oznacza uśrednianie po kącie φ . Z kolei dla stanów z $\alpha_1 = 0$ oraz $\alpha_1 = \pi/2$ ze względu na fakt, że $\mathcal{K}(\xi, \varphi) = \mathcal{K}(\xi, \frac{\pi}{2} - \varphi)$, mamy

$$\langle \mathcal{K}(\xi, \varphi) \sin^2 \varphi \rangle = \langle \mathcal{K}(\xi, \varphi) \cos^2 \varphi \rangle = \frac{1}{2} \langle \mathcal{K}(\xi, \varphi) \rangle = \frac{1}{2} \nu(\xi).$$

Zatem funkcja $I_2(\xi)$ zdefiniowana formułą (2.22) w formalizmie uogólnionej transformacji konforemnej przyjmuje postać

$$I_2(\xi) = \frac{1}{4\nu_0} [\nu(-\xi) + \nu(\xi)],$$

tzn. jej wartość jest dwukrotnie mniejsza od otrzymanej w ramach standardowego scenariusza Van Hove'a. Zauważmy, że w ogólności, dla dowolnej wartości parametru α_1 , formuła (2.22) jest postaci

$$I_2(\xi) = \frac{1}{4\nu_0} \{ \nu(-\xi) + \nu(\xi) + [\langle \mathcal{K}(-\xi, \varphi) \sin 2\varphi \rangle + \langle \mathcal{K}(\xi, \varphi) \sin 2\varphi \rangle] \sin 2\alpha_1 \},$$

co dowodzi faktu, że zmiana temperatury krytycznej zależy w tym przypadku od orientacji parametru porządku w przestrzeni odwrotnej.

2.5 Podsumowanie

Przedstawiony formalizm, oparty na uogólnionej transformacji konforemnej przestrzeni pędów, umożliwia badania zarówno zwykłych przewodników jak również nadprzewodników takich jak związki A15 z normalnymi i paramagnetycznymi domieszkami, kwazidwuwymiarowe nadprzewodniki z płaszczyznami tlenowo-miedziowymi, fazy Chevrela i związki ciężkofermionowe [33,34,38]. Metoda ta może również znaleźć zastosowanie do badań nowej generacji nadprzewodników opartych na związkach boru i magnezu (MgB_2 , Mg^{10}B_2 , Mg^{11}B_2) z temperaturami krytycznymi rzędu 40 K [39–41] oraz innych nowych nadprzewodników z parametrem porządku o symetrii typu s oraz d [42–44] lub p [45–48].

W rozwiniętej metodzie zakładamy, że relacja dyspersyjna jest dowolną różniczkowalną funkcją wektora pędu. W realnych układach postać zależności dyspersyjnej jest jednak modyfikowana przez zmiany w relacjach stechiometrycznych i wszelkiego rodzaju deformacje struktury materiału. Jądro gęstości stanów, które umożliwia znalezienie wartości pewnych charakterystyk nadprzewodników, musi być zawsze wyznaczane dla ustalonej postaci relacji dyspersyjnej. Zatem przedstawioną w niniejszym rozdziale metodę uważać można za sposób odwzorowania stechiometrii, realnej struktury związków — poprzez jądro gęstości stanów i funkcję gęstości stanów — w charakterystyki termodynamiczne. W szczególności, temperatura krytyczna, która jest pewnym nieliniowym funkcjonałem relacji dyspersyjnej określonej m.in. przez parametry struktury realnych związków nadprzewodzących, może być maksymalizowana metodami rachunku wariacyjnego.

Obliczając charakterystyki termodynamiczne dla układów ze sparowaniem typu s jądro gęstości stanów może być zastąpione przez jego wartość uśrednioną po zmiennej kątowej, tj. przez funkcję gęstości stanów. Zatem, jeżeli funkcja gęstości stanów dla pewnych różniących się — w sensie różnych relacji dyspersyjnych — układów ma jakościowo tę samą postać, układy te będą wykazywały podobne własności termodynamiczne i mogą być uważane za należące do tej samej klasy. Taka klasyfikacja może być również dokonana w przypadku różniących się (w tym samym sensie jak powyżej) nadprzewodników z anizotropową szczeliną energetyczną. Jednak w tym przypadku kryterium przynależności do jednej klasy jest funkcja $I_{2n}(\xi)$ zdefiniowana równaniem (2.22). Zatem przedsta-

wiony formalizm pozwala na klasyfikację nadprzewodników ze względu na ich własności termodynamiczne na podstawie funkcji, której postać jest bezpośrednio związana z relacją dyspersyjną.

Podkreślmy fakt, że w przypadku układów ze sparowaniem typu s i przy wyborze zmiennej kątowej jako zmiennej kątowej standardowego układu współrzędnych biegunowych przedstawiona metoda sprowadza się do standardowego scenariusza Van Hove'a, którego stosowalność jest jednak ograniczona do układów z izotropowym parametrem porządku. Metoda oparta na uogólnionej transformacji konforemnej stanowi zatem konsekwentne rozszerzenie scenariusza Van Hove'a dla nadprzewodników z anizotropowym parametrem porządku.

Rozdział 3

Klasyfikacja parametru porządku ze względu na elementy symetrii grupy C_{4v}

3.1 Model

Dla dwuwymiarowych modeli nadprzewodników wysokotemperaturowych, opartych na mechanizmie parowania za pośrednictwem bozonów i uwzględniających oddziaływanie na węzłach (*on-site*) oraz oddziaływanie najbliższych sąsiadów, oddziaływanie parujące w przestrzeni odwrotnej jest postaci [49–52]

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_0 - V_1[\cos(k_x - k'_x) + \cos(k_y - k'_y)], \quad (3.1)$$

gdzie stałe sieciowe a_x, a_y położono równe jedności. Dodatniość wielkości V_0 oraz V_1 , charakteryzujących odpowiednio izotropowy i anizotropowy kanał oddziaływania cząstka-cząstka, zapewnia jego przyciągający charakter. Oddziaływanie parujące może być zapisane w następującej ogólnej postaci

$$V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + V^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}'),$$

gdzie $V^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V^s(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V^s(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$ oraz $V^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V^a(-\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V^a(\mathbf{k}, -\mathbf{k}')$ oznaczają odpowiednio singletową i trypletową (w odniesieniu do spinu) składową potencjału parującego. W szczególności, dla oddziaływania postaci (3.1), znajdujemy

$$V^s(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_0 - V_1(\cos k_x \cos k'_x + \cos k_y \cos k'_y)$$

$$\begin{aligned}
&= -V_0 - \frac{1}{2} V_1(\cos k_x + \cos k_y)(\cos k'_x + \cos k'_y) \\
&\quad - \frac{1}{2} V_1(\cos k_x - \cos k_y)(\cos k'_x - \cos k'_y), \quad (3.2)
\end{aligned}$$

$$V^a(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -V_1(\sin k_x \sin k'_x + \sin k_y \sin k'_y). \quad (3.3)$$

Ponadto, dwuwymiarowy model ciasnego wiązania z mechanizmem hoppingu uwzględniającym najbliższych i drugich najbliższych sąsiadów, prowadzi do następującej relacji dyspersyjnej

$$\xi_{\mathbf{k}} = -2t_0(\cos k_x + \cos k_y + \eta \cos k_x \cos k_y) + \mu, \quad (3.4)$$

gdzie $\eta = 2t_1/t_0 < 1$ oraz t_0, t_1 oznaczają odpowiednio całki przeskoku dla najbliższych i drugich najbliższych sąsiadów. Parametr obsadzenia μ , który ustala przesunięcie poziomu Fermiego w przypadku domieszkowania i niepołówkowego wypełnienia pasma, należy, podobnie jak w przypadku jednopasmowego modelu Hubbarda analizowanego w podrozdziale 2.3.2, identyfikować z potencjałem chemicznym [24, 33, 34].

W przypadku dwuwymiarowego modelu t - J metoda kwantowego Monte Carlo prowadzi do relacji dyspersyjnej dziury w antyferromagnetycznym tle, która jest postaci

$$\xi_{\mathbf{k}} = -4t' \cos k_x \cos k_y - 2t''(\cos 2k_x + \cos 2k_y) + \mu. \quad (3.5)$$

Odpowiada ona dwuwymiarowemu modelowi ciasnego wiązania, w którym nie ma przeskoków do najbliższych sąsiadów ($t_0 = 0$), jak w przypadku dziury poruszającej się w tej samej podsieci aby uniknąć zaburzenia antyferromagnetycznego tła. Całki przeskoku t' oraz t'' odpowiadają przeskokom do drugich i trzecich najbliższych węzłów płaszczyzny miedziowo-tlenowej zawierających jony miedzi. Relacja dyspersyjna (3.5) może być przekształcona do postaci (3.4) po dokonaniu zamiany zmiennych w przestrzeni pędów $k_x \mapsto (k_x + k_y)/\sqrt{2}$, $k_y \mapsto (k_x - k_y)/\sqrt{2}$, zmianie stałej sieciowej o czynnik $\sqrt{2}$ oraz zamianie t' na t_0 oraz t'' na t_1 . Wówczas wartość parametru $\eta = 2t''/t'$ może być większa od jedności.

Elementy symetrii płaszczyzn miedziowo-tlenowych występujących w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych tworzą grupę punktową C_{4v} . Dla dwuwymiarowej przestrzeni pędów podzbiory funkcji bazowych reprezentacji nie-

przywiedlnych tej grupy (por. dodatek A) wybierane są zazwyczaj w następujących najprostszyc postaciach

$$\{\cos k_x + \cos k_y\}, \quad (3.6)$$

$$\{\cos k_x - \cos k_y\}, \quad (3.7)$$

$$\{\sin k_x \sin k_y\}, \quad (3.8)$$

$$\{\sin k_x \sin k_y (\cos k_x - \cos k_y)\}, \quad (3.9)$$

$$\{\sin k_x, \sin k_y\}. \quad (3.10)$$

Wszystkie te funkcje są niezmiennicze względem translacji o wektory sieci odwrotnej [35]. Ponieważ funkcja bazowa należąca do pierwszego podzbioru (3.6) odpowiada trywialnej reprezentacji nieprzywiedlnej, niekiedy podzbiór ten wybierany jest jako $\{1\}$. Podkreślmy, że powyższy wybór jest jednym z wielu możliwych i wybrane funkcje mogą być zastąpione innymi, bardziej złożonymi. W szczególności pomnożenie ich przez $(1 + \cos k_x \cos k_y)^{-1}$ generuje nowy bardziej złożony zestaw niezmienników grupy C_{4v} [34]. Ponadto podzbiory funkcji bazowych mogą być również wybrane jako

$$\{\cos k_x + \cos k_y + \eta_1 \cos k_x \cos k_y\}, \quad (3.11)$$

$$\{(\cos k_x - \cos k_y)[1 + \eta_2(\cos k_x + \cos k_y)]\}, \quad (3.12)$$

$$\{\sin k_x \sin k_y [1 + \eta_3(\cos k_x + \cos k_y)]\}, \quad (3.13)$$

$$\{\sin k_x \sin k_y (\cos k_x - \cos k_y)[1 + \eta_4(\cos k_x + \cos k_y)]\}, \quad (3.14)$$

$$\{\sin k_x [1 + \eta_5(\cos k_x + \cos k_y)], \sin k_y [1 + \eta_5(\cos k_x + \cos k_y)]\}, \quad (3.15)$$

gdzie $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_5$ są liczbami rzeczywistymi. Zazwyczaj do przedstawienia komponentów (3.2) oraz (3.3) oddziaływania parującego (3.1) wykorzystywane są funkcje (3.6)–(3.8). Z kolei relacja dyspersyjna (3.4) może być wyrażona za pomocą funkcji (3.11), będącej innym niezmiennikiem grupy C_{4v} odpowiadającym trywialnej reprezentacji nieprzywiedlnej. Mimo, że własności symetrii funkcji (3.6) oraz (3.11) określone przez elementy grupy są takie same, funkcje te nie są równoważne, za wyjątkiem przypadku gdy $\eta_1 = 0$. W ogólności zatem może istnieć wiele zestawów funkcji bazowych.

W pewnych modelach zakłada się, że oddziaływanie parujące jest oddziaływaniem sprzęgającym ładunki za pośrednictwem bozonów. Wówczas maksymalna energia ω_c bozonów identyfikowana jest z parametrem obciążenia z warunku

$-\omega_c \leq \xi_{\mathbf{k}} \leq \omega_c$ nałożonego na energię cząstki. W innych z kolei nadprzewodnik opisywany jest jako układ metaliczny z wąskim niemal w połowie wypełnionym ($\mu \simeq 0$ oraz $\mu > 0$) pasmem przewodnictwa szerokości $2\omega_c$, pokrytym w całości oddziaływaniem parującym. Ponadto, w obu przypadkach, energia cząstki (mierzona względem potencjału chemicznego) jest dużo mniejsza od energii Fermiego. Dlatego dla większości rozważanych układów można założyć, że wszystkie regularne funkcje energii cząstki zmieniają się tylko nieznacznie w obszarze szerokości $2\omega_c$ i parametr porządku może być uznawany za niezależny od $\xi_{\mathbf{k}}$. Wówczas równanie na szczelinę (2.1) oraz równanie na potencjał chemiczny (2.2) stanowią układ podstawowych równań opisujących układ nadprzewodzący.

3.2 Metoda kolejnych transformacji przestrzeni odwrotnej

Symetria postawionego zagadnienia, która jest symetrią grupy punktowej C_{4v} , pozwala na ograniczenie rozważań do pierwszej ćwiartki $k_x, k_y \geq 0$. Wówczas we wszystkich równaniach sumowanie po wektorze pędu może być zastąpione całkowaniem po jego składowych zgodnie z formułą

$$\sum_{\mathbf{k}} \dots = \frac{8}{(2\pi)^2} \int_0^\pi dk_x \int_0^\pi dk_y \dots, \quad (3.16)$$

gdzie obszar całkowania obejmuje odpowiednią część strefy Brillouina ($0 \leq k_x \leq \pi, 0 \leq k_y \leq \pi$) określoną przez warunek

$$-\omega_c \leq \xi_{\mathbf{k}} \leq \omega_c. \quad (3.17)$$

3.2.1 Pierwsza transformacja

Definiujemy następującą transformację przestrzeni pędów

$$k_x = \arccos(1 - 2x), \quad k_y = \arccos(1 - 2y),$$

której jacobian ma postać

$$J_1(x, y) = \frac{4}{\sqrt{1 - (1 - 2x)^2} \sqrt{1 - (1 - 2y)^2}}, \quad (3.18)$$

a określony uprzednio obszar całkowania zostaje zastąpiony przez obszar zdefiniowany nierównościami $0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1$. Zatem prawa strona równości (3.16) jest teraz postaci

$$\frac{8}{(2\pi)^2} \int_0^1 dx \int_0^1 dy J_1(x, y) \dots,$$

a relacja dyspersyjna (3.4)

$$\frac{\xi(x, y)}{2t_0} = -(1 - 2x) - (1 - 2y) - \eta(1 - 2x)(1 - 2y) + \frac{\mu}{2t_0}. \quad (3.19)$$

3.2.2 Druga transformacja

Kolejnym krokiem jest wykonanie uogólnionej transformacji konforemnej [32, 33], tak aby zmienna ξ była jedną ze współrzędnych nowego ortogonalnego krzywoliniowego układu współrzędnych (por. podrozdział 2.2). Korzystając z postaci (3.19) relacji dyspersyjnej znajdujemy gradient

$$\nabla \xi(x, y) = 4t_0 (1 + \eta(1 - 2y), 1 + \eta(1 - 2x)),$$

pozwalający na sformułowanie następującego równania różniczkowego

$$\frac{dy}{dx} = \frac{1 + \eta(1 - 2x)}{1 + \eta(1 - 2y)}.$$

Rozwiązania tego równania, na mocy twierdzenia Picarda, istnieją zawsze i tworzą jednoparametrową rodzinę krzywych całkowych

$$\phi(x, y) = 2[(1 + \eta)y - \eta y^2 - (1 + \eta)x + \eta x^2]. \quad (3.20)$$

Ze względu na warunek $\nabla \xi(x, y) \cdot \nabla \phi(x, y) = 0$, izokliny $\phi(x, y) = C_1$ są w każdym punkcie (x, y) prostopadłe do linii izoenergetycznych $\xi(x, y) = C_2$.

Zauważmy, że równania (3.19) oraz (3.20) mogą być zapisane odpowiednio jako

$$1 - \eta z = XY \quad \text{oraz} \quad 2\eta\phi = X^2 - Y^2, \quad (3.21)$$

gdzie $z = (\xi - \mu)/2t_0$, $X = 1 + \eta - 2\eta x$ oraz $Y = 1 + \eta - 2\eta y$. Jakobian uogólnionej transformacji konforemnej $(x, y) \mapsto (\xi, \phi)$ ma wówczas postać

$$J_2(\xi, \phi) = \frac{1}{8t_0} \frac{1}{X^2 + Y^2}, \quad (3.22)$$

gdzie X oraz Y powinny być wyrażone jako funkcje zmiennych ξ oraz ϕ na podstawie równań (3.21). Konsekwencją wykonanej transformacji jest ponadto zmiana obszaru całkowania, który określony jest teraz nierównościami

$$\begin{aligned} -2 - \eta \leq z \leq 2 - \eta & \quad \text{gdy} \quad \eta \leq 1, \\ -2 - \eta \leq z \leq \eta & \quad \text{gdy} \quad \eta \geq 1, \end{aligned}$$

a stąd $-\phi_0(\xi) \leq \phi \leq \phi_0(\xi)$, gdzie

$$\phi_0(\xi) = \begin{cases} \frac{1}{2(1+\eta)^2} \left(2 + \eta + \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right) \left(2 + 2\eta + \eta^2 - \eta \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right) & \text{dla} \quad \frac{\xi - \mu}{2t_0} \leq \eta \\ \frac{1}{2(1-\eta)^2} \left|2 - \eta - \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right| \left|2 - 2\eta + \eta^2 - \eta \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right| & \text{dla} \quad \frac{\xi - \mu}{2t_0} \geq \eta. \end{cases} \quad (3.23)$$

Zatem, po wykonaniu dwóch transformacji, prawa strona równości (3.16) jest postaci

$$\frac{8}{(2\pi)^2} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi \int_{-\phi_0}^{\phi_0} d\phi J_1^{(1)}(x, y) J_2(\xi, \phi) \dots,$$

gdzie na zmienną ξ nałożony jest warunek (3.17), tak że $|\xi| \ll 2t_0$. Ponadto $J_1^{(1)}(\xi, \phi)$ oznacza jakobian $J_1(x, y)$ pierwszej transformacji, w którym zmienne x, y wyrażono przez zmienne ξ, ϕ .

3.2.3 Trzecia transformacja

Ponieważ ostatecznym celem wykonywanych transformacji jest przekształcenie układu współrzędnych przestrzeni odwrotnej w taki sposób, aby jedną ze zmiennych była energia cząstki ξ a drugą współrzędną kątową układu współrzędnych biegunowych φ przy jednoczesnym zachowaniu symetrii zagadnienia, zmienną φ można zdefiniować relacją $\text{tg } \varphi = y/x$. Wówczas z równań (3.21) otrzymujemy

$$\phi = 2(\text{tg } \varphi - 1)x [1 + \eta - \eta(1 + \text{tg } \varphi)x], \quad (3.24)$$

gdzie

$$x = \frac{(1 + \eta)(1 + \text{tg } \varphi) - \sqrt{(1 + \eta)^2(1 + \text{tg } \varphi)^2 - 4\eta \left(2 + \eta + \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right) \text{tg } \varphi}}{4\eta \text{tg } \varphi}$$

Funkcja ϕ określona wzorem (3.24) ma następującą własność: jeżeli dokonamy zamiany φ na $\pi/2 - \varphi$, wówczas funkcja ϕ zmienia znak na przeciwny. Ponieważ

w granicy $\varphi \rightarrow 0$ lub $\eta \rightarrow 0$ formuła (3.24) redukuje się do postaci

$$\phi = \phi_0(\xi) \frac{\operatorname{tg} \varphi - 1}{\operatorname{tg} \varphi + 1},$$

która zachowuje żadaną symetrię zagadnienia, definiujemy kolejną transformację przestrzeni

$$\xi = \xi, \quad \phi(\xi, \varphi) = \phi_0(\xi) f(\varphi), \quad (3.25)$$

gdzie funkcja

$$f(\varphi) = \frac{\sin \varphi - \cos \varphi}{\sin \varphi + \cos \varphi} \quad (3.26)$$

spełnia nierówność $-1 \leq f(\varphi) \leq 1$ dla $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ definiującego obszar całkowania. Jakobian tej transformacji jest postaci

$$J_3(\xi, \varphi) = \frac{2}{1 + \sin 2\varphi} \phi_0(\xi).$$

Ostatecznie prawa strona równości (3.16) przyjmuje postać

$$\frac{8}{(2\pi)^2} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi J(\xi, \varphi) \dots,$$

gdzie $J(\xi, \varphi) = J_1^{(2)}(\xi, \varphi) J_2^{(1)}(\xi, \varphi) J_3(\xi, \varphi)$ jest pełnym jakobianem przeprowadzonych transformacji. Ponadto $J_1^{(2)}(\xi, \varphi)$ oraz $J_2^{(1)}(\xi, \varphi)$ oznaczają odpowiednio jakobiany pierwszej i drugiej transformacji, w których zmienną ϕ wyrażono przez zmienne ξ oraz φ , zgodnie z relacjami (3.25).

3.2.4 Jądro gęstości stanów

Aby znaleźć jawną postać jakobianu $J(\xi, \varphi)$, a co za tym idzie (por. wzór (2.11)) również jądra gęstości stanów $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$, należy rozwiązać równania (3.21) ze względu na X oraz Y i uwzględniając relacje (3.23), (3.25) oraz (3.26) przedstawić rozwiązania w zależności od zmiennych ξ oraz φ . Po przekształceniach algebraicznych otrzymujemy ostatecznie

$$X(\xi, \varphi) = \left[\sqrt{\left(1 - \eta \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right)^2 + \eta^2 \phi_0^2(\xi) f^2(\varphi) + \eta \phi_0(\xi) f(\varphi)} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$Y(\xi, \varphi) = \left[\sqrt{\left(1 - \eta \frac{\xi - \mu}{2t_0}\right)^2 + \eta^2 \phi_0^2(\xi) f^2(\varphi) - \eta \phi_0(\xi) f(\varphi)} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Zauważmy, że $X(\xi, \frac{\pi}{2} - \varphi) = Y(\xi, \varphi)$. Ponadto zmienne x oraz y wyrażają się poprzez zmienne ξ oraz φ za pomocą formuł

$$x(\xi, \varphi) = \frac{1}{2\eta} [1 + \eta - X(\xi, \varphi)] \quad \text{oraz} \quad y(\xi, \varphi) = \frac{1}{2\eta} [1 + \eta - Y(\xi, \varphi)].$$

Zatem, wykorzystując znalezione postaci jacobianów kolejnych transformacji, zaprezentowana metoda pozwala wyznaczyć funkcję jądra gęstości stanów dla dowolnych wartości parametru η w postaci

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\xi, \varphi) &= \frac{\eta^2}{2\pi^2 t_0} \frac{1}{\sqrt{\eta^2 - [X(\xi, \varphi) - 1]^2} \sqrt{\eta^2 - [Y(\xi, \varphi) - 1]^2}} \\ &\quad \times \frac{1}{[X(\xi, \varphi)]^2 + [Y(\xi, \varphi)]^2} \frac{1}{1 + \sin 2\varphi} \phi_0(\xi). \end{aligned}$$

Na Rysunku 3.1 przedstawiono postać funkcji $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ dla kilku wybranych wartości parametru η .

3.3 Oddziaływanie parujące

Postaci składowych: singletowej i trypletowej oddziaływania parującego odpowiedzialnego za tworzenie par Coopera o symetrii typu s, d, g, \dots lub p, f, \dots dane są odpowiednio wzorami (3.2) oraz (3.3). Uwzględniając związki

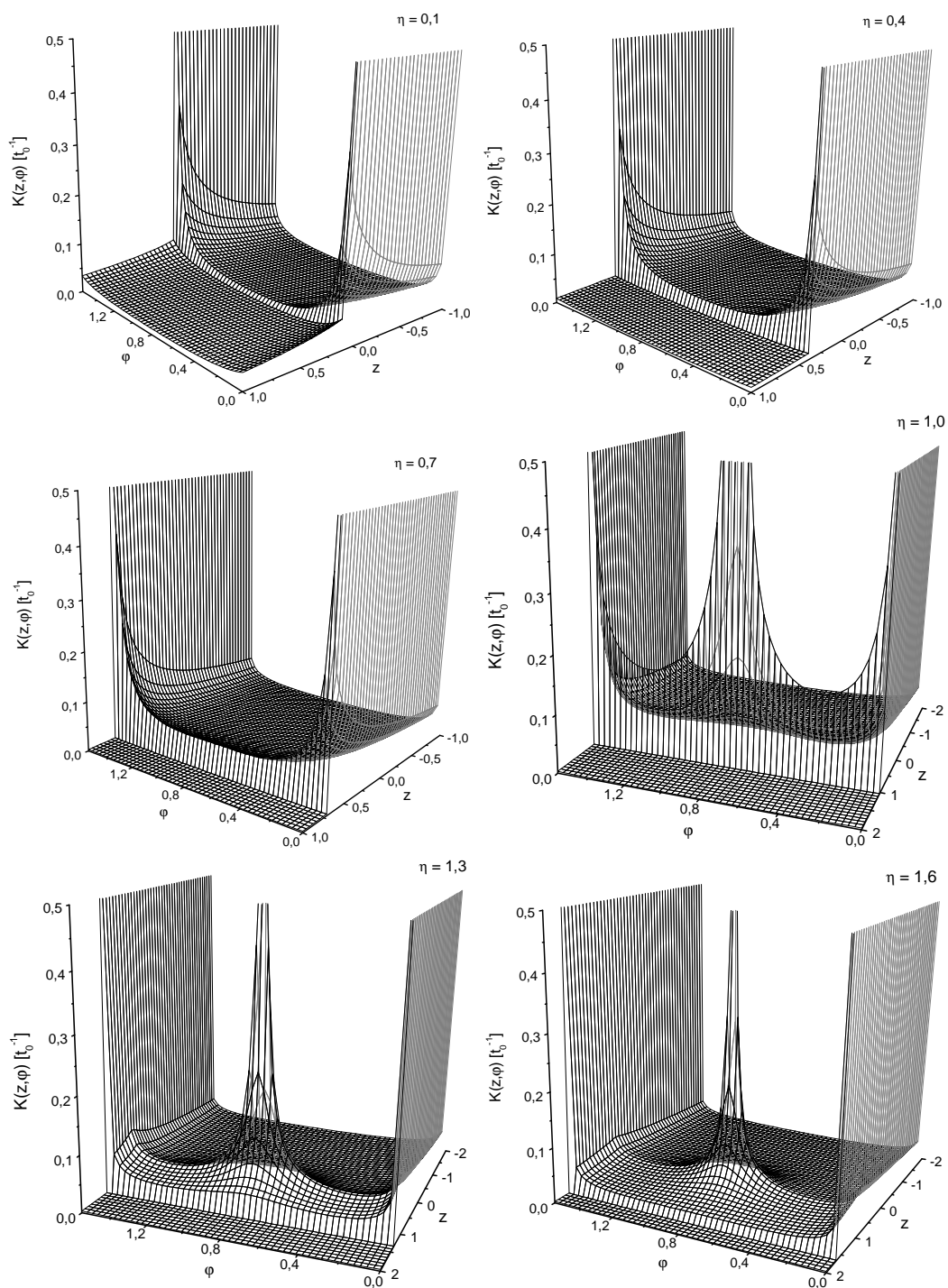
$$\cos k_x = \frac{1}{\eta} [X(\xi, \varphi) - 1] \quad \text{oraz} \quad \cos k_y = \frac{1}{\eta} [Y(\xi, \varphi) - 1],$$

obie składowe możemy przepisać w postaci

$$\begin{aligned} V^s(\xi, \varphi; \xi', \varphi') &= \\ &= -V_0 - \frac{1}{2\eta^2} V_1 [X(\xi, \varphi) + Y(\xi, \varphi) - 2] [X(\xi', \varphi') + Y(\xi', \varphi') - 2] \\ &\quad - \frac{1}{2\eta^2} V_1 [Y(\xi, \varphi) - X(\xi, \varphi)] [Y(\xi', \varphi') - X(\xi', \varphi')] \quad (3.27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V^a(\xi, \varphi; \xi', \varphi') &= \\ &= -\frac{1}{\eta^2} V_1 \left\{ (\pm) \sqrt{\eta^2 - [X(\xi, \varphi) - 1]^2} (\pm) \sqrt{\eta^2 - [X(\xi', \varphi') - 1]^2} \right. \\ &\quad \left. + (\pm) \sqrt{\eta^2 - [Y(\xi, \varphi) - 1]^2} (\pm) \sqrt{\eta^2 - [Y(\xi', \varphi') - 1]^2} \right\}, \quad (3.28) \end{aligned}$$

gdzie znak (\pm) powinien być odpowiednio wybrany, w zależności od wartości zmiennej kątowej z uwzględnieniem własności symetrii funkcji trygonometrycznych $\sin k_x^{(\prime)}$, $\sin k_y^{(\prime)}$ (por. dodatek A).



Rysunek 3.1: Jądro gęstości stanów $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ dla różnych wartości parametru η .

3.3.1 Dopuszczalne postaci oddziaływania parującego

Klasyfikacja harmonik fourierowskich $\sin l\varphi$ oraz $\cos l\varphi$ przeprowadzona w dodatku A pozwala na rozwinięcie komponentów potencjału parującego w szeregi Fouriera z zachowaniem wszystkich własności symetrii ze względu na elementy grupy punktowej C_{4v} . Komponenty występujące w części singletowej (3.27) potencjału parującego przedstawić można w postaci następujących szeregów

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\eta} [X(\xi, \varphi) + Y(\xi, \varphi) - 2] &= \frac{v_0(\xi)}{\sqrt{2}} + \sum_{n=1}^{\infty} v_{4n}(\xi) \cos 4n\varphi, \\ \frac{1}{2\eta} [Y(\xi, \varphi) - X(\xi, \varphi)] &= \sum_{n=0}^{\infty} v_{2+4n}(\xi) \cos(2 + 4n)\varphi,\end{aligned}$$

gdzie współczynniki rozwinięcia dane są formułami

$$\begin{aligned}v_0(\xi) &= \frac{\sqrt{2}}{\eta\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [X(\xi, \varphi) + Y(\xi, \varphi) - 2] d\varphi, \\ v_{2+4n}(\xi) &= \frac{2}{\eta\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [X(\xi, \varphi) + Y(\xi, \varphi) - 2] \cos 4n\varphi d\varphi\end{aligned}$$

dla $n = 1, 2, \dots$ oraz

$$v_{2+4n}(\xi) = \frac{2}{\eta\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [Y(\xi, \varphi) - X(\xi, \varphi)] \cos(2 + 4n)\varphi d\varphi$$

dla $n = 0, 1, \dots$. Natomiast komponenty występujące w części trypletowej (3.28) mogą być przedstawione jako

$$\begin{aligned}(\pm) \frac{\sqrt{2}}{2\eta} \sqrt{\eta^2 - [X(\xi, \varphi) - 1]^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} v_{1+4n}(\xi) \cos(1 + 4n)\varphi, \\ (\pm) \frac{\sqrt{2}}{2\eta} \sqrt{\eta^2 - [Y(\xi, \varphi) - 1]^2} &= \sum_{n=0}^{\infty} v_{1+4n}(\xi) \sin(1 + 4n)\varphi,\end{aligned}$$

gdzie

$$\begin{aligned}v_{1+4n}(\xi) &= \frac{2\sqrt{2}}{\eta\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\eta^2 - [X(\xi, \varphi) - 1]^2} \cos(1 + 4n)\varphi d\varphi \\ &= \frac{2\sqrt{2}}{\eta\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sqrt{\eta^2 - [Y(\xi, \varphi) - 1]^2} \sin(1 + 4n)\varphi d\varphi\end{aligned}$$

<i>typ sparowania</i>	$V(\xi, \varphi; \xi', \varphi')$
<i>s</i>	$-V_0 - V_1 v_0(\xi) v_0(\xi')$
<i>p</i>	$-2V_1 v_1(\xi) v_1(\xi') [\cos \varphi \cos \varphi' + \sin \varphi \sin \varphi']$
<i>d</i>	$-2V_1 v_2(\xi) v_2(\xi') \cos 2\varphi \cos 2\varphi'$
<i>g</i>	$-2V_1 v_4(\xi) v_4(\xi') \cos 4\varphi \cos 4\varphi'$

Tabela 3.1: Potencjał parujący dla czystych typów symetrii.

dla $n = 0, 1, \dots$

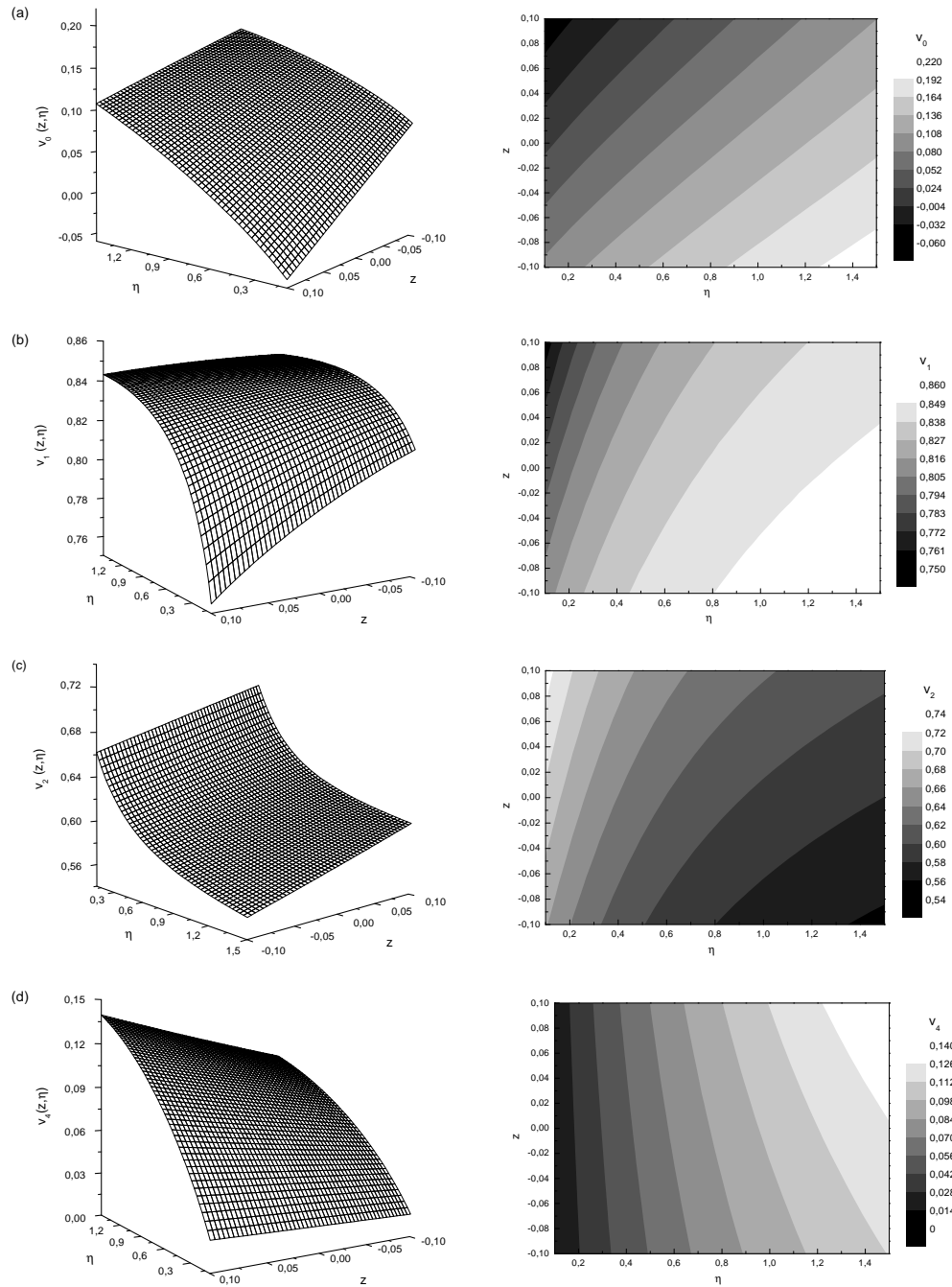
W przypadku gdy dominuje pojedyncza składowa fourierowska, potencjał parujący dla stanu o czystym typie symetrii sparowania może być sprowadzony do jednej z postaci przedstawionych dla kilku przypadków w Tabeli 3.1, determinując jednocześnie strukturę parametru porządku. Na Rysunku 3.2 przedstawiono wykresy współczynników v_0 , v_1 , v_2 oraz v_4 w funkcji zmiennej $z = (\xi - \mu)/2t_0$ w zależności od parametru η zmieniającego się w granicach od 0,1 do 1,5. Rysunek 3.3 przedstawia różnicę między współczynnikami v_1 oraz v_2 związanymi z potencjałem parującym o symetrii odpowiednio p oraz d . Rezultaty przedstawione na Rysunkach 3.2 (b), 3.2 (c) oraz na Rysunku 3.3 pozwalają stwierdzić, że dla małych wartości parametru η , jak w dwuwymiarowym modelu ciasnego wiązania, współczynniki v_1 oraz v_2 są porównywalne, podczas gdy dla dużych wartości tego parametru zaznacza się dominacja typu symetrii p . Zatem w modelu t - J , gdzie relacja dypersyjna oraz potencjał parujący zdeterminowany jest przez efekty korelacji magnetycznych w płaszczyznach miedziowo-tlenowych [49, 53], symetria oddziaływania parującego jest typu p .

3.3.2 Parametr porządku i podstawowe równania

Parametr porządku może być przedstawiony w sfaktoryzowanej postaci (por. wzór (2.17))

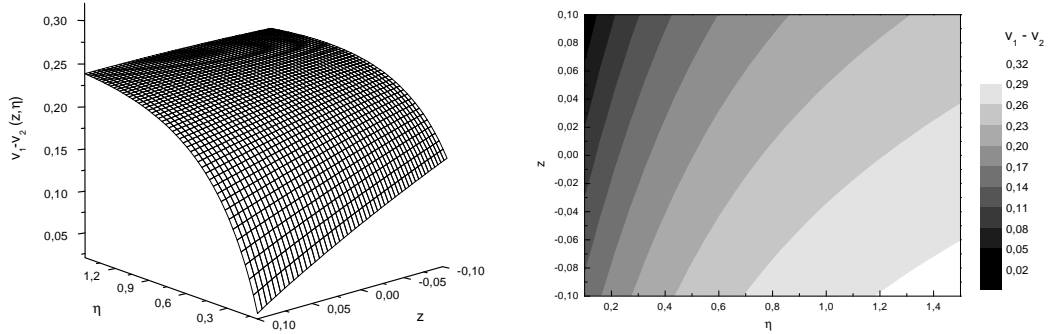
$$\Delta(\xi, \varphi) = \Delta(T) v_l(\xi) D_l(\varphi),$$

przy czym funkcja $D_l(\varphi)$ zależy tutaj jedynie od zmiennej kątowej φ a zależność od zmiennej ξ zawarta jest w całości w funkcji $v_l(\xi)$. W przypadku gdy dominuje jedna składowa fourierowska $v_l(\xi)$, gdzie $l = 0, 1, 2, 4$, dla $\xi \approx 0$ realizowany będzie odpowiednio stan s , p , d lub g (por. Tabela 3.1). Konsekwentnie,



Rysunek 3.2: Współczynniki rozwinięcia w szeregach Fouriera odpowiadające potencjałowi parującemu o symetrii: (a) s , (b) p , (c) d , (d) g .

struktura kątowna parametru porządku zdeterminowana przez odpowiednie harmoniki fourierowskie ma dla rozważanych typów symetrii sparowania postać



Rysunek 3.3: Różnica między współczynnikami v_1 oraz v_2 odpowiadającymi potencjałowi parującemu o symetrii p oraz d .

<i>typ sparowania</i>	$D_l(\varphi)$
s	1
p	$\sqrt{2} \cos(\varphi + \alpha_1)$
d	$\sqrt{2} \cos 2\varphi$
g	$\sqrt{2} \cos 4\varphi$

Tabela 3.2: Struktura kątowna parametru porządku. Sparowanie o symetrii typu s realizuje się w przypadku gdy $V_0 \gg V_1$. Dla symetrii typu p możliwymi wartościami parametru α_1 są $0, \pm\pi/4, \pi/2$.

przedstawioną w Tabeli 3.2.

Podstawowe równania opisujące układ nadprzewodzący, tzn. równanie na szczelinę (2.1) oraz równanie na potencjał chemiczny (2.2) mogą być przepisane w następującej postaci

$$1 = V_i \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi \mathcal{K}(\xi, \varphi) \frac{v_i^2(\xi) D_l^2(\varphi)}{E(\xi, \varphi)} \operatorname{tgh} \frac{E(\xi, \varphi)}{2T}$$

oraz

$$2n = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_{-\omega_c}^{\omega_c} d\xi \mathcal{K}(\xi, \varphi) \left[1 - \frac{\xi - \mu}{E(\xi, \varphi)} \operatorname{tgh} \frac{E(\xi, \varphi)}{2T} \right],$$

gdzie $E(\xi, \varphi) = \sqrt{(\xi - \mu)^2 + \Delta^2(\xi, \varphi)}$ oraz $i = 0, 1$. Ponadto, na podstawie formuł (2.19)–(2.21), mogą być wyznaczone charakterystyki termodynamiczne rozważanego układu.

Zgodnie z wynikami numerycznymi przedstawionymi na Rysunku 3.2, izotropowe sparowanie typu s może być zrealizowane w przypadku, gdy wartość amplitudy V_0 oddziaływania parującego w kanale izotropowym jest wystarczająco duża w porównaniu z wartością amplitudy V_1 oddziaływania parującego w kanale anizotropowym. W przeciwnym wypadku preferowany jest anizotropowy typ sparowania. Dlatego można wnioskować, że w nadprzewodnikach z płaszczyznami miedziowo-tlenowymi do destabilizacji sparowania typu s nie jest niezbędne duże odpychanie kulombowskie na węzłach (*on-site*), ponieważ dominują człony oddziaływania parującego odpowiedzialne za sparowanie typu d lub p . Ponadto oddziaływanie V_0 przyciągające lub odpychające jest zawsze eliminowane z równania na szczelinę w przypadku sparowania d , g oraz p [49].

3.4 Podsumowanie

Rozwiniętą w rozdziale drugim metodę uogólnionej transformacji konforemnej zastosowano do modelu układu nadprzewodzącego z relacją dyspersyjną uzyskaną w ramach dwuwymiarowego modelu ciasnego wiązania lub dwuwymiarowego modelu t - J oraz z anizotropowym, realizowanym za pośrednictwem bozonów, mechanizmem parującym. Uwzględnienie dodatkowej transformacji przestrzeni pozwoliło na wyznaczenie jądra gęstości stanów $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ w postaci analitycznej dla dowolnych wartości $\eta = 2t_1/t_0$. W przestrzeni (ξ, φ) jako funkcje bazowe reprezentacji nieprzywiedlnych grupy C_{4v} , która jest grupą symetrii rozważanego zagadnienia, wybrano harmoniki fourierowskie. W przeciwieństwie do innych podejść [49, 50, 52] wykorzystany tutaj układ funkcji jest ortonormalny i zupełny, co umożliwia wyrażenie za ich pomocą oddziaływania parującego. Struktura parametru porządku jest wówczas określona przez dominującą składową fourierowską potencjału parującego. Otrzymane wyniki wskazują na fakt, że dla małych wartości parametru η , jak dla dwuwymiarowego modelu ciasnego wiązania, współczynniki odpowiadające składowym z $l = 1$ oraz $l = 2$ są porównywalne. Z kolei w reżimie dużych wartości tego parametru, jak w przypadku dwuwymiarowego modelu t - J odpowiadającego sparowaniu za pośrednictwem magnonów, preferowane jest sparowanie trypletowe o symetrii p .

Rozdział 4

Pewne uniwersalne relacje pomiędzy szczeliną a funkcjami termodynamicznymi

4.1 Równanie na szczelinę

Dla układów dwu- i trójwymiarowych równanie na szczelinę może być zapisane w następującej postaci, stanowiącej uogólnienie równania (2.1),

$$\Delta_{\mathbf{p}} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}'} V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \frac{\Delta_{\mathbf{p}'}}{E_{\mathbf{p}'}} f \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{p}'} - \mu}{T}, \frac{|\Delta_{\mathbf{p}'}}{T} \right), \quad (4.1)$$

gdzie $V_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}$ jest oddziaływaniem parującym, μ oznacza potencjał chemiczny, f jest pewną funkcją analityczną, której własności zdefiniowane zostaną poniżej oraz $E_{\mathbf{p}} = \sqrt{(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)^2 + |\Delta_{\mathbf{p}}|^2}$. Równanie na szczelinę (4.1) wraz z równaniem

$$2n = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{p}} \left[1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{E_{\mathbf{p}}} f \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu}{T}, \frac{|\Delta_{\mathbf{p}}|}{T} \right) \right], \quad (4.2)$$

pozwalającym wyznaczyć potencjał chemiczny (por. równanie (2.2)), stanowi komplet równań opisujących układ. Równanie (4.1), po wykonaniu transformacji konforemnej przestrzeni odwrotnej [32, 33], przyjmuje postać

$$\Delta(\xi, \vartheta, \varphi) = \frac{1}{4\pi^{d-1}} \left\langle \int_{-\omega_d}^{\omega_u} V(\xi, \xi', \vartheta, \vartheta', \varphi, \varphi') \frac{J(\xi', \vartheta', \varphi') \Delta(\xi', \vartheta', \varphi')}{\sqrt{(\xi' - \mu^*)^2 + |\Delta(\xi', \vartheta', \varphi')|^2}} \times f \left(\frac{\xi' - \mu^*}{T}, \frac{|\Delta(\xi', \vartheta', \varphi')|}{T} \right) d\xi' \right\rangle, \quad (4.3)$$

gdzie $d = 2$ lub 3 jest wymiarem przestrzeni odwrotnej, μ^* oznacza potencjał chemiczny mierzony od poziomu Fermiego (tzn. $\mu = \epsilon_F + \mu^*$), natomiast ξ jest energią również mierzoną od poziomu Fermiego. Wartości parametrów ω_d oraz ω_u określają granice całkowania, które w przypadku dostatecznie szerokiego pasma przewodnictwa są równe energii Debye'a ω_D . W przypadku częściowo wypełnionego pasma o szerokości $2\omega_b = \omega_u + \omega_d$, gdy $\omega_b < \omega_D$, powinny być one zastąpione granicami pasma. Wówczas ω_d oraz ω_u mogą być identyfikowane z asymetrycznymi parametrami obciążenia oddziaływania parującego. Ponadto dla wystarczająco wąskiego pasma przewodnictwa, wszystkie cząstki są sparowane. Jeżeli pasmo jest wypełnione prawie w połowie, $n = 1 - \delta$, gdzie wartość δ jest mała, mamy

$$\omega_d = (1 - \delta)\omega_b \quad \text{oraz} \quad \omega_u = (1 + \delta)\omega_b.$$

Zatem, dla pewnych układów nadprzewodzących energia Debye'a ω_D musi zostać zastąpiona przez połowę szerokości pasma ω_b , biorąc pod uwagę wypełnienie pasm. Dlatego, jeżeli oddziaływanie parujące rozciąga się na obszarze scharakteryzowanym wartością ω , gdzie ω oznacza ω_b lub ω_D , można wprowadzić następującą notację

$$\omega_d = n\omega \quad \text{oraz} \quad \omega_u = (2 - n)\omega,$$

gdzie w przypadku symetrycznego oddziaływania parującego, jak np. w modelach typu BCS, należy położyć $n = 1$ oraz $\omega = \omega_D$.

Symbol $\langle \dots \rangle$ we wzorze (4.3) oznacza uśrednienie po kątach sferycznych ϑ' i φ' w przypadku trójwymiarowym lub uśrednienie jedynie po kącie φ' w przypadku dwuwymiarowym, dla którego $\vartheta = \vartheta' = \pi/2$. Ponadto $J(\xi, \vartheta, \varphi)$ jest jakobianem zastosowanej transformacji konformnej. Oddziaływanie parujące dla sparowania czystego typu s , d , \dots może być przyjęte w postaci

$$V(\xi, \xi', \vartheta, \vartheta', \varphi, \varphi') = V_l(\xi, \xi') \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{lm}^*(\vartheta', \varphi'), \quad (4.4)$$

gdzie $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ są harmonikami sferycznymi, $l = 0, 2, \dots$. Przy założeniu, że wyrażenie $V_l(\xi, \xi')$ zawiera tylko przyciągającą część oddziaływania, można je zastąpić przez $g_l v_l(\xi) v_l(\xi')$. Wówczas, dla układów silnie ekranowanych elektronów można przyjąć $v_l(\xi) = 1$, podczas gdy dla silnego odpychania elektronów $v_l(\xi)$ musi być nieparzystą funkcją energii [54–56]. Efektywna wartość stałej

sprężenia g_l powinna być wyznaczona w ramach procedury renormalizacyjnej z uwzględnieniem np. efektów silnego sprężenia i oddziaływania kulombowskiego elektronów tworzących parę Coopera [57]. Szczelina energetyczna uwzględniająca powyższe warunki jest postaci

$$\Delta(\xi, \vartheta, \varphi) = \Delta(T) D_l(\vartheta, \varphi) v_l(\xi), \quad (4.5)$$

gdzie $\Delta(T)$ jest amplitudą szczeliny energetycznej zależną jedynie od temperatury, natomiast

$$D_l(\vartheta, \varphi) = \sum_{m=-l}^l d_m(l) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$$

charakteryzuje przestrzenną strukturę szczeliny na powierzchniach izoenergetycznych. Stałe normalizacyjne $d_m(l)$ dobrane są tak, aby spełniony był warunek $\langle |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \rangle = 1$. Dla większości rozważanych układów funkcja f jest postaci

$$f\left(\frac{\xi - \mu^*}{T}, \frac{|\Delta(\xi, \vartheta, \varphi)|}{T}\right) = \operatorname{tgh} \frac{\sqrt{(\xi - \mu^*)^2 + |\Delta(\xi, \vartheta, \varphi)|^2}}{2T}.$$

Stąd, na podstawie relacji $\operatorname{tgh} \frac{x}{2} = 1 - 2n(x)$, gdzie $n(x)$ jest średnią liczbą obsadzeń, stwierdzamy że funkcja ta dąży do 1 w granicy $T = 0$, podczas gdy dla $\Delta(\xi, \vartheta, \varphi) = 0$ jest $f(x, 0) \sim x$ gdy $x \rightarrow 0$. Uwzględniając równania (4.4) oraz (4.5), równanie na szczelinę (4.3) może być zapisane w postaci

$$\frac{1}{g_l} = \frac{1}{4\pi^{d-1}} \left\langle \int_{-n\omega}^{(2-n)\omega} \frac{J(\xi, \vartheta, \varphi) v_l^2(\xi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2}{\sqrt{(\xi - \mu^*)^2 + v_l^2(\xi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \Delta^2(T)}} \times f\left(\frac{\xi - \mu^*}{T}, \frac{v_l(\xi) |D_l(\vartheta, \varphi)| \Delta(T)}{T}\right) d\xi \right\rangle, \quad (4.6)$$

która pozwala na wyznaczenie amplitudy $\Delta(T)$ dla zadanej struktury szczeliny energetycznej, jeżeli jakobian i funkcje $v_l(\xi)$ oraz f są znane.

Rozpatrzmy przypadek, gdy $v_l(\xi) \equiv 1$ lub $v_l(\xi) \cong v_l = \text{const}$ dla $|\xi - \mu^*|$ mniejszego niż kilka T_c , pasmo przewodnictwa jest wystarczająco szerokie, tak aby $\Delta(0) \ll \omega_b$ oraz gdy potencjał chemiczny jest niezależny od temperatury i równy wartości dla metalu w stanie normalnym w temperaturze $T = 0$ [19]. Wówczas, zmiany $v_l(\xi)$ dla pozostałych wartości $|\xi - \mu^*|$ są zaniedbywalne i równanie (4.2) może być wyeliminowane z dalszych rozważań [58]. W granicy $T = 0$, całkując przez części uśredniane wyrażenie w równaniu (4.6), otrzymujemy

$$\frac{4\pi^{d-1}}{g_l v_l^2} = \left\langle J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \ln[2(2-n)\omega]$$

$$\begin{aligned}
& + \left\langle J(-n\omega, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \ln(2n\omega) \\
& - 2 \left\langle J(0, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \ln(v_l |D_l(\vartheta, \varphi)|) \right\rangle \\
& - \left\langle [J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) + J(-n\omega, \vartheta, \varphi)] |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \ln \Delta(0) \\
& - \left\langle |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \int_{-n\omega/\Delta(0)}^{(2-n)\omega/\Delta(0)} \ln \left[u + \sqrt{u^2 + v_l^2 |D_l(\vartheta, \varphi)|^2} \right] \right. \\
& \quad \left. \times \frac{\partial}{\partial u} J(u\Delta(0), \vartheta, \varphi) du \right\rangle. \tag{4.7}
\end{aligned}$$

Jeżeli całka w równaniu (4.7), w ramach postulowanej dokładności, może być uznana za stałą, równanie to redukuje się do postaci

$$\frac{1}{g_l} = N(n) \ln \frac{A}{\Delta(0)}, \tag{4.8}$$

gdzie $A > 0$ może być uznawane za niezależne od $\Delta(0)$, natomiast wyrażenie

$$N(n) = \frac{v_l^2}{4\pi^{d-1}} \left\langle [J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) + J(-n\omega, \vartheta, \varphi)] |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \tag{4.9}$$

może być rozumiane jako wartość średnia gęstości stanów [33]. Ponieważ otrzymane relacje są spełnione dla dowolnej wartości $\Delta(T)$, mamy

$$N(n) \ln \frac{A}{\Delta(0)} = \frac{1}{4\pi^{d-1}} \left\langle \int_{-n\omega}^{(2-n)\omega} \frac{J(\xi, \vartheta, \varphi) v_l^2(\xi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2}{\sqrt{(\xi - \mu)^2 + v_l^2(\xi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \Delta(T)^2}} d\xi \right\rangle. \tag{4.10}$$

Zatem, odejmując równanie (4.10) od równania (4.6), równanie na szczelinę sprowadza się do postaci

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{A}{\Delta(T)} + F \left(n, \frac{\omega}{T}, \frac{\Delta(T)}{T} \right), \tag{4.11}$$

gdzie $\lambda = g_l N(n)$ jest bezwymiarowym parametrem sprzężenia, F jest funkcjonalem od $\Delta(T)$ otrzymanym w wyniku całkowania po zmiennej ξ oraz kątach ϑ, φ dla zadanej postaci jakobianu, struktury szczeliny energetycznej i funkcji f .

W granicy $T = T_c$, gdy $\Delta(T_c) = 0$, całkując przez części, równanie na szczelinę (4.6) przyjmuje postać

$$\frac{4\pi^{d-1} N(n)}{\lambda v_l^2} = \left\langle J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle f \left(\frac{(2-n)\omega}{T_c} \right) \ln[(2-n)\omega]$$

$$\begin{aligned}
& + \left\langle J(-n\omega, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle f\left(-n\frac{\omega}{T_c}\right) \ln(n\omega) \\
& - \left\langle \left[f\left((2-n)\frac{\omega}{T_c}\right) J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) \right. \right. \\
& \left. \left. + f\left(-n\frac{\omega}{T_c}\right) J(-n\omega, \vartheta, \varphi) \right] |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \ln T_c \\
& - \int_0^{(2-n)\omega/T_c} \ln u \frac{\partial}{\partial u} \left[f(u) \left\langle J(uT_c, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \right] du \\
& - \int_0^{n\omega/T_c} \ln u \frac{\partial}{\partial u} \left[f(-u) \left\langle J(-uT_c, \vartheta, \varphi) |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \right\rangle \right] du \quad (4.12)
\end{aligned}$$

i może być zapisane jako

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{b} \ln \frac{B}{T_c}. \quad (4.13)$$

Parametry B, b są dodatnie i mogą być uważane za niezależne od T_c oraz

$$b = \frac{\langle [J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) + J(-n\omega, \vartheta, \varphi)] |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \rangle}{\langle \left[f\left((2-n)\frac{\omega}{T_c}\right) J((2-n)\omega, \vartheta, \varphi) + f\left(-n\frac{\omega}{T_c}\right) J(-n\omega, \vartheta, \varphi) \right] |D_l(\vartheta, \varphi)|^2 \rangle} \quad (4.14)$$

jest niezależne od v_l . Charakterystyczny stosunek

$$\frac{\Delta(0)}{T_c} = \frac{A}{B} \exp\left(\frac{b-1}{\lambda}\right), \quad (4.15)$$

odmiennie niż w standardowej teorii BCS, nie jest stałą uniwersalną.

4.2 Szczelina energetyczna jako funkcja parametru sprzężenia

Różnica między potencjałami termodynamicznymi fazy nadprzewodzącej i fazy normalnej, która równa jest różnicy energii swobodnych, gdy potencjał chemiczny obydwu faz jest taki sam, może być wyznaczona z relacji [59, 60]

$$\Delta\Omega(T) = -N(n) \int_0^\lambda \frac{\Delta(T)}{(\lambda')^2} d\lambda', \quad (4.16)$$

gdzie wzięto pod uwagę, że $g_l = \lambda/N(n)$. Formuły (4.8) oraz (4.13) pozwalają na wyrażenie wielkości $\Delta(0)$ oraz T_c za pomocą dowolnej wartości λ' zmieniającej się od 0 do λ

$$\Delta_{\lambda'}(0) = A \exp\left(-\frac{1}{\lambda'}\right) \quad \text{oraz} \quad T_{\lambda'} = B \exp\left(-\frac{b}{\lambda'}\right). \quad (4.17)$$

W ramach założonej dokładności można położyć $A = A_1\omega$ oraz $B = B_1\omega$, gdzie A_1, B_1 są stałymi rzeczywistymi. Aby zachować standardową notację, przyjmujemy że $\Delta_\lambda(0) \equiv \Delta(0)$, $T_\lambda \equiv T_c$ oraz $\Delta_\lambda(T) \equiv \Delta(T)$. Zauważmy, że T_c jest malejącą funkcją b , a dla modelu BCS $b = 1$. Ponadto, po eliminacji parametru λ z formuł (4.17), można znaleźć wartość ilorazu (4.15) w funkcji parametru ω

$$\frac{\Delta(0)}{T_c} = A_1 B_1^{-\frac{1}{b}} \left(\frac{\omega}{T_c} \right)^{\frac{b-1}{b}}.$$

Funkcja ta jest rosnąca dla $b > 1$ lub malejąca dla $b < 1$.

Wykorzystując formuły (4.17), różnicę potencjałów termodynamicznych w granicy $T = 0$ wyrazić można w następującej uniwersalnej postaci

$$\Delta\Omega(0) = -\frac{1}{2} N(n)\Delta(0)^2.$$

Aby znaleźć tę różnicę dla niezerowej temperatury, należy wyrazić $\Delta_{\lambda'}(T)$, tj. rozwiązanie równania (4.11) dla λ' zmieniającego się od 0 do λ , przez wartość $\Delta(T')$, gdzie T' może się zmieniać od 0 do T_c . Załóżmy, że dla wszystkich wartości λ' możliwe jest znalezienie wartości szczeliny energetycznej w funkcji zredukowanej temperatury $T/\Delta_{\lambda'}(0)$. Wówczas, określając zredukowaną szczelinę energetyczną jako

$$\Lambda_{\lambda'} \left(\frac{T}{\Delta_{\lambda'}(0)} \right) = \frac{\Delta_{\lambda'} \left(\frac{T}{\Delta_{\lambda'}(0)} \right)}{\Delta_{\lambda'}(0)} \quad (4.18)$$

oraz wykorzystując pierwsze z równań (4.17), równanie na szczelinę (4.11) może zostać przekształcone do postaci

$$\ln \Lambda_{\lambda'} \left(\frac{T}{\Delta_{\lambda'}(0)} \right) = F \left(n, \frac{\omega}{T}, \frac{\Lambda_{\lambda'} \left(\frac{T}{\Delta_{\lambda'}(0)} \right)}{\frac{T}{\Delta_{\lambda'}(0)}} \right). \quad (4.19)$$

Ponieważ równanie (4.19) ma tę samą formę dla wszystkich wartości λ' od 0 do λ przy ustalonych wartościach T , ω i n , wszystkie postaci zredukowanej szczeliny $\Lambda_{\lambda'}(T/\Delta_{\lambda'}(0))$ wyznaczone na podstawie tego równania muszą być równoważne. Stają się one identyczne, gdy temperaturę unormuje się przez odpowiednią wartość temperatury krytycznej oznaczonej jako τ . Ten fakt pozwala wyrazić zredukowaną szczelinę energetyczną wyznaczoną dla dowolnej wartości λ' za pomocą zredukowanej szczeliny energetycznej Λ , tj. wartości $\Lambda_{\lambda'}$ dla $\lambda' = \lambda$, która reprezentuje rzeczywistą szczelinę energetyczną nadprzewodnika

$$\Lambda_{\lambda'} \left(\tau \frac{T_{\lambda'}}{\Delta_{\lambda'}(0)} \right) = \Lambda \left(\tau \frac{T_c}{\Delta(0)} \right).$$

Wartość zredukowanej szczeliny energetycznej $\Lambda_{\lambda'}$ w temperaturze $T/T_{\lambda'}$ może być więc wyrażona za pomocą funkcji Λ jako

$$\Lambda_{\lambda'} \left(\frac{T}{T_{\lambda'}} \right) = \Lambda \left(\frac{T}{T_c} \left(\frac{T_c}{T_{\lambda'}} \right)^2 \frac{\Delta_{\lambda'}(0)}{\Delta(0)} \right).$$

Uwzględnienie równań (4.17) oraz (4.18) prowadzi do następującej istotnej relacji

$$\Delta_{\lambda'} \left(\frac{T}{T_{\lambda'}} \right) = \Delta \left(\frac{T}{T_c} \exp \left[(2b-1) \left(\frac{1}{\lambda'} - \frac{1}{\lambda} \right) \right] \right) \exp \left[- \left(\frac{1}{\lambda'} - \frac{1}{\lambda} \right) \right]. \quad (4.20)$$

Znalezienie wartości szczeliny energetycznej dla $\lambda' < \lambda$ i ustalonej temperatury T wymaga zatem znajomości wartości rzeczywistej szczeliny dla wszystkich wyższych temperatur dla $b > \frac{1}{2}$ lub dla wszystkich niższych temperatur dla $b < \frac{1}{2}$. Dla $b = \frac{1}{2}$ obie zależności temperaturowe koincydują.

4.3 Uniwersalne relacje

Uzyskanie równania (4.20) otwiera nowe możliwości wyznaczenia różnicy potencjałów termodynamicznych oraz jego pochodnych względem temperatury jako funkcjonatów amplitudy szczeliny energetycznej $\Delta(T)$. Podstawiając równanie (4.20) do równania (4.16), po pewnych przekształceniach otrzymujemy formułę określającą różnicę potencjałów termodynamicznych w postaci

$$\Delta\Omega(T) = -\frac{1}{2b-1} N(n) T^{\frac{2}{2b-1}} \int_T^{T_L} \frac{\Delta^2(T')}{(T')^{\frac{2}{2b-1}+1}} dT', \quad (4.21)$$

gdzie $T_L = T_c$ jeżeli $b > \frac{1}{2}$, ponieważ $\Delta(T) = 0$ dla $T \geq T_c$ oraz $T_L = 0$ jeżeli $b < \frac{1}{2}$. Dla $b = \frac{1}{2}$ mamy natomiast

$$\Delta\Omega(T) = -\frac{1}{2} N(n) \Delta^2(T)$$

i w dalszych rozważaniach pomijamy ten przypadek. Wzór (4.21) może być również zapisany w innej równoważnej postaci

$$\begin{aligned} \Delta\Omega(T) = & -\frac{1}{2b-1} N(n) T^{\frac{2}{2b-1}} \int_T^{T_L} \frac{\Delta^2(T') - \Delta^2(T)}{(T')^{\frac{2}{2b-1}+1}} dT' \\ & -\frac{1}{2} N(n) \Delta^2(T) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{\frac{2}{2b-1}} \Theta \left(b - \frac{1}{2} \right) \right], \end{aligned} \quad (4.22)$$

gdzie $\Theta(x)$ jest funkcją schodkową Heaviside'a. Ponieważ

$$\Delta S(T) = -\frac{d}{dT} \Delta\Omega(T) \quad \text{oraz} \quad \Delta C(T) = -T \frac{d^2}{dT^2} \Delta\Omega(T), \quad (4.23)$$

gdzie $\Delta S(T)$ i $\Delta C(T)$ jest odpowiednio różnicą entropii oraz ciepła właściwego faz nadprzewodzącej i normalnej, różniczkując obie strony równości (4.21) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \Delta S(T) = & \frac{2}{(2b-1)^2} N(n) T^{\frac{2}{2b-1}-1} \int_T^{T_L} \frac{\Delta^2(T')}{(T')^{\frac{2}{2b-1}+1}} dT' \\ & - \frac{1}{2b-1} N(n) \frac{\Delta^2(T)}{T} \end{aligned} \quad (4.24)$$

lub równoważnie, na podstawie wzoru (4.22),

$$\begin{aligned} \Delta S(T) = & \frac{2}{(2b-1)^2} N(n) T^{\frac{2}{2b-1}-1} \int_T^{T_L} \frac{\Delta^2(T') - \Delta^2(T)}{(T')^{\frac{2}{2b-1}+1}} dT' \\ & - \frac{1}{2b-1} N(n) \frac{\Delta^2(T)}{T_c} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{2}{2b-1}-1} \Theta\left(b - \frac{1}{2}\right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Z kolei korzystając z drugiej z formuł (4.23), znajdujemy ciepło właściwe

$$\begin{aligned} \Delta C(T) = & \frac{2(3-2b)}{(2b-1)^3} N(n) T^{\frac{2}{2b-1}-1} \int_T^{T_L} \frac{\Delta^2(T')}{(T')^{\frac{2}{2b-1}+1}} dT' \\ & - \frac{3-2b}{(2b-1)^2} N(n) \frac{\Delta^2(T)}{T} - \frac{2}{2b-1} N(n) \Delta(T) \frac{d}{dT} \Delta(T) \end{aligned} \quad (4.26)$$

lub równoważnie, na podstawie wzoru (4.22),

$$\begin{aligned} \Delta C(T) = & \frac{2(3-2b)}{(2b-1)^3} N(n) T^{\frac{2}{2b-1}-1} \int_T^{T_L} \frac{\Delta^2(T') - \Delta^2(T)}{(T')^{\frac{2}{2b-1}+1}} dT' \\ & - \frac{3-2b}{(2b-1)^2} N(n) \frac{\Delta^2(T)}{T_c} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{\frac{2}{2b-1}-1} \Theta\left(b - \frac{1}{2}\right) \\ & - \frac{2}{2b-1} N(n) \Delta(T) \frac{d}{dT} \Delta(T). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Uzyskane wzory zawierają parametr b , który jest dowolną liczbą dodatnią. Zatem, jeżeli określony parametr b , możliwe byłoby znalezienie postaci potencjału termodynamicznego (ewentualnie energii swobodnej), entropii oraz ciepła właściwego na podstawie kształtu zależności $\Delta(T)$. Zauważmy, że dla modeli

typu BCS $b = 1$ i ten przypadek został zbadany szczegółowo [61–64]. Z kolei znajomość zależności $\Delta(T)$ oraz $\Delta C(T)$ pozwala, w ramach przedstawionego formalizmu, na ocenę wartości parametru b . Godnym podkreślenia jest fakt, że w ogólności $N(n)$, czyli zdefiniowana równaniem (4.9) gęstość stanów dla fazy nadprzewodzącej, jest inna od tej zdefiniowanej dla fazy normalnej. Różnica ta może być wyjaśniona jako wynikająca z modyfikacji masy efektywnej [58] i musi być ona uwzględniona we wszystkich funkcjach termodynamicznych dla fazy normalnej, gdy funkcje termodynamiczne dla fazy nadprzewodzącej wyznaczane są ze wzorów (4.24)–(4.27). W pewnych przypadkach [61] uwzględnienie tego faktu pozwala na uniknięcie pewnych niefizycznych wyników jak np. ujemne ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej. Zauważmy jeszcze, że równania (4.24)–(4.27) implikują formalną relację pomiędzy wielkościami $\Delta S(T)$ oraz $\Delta C(T)$ postaci

$$\Delta C(T) = \frac{3 - 2b}{2b - 1} \Delta S(T) - \frac{1}{2b - 1} N(n) \frac{d}{dT} \Delta^2(T). \quad (4.28)$$

Aby znaleźć ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej w granicy niskich temperatur ($T \rightarrow 0$), należy uwzględnić ciepło właściwe fazy normalnej $C_N(T)$, które w ramach przedstawionego formalizmu może być znalezione jako

$$C_N(T) = T \int_0^{\infty} \bar{N}(2Tu) u^2 \cosh^{-2}(u) du, \quad (4.29)$$

gdzie $\bar{N}(2Tu) = \frac{2}{\pi^{d-1}} \langle J(2Tu, \vartheta, \varphi) + J(-2Tu, \vartheta, \varphi) \rangle$ jest inną postacią funkcji gęstości stanów (por. wzór (4.9)). Ponieważ $\bar{N}(2Tu)$ zależy od temperatury, wielkość $C_N(T)$ może okazać się skomplikowaną jej funkcją. Zgodnie z równaniami (4.28) oraz (4.29) ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej może być zapisane w postaci

$$C_S(T) = \frac{3 - 2b}{2b - 1} \Delta S(T) - \frac{2}{2b - 1} N(n) \Delta(0) \frac{d}{dT} \Delta(T) + C_N(T).$$

Zatem formuła określająca ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej może zawierać kilka różnych składników, które w sumie determinują jego zależność temperaturową. W modelu BCS ze sparowaniem typu s lub d ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej jest proporcjonalne jedynie do $d\Delta(T)/dT$, ponieważ dla $b = 1$ wyraz $\Delta S(T)$ jest proporcjonalny do temperatury i jest dokładnie kompensowany przez wartość $C_N(T)$.

Rozważmy obecnie wartość skoku ciepła właściwego w temperaturze krytycznej, $T = T_c$. Załóżmy zatem, że dla $T \rightarrow T_c$, amplituda szczeliny energetycznej $\Delta(T) \rightarrow \Delta(T_c)$ oraz $\Delta(T_c) = 0$ dla przejścia fazowego drugiego rodzaju (ciągłego) lub $\Delta(T_c) > 0$ dla przejścia pierwszego rodzaju (nieciągłego). Ponadto dla $T > T_c$ szczelina energetyczna znika, tj. $\Delta(T) \equiv 0$. Wówczas, skok ciepła właściwego, wyznaczony z równania (4.28) w granicy $T \rightarrow T_c$, wynosi

$$\Delta C(T_c) = \frac{3-2b}{2b-1} \Delta S(T_c) - \frac{2}{2b-1} N(n) \lim_{T \rightarrow T_c} \Delta(T) \frac{d}{dT} \Delta(T).$$

Ponieważ dla ciągłych przejść fazowych $\Delta S(T_c) = 0$, otrzymany wzór odpowiada analogicznej formule dla modeli typu BCS [17, 24, 36].

4.4 Rekonstrukcja szczeliny energetycznej

W poprzednim podrozdziale wykazano, że różnica potencjałów termodynamicznych, entropii i pojemności cieplnych pomiędzy fazą nadprzewodzącą i normalną może być określona na podstawie zależności temperaturowej szczeliny energetycznej. W niniejszym podrozdziale wykażemy, że możliwa jest procedura odwrotna, tzn. zrekonstruowanie amplitudy szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ na podstawie znajomości wartości parametru b oraz różnicy entropii $\Delta S(0)$ w zerowej temperaturze. Korzystając z równań (4.23) oraz (4.28), po pewnych przekształceniach, amplituda szczeliny energetycznej może być wyrażona jako

$$\begin{aligned} \Delta^2(T) &= \Delta^2(0) + \frac{3-2b}{N(n)} T \Delta S(0) \\ &+ \frac{1}{N(n)} \int_0^T \left[(3-2b) \int_0^{T'} \frac{\Delta C(T'')}{T''} dT'' - (2b-1) \Delta C(T') \right] dT'. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Zatem, w przypadkach gdy $C_N(T) \sim T^q$, gdzie zgodnie z prawem Nernsta $q > 0$, równanie (4.30) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \Delta^2(T) &= \Delta^2(0) + \frac{3-2b}{N(n)} T \Delta S(0) - \frac{3-2b-(2b-1)q}{N(n)q(q+1)} T C_N(T) \\ &+ \frac{1}{N(n)} \int_0^T \left[(3-2b) \int_0^{T'} \frac{C_S(T'')}{T''} dT'' - (2b-1) C_S(T') \right] dT', \end{aligned}$$

która dla modeli typu BCS, gdy $\Delta S(0) = 0$ oraz $b = q = 1$, zawiera wyłącznie wyrazy z $C_S(T)$ [62].

4.5 Wartość krytyczna indukcji magnetycznej

Równania otrzymane w podrozdziale 4.3 pozwalają na wyznaczenie wartości krytycznej natężenia pola magnetycznego $H_c(T)$ lub indukcji magnetycznej $B_c(T) = \mu_0 H_c(T)$ oraz ich pochodnych jako funkcjonałów amplitudy szczeliny energetycznej $\Delta(T)$. Na podstawie relacji

$$G_S(T, H = 0) - G_N(T, H = 0) = -\frac{1}{2} \mu_0 H_c^2(T)$$

oraz uwzględniając, że $G_S(T, H = 0) - G_N(T, H = 0) = \Delta\Omega(T)$, gdy potencjał chemiczny jest niezależny od temperatury i identyczny dla obu faz, otrzymujemy wartość krytyczną indukcji magnetycznej

$$B_c(T) = B_c(0) \sqrt{-\frac{2\Delta\Omega(T)}{N(n)\Delta^2(0)}},$$

gdzie $B_c(0) = \sqrt{2\mu_0 N(n)} \Delta(0)$, natomiast różnica potencjałów termodynamicznych dana jest wzorem (4.21) lub (4.22). Wykorzystując relacje (4.23) znajdujemy pochodne

$$\begin{aligned} \frac{dB_c(T)}{dT} &= \sqrt{\frac{\mu_0}{2}} \frac{\Delta S(T)}{\sqrt{-\Delta\Omega(T)}}, \\ \frac{d^2 B_c(T)}{dT^2} &= \sqrt{\frac{\mu_0}{2}} \left[\frac{\Delta C(T)}{T\sqrt{-\Delta\Omega(T)}} - \frac{(\Delta S(T))^2}{(-\Delta\Omega(T))^{\frac{3}{2}}} \right], \end{aligned}$$

które wraz formułami (4.24)–(4.27) powinny być pomocne przy ocenie wartości parametru b dla pewnych niekonwencjonalnych nadprzewodników na podstawie danych eksperymentalnych.

4.6 Uwaga o przypadku McMillana

Formalizm rozwinięty przez McMillana [57], uwzględniający efekty silnego sprzężenia elektron-fonon, dostarcza następującego oszacowania wartości temperatury krytycznej

$$T_c \sim \omega_D \exp\left(-\frac{1 + \lambda}{\lambda - \eta^*(1 + \lambda)}\right), \quad (4.31)$$

gdzie bezwymiarowy parametr η^* charakteryzuje odpychanie kulombowskie pomiędzy elektronami tworzącymi parę Coopera (typowa wartość $\eta^* \simeq 0,13$),

natomiast ω_D jest energią Debye'a stanowiącą parametr obciążenia dla konwencjonalnych nadprzewodników. Zauważmy, że dla $\lambda = \eta^*/(1 - \eta^*) > 0$ wartość temperatury krytycznej $T_c = 0$. Zatem parametr sprzężenia powinien być raczej zdefiniowany jako efektywny parametr sprzężenia, zmieniający się od zera do jego rzeczywistej wartości dla włączonego oddziaływania sprzęgającego. Takim efektywnym parametrem jest $\lambda_{\text{eff}} = a^{-1}[\lambda - \eta^*(1 + \lambda)]$. Podstawiając tę postać do wzoru (4.31) otrzymujemy [13]

$$T_c \sim \omega_D \exp\left(-\frac{1}{1 - \eta^*}\right) \exp\left(-\frac{b}{\lambda_{\text{eff}}}\right),$$

gdzie $b^{-1} = a(1 - \eta^*) > 0$ oraz a jest stałą dodatnią zapewniającą, że $\Delta(0)$ jest postaci (4.17). Zatem, rozwinięty formalizm może być zastosowany również do nadprzewodników typu McMillana.

4.7 Zastosowanie relacji do nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego

Mechanizm nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego oparty na korelacjach antyferromagnetycznych został po raz pierwszy zaproponowany w celu wyjaśnienia antyferromagnetycznego zachowania czystego La_2CuO_4 . Gdy tylko do materiału tego zostaną wprowadzone domieszki, dając kilka procent dziur w płaszczyźnie miedziowo-tlenowej, antyferromagnetyzm ulega zniszczeniu (por. Rysunek 1.2). Ponieważ koncentracja nośników jest zawsze niewielka, nie mogą one ekranować oddziaływania kulombowskiego w węzłach zajmowanych przez miedź. Dlatego elektrony atomów miedzi mogą się przemieszczać, jednak są zawsze przedmiotem silnego oddziaływania na węzłach (*on-site*). Wprowadzenie dodatkowych dziur powoduje, że w dostatecznie niskich temperaturach są one sprzężone oddziaływaniem nadwymiany poprzez atomy tlenu, tworząc pary Coopera [65–70]. Podobna sytuacja ma miejsce w przypadku związku $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$, który jest nieprzewodzącym antyferromagnetykiem. W opisującym ten scenariusz modelu t - J równanie na szczelinę może być otrzymane w postaci (4.1) po przeprowadzeniu linearyzacji typu BCS wyrazu J . Przyjmuje ono wówczas postać

$$\frac{2}{J} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\gamma_{\mathbf{k}}^2}{E_{\mathbf{k}}} \operatorname{tgh} \frac{E_{\mathbf{k}}}{2T}, \quad (4.32)$$

gdzie $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos(k_x a) \pm \cos(k_y a)$ i znak plus (minus) odnosi się to przypadku symetrii s (d) parametru porządku. Zauważmy, że $\gamma_{\mathbf{k}}$ reprezentuje faktoryzowalne oddziaływanie parujące, które deteminuje postać szczeliny energetycznej. Jest ono zatem kompatybilne z postacią oddziaływania założoną w przedstawionym w niniejszym rozdziale formalizmie. W celu wyznaczenia wartości temperatury krytycznej Cyrot *i in.* [19] nałożyli pewne ograniczenia na postać funkcji gęstości stanów, wydzielając w równaniu na szczelinę (4.32) dla $T = T_c$ dwa obszary całkowania: pierwszy, w którym gęstość stanów może być w przybliżeniu uważana za stałą oraz drugi gdzie tangens hiperboliczny może być zastąpiony przez 1. Podkreślając, że rezultat jest prawidłowy jedynie w zakresie koncentracji domieszek $\geq 0,05$, kiedy to parametr porządku ma symetrię typu s , otrzymano formułę określającą temperaturę krytyczną postaci

$$T_c = 1,14 W(\mu) \exp \left[-\frac{1}{JN(\mu)} \right],$$

gdzie $JN(\mu)$ odpowiada bezwymiarowej stałej sprzężenia λ , a wielkość $W(\mu)$ jest proporcjonalna do ω_c (por. wzory (4.13) oraz (4.17)). Ponadto wykazano, że w zerowej temperaturze $\gamma_{\mathbf{k}}(\mu)J\Delta(0) = 1,76 T_c$. Zatem model t - J w ramach podejścia Cyrota *i in.* [19] wykazuje własności modelu typu BCS z $b = 1$.

Aby zastosować uniwersalne relacje znalezione w ramach przedstawionego formalizmu do modelu t - J należy zatem położyć $b = 1$, ponieważ nie zawierają one żadnych innych parametrów. Warty podkreślenia jest fakt, że w zaproponowanej w niniejszym rozdziale metodzie sumowanie po wektorze pędu zastąpione jest przez całkowanie po energii dla, w ogólności, niesymetrycznego oddziaływania parującego zgodnie z metodą transformacji konforemnej [32, 33]. Dlatego też metoda ta jest bardziej precyzyjna (por. podrozdział 2.4) niż przedstawiona powyżej metoda Cyrota *i in.* [19] i przewiduje wartości parametru b różne od 1.

Zauważmy, że trzy wspomniane wyżej zasadnicze założenia implikują następujące fakty: stała gęstości stanów odpowiada stałemu jacobianowi, uwzględnienie symetrycznego oddziaływania parującego jest równoważne położeniu $n = 1$, a dla $\omega = \omega_D$, tak jak dla funkcji tgh, funkcja f może być zastąpiona przez 1. W rezultacie parametr b określony równaniem (4.14) przyjmuje wartość 1.

4.8 Podsumowanie

W ramach zaprezentowanego w niniejszym rozdziale formalizmu, dla szerokiej klasy modeli nadprzewodników znaleziono pewne uniwersalne relacje pomiędzy potencjałem termodynamicznym, entropią oraz ciepłem właściwym a amplitudą szczeliny energetycznej. Formuły (4.26) oraz (4.27), uzyskane uprzednio [61,63,64] dla $b = 1$ i dla uogólnionego przypadku BCS ze sparowaniem typu s uwzględniającego pole magnetyczne i superprądy oraz do przypadku BCS ze sparowaniem typu d , pozwoliły na otrzymanie prawidłowych postaci zależności temperaturowej ciepła właściwego fazy nadprzewodzącej, w których liniowe ze względu na temperaturę wyrazy były dokładnie eliminowane przez wyraz $C_N(T)$. Można się zatem spodziewać, że znalezione uniwersalne relacje znajdą potwierdzenie w eksperymencie i pozwolą na wskazanie wspólnych elementów mechanizmu konwencjonalnego jak i wysokotemperaturowego nadprzewodnictwa. Z drugiej strony podkreślmy, że formalizm ten może być zastosowany do układów spełniających pewne określone warunki: parametr obciążenia znacznie przekracza wartość $\Delta(0)$ (lub $v_l\Delta(0)$), potencjał chemiczny obu faz jest jednakowy oraz oddziaływanie parujące ma postać odpowiadającą modelom typu BCS, co jednak może być zawsze osiągnięte przez linearyzację odpowiedniego członu oddziaływania w hamiltonianie układu.

Rozdział 5

Osobliwa ciecz Fermiego

5.1 Wprowadzenie

W teorii BCS, w ramach której udało się wyjaśnić szereg własności konwencjonalnych nadprzewodników, układ elektronów traktowany jest jako ciecz Fermiego. Jednak materiały nowej generacji, o wysokich temperaturach krytycznych, są skomplikowanymi układami fizycznymi, w których rozmaite korelacje na poziomie mikroskopowym, symetrie, a także zjawiska kolektywne, takie jak fale gęstości ładunku oraz fale gęstości spinu, rywalizują w różnych obszarach ich diagramu fazowego. W fazie normalnej materiały te, w składzie odpowiadającym najwyższej temperaturze krytycznej, okazują się stanowić bardziej złożoną formę cieczy kwantowej niż ciecz Fermiego, należąca do szerokiej klasy cieczy nie-Fermiego [3, 4, 71–73]. W szczególności, dotyczy to nadprzewodników zawierających płaszczyzny miedziowo-tlenowe, w których zaobserwowano pewien rodzaj osobliwej cieczy Fermiego dla domieszkowania odpowiadającego najwyższej temperaturze krytycznej [4].

Teoria Landaua cieczy Fermiego wskazuje na możliwość swojego załamania poprzez niestabilność modów kolektywnych powierzchni Fermiego. Mody te mogą być scharakteryzowane przez moment pędu l oscylacji powierzchni Fermiego odpowiadających bezpośrednio (symetrycznemu ze względu na spin) lub wymiennemu (antysymetrycznemu ze względu na spin) oddziaływaniu typu Fermi-cieczowego (funkcji Landaua). Nieobecność osobliwości w funkcji Landaua jest spójna z warunkami stabilności Pomeranczuka nałożonymi na parametry Landaua. Spełnienie tych warunków, które są postaci $G_l^{s,a} > -1$ oraz

$F_l^{s,a} > -(2l + 1)$ (por. dodatek C), jest niezbędne dla zapewnienia stabilności dwu- i trójwymiarowych układów typu cieczy Fermiego [4, 74–76]. Naruszenie jakiegokolwiek z tych warunków prowadzi do utworzenia osobliwej cieczy Fermiego (cieczy nie-Fermiego). Naruszenie warunków dla $l = 0$ (tzn. $F_0^{s,a} \leq -1$) odpowiada osobliwości w ściślności i podatności spinowej. Pierwsza z nich, w ogólności, realizowana jest przez przejście fazowe pierwszego rodzaju, podczas gdy druga opisuje niestabilność ferromagnetyczną. Mimo, że dotychczas żadne inne niestabilności Landaua–Pomeranczuka nie zostały zidentyfikowane w eksperymencie, to możliwość ich wystąpienia powinna być brana pod uwagę [4]. Zatem nałożenie pewnych warunków na parametry Landaua może prowadzić do utworzenia nowych form cieczy kwantowych (por. dodatki B oraz C).

Wspólną cechą wszystkich diagramów fazowych, wiążących temperaturę krytyczną domieszkowanych nadprzewodników wysokotemperaturowych z poziomem domieszkowania [3, 71, 72], jest obecność, w reżimie poddomieszkowania, dwóch charakterystycznych temperatur — temperatury T^* , w której pojawiają się niespójne fazowo pary Coopera i otwiera się pseudoszczelina oraz temperatury krytycznej T_c , niższej od T^* , w której pary Coopera uzyskują spójność fazową, faza normalna staje się dla układu niekorzystna (w sensie energii swobodnej) i przechodzi on do fazy nadprzewodzącej. W obszarze pseudoszczeliny $T_c < T < T^*$ za pomocą wielu technik spektroskopowych — spektroskopii w podczerwieni, spektroskopii Ramanowskiej oraz techniki ARPES (*angle-resolved photoemission spectroscopy*) — obserwuje się rozmaite anomalie, wskazujące na fakt, że nadprzewodnictwo nie znika całkowicie w temperaturze T_c , ale niektóre jego cechy występują również powyżej temperatury krytycznej.

W niniejszym rozdziale przedstawiono analizę modelu osobliwej cieczy Fermiego z rozbieżną amplitudą rozpraszania dla cząstek (dziur lub elektronów) o takim samym pędzie [58, 77, 78]. W celu uproszczenia notacji zastosowano układ jednostek, w którym stała Diraca \hbar , stała Boltzmannna k_B oraz prędkość światła w próżni są równe jedności.

5.2 Hamiltonian

Oddziaływanie w przestrzeni rzeczywistej w quasi-dwuwymiarowym modelu cieczy kwantowej, gdzie za parowanie cząstek odpowiedzialne są np. oddziały-

wania dziura-bozon w kanale ładunkowym, może być zapisane w postaci [79]

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} V(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{j,-\sigma}, \quad (5.1)$$

gdzie \mathbf{R}_i jest współrzędną i -tego węzła sieci. Przyjmując jednostkowe stałe sieciowe ($a_x = a_y = 1$), potencjał $V(\mathbf{r})$ może być przedstawiony w postaci

$$V(\mathbf{r}) = V_L - V_0 \delta(\mathbf{r}) - V_1 \delta(|\mathbf{r}| - 1). \quad (5.2)$$

Wyraz V_L odpowiedzialny jest za długozasięgowe, jednorodne, odpychające oddziaływanie między cząstkami o przeciwnych spinach σ oraz $-\sigma$ na obszarze o powierzchni S , $V_0 \geq 0$ jest oddziaływaniem na węzłach (*on-site*), a $V_1 \geq 0$ oznacza oddziaływanie najbliższych sąsiadów. Wówczas pierwszy wyraz w hamiltonianie (5.1) z potencjałem (5.2) może być przepisany w postaci

$$\frac{1}{2} S V_L \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \frac{1}{S} \sum_j \hat{n}_{j,-\sigma},$$

gdzie, z uwagi na przybliżenie pola molekularnego, $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = \frac{1}{S} \sum_j \hat{n}_{j,-\sigma}$ odpowiada średniej liczbie cząstek ze spinem $-\sigma$ oddziałujących z inną cząstką o spinie σ . Takie oddziaływanie preferuje ferromagnetyczne ułożenie spinów dla każdej pary cząstek na każdym węźle. Zatem, ze względu na zakaz Pauliego, każdy węzeł może być zajęty przez zaledwie jedną cząstkę z określonym spinem, co odpowiada modelowi cieczy spinowej [80–93]. Oddziaływanie (5.2) przetransformowane do przestrzeni odwrotnej przyjmuje postać

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = R_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} - V_0 - V_1 [\cos(k_1 - k'_1) + \cos(k_2 - k'_2)],$$

gdzie $R_{\mathbf{k}} = V_L$. Ponieważ pierwszy wyraz dyskryminuje energetycznie obsadzenie stanów o tym samym pędzie, w granicy $R_{\mathbf{k}} \rightarrow \infty$ otrzymujemy model osobliwej cieczy Fermiego. W zależności od relacji między wielkościami V_0 oraz V_1 realizowany jest stan o symetrii typu s ($V_0 \gg V_1$) lub d ($V_1 \gg V_0$) (por. Tabela 3.2).

Osobliwa ciecz Fermiego jest zatem scharakteryzowana przez efektywny hamiltonian

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + \sum_{\mathbf{k}} R_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} - \eta \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \zeta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (5.3)$$

gdzie operator $\hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ kreuje cząstkę w stanie $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$, a $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\sigma}$ jest operatorem liczby obsadzeń tego stanu. Hamiltonian (5.3) dla szczególnej postaci relacji dyspersyjnej $\epsilon_{\mathbf{k}}$ (uzyskanej np. w ramach modelu ciasnego wiązania) oraz separowalnego potencjału parującego $\eta\zeta_{\mathbf{k}}\zeta_{\mathbf{k}'}$ może opisywać układ ze sparowaniem typu s lub d odpowiadający modelowi Hubbarda lub przybliżeniu typu BCS.

5.3 Metoda Bogolubowa

Własności modelu osobliwej cieczy Fermiego mogą być kompleksowo zbadane w formalizmie metody Bogolubowa dla wielkiego zespołu kanonicznego [94, 95]. Zauważmy, że efektywny hamiltonian (5.3) może być zapisany w postaci

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\mathbf{k}}' \hat{\kappa}_{\mathbf{k}} + \eta \langle \hat{B} \rangle^2 - \eta (\hat{B}^\dagger - \langle \hat{B} \rangle) (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle), \quad (5.4)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \hat{\kappa}_{\mathbf{k}} &= (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) + R_{\mathbf{k}}(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow}\hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) \\ &\quad - \eta \langle \hat{B} \rangle \zeta_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{a}_{\mathbf{k}\downarrow} \hat{a}_{-\mathbf{k}\uparrow}), \\ \hat{B} &= \sum_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}} \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Ze względu na fakt, że $\hat{\kappa}_{\mathbf{k}} = \hat{\kappa}_{-\mathbf{k}}$, oznaczone primem sumowanie w wyrażeniu (5.4) przebiega połowę przestrzeni odwrotnej. Zgodnie z metodą Bogolubowa szczelina energetyczna (parametr porządku) zdefiniowana jest jako

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \eta \langle \hat{B} \rangle \zeta_{\mathbf{k}}, \quad (5.6)$$

gdzie $\langle \dots \rangle$ oznacza samouzgodnioną średnią termodynamiczną. Oznaczając zależną jedynie od temperatury, izotropową amplitudę szczeliny energetycznej jako $\Delta(T) = \eta \langle \hat{B} \rangle$, parametr porządku dla modeli typu BCS oraz Hubbarda przyjmuje odpowiednio postać $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(T)$ oraz $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(T) \zeta_{\mathbf{k}}$.

Metoda Bogolubowa oparta jest na konstrukcji hamiltonianu aproksymacyjnego [94, 95]

$$\hat{\mathcal{H}}^0 = \sum_{\mathbf{k}}' \hat{\kappa}_{\mathbf{k}} + \eta \langle \hat{B} \rangle^2, \quad (5.7)$$

któremu odpowiada potencjał termodynamiczny

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z + \eta \langle \hat{B} \rangle^2, \quad (5.8)$$

gdzie $\beta^{-1} = T$. Ze względu na fakt, że $[\hat{\kappa}_{\mathbf{k}}, \hat{\kappa}_{\mathbf{k}'}]_- = 0$, suma statystyczna

$$Z = \text{Tr} \exp \left(-\beta \sum_{\mathbf{k}} \hat{\kappa}_{\mathbf{k}} \right)$$

może być, na mocy twierdzenia Bakera-Hausdorffa, zapisana w postaci

$$Z = \prod'_{\mathbf{k}} \text{Tr} \exp(-\beta \hat{\kappa}_{\mathbf{k}}). \quad (5.9)$$

Metoda Bogolubowa zapewnia, że potencjał termodynamiczny odpowiadający hamiltonianowi aproksymacyjnemu (5.7), w granicy termodynamicznej ($N, V \rightarrow \infty$ oraz $N/V = \text{const}$) dąży do potencjału termodynamicznego odpowiadającego efektywnemu hamiltonianowi (5.3), o ile parametr $\langle \hat{B} \rangle$ wybrany jest tak, że minimalizuje potencjał termodynamiczny (5.8). Parametr $\langle \hat{B} \rangle$ uwzględniony zatem w sposób samozugodniony

$$\langle \hat{B} \rangle = \frac{\text{Tr} \hat{B} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}^0}}{\text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}^0}},$$

tj. jako średnia termodynamiczna z hamiltonianem aproksymacyjnym, spełnia ten warunek.

5.4 Suma statystyczna

Składnik hamiltonianu $\hat{\kappa}_{\mathbf{k}}$, zdefiniowany równaniem (5.5), zawiera jednocześnie operatory działające na stany o pędzie \mathbf{k} oraz $-\mathbf{k}$. Operuje on zatem w 16-wymiarowej przestrzeni stanów podwójnych

$$\psi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = \left| \begin{array}{c} \mathbf{k}, \quad \sigma \\ -\mathbf{k}, \quad \sigma' \end{array} \right\rangle, \quad (5.10)$$

gdzie $\sigma, \sigma' = 0, \uparrow, \downarrow$ lub $\uparrow\downarrow$ a jego elementy macierzowe wyznaczone w bazie (5.10) przedstawiono w Tabeli (5.1). Aby znaleźć wartości i wektory własne hamiltonianu (5.5) a następnie sumę statystyczną (5.9) oraz potencjał termodynamiczny (5.8), należy rozwiązać równanie wiekowe dla macierzy z Tabeli 5.1. W ogólnym przypadku, gdy $R_{\mathbf{k}} > 0$, 16-wymiarowa przestrzeń rozpada się na następujące podprzestrzenie niezmiennicze: cztery podprzestrzenie jednowymiarowe, cztery podprzestrzenie dwuwymiarowe oraz jedną podprzestrzeń

czterowymiarową [96]. Jednakże, w przypadku gdy $R_{\mathbf{k}} \rightarrow \infty$, dominują diagonalne elementy macierzowe dla siedmiu stanów z co najmniej jedną, podwójnie obsadzoną konfiguracją singletową

$$\psi_{\uparrow\downarrow\sigma'}(\mathbf{k}) = \left| \begin{array}{c} \mathbf{k}, \uparrow\downarrow \\ -\mathbf{k}, \sigma' \end{array} \right\rangle, \quad \psi_{\sigma\uparrow\downarrow}(\mathbf{k}) = \left| \begin{array}{c} \mathbf{k}, \sigma \\ -\mathbf{k}, \uparrow\downarrow \end{array} \right\rangle, \quad (5.11)$$

gdzie $\sigma, \sigma' = 0, \uparrow, \downarrow$ lub $\uparrow\downarrow$. Dominujące elementy diagonalne mogą być zatem uważane za wartości własne, a odpowiadające im stany podwójne za wektory własne hamiltonianu (5.5). Ponieważ wartości te dążą do nieskończoności, nie dają one wkładu do sumy statystycznej, zatem odpowiadające im stany można wyeliminować i ograniczyć rozważania do 9-wymiarowej przestrzeni z bazą (5.10), gdzie $\sigma, \sigma' = 0, \uparrow$ lub \downarrow . Konsekwentnie, działający w tej przestrzeni hamiltonian $\hat{\kappa}_{\mathbf{k}}$ jest postaci

$$\begin{aligned} \hat{\kappa}_{\mathbf{k}} = & (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) \\ & - \Delta_{\mathbf{k}}(\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (5.12)$$

gdzie uwzględniono definicję (5.6). Elementy macierzowe hamiltonianu (5.12) przedstawia Tabela 5.2.

Przeprowadzona analiza prowadzi do wniosku, że w przypadku osobliwej cieczy Fermiego z silnym oddziaływaniem dyskryminującym podwójne obsadzenia stanów Blocha, stan układu jest realizowany w zredukowanej (9-wymiarowej) przestrzeni Focka.

	0,0	$\uparrow,0$	$\downarrow,0$	$\uparrow\downarrow,0$	0, \uparrow	\uparrow,\uparrow	\downarrow,\uparrow	$\uparrow\downarrow,\uparrow$	0, \downarrow	\uparrow,\downarrow	\downarrow,\downarrow	$\uparrow\downarrow,\downarrow$	0, $\uparrow\downarrow$	$\uparrow,\uparrow\downarrow$	$\downarrow,\uparrow\downarrow$	$\uparrow\downarrow,\uparrow\downarrow$
0,0	0						$-\Delta_{\mathbf{k}}$			$-\Delta_{\mathbf{k}}$						
$\uparrow,0$		$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$						$-\Delta_{\mathbf{k}}$								
$\downarrow,0$			$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$									$-\Delta_{\mathbf{k}}$				
$\uparrow\downarrow,0$				$R_{\mathbf{k}} + 2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$												
0, \uparrow					$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$									$-\Delta_{\mathbf{k}}$		
\uparrow,\uparrow						$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$										
\downarrow,\uparrow	$-\Delta_{\mathbf{k}}$						$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$									$-\Delta_{\mathbf{k}}$
$\uparrow\downarrow,\uparrow$		$-\Delta_{\mathbf{k}}$						$R_{\mathbf{k}} + 3\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$								
0, \downarrow									$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$						$-\Delta_{\mathbf{k}}$	
\uparrow,\downarrow	$-\Delta_{\mathbf{k}}$									$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$						$-\Delta_{\mathbf{k}}$
\downarrow,\downarrow											$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$					
$\uparrow\downarrow,\downarrow$			$-\Delta_{\mathbf{k}}$									$R_{\mathbf{k}} + 3\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$				
0, $\uparrow\downarrow$													$R_{\mathbf{k}} + 2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$			
$\uparrow,\uparrow\downarrow$					$-\Delta_{\mathbf{k}}$									$R_{\mathbf{k}} + 3\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$		
$\downarrow,\uparrow\downarrow$								$-\Delta_{\mathbf{k}}$							$R_{\mathbf{k}} + 3\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	
$\uparrow\downarrow,\uparrow\downarrow$							$-\Delta_{\mathbf{k}}$		$-\Delta_{\mathbf{k}}$		$-\Delta_{\mathbf{k}}$					$2R_{\mathbf{k}} + 4\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$

Tabela 5.1: Elementy macierzowe hamiltonianu (5.5) w pełnej, 16-wymiarowej przestrzeni stanów podwójnych; pominięto zerowe elementy pozadiagonalne. Oznaczenie: $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ [58, 77].

	0,0	↑,0	↓,0	0,↑	↑,↑	↓,↑	0,↓	↑,↓	↓,↓
0,0	0					$-\Delta_{\mathbf{k}}$		$-\Delta_{\mathbf{k}}$	
↑,0		$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$							
↓,0			$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$						
0,↑				$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$					
↑,↑					$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$				
↓,↑	$-\Delta_{\mathbf{k}}$					$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$			
0,↓							$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$		
↑,↓	$-\Delta_{\mathbf{k}}$							$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	
↓,↓									$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$

Tabela 5.2: Elementy macierzowe hamiltonianu (5.12) w zredukowanej, 9-wymiarowej przestrzeni stanów podwójnych; pominięto zerowe elementy pozadiagonalne [58, 77].

5.4.1 Faza normalna

Dla fazy normalnej, tj. gdy $\eta = 0$ (oraz konsekwentnie $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$), rozważania mogą być ograniczone do 3-wymiarowej przestrzeni, której bazę stanowią stany pojedyncze $|\mathbf{k}, \sigma\rangle$, gdzie $\sigma = 0, \downarrow$ lub \uparrow . Wówczas suma statystyczna dla fazy normalnej osobliwej cieczy Fermiego wyraża się wzorem

$$Z_N = \prod_{\mathbf{k}} (1 + 2e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}) = \prod_{\mathbf{k}} 2 \cosh \left[\frac{1}{2}\beta \left(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{\beta} \ln 2 \right) \right] e^{\frac{1}{2}\beta(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \frac{1}{\beta} \ln 2)}. \quad (5.13)$$

5.4.2 Faza nadprzewodząca

Diagonalizując hamiltonian (5.12) w zredukowanej, 9-wymiarowej przestrzeni stanów z wykluczonymi, podwójnie obsadzonymi konfiguracjami, znajdujemy stan podstawowy

$$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}^*}} \psi_{00}(\mathbf{k}) - \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$$

o energii $\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$, gdzie $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + 2\Delta_{\mathbf{k}}^2}$ oraz pozostałe wartości i wektory własne (por. Tabela 5.3). Znajomość wartości własnych pozwala obliczyć sumę

wartość własna	wektor własny
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$	$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \psi_{00}(\mathbf{k}) - \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{\uparrow 0}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{\downarrow 0}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{0\uparrow}(\mathbf{k})$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}$	$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \psi_{00}(\mathbf{k}) + \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{0\downarrow}(\mathbf{k})$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\frac{\sqrt{2}}{2} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})$

Tabela 5.3: Wartości i wektory własne hamiltonianu (5.5) w 9-wymiarowej przestrzeni stanów podwójnych [58, 77].

statystyczną dla fazy nadprzewodzącej osobliwej cieczy Fermiego

$$Z_S = \prod_{\mathbf{k}} \left[(4 + 3e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}}) e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.14)$$

5.5 Termodynamika

Charakterystyki termodynamiczne modelu mogą być znalezione z postaci energii swobodnej wyznaczonej na podstawie potencjału termodynamicznego (5.8). Układ o liczbie cząstek N , w ustalonej temperaturze T , znajduje się w równowadze, jeżeli energia swobodna $F = \Omega + \mu N$ osiąga minimum. W fazie nadprzewodzącej energia swobodna zależy od parametru $\langle \hat{B} \rangle$ oraz potencjału chemicznego μ , który jest funkcją temperatury. Warunek równowagi implikuje

$$\frac{\partial \Omega(\mu, \langle \hat{B} \rangle)}{\partial \mu} + N = 0 \quad \text{oraz} \quad \frac{\partial \Omega(\mu, \langle \hat{B} \rangle)}{\partial \langle \hat{B} \rangle} = 0.$$

Z pierwszego równania wynika, że średnia liczba (koncentracja) cząstek w układzie

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln Z \quad (5.15)$$

musi być stała $\langle N \rangle = N$ i niezależna od temperatury. Ponadto w dalszych rozważaniach, bez straty ogólności, przyjmujemy potencjał chemiczny w postaci

$\mu(T) = -\frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T)$. Z kolei, dla fazy nadprzewodzącej, z drugiego równania oraz definicji (5.6) otrzymujemy równanie na szczelinę postaci

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \frac{\zeta_{\mathbf{k}}}{2\beta} \frac{\partial}{\partial \langle \hat{B} \rangle} \ln Z. \quad (5.16)$$

Dla układów typu osobliwej cieczy Fermiego znajdujących się w fazie nadprzewodzącej, zależny od temperatury potencjał chemiczny $\mu_S(T)$ oraz amplituda szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ muszą być wyznaczone z równań (5.15) oraz (5.16) równocześnie, w sposób samouzgodniony.

5.5.1 Faza normalna

Korzystając z formuł (5.13) oraz (5.15) oraz związku między potencjałem termodynamicznym (5.8) a energią swobodną, wyznaczamy koncentrację cząstek

$$N = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - \operatorname{tgh} \left(\frac{1}{2} (\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \ln 2) \right) \right]. \quad (5.17)$$

oraz energię swobodną

$$F_N(T) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left[1 + 2e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_N(T))} \right] + \mu_N(T)N. \quad (5.18)$$

dla fazy normalnej.

5.5.2 Faza nadprzewodząca

Z kolei równania (5.14) oraz (5.15) pozwalają obliczyć koncentrację cząstek w fazie nadprzewodzącej

$$N = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} \left[1 - \frac{-3e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \frac{\tilde{\zeta}_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \sinh \beta E_{\mathbf{k}}}{4 + 3e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}}} \right]. \quad (5.19)$$

Równanie na szczelinę w przypadku sparowania o symetrii typu s lub d uzyskane ze wzorów (5.14) oraz (5.16) jest postaci

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \eta \zeta_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\zeta_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} \frac{\sinh \beta E_{\mathbf{k}'}}{4 + 3e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}'}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}'}}. \quad (5.20)$$

W przypadku sparowania o symetrii s dla modelu typu BCS oraz typu Hubbarda sprowadza się ono odpowiednio do postaci

$$\Delta(T) = \lambda \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\Delta(T)}{E} \frac{\sinh \beta E}{4 + 3e^{-\beta(\xi - \mu_S(T))} + 2 \cosh \beta E}, \quad (5.21)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{4}{U} \epsilon_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}'} \Delta_{\mathbf{k}'}}{E_{\mathbf{k}'}} \frac{\sinh \beta E_{\mathbf{k}'}}{4 + 3e^{-\beta \epsilon_{\mathbf{k}'}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}'}}. \quad (5.22)$$

Podkreślmy, że równanie na szczelinę (5.21), gdzie $\lambda = \eta \zeta_{\mathbf{k}} \zeta_{\mathbf{k}'}$ jest bezwymiarowym parametrem sprzężenia w faktoryzowalnym oddziaływaniu typu BCS, $\epsilon_{\mathbf{k}} = v_{\text{F}}(|\mathbf{k}| - k_{\text{F}}) = \xi$, oraz $E = \sqrt{(\xi - \mu_{\text{S}}(T))^2 + 2\Delta^2(T)}$, zawiera zarówno amplitudę szczeliny energetycznej jak i potencjał chemiczny. Zatem wielkości te nie mogą być wyznaczane niezależnie, ale obydwie równania (5.19) oraz (5.20) je określające, muszą być rozwiązywane równocześnie, w sposób samouzgodniony. Ze względu na zależność potencjału chemicznego od temperatury, równanie na szczelinę jest istotnie modyfikowane w całym zakresie temperatur. Zatem rozważania, w których kładzie się $\mu_{\text{S}}(T) \equiv 0$ dają prawidłowe wyniki jedynie dla $T = 0$ [96].

Korzystając z postaci sumy statystycznej (5.14) znajdujemy formułę określającą energię swobodną fazy nadprzewodzącej

$$F_{\text{S}}(T) = -\frac{1}{2\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln \left(4 + 3e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\text{S}}(T))} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}} \right) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu_{\text{S}}(T)) + \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^2}{\eta \zeta_{\mathbf{k}}^2} + \mu_{\text{S}}(T)N. \quad (5.23)$$

5.6 Rezultaty dla osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s

W celu zilustrowania najistotniejszych własności układu typu osobliwej cieczy Fermiego oraz zbadania charakteru przejścia fazowego między fazą nadprzewodzącą a normalną rozważymy model ze sparowaniem o symetrii typu s. Zakładamy, że pasmo przewodnictwa jest niemal w połowie wypełnione, a oddziaływanie parujące pokrywa całe pasmo nośników ładunków, tak że parametry obciążenia oddziaływania parującego są określone przez granice pasma $-\omega$ oraz ω (por. podrozdział 4.1). Przy przejściu od sumowania po wektorze pędu do całkowania po energii cząstki, we wszystkich formułach stosujemy rozszerzony scenariusz Van Hove'a (por. rozdział 2). Ponieważ rozważamy układ z czystym, izotropowym sparowaniem typu s, zamiast funkcji jądra gęstości stanów we wszystkich obliczeniach możemy posługiwać się jej wartością średnią, czyli funkcją gęstości stanów postaci $N(\xi) = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \mathcal{K}(\xi, \varphi)$. Ponadto przyjmujemy

założenie, że zmiany gęstości stanów w obszarze całego pasma są zaniedbywalne, tzn. $N(\xi) \approx N(0)$.

5.6.1 Faza normalna

Analizując równanie (5.17) znajdujemy $\Upsilon(T) = 2$, tzn. $\mu_N(T) = -\frac{1}{\beta} \ln 2$. Ponadto, stosując rozszerzony scenariusz Van Hove'a, ze wzoru (5.18) otrzymujemy formułę

$$F_N(T) = -\frac{2}{\beta} N(0) \int_0^\omega \ln(1 + e^{-\beta\xi}) d\xi - \frac{1}{2} N(0)\omega^2 - \frac{1}{\beta} N(0)\omega \ln 2, \quad (5.24)$$

określającą energię swobodną fazy normalnej. Ze wzoru (5.24) wynika, że entropia resztkowa osobliwej cieczy Fermiego $S_N(0) = N \ln 2$, w przeciwieństwie do przypadku cieczy Fermiego, gdy $S_N(0) = 0$. Zauważmy, że przy obecności entropii resztkowej energia swobodna maleje ze wzrostem temperatury.

5.6.2 Faza nadprzewodząca

Korzystając z warunku stałości średniej liczby cząstek, równań (5.14) oraz (5.15), a także relacji $\frac{\partial}{\partial\mu}(\xi - \mu) = -\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi - \mu)$ otrzymujemy równanie

$$0 = -\frac{1}{2\beta} N(0) \int_{-\omega}^\omega \frac{\partial}{\partial\xi} \ln \left[4 + \frac{3}{\Upsilon(T)} e^{-\beta\xi} + 2 \cosh \beta E \right] d\xi.$$

Formułę tę można zapisać w zwartej postaci

$$\Upsilon(T)^{1+\frac{\omega}{\Sigma}} - \Upsilon(T)^{1-\frac{\omega}{\Sigma}} = 3 \frac{\sinh \beta\omega}{\sinh \beta\Sigma}, \quad (5.25)$$

gdzie $\Sigma = \frac{1}{2} \left[\sqrt{(\omega + \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T))^2 + 2\Delta^2(T)} + \sqrt{(\omega - \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T))^2 + 2\Delta^2(T)} \right]$. Z równania (5.25) wynika, że $\Upsilon(T) = 2$, gdy $\Delta(T) = 0$ oraz $\Upsilon(0) = 1$, jeżeli $\Delta(0) > 0$.

Równanie na szczelinę (5.21), w którym przejścia od sumowania po wektorze pędu do całkowania po energii dokonano zgodnie z rozszerzonym scenariuszem Van Hove'a, uwzględniając ponadto warunek $N(\xi) \approx N(0)$, jest postaci

$$1 = \lambda N(0) \int_{-\omega}^\omega \frac{\sinh \beta E}{4 + \frac{3}{\Upsilon(T)} e^{-\beta\xi} + 2 \cosh \beta E} \frac{d\xi}{E}, \quad (5.26)$$

gdzie $E = \sqrt{\left(\xi + \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T)\right)^2 + 2\Delta^2(T)}$. Parametr sprzężenia λ eliminuje się w standardowy sposób, wykorzystując postać równania na szczelinę dla $T = 0$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{N(0)}{2\Delta^2(0)} \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + 2\Delta^2(0)}}.$$

Faza nadprzewodząca osobliwej cieczy Fermiego jest w sposób pełny scharakteryzowana przez dwie, wyznaczone w sposób samouzgodniony, wielkości: potencjał chemiczny oraz szczelinę energetyczną. Jednak aby stwierdzić, że faza nadprzewodząca jest fazą stabilną realizowaną przez układ, należy porównać jej energię swobodną

$$\begin{aligned} F_S(T) = & -\frac{1}{2\beta} N(0) \int_{-\omega}^{\omega} \ln \left(1 + 4e^{-\beta E} + \frac{3}{\Upsilon(T)} e^{-\beta(E+\xi)} + e^{-2\beta E} \right) d\xi \\ & -\frac{1}{4} N(0) \left(\omega + \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) \right) \sqrt{\left(\omega + \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) \right)^2 + 2\Delta^2(T)} \\ & -\frac{1}{4} N(0) \left(\omega - \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) \right) \sqrt{\left(\omega - \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) \right)^2 + 2\Delta^2(T)} \\ & -N(0)\Delta^2(T) \ln \left\{ \frac{\Delta(0)}{\Delta(T) \left(\omega + \sqrt{\omega^2 + 2\Delta^2(0)} \right)} \right. \\ & \times \left[\omega + \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) + \sqrt{\left(\omega + \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) \right)^2 + 2\Delta^2(T)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ & \left. \times \left[\omega - \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) + \sqrt{\left(\omega - \frac{1}{\beta} \ln \Upsilon(T) \right)^2 + 2\Delta^2(T)} \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (5.27) \end{aligned}$$

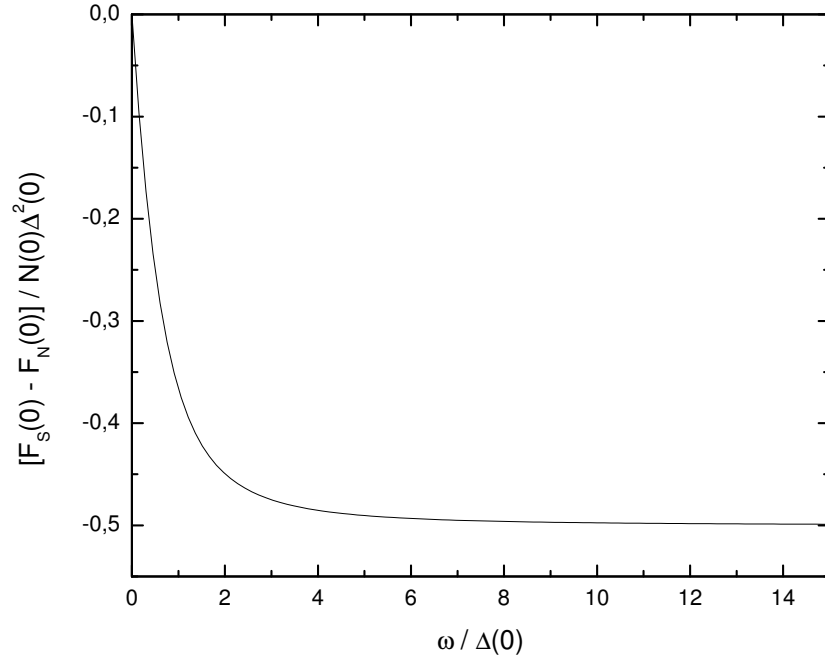
wyznaczoną na podstawie formuły (5.23), z energią swobodną fazy normalnej (5.24). W zerowej temperaturze wzór (5.27) można przekształcić do postaci

$$F_S(0) = -\frac{1}{2} N(0)\omega\sqrt{\omega^2 + 2\Delta^2(0)}.$$

Uwzględniając ponadto postać energii swobodnej fazy normalnej (5.24), znajdujemy różnicę energii swobodnych obydwu faz dla $T = 0$

$$F_S(0) - F_N(0) = -\frac{1}{2} N(0) \left(\omega\sqrt{\omega^2 + 2\Delta^2(0)} - \omega^2 \right), \quad (5.28)$$

której wykres w zależności od szerokości pasma przewodnictwa przedstawia Rysunek 5.1. W przypadku szerokiego pasma przewodnictwa, tj. w granicy dużych



Rysunek 5.1: Różnica energii swobodnych fazy nadprzewodzącej oraz fazy normalnej (5.28) dla osobliwej cieczy Fermiego w temperaturze $T = 0$ w zależności od szerokości pasma przewodnictwa.

wartości parametru $\omega \gg \Delta(0)$, otrzymujemy

$$F_S(0) - F_N(0) = -\frac{1}{2} N(0)\Delta^2(0),$$

tzn. wynik jak dla standardowego modelu BCS.

Chociaż przedstawiony formalizm, wykorzystujący metodę Bogolubowa, pozwala na wyznaczenie w sposób kompletny postaci energii swobodnej fazy normalnej i fazy nadprzewodzącej, w wielu innych podejściach różnica energii swobodnych obydwu faz $\Delta F(T) = F_S(T) - F_N(T)$ jest odtwarzana z postaci szczeliny energetycznej [97] (por. podrozdział 4.3). Jeżeli potencjały chemiczne obydwu faz są jednakowe, to $\Delta F(T) = \Delta\Omega(T)$, a różnice entropii i ciepła właściwego mogą być wyznaczone jako

$$\Delta S(T) = -\frac{d\Delta\Omega(T)}{dT}, \quad \Delta C(T) = -T \frac{d^2\Delta\Omega(T)}{dT^2}. \quad (5.29)$$

Jednakże, jeżeli potencjały chemiczne obydwu faz różnią się, wówczas $\Delta\Omega(T) \neq \Delta F(T)$ i $\Delta S(T)$ oraz $\Delta C(T)$ należy wyznaczać wyłącznie na podstawie różnicy

energii swobodnych. W granicy dużych wartości parametru ω mamy [97]

$$\Delta F(T) = \int_0^\lambda \Delta^2(T) \frac{d}{d\lambda'} \frac{1}{\lambda'} d\lambda' - \frac{1}{2} N(0) \left[T \ln \frac{1}{2} \Upsilon(T) \right]^2. \quad (5.30)$$

Zatem wyrażenia określające entropię oraz ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej zawierają dodatkowe człony opisujące wkład potencjału chemicznego. Gdy w innych modelach funkcja Υ jest prawie niezależna od temperatury, wkład do ciepła właściwego fazy nadprzewodzącej pochodzący od ostatniego wyrazu we wzorze (5.30) jest równy $N(0)T \left(\ln \frac{1}{2} \Upsilon \right)^2$. Ponieważ ciepło właściwe fazy normalnej $C_N(T) = \frac{\pi^2}{3} N(0)T$, to można przyjąć, że zmiana potencjału chemicznego w fazie nadprzewodzącej odpowiada zmianie masy efektywnej w fazie normalnej, zgodnie z relacją $\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{3}{\pi^2} \left(\ln \frac{1}{2} \Upsilon \right)^2$ [25]. Wówczas ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej można wyznaczyć obliczając jedynie całkę we wzorze (5.30). Z kolei, w przypadku dyskutowanej w niniejszym podrozdziale osobliwej cieczy Fermiego, ostatni wyraz we wzorze (5.30) może być przybliżony wyrażeniem $-\frac{1}{2} N(0)(T \ln 2)^2$. Zatem odpowiadający mu wkład do ciepła właściwego wynosi $N(0)T(\ln 2)^2$, co stanowi $0,146C_N(T)$. Pominięcie tego wyrażenia w obliczeniach prowadzi do ujemnych wartości ciepła właściwego wyznaczanego z postaci szczeliny energetycznej, które powinny być zinterpretowane jako niestabilność układu. Rozpatrywany w literaturze model [96], w którym potencjał chemiczny obydwu faz położono równy zero wykazuje niestabilność, ponieważ ciepło właściwe fazy normalnej jest większe od ciepła właściwego fazy normalnej osobliwej cieczy Fermiego o wartość $N(0)T(\ln 2)^2$. Ponieważ ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej, wyznaczone na podstawie drugiego z równań (5.29), zawierało nieskompensowany ujemny składnik, jego wartości w niskich temperaturach były ujemne [61, 98, 99].

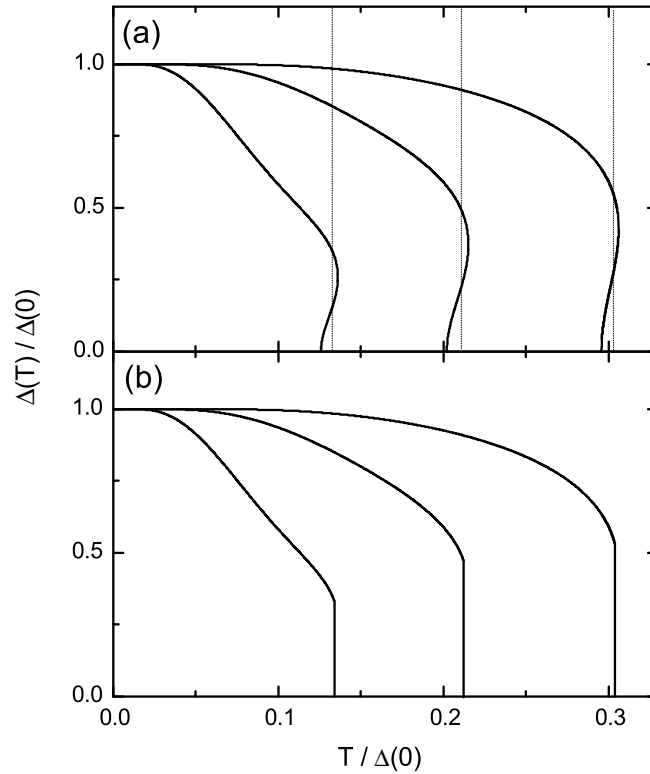
Rozważania te dowodzą faktu, że w ogólności zależność temperaturowa szczeliny energetycznej nie zawiera dostatecznie bogatej informacji pozwalającej na jej podstawie poprawnie zrekonstruować własności termodynamiczne układu.

5.6.3 Wyniki numeryczne i dyskusja

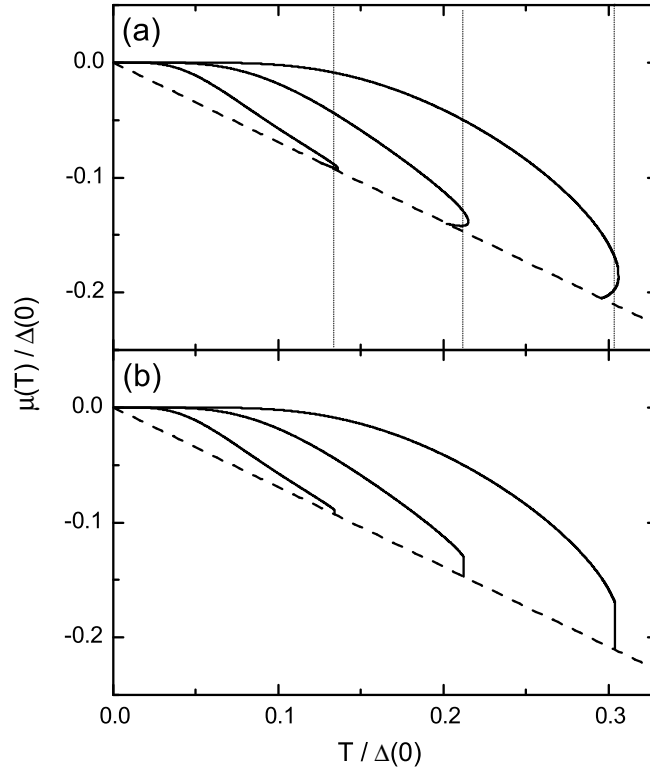
W celu ilustracji podstawowych własności modelu przedstawione w poprzednich podrozdziałach rezultaty analityczne dla osobliwej cieczy Fermiego

ze sparowaniem typu s uzupełniono obliczeniami numerycznymi. Porównując różne wielkości o wymiarze energii unormowano je przez wielkość $\Delta(0)$, tj. wartość szczeliny w zerowej temperaturze, i w dalszych rozważaniach wykorzystywano ich bezwymiarowe odpowiedniki. Obliczenia wykonano dla trzech układów z pasmem przewodnictwa o niewielkiej, średniej oraz dużej szerokości ($\omega/\Delta(0) = 2, 2\sqrt{5}$ oraz 10), co pozwoliło na identyfikację uniwersalnych własności modelu.

Na Rysunkach 5.2 (a) oraz 5.3 (a) przedstawiono samouzgodnione rozwiązania równania na szczelinę (5.26) oraz równania na potencjał chemiczny (5.25), czyli odpowiednio wykresy zależności $\Delta(T)/\Delta(0)$ oraz $\mu(T)/\Delta(0)$. Dodatkowo, na Rysunku 5.4, przedstawiono zależność temperaturową parametru Υ .



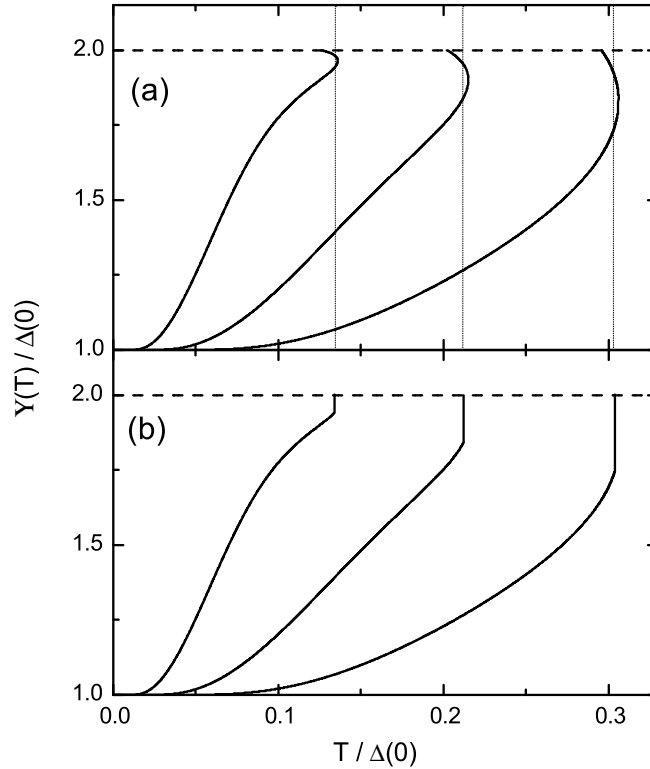
Rysunek 5.2: Szczelina energetyczna w modelu osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2, 2\sqrt{5}$ oraz 10 (kolejno, od prawej strony): (a) pełne rozwiązanie uwzględniające obydwie gałęzie szczeliny, (b) rozwiązanie uwzględniające przejście fazowe do fazy normalnej w temperaturze T_c . Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę przejścia fazowego [58, 77].



Rysunek 5.3: Potencjał chemiczny w modelu osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2, 2\sqrt{5}$ oraz 10 (kolejno, od prawej strony): (a) pełne rozwiązanie uwzględniające obydwie gałęzie szczeliny, (b) rozwiązanie uwzględniające przejście fazowe do fazy normalnej w temperaturze T_c . Linia przerywana oznacza potencjał chemiczny fazy normalnej. Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę przejścia fazowego [58, 77].

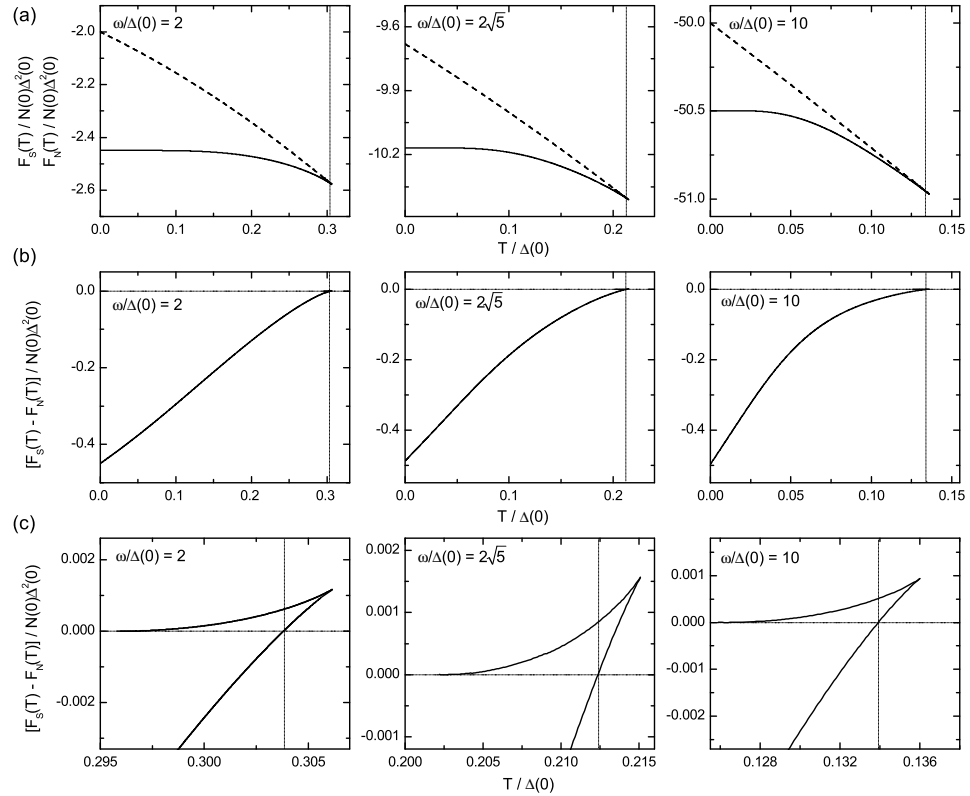
Analiza wyników przedstawionych na Rysunkach 5.2 (a) oraz 5.3 (a) pozwala stwierdzić, że w zakresie temperatur $0 < T < T_0$ równanie na szczelinę (oraz konsekwentnie równanie na potencjał chemiczny) ma jedno rozwiązanie. W temperaturze $T = T_0$ pojawia się drugie rozwiązanie, otwierając dolną gałąź szczeliny energetycznej (potencjału chemicznego). Oznaczając przez T^* najwyższą wartość temperatury, dla której istnieje niezerowe rozwiązanie równania na szczelinę (potencjał chemiczny) stwierdzamy, że w zakresie temperatur $T_0 < T < T^*$ równanie na szczelinę energetyczną (oraz równanie na potencjał chemiczny) ma dwa rozwiązania.

W celu rozstrzygnięcia, któremu z dwu otrzymanych rozwiązań odpowia-



Rysunek 5.4: Parametr Υ w modelu osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2$, $2\sqrt{5}$ oraz 10 (kolejno, od prawej strony): (a) pełne rozwiązanie uwzględniające obydwie gałęzie szczeliny, (b) rozwiązanie uwzględniające przejście fazowe do fazy normalnej w temperaturze T_c . Linia przerywana oznacza wartość parametru dla fazy normalnej. Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę przejścia fazowego [58].

da energia swobodna niższa od energii swobodnej fazy normalnej (tzn. które rozwiązanie i w jakim zakresie temperatur jest realizowane w układzie w fazie nadprzewodzącej), porównano wartości energii swobodnej obliczone dla obydwu rozwiązań w fazie nadprzewodzącej (por. wzór (5.27)) z wartością energii swobodnej fazy normalnej (5.24). Wyniki obliczeń, przedstawione na Rysunku 5.5, pozwalają stwierdzić, że energia swobodna odpowiadająca dolnej gałęzi szczeliny energetycznej (potencjału chemicznego) jest w całym zakresie temperatur $T_0 < T < T^*$ większa od energii swobodnej fazy normalnej. Natomiast energia swobodna fazy nadprzewodzącej dla górnej gałęzi jest mniejsza od energii swobodnej fazy normalnej dla $0 \leq T < T_c$. Dla $T_c < T \leq T^*$ niższa jest energia swo-



Rysunek 5.5: Zależność temperaturowa: (a) energii swobodnej fazy nadprzewodzącej (linia ciągła) i fazy normalnej (linia przerywana), (b) różnicy energii swobodnych, (c) różnicy energii swobodnych w zakresie temperatur krytycznych, dla osobliwej cieczy Fermiego. Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę T_c przejścia fazowego [58, 77].

bodna fazy normalnej i układ przestaje być nadprzewodzący. Temperatura T_c , w której zachodzi równość energii swobodnych obydwu faz (czyli $\Delta F(T_c) = 0$), jest temperaturą przejścia fazowego pomiędzy fazą nadprzewodzącą a fazą normalną. Uwzględniając obecność przejścia fazowego zachodzącego w temperaturze T_c , odpowiednio zmodyfikowano wykresy zależności temperaturowych szczeliny energetycznej, potencjału chemicznego oraz parametru Υ : Rysunki 5.2 (b), 5.3 (b) oraz 5.4 (b) przedstawiają realizowane w układzie rozwiązania, tzn. rozwiązania wybrane na podstawie kryterium energii swobodnej, które odpowiadają górnej gałęzi szczeliny energetycznej (potencjału chemicznego) dla $0 \leq T \leq T_c$.

Przedstawione wyniki wskazują na możliwość występowania pewnych cech

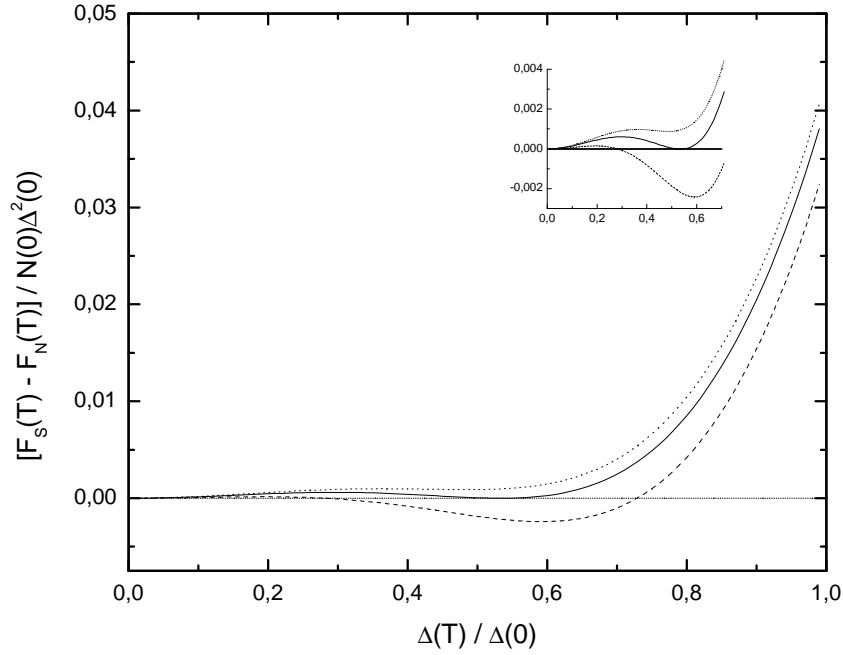
charakterystycznych dla stanu nadprzewodzącego w obszarze ponadkrytycznym $T_c < T \leq T^*$. Niezerowa wartość szczeliny energetycznej wskazuje na możliwość tworzenia się par Coopera, chociaż energetycznie fazą korzystniejszą jest w tym zakresie temperatur faza normalna. Obszar ponadkrytyczny z niezerową szczeliną energetyczną (por. Rysunek 5.2 (a) oraz 5.5 (c)) może być powiązany z pojawieniem się w układzie pseudoszczeliny. W modelu osobliwej cieczy Fermiego realizowany jest zatem następujący scenariusz: poniżej temperatury T^* mogą tworzyć się pary Coopera (niespójne fazowo) i otwiera się pseudoszczelina. W wyniku obniżenia temperatury do wartości T_c , w której faza normalna przestaje być — w sensie energii swobodnej — korzystna dla układu, pary Coopera zyskują spójność fazową i układ przechodzi do fazy nadprzewodzącej. Ponieważ w temperaturze $T_c < T \leq T^*$ energia swobodna odpowiadająca górnej gałęzi szczeliny energetycznej (oraz potencjału chemicznego) jest wyższa od energii swobodnej fazy normalnej, w tym zakresie temperatur stan nadprzewodzący może być jedynie stanem metastabilnym (por. Rysunek 5.6).

Wartości trzech charakterystycznych temperatur, spełniające relację $T_0 < T_c < T^*$, przedstawiono w Tabeli 5.4. Dodatkowo w Tabeli 5.5 przedstawiono wartości wybranych wielkości fizycznych w temperaturze otwarcia pseudoszczeliny T^* .

$\frac{\omega}{\Delta(0)}$	$\frac{T_0}{\Delta(0)}$	$\frac{T_c}{\Delta(0)}$	$\frac{T^*}{\Delta(0)}$	$\frac{\Delta(0)}{T_0}$	$\frac{\Delta(0)}{T_c}$	$\frac{\Delta(0)}{T^*}$
2	0,2958	0,3038	0,3061	3,381	3,292	3,267
$2\sqrt{5}$	0,2022	0,2124	0,2151	4,946	4,708	4,649
10	0,1259	0,1339	0,1359	7,943	7,469	7,358

Tabela 5.4: Wartości charakterystycznych temperatur w modelu osobliwej cieczy Fermiego.

Aby bardziej szczegółowo zbadać charakter przejścia fazowego, które już na podstawie Rysunku 5.5 (c) sklasyfikować można jako przejście pierwszego rodzaju, obliczone wartości energii swobodnej wykorzystano do wyznaczenia entropii $S(T) = -dF(T)/dT$ oraz ciepła właściwego $C(T) = -Td^2F(T)/dT^2$ obydwu faz w zakresie temperatur $0 < T < T_c$. Wykres zależności temperaturowej entropii (Rysunek 5.7) ujawnia wyraźną nieciągłość tej wielkości potwierdzając, że przejście fazowe jest pierwszego rodzaju z niezerowym ciepłem przemiany

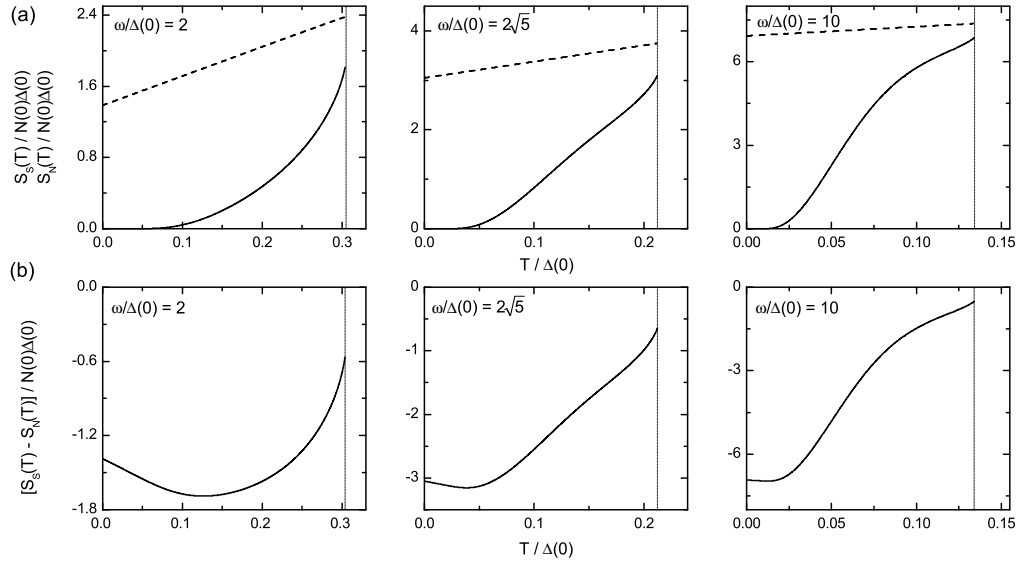


Rysunek 5.6: Różnica energii swobodnych w zależności od szczeliny energetycznej dla $\omega/\Delta(0) = 2$. Dla zadanej wartości szczeliny energetycznej, potencjał chemiczny wyznaczono z równania (5.25). Obliczenia przeprowadzono dla trzech wartości temperatury: $T_c/\Delta(0) = 0,3038$ (linia ciągła), $T_1/\Delta(0) = 0,3$ (linia przerywana) oraz $T_2/\Delta(0) = 0,3055$ (linia kropkowana), spełniających relację $T_0 < T_1 < T_c < T_2 < T^*$. Dla temperatury T_2 widoczna jest możliwość pojawienia się stanu metastabilnego w obszarze pseudoszczeliny. Poziomą linią kropkowaną zaznaczono poziom zera.

$\frac{\omega}{\Delta(0)}$	$\frac{T^*}{\Delta(0)}$	$\frac{\Delta(T^*)}{\Delta(0)}$	$\frac{\mu(T^*)}{\Delta(0)}$	$\Upsilon(T^*)$	$\frac{\Delta F(T^*)}{N(0)\Delta^2(0)}$
2	0,3061	0,4403	-0,1844	1,8266	$1,1653 \cdot 10^{-3}$
$2\sqrt{5}$	0,2151	0,3706	-0,1383	1,9017	$1,5672 \cdot 10^{-3}$
10	0,1359	0,2585	-0,0917	1,9639	$0,9377 \cdot 10^{-3}$

Tabela 5.5: Wybrane wielkości termodynamiczne w temperaturze otwarcia pseudoszczeliny T^* .

(por. Tabela 5.6). Rysunki 5.8 oraz 5.9, zawierające wykresy ciepła właściwego, wskazują na silną modyfikację przebiegu jego zależności temperaturowej wraz ze zmianą szerokości pasma przewodnictwa. Dla układów z szerokim pa-



Rysunek 5.7: Zależność temperaturowa (a) entropii fazy nadprzewodzącej (linia ciągła) i fazy normalnej (linia przerywana), (b) różnicy entropii. Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę T_c przejścia fazowego [58, 77].

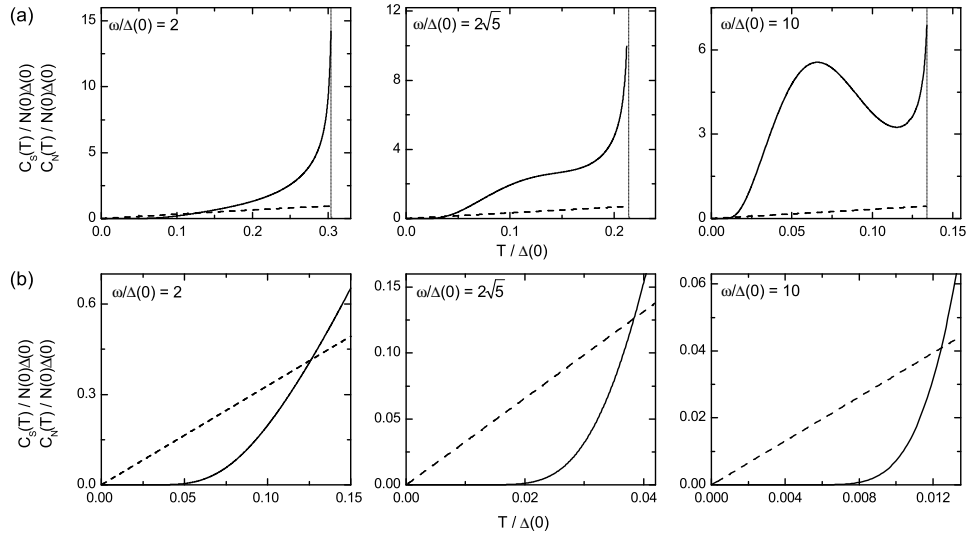
$\frac{\omega}{\Delta(0)}$	$\frac{T_c}{\Delta(0)}$	$\frac{\Delta(T_c)}{\Delta(0)}$	$\frac{\mu(T_c)}{\Delta(0)}$	$\Upsilon(T_c)$	$\frac{\Delta S(T_c)}{N(0)\Delta(0)}$	$\frac{\Delta C(T_c)}{N(0)\Delta(0)}$	$\frac{T_c \Delta S(T_c)}{N(0)\Delta^2(0)}$
2	0,3038	0,5320	-0,1691	1,7450	0,5659	13,25	0,1719
$2\sqrt{5}$	0,2124	0,4704	-0,1301	1,8450	0,6498	9,27	0,1380
10	0,1339	0,3324	-0,0888	1,9411	0,5150	6,41	0,0689

Tabela 5.6: Charakterystyki termodynamiczne układu osobliwej cieczy Fermiego w temperaturze przejścia fazowego T_c .

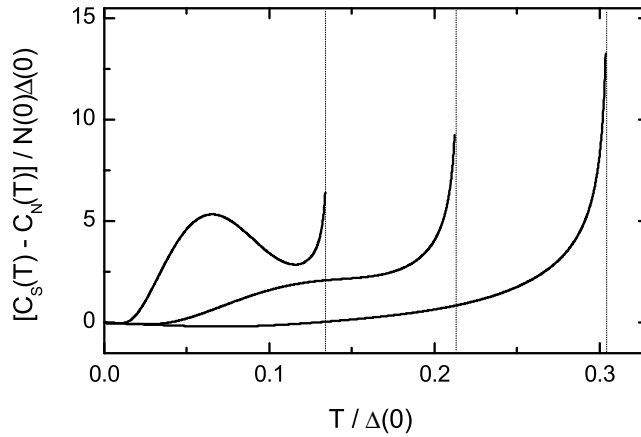
smem obserwujemy ekstremum (anomalię) ciepła właściwego, podczas gdy dla układów z wąskim pasmem anomalie te nie występują (por. Rysunek 5.8).

5.7 Odpowiedź na pole magnetyczne

Przedstawione w poprzednich podrozdziałach rozważania dotyczyły modelu osobliwej cieczy Fermiego w nieobecności zewnętrznych pól i prądów. Niniejszy podrozdział zawiera rezultaty uzyskane w wyniku analizy odpowiedzi układu na słabe pole magnetyczne oddziałujące ze spinowymi oraz ładunkowymi



Rysunek 5.8: Ciepło właściwe fazy nadprzewodzącej (linia ciągła) i fazy normalnej (linia przerywana) (a) w pełnym zakresie temperatur, (b) w zakresie temperatur krytycznych. Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę T_c przejścia fazowego [58, 77].



Rysunek 5.9: Różnica pojemności cieplnych dla szerokości pasma $\omega/\Delta(0) = 2$, $2\sqrt{5}$ oraz 10 (kolejno, od prawej strony). Kropkowane linie pionowe oznaczają temperaturę T_c przejścia fazowego [58, 77].

stopniami swobody, a także dyskusję parametrów krytycznych związanych z polem magnetycznym. Obliczenia numeryczne wykonano dla modelu osoblwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s zdefiniowanego w podrozdziale 5.6.

5.7.1 Podatność spinowa

Oddziaływanie spinowych stopni swobody z zewnętrznym polem magnetycznym o natężeniu \mathbf{H} uwzględnia się w modelu poprzez dodanie do hamiltonianu (5.12) członu Pauliego $-\mu_B H s$, gdzie s jest rzutem spinu na kierunek pola, μ_B oznacza magneton Bohra. Aby zbadać efekty związane z tym oddziaływaniem, należy zatem rozpatrywać następujący hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{\kappa}_{\mathbf{k}} = & (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) - h(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) \\ & - \Delta_{\mathbf{k}}(\hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (5.31)$$

gdzie $h = \mu_B H$ jest natężeniem pola magnetycznego wyrażonym w jednostkach energii. Zauważmy, że obecność członu Pauliego nie wymaga zmiany bazy stanów podwójnych (5.10) z $\sigma, \sigma' = 0, \uparrow$ lub \downarrow , co pozwala łatwo znaleźć elementy macierzowe hamiltonianu (5.31) działającego w 9-wymiarowej przestrzeni (por. Tabela 5.7).

	0,0	$\uparrow,0$	$\downarrow,0$	0, \uparrow	\uparrow,\uparrow	\downarrow,\uparrow	0, \downarrow	\uparrow,\downarrow	\downarrow,\downarrow
0,0	0					$-\Delta_{\mathbf{k}}$		$-\Delta_{\mathbf{k}}$	
$\uparrow,0$		$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - h$							
$\downarrow,0$			$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + h$						
0, \uparrow				$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - h$					
\uparrow,\uparrow					$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - 2h$				
\downarrow,\uparrow	$-\Delta_{\mathbf{k}}$					$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$			
0, \downarrow							$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + h$		
\uparrow,\downarrow	$-\Delta_{\mathbf{k}}$							$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	
\downarrow,\downarrow									$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + 2h$

Tabela 5.7: Elementy macierzowe hamiltonianu (5.31); pominięto zerowe elementy pozadiagonalne [78].

Diagonalizując hamiltonian znajdujemy wartości i wektory własne (por. Tabela 5.8) oraz sumę statystyczną fazy nadprzewodzącej

$$Z_S = \prod_{\mathbf{k}} \left\{ \left[4 \cosh \beta h + (1 + 2 \cosh 2\beta h) e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}} \right] e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (5.32)$$

Natomiast suma statystyczna fazy normalnej, tj. gdy $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$, jest postaci

wartość własna	wektor własny
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$	$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \psi_{00}(\mathbf{k}) - \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - h$	$\psi_{\uparrow 0}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + h$	$\psi_{\downarrow 0}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - h$	$\psi_{0\uparrow}(\mathbf{k})$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - 2h$	$\psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}$	$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \psi_{00}(\mathbf{k}) + \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + h$	$\psi_{0\downarrow}(\mathbf{k})$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\frac{\sqrt{2}}{2} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + 2h$	$\psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})$

Tabela 5.8: Wartości i wektory własne hamiltonianu (5.31) [78].

$$Z_N = \prod_{\mathbf{k}} [1 + 2e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \cosh \beta h]. \quad (5.33)$$

Magnetyzacja $M(T, h)$ oraz podatność spinowa $\chi(T)$ związane są z sumą statystyczną standardowymi formułami

$$M(T, h) = \frac{\mu_B}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial h}, \quad \chi(T) = \mu_B \left. \frac{\partial M(T, h)}{\partial h} \right|_{h=0}.$$

Na ich podstawie, wykorzystując postać sumy statystycznej (5.32), wyznaczamy magnetyzację oraz podatność spinową fazy nadprzewodzącej

$$M_S(T, h) = 2\mu_B \sum_{\mathbf{k}} \frac{\sinh \beta h + e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \sinh 2\beta h}{4 \cosh \beta h + (1 + 2 \cosh 2\beta h) e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}}},$$

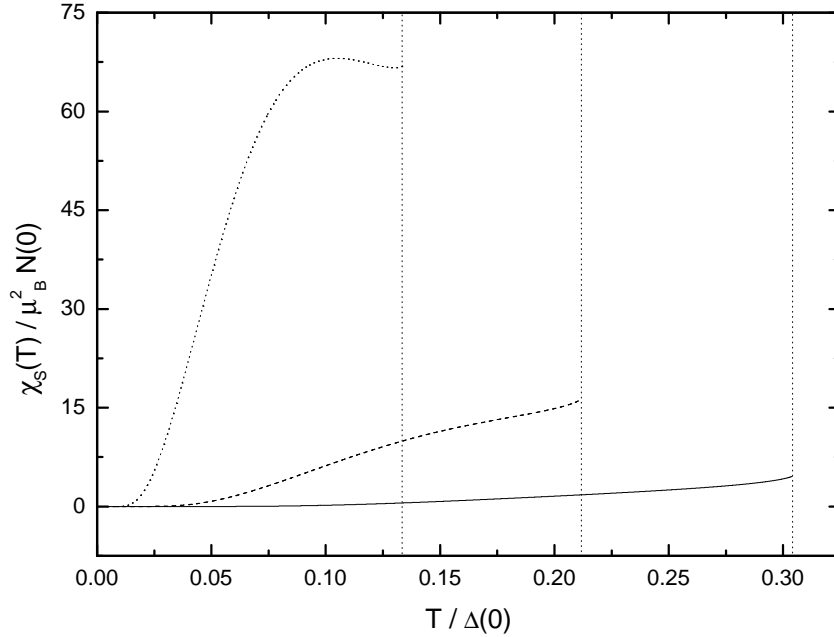
$$\chi_S(T) = 2\mu_B^2 \beta \sum_{\mathbf{k}} \frac{1 + 2e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}}{4 + 3e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}}}.$$

Ponieważ $\cosh \beta E_{\mathbf{k}} \rightarrow \infty$ gdy $T \rightarrow 0$, podatność spinowa fazy nadprzewodzącej znika w zerowej temperaturze, tj. $\chi_S(0) = 0$.

Sumowanie po wektorze pędu \mathbf{k} zastępujemy całkowaniem po energii ξ zgodnie z rozszerzonym scenariuszem Van Hove'a, otrzymując w przypadku osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s oraz $N(\xi) \approx N(0)$

$$\chi_S(T) = 2\mu_B^2 \beta N(0) \int_{-\omega}^{\omega} d\xi \frac{1 + 2e^{-\beta\tilde{\xi}}}{4 + 3e^{-\beta\tilde{\xi}} + 2 \cosh \beta \sqrt{\tilde{\xi}^2 + 2\Delta^2(T)}}, \quad (5.34)$$

gdzie $\tilde{\xi} = \xi - \mu$. Zależność temperaturową podatności spinowej fazy nadprzewodzącej (5.34) przedstawiono na Rysunku 5.10.



Rysunek 5.10: Podatność spinowa fazy nadprzewodzącej osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2$ (linia ciągła), $2\sqrt{5}$ (linia przerywana) oraz 10 (linia kropkowana). Kropkowane linie pionowe zaznaczają temperaturę T_c przejścia fazowego [78].

Dla $\Delta_{\mathbf{k}} = 0$, tj. dla fazy normalnej, magnetyzacja oraz podatność spinowa wyznaczone z sumy statystycznej (5.33) dane są formułami

$$\begin{aligned} M_N(T, h) &= 2\mu_B \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \sinh \beta h}{1 + 2e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \cosh \beta h}, \\ \chi_N(T) &= \mu_B^2 \beta \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + e^{\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \ln 2}}. \end{aligned} \quad (5.35)$$

Zauważmy, że dla fazy normalnej całkowita liczba cząstek [33]

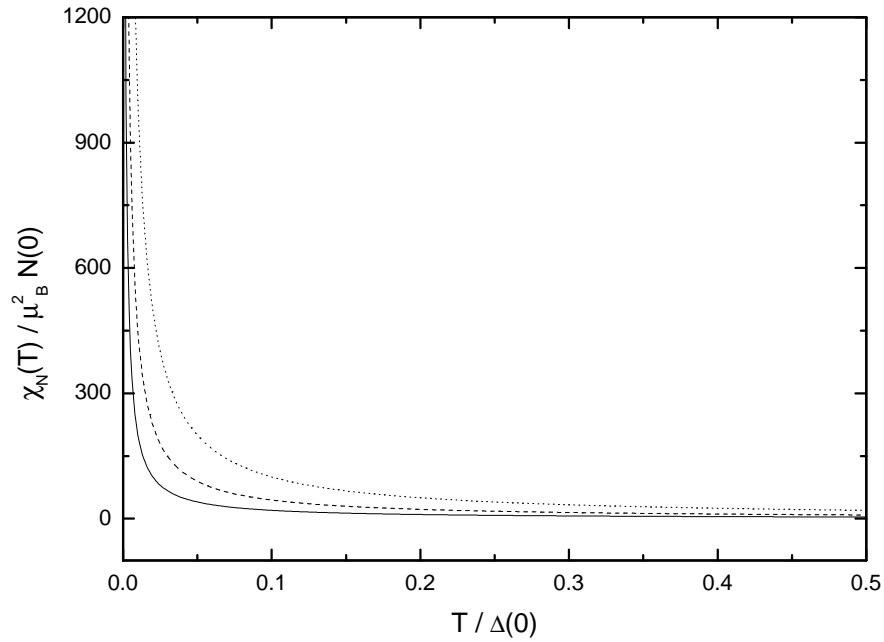
$$N = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{1 + e^{\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \ln 2}}.$$

Zatem podatność spinowa fazy normalnej $\chi_N(T) = N\mu_B^2/T$ dąży do nieskończoności, gdy $T \rightarrow 0$. Ponadto, w zerowej temperaturze, magnetyzacja $M_N(0, h) = \mu_B \sum_{\mathbf{k}} 1 = 2N\mu_B$, tzn. wszystkie spiny ustawiają się zgodnie ze zwrotem wektora natężenia pola. Własności te są analogiczne do odpowiednich własności jednowymiarowego modelu Isinga.

Zgodnie ze scenariuszem Van Hove'a dla osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s oraz $N(\xi) \approx N(0)$ formuła (5.35) przyjmuje postać

$$\chi_N(T) = \mu_B^2 \beta N(0) \int_{-\omega}^{\omega} d\xi \frac{1}{1 + e^{-\beta\xi - \ln 2}}. \quad (5.36)$$

Zależność temperaturową podatności spinowej fazy normalnej (5.36) przedstawiono na Rysunku 5.11.



Rysunek 5.11: Podatność spinowa fazy normalnej osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2$ (linia ciągła), $2\sqrt{5}$ (linia przerywana) oraz 10 (linia kropkowana) [78].

Zwróćmy uwagę, że suma statystyczna (5.33) fazy normalnej może być również zapisana w postaci

$$Z_N = \prod_{\mathbf{k}} \{1 + \exp[-\beta(\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - T \ln 2 - T \ln \cosh \beta h)]\}.$$

Zatem potencjał chemiczny fazy normalnej (mierzony od poziomu Fermiego) w polu magnetycznym wyraża się wzorem $\mu_N(T) = -T \ln 2 - T \ln \cosh \beta h$, a w granicy $H \rightarrow 0$ mamy $\mu_N(T) = -T \ln 2 - \mu_B^2 H^2 / 2T$, tzn. poprawki ze względu na pole magnetyczne są rzędu H^2 . Z kolei w granicy $T \rightarrow 0$ potencjał chemiczny

$\mu_N(0) = -\mu_B H$, a entropia w zerowej temperaturze

$$S_N(0) = -N \left. \frac{\partial \mu(T)}{\partial T} \right|_{T=0}$$

przyjmuje wartość $S_N(0) = N \ln 2$ dla $H = 0$ oraz $S_N(0) = 0$ dla $H > 0$ wskazując na przejście fazowe analogiczne do przejścia fazowego występującego w jednowymiarowym modelu Isinga.

5.7.2 Londonowska głębokość wnikania

Aby opisać oddziaływanie pola magnetycznego z ładunkowymi stopniami swobody definiuje się superprąd

$$\mathbf{v} = \nabla \chi - \frac{e}{m} \mathbf{A}, \quad (5.37)$$

gdzie χ jest fazą funkcji falowej par Coopera, \mathbf{A} jest potencjałem wektorowym ($\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$), natomiast m oznacza „gołą” lub efektywną masę. Superprąd jest wielkością niezmienniczą ze względu na cechowanie i ma znaczenie fizyczne jako prędkość pary Coopera [79, 100–103]. Dla potencjału wektorowego wybieramy cechowanie Londona [59, 60]. Taki wybór implikuje, że w rozwinięciu równań Gorkowa znika pierwsza poprawka do wartości szczeliny i konsekwentnie pierwsza poprawka do funkcji Greena zawiera wartość szczeliny wyliczonej pod nieobecność zewnętrznego pola [59]. Uwaga ta odnosi się również do metody odpowiedzi liniowej [60, 104].

Włączenia superprądu do hamiltonianu dokonuje się poprzez transformację pędu cząstki $\mathbf{k} \mapsto \mathbf{k} + m\mathbf{v}$, przy czym $k \gg mv$. Zatem całkowity pęd pary Coopera jest teraz równy $2m\mathbf{v}$ w odróżnieniu od przypadku bez zewnętrznego pola, gdy jest on równy zeru. Konsekwentnie, energia cząstki transformuje się w następujący sposób: $\epsilon_{\mathbf{k}} \mapsto \epsilon_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}}$, natomiast potencjał chemiczny $\mu \mapsto \mu - \frac{1}{2}mv^2$, tzn. jest stały z dokładnością do wyrazów $O(v^2)$. Hamiltonian uwzględniający oddziaływanie pola magnetycznego z ładunkowymi stopniami swobody jest zatem postaci

$$\begin{aligned} \hat{\kappa}_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}} = & (\epsilon_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}} - \mu)(\hat{n}_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}\downarrow}) + \tilde{\epsilon}_{-\mathbf{k}+m\mathbf{v}}(\hat{n}_{-\mathbf{k}+m\mathbf{v}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}+m\mathbf{v}\downarrow}) \\ & - \Delta_{\mathbf{k}} \left(\hat{a}_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{-\mathbf{k}+m\mathbf{v}\downarrow}^\dagger + \hat{a}_{-\mathbf{k}+m\mathbf{v}\uparrow}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}\downarrow}^\dagger + \text{H.c.} \right). \end{aligned} \quad (5.38)$$

Zauważmy, że w odróżnieniu od sytuacji w poprzednim podrozdziale, należy zdefiniować nową bazę 9-wymiarowej przestrzeni Focka

$$\psi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}) = \left| \begin{array}{c} \mathbf{k} + m\mathbf{v}, \sigma \\ -\mathbf{k} + m\mathbf{v}, \sigma' \end{array} \right\rangle, \quad (5.39)$$

gdzie $\sigma, \sigma' = 0, \uparrow$ lub \downarrow . Elementy macierzowe hamiltonianu (5.38) w bazie (5.39) przedstawia Tabela 5.9.

	0,0	$\uparrow,0$	$\downarrow,0$	0, \uparrow	\uparrow,\uparrow	\downarrow,\uparrow	0, \downarrow	\uparrow,\downarrow	\downarrow,\downarrow
0,0	0					$-\Delta_{\mathbf{k}}$		$-\Delta_{\mathbf{k}}$	
$\uparrow,0$		$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \mathbf{k}\mathbf{v}$							
$\downarrow,0$			$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \mathbf{k}\mathbf{v}$						
0, \uparrow				$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{v}$					
\uparrow,\uparrow					$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$				
\downarrow,\uparrow	$-\Delta_{\mathbf{k}}$					$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$			
0, \downarrow							$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{v}$		
\uparrow,\downarrow	$-\Delta_{\mathbf{k}}$							$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	
\downarrow,\downarrow									$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$

Tabela 5.9: Elementy macierzowe hamiltonianu (5.38); pominięto zerowe elementy pozadiagonalne [78].

Przy wyznaczaniu elementów macierzowych skorzystano z faktu, że $\epsilon_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}} + m\mathbf{v} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}}$. Ponadto uwzględniając, że $m\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}} = \mathbf{k}$, otrzymujemy $\epsilon_{\mathbf{k}+m\mathbf{v}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}} + \mathbf{k}\mathbf{v}$ oraz $\epsilon_{-\mathbf{k}+m\mathbf{v}} \approx \epsilon_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{v}$.

Diagonalizując hamiltonian (5.38) znajdujemy jego wartości i wektory własne (por. Tabela 5.10), a następnie sumę statystyczną

$$Z = \prod_{\mathbf{k}} \left\{ \left[3e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 4 \cosh \beta\mathbf{k}\mathbf{v} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}} \right] e^{-\beta\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (5.40)$$

W poprzednim podrozdziale energia oddziaływania Pauliego została jawnie uwzględniona w hamiltonianie (5.31) w postaci oddziaływania jednocząstkowego. Jednak w obecnie rozważanej sytuacji energię samego pola magnetycznego należy również uwzględnić w potencjale termodynamicznym. Wariacja potencjału termodynamicznego ze względu na pole magnetyczne $\delta\Omega = \Omega' - \Omega =$

wartość własna	wektor własny
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$	$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \psi_{00}(\mathbf{k}) - \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \mathbf{k}\mathbf{v}$	$\psi_{\uparrow 0}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + \mathbf{k}\mathbf{v}$	$\psi_{\downarrow 0}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{v}$	$\psi_{0\uparrow}(\mathbf{k})$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k})$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} + E_{\mathbf{k}}$	$\sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} - \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} \psi_{00}(\mathbf{k}) + \frac{\sqrt{2}}{2} \sqrt{\frac{E_{\mathbf{k}} + \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}}} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) + \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}} - \mathbf{k}\mathbf{v}$	$\psi_{0\downarrow}(\mathbf{k})$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\frac{\sqrt{2}}{2} [\psi_{\downarrow\uparrow}(\mathbf{k}) - \psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})]$
$2\tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}$	$\psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})$

Tabela 5.10: Wartości i wektory własne hamiltonianu (5.38) [78].

$\frac{1}{4\pi} \mathbf{H} \cdot \delta \mathbf{H}$, gdzie Ω' oznacza potencjał termodynamiczny w obecności pola magnetycznego. Korzystając ze związku potencjału wektorowego z natężeniem pola, tożsamości wektorowych oraz z równania Maxwella $\nabla \times \mathbf{H} = 4\pi \mathbf{j}$ otrzymujemy ostatecznie

$$\delta \Omega = \mathbf{j} \cdot \delta \mathbf{A}, \quad (5.41)$$

gdzie \mathbf{j} jest prądem cząstek normalnych, który na podstawie równań (5.8), (5.37) oraz (5.41) związany jest z sumą statystyczną relacją

$$\mathbf{j} = \frac{e}{m\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial \mathbf{v}}. \quad (5.42)$$

Natomiast nadprzewodzący prąd par Coopera

$$\mathbf{j}_S = eN\mathbf{v} - \mathbf{j}. \quad (5.43)$$

Formuła (5.40) określająca sumę statystyczną oraz związek (5.42) pozwalają znaleźć wartość prądu nadprzewodzącego w osobliwej cieczy Fermiego

$$\mathbf{j}_S = eN\mathbf{v} - \frac{e\beta}{2m} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \frac{\sinh \beta \mathbf{k}\mathbf{v}}{\cosh \beta \mathbf{k}\mathbf{v} + \frac{3}{4} e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{2} \cosh \beta E_{\mathbf{k}}}.$$

Rozwijając to wyrażenie do pierwszego rzędu względem \mathbf{v} otrzymujemy

$$\mathbf{j}_S = eN\mathbf{v} - \frac{e\beta}{2m} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k}(\mathbf{k}\mathbf{v}) \frac{4}{4 + 3e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{\mathbf{k}}} + 2 \cosh \beta E_{\mathbf{k}}},$$

przy czym kolejny wyraz rozwinięcia jest rzędu $O(\mathbf{v}^3)$. Dla osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s oraz $N(\xi) \approx N(0)$ otrzymujemy

$$j_s = eNv \left[1 - \beta\gamma \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\xi}{4 + 3e^{-\beta\xi} + 2 \cosh \beta \sqrt{\tilde{\xi}^2 + 2\Delta^2(T)}} \right], \quad (5.44)$$

gdzie ponadto uwzględniono relacje $N = N(0)\omega$ oraz $\gamma \simeq m|\nabla\epsilon_{\mathbf{k}}|^2/\omega \approx 1$ [105]. Zauważmy, że równanie (5.43) może być zapisane w postaci

$$\mathbf{j}_s = eN\mathbf{v} \left(1 - \frac{N_N}{N} \right),$$

gdzie N_N jest liczbą cząstek normalnych. Zatem zawierający całkę wyraz w równaniu (5.44) określa zależną od temperatury frakcję $N_N(T)/N$ cząstek normalnych. Dla $T = 0$, gdy wszystkie cząstki tworzą pary Coopera, mamy $N_N(0) = 0$. Ponadto frakcja ta związana jest z londonowską głębokością wnikania wzorem [60]

$$\left[\frac{\lambda(0)}{\lambda(T)} \right]^2 = 1 - \frac{N_N(T)}{N}.$$

Zatem, dla osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s , londonowska głębokość wnikania wyraża się wzorem

$$\left[\frac{\lambda(0)}{\lambda(T)} \right]^2 = 1 - \beta \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\xi}{4 + 3e^{-\beta\xi} + 2 \cosh \beta \sqrt{\tilde{\xi}^2 + 2\Delta^2(T)}}.$$

Jej zależność temperaturową przedstawiono na Rysunku 5.12.

5.7.3 Pole krytyczne

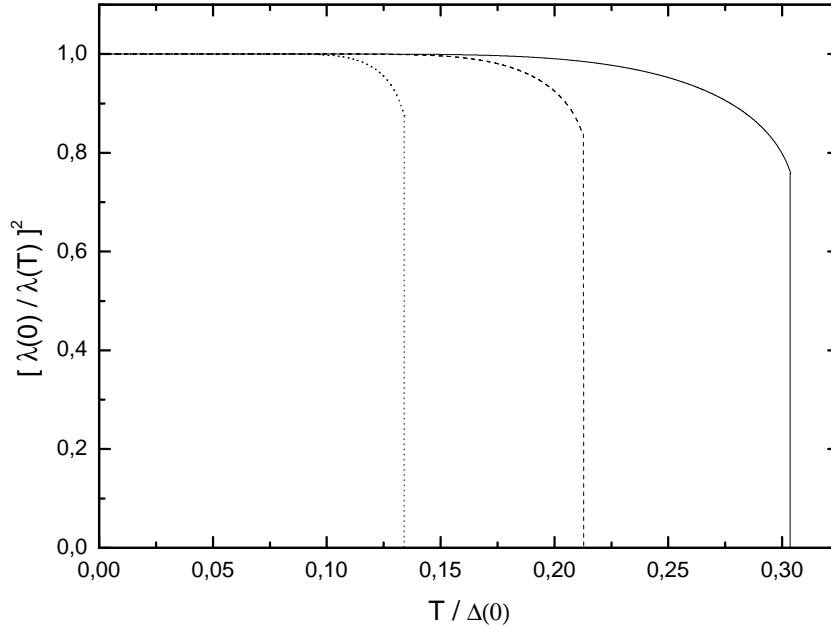
Znając wartości energii swobodnej obydwu faz pod nieobecność zewnętrznego pola magnetycznego (por. podrozdział 5.5) można wyznaczyć wartość krytyczną pola magnetycznego [60, 79]

$$H_c(T) = \sqrt{\frac{F_N(T) - F_S(T)}{8\pi}}. \quad (5.45)$$

Zależność temperaturową wartości krytycznej pola magnetycznego przedstawiono na Rysunku 5.13.

Zapisując równość (5.45) jako $F_N(T) - F_S(T) = H_c^2(T)/8\pi$ i różniczkując obie jej strony względem temperatury otrzymujemy

$$S_S(T) - S_N(T) = \frac{1}{4\pi} H_c(T) \frac{dH_c(T)}{dT}. \quad (5.46)$$



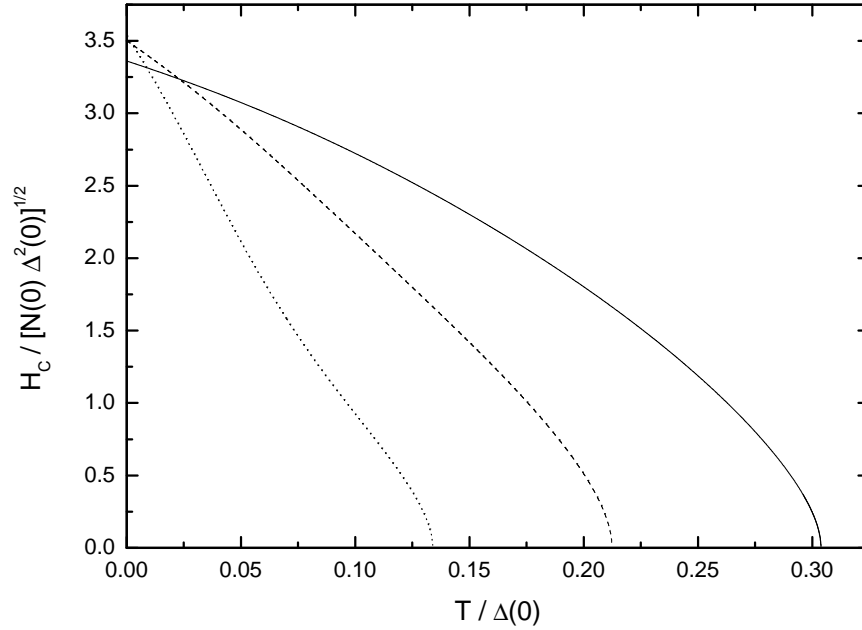
Rysunek 5.12: Londonowska głębokość wnikania w modelu osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2$ (linia ciągła), $2\sqrt{5}$ (linia przerywana) oraz 10 (linia kropkowana) [78].

Prawa strona równości (5.46) jest ujemna w zakresie temperatur $0 \leq T < T_c$ (por. Rysunek 5.13), zatem fazą o niższej entropii jest faza nadprzewodząca. Ponadto formuła (5.46) pozwala na wyznaczenie ciepła przemiany, które jest niezerowe we wspomnianym zakresie temperatur. Wynika stąd, że przejście fazowe pomiędzy fazą nadprzewodzącą a fazą normalną, wywołane polem magnetycznym, jest pierwszego rodzaju tak jak dla $H = 0$ w temperaturze $T = T_c$.

5.7.4 Prąd krytyczny

W granicy $k \gg mv$ potencjał termodynamiczny można rozwinąć w szereg, zachowując wyrazy rzędu $O(v^2)$. Otrzymujemy wówczas następującą formułę określającą energię swobodną $F(\mathbf{v}) = \Omega(\mathbf{v}) + \mu N$ w obecności superprądu (5.37)

$$F(\mathbf{v}) = \Omega(0) + \sum_{i=1}^3 \left. \frac{\delta\Omega(\mathbf{v})}{\delta v_i} \right|_{\mathbf{v}=0} v_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \left. \frac{\delta^2\Omega(\mathbf{v})}{\delta v_j \delta v_j} \right|_{\mathbf{v}=0} v_j v_i + \mu N, \quad (5.47)$$



Rysunek 5.13: Wartość krytyczna pola magnetycznego w modelu osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2$ (linia ciągła), $2\sqrt{5}$ (linia przerywana) oraz 10 (linia kropkowana) [78].

gdzie $\delta/\delta v_i$ oznacza pochodną wariacyjną. Równania (5.37) oraz (5.41) implikują

$$\frac{\delta\Omega(\mathbf{v})}{\delta v_i} = -\frac{m}{e} j_i = -mN_N v_i$$

a stąd

$$\left. \frac{\delta\Omega(\mathbf{v})}{\delta v_i} \right|_{\mathbf{v}=0} = 0 \quad \text{oraz} \quad \left. \frac{\delta^2\Omega(\mathbf{v})}{\delta v_i \delta v_j} \right|_{\mathbf{v}=0} = \left. \frac{\delta}{\delta v_i} (-mN_N v_j) \right|_{\mathbf{v}=0} = -mN_N \delta_{ij}.$$

Wykorzystując obliczone pochodne wariacyjne, wzór (5.47) możemy zapisać w postaci

$$F(\mathbf{v}) = \Omega(0) - \frac{m}{2e} \mathbf{j} \cdot \mathbf{v} + \mu N.$$

Ponieważ w fazie normalnej nie istnieją spójne fazowo pary Coopera, prąd elektryczny $\mathbf{j} = eN\mathbf{v}$, podczas gdy w fazie nadprzewodzącej $\mathbf{j} = eN\mathbf{v} - \mathbf{j}_S$ (por. równanie (5.43)). Zatem energia swobodna obydwu faz w obecności superprądu może być zapisana w postaci

$$\begin{aligned} F_N(\mathbf{v}) &= \Omega_N(0) - \frac{1}{2} mN\mathbf{v}^2 + \mu_N N, \\ F_S(\mathbf{v}) &= \Omega_S(0) - \frac{1}{2} mN\mathbf{v}^2 + \frac{m}{2e} \mathbf{j}_S \cdot \mathbf{v} + \mu_S N. \end{aligned}$$

Różnica wartości energii swobodnych $\Delta F(\mathbf{v}) = F_S(\mathbf{v}) - F_N(\mathbf{v})$ w obecności superprądu jest zatem równa

$$\Delta F(\mathbf{v}) = \Delta F(0) + \frac{m}{2e} \mathbf{j}_S \cdot \mathbf{v} = \Delta F(0) + \frac{1}{2} m(N - N_N)v^2, \quad (5.48)$$

gdzie $\Delta F(0)$ jest wartością różnicy wyznaczoną pod nieobecność superprądu.

Prąd par Coopera \mathbf{j}_S płynący przez układ w fazie nadprzewodzącej niszczy nadprzewodnictwo, gdy tylko superprąd osiągnie krytyczną wartość \mathbf{v}_c , dla której $\Delta F(\mathbf{v}_c) = 0$. Warunek ten, wraz z formułą (5.48), pozwala znaleźć wartość krytyczną superprądu

$$v_c = \sqrt{-\frac{2\Delta F(0)}{m(N - N_N)}}.$$

Odpowiadająca jej wartość gęstości prądu par Coopera (tzw. prąd krytyczny) $\mathbf{j}_c = e(N - N_N)\mathbf{v}_c$, przy której układ przechodzi do fazy normalnej, określona jest wzorem

$$j_c = e\sqrt{-\frac{2\Delta F(0)(N - N_N)}{m}}. \quad (5.49)$$

Ponieważ w temperaturze $T = 0$ wszystkie cząstki są sparowane ($N_N(0) = 0$), potencjał chemiczny $\mu_S(0) = \mu_N(0) = 0$ oraz $\Delta F(0) = -N(0)\Delta^2(0)/2$ dla $\omega \gg \Delta(0)$ [58], równanie (5.49) upraszcza się do postaci $j_c = e\sqrt{N N(0)/m\Delta(0)}$.

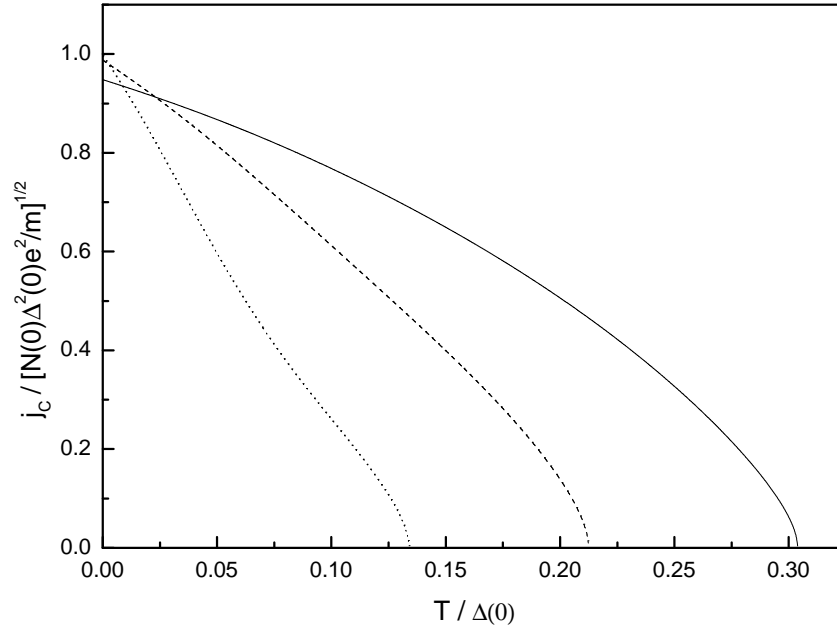
Wykorzystując obliczenia frakcji cząstek normalnych $N_N(T)/N$ wykonane w podrozdziale 5.7.2 otrzymujemy formułę określającą wartość prądu krytycznego w układzie osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s

$$j_c = e\sqrt{-\frac{2\Delta F(0)N}{m} \left(1 - \beta \int_{-\omega}^{\omega} \frac{d\xi}{4 + 3e^{-\beta\xi} + 2 \cosh \beta\sqrt{\xi^2 + 2\Delta^2(T)}} \right)}.$$

Zależność prądu krytycznego od temperatury ilustruje Rysunek 5.14.

5.8 Podsumowanie

W niniejszym rozdziale rozpatrzono model osobliwej cieczy Fermiego z różną amplitudą rozpraszania dla cząstek (dziur lub elektronów) o takim samym pędzie [58, 77, 78]. W modelu tym obserwuje się zachowanie typu pseudoszczeliny z dwoma charakterystycznymi temperaturami: T^* — temperaturą, w której pojawia się szczelina energetyczna, ale układ znajduje się w fazie normalnej oraz temperaturą T_c (niższą od T^*), w której energia swobodna fazy



Rysunek 5.14: Wartość prądu krytycznego w modelu osobliwej cieczy Fermiego dla $\omega/\Delta(0) = 2$ (linia ciągła), $2\sqrt{5}$ (linia przerywana) oraz 10 (linia kropkowa) [78].

nadprzewodzącej zrównuje się z energią swobodną fazy normalnej, pary Coopera uzyskują spójność fazową i układ przechodzi do stabilnej fazy nadprzewodzącej (por. Tabela 5.5). Przejście fazowe pomiędzy fazą nadprzewodzącą a normalną jest pierwszego rodzaju (por. Rysunek 5.7 oraz Tabela 5.6). Jest ono rezultatem konkurencji pomiędzy energią swobodną fazy normalnej (o dużej entropii resztkowej $S_N(0) = N \ln 2$) z entropią wzrastającą wraz z temperaturą a, z drugiej strony, energią swobodną fazy nadprzewodzącej (z zerową entropią resztkową), której wartość w $T = 0$ jest pomniejszona ze względu na niezerowy parametr porządku. Dla układu w temperaturze $T = T_c$ bardziej korzystne jest posiadanie większej entropii niż niezerowego parametru porządku. Efekt ten jest analogiczny do przejścia fazowego pierwszego rodzaju wywołanego polem magnetycznym w nadprzewodnikach pierwszego rodzaju, gdzie silne pole magnetyczne zmniejsza energię swobodną układu bardziej, niż niezerowa szczelina energetyczna w fazie nadprzewodzącej. Taki efekt nie może być zaobserwowany w układach, w których entropia fazy normalnej znika w 0 K. Wówczas przejście fazowe jest drugiego rodzaju.

Włączenie do modelu osobliwej cieczy Fermiego zewnętrznego pola magnetycznego poprzez człon Pauliego pozwoliło na zbadanie oddziaływania pola ze spinowymi stopniami swobody. Podatność magnetyczna fazy nadprzewodzącej, charakteryzująca odpowiedź układu, zaznacza się szczególnie szczególnie wyraźnie dla układów z szerokim pasmem przewodnictwa (por. Rysunek 5.10). Z kolei przyłożenie zewnętrznego pola magnetycznego do układu w fazie normalnej skutkuje całkowitym (gdy $T = 0$) lub częściowym (gdy $T > 0$) uporządkowaniem spinów, a zależność temperaturowa podatności magnetycznej fazy normalnej ma charakter prawa Curie (por. Rysunek 5.11).

Z analizy oddziaływania pola magnetycznego z ładunkowymi stopniami swobody wynika, że istnieje jedynie niewielka frakcja cząstek normalnych w obszarze podkrytycznym, tj. dla temperatur nieco niższych niż T_c . Zatem głębokość wnikania pola magnetycznego nie osiąga dużych wartości, w przeciwieństwie do standardowego modelu BCS, gdzie dąży ona do nieskończoności gdy $T = T_c$. Ponieważ głębokość wnikania pola magnetycznego charakteryzuje obszar nadprzewodnika, w którym płyną prądy ekranujące uniemożliwiające wnikanie pola magnetycznego do wnętrza nadprzewodnika, można stwierdzić, że obszar ten jest raczej wąski w przypadku rozważanego układu osobliwej cieczy Fermiego ze sparowaniem typu s .

Obserwowane w przypadku pola krytycznego (Rysunek 5.13) oraz prądu krytycznego (Rysunek 5.14) różnice pomiędzy ich wartościami dla różnych szerokości pasma w $T = 0$ wynikają z zależności różnicy energii swobodnych obydwu faz — nadprzewodzącej oraz normalnej — w zerowej temperaturze od parametru ω (por. wzór (5.28) oraz Rysunek 5.1).

Rozdział 6

Podsumowanie

W rozprawie zaprezentowano rezultaty badań dotyczących wybranych aspektów nadprzewodnictwa w złożonych układach jakimi są nadprzewodniki wysokotemperaturowe zawierające płaszczyzny miedziowo-tlenowe.

W pracy rozwinięto zaproponowaną wcześniej metodę rozszerzonego scenariusza Van Hove'a [33], opartą na uogólnionej transformacji konforemnej dla dowolnej różniczkowalnej relacji dyspersyjnej. Zastosowanie opracowanego formalizmu do naddomieszkowanych układów nadprzewodzących z anizotropowym parametrem porządku np. o symetrii d (stan singletowy) lub p (stan trypletowy z zerowym rzutem całkowitego spinu) bezpośrednio dowodzi, że w tych przypadkach standardowy scenariusz Van Hove'a jest niewłaściwym narzędziem badawczym a zamiast niego należy stosować rozszerzony scenariusz Van Hove'a, w którym liczba uwzględnianych współrzędnych, tj. liczba stopni swobody, jest równa wymiarowi przestrzeni wyjściowego układu. W formalizmie tym współrzędna ξ , odpowiadająca energii wzbudzeń jednocząstkowych, ma jednoznaczną interpretację fizyczną, a zasadniczą rolę odgrywa jądro gęstości stanów wyznaczone na podstawie relacji dyspersyjnej. Wykonanie kilku nieliniowych transformacji współrzędnych pozwala na przeniesienie rozważań do biegunowego układu współrzędnych (ξ, φ) , w którym harmoniki Fouriera $\cos l\varphi$ oraz $\sin l\varphi$, stanowiące układ ortogonalny zupełny w odpowiedniej przestrzeni funkcyjnej, mogą być sklasyfikowane w jedno- lub dwuelementowe podzbiory niezmiennicze nieprzywiedlonej reprezentacji grupy C_{4v} . Wyrażenie poszczególnych komponentów oddziaływania parującego w reprezentacji harmonik fourierowskich pozwala na identyfikację typu symetrii sparowania w zależności od parametrów charakte-

ryzujących oddziaływanie parujące. Uzyskane rezultaty wskazują na możliwość realizacji w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych stanu o symetrii typu p (stan trypletowy z zerowym rzutem całkowitego spinu) dla odpowiednio dobranych parametrów. Wyniki tej części badań pozwalają również na wyznaczenie w zwartej postaci formuł określających temperaturę krytyczną, skok ciepła właściwego oraz wykładnik w efekcie izotopowym w zależności od jądra gęstości stanów, postaci potencjału parującego, symetrii parametru porządku oraz zasięgu obszaru sparowania.

W drugim nurcie badań, których rezultaty zawarto w rozprawie, przedstawiono formalizm umożliwiający wyznaczenie wartości szczeliny w zerowej temperaturze oraz temperatury przejścia w zależności od parametru sprzężenia. Badania w tej dziedzinie doprowadziły do rozwinięcia formalizmu poza ograniczenia modelu BCS i znalezienia pewnych uniwersalnych relacji pomiędzy szczeliną energetyczną a energią swobodną, entropią, ciepłem właściwym oraz krytycznym polem magnetycznym dla szerokiej klasy modeli układów nadprzewodzących, uwzględniających efekty silnego sprzężenia oraz nieciągłość parametru porządku. Wskazano również na ograniczenia możliwości wyznaczenia funkcji termodynamicznych na podstawie zależności temperaturowej szczeliny energetycznej, a podane relacje stanowiąc mogą dodatkowe kryterium poprawności rozważanych modeli.

Ostatni nurt badań dotyczył modelu osobliwej cieczy Fermiego tworzącej izotropowy stan nadprzewodzący, w którym stany Blocha w przestrzeni odwrotnej są obsadzone przez fermionowe kwazicząstki (elektryony lub dziury) co najwyżej pojedynczo. Rezultaty uzyskane w tym zakresie ujawniły nieliniową zależność potencjału chemicznego w fazie nadprzewodzącej od temperatury oraz silny wpływ szerokości pasma (zasięgu sparowania) na termodynamikę układu. Ponadto, w rozważanym układzie, przejście fazowe pomiędzy fazą normalną a fazą nadprzewodzącą jest przejściem fazowym pierwszego rodzaju. Z faktu tego należy oczekiwać, że w układzie mogą pojawiać się stany metastabilne, zlokalizowane w obszarze powyżej temperatury przejścia fazowego, tj. w obszarze pseudoszczeliny, charakterystycznym dla wielu nadprzewodników wysokotemperaturowych w reżimie poddomieszkowania. W ramach przeprowadzonych badań wyznaczono oraz szczegółowo przedyskutowano formuły dla energii swobodnej, entropii oraz ciepła właściwego. Zbadano również odpowiedź układu

na zewnętrzne pole magnetyczne wyznaczając podatność spinową, londonowską głębokość wnikania, prąd krytyczny oraz pole krytyczne. Należy podkreślić, że korzystając z rozwiniętego w tym zakresie formalizmu możliwe jest rozszerzenie badań na układy z anizotropowym oddziaływaniem parującym (anizotropowym parametrem porządku) i dowolną relacją dyspersyjną.

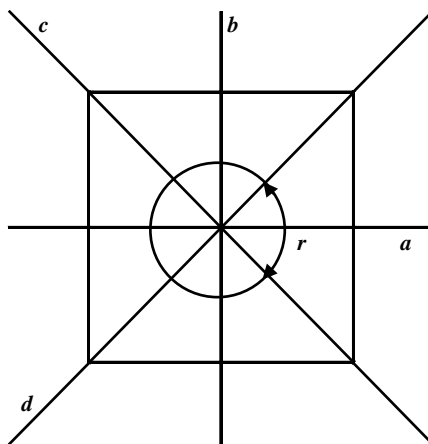
W przeprowadzonych badaniach zasadniczy nacisk został położony na opis i wyjaśnienie własności termodynamicznych nadprzewodników nowej generacji. Dominującą metodę badawczą stanowiły badania analityczne, o maksymalnie dużym stopniu ogólności, polegające na modelowaniu układów nadprzewodzących z uwzględnieniem ich symetrii, struktury przestrzennej, wewnętrznych mechanizmów oddziaływań, wpływu domieszek, pól zewnętrznych i innych czynników oraz charakteryzowaniu własności takich modeli poprzez poszukiwanie analitycznych rozwiązań odpowiednich równań różniczkowo-całkowych, uwzględnianie asymptotycznych zachowań i prezentację wyników w postaci formuł zapisanych przy użyciu funkcji elementarnych, specjalnych lub nowych reprezentacji całkowych określających relacje pomiędzy mierzalnymi (makroskopowymi) parametrami układu w zależności od parametrów mikroskopowych uwzględnianych przy opisie układu.

Dodatek A

Harmoniki fourierowskie jako funkcje bazowe reprezentacji nieprzywiedlnych grupy C_{4v}

A.1 Klasyfikacja harmonik fourierowskich

Punktowa grupa symetrii kwadratu, oznaczana jako C_{4v} zawiera następujące elementy: jedną czterokrotną oś symetrii (r oznacza obrót wokół niej o kąt $\pi/2$) oraz cztery płaszczyzny symetrii a, b, c, d przecinające się na osi czterokrotnej (Rysunek A.1). Wraz z elementem jednostkowym e grupa ta jest ośmioelementową grupą nieabelową. Elementy grupy mogą być podzielone na pięć klas: dwie



Rysunek A.1: Elementy symetrii grupy punktowej C_{4v} .

jednoelementowe $\{e\}$, $\{r^2\}$ oraz trzy dwuelementowe $\{r, r^3\}$, $\{a, b\}$, $\{c, d\}$ co implikuje, że ma ona pięć reprezentacji nieprzywiedlnych: cztery jednowymiarowe i jedną dwuwymiarową. Zatem zawsze musi istnieć sześć funkcji bazowych tworzących cztery zbiory jednoelementowe $\{f_1\}$, $\{f_2\}$, $\{f_3\}$, $\{f_4\}$ i jeden zbiór dwuelementowy $\{f_5, f_6\}$. Zbiory te są niezmiennikami grupy C_{4v} . Elementy grupy w działaniu na funkcje f_1, f_2, f_3, f_4 pozostawiają je (z dokładnością do znaku) bez zmian, natomiast działając na funkcje f_5, f_6 mogą wygenerować ich kombinację liniową. Własności podzbiorów inwariantnych: jednoelementowych $\{f_i\}$, gdzie $i = 1, 2, 3, 4$, oraz dwuelementowego $\{f_5, f_6\}$ mogą być sklasyfikowane ze względu na ich zachowanie pod działaniem elementów grupy w następujący sposób

A Jednoelementowy podzbiór $\{f_1\}$ funkcji bazowych odpowiadający reprezentacji trywialnej, taki że $g f_1 = f_1$ dla każdego $g \in \{e, r, r^2, r^3, a, b, c, d\}$.

B Jednoelementowy podzbiór $\{f_2\}$ funkcji bazowych odpowiadający reprezentacji z trywialną reprezentacją podgrupy C_{2v} , taki że $g f_2 = f_2$ dla $g \in \{e, r^2, a, b\}$ oraz $g f_2 = -f_2$ dla $g \in \{r, r^3, c, d\}$.

C Jednoelementowy podzbiór $\{f_3\}$ funkcji bazowych odpowiadający reprezentacji z trywialną reprezentacją innej cztero grupy, taki że $g f_3 = f_3$ dla $g \in \{e, r^2, c, d\}$ oraz $g f_3 = -f_3$ dla $g \in \{r, r^3, a, b\}$.

D Jednoelementowy podzbiór $\{f_4\}$ funkcji bazowych odpowiadający reprezentacji z trywialną reprezentacją podgrupy cyklicznej, taki że $g f_4 = f_4$ dla $g \in \{e, r, r^2, r^3\}$ oraz $g f_4 = -f_4$ dla $g \in \{a, b, c, d\}$.

E_s Własności dwuelementowego inwariantnego podzbioru $\{f_5, f_6\}$ odpowiadającego dwuwymiarowej reprezentacji nieprzywiedlnej mogą być sklasyfikowane na dwa sposoby:

$$\begin{aligned} g f_5 &= f_5 \quad \text{dla } g \in \{e, a\}, & g f_5 &= -f_5 \quad \text{dla } g \in \{r^2, b\}, \\ g f_5 &= -(-1)^s f_6 \quad \text{dla } g \in \{r, d\}, & g f_5 &= (-1)^s f_6 \quad \text{dla } g \in \{r^3, c\}, \end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned} g f_6 &= f_6 \quad \text{dla } g \in \{e, b\}, & g f_6 &= -f_6 \quad \text{dla } g \in \{r^2, a\}, \\ g f_6 &= -(-1)^s f_5 \quad \text{dla } g \in \{r^3, d\}, & g f_6 &= (-1)^s f_5 \quad \text{dla } g \in \{r, c\}, \end{aligned}$$

gdzie $s = 1, 2$.

Pod działaniem elementów grupy C_{4v} składowe wektora $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ transformują się w następujący sposób:

$$\begin{aligned} g k_x = k_x & \text{ dla } g \in \{e, a\}, & g k_x = -k_x & \text{ dla } g \in \{r^2, b\}, \\ g k_x = k_y & \text{ dla } g \in \{r, d\}, & g k_x = -k_y & \text{ dla } g \in \{r^3, c\}, \end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned} g k_y = k_y & \text{ dla } g \in \{e, b\}, & g k_y = -k_y & \text{ dla } g \in \{r^2, a\}, \\ g k_y = k_x & \text{ dla } g \in \{r^3, d\}, & g k_y = -k_x & \text{ dla } g \in \{r, c\}. \end{aligned}$$

Powyższe relacje po uwzględnieniu faktu, że $g f_i(k_x) = f_i(g k_x)$ oraz $g f_i(k_y) = f_i(g k_y)$, gdzie $i = 1, 2, \dots, 6$, pozwalają na wybór podzbiorów inwariantnych funkcji bazowych w postaci (3.6)–(3.10). Ponieważ $g \cos k_x \cos k_y = \cos k_x \cos k_y$ dla wszystkich elementów grupy, podzbiory niezmiennicze wybrać można również jako (3.11)–(3.15).

W przypadku układu współrzędnych biegunowych elementy grupy C_{4v} w działaniu na współrzędną kątową φ transformują ją w następujący sposób

$$\begin{aligned} e \varphi = \varphi, & \quad r \varphi = \varphi - \frac{\pi}{2}, & r^2 \varphi = \varphi - \pi, & \quad r^3 \varphi = \varphi - \frac{3\pi}{2}, \\ a \varphi = -\varphi, & \quad b \varphi = \pi - \varphi, & c \varphi = \frac{3\pi}{2} - \varphi, & \quad d \varphi = \frac{\pi}{2} - \varphi. \end{aligned}$$

Zatem, stosując formułę $g f(\varphi) = f(g \varphi)$ do harmonik fourierowskich $1, \cos l\varphi, \sin l\varphi$, gdzie $l = 1, 2, \dots$, stwierdzamy, że $g 1 = 1$ dla wszystkich elementów g grupy. Ponadto

$$e \cos l\varphi = \cos l\varphi$$

$$e \sin l\varphi = \sin l\varphi$$

$$r \cos l\varphi = \begin{cases} (-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ (-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$r \sin l\varphi = \begin{cases} (-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ -(-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$r^2 \cos l\varphi = (-1)^l \cos l\varphi$$

$$r^2 \sin l\varphi = (-1)^l \sin l\varphi$$

$$r^3 \cos l\varphi = \begin{cases} (-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ -(-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$r^3 \sin l\varphi = \begin{cases} (-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ (-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$a \cos l\varphi = \cos l\varphi$$

$$a \sin l\varphi = -\sin l\varphi$$

$$b \cos l\varphi = (-1)^l \cos l\varphi$$

$$b \sin l\varphi = -(-1)^l \sin l\varphi$$

$$c \cos l\varphi = \begin{cases} (-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ -(-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$c \sin l\varphi = \begin{cases} -(-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ -(-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$d \cos l\varphi = \begin{cases} (-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ (-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

$$d \sin l\varphi = \begin{cases} -(-1)^n \sin l\varphi & \text{gdy } l = 2n \\ (-1)^n \cos l\varphi & \text{gdy } l = 1 + 2n \end{cases}$$

gdzie $n = 0, 1, 2, \dots$. Powyższe relacje pozwalają dokonać klasyfikacji harmonik fourierowskich.

- 1 Funkcje 1 oraz $\cos 4n\varphi$, dla $n = 1, 2, 3, \dots$, są niezmiennikami oraz każda z nich ma takie same własności jak funkcja f_1 należąca do podzbioru A .
- 2 Funkcje $\sin 4n\varphi$, dla $n = 1, 2, 3, \dots$, są niezmiennikami i każda z nich ma takie same własności jak funkcja f_4 należąca do podzbioru D .
- 3 Funkcje $\cos(1 + 4n)\varphi$ oraz $\sin(1 + 4n)\varphi$ dla ustalonego $n = 0, 1, 2, \dots$, mają takie same własności jak funkcje odpowiednio f_5 oraz f_6 , należące do podzbioru E_1 .
- 4 Funkcje $\cos(2 + 4n)\varphi$, dla $n = 0, 1, 2, \dots$, są niezmiennikami i każda z nich ma takie same własności jak funkcja f_2 należąca do podzbioru B .
- 5 Funkcje $\sin(2 + 4n)\varphi$, dla $n = 0, 1, 2, \dots$, są niezmiennikami i każda z nich ma takie same własności jak funkcja f_3 należąca do podzbioru C .
- 6 Funkcje $\cos(3 + 4n)\varphi$ oraz $\sin(3 + 4n)\varphi$ dla ustalonego $n = 0, 1, 2, \dots$, mają takie same własności jak funkcje odpowiednio f_5 oraz f_6 należące do podzbioru E_2 .

Zatem wszystkie harmoniki fourierowskie mogą być sklasyfikowane w jedynie pięć możliwych typów podzbiorów niezmienniczych.

A.2 Własności symetrii komponentów oddziaływania parującego

Komponenty części singletowej (3.2) oraz trypletowej (3.3) oddziaływania parującego mają następujące własności symetrii ze względu na elementy grupy C_{4v} :

- 1 funkcje 1 oraz $\cos k_x + \cos k_y$ mają takie same własności jak funkcja f_1 należąca do podzbioru A ,
- 2 funkcja $\cos k_x - \cos k_y$ ma takie same własności jak funkcja f_2 należąca do podzbioru B .
- 3 a funkcje $\sin k_x$ oraz $\sin k_y$ mają takie same własności jak funkcje odpowiednio f_5 oraz f_6 należące do podzbioru E_1 .

Po wykonaniu wszystkich trzech transformacji odpowiadające im komponenty, zależne od zmiennych ξ oraz φ , występujące w części singletowej (3.27) oraz trypletowej (3.28), muszą mieć dokładnie takie same własności symetrii. Zauważmy, że funkcja

$$f(\varphi) = \frac{|\sin \varphi| - |\cos \varphi|}{|\sin \varphi| + |\cos \varphi|},$$

zdefiniowana równaniem (3.26), dla $0 \leq \varphi < 2\pi$ ma takie same własności jak funkcja f_2 należąca do podzbioru B . Zatem $gX(\xi, \varphi) = X(\xi, \varphi)$ dla $g \in \{e, r^2, a, b\}$ oraz $gX(\xi, \varphi) = Y(\xi, \varphi)$ dla $g \in \{r, r^3, c, d\}$ jak również $gY(\xi, \varphi) = Y(\xi, \varphi)$ dla $g \in \{e, r^2, a, b\}$ oraz $gY(\xi, \varphi) = X(\xi, \varphi)$ dla $g \in \{r, r^3, c, d\}$. Wynika stąd, że

- 1' funkcja $\frac{1}{2\eta} [X(\xi, \varphi) + Y(\xi, \varphi) - 2]$ ma takie same własności jak funkcja f_1 należąca do podzbioru A ,
- 2' a funkcja $\frac{1}{2\eta} [Y(\xi, \varphi) - X(\xi, \varphi)]$ ma takie same własności jak funkcja f_2 należąca do podzbioru B ,
- 3' Ponadto funkcje $(\pm) \frac{\sqrt{2}}{2\eta} \sqrt{\eta^2 - [X(\xi, \varphi) - 1]^2}$ i $(\pm) \frac{\sqrt{2}}{2\eta} \sqrt{\eta^2 - [Y(\xi, \varphi) - 1]^2}$ mają takie same własności jak funkcje odpowiednio f_5 oraz f_6 należące do podzbioru E_1 .

Dodatek B

Dominujące typy zderzeń binarnych cząstek o pędach leżących w pobliżu powierzchni Fermiego

Dla cząstek z paraboliczną (linową) relacją dyspersyjną, biorących udział w zderzeniach binarnych na powierzchni (linii) Fermiego, spełnione są następujące relacje

$$|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}' + \mathbf{q}| = |\mathbf{p}'| = |\mathbf{p} + \mathbf{q}| = p_F. \quad (\text{B.1})$$

Przedstawiając wektor \mathbf{q} w postaci $\mathbf{q} = a\mathbf{p} + b\mathbf{p}'$, gdzie a oraz b są liczbami rzeczywistymi, z równania (B.1) otrzymujemy układ dwóch równań

$$(1 + a)^2 + b^2 + 2(1 + a)b \cos \theta = 1,$$

$$(1 + b)^2 + a^2 + 2(1 + b)a \cos \theta = 1,$$

gdzie θ oznacza kąt zawarty pomiędzy wektorami \mathbf{p} oraz \mathbf{p}' . Układ ten może być również zapisany w postaci

$$(1 + a)a + (1 + b)b + [(1 + a)b + (1 + b)a] \cos \theta = 0,$$

$$(a - b)(1 - \cos \theta) = 0.$$

Dla dowolnej wartości θ istnieją dwa niezależne rozwiązania

$$a = b = 0 \quad \text{oraz} \quad a = b = -1.$$

Pierwszemu z nich odpowiada wektor $\mathbf{q} = 0$ (tzn. $\mathbf{p} + \mathbf{q} = \mathbf{p}$ oraz $\mathbf{p}' + \mathbf{q} = \mathbf{p}'$), natomiast drugiemu $\mathbf{q} = -\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ (tzn. $\mathbf{p} + \mathbf{q} = -\mathbf{p}'$ oraz $\mathbf{p}' + \mathbf{q} = -\mathbf{p}$). Pierwsze rozwiązanie odpowiada przypadkowi zerowego transferu pędu, podczas gdy drugie oddziaływaniu cząstek z przeciwnymi pędami.

Rozszerzenie powyższych rozważań na przypadek gdy wektory \mathbf{p} oraz \mathbf{p}' leżą w pobliżu powierzchni (linii) Fermiego, tzn.

$$\begin{aligned} |\mathbf{p}| &= (1 + c_1)p_F, & |\mathbf{p}' + \mathbf{q}| &= (1 + c_2)p_F, \\ |\mathbf{p}'| &= (1 + c_3)p_F, & |\mathbf{p} + \mathbf{q}| &= (1 + c_4)p_F, \end{aligned}$$

gdy $|c_i| \ll 1$, $i = 1, 2, 3, 4$, powinno być przeprowadzone metodą perturbacyjną. Wówczas można założyć, że

$$\mathbf{q} = (a + a')\mathbf{p} + (b + b')\mathbf{p}',$$

gdzie a' oraz b' są tego samego rzędu co c_i , tzn. $|a'|, |b'| \ll 1$. Stosując poprzednią metodę oraz zasadę zachowania energii otrzymujemy następujący układ równań

$$\begin{aligned} (1 + a)a' + b b' + (1 + a)^2 c_1 + b^2 c_3 &= c_4, \\ (1 + a)b' + b a' + (1 + a) b (c_1 + c_3) &= 0, \\ (1 + b)b' + a a' + (1 + b)^2 c_3 + a^2 c_1 &= c_2, \\ (1 + b)a' + a b' + (1 + b) a (c_1 + c_3) &= 0, \end{aligned}$$

oraz

$$c_1 + c_2 = c_3 + c_4.$$

Równania te, po uwzględnieniu $a = b = 0$, upraszczają się do postaci

$$a' = b' = 0 \quad \text{oraz} \quad c_1 = c_4, \quad c_2 = c_3.$$

Zatem $\mathbf{q} = 0$, chociaż w ogólności $|\mathbf{p}| \neq |\mathbf{p}'|$. Z drugiej strony dla $a = b = -1$ otrzymujemy

$$a' = b' = 0 \quad \text{oraz} \quad c_1 = c_2 = c_3 = c_4.$$

Zatem $\mathbf{q} = -\mathbf{p} - \mathbf{p}'$ oraz $|\mathbf{p}| = |\mathbf{p}'|$, tak że $\xi_{\mathbf{p}} = \xi_{\mathbf{p}'}$.

Przedstawione rozważania dowodzą, że jedynie dwa typy oddziaływań są faworyzowane w układzie z paraboliczną relacją dyspersyjną. Pierwsze z nich jest oddziaływaniem w duchu teorii cieczy Fermiego, natomiast drugie jest odpowiedzialne za tworzenie par Coopera o określonej symetrii, jeżeli jeden (lub kilka)

ze współczynników rozwinięcia potencjału oddziaływania jest ujemny. Z kolei wykonując odwrotną transformację konforemną zauważamy, że znów dominują zderzenia z zerowym transferem pędu oraz zderzenia cząstek o przeciwnych pędach.

Zatem, ponieważ równanie (B.1) implikuje

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'} = \epsilon_{\mathbf{k}'} = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'} = \epsilon_{\text{F}},$$

należy się spodziewać, że dla złożonych postaci relacji dyspersyjnej, dowolnych wektorów \mathbf{k}, \mathbf{k}' oraz wszystkich możliwych wektorów \mathbf{q}' równość ta jest spełniona gdy $\mathbf{q}' = 0$ lub $\mathbf{q}' = -\mathbf{k} - \mathbf{k}'$.

Dodatek C

Niestabilności

Landaua–Pomeranczuka

Oddziaływanie w kanale cząstka-dziura, zawierające poprawki Fermi-cieczowe, dla układów dwu- i trójwymiarowych może być uwzględnione odpowiednio w postaci

$$G^{\text{s,a}}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') = G_0^{\text{s,a}} + 2 \sum_{l=1}^{\infty} G_l^{\text{s,a}} \cos l(\varphi - \varphi'), \quad (\text{C.1})$$

$$F^{\text{s,a}}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') = \sum_{l=0}^{\infty} F_l^{\text{s,a}} P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'), \quad (\text{C.2})$$

gdzie $\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}' = \cos(\varphi - \varphi')$, $P_l(x)$ są wielomianami Legendre'a, natomiast $G_l^{\text{s,a}}$ oraz $F_l^{\text{s,a}}$ są parametrami Landaua spełniającymi warunki [4, 74–76, 106].

$$-1 < G_l^{\text{s,a}} < \infty \quad \text{lub} \quad -(2l + 1) < F_l^{\text{s,a}} < \infty.$$

Ponadto, aby zapewnić zbieżność oddziaływań, parametry $G_l^{\text{s,a}}$ oraz $F_l^{\text{s,a}}$ powinny dążyć do zera dostatecznie szybko przy $l \rightarrow \infty$. Wprowadzając amplitudy rozpraszania [76]

$$R^{\text{s,a}}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') = r_0^{\text{s,a}} + 2 \sum_{l=1}^{\infty} r_l^{\text{s,a}} \cos l(\varphi - \varphi'),$$

$$R^{\text{s,a}}(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') = \sum_{l=0}^{\infty} R_l^{\text{s,a}} P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'),$$

odpowiednio dla układów dwu- i trójwymiarowych, otrzymujemy funkcje odgrywające w teorii cieczy Fermiego identyczną rolę jak funkcje (C.1) oraz (C.2).

Relacje między współczynnikami rozwinięć (C.1) i (C.3) oraz (C.2) i (C.3)

$$r_l^{s,a} = \frac{G_l^{s,a}}{1 + G_l^{s,a}} \qquad R_l^{s,a} = \frac{F_l^{s,a}}{1 + \frac{1}{2l+1} F_l^{s,a}},$$

implikują warunki stabilności postaci

$$-\infty < r_l^{s,a} < 1 \qquad \text{oraz} \qquad -\infty < R_l^{s,a} < 2l + 1.$$

Ponieważ $G_l^{s,a}, F_l^{s,a} \rightarrow 0$ dla $l \rightarrow \infty$, to również współczynniki $r_l^{s,a}, R_l^{s,a}$ dążą do zera dla dużych wartości l . Zatem, jeżeli powyższe warunki są spełnione, w rozważanym układzie stabilna jest ciecz Fermiego.

Z kolei, gdy np. w układzie dwuwymiarowym mamy $r_l^s \rightarrow r_\infty^s > 0$ dla $l \rightarrow \infty$, wówczas amplituda rozpraszania

$$\begin{aligned} R^s(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') &= r_0^s - r_\infty^s + 2 \sum_{l=1}^{\infty} (r_l^s - r_\infty^s) \cos l(\varphi - \varphi') + r_\infty^s \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{il(\varphi - \varphi')} \\ &= r_0^s - r_\infty^s + 2 \sum_{l=1}^{\infty} (r_l^s - r_\infty^s) \cos l(\varphi - \varphi') + r_\infty^s \delta(\varphi - \varphi'). \end{aligned}$$

Zatem

$$R_{\mathbf{k}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sim r_\infty^s \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

i niestabilność ta odpowiada osobliwej cieczy Fermiego.

Funkcja tworząca wielomianów Legendre'a jest postaci

$$\sum_{l=0}^{\infty} t^l P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}') = \frac{1}{\sqrt{1 - 2(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}')t + t^2}},$$

gdzie $0 \leq t < 1$ oraz $|\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}}'| \leq 1$. W granicy $t \rightarrow 1$ określony przez nią szereg jest rozbieżny gdy $|\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{k}}'| \rightarrow 0$. Podobnie jak w przypadku dwuwymiarowym, jeżeli $R_l^s \rightarrow R_\infty^s > 0$ dla $l \rightarrow \infty$, poprzez odpowiedni wybór współczynników R_∞^s oraz R_l^s . A zatem niestabilności Landaua–Pomeranczuka mogą prowadzić do różnych form cieczy nie-Fermiego.

Bibliografia

- [1] M. R. Norman, C. Pépin, *Rep. Prog. Phys.* **66**, 1547 (2003).
- [2] R. Gonczarek, M. Gładysiewicz-Kudrawiec, *Scenariusz Van Hove'a w nadprzewodnictwie wysokotemperaturowym* (Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław, 2004).
- [3] J. Spałek, *Postępy Fizyki* **53D**, 22 (2002).
- [4] C. M. Varma, Z. Nussinov, W. van Saarloos, *Phys. Rep.* **361**, 267 (2002).
- [5] J. Labbe, J. Bok, *Europhys. Lett.* **3**, 1225 (1987).
- [6] R. S. Markiewicz, *Physica C* **168**, 195 (1990).
- [7] R. S. Markiewicz, *Physica C* **183**, 303 (1991).
- [8] C. C. Tsuei, D. M. Newns, C. C. Chi, P. C. Pattnaik, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 2724 (1990).
- [9] C. C. Tsuei, D. M. Newns, C. C. Chi, P. C. Pattnaik, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1091 (1992).
- [10] J. Bok, *Physica C* **209**, 107 (1993).
- [11] J. Bouvier, J. Bok, *Physica C* **282-287**, 294 (1997).
- [12] J. Bouvier, J. Bok, *Physica C* **288**, 217 (1997).
- [13] J. Bouvier, J. Bok, w: *The Gap Symmetry and Fluctuations in High- T_c Superconductors*, red. J. Bok, G. Deutscher, D. Pavuna, S. Wolf (Plenum Press, 1998).
- [14] J. M. Getino, M. de Llano, H. Rubio, *Phys. Rev. B* **48**, 597 (1993).

-
- [15] X. Tiefeng, B. Guiru, *Z. Phys. B* **89**, 35 (1992).
- [16] J. E. Hirsch, D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 2732 (1986).
- [17] M. Gładysiewicz, R. Gonczarek, M. Mulak, *Acta Phys. Pol. A* **97**, 1039 (2000).
- [18] Y. Yokoya, Y. O. Nakamura, *Solid State Comm.* **98**, 133 (1996).
- [19] M. Cyrot, D. Mayou, J. P. Julien, F. Cyrot-Lackmann, *J. Phys.: Condens. Matter* **1**, 4359 (1989).
- [20] G. Litak, *phys. stat. solidi (b)* **229**, 1427 (2002).
- [21] R. Grassme, P. Seidel, *J. Supercond.* **9**, 619 (1996).
- [22] J. X. Zhu, D. N. Sheng, C. S. Ting, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4944 (2000).
- [23] R. S. Markiewicz, *J. Phys. Chem. Solids* **58**, 1179 (1997).
- [24] R. Baquero, C. Trallero-Giner, D. Quesada, *Physica C* **271**, 122 (1996).
- [25] S. Dorbolo, M. Houssa, M. Ausloos, *Physica C* **267**, 24 (1996).
- [26] B. Mitrović, J. P. Carbotte, *Can. J. Phys.* **61**, 758 (1983).
- [27] Y. Yokoya, Y. O. Nakamura, *Physica C* **248**, 83 (1995).
- [28] P. Udomsamuthirun, S. Ratanaburi, S. Seantalard, *J. Supercond.* **9**, 603 (1996).
- [29] R. J. Radtke, K. Levin, H.-B. Schüttler, M. R. Norman, *Phys. Rev. B* **48**, 15957 (1993).
- [30] R. J. Radtke, M. R. Norman, *Phys. Rev. B* **50**, 9554 (1994).
- [31] E. A. Pashitskii, V. I. Pentegov, E. Abraham, *JETP Lett.* **67**, 495 (1998).
- [32] R. Gonczarek, M. Krzyżosiak, M. Mulak, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 4899 (2004).
- [33] R. Gonczarek, M. Gładysiewicz, M. Mulak, *Int. J. Mod. Phys. B* **15**, 491 (2001).

-
- [34] R. Gonczarek, M. Gładysiewicz, M. Mulak, *phys. stat. solidi (b)* **233**, 351 (2002).
- [35] D. Vojta, Y. Zhang, S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4940 (2000).
- [36] R. Gonczarek, M. Mulak, *Phys. Lett. A* **251**, 262 (1999).
- [37] M. Gładysiewicz-Kudrawiec, R. Gonczarek, M. Krzyżosiak, *Physica B* **359-361**, 572 (2005).
- [38] M. Gładysiewicz, R. Gonczarek, M. Mulak, *Acta Phys. Pol. A* **101**, 865 (2002).
- [39] S. L. Bud'ko, G. Lapertot, C. Petrovic, C. E. Cunningham, N. Anderson, P. C. Canfield, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1877 (2001).
- [40] D. K. Finnemore, J. E. Ostenson, S. L. Bud'ko, G. Lapertot, P. C. Canfield, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2420 (2001).
- [41] P. C. Canfield, D. K. Finnemore, S. L. Bud'ko, J. E. Ostenson, G. Lapertot, C. E. Cunningham, C. Petrovic, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 2423 (2001).
- [42] J. F. Annett, *Physica C* **317-318**, 1 (1998).
- [43] A. M. Martin, G. Litak, B. Györfy, J. F. Annett, K. I. Wysokiński, *Phys. Rev. B* **60**, 7523 (1999).
- [44] C. Buhler, S. Yunoki, A. Moreo, *Phys. Rev. B* **62**, R3620 (2000).
- [45] Y. Maeno, H. Hashimoto, K. Yosida, S. Nishizaki, S. Fujita, J. G. Bednorz, F. Lichtenberg, *Nature* **372**, 532 (1994).
- [46] Y. Maeno, T. M. Rice, M. Sigrist, *Phys. Today* **54**, 42 (2001).
- [47] K. Maki, S. Haas, *Phys. Rev. B* **62**, R11969 (2000).
- [48] E. Puchkaryov, K. Maki, *Physica C* **341-348**, 727 (2000).
- [49] D. Y. Xing, M. Liu, Y. G. Wang, J. Dong, *Phys. Rev. B* **60**, 9775 (1999).
- [50] H. Shimahara, S. Hata, *Phys. Rev. B* **62**, 14541 (2000).

-
- [51] J. González, *Phys. Rev. B* **63**, 024502 (2000).
- [52] E. Y. Sherman, *Phys. Rev. B* **58**, 14187 (1998).
- [53] P. Monthoux, G. G. Lonzarich, *Phys. Rev. B* **66**, 224504 (2002).
- [54] F. Mila, E. Abrahams, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2379 (1991).
- [55] A. Balatsky, E. Abrahams, *Phys. Rev. B* **45**, 13125 (1992).
- [56] M. H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **12**, 664 (1964).
- [57] W. L. McMillan, *Phys. Rev.* **167**, 331 (1968).
- [58] R. Gonczarek, M. Krzyżosiak, *Int. J. Mod. Phys. B* **17**, 5683 (2003).
- [59] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, *Methods of quantum field theory in statistical physics* (Dover Publications, Nowy Jork, 1975).
- [60] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Kwantowa teoria układów wielu cząstek* (PWN, Warszawa, 1988).
- [61] M. Mulak, R. Gonczarek, *Acta Phys. Pol. A* **89**, 689 (1996).
- [62] R. Gonczarek, M. Mulak, *phys. stat. solidi (b)* **208**, 457 (1998).
- [63] R. Gonczarek, M. Mulak, W. Kumala, *Acta Phys. Pol. A* **95**, 231 (1999).
- [64] W. Kumala, R. Gonczarek, M. Mulak, *Acta Phys. Pol. A* **97**, 693 (2000).
- [65] F. C. Zhang, T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **37**, 3759 (1988).
- [66] M. Cyrot, *Solid State Comm.* **62**, 821 (1987).
- [67] M. Cyrot, *Solid State Comm.* **63**, 1015 (1987).
- [68] M. Cyrot, *Nature* **330**, 115 (1987).
- [69] G. Baskaran, Z. Zou, P. W. Anderson, *Solid State Comm.* **63**, 973 (1987).
- [70] V. J. Emery, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2794 (1987).
- [71] P. W. Anderson, *Science* **288**, 480 (2000).

- [72] D. Pines, *Physica C* **341-348**, 59 (2000).
- [73] D. Manske, K. H. Bennemann, *Physica C* **341-348**, 83 (2000).
- [74] I. Y. Pomeranchuk, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **34**, 524 (1958).
- [75] R. Gonczarek, I. H. Krzyżanowski, *Phys. Lett. A* **171**, 107 (1992).
- [76] P. M. Platzman, P. A. Wolff, *Waves and Interactions in Solid State Plasmas* (Academic Press, 1973).
- [77] R. Gonczarek, M. Krzyżosiak, *phys. stat. solidi (b)* **241**, 352 (2004).
- [78] M. Krzyżosiak, R. Gonczarek, *Int. J. Mod. Phys. B* **18**, 4143 (2004).
- [79] R. Micnas, J. Ranniger, S. Robaszkiewicz, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 113 (1990).
- [80] J. Spałek, W. Wójcik, *Phys. Rev. B* **37**, 1532 (1988).
- [81] J. Spałek, *Phys. Rev. B* **40**, 5180 (1989).
- [82] J. Spałek, *Physica B* **163**, 621 (1990).
- [83] K. Byczuk, J. Spałek, W. Wójcik, *Physica C* **235-240**, 2347 (1994).
- [84] K. Byczuk, J. Spałek, *Phys. Rev. B* **50**, 11403 (1994).
- [85] J. Spałek, *Acta Phys. Pol. A* **85**, 39 (1994).
- [86] J. Spałek, W. Wójcik, *Acta Phys. Pol. A* **85**, 357 (1994).
- [87] K. Byczuk, J. Spałek, *Acta Phys. Pol. A* **85**, 337 (1994).
- [88] K. Byczuk, J. Spałek, *Phys. Rev. B* **51**, 7934 (1995).
- [89] J. Karbowski, J. Spałek, *Acta Phys. Pol. A* **85**, 341 (1994).
- [90] G. S. Joyce, S. Sarkar, J. Spałek, K. Byczuk, *Phys. Rev. B* **53**, 990 (1996).
- [91] J. Hyyppä, K. Byczuk, J. Spałek, J. M. Honig, *Solid State Comm.* **98**, 367 (1996).
- [92] K. Byczuk, J. Spałek, W. Wójcik, *Molecular Phys. Rep.* **12**, 219 (1995).

- [93] K. Byczuk, J. Spałek, W. Wójcik, *Acta Phys. Pol. B* **29**, 3871 (1998).
- [94] N. N. Bogolubov (mł.), *Metody badania modelowych hamiltonianów* (Nauka, Moskwa, 1974) [j. ros.].
- [95] N. N. Bogolubov (mł.), B. I. Sadovnikov, *Niektóre zagadnienia mechaniki statystycznej* (Wysszaja Szkoła, Moskwa, 1975) [j. ros.].
- [96] J. Czerwonko, *Physica C* **235-240**, 2337 (1994).
- [97] R. Gonczarek, M. Krzyżosiak, *phys. stat. solidi (b)* **238**, 29 (2003).
- [98] M. Mulak, R. Gonczarek, *Czech. J. Phys.* **46**, 3379 (1996).
- [99] M. Mulak, R. Gonczarek, *Acta Phys. Pol. A* **92**, 1177 (1997).
- [100] R. Micnas, M. H. Pedersen, S. Schafroth, T. Schneider, J. J. Rodriguez-Nunez, H. Beck, *Phys. Rev. B* **52**, 16223 (1995).
- [101] R. Micnas, M. H. Pedersen, S. Schafroth, T. Schneider, J. J. Rodriguez-Nunez, H. Beck, *Phys. Rev. B* **54**, 3662 (1996).
- [102] R. P. Feynman, *Wykłady z mechaniki statystycznej* (PWN, Warszawa, 1980).
- [103] A. V. Svidzinskii, *Przestrzennie niejednorodne zagadnienia w teorii nadprzewodnictwa* (Nauka, Moskwa, 1982) [j. ros.].
- [104] J. R. Engelbrecht, A. Nazarenko, *Physica C* **341**, 139 (2000).
- [105] Z. Szotek, B. L. Györfy, W. M. Temmerman, *Phys. Rev. B* **62**, 3997 (2000).
- [106] A. J. Leggett, *Ann. Phys. (NY)* **46**, 76 (1968).