

INSTYTUT FIZYKI
POLITECHNIKA WROCŁAWSKA

MARTA GŁADYSIEWICZ-KUDRAWIEC

**ROLA ANIZOTROPII I MECHANIZMÓW ODDZIAŁYWANIA W
UKŁADACH NADPRZEWODZĄCYCH**

ROZPRAWA DOKTORSKA

wykonana pod kierunkiem
Prof. dr hab. Ryszarda Gonczarka

Wrocław, czerwiec 2003

Składam gorące podziękowania promotorowi pracy profesorowi Ryszardowi Gonczarkowi za okazaną mi pomoc w realizacji pracy doktorskiej, za rozbudzenie we mnie zainteresowania teorią nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego.

Bardzo dziękuję również koledze z zespołu doktorowi Maciejowi Mulakowi za okazaną pomoc.

Spis treści

1	Wstęp	3
1.1	Tezy rozprawy doktorskiej	3
1.2	Scenariusz Van Hove'a	4
1.2.1	Geneza scenariusza Van Hove'a	4
1.2.2	Scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodników typu s	6
1.2.3	Model ciasnego wiązania	9
1.2.4	Scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnictwa typu d	13
2	Transformacje przestrzeni i gęstość stanów	19
2.1	Ciecz Fermiego	19
2.2	Model anizotropowej cieczy Fermiego	20
2.3	Transformacje przestrzeni odwrotnej	21
2.3.1	Ortonormalizacja przestrzeni	21
2.3.2	Transformacje krzywoliniowe i pole gęstości stanów	22
2.3.3	Uogólniona transformacja konforemna	25
2.4	Model kwazicząstek Landaua	27
2.4.1	Układ anizotropowy	29
2.4.2	Jednopasmowy model Hubbarda	30
3	Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu s	40
3.1	Teoria typu BCS dla anizotropowego nadprzewodnika	40
3.2	Analiza gęstości stanów w modelu ciasnego wiązania	43
3.3	Aproksymacje funkcji i obliczenia numeryczne	45
3.4	Własności nadprzewodnika ze sparowaniem s dla zamodelowanych postaci gęstości stanów	50
3.4.1	Wprowadzenie	50
3.4.2	Formalizm	50
3.4.3	Efekty obecności fluktuacji w gęstości stanów	55
3.4.4	Nieosiągalność nadprzewodnictwa	60
3.4.5	Własności szczeliny energetycznej dla $T \rightarrow T_c$ i $T \rightarrow 0$	62
3.5	Wnioski	63
4	Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu d	65
4.1	Formalizm	65
4.2	Przypadek temperatur podkrytycznych	67
4.3	Wyniki numeryczne	71
4.3.1	Temperatura krytyczna	71

4.3.2	Skok ciepła właściwego i ciepło właściwe fazy normalnej	72
5	Podsumowanie	76
5.1	Wnioski	76

Rozdział 1

Wstęp

1.1 Tezy rozprawy doktorskiej

Celem rozprawy doktorskiej była próba znalezienia podejścia pozwalającego na unifikację opisu dla pewnych modeli nadprzewodnictwa nisko i wysokotemperaturowego. Punktem wyjścia jest stwierdzenie, że izotropowa teoria BCS, która pozwoliła wyjaśnić zjawisko nadprzewodnictwa w izotopach metali, nie może być bezpośrednio zastosowana do grupy nadprzewodników wysokotemperaturowych. Związki które wykazują wysoką temperaturę przejścia wywodzą się w większości z rodziny magnetyków. Do opisu zjawiska nadprzewodnictwa w tych związkach stosuje się modele bazujące na hamiltonianie Hubbarda, jak model ciasnego wiązania lub model t - J , uwzględniające anizotropowość układu. Dążenie do podania jednolitego opisu dla tych dwóch podejść jest punktem wyjścia do rozważań postawionych w rozprawie doktorskiej w której postawiono następujące tezy:

- Wpływ fluktuacji gęstości stanów na własności termodynamiczne nadprzewodnika
- Model anizotropowej cieczy Fermiego z nieparabolicznym widmem wzbudzeń.
- Zmodyfikowanie równania na szczelinę w układach anizotropowych o złożonych mechanizmach oddziaływania
- Wyznaczenie stanów równowagowych i własności termodynamicznych nadprzewodnika z dominującą składową d

Tezy te zostały zrealizowane w kolejnych rozdziałach. W pierwszym rozdziale w podrozdziale *Scenariusz Van Hove'a*, przedstawiono w skrócie teorię, która w zasadniczy sposób wiąże się z podejściem zaprezentowanym w pracy. W rozdziale drugim *Transformacje przestrzeni i gęstość stanów* opisano model anizotropowej cieczy Fermiego. Wprowadzono ekwiwalentny opis układu anizotropowego poprzez transformacje przestrzeni. Dzięki tak przeprowadzonej renormalizacji uzyskano przestrzeń izotropową zanurzoną w polu skalarnej gęstości stanów, które zachowuje symetrię wejściowego układu. Jest to nowe podejście do opisu układu, rozszerzające standardowe pojęcie gęstości stanów. Szczegółowe obliczenia przeprowadzono dla dwuwymiarowego modelu Hubbarda, opisującego dwuwymiarowy układ płaszczyzn miedziowo-tlenowych. Przedstawiono pole skalarnej gęstości stanów dla dozwolonych wartości parametrów modelu. Gęstość stanów dla całego obszaru stosowności modelu została obliczona numerycznie. W dalszej części *Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu s* rozważono własności

termodynamiczne nadprzewodnika z zamodelowanymi fluktuacjami gęstości stanów. Następnie w rozdziale *Rozszerzony scenariusz Van Hove’a dla nadprzewodnika typu d* obliczono własności dla sparowania typu *d*. Wprowadzone fluktuacje gęstości stanów reprezentują osobliwości typu Van Hove’a. Pokazano, że rozszerzenie scenariusza Van Hove’a poprzez zastąpienie uśrednionej gęstości stanów przez pole skalarne gęstości stanów ma istotny wpływ na własności nadprzewodnika typu *d*.

1.2 Scenariusz Van Hove’a

W ostatnich latach szczególnym zainteresowaniem w teoretycznych badaniach nadprzewodników wysokotemperaturowych cieszy się scenariusz Van Hove’a. U podstaw tego podejścia leży założenie, że za właściwości termodynamiczne nadprzewodników wysokotemperaturowych odpowiedzialne są osobliwości gęstości stanów w pobliżu poziomu Fermiego. Przedstawienie tego podejścia oraz zestawienie z rozwiniętym formalizmem korespondującym z opisem utrzymanym w konwencji BCS stanowią zasadnicze elementy niniejszej pracy.

1.2.1 Geneza scenariusza Van Hove’a

Genezy scenariusza Van Hove’a należy szukać jeszcze przed odkryciem nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego. Już w latach siedemdziesiątych [15, 17, 16] zwrócono uwagę na gwałtowne zmiany elektronowej gęstości stanów w pobliżu poziomu Fermiego w międzymetalicznych związkach typu $A15$ inaczej β -wolframu czyli : A_3B ($A = V, Nb$ $B = Si, Ge, Al, Ga, Sn$). Z faktem tym powiązano dużą w porównaniu z czystymi nadprzewodzącymi metalami temperaturę przejścia fazowego. Już wówczas w pracach teoretycznych przewidywano nie tylko zwiększenie temperatury krytycznej ale również jej obniżanie związane z postacią fluktuacji gęstości stanów. W pracach [15, 17, 16] przedstawiono obliczenia, które wykorzystywały podane przez Eliashberga równanie uwzględniające wpływ zmiany elektronowej gęstości stanów na temperaturę krytyczną. Pokazano również [16], że konkretna postać gęstości stanów $N(\xi)$ nie ma wpływu na kształt funkcjonu $\delta T_c / \delta N(\xi)$ (wariacja temperatury krytycznej po funkcji gęstości stanów), który jest uniwersalną funkcją ξ/T_c (ξ jest energią mierzona od poziomu Fermiego). Zwrócono również uwagę na fakt, że zmienna gęstości stanów wymaga innego określenia dla występującego w teorii BCS bezwymiarowego parametru oddziaływania parującego $\lambda = N(0)V$. Postać fluktuacji została zaproponowana w kolejnych pracach [18, 19] to pik lorentzowski i osobliwość trójkątna. Rozważenie własności termodynamicznych z takimi postaciami fluktuacji rozważono w drugim podrozdziale 3.4. Odminną niż w teorii BCS postać elektronowej gęstości stanów zaczęto wiązać z innymi niż tylko podwyższona temperatura krytyczna ($T_c \sim 20K$) zmianami, ale także z takimi jak np. zależność podatności magnetycznej od temperatury oraz niestabilność struktury krystalograficznej. Zapoczątkowało to poszukiwania teoretyczne istnienia odpowiednich fluktuacji gęstości stanów. W latach osiemdziesiątych jeszcze przed odkryciem nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego [21] takie fluktuacje powiązano z teorią stworzoną przez Van Hove’a [22]. Van Hove sklasyfikował osobliwości mogące teoretycznie istnieć w elektronowej gęstości stanów w przypadku dwu i trójwymiarowego kryształu oraz pokazał, że pewne zaskakujące właściwości rozpatrywanego układu mogą być związane z istnieniem tego typu osobliwości. W 1986 roku Hirsch and Scalapino rozważali dwuwymiarowy model Hubbarda na sieci kwadratowej, uwzględniając oddziaływania pomiędzy najbliższymi i kolejnymi najbliższymi sąsiadami oraz zaniedbując oddziaływania

elektronowe. Rozwiązanie takiego prostego modelu prowadziło do otrzymania takiej postaci energii, która wykazywała osobliwość typu logarytmicznego określonej według klasyfikacji Van Hove'a mianem punktu siodłowego. Stosując metodę symulacyjną Monte Carlo pokazano, że tego typu osobliwość może być odpowiedzialna za podniesienie temperatury krytycznej. Przewidziano również możliwość otrzymania wyższej niż dotychczas obserwowano temperatury przejścia. Lata dziewięćdziesiąte wraz z eksperymentalnym odkrywaniem nowych materiałów nadprzewodzących przyniosły obszerny rozwój opisanej teorii. Dwuwymiarowy lub kwazidwuwymiarowy charakter nadprzewodników wysokotemperaturowych potwierdzono eksperymentalnie i powiązano to z istnieniem płaszczyzn miedziowo-tlenowych CuO_2 . Podjęto też próbę zmodyfikowania teorii BCS [23] poprzez zastąpienie stałej gęstości stanów przez postać posiadającą osobliwość typu logarytmicznego. Taki model zaczęto nazywać scenariuszem Van Hove'a [23, 24, 25]. Proste wstawienie tak skonstruowanej funkcji do równania na szczelinę pozwoliło podać formułę na temperaturę krytyczną $T_c \sim \exp(-1/\sqrt{\lambda})$ znacznie różniącą się od typowego rezultatu przewidzianego przez teorię BCS $T_c \sim \hbar\omega_D \exp(-1/\lambda)$. Takie oszacowanie temperatury krytycznej pozwoliło z kolei podnieść jej przewidywalną wartość do około 100K. Eksperymentalnie potwierdzona zmiana wartości temperatury w takich nadprzewodnikach jak np. $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ wraz ze zmianą domieszkowania x , została powiązana z przesuwaniem się osobliwości względem poziomu Fermiego. Ten sam prosty model pozwolił wyjaśnić mały efekt izotopowy [26]. Pokazano, że kiedy temperatura wzrasta wraz ze wzrostem wartości gęstości stanów na poziomie Fermiego maleje wartość współczynnika izotopowego. Podobne obliczenia zostały wykonane dla nadprzewodnika typu BCS z dodaną logarytmiczną osobliwością [27], gdzie policzono wartość współczynnika $\mathcal{R}_1 \equiv 2\Delta(0)/k_B T_C$ oraz skok ciepła właściwego. Pokazano również, że w takim modelu najwyższe temperatury krytyczne uzyskuje się, kiedy osobliwość leży dokładnie na poziomie Fermiego. Uznano jednak, że ten model potrafi który potrafi dobrze wytłumaczyć dużą wartość T_c nie jest wystarczający do wyjaśnienia słabego efektu izotopowego i dużej wartości współczynnika $\mathcal{R}_1$. Innym ważnym kryterium w badaniu zgodności teorii z eksperymentem wartości temperatury krytycznej i współczynnika $\mathcal{R}_1$ są pozostałe charakterystyczne współczynniki: $\mathcal{R}_2 \equiv \Delta C(T_c)/C_N(T_c)$, gdzie $\Delta C(T_c) = C_S(T_c) - C_N(T_c)$ jest skokiem ciepła właściwego pomiędzy fazami nadprzewodzącą i normalną w temperaturze przejścia oraz $\mathcal{R}_3 \equiv H_C(0)/\sqrt{N(0)\Delta(0)}$. Współczynniki $\mathcal{R}_i$, $i = 1, 2, 3$, noszą nazwę uniwersalnych współczynników BCS i dla nadprzewodnika typu BCS są stałe, a ich wartości wynoszą odpowiednio: $\mathcal{R}_1 = 3.52$, $\mathcal{R}_2 = 1.43$ oraz $\mathcal{R}_3 = 2\sqrt{\pi}$ [28].

Wprowadzenie fluktuacji gęstości stanów do równania na szczelinę zmienia również wartości tych parametrów jednak nie na tyle, aby porównać je z wartościami otrzymywanymi dla nadprzewodników wysokotemperaturowych. Aby poprawić otrzymane rezultaty należy uwzględnić także inne efekty. Sukcesy takiego podejścia skłoniły do odmiennego spojrzenia na oddziaływanie pomiędzy elektronami [23]. Istnienie osobliwości w pobliżu poziomu Fermiego powinno wskazywać na silne oddziaływanie pomiędzy parującymi elektronami w tym rejonie. Należałoby zatem podzielić nośniki na dwie grupy, tj. te które są silnie zlokalizowane w pobliżu poziomu Fermiego i pozostałe mające stałą wartość gęstości stanów. Jednakże ten stan rzeczy nie pozwala na tak proste jak w teorii BCS ujęcie problemu nadprzewodnictwa, dlatego też niektórzy badacze zaczęli odchodzić od tej teorii.

Scenariusz Van Hove'a próbuje odpowiedzieć na pytanie jaka jest fizyka oddziałujących elektronów zmodyfikowana obecnością osobliwości gęstości stanów typu Van Hove'a. Współczesne teorie są zgodne co do możliwości stosowania scenariusza Van Hove'a z osobliwościami w pobliżu poziomu Fermiego. Początkowo scenariusz Van Hove'a był stosowany w odniesieniu do układów ze sparowaniem typu s dla których parametr porządku jest izotropowy. Stosując to samo po-

dejsie do układów ze sparowaniem typu d [30], gdzie parametr porządku jest anizotropowy, zwrócono jednakże uwagę na jakościową zmianę rozpraszania pomiędzy cząstkami. W konwencjonalnych układach metalicznych, w których może być realizowany stan nadprzewodzący, rozpraszanie pomiędzy cząstkami ma złożony charakter. W przypadku stosowania scenariusza Van Hove’a rozpraszanie rozważanych kwazicząstek jest opisywane według reguł stosowanych w formalizmie cieczy Fermiego. Wyniki badań prezentowanych w dalszej części pokazują, że stosowanie scenariusza Van Hove’a do układów z anizotropowym parametrem porządku wymaga zasadniczej jego modyfikacji. Niemniej, opracowany formalizm rozszerzonego scenariusza Van Hove’a wskazuje na możliwość otrzymania zunifikowanego podejścia do badania nadprzewodników nowej i starej generacji.

1.2.2 Scenariusz Van Hove’a dla nadprzewodników typu s

Z rozważań zaprezentowanych w poprzednim rozdziale wynika, że w stosowanych podejściach scenariusz Van Hove’a stanowi istotne uzupełnienie teorii BCS poprawiając jej zakres stosowności. Uwzględnienie silnych fluktuacji gęstości stanów w pobliżu poziomu Fermiego jest eksperymentalnie uzasadnione, dlatego też postać funkcji $N(\xi)$ jest po prostu postulowana w taki sposób, że posiada ona osobliwość lub wąskie maksimum zlokalizowane na poziomie Fermiego lub jego okolicy. Kształt takiego „piku” jest dopasowywany w formie analitycznej do danych eksperymentalnych lub też przyjmowany w postaci otrzymywanej w ramach innych modeli teoretycznych opisujących rozważany układ, lub wyznaczany z lokalnych przybliżeń uwzględniających domieszki, jak to ma miejsce w odniesieniu do HTCS [29, 28, 18, 24, 25, 38, 39, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46].

W podstawowej teorii BCS, która wyjaśnia zjawisko nadprzewodnictwa w czystych metalach, zakłada się, że gęstość stanów jest stała. Temperatura krytyczna czystych pierwiastków metalicznych, spośród których 25 przechodzi w stan nadprzewodzący, a dodatkowych 11 pod zwiększonym ciśnieniem (od 25 do 150 kbar), zmienia się w zakresie od 0,003K dla rodu do 9,5K dla niobu. Jednakże już w przypadku związków międzymetalicznych ich temperatura krytyczna wzrasta, a dla Nb_3Ge osiąga wartość 23,6K. Dlatego założenia podstawowej teorii BCS okazały się nie wystarczające do wyjaśnienia zwiększonych temperatur krytycznych nadprzewodników w takich związkach, jak $A - 15$ o strukturze wolframu β , bizmutanach, fazach Chervela (chalkogenki molibdenu) oraz nadprzewodnikach wysokotemperaturowych. Zmodyfikowanie teorii BCS poprzez uwzględnienie zmieniającej się gęstości stanów otworzyło nowe możliwości jej stosowania. Wpływ zmiany gęstości stanów na temperaturę krytyczną został wyrażony równaniem Eliashberga [16]:

$$\Delta T_c = \int_{-\infty}^{\infty} \delta N(\xi) \frac{\delta T_c}{\delta N(\xi)} \quad (1.1)$$

Okazuje się, że postać funkcjonału $\delta T_c / \delta N(\xi)$ jest niezależna od postaci funkcji $N(\xi)$. I tak np. jeżeli rozważymy gęstość stanów postaci [26]:

$$N(\xi) = N_0 \ln \left| \frac{\epsilon_F}{\xi} \right|, \quad (1.2)$$

gdzie osobliwość Van Hove’a została zlokalizowana dokładnie na poziomie Fermiego i wstawimy ją do równania na szczelinę w teorii BCS zapisanego w postaci:

$$\frac{2}{V} = \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} N(\xi) \tanh \left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2k_B T} \right) \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}, \quad (1.3)$$

które w granicy $T \rightarrow T_c$ redukuje się do postaci:

$$\frac{2}{V} = \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} N(\xi) \tanh\left(\frac{\xi}{2k_B T_c}\right) \frac{d\xi}{\xi}, \quad (1.4)$$

wówczas możemy oszacować temperaturę krytyczną T_c wykorzystując następujące oszacowania tangensa hiperbolicznego: Gdy $|\xi| \leq 2k_B T_c$ to $\tanh(\xi)/2k_B T_c = \xi/2k_B T_c$, a gdy $|\xi| \geq 2k_B T_c$ wtedy $\tanh(\xi)/2k_B T_c = 1$. Wykorzystując powyższe wyrażenie na temperaturę krytyczną daje się zapisać [26]:

$$T_c = 1.36 T_F \exp \left\{ - \left[\frac{2}{N_0 V} + \left(\ln \frac{k_B T_F}{\hbar\omega_D} \right)^2 - 1 \right]^{1/2} \right\} \quad (1.5)$$

Otrzymane wyrażenie istotnie różni się od rezultatu uzyskiwanego w ramach teorii BCS i można je przybliżyć następująco:

$$T_c \sim T_F \exp \left(- \left(\frac{2}{\lambda_0} \right)^{1/2} \right),$$

gdzie $\lambda_0 = N_0 V$. Oszacowanie temperatury krytycznej na podstawie otrzymanego rezultatu dla $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) dla $\lambda_0 = 0.12$, $T_F = 5800K$, $\hbar\omega_D = 754K$ daje wartość $T_c = 92K$ [23].

W przypadku kiedy osobliwość w gęstości stanów przemieszcza się względem poziomu Fermiego o δ , temperaturę krytyczną T_c wyznacza się po rozwinięciu funkcji $N(\xi)$ w szereg względem poziomu Fermiego stosując metody numeryczne. W przypadku tym obliczono również współczynnik izotopowy α i udowodniono, że temperatura krytyczna jest najwyższa, jeżeli osobliwość w gęstości stanów pokrywa się z poziomem Fermiego. Natomiast współczynnik izotopowy α wykazuje odmienne własności i rośnie wraz z oddalaniem się osobliwości od powierzchni Fermiego [26, 27]. W sposób analogiczny została oszacowana temperatura krytyczna z zamodelowaną gęstością stanów posiadającą rozbieżność logarytmiczną typu: $N(\xi) = N(0) [\ln |\epsilon_F/(\xi + \delta)| + C]$, gdzie stała δ oznacza przesunięcie osobliwości względem poziomu Fermiego. Oszacowano również współczynnik izotopowy α i współczynnik $\mathcal{R}_1$. Wartość Δ_0 została wyznaczona z równania na szczelinę (1.3) dla $T = 0$ w następującej postaci:

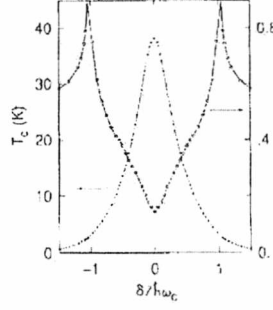
$$\Delta(0) = 2.39 \epsilon_F \exp \left\{ C - \sqrt{\frac{2}{N_0 V} + \left[\ln \left(\frac{\epsilon_F}{\omega_D} \right) \right]^{1/2} + \frac{\delta^2}{2} \left[\frac{1}{\omega_D^2} + \frac{1}{\Delta_0^2} \right] - 1} \right\} \quad (1.6)$$

Rozwiązanie numeryczne tego równania pozwoliło stwierdzić, że otrzymana wartość $\mathcal{R}_1$ jest zbyt mała, a podobnie obliczony współczynnik izotopowy α okazał się zbyt duży, jak dla nadprzewodników wysokotemperaturowych. W pracy tej [27] obliczono również skok ciepła właściwego dla rozważanej gęstości stanów. Jednak otrzymane wyniki zostały uznane za niewystarczającą zgodne w porównaniu z eksperymentem. Po wstawieniu gęstości stanów posiadającej osobliwość typu logarytmicznego do równania na szczelinę, można postąpić również w inny sposób [47]. Równanie (1.3) z gęstością stanów (1.2) można całkować przez części, co prowadzi do następującego równania na temperaturę krytyczną

$$T_c = \frac{1}{2} T_F \exp \left\{ - \left[\left(\frac{1}{N_0 V} + D \left(\frac{\Theta_D}{2T_c}, \frac{T_F}{2T_c} \right) \right) 2 \coth \frac{\Theta_D}{2T_c} + \ln^2 \frac{T_F}{\Theta_D} \right]^{1/2} \right\}, \quad (1.7)$$

gdzie funkcja

$$D(Z, W) = \int_0^Z dx \left(\ln x \ln \frac{W}{x} + \frac{1}{2} \ln^2 x \right) \text{sech}^2 x$$



Rysunek 1.1: Wartości temperatury krytycznej i współczynnika izotopowego w zależności od położenia osobliwości logarytmicznej względem poziomu Fermiego [26]

Podobnie całkując przez części można uzyskać dokładniejszą niż (1.6) przybliżoną wartość Δ_0 :

$$\Delta(0) = 2k_B T_F \exp \left\{ - \left[\frac{2}{N_0 V} + \ln^2 \left(\frac{T_F}{\Theta_D} \right) - 1.64 \right]^{1/2} \right\} \quad (1.8)$$

Podstawienie do równania na szczelinę funkcji gęstości stanów postaci [28]:

$$N(\xi) = \frac{2}{\pi^2 \tau} K \left(\sqrt{1 - \left(\frac{\xi}{4\tau} \right)^2} \right) \quad (1.9)$$

gdzie K jest całką eliptyczną pierwszego rodzaju pozwoliło obliczyć wartości współczynników $\mathcal{R}_1 = 2\Delta(0)/k_B T_c$, $\mathcal{R}_2 = \Delta C(T_c)/C_N(T_c)$ oraz $\mathcal{R}_3 = H_c(0)/\sqrt{N(0)\Delta(0)}$. Wartość całki eliptycznej można przybliżyć zależnością $K(\sqrt{1-x^2}) \sim \frac{1}{2} \ln(16/|x|)$. Przybliżenie funkcji $\tanh$ tak jak w uprzednio, pozwala obliczyć po wstawieniu gęstości stanów (1.9) do równania na szczelinę zmodyfikowane wartości charakterystycznych współczynników: $\mathcal{R}_1 = 4$, $\mathcal{R}_2 = 2.86$ oraz $\mathcal{R}_3 = 2.3\sqrt{\pi}$. W ocenie otrzymanych wyników stwierdza się, że zmodyfikowana teoria BCS może być punktem wyjścia do dalszych rozważań nad zrozumieniem mechanizmów nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego i roli scenariusza Van Hove'a.

Osobliwość w gęstości stanów próbowano również zamodelować funkcją delta Diraca [48]:

$$N(\xi) = A\delta(\xi) \quad (1.10)$$

gdzie A jest pewną stałą. Taki typ osobliwości jest najprostszy w sensie rachunkowym i w związku z tym obliczenia nie są zbyt skomplikowane. Tę postać gęstości stanów można też uogólnić zakładając, że jest ona sumą wielu (kilku) pików z różną wagą, miarą której jest stała A . Udowodniono, że taka osobliwość jest również odpowiedzialna za wzrost temperatury krytycznej. Zbadano zmianę temperatury w zależności od położenia piku. Zwrócono także uwagę, że rozszerzając formalizm na przypadek silniejszego sparowania, należy stałą $\lambda = N(0)V$ zapisać w postaci:

$$\lambda^* = \frac{\lambda}{1 + \lambda}.$$

Możliwość rozszerzenia formalizmu na przypadek silnego sparowania została rozważona ponadto w pracy [23], gdzie parametr sparowania przedstawiono w postaci:

$$\frac{1}{\lambda^*} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1.5}{1 + \eta\lambda}, \quad (1.11)$$

a η jest stałą dopasowania. Tak zmodyfikowana teoria BCS prowadzi do następującego wyrażenia na temperaturę krytyczną:

$$T_c = \Gamma \omega_D \sqrt{\lambda}, \quad (1.12)$$

gdzie:

$$\Gamma = \frac{\sqrt{2}}{\pi \sqrt{1 + 1.5/\eta}}. \quad (1.13)$$

Wartość Γ oszacowana dla $\eta \simeq 0.2$ wynosi $\Gamma \simeq 0.15$. Dla nadprzewodnika typu Van Hove'a modyfikacja równania na szczelinę prowadząca do wprowadzenia gęstości stanów typu logarytmicznego [23], tak jak w równaniu (1.5) oraz modyfikacja parametru oddziaływania parującego zgodnie z równaniem (1.11) prowadzi do następującego wyrażenia na temperaturę krytyczną [23]:

$$\frac{T_c}{\left(\ln\left(\frac{T_F}{\pi T_c}\right)\right)^{1/2}} \simeq \Gamma \omega_D \sqrt{\lambda} \quad (1.14)$$

Warto jeszcze podkreślić, że ciekawą, złożoną postać gęstości rozważali Grasmann i Seidel [46], którzy zaproponowali, aby całkowita gęstość stanów zawierająca osobliwości Van Hove'a w punkcie ϵ_{vH} była superpozycją gęstości wykazującej rozbieżność logarytmiczną

$$N_s(\xi) \propto \ln |\epsilon_F / (\xi - \epsilon_{vH})|$$

odpowiadającą dwuwymiarowemu punktowi siodłowemu, gęstości odpowiadającej jednowymiarowemu ekstremum na części powierzchni Fermiego, które wykazuje rozbieżność typu pierwiastkowego

$$N_x(\xi) \propto (\xi - \epsilon_{vH})^{-1/2} \Theta(\xi - \epsilon_{vH})$$

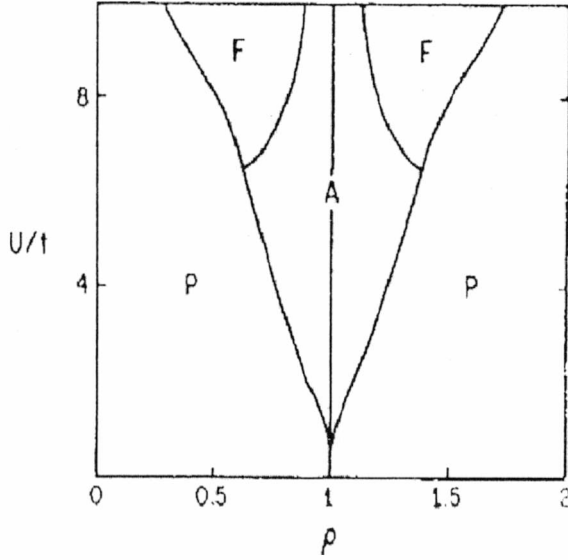
oraz pewnej stałej gęstości N_c , tj.

$$N(\xi) = N_s(\xi) + N_x(\xi) + N_c$$

Jakościowe wyniki jakie otrzymali nie różnią się zasadniczo od przedstawionych powyżej. Uzyskali wzrost temperatury krytycznej pomiędzy 40 K i 140 K oraz zależność współczynnika isotopowego w przedziale $0,18 < \alpha < 0,28$ w granicy słabego wiązania, gdy $0,027 < \lambda_0 < 0,068$. Zwrócili również uwagę, że współczynnik $\mathcal{R}_1$ nie może przekroczyć wartości 4 dla typowego izotropowego modelu typu BCS, lecz nie wykluczyli możliwości jego zwiększenia dla przypadku anizotropowego. Dlatego pytanie o mechanizm parowania dla większości znanych nadprzewodników pozostaje cały czas otwarte. Istnieje przekonanie wynikające z oszacowania wartości parametru sparowania na podstawie „starej” formuły BCS, $T_c \simeq \hbar \omega_D \exp(-1/\lambda)$, że w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych należy oczekiwać raczej silnego mechanizmu parującego. Jednakże, jak pokazano w tym rozdziale wzór ten przestaje być słuszny, jeżeli dopuszcza się istnienie osobliwości Van Hove'a w gęstości stanów gdyż wówczas wysokie temperatury krytyczne są osiąmane dla małych wartości λ , a punktem wyjścia do oszacowań teoretycznych staje się równanie na szczelinę ze zmodyfikowaną gęstością stanów.

1.2.3 Model ciasnego wiązania

Niezależnym kierunkiem poszukiwań wyjaśnienia istnienia nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego są badania wykorzystujące jako podstawę rozważań tak zwany model Hubbarda lub

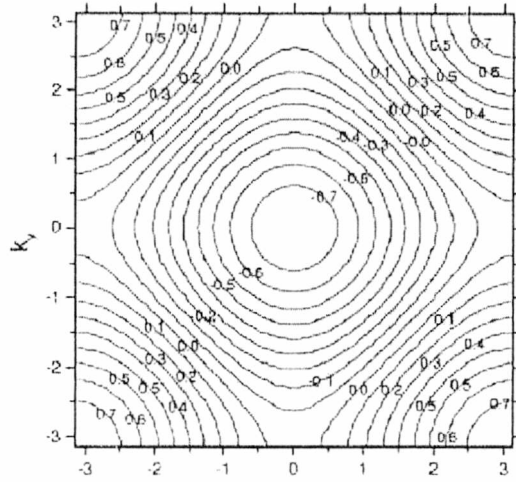


Rysunek 1.2: Teoretyczny diagram fazowy przewidziany dla dwuwymiarowego modelu Hubbarda [52]

powiązany z nim model t-J. Model ten został zaproponowany przez Hubbarda w 1963 roku [49] jako konkurencyjny w stosunku do modelu cieczy Fermiego ustanowionego przez Landaua w 1956 roku [50] oraz zmodyfikowanego przez Silina [51] poprzez wprowadzenie pola magnetycznego. Chociaż oba modele dają przybliżony opis układu elektronów w metalu, model Hubbarda został uznany za bardziej nadający się do analizy układów oddziałujących fermionów w skończonych temperaturach. Przyjmuje się w nim, że wąskie pasmo przewodnictwa jest częściowo wypełnione przez elektrony, a gdy pasmo to jest bardzo wąskie, wówczas oddziaływanie elektron-elektron jest duże jedynie wtedy, gdy elektrony spotykają się w tym samym węźle jonowym. W modelu tym w przestrzeni rzeczywistej w reprezentacji Wanniera jednoelektronowa energia nie jest diagonalna, a nediagonalne człony odpowiadają przeskokom elektronu z węzła na węzeł. Natomiast model cieczy Fermiego opiera się na założeniu, że widmo wzbudzeń kwazicząstek leży w pobliżu powierzchni Fermiego dlatego może być on stosowany do badania metali niemagnetycznych. Ograniczenia tego nie ma model Hubbarda układu elektronów wędrownych, który jest stosowany także do badania metali ferromagnetycznych i antyferromagnetycznych. Wszystko to sprawiło, że model Hubbarda zyskał on szerokie zastosowanie do obliczeń własności układów oddziałujących elektronów z efektywnym oddziaływaniem krótkozasięgowym. Szczególnie dobrze model ten sprawdza się do opisu efektów wielociałowych w metalach takich, jak ferromagnetyzm, antyferromagnetyzm i przejście metal izolator. Zasadniczym momentem rozwijanego modelu było określenie Hamiltonianu [52, 53]

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{i,j} (c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \eta \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \quad (1.15)$$

opisującego jednopasmowy model, ze stałą oddziaływania pomiędzy elektronami U , dla którego elektrony z przeciwnymi spinami mają taki sam orbital atomowy. Operatory $c_{i\sigma}^{\dagger}$ i $c_{i\sigma}$ oznaczają operatory kreacji i anihilacji elektronu o spinie σ w węźle i , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma}$. Model ten nie daje się ściśle rozwiązać poza przypadkiem jednowymiarowym. Dlatego, aby rozwiązać go w przypad-



Rysunek 1.3: Linie ekwienergetyczne dla spektrum energii obliczonego na podstawie modelu Hubbarda (1.17) dla parametrów modelu $t_0 = 0.2$ $t_1 = 0.001$

kach dwu- i trójwymiarowym stosuje się metody przybliżone. Obliczenia dla dwuwymiarowego modelu Hubbarda opisanego hamiltonianem (1.15) wykonane w przybliżeniu Hartree’ego-Focka pozwoliły otrzymać diagram fazowy przedstawiony na rysunku 1.2, gdzie litery A, F i P odnoszą się do stanu antyferromagnetycznego, ferromagnetycznego i paramagnetycznego [53]. Natomiast w 1986 roku Hirsch i Scalapino [21] zaproponowali dwuwymiarowy model Hubbarda na sieci kwadratowej do opisu nadprzewodnictwa, gdzie efektywny hamiltonian miał w postaci:

$$H = - \sum_{i,j} t_{i,j} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.16)$$

a stała oddziaływania $U < 0$. Wprowadzając ponadto oznaczenia $t_{i,j} = t_0$ w przypadku, gdy określa ono oddziaływanie pomiędzy najbliższymi sąsiadami oraz $t_{i,j} = t_1$ dla oddziaływania pomiędzy kolejnymi najbliższymi sąsiadami, znaleźli następujące wyrażenie na widmo energetyczne

$$\xi(\mathbf{k}) = -2t_0(\cos k_x + \cos k_y) + 4t_1 \cos k_x \cos k_y, \quad (1.17)$$

które zostało przedstawione na rysunku 1.3. Parametry t_0 i t_1 noszą nazwę odpowiednio parametrów przeskoku pomiędzy najbliższymi i następnymi najbliższymi sąsiadami. Dla $\xi(\mathbf{k}) < 0$ linie ekwienergetyczne są zamknięte i im mniejszą wartość energii reprezentują tym bardziej kształtem zbliżają się do powierzchni kulistych. Dla $\xi(\mathbf{k}) > 0$ linie ekwienergetyczne są otwarte i kończą się na granicy pierwszej strefy Brillouina. Przypadek $\xi(\mathbf{k}) = 0$ odpowiada kwadratowej powierzchni Fermiego, jest przypadkiem granicznym pomiędzy zamkniętymi i otwartymi krzywymi i ma własność doskonałego *nestingu*. Odpowiadająca w tym przypadku gęstość stanów wykazuje rozbieżność logarytmiczną. Taka postać energii (1.17) pozwala oszacować gęstość stanów poprzez formalizm funkcji Greena w zależności od parametrów modelu:

$$N(\xi) \sim t_0^{-1} \ln \left(\frac{t_0}{|\xi - 4t_1|} \right) \quad (1.18)$$

Wynik ten jest zgodny, z wcześniej opisanym założeniem o istnieniu osobliwości Van Hove'a поблизу poziomu Fermiego. Wyznaczenie temperatury krytycznej T_c w zależności od parametrów modelu pozwoliło przewidzieć jej wzrost. Model ten był w kolejnych latach szeroko rozwijany powodując wyjaśnienie innych niż wysoka temperatura przejścia fazowego własności nadprzewodników tlenkowo-miedziowych. Jego dużym sukcesem stało się wyjaśnienie diagramu fazowego, gdyż nadprzewodniki wysokotemperaturowe charakteryzują się niestabilnością strukturalną i dla danego związku w zależności od domieszkowania tlenem mamy stan nadprzewodzący, szkło spinowe lub ferromagnetyk. Ponadto istnieje możliwość pojawienia się fal gęstości spinowej (SDW) lub fal gęstości ładunku (CDW) czyli tzw. niestabilności Peierlsa. W przypadku doskonałego *nestingu* pojawia się niestabilność ze względu na tworzenie się fal gęstości ładunku, która implikuje powstanie szczeliny energetycznej na całej powierzchni Fermiego powodując, że układ staje się izolatorem. I tak np. dla związku La_2CuO_4 zostało zaobserwowane związane z tym zjawiskiem przejście strukturalne do fazy rombowej. Domieszkowanie barem lub strontem powoduje przesunięcie powierzchni Fermiego, niestabilność Peierlsa jest osłabiana i układ staje się metalem. Domieszkowanie powoduje stabilizację fazy tetragonalnej. Natomiast w przypadku niedoskonałego *nestingu* mogą pojawić się fale gęstości ładunku związane z oddziaływaniem fononowym lub fale gęstości spinowej związane z kulombowskim oddziaływaniem odpychającym na węzle generującym korelacje antyferromagnetyczne. Niestabilności Peierlsa mogą w pewnych przypadkach mieć wpływ na wzrost temperatury przejścia do fazy nadprzewodzącej. Warunkiem koniecznym jest aby związana z daną osobliwością szczelina pojawiła się tylko na części powierzchni Fermiego [54]. Przykładowa postać diagramu fazowego została przedstawiona na rysunku 1.2. Bardziej ogólne rozwiązanie hamiltonianu (1.15) dla sieci prostokątnej lub supersieci w przypadku dwuwymiarowym prowadzi do następującej zależności dyspersyjnej dla energii cząstek [55]:

$$\xi(\mathbf{k}) = -2t_0[\cos k_x + \gamma_1 \cos k_y - \gamma_2 \cos k_x \cos k_y], \quad (1.19)$$

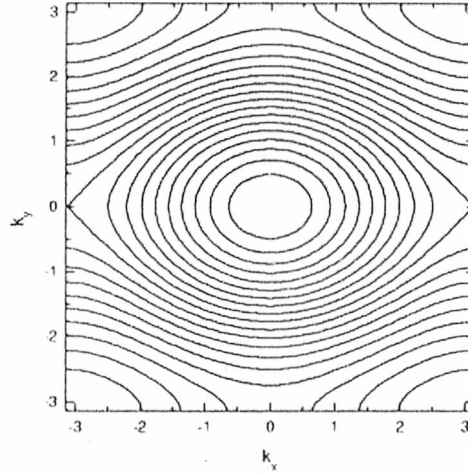
gdzie parametry przeskoku t_0 i $t_0\gamma_1$ odpowiadają oddziaływaniom pomiędzy najbliższymi sąsiadami wzdłuż kierunków a i b , a parametr $t_0\gamma_2/2$ odpowiada oddziaływaniom (przeskokom) pomiędzy kolejnymi sąsiadami. Taki model prowadzi również do powstania osobliwości typu Van Hove'a. W modelu tym dla ($\gamma_1 < 1$) obserwuje się dwa piki w gęstości stanów wykazujące rozbieżność typu logarytmicznego. Odpowiadają one wartościom energii $\xi_+ = 2t_0(1 - \gamma_1 + \gamma_2)$ i $\xi_- = -2t_0(1 - \gamma_1 + \gamma_2)$. Dla $\gamma_1 = 1$ mamy do czynienia z siecią kwadratową i wyrażenia na energię i gęstość stanów przechodzą odpowiednio w (1.17) i (1.18). Przykładowe spektrum energii dla modelu sieci prostokątnej przedstawiono na rysunku 1.4. Tym razem linie ekwienergetyczne dla $\xi < 0$ przybierają kształt elips.

Opisany model Hubbarda jest modelem jednopasmowym. Jego kolejne modyfikacje polegają na rozszerzeniu tego uproszczonego modelu na przypadek dwu- i lub trójpasmowy, co pozwala zwiększyć precyzję podejścia [33]. Przez ostatnich kilkanaście lat model Hubbarda i jego kolejne modyfikacje były szeroko rozwijane w celu wyjaśnienia efektów stwierdzonych eksperymentalnie w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych. Punktem wyjścia takich rozważań jest zawsze określenie postaci hamiltonianu w przestrzeni rzeczywistej

$$H = H_0 + H_{int}. \quad (1.20)$$

Pierwsza część Hamiltonianu zawiera jednocząstkowe człony, które w przypadku modelu trójpasmowego dla pojedynczej płaszczyzny CuO_2 przyjmują postać [33, 20]:

$$H_0 = \sum_{i,\sigma} (\varepsilon_d^0 - \mu) d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + \sum_{j,\alpha,\sigma} (\varepsilon_{p\alpha}^0 - \mu) p_{j\alpha\sigma}^\dagger p_{j\alpha\sigma}$$



Rysunek 1.4: Zależność energii od wektora falowego dla sieci prostokątnej. Parametry modelu $t_0 = 0.2$, $\gamma_1 = 0.5$, $\gamma_2 = -0.1$.

$$+ \sum_{i,j,\alpha,\sigma} t_{ij\alpha}^{pd} (d_{i\sigma}^\dagger p_{j\alpha\sigma} + h.c.) + \sum_{i,j,\alpha,\beta,\sigma} t_{ij\alpha\beta}^{pp} (p_{i\alpha\sigma}^\dagger p_{j\beta\sigma} + h.c.), \quad (1.21)$$

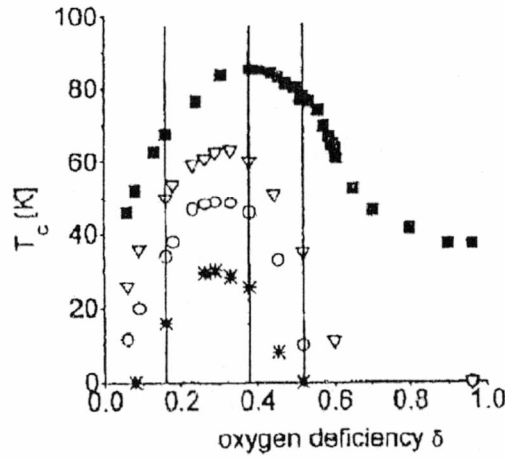
gdzie $t_{ij\alpha}^{pd}$ są całkami przeskoku pomiędzy stanami p_α ($\alpha = x, y$) i d dla Cu – O. Całka przeskoku $t_{ij\alpha\beta}^{pp}$ odpowiada przejściom pomiędzy stanami p_α oraz p_β dla O – O. Energie ε_d^0 i $\varepsilon_{p\alpha}^0$ są lokalnymi poziomami d i p energii, μ jest potencjałem chemicznym. Część hamiltonianu odpowiadającą uwzględnionym oddziaływaniom kulombowskim długo- i krótkozasięgowym oraz oddziaływaniom elektronowo-fononowym można przedstawić w postaci [21, 53, 33]:

$$H_{int} = U_d \sum_i n_{i\uparrow}^d n_{i\downarrow}^d + U_p \sum_{j,\alpha} n_{j\alpha\uparrow}^p n_{j\alpha\downarrow}^p + V_{LC} + V_{EP} \quad (1.22)$$

gdzie U_d oraz U_p reprezentują oddziaływanie typu kulombowskiego pomiędzy atomami Cu i O, człony V_{LC} oraz V_{EP} opisują odpowiednio dalekozasięgowe oddziaływanie kulombowskie pomiędzy elektronami lub dziurami oraz oddziaływanie pomiędzy elektronami i fononami. Uwzględnienie tych wszystkich oddziaływań w ramach przyjętej struktury pasmowej zwiększa dokładność otrzymywanych wyników i może prowadzić do nowych efektów. To rozszerzenie modelu Hubbarda uwzględniające istnienie płaszczyzn miedziowo-tlenowych prowadzi również do osobliwości typu Van Hove’a w elektronowej gęstości stanów. Okazuje się jednak, że nie tylko nadprzewodniki miedziowo-tlenowe wykazują ten typ osobliwości. Osobliwości typu Van Hove’a zostały zaobserwowane w nadprzewodnikach interkalowanego fulerenu K_3C_{60} , dla którego $T_c = 20K$, w pobliżu punktu X [36]. Także związek Sr_2RuO_4 wykazuje osobliwość w gęstości stanów typu $N_x(\xi) \sim (\xi - \epsilon_{vH})^{-1/2}$ odpowiadającą jednowymiarowemu ekstremum w pobliżu punktów Γ oraz X na powierzchni Fermiego [37].

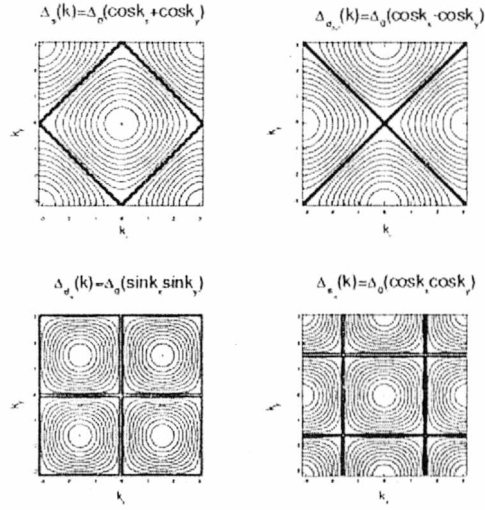
1.2.4 Scenariusz Van Hove’a dla nadprzewodnictwa typu d

W nadprzewodnikach wysokotemperaturowych funkcje falowe par Coopera powinny być singletowe, co wynika z szybkiego zaniku podatności paramagnetycznej wraz z obniżaniem się temperatury. Dlatego szczelina energetyczna powinna mieć symetrię stanu singletowego pary s lub d .

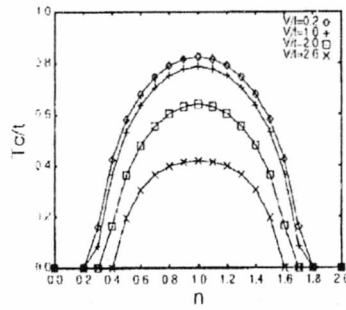


Rysunek 1.5: Wartości temperatury krytycznej dla $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2(Cu_{1-y}Zn_y)_3O_{7-y}$ w zależności od parametru domieszkowania tlenem δ dla $y = 0$ (pełne kwadraty), $y = 0.02$ (trójkąty), $y = 0.04$ (koła) oraz $y = 0.06$ (gwiazdy)

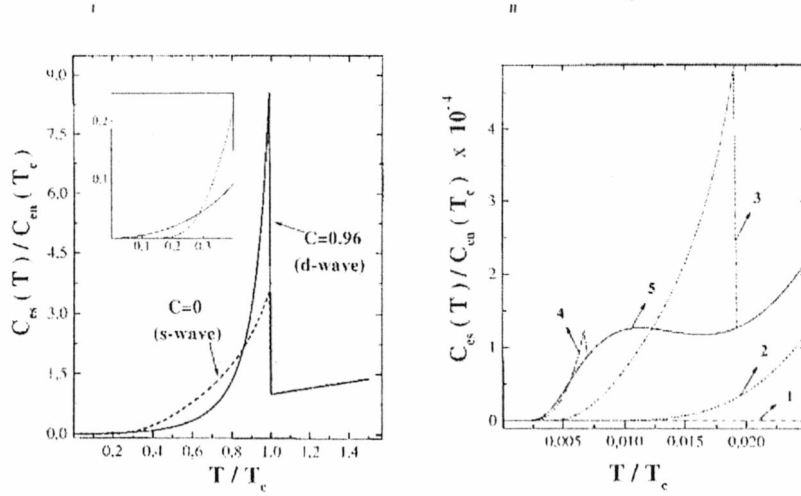
W eksperymentach badających prąd tunelowy płynący przez złącze nadprzewodnikowe trudno było rozstrzygnąć czy nadprzewodzący kondensat ma s – czy d –falową symetrię [56, 57]. Wyniki tunelowania otrzymywane w kolejnych eksperymentach wskazywały zarówno na s –falowy [58], jak i d –falowy charakter funkcji falowej kondensatu [59, 62]. Dlatego w początkowym okresie badań osobiściwości typu Van Hove’a rozważano dla czystego sparowania s , które było zidentyfikowane jednoznacznie w wielu nadprzewodnikach. Jednocześnie wraz z kolejnymi wynikami eksperymentalnymi [63, 64], które potwierdzały d –falowy charakter parametru porządku, pojawiła się idea rozszerzenia scenariusza Van Hove’a na silnie anizotropowe stany d , tj. $d_{x^2-y^2}$ lub d_{xy} , realizowane w dwuwymiarowym układzie o tetragonalnej symetrii. Dlatego obecnie jednym z podstawowych kierunków badań nadprzewodników wysokotemperaturowych jest poszukiwanie symetrii szczeliny energetycznej czyli parametru porządku dla znanych związków nadprzewodzących. Dla typowych izotopowych nadprzewodników, czyli takich jakie są opisane w ramach teorii BCS, jako funkcje bazowe potrzebne do zdefiniowania funkcji falowej szczeliny energetycznej są wykorzystywane harmoniki sferyczne w przypadku układów trójwymiarowych oraz funkcje trygonometryczne (*cosinus* i *sinus*) dla układów dwuwymiarowych. Symetria funkcji falowej szczeliny energetycznej określa wówczas stan symetrii par Coopera i możemy mówić o stanie s p lub d itd. Jednocześnie parametr porządku powinien zachowywać symetrię odpowiedniej nieprzywiedlnej reprezentacji grupy symetrii rozważanego hamiltonianu. Tak więc rozważając dany układ dwu- lub trójwymiarowy należy uwzględniać jego własności symetrii. W układach trójwymiarowych liczba kwantowa l określa stan sparowania, a odpowiednia kombinacja liniowa harmonik sferycznych $Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ z ustalonym l i m zmieniającym się od $-l$ do l reprezentuje parametr porządku. Natomiast w układach dwuwymiarowych należy utworzyć kombinację liniową funkcji $\cos n\varphi$ i $\sin n\varphi$, gdzie n określa stan sparowania. Istnieje zawsze skończona liczba takich reprezentacji. Szczelina energetyczna skaluje się według zasady: $\Delta(\rho\hat{k}) = \rho^l \Delta(\hat{k})$ i posiada symetrię l -tej harmoniki sferycznej. W przestrzeni trójwymiarowej dla nadprzewodników o tetragonalnej symetrii sieci istnieje tylko pięć nieredukowalnych



Rysunek 1.6: Możliwe postacie szczeliny energetycznej dla dwuwymiarowej sieci kwadratowej. Pogrubiona linia opisuje przypadek $\Delta = 0$.



Rysunek 1.7: Teoretycznie oszacowana wartość temperatury krytycznej dla nadprzewodnika typu d w zależności od parametru zapelnienia pasma [60]



Rysunek 1.8: Ciepło właściwe w stanie nadprzewodzącym [68] w zależności od temperatury dla stanów s , d i stanu mieszanego w niskich temperaturach oraz w całym przedziale temperatur od 0 do T_c . Na rysunku I (niskie temperatury) liczby oznaczają kolejno: (1) $c = 0,43$, (2) $c = 0,46$, (3) $c = 0,49$, (4) $c = 0,52$, (5) $c = 0,55$. Na rysunku II (cały zakres temperatur) (a): (1) $c = 0,37$, (2) $c = 0,375$, (3) $c = 0,38$, (4) $c = 0,385$; (b) (1) $c = 0,39$, (2) $c = 0,395$, (3) $c = 0,4$.

reprezentacji tej grupy symetrii [65]. Ograniczenie liczby dostępnych wymiarów w przestrzeni pędów do dwóch można uzyskać kładąc $k_z = 0$ lub $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ [66] w formułach opisujących parametr porządku, wówczas parametr porządku - szczelina energetyczna redukuje się do następujących postaci [43, 60, 61, 65, 67]:

- Izotropowa szczelina typu s

$$\Delta_s(\hat{k}) = \Delta(T) [\cos(k_x) + \cos(k_y)] \quad (1.23)$$

- Szczelina typu $d_{x^2-y^2}$

$$\Delta_{d_{x^2-y^2}}(\hat{k}) = \Delta(T) [\cos(k_x) - \cos(k_y)] \quad (1.24)$$

- Szczelina typu d_{xy}

$$\Delta_{d_{xy}}(\hat{k}) = \Delta(T) \sin(k_x) \sin(k_y) \quad (1.25)$$

- Uogólniona szczelina typu s

$$\Delta_{s_{xy}}(\hat{k}) = \Delta(T) \cos(k_x) \cos(k_y) \quad (1.26)$$

Powyższe formuły określają kształt szczeliny energetycznej na powierzchni Fermiego w dwuwymiarowej przestrzeni pędów z uwzględnieniem kształtu tej powierzchni. Stąd obecna postać szczeliny izotropowej. Natomiast postać uogólnionej szczeliny typu s określanej także jako

diagonalnie rozszerzonej należy wiązać ze sparowaniem na supersieciach lub z uwzględnieniem przeskoków par kolejnych najbliższych sąsiadów, gdy $t_1 \neq 0$.

Obliczenia przeprowadzone dla sparowania d wykazują, że scenariusz Van Hove'a w przypadku daje bardziej efektywne wyniki niż dla sparowania typu s [30]. Rozważanie stanów d pozwala uzyskać wyższą temperaturę krytyczną oraz większy skok ciepła właściwego w $T = T_c$, a także zależność temperatury krytycznej od parametru domieszkowania tlenem [68]. Przykładowe obliczenia temperatury krytycznej dla nadprzewodnika typu d w zależności od parametru wypełnienia przedstawiono na rysunku 1.7. Zatem w omówionych badaniach standardowa metoda scenariusza Van Hove'a została użyta do badania anizotropowych nadprzewodników. Z drugiej strony pytanie o to jaka jest symetria parametru porządku (szczeliny energetycznej) w takich układach jest ciągle otwarte. Dlatego zaczęto rozważać także możliwość istnienia symetrii mieszanej [55, 62] ($s + e^{i\theta}$), dla której postać szczeliny energetycznej można przybliżyć następującą zależnością:

$$\Delta(k) = \Delta_s + i\Delta_d(\cos(k_x) - \beta \cos(k_y)). \quad (1.27)$$

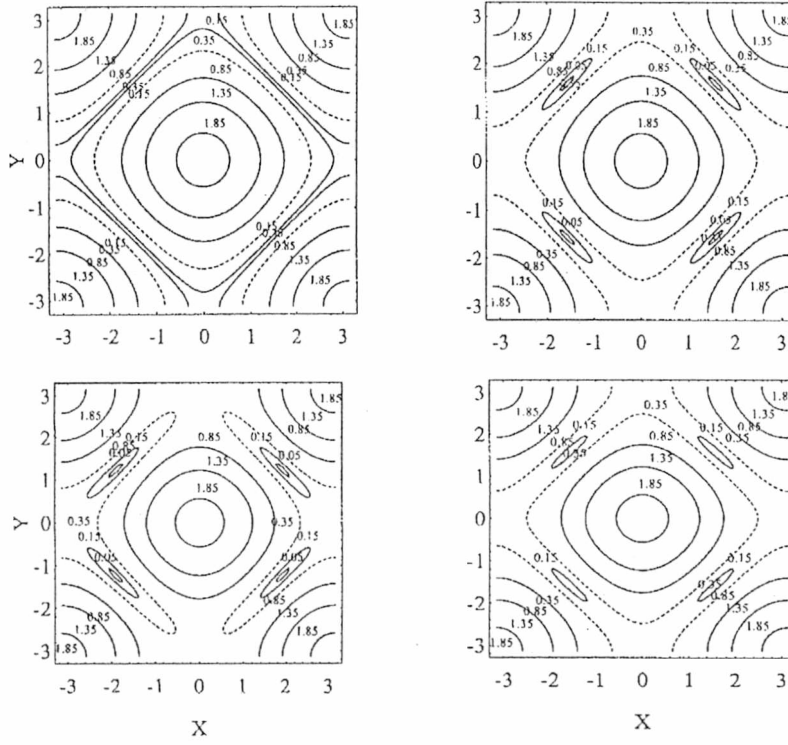
Na rysunkach 1.8, 1.9 przedstawiono wyniki obliczeń numerycznych własności termodynamicznych dla nadprzewodnika posiadającego symetrię mieszaną s i d . Parametr c jest parametrem opisującym stopień „mieszania” stanów i przyjmuje wartości od 0 do 1. Wartość parametru $c = 0$ odpowiada czystemu stanowi s , a $c = 1$ czystemu stanowi d .

W celu rozważenia własności nadprzewodnika dla dowolnych stanów a w szczególności stanów mieszanych wykorzystuje się zmodyfikowane równanie na szczelinę:

$$\Delta_k = \sum_{k'} J(k - k') \frac{\Delta_{k'}}{2E_{k'}} \tanh\left(\frac{E_{k'}}{2T}\right), \quad (1.28)$$

gdzie Δ_k jest szczeliną energetyczną zadaną przez równanie (1.24) lub równanie uwzględniające symetrię mieszaną (1.27) [30, 55], $E_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}$ określa zależność dyspersyjną energii kwazicząstek w stanie nadprzewodzącym gdzie ξ_k jest podana np. przez równanie (1.17), a funkcja $J(k - k')$ wyraża istniejące oddziaływanie parujące, które także uwzględnia symetrię układu. Większość znanych nadprzewodników wysokotemperaturowych posiada symetrię typu d lub mieszaną. Do określenia rodzaju symetrii wykorzystuje się pomiar efektu Josephaona przy pomocy nadprzewodzącego interferometru kwantowego czyli tzw. SQUID-u (Superconducting Quantum Interference Device). Z przeprowadzonych pomiarów wynika, że związek $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ w stanie nadprzewodzącym powinien posiadać symetrię typu d [33]. Podobnie związek $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ jest czystym nadprzewodnikiem typu d , podczas gdy $Nd_{2-x}Ce_xCuO_4$ wykazuje anizotropowe nadprzewodnictwo typu s . Ponadto jeden z najbardziej przebadanych związków nadprzewodzących YBCO, dla większości składów stechiometrycznych, realizuje stan typu d lub stan mieszany $s + d$.

Chociaż stosowane metody scenariusza Van Hove'a w przypadku d sparowania uwzględniają symetrię realnych układów oraz parametru porządku fazy nadprzewodzącej, a gęstość stanów wyznaczana w odniesieniu do uwzględnianych relacji dyspersji posiada osobliwości Van Hove'a, to jednakże metody te prowadzą do ograniczenia liczby stopni swobody do jednego (energia ξ) w formule na gęstość stanów, a w konsekwencji w równaniu na szczelinę. Niezależną próbę pokonania tego niedostatku w scenariuszu Van Hove'a podjęli Pashitskii *et al.* [69] i zaproponowali, aby w stosunku do dwuwymiarowych układów (warstwowych kryształów) nadprzewodzących z d sparowaniem zastąpić tradycyjną gęstość stanów $N(\xi)$ funkcją $N(\xi, \theta)$, która stanowi rozwinięcie gęstości stanów w szereg Fouriera względem kąta θ występującego



Rysunek 1.9: Kształt i przebieg linii izoenergetycznych w układach o symetrii typu s (górny lewy rysunek) i d (górny prawy rysunek) oraz symetrii mieszanej dla stanów postaci $s + d$ (lewy dolny rysunek) i $s + id$ (prawy dolny rysunek); $X = k_x a, Y = k_y a$ [68].

pomiędzy jedną z głównych osi krystalograficznych w płaszczyźnie warstwy, a pędem cząstki k leżącym na powierzchni Fermiego. W celu uproszczenia rozważań uwzględnione zostały jedynie dwa pierwsze człony rozwinięcia, które zostało wykonane zgodnie z symetrią grupy D_{4h} . Natomiast współczynniki rozwinięcia zostały zdefiniowane z wykorzystaniem gęstości stanów na jednowymiarowych i dwuwymiarowych częściach zamkniętej i w przybliżeniu cylindrycznej powierzchni Fermiego. Jednakże takie podejście i otrzymane rezultaty nie wydają się być poprawne, gdyż uśredniona po θ wartość $N(\xi, \theta)$ powinna redukować się do postaci gęstości stanów stosowanej dla czystego s sparowania, a tak nie jest.

Rozdział 2

Transformacje przestrzeni i gęstość stanów

2.1 Ciecz Fermiego

W teorii cieczy Fermiego zakłada się, że mikroskopowe własności silnie oddziałujących cząstek mogą być przeniesione na gaz wzbudzeń elementarnych zwanych kwazicząstkami Landaua, z funkcją rozkładu zależną od energii. Zgodnie z twierdzeniem Luttingera liczby cząstek i kwazicząstek są równe. Jednakże energia przetransformowanego układu nie jest równa prostej sumie energii tak zdefiniowanych kwazicząstek. Jest ona funkcjonalem swojej funkcji rozkładu i dla infinitesimalnej zmiany funkcji rozkładu, zmiana energii całkowitej może być zapisana w formie: $\delta E = \int \varepsilon \delta n d\tau$, gdzie $d\tau = dp_x dp_y dp_z / (2\pi\hbar)^3$. Wartość $\varepsilon(\mathbf{p}, \sigma) = \delta E / \delta n(\mathbf{p}, \sigma)$ jest wariacją energii, która w odniesieniu do funkcji rozkładu może być rozważana jako hamiltonian z jedną dodaną kwazicząstką z ustalonym pędem i spinem. Teoria cieczy Fermiego uwzględnia oddziaływanie kwazicząstek poprzez drugą pochodną wariacyjną funkcjonala energii. Jest to tak zwane oddziaływanie cieczy Fermiego, które prowadzi do renormalizacji masy efektywnej, ściśliwości, podatności magnetycznej itp. W rozwiniętej przez Landaua [50] teorii zakłada się, że włączenie oddziaływania pomiędzy cząstkami, które przekształca gaz Fermiego w ciecz Fermiego, nie zmienia symetrii wyjściowego układu, a jako że gaz nie oddziałujących fermionów jest izotropowy, więc ta sama symetria musi być zachowana w odpowiadającej mu cieczy Fermiego. Założenie to jest przyczyną drastycznego ograniczenia rozważań możliwych układów fermionowych, dla których teoria cieczy Fermiego może być stosowana. Formalizm cieczy Fermiego okazał się wystarczający do rozważań normalnych metali [51] i nadprzewodników niskotemperaturowych pierwiastków metali niemagnetycznych [70]. Ponieważ nadprzewodniki wysokotemperaturowe wykazują silną anizotropię pojawił się problem możliwości dostosowania formalizmu cieczy Fermiego do układów anizotropowych. Rozszerzając formalizm Landaua można założyć, że symetria ulega płynnej modyfikacji od układu izotropowego do układu anizotropowego w procesie adiabatycznego (bardzo powolnego) włączania oddziaływania. Ta procedura prowadzi do rozszerzenia formalizmu cieczy Fermiego na układy, dla których przestrzeń pędów jest anizotropowa, a widmo wzbudzeń jednocząstkowych jest nieparaboliczne. Aby uzyskać formalizm zbliżony z modelem cieczy Fermiego pokazuje się, że anizotropowa przestrzeń pędów z nieparabolicznym widmem wzbudzeń odpowiadająca rzeczywistemu układowi może być przetransformowana do przestrzeni izotropowej z parabolicznym (landauowskim) spektrum, gdzie standardowe informacje o układzie dotyczące rzeczywistej symetrii i określonego widma wzbudzeń jednocząstkowych zostają zapisane w formie dodatkowego pola skalarnego nakładanego na izotropową przestrzeń pędów, które modyfikuje rozmiar stanów kwantowo-mechanicznych zgodnie z symetrią wyjściowego układu. W przypadku tradycyjnej cieczy Fer-

miego to skalarne pole jest stałe w całej przestrzeni, a jego wartość można przyjąć równą 1. Zatem informacja o symetrii i widmie układu jest zapisana w formie pola skalarneego wypełniającego przestrzeń pędów, natomiast oddziaływania dwucząstkowe uzyskują symetrię właściwą dla oddziaływań w teorii cieczy Fermiego. Opisany formalizm stanowi nowe podejście do anizotropowego układu fermionów dając możliwość opisanego go w terminach cieczy Fermiego. Pozwala on również wyjaśnić podstawy stosowania rozszerzonego formalizmu BCS do opisu nadprzewodników wysokotemperaturowych.

2.2 Model anizotropowej cieczy Fermiego

Wprowadzając model anizotropowej cieczy Fermiego z oddziaływaniem mogącym prowadzić do nadprzewodnictwa należy podkreślić następujące fakty.

- Po pierwsze zakładamy, że badany kryształ może być rozważany jako układ anizotropowy opisywany w przestrzeni rzeczywistej hamiltonianem typu Hubbarda zawierającym człony jednocząstkowe i dwucząstkowe, i w razie konieczności kolejne wielocząstkowe człony odpowiadające mechanizmom mikroskopowym wszystkich obecnych oddziaływań. Taki hamiltonian w ogólnej postaci może okazać się bardzo skomplikowany. Na człon jednocząstkowy składają się elementy diagonalne wyrażające energię pojedynczych, wędrównych elektronów i niediagonalne odpowiadające przeskokom elektronu z węzła na węzeł. Człon odpowiadający oddziaływaniom dwucząstkowym powinien zawierać zlokalizowane oddziaływania elektronów z przeciwnie skierowanymi spinami, oddziaływanie kulombowskie pomiędzy dwoma elektronami, skorelowane przeskoki elektronów do najbliższych węzłów w obecności elektronu z przeciwnym spinem itd. Mogą również zostać wprowadzone człony opisujące oddziaływania z jonami. Aby taki problem był rozwiązywalny wprowadza się rozmaite przybliżenia np. ciasnego wiązania lub swobodnych elektronów. To wszystko prowadzi do stwierdzenia, że po pewnych przekształceniach oraz przetransformowaniu hamiltonianu do przestrzeni odwrotnej można zastąpić pierwotne cząstki układem kwazicząstek, dla którego da się wyliczyć strukturę pasmową oraz widmo wzbudzeń jednocząstkowych jako funkcję pędu. Można wówczas mówić o powierzchniach ekwienerygetycznych, rozumianych jako powierzchnie lub krzywe łączące punkty posiadające tę samą energię. Warto wspomnieć, że w formalizmie tym kwazicząstki mogą być obdarzone ładunkiem ujemnym lub dodatnim, podobnie jak elektrony i dziury. W dalszych rozważaniach skoncentrujemy się wyłącznie na układach przewodzących i nadprzewodzących jak np.: związki A15 z normalnymi i paramagnetycznymi domieszkami oraz takich, jak nadprzewodniki wysokotemperaturowe, dla których pokażemy jak można stosować scenariusz Van Hove'a [25, 71, 72].
- Po drugie istnieje transformacja typu transformacji konforemnej, która pozwala zastąpić oryginalny anizotropowy układ z dowolnym widmem wzbudzeń przez inny izotropowy układ z parabolicznym (liniowym w okolicy powierzchni Fermiego) widmem wzbudzeń i dodanym polem skalarneym. Wówczas przetransformowane efektywne oddziaływanie kwazicząstek w przestrzeni izotropowej otrzymuje szczególne własności. Ponieważ pęd Fermiego ma stałą wartość na całej powierzchni Fermiego, która jest sferą w przypadku trójwymiarowym i okręgiem w przypadku dwuwymiarowym, więc efektywne oddziaływanie posiada strukturę oddziaływań rozważanych w cieczy Fermiego i może być zapisane w sumy oddziaływania o strukturze oddziaływania fermicieczowego i oddziaływania pa-

rującego. Ta ich struktura powoduje, że mogą być one rozwijane w szeregi Fouriera w przypadku dwuwymiarowym i w szeregi wielomianów Legendre’a w przypadku trójwymiarowym [66]. Inne człony oddziaływania niespełniające tych kryteriów stają się nieistotne [73, 74]. Oddziaływanie typu fermicieczowego modyfikuje widmo wzbudzeń za pośrednictwem operatora masowego zachowując jego paraboliczny charakter. Przy tym założeniu może być ono pomijane w dalszych rozważaniach.

- Po trzecie włączenie oddziaływania parującego przekształca formalizm słuszny dla układów normalnych w formalizm opisujący układy nadprzewodzące o tej samej symetrii i tym samym widmie wzbudzeń elementarnych. Po przetransformowaniu układu do izotropowej przestrzeni pędów, w której widmo jednocząstkowe ma kształt paraboliczny, oddziaływanie parujące może zostać rozłożone na szereg Fouriera w przypadku dwuwymiarowym lub na szereg wielomianów Legendre’a w przypadku trójwymiarowym. Istnienie w takim rozkładzie jednego lub więcej ujemnych współczynników rozwinięcia determinuje symetrię stanu sparowanego. Jeżeli w rozkładzie takim występują dodatnie współczynniki rozwinięcia to standardowo są one pomijane, przyjmowane jako równe zero, gdyż wpływ tych składowych oddziaływania jest pomijalny w porównaniu z innymi oddziaływaniami występującymi w rozważanym układzie [75, 76, 77, 78, 79, 80].

2.3 Transformacje przestrzeni odwrotnej

Przedmiotem rozważań jest jednopasmowy model anizotropowego układu dwu- lub trójwymiarowego w stanie metalicznym z ustalonym widmem wzbudzeń jednocząstkowych. Zakładamy, że energia cząstek jest różniczkowalną funkcją wszystkich składowych pędu $\mathbf{p}$.

Na wstępie podkreślimy, że transformacja pomiędzy wyjściową przestrzenią pędów z bazą wektorów odwrotnej sieci krystalicznej a końcową przestrzenią z ortonormalnym układem współrzędnych i parabolicznym lub liniowym widmem wzbudzeń wymaga złożenia ciągu transformacji, a w szczególności ortonormalizacji przestrzeni, jej ewentualnego obrotu (transformacji ortogonalnej) oraz transformacji konforemnych (krzywoliniowych), które zawsze dają się określić poprzez odpowiednie macierze kwadratowe. Jakobian takiego przejścia będzie się wyrażał jako iloczyn jacobianów ciągu tych transformacji [73]. Własność ta wynika z twierdzenia o mnożeniu wyznaczników, które mówi, że wyznacznik złożenia (iloczynu) kilku macierzy tego samego rzędu jest równy iloczynowi wyznaczników tych macierzy.

2.3.1 Ortonormalizacja przestrzeni

Niech energia wzbudzeń jednocząstkowych, która jest różniczkowalną funkcją wszystkich składowych pędu, będzie postaci:

$$\xi = \xi(p_1, \dots, p_d), \quad (2.1)$$

gdzie $d = 2$ lub $d = 3$, a wektor pędu $\mathbf{p}$ ma postać

$$\mathbf{p} = \sum_{i=1}^d p_i \mathbf{e}_i. \quad (2.2)$$

Wektory $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d$ tworzą bazę w d -wymiarowej przestrzeni pędów i są wektorami bazowymi sieci odwrotnej. W najogólniejszym przypadku baza układu anizotropowego $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_d$ nie jest ortogonalna i unormowana. Można jednak zastosować procedurę ortonormalizacyjną $\mathbf{D}$

w przestrzeni pędów, wówczas nowa baza wektorów $\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_d$ będzie ortonormalna. Wektory bazowe $\mathbf{f}_i$ zostają wyrażone przez wersory $\mathbf{e}_i$ w następujący sposób:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j=1}^d \mathcal{D}_{ij} \mathbf{e}_j. \quad (2.3)$$

Stąd wektor $\mathbf{p}$ w nowej bazie (patrz równanie 2.2) otrzymuje postać:

$$\mathbf{p}' = \sum_{i=1}^d p'_i \mathbf{f}_i, \quad (2.4)$$

a zatem zachodzą następujące relacje:

$$p_i = \sum_{j=1}^d \mathcal{D}_{ji}^{-1} p'_j, \quad (2.5)$$

gdzie $\mathcal{D}^{-1}$ jest macierzą odwrotną do macierzy $\mathcal{D}$. Wykorzystując relacje (2.5) możemy określić energię kwazicząstki z równania (2.1) jako funkcje pędów $p'_1, \dots, p'_d$ w nowym ortonormalnym układzie współrzędnych. Ma ona postać:

$$\xi = \xi \left(\sum_{j=1}^d \mathcal{D}_{j1}^{-1} p'_j, \dots, \sum_{j=1}^d \mathcal{D}_{jn}^{-1} p'_j \right). \quad (2.6)$$

W oparciu o równanie (2.6) i kładąc $\xi = \text{const}$ możemy znaleźć powierzchnie lub linie ekwienergetyczne. W szczególności kładąc $\xi = 0$ dostajemy, w zależności od wymiaru rozpatrywanego układu, powierzchnię lub linię (dla uproszczenia nazywaną też powierzchnią) Fermiego. Kształt tych powierzchni może być różnorodny, ale zawsze powinien odzwierciedlać symetrię układu. Skomplikowany kształt powierzchni ekwienergetycznych sugeruje, że nie możemy traktować układu jako cieczy Fermiego. Z drugiej strony należy pamiętać o wykonanej transformacji $\mathcal{D}$ układu współrzędnych. Prowadzenie wyliczeń w nowym układzie współrzędnych wymaga dodatkowo wprowadzenia jakobianu:

$$\mathcal{J}(\mathbf{p}') = \left| \frac{\partial p_i}{\partial p'_j} \right| \quad (2.7)$$

w formie wyznacznika, którego wartość zgodnie z równaniem (2.5) wynosi

$$\mathcal{J}(\mathbf{p}') = \det \left(\mathcal{D}^{-1} \right). \quad (2.8)$$

Zatem jakobian transformacji ortonormalnej wyraża się w formie odwrotności wyznacznika macierzy transformacji.

2.3.2 Transformacje krzywoliniowe i pole gęstości stanów

Rozważmy w przestrzeni d -wymiarowej, gdzie $d = 2$ lub $d = 3$, dwa dowolne prawoskrętne, ortogonalne i w szczególności, krzywoliniowe układy współrzędnych

$$x_1, \dots, x_d \quad \text{i} \quad y_1, \dots, y_d.$$

Niech współrzędne każdego z układów dadzą się wyrazić jako funkcje parametrów drugiego układu

$$x_i = x_i(y_1, \dots, y_d) \quad \text{oraz} \quad y_j = y_j(x_1, \dots, x_d),$$

gdzie $i, j = 1, \dots, d$, oraz niech

$$\hat{\mathbf{x}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_d$$

jest bazą (ortogonalnych wektorów jednostkowych) skojarzoną z punktem $[x_1, \dots, x_d]$ w tej przestrzeni. Ponieważ założyliśmy, że rozważane układy współrzędnych mogą być krzywoliniowe, więc wektory bazy ortonormalnego układu współrzędnych mogą mieć różną orientację w przestrzeni dla poszczególnych punktów tej przestrzeni. Różniczkowy wektor przesunięcia wystawiony z punktu $[x_1, \dots, x_d]$ ma postać

$$d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^d \hat{\mathbf{x}}_i dx_i. \quad (2.9)$$

Przechodząc do drugiego układu współrzędnych wektor $d\mathbf{x}$ wyraża się następująco

$$d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^d \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_i} dy_i, \quad (2.10)$$

gdzie wektory

$$\hat{\mathbf{y}}_i = \frac{\partial \mathbf{x} / \partial y_i}{|\partial \mathbf{x} / \partial y_i|} \quad (2.11)$$

tworzą ortonormalną bazę w drugim układzie współrzędnych, gdyż są styczne do linii y_i , a ich orientacja w przestrzeni także może być różna dla poszczególnych punktów tej przestrzeni. Ponieważ dla każdej współrzędnej y_i zachodzą równości

$$dy_i = \nabla_{\mathbf{x}} y_i \cdot d\mathbf{x} = \sum_{j=1}^d \nabla_{\mathbf{x}} y_i \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_j} dy_j \quad (2.12)$$

zatem

$$\nabla_{\mathbf{x}} y_i \cdot \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_j} = \delta_{ij}. \quad (2.13)$$

Powierzchnia infinitezimalnego prostokąta w przypadku przestrzeni dwuwymiarowej lub objętość infinitezimalnego prostopadłościanu w przypadku trójwymiarowym, którego przekątną stanowi wektor $d\mathbf{x}$, a punkt $[x_1, \dots, x_d]$ jest jednym z jego wierzchołków, daje się wyrazić w następujący sposób

$$d\tau = [\hat{\mathbf{x}}_1 dx_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_d dx_d] = \prod_{i=1}^d dx_i, \quad (2.14)$$

gdzie dla $d = 3$ symbol $[\cdot, \cdot, \cdot]$ oznacza iloczyn mieszany, natomiast dla $d = 2$ symbol $[\cdot, \cdot]$ jest iloczynem zewnętrznym dwóch wektorów. W drugim układzie współrzędnych analogiczny infinitezimalny element ma postać

$$d\tau' = \prod_{i=1}^d dx_i = \left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_1} dy_1, \dots, \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_d} dy_d \right] = \mathcal{J}(y_1, \dots, y_d) \prod_{i=1}^d dy_i, \quad (2.15)$$

gdzie

$$\mathcal{J}(y_1, \dots, y_d) = \left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_1}, \dots, \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_d} \right] = \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_j} \right| \quad (2.16)$$

jest jacobianem transformacji od pierwszego układu współrzędnych do drugiego.

Wykonanie obrotu pierwszego układu współrzędnych w taki sposób, aby wersory $\hat{\mathbf{x}}_i$ pokryły się z odpowiednimi wersorami $\hat{\mathbf{y}}_i$ zapewnia, że

$$d\tau' = d\tau = \prod_{i=1}^d dx_i. \quad (2.17)$$

Ponieważ obrót jest transformacją ortogonalną, więc z twierdzenia o mnożeniu wyznaczników wynika, że jacobian (2.16) zachowuje swoją postać. Symetria rozważanego problemu zapewnia, że w przypadku przejścia od drugiego układu współrzędnych do pierwszego równanie (2.15) przyjmuje formę

$$\prod_{i=1}^d dy_i = \mathcal{J}'(x_1, \dots, x_d) \prod_{i=1}^d dx_i, \quad (2.18)$$

gdzie

$$\mathcal{J}'(x_1, \dots, x_d) = \left| \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \right|. \quad (2.19)$$

Podstawienie prawej strony równania (2.18) do równania (2.15) pozwala stwierdzić, że zdefiniowane jacobiany spełniają relację

$$\mathcal{J}(y_1, \dots, y_d) \mathcal{J}'(x_1, \dots, x_d) = 1.$$

Natomiast z równania (2.13) wynika, że w przypadku ortogonalnych układów współrzędnych jacobian (2.16) może być zapisany w postaci

$$\mathcal{J}(y_1, \dots, y_d) = \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_1} \right| \cdot \dots \cdot \left| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial y_d} \right| = \frac{1}{|\nabla_{\mathbf{x}} y_1| \cdot \dots \cdot |\nabla_{\mathbf{x}} y_d|}. \quad (2.20)$$

Należy podkreślić, że podobnie jak jacobian przekształcenia tak samo gradient funkcji, a w szczególności wyrażenia $|\nabla_{\mathbf{x}} y_i|$, są niezmiennicze przy transformacji ortogonalnej. Różniczkowy wektor przesunięcia wystawiony z punktu $[x_1, \dots, x_d]$, który jest przekątną elementu $d\tau$, może być zatem zapisany w postaci

$$d\mathbf{x} = \sum_{i=1}^d \hat{\mathbf{y}}_i dx_i, \quad (2.21)$$

wówczas

$$dy_i = \nabla_{\mathbf{x}} y_i \cdot d\mathbf{x} = |\nabla_{\mathbf{x}} y_i| dx_i, \quad (2.22)$$

a zatem

$$dx_i = \frac{dy_i}{|\nabla_{\mathbf{x}} y_i|}. \quad (2.23)$$

Wykorzystanie równań (2.15), (2.20) i (2.23) pozwala stwierdzić następującą równoważność wyrażeń

$$\mathcal{J}(y_1, \dots, y_d) \prod_{i=1}^d dy_i = dy_1 \frac{\prod_{i=2}^d dx_i}{|\nabla_{\mathbf{x}} y_1|}, \quad (2.24)$$

gdzie elementy różniczkowe dx_2 , lub $dx_2 dx_3 = dS$ są elementami krzywej lub powierzchni prostopadłej do wektora $\nabla_{\mathbf{x}} y_1$.

Odnosząc powyższe rozważania do ortogonalnej przestrzeni pędów, dla której jest znana transformacja przejścia do krzywoliniowego, ortogonalnego układu współrzędnych, gdzie jedną

(pierwszą) współrzędną jest energia wzbudzeń jednocząstkowych ξ , na podstawie równania (2.24) stwierdzamy, że następujące definicje gęstości stanów dla $d = 2$ lub $d = 3$

$$\begin{aligned} N(\xi) &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \int \frac{\prod_{i=2}^d dp_i}{|\nabla_{\mathbf{p}} \xi|} \\ N(\xi) &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \int \mathcal{J}(\xi, \dots, \xi_d) \prod_{i=2}^d d\xi_i \end{aligned} \quad (2.25)$$

są równoważne, gdzie ξ_2 , lub ξ_2 i ξ_3 są pozostałymi współrzędnymi układu krzywoliniowego. Całkę w pierwszym wyrażeniu wykonuje się po powierzchni (jedno- lub dwuwymiarowej) stałej energii ξ , natomiast w drugim wyrażeniu całkowanie przebiega po wynikającym z transformacji obszarze jednowymiarowej przestrzeni $[\xi_2]$ lub dwuwymiarowej przestrzeni $[\xi_2, \xi_3]$, odpowiednio.

2.3.3 Uogólniona transformacja konforemna

Jak stwierdziliśmy na wstępie kolejne rozważane transformacje przestrzeni pędów można wykonywać niezależnie. Niemniej określenie transformacji krzywoliniowej, która odwzorowuje z zachowaniem kątów przestrzeń pędów określoną w ortogonalnym (kartezjańskim) układzie, w której jest zdefiniowane widmo wzbudzeń elementarnych $\xi(p_1, \dots, p_d)$, w inną przestrzeń o tym samym wymiarze d , a której jedną z osi ortogonalnego układu współrzędnych jest właśnie energia wzbudzeń elementarnych ξ , wymaga wykonania odpowiednich konstrukcji matematycznych. Ponieważ gradient energii wzbudzeń elementarnych, $\nabla_{\mathbf{p}} \xi$, jest wektorem prostopadłym do linii ($d = 2$) lub do powierzchni ($d = 3$) ekwienergetycznych określonych w przestrzeni pędów, w celu wyznaczenia linii prostopadłych do tej powierzchni formułujemy następujący układ równań

$$dp_1 : \dots : dp_d = \frac{\partial \xi}{\partial p_1} : \dots : \frac{\partial \xi}{\partial p_d}, \quad (2.26)$$

który prowadzi do równań różniczkowych:

$$\frac{dp_i}{dp_1} = \frac{\partial \xi / \partial p_i}{\partial \xi / \partial p_1}, \quad (2.27)$$

gdzie $i = 2$ lub $i = 2$ i $i = 3$, odpowiednio. Z twierdzenia Picarda wynika, że rozwiązanie takiego równania dla $d = 2$, $i = 2$, istnieje i prowadzi do jednoparametrowej rodziny krzywych:

$$\xi_2 = \xi_2(p_1, p_2), \quad (2.28)$$

gdzie nowy parametr ξ_2 jest stały, a równanie (2.28) jest całką ogólną równania różniczkowego (2.27). Zauważmy, że każda z otrzymanych krzywych jest prostopadła do linii ekwienergetycznych, gdyż

$$d\xi_2 = \frac{\partial \xi_2}{\partial p_1} dp_1 + \frac{\partial \xi_2}{\partial p_2} dp_2 = 0, \quad (2.29)$$

więc definiując gradient funkcji $\xi_2(p_1, p_2)$ jako $\nabla_{\mathbf{p}} \xi_2$ i wykorzystując równanie (2.26) otrzymujemy

$$\nabla_{\mathbf{p}} \xi_1 \cdot \nabla_{\mathbf{p}} \xi_2 = 0. \quad (2.30)$$

Tego typu transformacja jest nazywana transformacją konforemną. Dlatego wykonanie analogicznej transformacji w przestrzeni trójwymiarowej będziemy nazywali uogólnioną transformacją konforemną. W przestrzeni trójwymiarowej należy uwzględnić, że $i = 2$ oraz $i = 3$, wówczas

równania (2.27) tworzą układ równań różniczkowych, dla którego podobnie jak w przypadku jednego równania, jest słuszne twierdzenie Picarda. Rozwiązanie ogólne takiego układu jest postaci

$$\xi_2 = \xi_2(p_1, p_2, p_3), \quad \xi_3 = \xi_3(p_1, p_2, p_3), \quad (2.31)$$

gdzie każde z równań jest całką układu równań różniczkowych, a parametry ξ_2 i ξ_3 są stałe, których wybór prowadzi do rozwiązań szczególnych [81, 82]. Rozwiązania (2.31) określają dwie jednoparametrowe rodziny powierzchni, które są prostopadłe do powierzchni ekwienergetycznych $\xi(p_1, p_2, p_3) = \text{const}$. Ponieważ gradienty $\nabla_{\mathbf{p}}\xi_i$ dla $i = 2$ oraz $i = 3$ definiują kierunki prostopadłe do powierzchni tych rodzin, oraz zachodzą równania

$$d\xi_i = \frac{\partial \xi_i}{\partial p_1} dp_1 + \frac{\partial \xi_i}{\partial p_2} dp_2 + \frac{\partial \xi_i}{\partial p_3} dp_3 = 0, \quad (2.32)$$

zatem wykorzystując relacje (2.26) otrzymuje się warunki ortogonalności w postaci

$$\nabla_{\mathbf{p}}\xi_1 \cdot \nabla_{\mathbf{p}}\xi_i = 0. \quad (2.33)$$

Zauważmy ponadto, że jeżeli $\Xi(\cdot, \cdot)$ jest dowolną funkcją różniczkowalną to równanie

$$\Xi = \Xi(\xi_2(p_1, p_2, p_3), \xi_3(p_1, p_2, p_3)) = \tilde{\Xi}(p_1, p_2, p_3) \quad (2.34)$$

także wyznacza jednoparametrową rodzinę powierzchni prostopadłych do powierzchni ekwienergetycznych. Dla układu trójwymiarowego należy znaleźć takie wyrażenie $\xi'_3(p_1, p_2, p_3)$, aby powierzchnie obu zdefiniowanych rodzin były równocześnie wzajemnie prostopadłe. Zadanie to okazuje się znacznie prostsze w przypadku, gdy w otrzymywanych równaniach różniczkowych można rozdzielić zmienne. Niemniej stosując proste reguły ortogonalizacji wektorów można wykazać, że lokalnie jest to możliwe w każdym przypadku. Niech

$$\xi'_3(\mathbf{p}) = \xi_3(\mathbf{p}) - \gamma \xi_2(\mathbf{p}), \quad (2.35)$$

wówczas z warunku

$$\nabla_{\mathbf{p}}\xi'_3 \cdot \nabla_{\mathbf{p}}\xi_2 = 0, \quad (2.36)$$

możemy wyznaczyć γ i w rezultacie określić

$$\xi'_3(\mathbf{p}) = \xi_3(\mathbf{p}) - \frac{\nabla_{\mathbf{p}}\xi_3 \cdot \nabla_{\mathbf{p}}\xi_2}{(\nabla_{\mathbf{p}}\xi_2)^2} \cdot \xi_2(\mathbf{p}). \quad (2.37)$$

Powyższa metoda jest tylko jedną z możliwych i dotyczy obszarów lokalnych. W poszczególnych przypadkach na ogół można znaleźć dogodną całkę ogólną $\xi_3 = \xi_3(\mathbf{p})$, który spełnia warunek (2.36). Opierając się na otrzymanych wynikach można ustanowić nową ortonormalną bazę $\mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_d$, gdzie wersory:

$$\mathbf{g}_i = \frac{\nabla_{\mathbf{p}}\xi_i}{|\nabla_{\mathbf{p}}\xi_i|},$$

reprezentują dwu lub trójwymiarowy ortogonalny układ współrzędnych krzywoliniowych, dla których pierwsza oś ξ reprezentuje energię widma wzbudzeń cząstek. Zaprezentowana metoda pozwala odwzorować każdą dwu- lub trójwymiarową przestrzeń pędów w odpowiednią dwu- lub trójwymiarową przestrzeń o współrzędnych ξ oraz ξ_2 lub ξ_2 i ξ_3 . Współrzędna ξ , która określa energię kwazicząstki względem powierzchni Fermiego może przyjmować wartości pomiędzy $-\mu$

(potencjałem chemicznym) i nieskończonością w ramach dozwolonych szerokością pasma. Zakres zmienności współrzędnych ξ_2 i ξ_3 może być wybierany różnie i w ogólności może być ograniczony lub nieograniczony. Współrzędnym tym można próbować nadać sens fizyczny wyrażając je przez współrzędne kątowe analogiczne jak w układach biegunowym lub sferycznym. Poprzez wprowadzenie odpowiednich funkcji trygonometrycznych zakres zmienności nowych współrzędnych np. φ i ϑ można standardowo ograniczyć, wówczas $0 \leq \varphi < 2\pi$ i $0 \leq \vartheta \leq \pi$.

Jak zostało pokazane w poprzednim podrozdziale przy powyższych transformacjach w celu zachowania powierzchni lub objętości transformowanych fragmentów przestrzeni należy uwzględnić jakobian odwzorowania, który można utożsamiać z lokalnymi zmianami gęstości powierzchni lub przestrzeni. W przypadku transformacji rozważanych przestrzeni jakobian (2.16) należy przepisać w postaci

$$\mathcal{J}(\xi, \dots, \xi_d) = \begin{vmatrix} \frac{\partial p_1}{\partial \xi} & \dots & \frac{\partial p_d}{\partial \xi} \\ \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial p_1}{\partial \xi_d} & \dots & \frac{\partial p_d}{\partial \xi_d} \end{vmatrix}. \quad (2.38)$$

Rozwinięty formalizm pozwala określić zasady przejścia od sumowania lub całkowania po przestrzeni pędów do całkowania po współrzędnych $\xi, \dots, \xi_d$ w „nowej” przestrzeni zgodnie z następującą relacją

$$2 \sum_{\mathbf{p}} \dots = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \int d^d p \dots = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \int d\xi \dots d\xi_d \mathcal{J}(\xi, \dots, \xi_d) \dots \quad (2.39)$$

Zauważmy, że jakobian definiuje nam dodatkowe pole skalarne w przestrzeni $[\xi, \dots, \xi_d]$. To pole jest niejednorodne i wyraża lokalną deformację lub modyfikację stanów kwantowo-mechanicznych, co jest rezultatem dokonanej transformacji. Uwzględnienie czynnika $2 \cdot (2\pi\hbar)^{-d}$, pozwala zdefiniować skalarne pole gęstości stanów w przestrzeni $[\xi, \dots, \xi_d]$ następująco:

$$\mathcal{K}(\xi, \dots, \xi_d) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d} \mathcal{J}(\xi, \dots, \xi_d). \quad (2.40)$$

Skalarne pole $\mathcal{K}(\xi, \dots, \xi_d)$ jest jądrem funkcji gęstości stanów $N(\xi)$ zdefiniowanej w równaniu (2.25), gdzie pokazano, że aby wyznaczyć funkcję gęstości stanów należy wycalcować $\mathcal{K}(\xi, \dots, \xi_d)$ po wszystkich ekwienergetycznych liniach lub powierzchniach, czyli po ξ_2 lub ξ_2 i ξ_3 , które mogą być np. odpowiednio dobranymi współrzędnymi kątowymi. W przypadku wycalcowania po ξ_2 lub ξ_2, ξ_3 relacja (2.39) redukuje się do postaci

$$2 \sum_{\mathbf{p}} \dots = \int d\xi N(\xi) \dots, \quad (2.41)$$

w której niestety zostają pominięte, odpowiednio, jeden (ξ_2) lub dwa (ξ_2, ξ_3) stopnie swobody układu.

2.4 Model kwazicząstek Landaua

Opisane transformacje anizotropowego układu cząstek (fermionów) umożliwiają przeniesienie rozważań do pewnej abstrakcyjnej przestrzeni $[\xi, \dots, \xi_d]$. Jednak, jak już wspomniano wcześniej

współrzędne ξ_2 dla $d = 2$, i ξ_2, ξ_3 dla $d = 3$ można wyrazić poprzez współrzędne φ , lub φ i ϑ wprowadzając odpowiednie funkcje trygonometryczne według zasad odpowiadających biegunowemu lub sferycznemu układowi współrzędnych. Współrzędne te powinny spełniać warunki: $0 \leq \varphi < 2\pi$ i $0 \leq \vartheta \leq \pi$. W otrzymanych modelach układów krzywe ($d = 2$) lub powierzchnie ($d = 3$) ekwienergetyczne są płaskie, a skalarne pola gęstości stanów zostają wyrażone w formie funkcji:

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(\xi, \varphi) &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^2} \mathcal{J}(\xi, \varphi) & \text{dla } d = 2 \\ \mathcal{K}(\xi, \varphi, \vartheta) &= \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \mathcal{J}(\xi, \varphi, \vartheta) & \text{dla } d = 3. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Odnieśmy teraz przedstawione rozważania do dwu- i trójwymiarowego modelu kwazicząstek Landaua w przestrzeni pędów. W modelu tym widmo wzbudzeń kwazicząstek ma tzw. paraboliczną formę

$$\xi = \frac{1}{2m^*} (p_1^2 + \dots + p_n^2) - \mu, \quad (2.43)$$

którą w okolicy powierzchni Fermiego ($\xi = 0$) można zredukować do postaci liniowej

$$\xi = \mathbf{v}_F (|\mathbf{p}| - p_F), \quad (2.44)$$

gdzie $\mathbf{v}_F$ i p_F określają prędkość i pęd Fermiego oraz $\mu = p_F^2/2m^*$. Dla parabolicznego widma wzbudzeń zachodzą relacje

$$\nabla_{\mathbf{p}} \xi = \frac{1}{m^*} [p_1, \dots, p_d] \quad (2.45)$$

oraz odpowiadająca równaniu (2.26)

$$\frac{dp_1}{p_1} = \dots = \frac{dp_d}{p_d}. \quad (2.46)$$

Rozwiązania równania (2.46) mają postać

$$\varphi = \arctan \left(\frac{p_2}{p_1} \right) \quad (2.47)$$

dla $d = 2$ oraz

$$\varphi = \arctan \left(\frac{p_2}{p_1} \right) \quad \text{and} \quad \vartheta = \arctan \sqrt{\left(\frac{p_1}{p_3} \right)^2 + \left(\frac{p_2}{p_3} \right)^2} \quad (2.48)$$

dla $d = 3$, z których po przekształceniach algebraicznych dostajemy

$$\begin{aligned} p_1 &= \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \cdot \cos \varphi \\ p_2 &= \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \cdot \sin \varphi \\ \mathcal{J}(\xi, \varphi) &= m^* \end{aligned} \quad (2.49)$$

dla $d = 2$ oraz

$$\begin{aligned}
p_1 &= \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \cdot \sin \vartheta \cos \varphi \\
p_2 &= \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \cdot \sin \vartheta \sin \varphi \\
p_3 &= \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \cdot \cos \vartheta \\
\mathcal{J}(\xi, \varphi, \vartheta) &= m^* \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \cdot \sin \vartheta
\end{aligned} \tag{2.50}$$

dla $d = 3$. W ten sposób dowolne wzbudzenia kwazicząstek i kwazicząstki Landaua mają taką samą reprezentację w przestrzeniach $[\xi, \varphi]$ i $[\xi, \varphi, \vartheta]$. Jedyna różnica pomiędzy takimi układami wyraża się w postaci skalarne go pola gęstości stanów. Nakładając przekształcenie odwrotne na związki określone równaniami (2.49) i (2.50) można odzwierciedlić dowolne wzbudzenia kwazicząstek na kwazicząstki Landaua. Wówczas należy uwzględnić także, że w takim izotropowym układzie $[p_1, \dots, p_d]$ stany kwantowo-mechaniczne nie są rozłokowane w sposób jednorodny, oraz że, pojawia się dodatkowo pewne szczególne dla danego układu pole gęstości stanów. Dla $d = 2$ wyraża się ono następująco

$$\mathcal{K}'(p_1, p_2) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2 m^*} \mathcal{J}(\xi, \varphi), \tag{2.51}$$

a dla $d = 3$ otrzymujemy odpowiednio

$$\mathcal{K}'(p_1, p_2, p_3) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3 m^* \sqrt{2m^*(\xi + \mu)} \sin \vartheta} \mathcal{J}(\xi, \varphi, \vartheta), \tag{2.52}$$

gdzie jacobiany są postaci jak w równaniach (2.42), w których jednakże współrzędne ξ , φ i ϑ muszą zostać wyrażone przez p_1 , p_2 i p_3 zgodnie z równaniami (2.43), (2.47) i (2.48). Jeśli wejściowy układ jest izotropowy oraz energię kwazicząstek określa równanie (2.43), wówczas równania (2.51) i (2.52) redukują się do postaci

$$\mathcal{K}'(p_1, \dots, p_d) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^d}. \tag{2.53}$$

Zaprezentowany formalizm dowodzi, że dowolny anizotropowy układ elektronów lub dziur, dla którego postać widma energii wzbudzeń cząstek jest znana, może być rozważany jako układ cieczy Fermiego w izotropowej przestrzeni pędów z dodatkowym niejednorodnym skalarnym polem gęstości stanów, $\mathcal{K}'$. W takich przestrzeniach pędów linie lub powierzchnie Fermiego, określone równaniem $\xi = 0$, są okręgami lub sferami.

2.4.1 Układ anizotropowy

W celu zilustrowania omówionego w podrozdziale 2.3.1 zagadnienia ortonormalizacji przestrzeni i wynikających następstw tego procesu rozpatrzmy dwuwymiarowy anizotropowy układ, w którym podstawowe wektory sieci odwrotnej $\mathbf{e}_1$ i $\mathbf{e}_2$ nie są ortogonalne i mają różną długość. Zakładamy, że $|\mathbf{e}_1| = 1$, wówczas transformacja ortonormalna jest reprezentowana przez następujące macierze

$$\mathcal{D} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\cot \alpha & \frac{1}{|\mathbf{e}_2| \sin \alpha} \end{bmatrix} \quad \mathcal{D}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ |\mathbf{e}_2| \cos \alpha & |\mathbf{e}_2| \sin \alpha \end{bmatrix} \tag{2.54}$$

gdzie α jest kątem pomiędzy wektorami $\mathbf{e}_1$ i $\mathbf{e}_2$, a jacobian

$$\mathcal{J}(p'_1, p'_2) = |\mathbf{e}_2| \sin \alpha. \quad (2.55)$$

Wykonanie powyższej transformacji pozwala przenieść dalsze rozważania do ortonormalnego układu współrzędnych z podstawowymi wektorami przetransformowanej sieci odwrotnej $\mathbf{f}_1$ i $\mathbf{f}_2$ takimi, że $|\mathbf{e}_1| = |\mathbf{f}_1| = |\mathbf{f}_2|$.

W przypadku gdy relacja dyspersji w układzie wyjściowym została przyjęta w postaci parabolicznej, tj.

$$\xi(p_1, p_2) = \frac{1}{2m^*} (p_1^2 + p_2^2) - \mu, \quad (2.56)$$

gdzie m^* oznacza masę efektywną, a μ jest potencjałem chemicznym, wówczas po transformacji uzyskuje ona postać

$$\xi(p'_1, p'_2) = \frac{1}{2m^*} \left[(p'_1)^2 + 2p'_1 p'_2 |\mathbf{e}_2| \cos \alpha + (p'_2)^2 |\mathbf{e}_2|^2 \right] - \mu. \quad (2.57)$$

Dokonując obrotu „nowego” układu współrzędnych o kąt

$$\beta = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{2|\mathbf{e}_2| \cos \alpha}{1 - |\mathbf{e}_2|^2} \right) \quad (2.58)$$

możemy relację dyspersji zastąpić bardziej symetryczną, uproszczoną i równoważną jej formą

$$\xi(p'_1, p'_2) = \frac{1}{2m_1^*} (p'_1)^2 + \frac{1}{2m_2^*} (p'_2)^2 - \mu, \quad (2.59)$$

gdzie m_1^* i m_2^* są parametrami masy efektywnej dającymi się wyrazić za pomocą m^* , $|\mathbf{e}_2|$ i kąta α , których natura wynika z anizotropowości układu wyjściowego. Ponieważ obrót układu współrzędnych jest transformacją ortogonalną, więc jacobian tej transformacji jest równy 1. Zauważmy, że w wyniku przeprowadzonej transformacji w nowym kartezjańskim układzie współrzędnych linie ekwienergetyczne są koncentrycznymi elipsami. W ten sposób pokazaliśmy, że wzrost symetrii układu współrzędnych powoduje zmiany postaci relacji dyspersji, która może stać się bardziej złożona. A zatem własności symetrii układu odpowiadające symetrii sieci krystalicznej w procesie ortonormalizacji układu współrzędnych zostają przeniesione do relacji dyspersji i są zawarte w jacobianie transformacji.

2.4.2 Jednopasmowy model Hubbarda

Zgodnie z rezultatami obliczeń struktury pasmowej [21, 38] w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych pasmo przewodnictwa może zostać opisane w podejściu modelu ciasnego wiązania. Wówczas jednocząsteczkowa postać widma energetycznego dla płaskiej sieci prostokątnej o symetrii D_{4h} , gdzie b_1 i b_2 odpowiadają długościom boków komórki elementarnej oraz $a_1 \equiv b_1/\hbar$ i $a_2 \equiv b_2/\hbar$, jest postaci [83]

$$\xi(p_1, p_2) = -2t_0 [\cos(p_1 a_1) + \cos(p_2 a_2)] + 4t_1 \cos(p_1 a_1) \cdot \cos(p_2 a_2) - t_2, \quad (2.60)$$

a parametry t_0 i t_1 odpowiadają przeskokom do węzłów najbliższych i kolejnych najbliższych sąsiadów. Parametr zapelnienia pasma t_2 wyraża przesunięcie poziomu Fermiego w przypadku domieszkowania i niesymetrycznego wypełnienia pasma. Jest on identyfikowany z potencjałem

chemicznym. Aby uprościć obliczenia dokonujemy następującego przekształcenia przestrzeni pędów

$$k_1 = p_1 a_1 \quad \text{and} \quad k_2 = p_2 a_2. \quad (2.61)$$

Transformacja ta, której jacobian jest postaci $\mathcal{J} = (a_1 a_2)^{-1}$, pozwala prowadzić dalsze obliczenia w przestrzeni ortonormalnej. Wówczas równanie (2.60) redukuje się do postaci:

$$\xi(k_1, k_2) = -2t_0 [\cos(k_1) + \cos(k_2)] + 4t_1 \cos(k_1) \cdot \cos(k_2) - t_2, \quad (2.62)$$

z której otrzymujemy

$$\nabla_{\mathbf{p}} \xi = [2t_0 \sin k_1 + 4t_1 \sin k_1 \cos k_2, \quad 2t_0 \sin k_2 + 4t_1 \cos k_1 \sin k_2] \quad (2.63)$$

Postępowanie zgodne z procedurą opisaną w podrozdziale 2.3.3 prowadzi do następującego równania różniczkowego

$$\frac{dk_1}{dk_2} = \frac{2t_0 \sin k_1 - 4t_1 \sin k_1 \cos k_2}{2t_0 \sin k_2 - 4t_1 \cos k_1 \sin k_2}, \quad (2.64)$$

które w wyniku przekształceń algebraicznych pozwala na rozseparowanie zmiennych k_1 i k_2 , i daje się zapisać w postaci

$$\frac{1 - 2\frac{t_1}{t_0} \cos k_1}{\sin k_1} dk_1 = \frac{1 - 2\frac{t_1}{t_0} \cos k_2}{\sin k_2} dk_2. \quad (2.65)$$

Po przelicowaniu obu stron równania (2.65) otrzymuje się wyrażenie

$$\ln \tan \frac{k_1}{2} - 2\frac{t_1}{t_0} \ln \sin k_1 = \ln \tan \frac{k_2}{2} - 2\frac{t_1}{t_0} \ln \sin k_2 - \xi_2, \quad (2.66)$$

gdzie k_1 i k_2 spełniają warunek $0 \leq k_1, k_2 \leq \pi$. Stała całkowania definiuje drugi parametr ξ_2 . Równania (2.62) i (2.64) stanowią układ równań definiujących transformację przestrzeni wektora $\mathbf{k}$ w ortonormalną dwuwymiarową przestrzeń $[\xi, \xi_2]$. W tej nowej przestrzeni współrzędna ξ_2 przybiera zakres zmienności od minus do plus nieskończoności, a ξ przyjmuje wartości od ξ_{min} do ξ_{max} wyznaczone szerokością pasma przewodnictwa. Wielkości te zależą od wzajemnych relacji pomiędzy parametrami modelu t_0 i t_1 . Aby uczynić zakres zmienności drugiej współrzędnej ograniczonym można zastąpić ξ_2 np. przez $\tan \varphi$, wówczas $-\frac{\pi}{2} < \varphi < \frac{\pi}{2}$, lub przez $\ln \tan \varphi$, a wtedy $0 < \varphi < \frac{\pi}{2}$. W takim przypadku linie ekwienergetyczne w przestrzeni $[\xi, \varphi]$ są równoległymi odcinkami o długości $\frac{\pi}{2}$. Mogą one zostać przedłużone na przedział $[0, 2\pi]$ zgodnie z warunkami symetrii D_{4h} wejściowego układu. Wyliczenia w przestrzeni $[\xi, \varphi]$ wymagają wyznaczenia jacobianu $\mathcal{J}(\xi, \varphi)$. Wówczas równanie (2.38) pozwala zdefiniować pole gęstości stanów

$$\mathcal{K}(\xi, \varphi) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^2 a_1 a_2} \cdot \mathcal{J}(\xi, \varphi) \quad (2.67)$$

oraz gęstość stanów (równanie (2.25))

$$N(\xi) = \frac{8}{(2\pi\hbar)^2 a_1 a_2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mathcal{J}(\xi, \varphi) d\varphi. \quad (2.68)$$

Jak już zostało pokazane wyznaczone transformacje pozwalają zdefiniować układ równoważny rozpatrywanemu dla cieczy Fermiego z dodatkowym skalarnym polem gęstości stanów, $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$. Zachowanie pełnej odpowiedniości pomiędzy skonstruowanym układem a cieczą Fermiego wymaga, aby kąt φ przyjmował wartości od 0 do 2π . Jednakże wykorzystując własności symetrii D_{4h} można rezultaty otrzymane dla $0 \leq k_1, k_2 \leq \pi$ z pierwszej ćwiartki układu współrzędnych i odpowiednio dla $0 \leq \varphi \leq \frac{\pi}{2}$ rozszerzyć tak, aby zakres zmienności k_1 i k_2 obejmował całą przestrzeń, wówczas kąt φ będzie przybiegał wartości od 0 do 2π . Zauważmy, że aby wyznaczyć jacobian $\mathcal{J}(\xi, \varphi)$ należy rozwiązać równania (2.62) i (2.66). Podstawiając $\xi_2 = \ln \tan \varphi$ ($\tan \varphi \geq 0$), równanie (2.66) redukuje się do postaci

$$\tan \varphi = \frac{\tan \frac{k_2}{2} \cdot (\sin k_2)^{-\frac{2t_1}{t_0}}}{\tan \frac{k_1}{2} \cdot (\sin k_1)^{-\frac{2t_1}{t_0}}}. \quad (2.69)$$

Wykorzystując związki

$$\sin \beta = \frac{\tan \beta}{\sqrt{1 + \tan^2 \beta}}$$

i

$$\sin 2\beta = 2 \sin \beta \cos \beta, \quad \cos 2\beta = \cos^2 \beta - \sin^2 \beta$$

oraz wprowadzając oznaczenia

$$x_1 = \tan \frac{k_1}{2} \quad x_2 = \tan \frac{k_2}{2}, \quad (2.70)$$

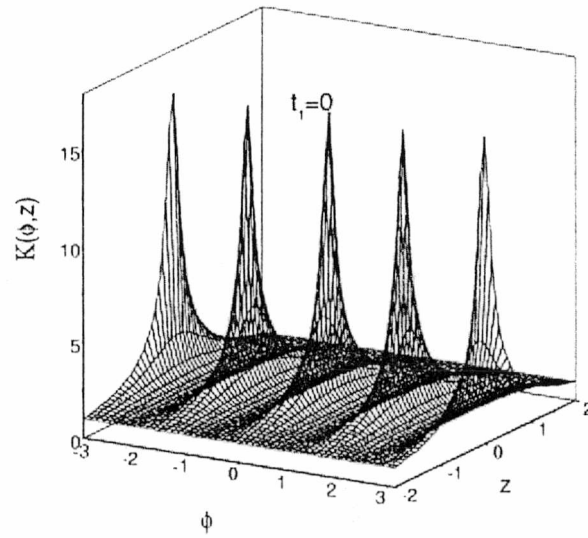
gdzie $x_1, x_2 \geq 0$, równania (2.62) i (2.69) dają się zredukować do postaci

$$\begin{aligned} \xi_1 &= -2t_0 \left(-2 + \frac{2}{1+x_1^2} + \frac{2}{1+x_2^2} \right) + 4t_1 \left[1 - \frac{2}{1+x_1^2} - \frac{2}{1+x_2^2} + \frac{4}{(1+x_1^2)(1+x_2^2)} \right] - t_2 \\ \tan \varphi &= \frac{x_2 \cdot \left(\frac{x_2}{1+x_2^2} \right)^{-\frac{2t_1}{t_0}}}{x_1 \cdot \left(\frac{x_1}{1+x_1^2} \right)^{-\frac{2t_1}{t_0}}} \end{aligned} \quad (2.71)$$

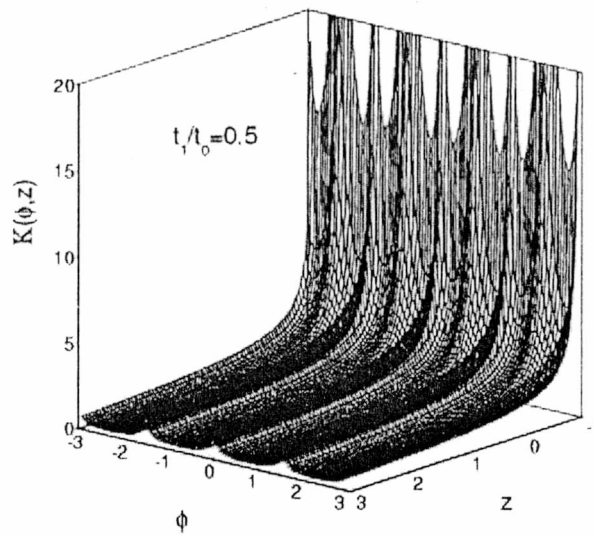
Wyznaczenie x_1 i x_2 jako funkcji ξ i φ dla dowolnych t_0 i t_1 w zakresie stosowalności modelu może zostać wykonane wyłącznie metodami numerycznymi [83]. Po znalezieniu odpowiednich pochodnych cząstkowych można zgodnie z równaniem (2.38) wyliczyć jacobian. Natomiast równania (2.71) można rozwiązać analitycznie jedynie dla kilku szczególnych przypadków, kiedy t_0 i t_1 spełniają warunek $t_1/t_0 = 0,5$ lub $t_1/t_0 = 0$, lub $t_1/t_0 = -0,5$ ([83]). Aby uprościć dalsze obliczenia wprowadza się następujące oznaczenia:

$$z = \frac{\xi_1 + t_2}{2t_0} \quad \text{oraz} \quad f = \tan \varphi \geq 0. \quad (2.72)$$

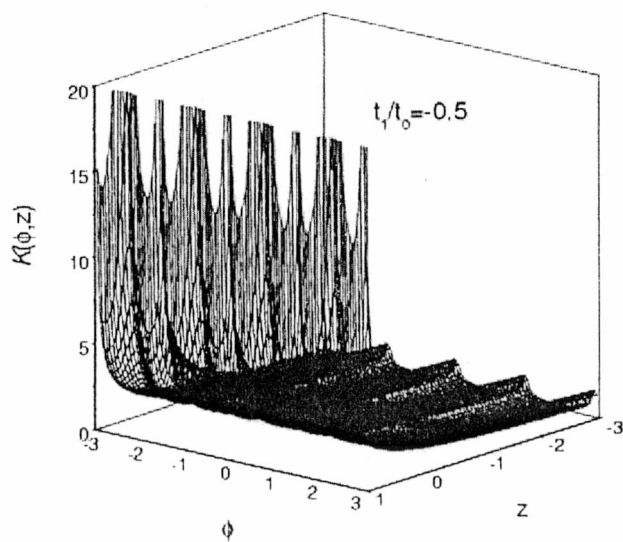
Po przekształceniach algebraicznych otrzymujemy ($i = 1$ lub $i = 2$)



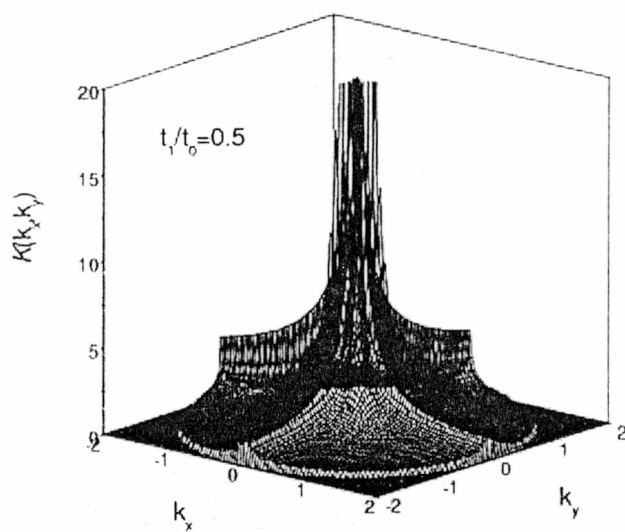
Rysunek 2.1: Skalarne pole gęstości stanów w zależności od φ i z dla $t_1 = 0$



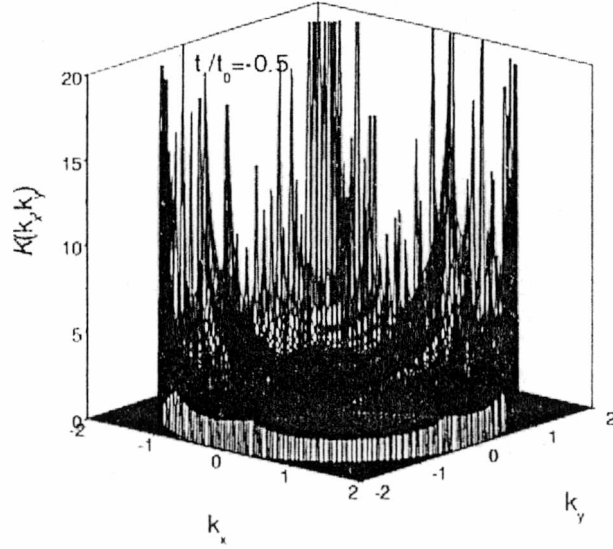
Rysunek 2.2: Skalarne pole gęstości stanów w zależności od φ i z dla $t_1/t_0 = 0.5$



Rysunek 2.3: Skalarne pole gęstości stanów w zależności od φ i z dla $t_1/t_0 = -0.5$



Rysunek 2.4: Skalarne pole gęstości stanów w zależności od zredukowanego wektora falowego dla $t_1/t_0 = 0.5$.



Rysunek 2.5: Skalarne pole gęstości stanów w zależności od zredukowanego wektora falowego dla $t_1/t_0 = -0.5$.

- dla $t_1/t_0 = 0.5$, $|z - 1| \leq 2$

$$k_i = 2 \arctan \sqrt{\frac{1}{y_i} - 1}$$

$$y_i = \frac{f + 1 - \sqrt{(f + 1)^2 + (z - 3)f}}{2f^{i-1}} \quad (2.73)$$

- dla $t_1 = 0$, $|z| \leq 2$

$$k_i = 2 \arctan \left[\frac{z(1 + f^2) + \sqrt{(1 + f^2)z^2 + 4f^2(4 - z^2)}}{2(2 - z)f^{2(2-i)}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.74)$$

- dla $t_1/t_0 = -0.5$ $|z + 1| \leq 2$

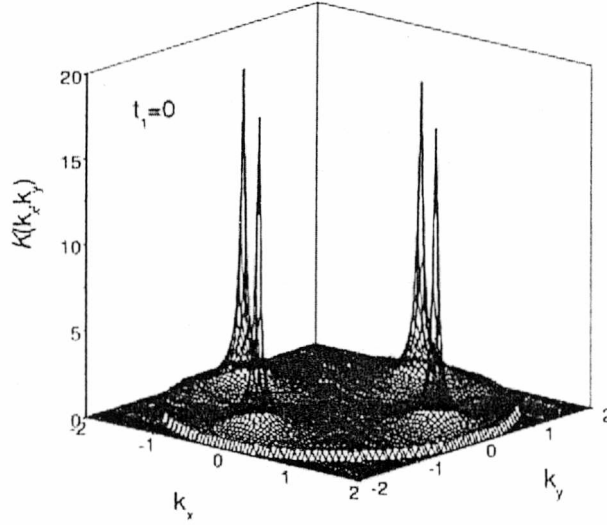
$$k_i = 2 \arctan \sqrt{\frac{1}{y_i} - 1}$$

$$y_i = \frac{(-1)^{i-1}(1 - f) + \sqrt{(1 - f)^2 + (1 - z)f}}{2f^{i-1}} \quad (2.75)$$

Wykorzystując otrzymane rozwiązania (2.73)–(2.75) można wyznaczyć dokładną postać jacobianu. Podstawiając do równania (2.38), równanie (2.67) otrzymujemy:

- dla $t_1/t_0 = 0.5$, $-1 \leq z \leq 3$

$$\mathcal{K}(\xi_1, \varphi) = \frac{1}{2(2\pi\hbar)^2 t_0 a_1 a_2} \frac{1 + f^2}{\sqrt{[(1 - f)^2 + (1 + z)f](1 + z)f}} \quad (2.76)$$



Rysunek 2.6: Skalarne pole gęstości stanów w zależności od zredukowanego wektora falowego dla $t_1 = 0$.

- dla $t_1 = 0$, $-2 \leq z \leq 2$

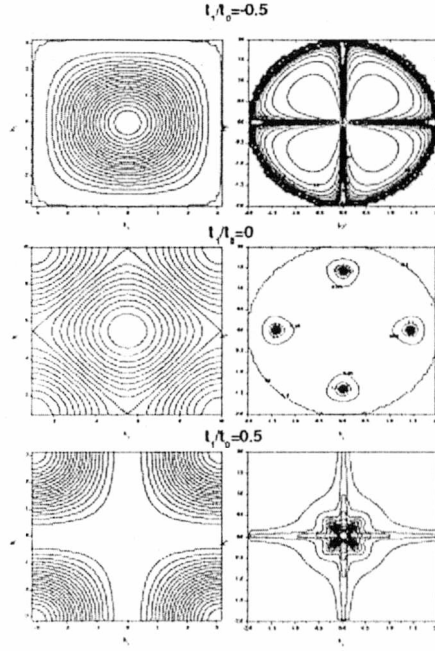
$$\mathcal{K}(\xi_1, \varphi) = \frac{4}{2(2\pi\hbar)^2 t_0 a_1 a_2} \frac{1 + f^2}{\sqrt{z^2(1 - f^2)^2 + 16f^2}} \quad (2.77)$$

- dla $t_1/t_0 = -0.5$, $-3 \leq z \leq 1$

$$\mathcal{K}(\xi_1, \varphi) = \frac{1}{2(2\pi\hbar)^2 t_0 a_1 a_2} \frac{1 + f^2}{\sqrt{[(1 - f)^2 + (1 - z)f](1 - z)f}}, \quad (2.78)$$

gdzie parametry z i f jako funkcje ξ i φ zostały określone przez równanie (2.72). Postać funkcji $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$, to jest postać pola gęstości stanów, została przedstawiona na rysunkach: 2.1, 2.2, 2.3. Na rysunkach 2.7 dodatkowo przedstawiono dodatkowo rzuty funkcji $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ na płaszczyznę, gdzie zakreślono linie równych wartości $\mathcal{K}$. Dla porównania obok zamieszczono postać funkcji $z(k_x, k_y)$, przedstawioną w tej samej dziedzinie. Krzywe przedstawione po lewej stronie przedstawiają sytuację wyjściową, czyli linie ekwienergetyczne, a obok po prawej stronie znajdujemy ich odpowiedniki dla skalarne pole gęstości stanów. Można łatwo zauważyć, że symetria układu wyjściowego zostaje zachowana.

Aby odwzorować wzbudzenia jednocząstkowe na kwazicząstki typu Landaua rozmieszczone w izotropowej przestrzeni pędów przyjmuje się, że $z = k^2 - z_0$ oraz $k_i = p_i a$. Wówczas, ξ ma postać określoną w równaniu (2.43), jeżeli $m^* = (4t_0 a^2)^{-1}$ i $\mu = 2t_0 z_0 + t_2$ z czego wynika, że pęd Fermiego kwazicząstek typu Landaua $p_F = \sqrt{z_0/a^2 + t_2/(a^2 t_0)}$. Parametr a jest charakterystyczną długością, którą należy wyznaczyć z warunku wynikającego z twierdzenia Luttingera, że całkowita liczba kwazicząstek jest równa całkowitej liczbie cząstek. Na przykład, zakładając, że $t_1 = t_2 = 0$ i $z_0 = 2$ i wykorzystując równanie (2.83) otrzymamy $a = \sqrt{a_1 a_2}/4$ i



Rysunek 2.7: Linie ekwienergetyczne i odpowiadające im linie równych wartości pola gęstości stanów dla wybranych parametrów układu

$p_F = 8/\sqrt{2a_1a_2}$. Na kolejnych rysunkach 2.4, 2.5, 2.6 zostały przedstawione stosowne postaci funkcji $\mathcal{K}'(k_1, k_2)$ ($= \mathcal{K}/m^*$) otrzymane z wykorzystaniem równań (2.51), (2.71) i (2.76)–(2.78), która jest zdefiniowana w izotropowej przestrzeni zredukowanych wektorów k_x i k_y . Dla wszystkich przedyskutowanych przypadków spełniony jest związek

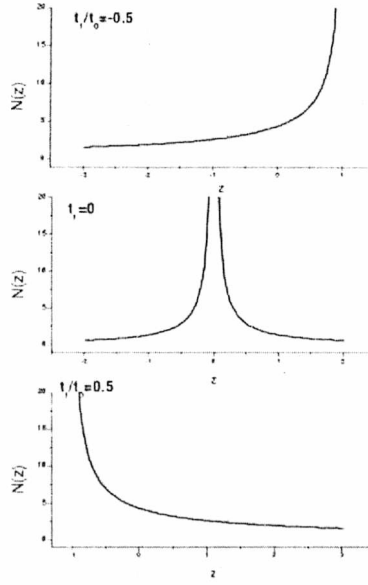
$$\mathcal{K}(\xi, \frac{\pi}{2} - \varphi) = \mathcal{K}(\xi, \varphi) \quad (2.79)$$

wynikający z przyjętej symetrii D_{4h} układu wyjściowego. Badając wyrażenia dane równaniami (2.76) i (2.78) można stwierdzić, że dla $t_1/t_0 = \pm 0,5$ osobliwość pojawia się, jeśli f dąży do zera lub nieskończoności, gdy $(\phi \rightarrow 0$ lub $\frac{\pi}{2})$, a także, gdy z dąży do -1 lub $+1$. Ten drugi warunek dotyczący dążenia parametru z do granicy stosowności teorii powoduje zatem, że te osobliwości nie pojawiają się w standardowych rozważaniach. Niemniej gęstość stanów otrzymana z równań (2.76) i (2.78) po scałkowaniu ich po φ zgodnie z równaniem (2.68) ma ona postać

$$N(\xi) = \frac{2}{\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 \pm z}} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{3 \mp z}{4}}\right), \quad (2.80)$$

gdzie $F(\phi, \kappa)$ jest całką eliptyczną pierwszego rodzaju, która jest postaci [39]

$$F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{3 \mp z}{4}}\right) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{d\alpha}{\sqrt{1 - \frac{3 \mp z}{4} \sin^2 \alpha}}, \quad (2.81)$$



Rysunek 2.8: Charakterystyczny przebieg funkcji gęstość stanów w obszarze stosowalności teorii.

i nie ma ona biegunów poza przypadkiem z dążącego do granicy stosowalności teorii. Gęstość stanów (2.80) jest więc w tych przypadkach regularną funkcją ξ . W przypadku $t_1 = 0$, gdy f dąży do nieskończoności ($\varphi \rightarrow \frac{\pi}{2}$), funkcja $\mathcal{K}(\xi, \varphi) \sim z^{-1}$ i nie posiada osobliwości poza przypadkiem $z \rightarrow 0$. Ta szczególna osobliwość wywiera istotny wpływ na własności całego układu, gdyż nie zanika ona po scałkowaniu po φ i zawsze pojawia się w funkcji gęstości stanów $N(\xi)$. Jest ona klasyfikowana jako osobliwość typu Van Hove'a [73, 83, 84, 89]. Całkując $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ dane równaniem (2.77) po kącie φ otrzymuje się

$$N(\xi) = \frac{2}{\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{8 - z^2 + 4\sqrt{4 - z^2}}} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, \left(\frac{8\sqrt{4 - z^2}}{8 - z^2 + 4\sqrt{4 - z^2}}\right)^{\frac{1}{2}}\right). \quad (2.82)$$

Postaci gęstości stanów określone równaniami (2.80) i (2.82) zostały przedstawione na rysunku 2.8. Wartość $N(\xi)$ gęstości stanów określonej równaniem (2.82), gdy $z = \pm 2$ wynosi $(4\pi t_0 a_1 a_2)^{-1}$, ponadto

$$\int_{-2}^0 \frac{1}{\sqrt{8 - z^2 + 4\sqrt{4 - z^2}}} \cdot F\left(\frac{\pi}{2}, \left(\frac{8\sqrt{4 - z^2}}{8 - z^2 + 4\sqrt{4 - z^2}}\right)^{\frac{1}{2}}\right) dz = \frac{\pi^2}{4}. \quad (2.83)$$

Ponieważ gęstość stanów $N(\xi)$ jest osobliwa w $\xi + t_2 = 0$, jej zachowanie zostało zbadane dla $z = (\xi + t_2)/2t_0$ zmierzającego do zera. W granicy $z \rightarrow 0$ czynnik κ^2 pojawiający się w całce

eliptycznej $F(\frac{\pi}{2}, \kappa)$ redukuje się do postaci

$$\kappa^2 = \frac{8\sqrt{4-z^2}}{8-z^2+4\sqrt{4-z^2}} \rightarrow 1 - \left(\frac{z}{4}\right)^4, \quad (2.84)$$

a więc jest bliski jedności. Funkcję $F(\frac{\pi}{2}, \kappa)$ w granicy $\kappa \rightarrow 1$ można rozwinąć w specyficzny szereg [39], którego kolejne wyrazy są rzędu $-z^{4n} \ln |z|$, co pozwala zgodnie z założoną dokładnością do z^4 przybliżyć wyrażenie (2.82) następującą formułą

$$N(\xi) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \cdot \left\{ \left[1 + \left(\frac{z}{4}\right)^2 \right] \ln \frac{8}{|z|} + \frac{1}{4} \left(9 \ln \frac{8}{|z|} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{z}{4}\right)^4 \right\}. \quad (2.85)$$

Otrzymane przybliżenie jest zgodne z innymi formułami [28, 73, 74, 90], które gęstość stanów definiują następująco:

$$N(\xi) = A \ln \frac{B}{|\xi_1 + t_2|}, \quad (2.86)$$

gdzie A i B są pewnymi stałymi. Zaprezentowane podejście umożliwia oszacowanie tych stałych w oparciu o równanie (2.85), stąd

$$A = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \quad \text{and} \quad B = 16 t_0. \quad (2.87)$$

Tym samym współczynniki A i B zostały precyzyjnie określone przez parametry modelu występujące w definicji widma energetycznego cząstek. Zauważmy, że iloczyn $AB = 8/\pi^2 \hbar^2 a_1 a_2$ jest niezależny od parametru t_0 . Porównując formuły równań (2.82) i (2.85) stwierdza się, że różnica ich wartości zmierza do zera, jeśli z jest małe oraz jest rzędu $0, 1/2\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2$, gdy $|z| \rightarrow 2$. Zostało zatem pokazane, że zmodyfikowana teoria cieczy Fermiego może zostać zastosowana w odniesieniu do układu posiadającego tetragonalną symetrię sieci i nieparaboliczne widmo wzbudzeń. Należy zaakcentować, że chociaż model jest izotropowy, to jednakże wszystkie właściwości układu wynikające z symetrii i kształtu widma wzbudzeń są zawarte w funkcji $\mathcal{K}(\xi_1, \varphi)$, reprezentującej skalarne pole gęstości stanów i istotnie modyfikującej własności izotropowego układu. Z drugiej strony, jeżeli rozważane zagadnienie jest niezależne od kąta φ , wtedy jedynie średnie własności symetrii sieci są uwzględniane. Postaci gęstości stanów określone równaniami (2.80) i (2.82) odpowiednio dla $t_1/t_0 = \pm 0.5$ i $t_1 = 0$ wykazują istnienie osobliwości jest typu logarytmicznego dla $t_1 = 0$ w $z = 0$ oraz dla $t_1/t_0 = \pm 0, 5$, gdy $z \rightarrow \mp 4$.

Rozdział 3

Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu s

3.1 Teoria typu BCS dla anizotropowego nadprzewodnika

Nadprzewodnictwo w teorii BCS pojawia się wtedy, kiedy do izotropowej cieczy Fermiego zostaje włączone oddziaływanie parujące. O potencjałach oddziaływań występujących w izotropowych układach cieczy Fermiego, tj. o potencjale oddziaływania fermicieczowego i o potencjale oddziaływania parującego zakłada się, że spełniają one żądanie inwariantności względem odwrócenia biegu czasu oraz względem obrotów przestrzeni. Wówczas każdy z potencjałów jest operatorem hermitowskim niezmienniczym względem obrotów.

Przedmiotem prezentowanych rozważań jest jednakże dowolny wieloelektronowy układ kwantowy przetransformowany do ortonormalnej przestrzeni pędów, dla którego potencjał oddziaływania dwucząstkowego, po wyeliminowaniu dodatkowych stopni swobody związanych z bozonami wirtualnymi pośredniczącymi w oddziaływaniach, jest wyrażony w efektywnej kwazicząstkowej postaci. Wówczas, wprowadzając operatory pola fermionów efektywny hamiltonian w formalizmie drugiego kwantowania ma postać

$$H = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \epsilon_{\alpha}(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p}, \alpha}^{\dagger} c_{\mathbf{p}, \alpha} + \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}^{eff}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}) c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}, \delta}^{\dagger} c_{\mathbf{p}', \gamma}^{\dagger} c_{\mathbf{p}'+\mathbf{q}, \beta} c_{\mathbf{p}, \alpha}, \quad (3.1)$$

gdzie $c_{\mathbf{p}, \alpha}^{\dagger}$ i $c_{\mathbf{p}, \alpha}$ są odpowiednimi operatorami kreacji i anihilacji fermionów oraz $\epsilon_{\alpha}(\mathbf{p})$ wyraża relację dyspersji tj. energię wzbudzeń pojedynczych cząstek (kwazicząstek) ze spinem α , która jest periodyczną funkcją $\mathbf{p}$. Postać funkcji $\epsilon_{\alpha}(\mathbf{p})$ powinna uwzględniać możliwie wszystkie elementy oddziaływań jednocząstkowych np. związane ze słabym polem elektromagnetycznym, średnim potencjałem domieszek, lub inne. Ponadto, $V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}^{eff}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})$ jest elementem macierzy transformacji Fouriera efektywnego potencjału dwucząstkowego oddziaływania, które uwzględnia wszystkie efekty wielociałowe oraz spełnia zasadę zachowania spinu. Aby objaśnić mechanizm oddziaływania kwazicząstek przyjmujemy, że dla wszystkich dwu- i trójwymiarowych układów części spinowe oddziaływania $V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}^{eff}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})$ mogą zostać wydzielone w następujący sposób [75, 74]

$$V_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}^{eff}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}) = \mathbf{R}^0 \tau_{\alpha, \delta}^0 \tau_{\beta, \gamma}^0 + \mathbf{R}^l \tau_{\alpha, \delta}^3 \tau_{\beta, \gamma}^3 + \mathbf{R}^t (\tau_{\alpha, \delta}^i \tau_{\beta, \gamma}^i - \tau_{\alpha, \delta}^3 \tau_{\beta, \gamma}^3) + \mathbf{G}^a (i \tau^2)_{\alpha, \beta} (\tau^2 i)_{\gamma, \delta} + \mathbf{G}^s (i \tau^2 \tau^i)_{\alpha, \beta} (\tau^i \tau^2 i)_{\gamma, \delta} + \mathbf{N}_{\alpha, \beta, \gamma, \delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q}), \quad (3.2)$$

gdzie τ^i są macierzami Pauliego a τ^0 jest macierzą jednostkową, $\mathbf{R}^{0,l,t} \equiv \mathbf{R}^{0,l,t}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ (gdzie $\mathbf{q} = 0$) definiują spinową wprost oraz spinowe wymienne poprzeczną i podłużną części amplitud

tudy rozpraszania, a $G^{a,s} \equiv G^{a,s}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ (gdzie $\mathbf{q} = -\mathbf{p} - \mathbf{p}'$) mogą być odpowiednio identyfikowane z antysymetrycznym (singletowym) i symetrycznym (tripletowym) oddziaływaniem parującym. Człon $N_{\alpha,\beta,\gamma,\delta}(\mathbf{p}, \mathbf{p}', \mathbf{q})$ odpowiada niekoherentnemu rozpraszaniu kwazicząstek i może być pominięty, gdyż rozważane rozpraszania dotyczą powierzchni (linii) Fermiego i jej najbliższych okolic. Podkreślimy, że stan sparowany może pojawić się w układzie jeśli oddziaływanie $G^{a,s}(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ zawiera przynajmniej jeden ujemny człon (parametr rozwinięcia) powodujący przyciąganie. Ponadto, jeżeli żaden kierunek orientacji spinów nie jest wyróżniony wówczas część spinowa wymienna oddziaływania jest izotropowa w przestrzeni spinów i $\mathbf{R}^l \equiv \mathbf{R}^t$. W rozważanych przypadkach tj. dwuwymiarowej i trójwymiarowej izotropowej przestrzeni pędów istniejąca niezmienniczość układu względem obrotów powoduje, że oddziaływania te można rozwinąć w szereg Fouriera ($d = 2$) lub szereg wielomianów Legendre'a ($d = 3$) [66, 91]. W przypadku potencjału oddziaływania parującego rozwinięcie go w szereg pozwala sklasyfikować typ sparowania zgodnie z symetrią funkcji falowej par Coopera, co oznacza, że jeżeli w otrzymanym rozwinięciu potencjału oddziaływania parującego istnieje dokładnie jedna harmonika z ujemnym parametrem to w układzie może zostać zrealizowane czyste sparowanie typu $s, d, \dots$. Taka klasyfikacja stanów sparowanych była dużym sukcesem teorii BCS. Jak można zauważyć rozwinięty formalizm pozwala na zastosowanie identycznej klasyfikacji stanów sparowanych w stosunku do złożonych układów anizotropowych, które w wyniku przeprowadzonych transformacji omówionych w podrozdziale 2.3 mogą być rozważane w przestrzeni izotropowej, w której uwzględnia się dodatkowo skalarne pole gęstości stanów, $\mathcal{K}'(p_1, \dots, p_d)$. W takich układach linie lub powierzchnie Fermiego są odpowiednio okręgami lub sferami, zatem przetransformowane oddziaływanie parujące jest określone w przestrzeni izotropowej i może zostać rozwinięte w szereg Fouriera lub szereg wielomianów Legendre'a, co zapewnia jednoznaczną identyfikację stanów sparowanych.

W przedstawionej procedurze postępowania zakłada się, że mechanizm nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w płaszczyznach miedziowo-tlenowych Cu-O wykonywany jako sparowanie Coopera fermionów (elektronów lub dziur) w wyniku wymiany wirtualnych bozonów (fononów, magnonów, plazmonów lub ekscytonów) w ramach jednego z następujących modeli: ciasnego wiązania, BCS, prawie swobodnych elektronów, Hubbarda, t-J lub jakiegoś innego. Aby móc badać tego typu układy, o których zakładamy, że reprezentują nadprzewodniki wysokotemperaturowe, stwierdzamy, że formalizm funkcji Greena stosowany dla nadprzewodników niskotemperaturowych może być także stosowany do tych układów po uwzględnieniu istniejących różnic. Dlatego definiując po kolei normalne funkcje Greena dla nieoddziałującego i oddziałującego układu, gdy relacja dyspersji jest postaci $\epsilon_\alpha(\mathbf{p})$ oraz anomalną funkcję Greena uwzględniając część $G^{a,s}$ oddziaływania (3.2) i funkcję energii jako macierze (2×2) można rozszerzyć warunki stosowalności formalizmu funkcji Greena [92, 93]. Relacja Bethego-Salpetera zapewnia konsekwentne uwzględnienie wszystkich wkładów oddziaływania metodą perturbacyjną, podczas gdy równanie Dysona umożliwia wyznaczenie funkcji Greena dla normalnego oddziałującego układu, zapewniając uwzględnienie efektów rozpraszania związanych z częścią $\mathbf{R}^{0,l,t}$ oddziaływania (3.2). Efekty te renormalizują relację dyspersji odnoszącą się do „gołych” cząstek poprzez operator masowy, przez co użyte parametry zostają zastąpione przez ich efektywne wartości, tak jak to ma miejsce w cieczy Fermiego, gdzie masa „gołych” cząstek m jest zastępowana masą efektywną m^* . Oczywiście, tę procedurę można pominąć, jeżeli założyć się, że efekty renormalizacyjne pochodzące od operatora masowego zostały już uwzględnione w zadanej i znanej formule widma wzbudzeń, $\epsilon_\alpha(\mathbf{p})$, lub są one nieistotnie małe.

Posługując się metodami funkcji Greena samozgodne równanie na szczylinę energetyczną,

które stanowi fundament badań układów sparowanych, jest otrzymywane w postaci

$$\Delta(\xi, \varphi, \vartheta) = \frac{2^{d-1}\pi}{4} \left\langle \int d\xi' \mathbf{G}^a(\xi, \varphi, \vartheta; \xi', \varphi', \vartheta') \mathcal{K}(\xi', \varphi', \vartheta') \frac{\Delta(\xi', \varphi', \vartheta')}{E(\xi', \varphi', \vartheta')} \tanh \frac{E(\xi', \varphi', \vartheta')}{2T} \right\rangle, \quad (3.3)$$

gdzie $\langle \dots \rangle$ oznacza średnią po kątach φ' i ϑ' dla przypadku trójwymiarowego i po kącie φ' dla przypadku dwuwymiarowego, wówczas należy konsekwentnie pominąć kąty ϑ i ϑ' w równaniu (3.3). $\mathbf{G}^a(\xi_1, \varphi, \vartheta; \xi', \varphi', \vartheta')$ jest singletowym oddziaływaniem parującym, o którym zakłada się najczęściej, że posiada separowalną strukturę, tj.

$$\mathbf{G}^a(\xi, \varphi, \vartheta; \xi', \varphi', \vartheta') = G(\xi, \varphi, \vartheta) \cdot G(\xi', \varphi', \vartheta') \quad (3.4)$$

i które można rozważać jako niezależne od ξ i ξ' w przypadku słabego wiązania lub, gdy zmienia się w sposób nieistotny w obszarze sparowania np. w wąskim paśmie przewodnictwa. Wówczas, dla czystego sparowania s , potencjał oddziaływania parującego $\mathbf{G}^a(0, \varphi, \vartheta; 0, \varphi', \vartheta')$ nie może zależeć od kątów i redukuje się do stałej oznaczanej najczęściej przez V . Stała V pomnożona przez stałą o wymiarze gęstości stanów staje się bezwymiarowym parametrem teorii, od którego zależy m. in. temperatura krytyczna. W teorii BCS, w której gęstość stanów jest stała i oznaczana jako $N(0)$, bezwymiarowym parametrem jest $\lambda = V N(0)$. Natomiast w przypadku, gdy gęstość stanów $N(\xi)$ zależy od energii cząstek i może posiadać osobliwości, wybór stałej o wymiarze gęstości stanów jest niejednoznaczny i może powodować, że ustalony bezwymiarowy parametr teorii będzie różny od λ . Energia wzbudzeń kwazicząstek

$$E(\xi, \varphi, \vartheta) = \left[\xi^2 + \Delta^2(\xi, \varphi, \vartheta) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.5)$$

i szczelina $\Delta(\xi, \varphi, \vartheta)$ zachowują symetrię harmoniki parującej. Całkowanie po ξ' jest zredukowane do obszaru występowania oddziaływania parującego. Ma to miejsce, gdy $|\xi'|$ jest większe od energii Debye'a, ω_D . Oddziaływanie to może być również odcinane przez granice pasma przewodnictwa w symetryczny lub niesymetryczny sposób, albo też istnieje inny mechanizm mikroskopowy, który ogranicza zasięg sparowania. Wszystkie anizotropowe własności układu wyjściowego są zawarte w funkcji $\mathcal{K}(\xi, \varphi, \vartheta)$. To powoduje, że problem znalezienia rozwiązania równania (3.3) dla wyższych harmonik parujących staje się trudniejszy w porównaniu z przypadkiem czystego sparowania s . Jeżeli zatem ograniczymy rozważania jedynie do czystego oddziaływania typu s oraz przyjmemy, że w oddziaływaniu tym można pominąć zależność od ξ i ξ' , wówczas Δ jest izotropowa i zależy jedynie od temperatury, a równanie (3.3) redukuje się do postaci

$$1 = \frac{2^{d-1}\pi}{4} V \int d\xi' \langle \mathcal{K}(\xi', \varphi', \vartheta') \rangle \frac{\tanh \frac{E(\xi')}{2T}}{E(\xi')}. \quad (3.6)$$

Ponieważ

$$2^{d-1}\pi \langle \mathcal{K}(\xi', \varphi', \vartheta') \rangle = N(\xi') \quad (3.7)$$

i $N(\xi)$ jest zwykłą gęstością stanów (równanie (2.68)) wnioskujemy stąd, że dla nadprzewodników z czystym sparowaniem s wpływ poszczególnych elementów symetrii układu wyjściowego zawartych w funkcji $\mathcal{K}$ na termodynamiczne własności układu jest znacząco ograniczony z powodu występowania w równaniu na szczelinę (3.6) jedynie uśrednionej wartości funkcji

$\mathcal{K}$ czyli gęstości stanów $N(\xi)$. A zatem, aby uwzględnić osobliwości Van Hove’a w rozważaniach dotyczących nadprzewodnictwa typu s , które może być realizowane zarówno w układach dwuwymiarowych jak i trójwymiarowych, wystarczy uwzględnić jedynie właściwą postać gęstości stanów $N(\xi)$, szczegółowo umówioną w pierwszym rozdziale, czyli zastosować standardowy scenariusz Van Hove’a. Zauważmy ponadto, że zupełnie odmienne układy o zdecydowanie różnej symetrii, w których jest realizowany czysty stan s , będą wykazywać zbliżone własności termodynamiczne gdy funkcje określające ich gęstości stanów mają zbliżony kształt.

3.2 Analiza gęstości stanów w modelu ciasnego wiązania

W podrozdziale 2.4.2, gdzie został rozważony dwuwymiarowy model ciasnego wiązania dla płaskiej, prostokątnej sieci, w którym uwzględniono przeskoiki do najbliższych i następnych najbliższych sąsiadów oraz przesunięcie potencjału chemicznego odzwierciedlające stopień zapelnienia pasma przewodnictwa, stwierdzono, że równania transformacji konforemnej oraz wynikające z transformacji funkcje skalarne pola gęstości stanów $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ i gęstości stanów $N(\xi)$ mogą być wyznaczone w formie analitycznej jedynie dla trzech szczególnych, dla których $t_1/t_0 = -0,5, 0$ lub $0,5$. Ponieważ model ciasnego wiązania jest powszechnie wykorzystywany w badaniach nadprzewodników wysokotemperaturowych wyznaczenie funkcji gęstości stanów i innych elementów transformacji dla wszystkich dozwolonych wartości t_1/t_0 i t_2/t_0 ma głębokie uzasadnienie, niemniej aby tego dokonać należy w finalnej części zastosować metody numeryczne.

W prezentowanych rozważaniach zostały wykorzystane relacje i oznaczenia wprowadzone w podrozdziale 2.4.2. Zatem energia wzbudzeń jednocząstkowych ma postać [83]

$$\xi(p_1, p_2) = -2t_0 [\cos(p_1 a_1) + \cos(p_2 a_2)] + 4t_1 \cos(p_1 a_1) \cdot \cos(p_2 a_2) - t_2, \quad (3.8)$$

gdzie parametry t_0 i t_1 odpowiadają przeskokom do węzłów najbliższych i kolejnych najbliższych sąsiadów. Parametr zapelnienia pasma t_2 wyraża przesunięcie poziomu Fermiego w przypadku domieszkowania i niesymetrycznego wypelnienia pasma i jest on identyfikowany z potencjałem chemicznym. Aby uprościć dalsze obliczenia przyjmuje się jak poprzednio, że

$$k_1 = p_1 a_1, \quad k_2 = p_2 a_2 \quad (3.9)$$

oraz wprowadza wygodne i używane w dalszych rozważaniach oznaczenia

$$\eta = \frac{2t_1}{t_0}, \quad \zeta = \frac{t_2}{2t_0}, \quad (3.10)$$

wówczas $z = \xi/2t_0 - \zeta$. W przypadku, gdy $\eta \neq 0$ i $|\eta| \ll 1$ równania (2.71) mogą zostać przepisane w postaci

$$Z = 2 - \frac{2}{1+x_1^2} - \frac{2}{1+x_2^2}, \quad \Phi = \frac{x_2}{x_1}, \quad (3.11)$$

gdzie

$$Z = z(1 - \eta) + \eta \left[1 - \frac{4f^2(2-z)^2}{z(1+f^2)^2 + 4f^2(2-z) + (1+f^2)\sqrt{(1-f^2)^2 z^2 + 16f^2}} \right]$$

$$\Phi = f + \eta f \ln \left\{ \frac{1}{f} \left[\frac{2(2-z)(f^2-1)}{z(1+f^2)^2 + 2(2-z) + \sqrt{(1-f^2)^2 z^2 + 16f^2}} \right] \right\} \quad (3.12)$$

Struktura równania (3.11) jest taka sama jak dla przypadku $\eta = 0$, ale teraz Z i Φ są funkcjami z i φ zależnymi od parametrów η i ζ . Pomimo tego, można formalnie rozwiązać równanie (3.11), wykorzystując wyniki otrzymane dla $\eta = 0$. Ponieważ dla $i = 1$ oraz $i = 2$

$$\begin{aligned}\frac{\partial k_i}{\partial \xi} &= \left(\frac{\partial k_i}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial z} + \frac{\partial k_i}{\partial \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right) \frac{1}{2t_0} \\ \frac{\partial k_i}{\partial \varphi} &= \left(\frac{\partial k_i}{\partial \Phi} \frac{\partial \Phi}{\partial f} + \frac{\partial k_i}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial f} \right) \frac{\partial f}{\partial \varphi},\end{aligned}\tag{3.13}$$

więc

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z}{\partial z} &= 1 + \eta \cdot f_1(z, f), & \frac{\partial Z}{\partial f} &= \eta \cdot f_2(z, f) \\ \frac{\partial \Phi}{\partial f} &= 1 + \eta \cdot f_3(z, f), & \frac{\partial \Phi}{\partial z} &= \eta \cdot f_4(z, f),\end{aligned}\tag{3.14}$$

gdzie $f_j(z, f)$ oznaczają pewne funkcje zależne od z i f , których jawne postacie nie są istotne dla dalszych wyliczeń prowadzonych metodą perturbacyjną. Wówczas, jacobian przekształcenia przyjmuje postać

$$\mathcal{J}(\xi, \varphi) = \frac{1}{2t_0 a_1 a_2} \begin{vmatrix} \frac{\partial k_1}{\partial \xi} & \frac{\partial k_1}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial k_2}{\partial \xi} & \frac{\partial k_2}{\partial \varphi} \end{vmatrix} \cdot \frac{df}{d\varphi} + O(\eta),\tag{3.15}$$

gdzie $O(\eta)$ oznacza pozostałe człony proporcjonalne do η i η^2 , które, jako perturbacyjne, a zatem znacznie mniejsze od głównego członu jacobianu mogą zostać zaniedbane. Po pewnych przekształceniach oraz uwzględniając relacje

$$k_1(z, \frac{\pi}{2} - \varphi) = k_2(z, \varphi) \quad \text{lub} \quad k_1(z, \frac{1}{f}) = k_2(z, f)\tag{3.16}$$

gęstość stanów można zapisać w postaci

$$N(\xi, \eta) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \int_0^1 \frac{1 + \Phi^2}{(1 + f^2) \sqrt{Z^2 (1 - \Phi)^2 + 16 \Phi^2}} df,\tag{3.17}$$

gdzie Z i Φ zostały zdefiniowane równaniem (3.12). Aby oszacować asymptotyczne zachowanie się funkcji gęstości stanów $N(\xi, \eta)$ w jej punktach osobliwości zostało nałożone ograniczenie, że $|z| \ll 1$, co narzuca warunek $|\eta| \ll 1$. Pominięcie małych członów zawierających z , redukuje równanie (3.12) do postaci

$$Z = z + \eta \left(\frac{1 - f}{1 + f} \right)^2, \quad \Phi = f.\tag{3.18}$$

Podstawiając równania (3.18) do równania (3.17) można zauważyć, że osobliwość w gęstości stanów pojawia się wyłącznie w przypadku $z = -\eta$ a właściwie przybliżona funkcja może być otrzymana z równania (3.17), w którym osobliwości są związane z dolną granicą całkowania, gdy $f \rightarrow 0$. Wszystko to prowadzi do oszacowania

$$N(\xi, \eta) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \cdot \ln \frac{8}{|z + \eta|}.\tag{3.19}$$

Zatem osobliwość typu logarytmicznego pojawia się w gęstości stanów otrzymywanej w dwuwymiarowym modelu ciasnego wiązania, gdy $\xi = -(4t_1 + t_2)$, co jest zgodne z innymi rezultatami [21].

Warto zaznaczyć, że poprawność otrzymanego wyniku, a więc i zastosowanej metody perturbacyjnej, została potwierdzona przez niezależne podejście analityczne i wyliczenia numeryczne zamieszczone w dalszej części. Należy wyjaśnić, że liniowe rozwinięcie równań (3.27) względem η prowadzi do niepoprawnego wyniku ponieważ osobliwość logarytmiczna nie uwzględnia wpływu dodatkowych członów pojawiających się dla niezerowego η i jest taka sama jak dla $\eta = 0$ (równanie (3.19)). Przedstawione podejście pokazuje, że gęstość stanów posiada osobliwość typu logarytmicznego w punkcie $\xi = -(4t_1 + t_2)$ dla $\eta \ll 1$, która jest bardzo wrażliwa na małe poprawki parametrów modelu. Z drugiej strony warto podkreślić, że w przypadku określonym równaniem (2.80) osobliwość logarytmiczna w gęstości stanów pojawia się dla $\eta = \pm 1$, gdy $|z|, 1$ i $z \rightarrow \mp 1$ i przybiera postać

$$N(\xi, \pm\eta) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 \pm z}} \ln \frac{64}{1 \pm z}. \quad (3.20)$$

Tak więc osobliwość logarytmiczna w gęstości stanów pojawia się także, gdy $\eta = \pm 1$, z czego można wnioskować, że pojawia się ona zawsze, gdy $\xi = -(4t_1 + t_2)$.

3.3 Aproksymacje funkcji i obliczenia numeryczne

W poprzedniej części zostały przedstawione rozważania dla η należącego do przedziału $-1 \leq \eta \leq 1$. Warunek ten wymusza ograniczenie na parametr z , co biorąc pod uwagę ekstremalne wartości energii ξ (3.8) prowadzi do relacji

$$-2 + \eta \leq z \leq 2 + \eta. \quad (3.21)$$

Aby otrzymać ogólną postać gęstości stanów $N(\xi, \eta)$ dla wszystkich wartości η rozważania należy rozpocząć od przekształcenia równania (3.8). Zauważmy, że jacobian wykonywanej transformacji dla dowolnych η może być znaleziony w następujący sposób: różniczkując obie strony równia (3.8) oraz

$$f = \frac{\tan \frac{k_2}{2} \left[\frac{\sin(k_2)}{\sin(k_1)} \right]^\eta}{\tan \frac{k_1}{2}}, \quad (3.22)$$

względem ξ i φ otrzymujemy układ równań, z którego można wyznaczyć pochodne cząstkowe $\partial k_i / \partial \xi$ i $\partial k_i / \partial \varphi$ ($i = 1$ lub 2 .) Podstawiając te wyrażenia do równania (2.7) otrzymujemy jacobian w następującej postaci

$$\mathcal{J} = (2t_0 f)^{-1} \left[\frac{\sin k_1}{\sin k_2} (1 - \eta \cos k_2)^2 + \frac{\sin k_2}{\sin k_1} (1 - \eta \cos k_1)^2 \right]^{-1} \cdot \frac{df}{d\varphi}. \quad (3.23)$$

Aby zastąpić k_1 i k_2 zmiennymi ξ i f w powyższych formułach należy wykorzystać równania (3.8) i (3.22). Wówczas, wprowadzając dodatkowe oznaczenia

$$v = \frac{x_2}{x_1} \quad q = \frac{1}{1 + x_1^2}, \quad (3.24)$$

można równanie (3.22) zapisać jako

$$f = v^{1-\eta} Q^\eta, \quad (3.25)$$

gdzie

$$Q = v^2 + q - v^2 q. \quad (3.26)$$

Biorąc pod uwagę, że

$$z = 2 - \frac{2}{1+x_1^2} - \frac{2}{1+x_2^2} + \eta \left[1 - \frac{2}{1+x_1^2} - \frac{2}{1+x_2^2} + \frac{4}{(1+x_1^2)(1+x_2^2)} \right],$$

i

$$\tan \varphi = \frac{x_2 \left(\frac{x_2}{1+x_2^2} \right)^{-\eta}}{x_1 \left(\frac{x_1}{1+x_1^2} \right)^{-\eta}}. \quad (3.27)$$

należy stwierdzić, że w rozważanym przypadku q stanowi rozwiązanie równania kwadratowego. Zmienna ta wyrażona poprzez v oraz parametry z i η jest postaci

$$q_{1,2} = 1 - \frac{4(1-\eta) + (1-v^2)(\eta+z) \pm \sqrt{(1-v^2)^2(\eta+2)^2 + 16v^2(1+z\eta)}}{4[1-\eta-v^2(1+\eta)]}. \quad (3.28)$$

Zgodnie z definicją q podana w równaniu (3.24) każda z postaci q może być rozwiązaniem o ile spełnia dodatkowy warunek

$$0 \leq q \leq 1, \quad (3.29)$$

który niemniej może być spełniony wyłącznie dla wartości v wziętych z przedziału $[0, 1]$, gdy parametry η i z są ustalone. Ponadto, nierówność wynikająca z (3.21) implikuje dalsze ograniczenia

$$(1-|\eta|)^2 \leq 1+z\eta \leq (1+|\eta|)^2, \quad 0 \leq 2 \pm (z-\eta) \leq 4, \quad -2(1-\eta) \leq z+\eta \leq 2(1+\eta), \quad (3.30)$$

które pozwalają nam oszacować $q_{1,2}$ następująco:

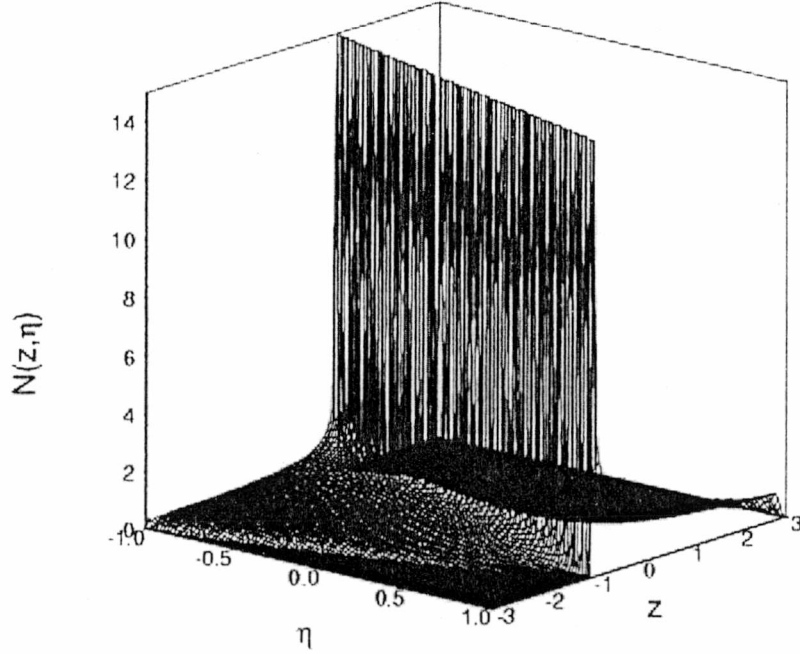
$$q_{1,2} = \frac{\pm|z+\eta| - (z+\eta)}{4(1-\eta)} \quad \text{gdy} \quad v = 0$$

oraz

$$q_{1,2} = \frac{1+\eta \pm \sqrt{1+z\eta}}{2\eta} \quad \text{gdy} \quad v = 1. \quad (3.31)$$

Stąd, jedynym rozwiązaniem spełniającym warunki (3.29) w odniesieniu do rozważanego przedziału η jest q_1 . Wykorzystując równania (3.24)–(3.28) oraz równania (2.71) można zastąpić w jakobianie (3.23) zmienne k_1 i k_2 przez f i v . Wówczas po pewnych przekształceniach gęstość stanów otrzymuje postać:

$$N(\xi, \eta) = \frac{2}{\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2} \times \int_0^1 \frac{Q(vf)^{-1} df}{[(1+\eta)(1-v^2) - 2\eta(Q-v^2)]^2 + \left[(1+\eta)(1-v^2) \frac{Q}{v} - 2\eta \left(\frac{Q}{v} - v \right) \right]^2} \quad (3.32)$$



Rysunek 3.1: Gęstość stanów otrzymana metodami numerycznymi w zależności od parametrów η i z w zredukowanych, bezwymiarowych jednostkach, gdzie $N(z, \eta)$ odpowiada wyrażeniu $N(z, \eta)/\pi^2 \hbar^2 t_0 a_1 a_2$

podczas gdy Q wyraża się następująco:

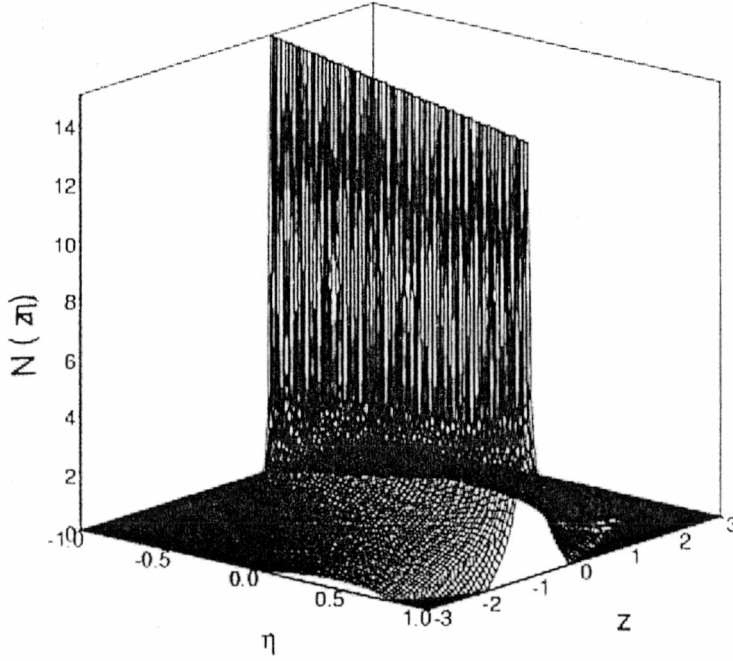
$$Q = \frac{2v^2}{(1 - \eta) - v^2(1 + \eta)} \times \quad (3.34)$$

$$\left[\frac{2(1 - v^2)(1 + z\eta)}{\sqrt{(1 - v^2)^2 (z - \eta)^2 + 16v^2(1 + z\eta)} + (z - \eta)(1 - v^2)} - \eta \right]. \quad (3.35)$$

Aby wyznaczyć gęstość stanów $N(\xi, z)$ określoną równaniem (3.32) stosując metody numeryczne należy rozwiązać równanie (3.25) uwzględniając równanie (3.34) oraz wyznaczyć v jako funkcję f dla ogólnych wartości z i ξ pamiętając, że f przyjmuje wartości od 0 do 1. Natomiast, podstawiając $f = f(v; z, \eta)$ do równań (3.31) i (3.32) można wyliczyć całki, a w konsekwencji wykreślić funkcję $N(z, \eta) \equiv N(\xi, \eta)$ (rysunek 3.1). Ponadto opierając się na równaniach (3.32) i (3.34) można wyznaczyć asymptotyczną postać gęstości stanów dla danych wartości z i η spełniających warunek $|z + \eta| \ll 1$. Jeżeli założyć, że $z + \eta = 0$ we wszystkich singularnych przypadkach, funkcja Q redukuje się do postaci

$$Q = v \frac{\sqrt{1 + \eta} + v\sqrt{1 - \eta}}{\sqrt{1 - \eta} + v\sqrt{1 + \eta}}. \quad (3.36)$$

Zauważmy, że podczas gdy osobliwości gęstości stanów w równaniu (3.32) są związane z całkowaniem wewnątrz obszaru f ($f \ll 1$), można ograniczyć rozważania równania (3.25) do



Rysunek 3.2: Gęstość stanów określona przybliżeniem funkcji logarytmicznej przedstawionej w zredukowanych, bezwymiarowych jednostkach, gdzie $N(z, \eta)$ odpowiada wyrażeniu $N(z, \eta)/\pi^2 t_0 a_1 a_2$

przypadku małych v , które spełniają warunek $v \ll \sqrt{1 - |\eta|}$. Tak więc otrzymujemy

$$\frac{Q}{v} = \sqrt{\frac{1+\eta}{1-\eta}} \quad \text{gd}y \quad z + \eta = 0 \quad (3.37)$$

i

$$\frac{Q}{v^2} = \frac{2}{1-\eta} \cdot \left[\frac{2(1-\eta^2)}{\sqrt{(z+\eta)^2 + 16v^2(1-\eta^2)} + (z+\eta)} - \eta \right] \quad \text{gd}y \quad z + \eta \neq 0. \quad (3.38)$$

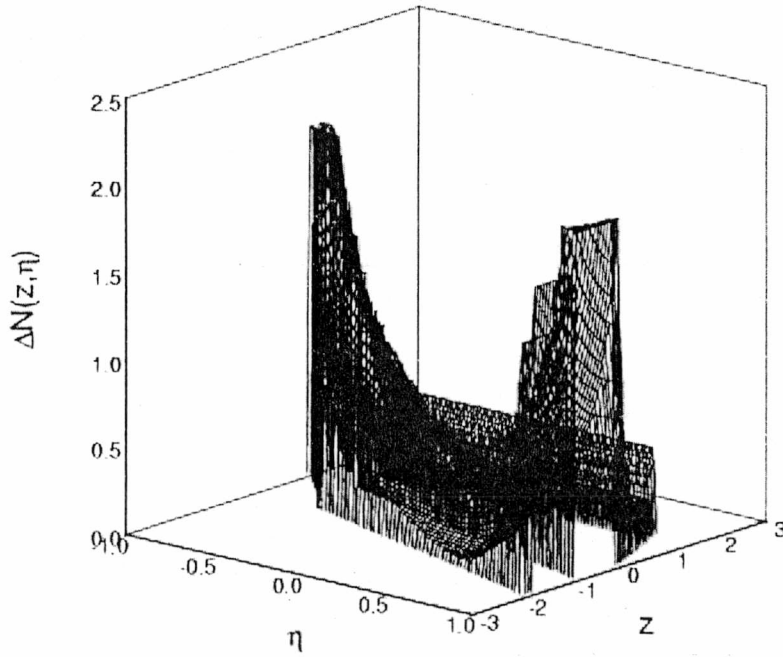
Stosując konsekwentnie założenia, że $z + \eta = 0$ we wszystkich nieosobliwych częściach wyrażenia podcałkowego równania (3.32) i zastępując

$$f = v \left(\frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^{\frac{\eta}{2}}, \quad (3.39)$$

funkcja gęstości stanów (3.32) w przypadku, gdy $|z + \eta| \ll 1$, redukuje się do postaci

$$N(z, \eta) = \frac{1}{\pi^2 t_0 a_1 a_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} \ln \frac{8(1-\eta)^{\frac{1+\eta}{2}} (1+\eta)^{\frac{1-\eta}{2}}}{|z + \eta|}. \quad (3.40)$$

Należy zatem stwierdzić, że osobliwość logarytmiczna pojawia się w gęstości stanów zawsze, gdy $\xi = -(4t_1 + t_2)$, a gęstość stanów ma tylko jedną osobliwość dla danego $\eta = 2t_1/t_0$. Jednakże użyte przybliżenie zapewnia poprawność otrzymanej formuły jedynie w bliskiej okolicy



Rysunek 3.3: Różnica pomiędzy dokładną (wyznaczoną numerycznie) i przybliżoną analitycznie postaciami funkcji gęstości stanów w zredukowanych, bezwymiarowych jednostkach, gdzie $\Delta N(z, \eta)$ odpowiada wyrażeniu $\Delta N(z, \eta)/\pi^2 t_0 a_1 a_2$

osobliwości ponieważ z dala od nich otrzymana formuła przyjmuje nawet wartości ujemne, gdy $\eta \rightarrow \pm 1$. Na rysunku 3.2 została przedstawiona postać przybliżonej funkcji gęstości stanów określonej równaniem (3.40). W obszarach, gdzie funkcja ta przyjmuje wartości ujemne położono jej wartość równą 0. Na rysunku 3.3 przedstawiono dodatkowo różnicę pomiędzy funkcjami gęstości stanów obliczonymi numerycznie i jej analitycznym przybliżeniem w interesującym dla nas obszarze w pobliżu osobliwości.

3.4 Własności nadprzewodnika ze sparowaniem s dla zamodelowanych postaci gęstości stanów

3.4.1 Wprowadzenie

W przypadku nadprzewodnika, w którym pary Coopera znajdują się czystym stanie s , a szczelina energetyczna (parametr porządku) jest izotropowa, równanie na szczelinę energetyczną otrzymane w rozszerzonym scenariuszu Van Hove'a redukuje się do postaci (3.6) odpowiadającej zwykłemu scenariuszowi Van Hove'a. Dlatego, gdy można pominąć zależność od energii izotropowego potencjału oddziaływania parującego, do wyznaczenia własności termodynamicznych s sparowanego nadprzewodnika wysokotemperaturowego wystarczy jedynie znajomość postaci gęstości stanów $N(\xi)$. Przedstawione poniżej rozważania dotyczą wyznaczania zależności izotropowej szczeliny energetycznej od temperatury dla zamodelowanych postaci gęstości stanów. Ponieważ zasadniczym elementem scenariusza Van Hove'a w badaniach nadprzewodników wysokotemperaturowych jest istnienie tzw. osobliwości Van Hove'a w funkcji gęstości stanów $N(\xi)$, rozważane postaci gęstości stanów zostały zamodelowane poprzez dodanie do stałej gęstości stanów $N(0)$ pewnych funkcji zmiennej ξ definiujących wąskie piki lub osobliwości. Użyte funkcje, które reprezentują trzy szczególne formy osobliwości w gęstości stanów tj. lorentzowską, trójkątną i logarytmiczną, zostały wybrane zgodnie ze standardowo rozważanymi postaciami gęstości stanów omówionymi w rozdziale pierwszym. Dołączone funkcje są traktowane jako fluktuacje gęstości stanów, których obecność może powodować zarówno wzrost jak i obniżenie temperatury krytycznej.

3.4.2 Formalizm

W celu wyznaczenia własności termodynamicznych nadprzewodnika z izotropową szczeliną energetyczną wykorzystuje się scenariusz Van Hove'a, gdzie w równaniach całkowych po wykonaniu całkowania po kątach skalarne pole gęstości stanów redukuje się do gęstości stanów $N(\xi)$, a pozostałe wyrażenia podcałkowe zależą wyłącznie od ξ . Nie wnikając w naturę uwzględnianych fluktuacji można przyjąć, że zmodyfikowana, w stosunku do modelu BCS, gęstości stanów jest postaci

$$N(\xi, \text{parametry}) = N(0) [1 + \text{fluktuacje}] = N(0) J(\xi, \text{parametry}), \quad (3.41)$$

a „parametry” skalują dołączone funkcje. W przeprowadzonych badaniach zostały wykorzystane trzy standardowo rozważane typy fluktuacji, tj. pików i osobliwości, które mogą być dodatnie lub ujemne.

- Gęstość stanów z fluktuacjami typu Lorentza:

$$J(\xi, B, R, x, n) = 1 + \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{1 + \left(\frac{\xi - R_i}{B_i}\right)^2} \quad (3.42)$$

Powyższe formuła stanowi superpozycję n pików typu Lorentza nałożonych na stałą funkcję. Taka postać gęstości stanów została wprowadzona przez Mitrovića i Carbotte [18, 19] dla międzymetalicznych związków typu A15. Jej postać pozwoliła na rozważenie wpływu poszczególnych parametrów fluktuacji na zmianę temperatury krytycznej i skoku ciepła właściwego [83].

- Gęstość stanów z fluktuacjami typu trójkąta:

$$J(\xi, B, R, x, n) = 1 + \sum_{i=1}^n x_i \left(1 - \frac{|\xi - R_i|}{B_i} \right) \Theta \left(1 - \frac{|\xi - R_i|}{B_i} \right) \quad (3.43)$$

W tym przypadku gęstość stanów posiada n trójkątnych pików.

- Gęstość stanów z fluktuacjami typu logarytmicznego:

$$J(\xi, B, R, x, n) = 1 + \sum_{i=1}^n x_i \ln \frac{B_i}{|\xi - R_i|} \Theta \left(1 - \frac{|\xi - R_i|}{B_i} \right), \quad (3.44)$$

gdzie B , R i x oznaczają n -wymiarowe wektory o współrzędnych B_i , R_i i x_i , odpowiednio. Ta ostatnia postać fluktuacji stanowi przybliżoną formę gęstości stanów (2.86) otrzymaną w modelu ciasnego wiązania dla układu dwuwymiarowego i jest najczęściej wykorzystywana w badaniach teoretycznych.

Parametry użyte we wzorach zostały tak zdefiniowane, że parametr x_i wyraża wysokość fluktuacji lorentzowskich lub trójkątnych oraz ma wpływ na tempo wzrostu fluktuacji logarytmicznej. Gdy x_i ma wartość ujemną następuje zmniejszenie obsadzenia odpowiednich stanów energetycznych i mogą pojawić się szczeliny. B_i jest identyfikowane z połówką szerokością zaburzenia stałej gęstości stanów fluktuacją, R_i oznacza przesunięcie pików fluktuacji względem poziomu Fermiego oraz n jest liczbą uwzględnianych fluktuacji danego typu i wynosi od jednego do kilkunastu. O wszystkich fluktuacjach zakłada się, że są rozlokowane w pobliżu lub na poziomie Fermiego, oraz że ich połówkowa szerokość jest bardzo mała w porównaniu z (zasięgiem sparowania), energią Debye'a ω_D . Oznacza to, że R_i , $B_i \ll \omega_D$. Ponadto zakłada się, że rozważane fluktuacje są na tyle małe, że ich obecność nie wpływa na zachowanie średniej liczby cząstek dla dowolnych temperatur, gdyż

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n x_i \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{1}{1 + \left(\frac{\xi - R_i}{B_i} \right)^2} &= \pi \sum_{i=1}^n x_i B_i, \\ \sum_{i=1}^n x_i \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \left(1 - \frac{|\xi - R_i|}{B_i} \right) \Theta \left(1 - \frac{|\xi - R_i|}{B_i} \right) &= \sum_{i=1}^n x_i B_i, \\ \sum_{i=1}^n x_i \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \ln \frac{B_i}{|\xi - R_i|} \Theta \left(1 - \frac{|\xi - R_i|}{B_i} \right) &= 2 \sum_{i=1}^n x_i B_i, \end{aligned} \quad (3.45)$$

oraz

$$\int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi N(\xi, B, R, x, n) = N(0) \left(2\omega_D + \sum_{i=1}^n \varrho_{f,i} x_i B_i \right) \simeq 2N(0) \omega_D = N. \quad (3.46)$$

Aby uwzględnić, że występujące fluktuacje mogą być różnego typu, czynnik $\varrho_{f,i} = \pi, 1, 2$ został przyporządkowany poszczególnym fluktuacjom $i = 1, \dots, n$, a f oznacza kolejno fluktuacje lorentzowskie, trójkątne i logarytmiczne. A zatem, gdy $x_i B_i \ll \omega_D$ średnia liczba cząstek zachowuje się, co powoduje, że w rozważanym modelu potencjał chemiczny może być traktowany jako stały, $\mu = \epsilon_F$.

Punktem wyjścia dla dalszych rozważań jest równanie na szczelinę występujące w scenariuszu Van Hove'a, które może być traktowane jako uogólnione równanie na szczelinę typu BCS

$$1 = \frac{\lambda}{2} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} J(\xi, B, R, x, n) \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}, \quad (3.47)$$

gdzie $\lambda = N(0)g_0$ oznacza bezwymiarowy parametr stałego oddziaływania parującego. Symetryczna forma pozostałych funkcji podcałkowych oraz granic całkowania w równaniu na szczelinę (3.47) pozwalają zszytyzować funkcję gęstości stanów względem poziomu Fermiego. Wówczas funkcja

$$I(\xi) = \frac{1}{2} [J(\xi, B, R, x, n) + J(-\xi, B, R, x, n)] \quad (3.48)$$

opisuje rozkład fluktuacji gęstości stanów całkowicie symetryczny względem poziomu Fermiego, a równanie na szczelinę zostać przepisane w postaci

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T} + \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} [I(\xi, B, R, x, n) - 1] \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}, \quad (3.49)$$

gdzie na ogół w przekształconych całkach granice całkowania mogą zostać rozciągnięte do nieskończoności. Wprowadzając oznaczenia

$$u = \frac{\xi}{2T}, \quad \tau = \frac{\Delta(T)}{2T}, \quad r = \frac{R}{2T}, \quad b = \frac{B}{2\Delta_0(0)}, \quad (3.50)$$

gdzie odmienna od pozostałych definicja parametru b zapewnia mu stałą wartość w jednostkach bezwymiarowych, oraz całkując równanie na szczelinę (3.47) przez części można sprowadzić je do postaci

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln \left(\frac{2\omega_D}{\Delta(T)} \right) - \int_0^{\infty} du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \\ &\times \frac{\partial}{\partial u} \left[I \left(u, b, r, x, n, \frac{T}{\Delta_0(0)} \right) \tanh \sqrt{u^2 + \tau^2} \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

lub

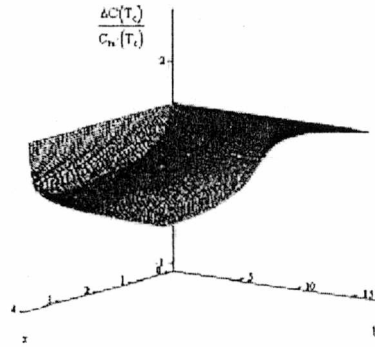
$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln \left(\frac{\omega_D}{T} \right) - \int_0^{\infty} du \ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) \\ &\times \frac{\partial}{\partial u} \left[I \left(u, b, r, x, n, \frac{T}{\Delta_0(0)} \right) \tanh \sqrt{u^2 + \tau^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.52)$$

W wszystkich dalszych obliczeniach przyjmuje się, że gdy u dąży do granic przedziału całkowania, ($|u| \rightarrow \frac{\omega_D}{2T}$), spełnione są następujące warunki

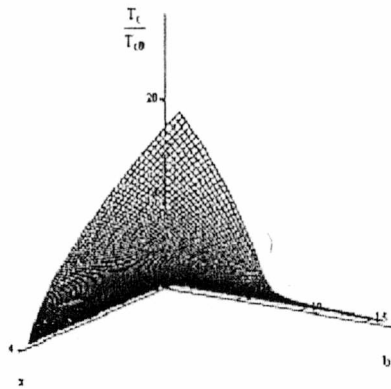
$$I \left(u, b, r, x, n, \frac{T}{\Delta_0(0)} \right) = 1 \quad \text{oraz} \quad \frac{\partial I}{\partial u} = 0, \quad (3.53)$$

co jest spójne z warunkami nałożonymi na fluktuacje gęstości stanów. Po dokonaniu zamiany zmiennych w równaniach (3.51) i (3.52) pojawia się nowy parametr $\frac{T}{\Delta(0)}$, który może modyfikować udział poszczególnych fluktuacji zwłaszcza w obszarze niskich temperatur. Zakładając, że fluktuacje mają bardzo małą szerokość połówkową B_i , która zapewnia, że funkcje podcałkowe w obszarze istnienia danej fluktuacji są prawie stałe, a zatem równe wartościom przyjmowanym dla $\xi = R_i$, równanie (3.51) dla $T = 0$ ($\tau = \infty$) oraz równanie (3.52) dla $T = T_c$ ($\tau = 0$) można zredukować odpowiednio do postaci

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{2\omega_D}{\Delta(0)} + \sum_{i=1}^n \frac{\varrho_{f,i} x_i B_i}{\sqrt{R_i^2 + \Delta^2(0)}} \quad (3.54)$$



Rysunek 3.4: Wartość skoku ciepła właściwego przy przejściu układu od fazy nadprzewodzącej do fazy normalnej w $T = T_c$ w zależności od parametrów b i x fluktuacji typu Lorentza. Dla ustalonego x wartość skoku wzrasta od wartości BCS ($= 1,43$), osiąga maksimum i staje się malejącą funkcją b dążąc znowu do wartości BCS, [83].



Rysunek 3.5: Wzrost temperatury krytycznej w odniesieniu do modelu BCS w zależności od parametrów b i x fluktuacji typu Lorentza.

oraz

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{\omega_D}{2T_c} + \sum_{i=1}^n \frac{\varrho_{f,i} x_i B_i}{R_i} \tanh \frac{R_i}{2T_c} - \int_0^\infty du \ln u \cosh^{-2} u, \quad (3.55)$$

gdzie ostatnia całka jest równa $-\ln(4e^{-\gamma}/\pi)$, a $\gamma = 0,577$ jest stałą Eulera. Porównanie powyższych wyników z wynikami otrzymanymi w przypadku braku fluktuacji $\varrho_{f,i} = 0$, co odpowiada modelowi BCS, prowadzi do następujących relacji

$$\begin{aligned} \Delta(0) &= \Delta_0(0) \prod_{i=1}^n \exp \left(\varrho_{f,i} \frac{x_i B_i}{\sqrt{R_i^2 + \Delta_0^2(0)}} \right) \\ T_c &= T_{c0} \prod_{i=1}^n \exp \left[\varrho_{f,i} \frac{x_i B_i}{R_i} \tanh \left(\frac{R_i}{2T_c} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.56)$$

gdzie, aby nie przewyższać dokładności zastosowanego podejścia przy wyznaczaniu $\Delta(0)$ i T_c metodą perturbacyjną, należy ograniczyć się do pierwszego przybliżenia i położyć po prawej stronie równań $\Delta(0) = \Delta_0(0)$ i $T_c = T_{c0}$. Dzieląc obustronnie równania (3.56) można oszacować współczynnik

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_1 &= \frac{2\Delta(0)}{T_c} \\ &= 2\pi e^{-\gamma} \prod_{i=1}^n \exp \left[\varrho_{f,i} x_i B_i \left(\frac{1}{\sqrt{R_i^2 + \Delta_0^2(0)}} - \frac{1}{R_i} \tanh \frac{R_i}{2T_{c0}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.57)$$

gdzie $\Delta_0(0)/T_{c0} = \pi e^{-\gamma} = 1,76$. Wartość współczynnika $\mathcal{R}_1$ jest podwyższana lub obniżana przez poszczególne fluktuacje w zależności od znaku parametru x_i , który determinuje fluktuację jako dodatnią lub ujemną i od znaku wyrażenia

$$\frac{1}{\sqrt{R_i^2 + \Delta_0^2(0)}} - \frac{1}{R_i} \tanh \frac{R_i}{2T_{c0}}. \quad (3.58)$$

Oszacowanie wyrażenia (3.58) pozwala stwierdzić, że

- gdy $R_i \ll \Delta_0(0), T_{c0}$ redukuje się ono do postaci

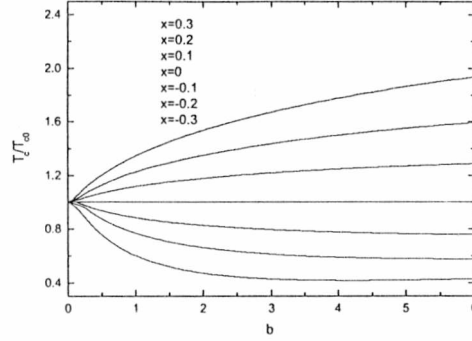
$$\begin{aligned} &\frac{1}{\Delta_0(0)} \left\{ \left(1 - \frac{\Delta_0(0)}{2T_{c0}} \right) - \frac{R_i^2}{6\Delta_0^2(0)} \left[3 - 2 \left(\frac{\Delta_0(0)}{2T_{c0}} \right)^2 \right] \right\} \\ &= \frac{1}{\Delta_0(0)} \left[0,12 - 0,24 \left(\frac{R_i}{\Delta_0(0)} \right)^2 \right] > 0, \end{aligned}$$

która zapewnia, że jest ono dodatnie,

- gdy $R_i \gg \Delta_0(0), T_{c0}$ funkcja $\tanh \left(\frac{R_i}{2T_{c0}} \right) \approx 1$, a wyrażenie (3.58) redukuje się do postaci

$$-\frac{1}{2} \left(\frac{\Delta_0(0)}{R_i} \right)^2 < 0$$

i staje się ujemne,



Rysunek 3.6: Zmiany wartości temperatury krytycznej od szerokości połówkowej fluktuacji typu Lorentza dla $r = 0$ i wybranych wartości parametru x .

- a dla $R_i = 1,76 T_{c0}$ jego wartość jest równa zero.

Zatem zarówno fluktuacje dodatnie rozlokowane blisko poziomu Fermiego jak i fluktuacje ujemne położone dostatecznie daleko od poziomu Fermiego wpływają na wzrost współczynnika $\mathcal{R}_1$. W przypadku istnienia wyłącznie fluktuacji dodatnich fluktuacje położone dostatecznie daleko od poziomu Fermiego będą obniżały wartość współczynnika $\mathcal{R}_1$. Gdy fluktuacje są skupione wyłącznie na poziomie Fermiego i w jego najbliższym sąsiedztwie tj., gdy $R_i \ll \Delta_0(0)$, T_{c0} , wówczas współczynnik $\mathcal{R}_1$ ograniczony do liniowych wyrazów rozwinięcia jest postaci

$$\mathcal{R}_1 = 3,52 \prod_{i=1}^n \exp \left(0,12 \varrho f, i x_i \frac{B_i}{\Delta_0(0)} \right) \quad (3.59)$$

i nie zależy od R_i . Natomiast wzrost parametru B_i , szerokości połówkowej fluktuacji powoduje wzrost współczynnika $\mathcal{R}_1$.

W dalszych obliczeniach ze względów rachunkowych wygodnie jest wprowadzić oznaczenia

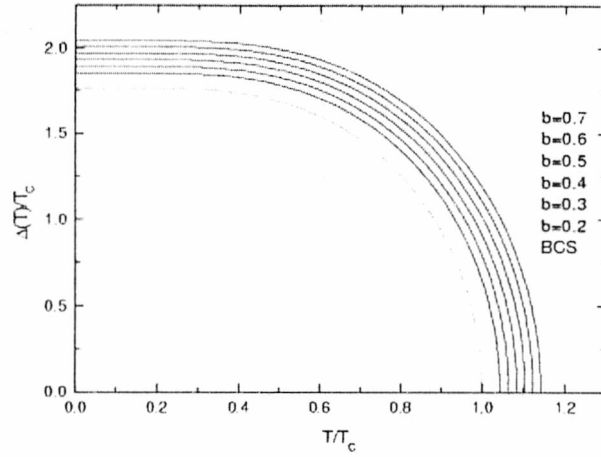
$$X(\tau) = \pi e^{-c} \frac{T}{\Delta_0(0)} = \frac{T}{T_{c0}}, \quad Y(\tau) = \pi e^{-c} \frac{\Delta(T)}{\Delta_0(0)} = \frac{\Delta(T)}{T_{c0}}, \quad (3.60)$$

gdzie parametr $\tau = \frac{\Delta(T)}{2T}$ może się zmieniać od zera do nieskończoności.

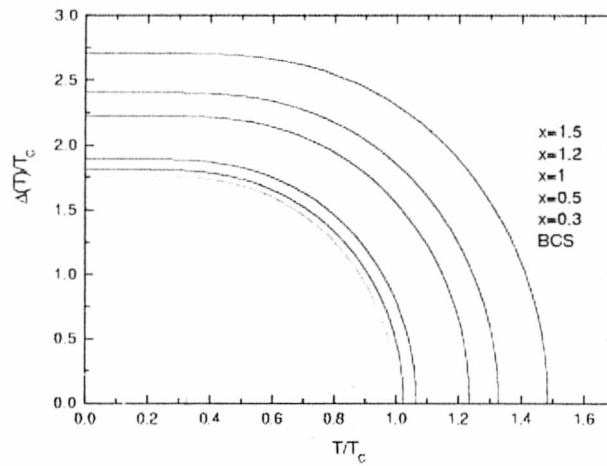
3.4.3 Efekty obecności fluktuacji w gęstości stanów

Fluktuacje lorentzowskie

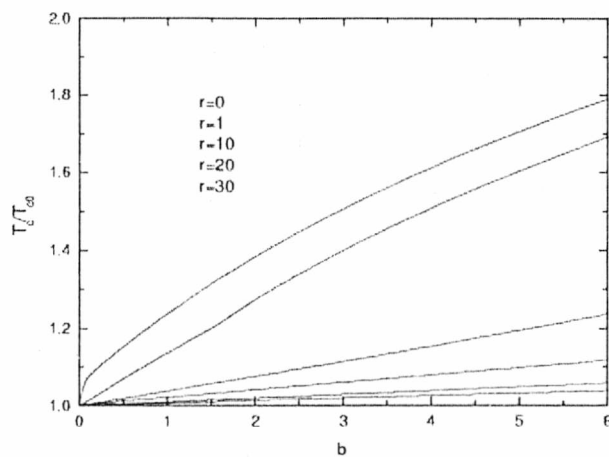
Równania na szczelinę zapisane w postaci (3.55) oraz (3.60) stają się użyteczne w procedurze numerycznej pozwalającej wyznaczyć zależność szczeliny energetycznej od temperatury. Rozważa-



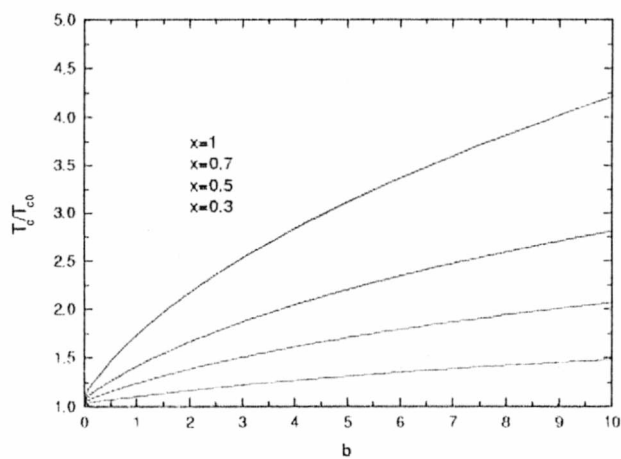
Rysunek 3.7: Szczelina energetyczna w zależności od temperatury dla wybranych parametrów modelu (fluktuacje trójkątne). Wysokość fluktuacji x jest stała i $x = 0,5$. Fluktuacja jest zlokalizowana na poziomie Fermiego, $r = 0$. Parametr b przybiera od góry wartości: 0.6; 0.5; 0.5; 0.3; 0.2. Krzywa kropkowana odpowiada krzywej BCS



Rysunek 3.8: Szczelina energetyczna w zależności od temperatury dla wybranych parametrów modelu (fluktuacje trójkątne). Szerokość podstawy trójkąta jest stała $b = 0,3$. Fluktuacja jest zlokalizowana na poziomie Fermiego, $r = 0$. Parametr x przybiera od góry wartości: 1.5; 1.2; 1; 0.5; 0.3. Krzywa kropkowana odpowiada krzywej BCS



Rysunek 3.9: Zmiany temperatury krytycznej w zależności od szerokości fluktuacji (fluktuacje trójkątne). Wysokość trójkąta jest stała $x = 0,5$. Parametr r od góry przyjmuje wartości: 0; 1; 10; 20; 30.



Rysunek 3.10: Zmiany temperatury krytycznej w zależności od szerokości fluktuacji (fluktuacje trójkątne). Fluktuacja jest zlokalizowana na poziomie Fermiego, $r = 0$. Parametr x od góry przyjmuje wartości: 1; 0.7; 0.5; 0.3

jąc postać fluktuacji (3.42) można określić następujący układ równań parametrycznych

$$Y(\tau) = \pi e^{-c} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} du \ln \left[(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \right\} \\ \times \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \left[\left(1 + \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{1 + \left(\frac{u-r_i}{b_i} \right)^2 \left(\frac{T}{\Delta_0(0)} \right)^2} \right) \tanh \sqrt{u^2 + \tau^2} \right] \right\}, \quad (3.61)$$

gdzie

$$X(\tau) = \frac{Y(\tau)}{2\tau}. \quad (3.62)$$

Otrzymane równania (3.61) i (3.62) np. przy zastosowaniu metody perturbacyjnej pozwalają wyznaczyć postać szczeliny energetycznej w zależności od temperatury. Aby określić zmiany temperatury krytycznej T_c i współczynnika $\mathcal{R}_1 = 2\Delta_0(0)/T_c$ bezpośrednio z równań (3.61) i (3.62), co pozwala uniknąć ograniczeń nakładanych na parametry B_i , należy oszacować wartość $X(\tau)$ w granicy $\tau \rightarrow 0$ ($\Delta(T) \rightarrow 0$) oraz wartość $Y(\tau)$ w granicy $\tau \rightarrow \infty$ ($T \rightarrow 0$). W wykonanych badaniach numerycznych skoncentrowano się głównie na przypadku istnienia w gęstości stanów pojedynczego lorentzowskiego pik. Wówczas temperaturę krytyczną można wyznaczyć z następującego układu równań [83]

$$t = \frac{1}{4} \exp \left\{ - \int_0^{\infty} du \ln(u) \frac{\partial}{\partial u} \left[\left(1 + \frac{x}{1 + \left(\frac{u}{b} \right)^2 t^2} \right) \tanh(u) \right] \right\} \quad (3.63)$$

gdzie

$$t = t(x, \frac{b}{t}) = \frac{T_c}{\Delta_0(0)} \quad (3.64)$$

Aby rozwiązać numerycznie otrzymany układ równań wygodnie jest podstawić $c = b/t$, wówczas

$$t = t(x, c) \quad \text{ i } \quad b = ct(x, c). \quad (3.65)$$

Na rysunku 3.4 pokazano, że temperatura krytyczna T_c jest wzrastającą funkcją b i x oraz $T_c/T_{c0} > 1$ jeśli $x > 0$. Jednakże należy pamiętać, że parametry te muszą spełniać warunek $bx \ll \omega_D/2\Delta_0(0)$.

Aby wyznaczyć skok ciepła właściwego przy przejściu układu od stanu nadprzewodzącego do stanu normalnego w $T = T_c$ wykorzystuje się formułę [72, 85]

$$\Delta C(T_c) = -2N(0) \lim_{T \rightarrow T_c} \Delta(T) \frac{\partial \Delta(T)}{\partial T} \quad (3.66)$$

Ponadto, gdy $T \rightarrow T_c$ i $\Delta(T) \rightarrow 0$ z równania (3.52) można otrzymać

$$- \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \int_0^{\infty} du \left[1 + \frac{x}{1 + \left(\frac{u}{b} \right)^2 \left(\frac{T_c}{\Delta(0)} \right)^2} \right] \frac{d}{du} \tanh(u) \\ = \frac{\Delta^2(T)}{8T_c^2} \int_0^{\infty} \frac{du}{u} \left[1 + \frac{x}{1 + \left(\frac{u}{b} \right)^2 \left(\frac{T_c}{\Delta(0)} \right)^2} \right] \frac{d}{du} \left[\frac{\tanh(u)}{u} \right]. \quad (3.67)$$

Różniczkując obie strony równania (3.67) po temperaturze T oraz kładąc $T = T_c$ ($\Delta(T_c) = 0$) i podstawiając do równania (3.66) otrzymuje się formułę na współczynnik $\mathcal{R}_2$ określający skok ciepła właściwego

$$\mathcal{R}_2 = \frac{\Delta C(T_c)}{C_n(T_c)} = -\frac{12}{\pi^2} \cdot \frac{\int_0^\infty du \left[1 + \frac{x}{1 + \left(\frac{u}{b}\right)^2 t^2} \right] \frac{d}{du} \tanh(u)}{\int_0^\infty \frac{du}{u} \left[1 + \frac{x}{1 + \left(\frac{u}{b}\right)^2 t^2} \right] \frac{d}{du} \left[\frac{\tanh(u)}{u} \right]}, \quad (3.68)$$

gdzie zostało także uwzględnione, że ciepło właściwe w fazie normalnej jest postaci

$$C_n(T) = \frac{2}{3} \pi^2 N(0) T. \quad (3.69)$$

Wyznaczenie numeryczne skoku ciepła właściwego wymaga posłużenia się rezultatami otrzymanymi dla temperatury krytycznej. Odpowiedni rezultat został przedstawiony na rysunku 3.5. Należy podkreślić, że dla ustalonego x i odpowiednio dużych b wartość skoku ciepła właściwego dąży do wartości 1,43 uzyskiwanej w modelu BCS, która jest także otrzymywana dla $x = 0$ lub gdy $b \rightarrow 0$.

Fluktuacje trójkątne

W celu porównania wpływu fluktuacji opisanych różnymi funkcjami badania numeryczne dotyczące wyznaczania szczeliny energetycznej i temperatury krytycznej zostały powtórzone dla dwóch pozostałych wyszczególnionych form zamodelowanej gęstości stanów. Jeżeli gęstość stanów określona równaniem (3.43)) zawierającą jedną fluktuację o kształcie trójkątnym zostanie wprowadzona do równania (3.51), wówczas poprzez parametryzację prowadzącą do równania (3.50) otrzymuje się podobnie jak poprzednio

(i)

$$\begin{aligned} Y(\tau) = & \pi e^{-c} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} du \ln \left[(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \right\} \\ & \times \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \left[x \left(1 + \frac{|u-r|}{b} \frac{T}{\Delta(0)} \right) \Theta \left(1 - \frac{|u-r|}{b} \frac{T}{\Delta(0)} \right) \right. \right. \\ & \times \left. \left. \tanh \sqrt{u^2 + \tau^2} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.70)$$

(ii)

$$X(\tau) = \frac{Y(\tau)}{2\tau}$$

Zachowanie się układu, w którym występują fluktuacje o kształcie trójkątnym jest podobne jak w przypadku fluktuacji lorentzowskiej.

Fluktuacje logarytmiczne

Postępując analogicznie jak w poprzednich przypadkach, po podstawieniu logarytmicznej postaci gęstości stanów (3.44) zawierającej jedną fluktuację logarytmiczną do równania (3.51) oraz po wprowadzeniu parametryzacji (3.50) równania pozwalające wyznaczyć zależność szczeliny energetycznej od temperatury przyjmują teraz postać:

(i)

$$\begin{aligned}
 Y(\tau) = & \pi e^{-c} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} du \ln \left[(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \right\} \\
 & \times \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \left[\left(1 + x \ln \left(\frac{b}{(u-r) \frac{T}{\Delta(0)}} \right) \right) \Theta \left(1 - \frac{|u-r|}{b} \frac{T}{\Delta(0)} \right) \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \tanh \sqrt{u^2 + \tau^2} \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

(ii)

$$X(\tau) = \frac{Y(\tau)}{2\tau}$$

Na zamieszczonych rysunkach pokazano przykładowe zmiany postaci szczeliny energetycznej jako funkcji temperatury w zależności od charakterystyki uwzględnionej fluktuacji. Przeskalowana szczelina energetyczna ma kształt zbliżony do krzywej BCS. Istnienie fluktuacji dodatniej w pobliżu poziomu Fermiego zwiększa wartość współczynnika $\mathcal{R}_1$. Chociaż porównanie wyników otrzymanych dla fluktuacji lorenzowskiej, trójkątnej i logarytmicznej przy tak samo dobranych parametrach x , b i r pozwala zauważyć drobne odstępstwa, to jednakże należy stwierdzić, że otrzymane wyniki wykazują zgodne tendencje przy dostrzegalnych różnicach ilościowych. Jest to zrozumiałe, gdyż wkłady poszczególnych fluktuacji do równania na szczelinę są różne, co znajduje swój wyraz w różnych wartościach współczynnika $\varrho_{f,i}$. W przypadku oddalania się fluktuacji od poziomu Fermiego następuje zmniejszenie jej wpływu na zmianę własności układu. Przeskalowana szczelina energetyczna zachowuje kształt zbliżony do krzywej BCS, a obecność fluktuacji dodatniej w pobliżu poziomu Fermiego zwiększa wartość współczynnika $\mathcal{R}_1$. Wykonane zestawienie własności termodynamicznych układu nadprzewodzącego dla trzech wybranych typów fluktuacji potwierdza słuszność scenariusza Van Hove'a, w którym obecność fluktuacji (osobliwości lub piku), a nie jej matematyczny opis, kształtuje odmiennie w porównaniu z modelem BCS własności układu.

3.4.4 Nieosiągalność nadprzewodnictwa

Chociaż obecność dodatnich fluktuacji gęstości stanów powoduje wzrost temperatury krytycznej, to fluktuacje ujemne przyczyniają się do jej obniżenia. Dlatego obecność różnych fluktuacji (dodatnich $x_i > 0$ i ujemnych $x_i < 0$) może prowadzić do nieosiągania stanu nadprzewodzącego,

co ma związek z nieograniczonym zmniejszaniem się temperatury krytycznej przy niekorzystnym kształcie gęstości stanów. Ponieważ gęstość stanów w równaniu na szczelinę może zostać zastąpiona przez jej zsymetryzowaną postać (3.48) nie zmniejszając ogólności rozważań można przyjąć, że fluktuacje gęstości stanów są rozłożone symetrycznie względem powierzchni Fermiego. Wówczas mogą być one aproksymowane superpozycją fluktuacji typu Lorentza umieszczonych na poziomie Fermiego, dla których $R_i \equiv 0$. Warunek ten zapewnia wymaganą symetrię gęstości stanów, a wybór pozostałych parametrów tj. wysokości x_i i szerokości połówkowej B_i umożliwia nadanie gęstości stanów określonego kształtu. W prezentowanych rozważaniach zakłada się, że gęstość stanów zawiera n fluktuacji lorentzowskich z $R_i = 0$. Kładąc w równaniu (3.49) $T = T_c$ oraz wykorzystując formułę

$$\tanh(u) = 2u \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 + u^2}, \quad (3.72)$$

po wykonaniu pierwszej całki i wykorzystaniu oznaczeń

$$t = \frac{T}{\Delta_0(0)}, \quad t_0 = \frac{T_{c0}}{\Delta_0(0)} = \pi e^{-\gamma}$$

otrzymuje się równanie

$$\begin{aligned} \ln \frac{t}{t_0} &= \sum_{i=1}^n \frac{2x_i b_i^2}{t^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{b_i}{t}\right)^2 - \pi^2 \left(k + \frac{1}{2}\right)^2} \\ &\times \int_0^{\infty} \left[\frac{1}{\pi^2 \left(k + \frac{1}{2}\right)^2 + u^2} - \frac{1}{\left(\frac{b_i}{t}\right)^2 + u^2} \right] du, \end{aligned} \quad (3.73)$$

które po wykonaniu całek redukuje się do postaci

$$\ln \frac{t}{t_0} = \sum_{i=0}^n x_i \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{k + \frac{1}{2}} - \frac{1}{k + \frac{1}{2} + \frac{b_i}{\pi t}} \right). \quad (3.74)$$

Otrzymane równanie można zapisać

$$\ln \frac{t}{t_0} = \sum_{i=0}^n x_i \left[\Psi \left(\frac{1}{2} + \frac{b_i}{\pi t} \right) - \Psi \left(\frac{1}{2} \right) \right], \quad (3.75)$$

gdzie

$$\Psi(z) = \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z) \quad (3.76)$$

jest funkcją *psi* Eulera tzw. *digamma* oraz

$$\Psi \left(\frac{1}{2} \pm m \right) = -\gamma - 2 \ln 2 + 2 \sum_{k=1}^m \frac{1}{2k - 1}. \quad (3.77)$$

Ponieważ w rozważanym przypadku chcemy wykazać, że istnienie ujemnych fluktuacji może powodować znaczne obniżenie temperatury krytycznej, można zatem przyjąć, że $t_c \ll B_i$ lub $t \ll b_i$. Funkcja $\Psi(z)$ dla dużych z ($z = 1/2 + b_i/\pi t$) daje się przedstawić w następującej formie

$$\Psi(z) = \ln z - \frac{1}{2z} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k}}{2k z^{2k}} \quad (3.78)$$

gdzie B_k są liczbami Brenoulliego oraz $B_2 = \frac{1}{6}$, $B_4 = -\frac{1}{30}$, co po uwzględnieniu (3.77), oraz że $t \rightarrow 0$, pozwala zredukować równanie (3.74) do postaci

$$\ln \frac{t}{t_0} = \sum_{i=0}^n x_i \left[\ln 4e^\gamma + \ln \frac{b_i}{\pi t} - \frac{1}{12} \left(\frac{\pi t}{b_i} \right)^2 - \dots \right], \quad (3.79)$$

z której po uwzględnieniu wprowadzonych oznaczeń i pominięciu wyrazów rzędu t^2 i dalszych otrzymuje się następujące równanie

$$\left(1 + \sum_{i=1}^n x_i \right) \ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \sum_{i=1}^n x_i \left(\ln \frac{B_i}{T_{c0}} + \ln \frac{2e^\gamma}{\pi} \right). \quad (3.80)$$

Szukanie rozwiązań równania (3.80) pokazuje, że dla pewnych zbiorów odpowiednio dobranych parametrów x_i i B_i , których istnieje wiele, temperatura krytyczna T_c może stać się nawet o kilka rzędów mniejsza od T_{c0} . Dla przykładu rozważmy sytuację, gdy $n = 1$ i założymy, że $T_c \sim 10^{-3} T_{c0}$ oraz $B_1 \sim 10 T_{c0}$, wtedy równanie (3.80) jest spełnione dla $x_1 = -0,74$. Ta fluktuacja odpowiada znacznemu bo prawie czterokrotnemu obniżeniu gęstości stanów w dość szerokim obszarze wokół poziomu Fermiego, co można identyfikować z pseudoszczeliną. Uwzględnienie większej liczby fluktuacji oraz ich przemieszczenia względem poziomu Fermiego będzie prowadzić do rozpatrywania postaci gęstości stanów zbliżonych do wyznaczanych eksperymentalnie. A zatem pewne niekorzystne fluktuacje gęstości stanów wywołane np. domieszkowaniem mogą prowadzić do nieosiągnięcia przez dany związek stanu nadprzewodnictwa, lub jego zaniku przy zmianie składu stechiometrycznego związku. Wydają się możliwe także sytuacje odwrotne, w których np. użycie ciśnienia spowoduje wzrost i przemieszczanie się fluktuacji w wyniku czego temperatura krytyczna zostanie podniesiona do wartości mierzalnych.

3.4.5 Własności szczeliny energetycznej dla $T \rightarrow T_c$ i $T \rightarrow 0$

Dla zsymetryzowanej funkcji gęstości stanów równanie na szczelinę energetyczną (3.47) można zapisać w postaci

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} I(\xi) \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T}. \quad (3.81)$$

W przypadku, gdy $T \rightarrow T_c$ oraz $T = T_c$ równanie (3.81) redukuje się do postaci

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln \frac{\omega_D}{2T} - \int_0^{\frac{\omega_D}{2T_c}} du \ln(u) \frac{d}{du} [I(uT) \tanh(u)] \\ &+ \frac{\Delta(T)^2}{8T_c} \int_0^{\frac{\omega_D}{2T_c}} \frac{du}{u} I(uT_c) \frac{d}{du} \left(\frac{\tanh(u)}{u} \right) \end{aligned} \quad (3.82)$$

oraz

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{\omega_D}{2T_c} - \int_0^{\frac{\omega_D}{2T_c}} du \ln(u) \frac{d}{du} [I(uT_c) \tanh(u)], \quad (3.83)$$

gdzie zgodnie z przyjętymi warunkami dla dużych wartości ξ $I(\xi) = 1$ oraz $dI(\xi)/d\xi = 0$, Eliminując λ i rozwijając $I(uT)$ w szereg potęgowy

$$I(uT) = I(uT_c + u(T - T_c)) = I(uT_c) + \frac{u}{T_c} (T - T_c) \frac{d}{du} I(uT_c) + \dots \quad (3.84)$$

po wykonaniu przekształceń algebraicznych wyrażenie na szczelinę energetyczną, gdy $T \rightarrow T_c$, przyjmuje postać

$$\Delta(T) = 2T_c \left[\frac{-2 \int_0^\infty du I(uT_c) \frac{d}{du} \tanh(u)}{\int_0^\infty \frac{du}{u} I(uT_c) \frac{d}{du} \left(\frac{\tanh(u)}{u} \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, \quad (3.85)$$

która dla $J(uT_c) = 1$ staje się dobrze znaną formułą BCS

$$\Delta(T) = T_c \sqrt{\frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)} \quad (3.86)$$

Równanie (3.85) dowodzi, że gęstość stanów zawierająca fluktuacje nie zmienia pierwiastkowej, otrzymywanej w modelu BCS, zależności funkcji $\Delta(T)$ od temperatury w pobliżu T_c . Rezultat ten w pełni potwierdza przedstawione wyniki numeryczne. Potwierdzają to również wyniki eksperymentalne oraz inne oszacowania analityczne. Z kolei oszacowania wykonane w obszarze niskich temperatur dla $T \rightarrow 0$ pozwalają otrzymać następującą formułę

$$\Delta(T) = \Delta(0) - \sqrt{2\pi T \Delta(0)} \cdot e^{-\frac{\Delta(0)}{T}} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dx I\left(x \sqrt{2\pi T \Delta(0)}\right) e^{-x^2}, \quad (3.87)$$

która potwierdza, że szczelina energetyczna gdy $T \rightarrow 0$, wykazuje niezauważalną w sensie numerycznym zależność od temperatury czyli tzw. plateau. Fakt ten potwierdza zgodność otrzymanych rezultatów z trzecią zasadą termodynamiki, gdyż ciepło właściwe, które w stanie nadprzewodzącym jest proporcjonalne do pochodnej szczeliny energetycznej po temperaturze, dąży do zera [86, 85, 88, 87]. Kształt funkcji e^{-x^2} zapewnia szybką zbieżność całki, a fakt, że argument $x \sqrt{2\pi T \Delta(0)}$ jest mały gdy $T \rightarrow 0$, powoduje, że wyłącznie fluktuacje zlokalizowane na poziomie Fermiego mogą modyfikować formułę (3.87) w stosunku do wartości BCS.

3.5 Wnioski

Wprowadzenie fluktuacji do gęstości stanów zmienia wartość temperatury krytycznej oraz kształt funkcji $\Delta(T)$. Rozwinięte podejście pozwala rozważać nie tylko dodanie fluktuacje zwiększające temperaturę krytyczną, ale również fluktuacje ujemne ($x < 0$) odpowiadające zmniejszeniu w obszarze fluktuacji gęstości stanów, które powodują spadek temperatury krytycznej i odpowiednio rozmieszczone mogą spowodować obniżenie T_c do zera, czyli zanik nadprzewodnictwa. Wszystkie typy fluktuacji zmieniają w podobny sposób wartość współczynnika $\mathcal{R}_1 = 2\Delta(0)/T_c$, który dla jednej dodatniej fluktuacji ulokowanej się na poziomie Fermiego zawsze wzrasta. Szczelina energetyczna dla temperatur bliskich zera posiada obszar „plateau”, w którym w niewielkim stopniu zależy od temperatury i bardzo powoli zbliża się do granicznej wartości $\Delta(0)$. Otrzymane rezultaty numeryczne są więc zgodne z oszacowaniami uzyskanymi z równań (3.56). Numeryczny obszar plateau występuje jednak dla stosunkowo niewielkiego zakresu temperatur, a wyznaczony kształt szczeliny energetycznej jest zbliżony do przeskalowanej postaci szczeliny otrzymywanej w modelu BCS. Chociaż małe fluktuacje zmieniają zauważalnie wartość temperatury krytycznej, mają znacznie mniejszy wpływ na zmianę wartości współczynnika $\mathcal{R}_1$. Obliczenia numeryczne pozwalają wyznaczać wartości temperatury krytycznej T_c dla

fluktuacji o większych szerokościach połówkowych. Maksymalna wartość temperatury krytycznej jest osiągana dla fluktuacji o ustalonym kształcie, gdy jest ona zlokalizowana dokładnie na poziomie Fermiego.

W przeprowadzonych rozważaniach zostały zaprezentowane metody pozwalające na numeryczne wyznaczanie postaci szczeliny energetycznej jako funkcji temperatury oraz wartości temperatury krytycznej dla układu nadprzewodzącego ze sparowaniem s przy uwzględnieniu zamodelowanych form gęstości stanów. Ponadto zostały zaproponowane metody szacowania temperatury krytycznej i współczynnika $\mathcal{R}_1$ oraz wyznaczono analitycznie kształt szczeliny energetycznej dla obszarów niskich i podkrytycznych temperatur. Rezultaty otrzymane dla $T \rightarrow T_c$ są zgodne z danymi eksperymentalnymi, gdyż nie zaobserwowano w tym obszarze zmiany kształtu szczeliny energetycznej.

Zasadniczym założeniem modelu jest przyjęcie, że zmiana całkowitej liczby cząstek wynikająca z uwzględnienia fluktuacji gęstości stanów może być pominięta w ramach stosowanego modelu. Zachowanie całkowitej liczby cząstek pociąga za sobą stałość potencjału chemicznego. Model ten zgodnie z zaprezentowanym rozszerzonym scenariuszem Van Hove'a może stanowić opis nadprzewodnika wysokotemperaturowego, a otrzymane wyniki znajdują potwierdzenie eksperymentalne. I tak zostało potwierdzone, że jeżeli środek (maksimum) fluktuacji pokrywa się z poziomem Fermiego wzrost wartości temperatury krytycznej jest największy. Poprzez odpowiedni dobór parametrów fluktuacji można dopasować kształt szczeliny energetycznej do postaci szczeliny energetycznej wyznaczanych eksperymentalnie. Ponadto wzrost temperatury krytycznej zależy także od rozmiaru fluktuacji. Największy wzrost temperatury krytycznej został otrzymany dla fluktuacji typu logarytmicznego odpowiadającej dwuwymiarowemu punktowi siodłowemu według klasyfikacji Van Hove'a. Wszystkie rozważane modyfikacje gęstości stanów zmieniają wartość współczynnika $\mathcal{R}_1$, przy czym dla ustalonych parametrów x , B i R logarytmy wyznaczonych temperatur krytycznych mają się jak $\pi : 2 : 1$. Model oparty na mechanizmie BCS z uwzględnieniem pojedynczej fluktuacji był wykorzystywany do wyjaśnienia relatywnie wysokiego wzrostu temperatury krytycznej w Nb_3Sn i PbMo_6S_8 [94]. Ważnym efektem rozważanego modelu jest możliwość nieograniczonego obniżania temperatury krytycznej T_c przy uwzględnieniu ujemnych fluktuacji, co może prowadzić do zupełnego zaniku nadprzewodnictwa. Efekt ten może tłumaczyć dlaczego niektóre metale jak np. Cu nie są nadprzewodnikami, a stają podstawowym elementem nadprzewodnictwa w związkach z tlenem, lub dlaczego pewne pierwiastki jak Bi, Ce, Te, Y, Ge, Sb, Se, Ba, Cs, P i Si, czy też związki organiczne jakimi są kwazi-jednowymiarowe sole Bechgaarda mogą przechodzić w stan nadprzewodzący dopiero po, wpływie ciśnień średnich rzędu 10kbarów lub wysokich przekraczających 100kbarów. Także związki nadprzewodzące z grupy nadprzewodników wysokotemperaturowych mogą pod wpływem ciśnienia uzyskiwać wyższą temperaturę przejścia jak np. $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$, którego temperatura krytyczna wzrasta od 135K do 150K dla 150kbarów. Wydaje się, że we wszystkich tych przypadkach następuje przemieszczenie się i wzrost fluktuacji gęstości stanów.

Wprowadzone parametry fluktuacji dają się powiązać z pewnymi wielkościami ustalonymi w eksperymentach. Parametr x wysokości fluktuacji jest wiązany z koncentracją domieszki. Parametr B , który określa szerokość połówkową piku lub osobliwości, odpowiada połowie szerokości osobliwości obserwowanej w eksperymentach. Ponadto parametr $R \neq 0$ określający odległość dodatniej fluktuacji od poziomu Fermiego stanowi tzw. pseudoszczelinę, gdyż w przypadku istnienia wyraźnego piku w gęstości stanów znajdującego się powyżej poziomu Fermiego, obszar pomiędzy poziomem Fermiego a tą fluktuacją jest znacznie mniej dostępny dla cząstek niż obszar zajmowany przez fluktuację. Dlatego pomiędzy poziomem Fermiego a fluktuacją powstaje pseudoszczelina o szerokości R .

Rozdział 4

Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu d

4.1 Formalizm

W podrozdziale 1.2.4 stwierdziliśmy, w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych funkcje falowe par Coopera powinny być singletowe, czyli uwzględniające, że całkowity spin pary Coopera jest równy zero, z czego wynika, że parametr porządku musi być parzystą funkcją pędu i posiadać symetrię stanu singletowego s , d , itd., lub być mieszaniną takich stanów. Ponieważ wyniki eksperymentów tunelowych na związkach nadprzewodzących wskazują zarówno na istnienie par Coopera o symetrii funkcji falowej s jak i d [56, 57, 58, 59, 62], w teoretycznych badaniach nadprzewodników wysokotemperaturowych należy dopuścić możliwość sparowania typu d . W tego typu badaniach opartych na scenariuszu Van Hove'a rozważa się nadprzewodniki wysokotemperaturowe z anizotropową szczeliną jako funkcją domieszkowania i porównuje otrzymane rezultaty z danymi eksperymentalnymi dla wybranych rodzin nadmiernie domieszkowanych *overdoped* próbek np. $\text{Ti}_2\text{Ba}_2\text{CuO}_{6+\delta}$ i $\text{Y}_{0,8}\text{Ca}_{0,2}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [25]. Pomimo, że przebadane dwuwymiarowe układy wykazują dobrą zgodność z wynikami użytego modelu teoretycznego, to jednakże istnieją pewne przyczyny tkwiące w zastosowanym podejściu utrudniające to porównanie. Natomiast, omówione w poprzednich rozdziałach, opracowane niezależne podejście i stanowiące rozszerzenie scenariusza Van Hove'a dla układów z innym niż czystym s sparowaniem, pozwala na subtelniejsze porównanie takich układów.

W ramach opracowanego formalizmu zostały wyznaczone własności termodynamiczne dwuwymiarowego układu w stanie d w modelu ciasnego wiązania, gdzie domieszkowanie jest reprezentowane przez przemieszczenie poziomu Fermiego, do oznaczenia czego użyto parametru t_2 . Ponieważ w dalszych rozważaniach używa się głównie bezwymiarowego parametru $\zeta = t_2/2t_0$, podkreślimy, że przypadek $\zeta > 0$ odpowiada efektowi nadmiernego domieszkowania *overdoped*, gdy natomiast przypadek $\zeta < 0$ odnosi się do materiałów niedodomieszkowanych *underdoped* i wymaga ostrożności w postępowaniu, gdyż mogą pojawić się wówczas fluktuacje magnetyczne.

Opracowany formalizm pozwala przenieść rozważania z dwuwymiarowej przestrzeni pędów do także dwuwymiarowej przestrzeni $[\xi, \varphi]$, w której uwzględnia się dodatkowo skalarne pole gęstości stanów, którego dokładna postać została wyznaczona i przeanalizowana w poprzednim rozdziale. Podkreślimy raz jeszcze, że do rozważań zagadnienia dotyczącego układu, w którym pary Coopera znajdują się w stanie d , nie wystarcza jedynie znajomość postaci tradycyjnej gęstości stanów zależnej tylko od energii. Wymagana jest znajomość funkcji $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ definiująca pole gęstości stanów w dwuwymiarowej przestrzeni $[\xi, \varphi]$, gdyż funkcja $N(\xi)$ definiująca gęstość

stanów wyraża jej średnią wartość w jednowymiarowej przestrzeni $[\xi]$.

$$N(\xi) = \int_0^{2\pi} \mathcal{K}(\xi, \varphi) d\varphi, \quad (4.1)$$

z czego wynika, że $N(\xi)$, jako wartość uśredniona funkcji $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$ równoważnej jacobianowi transformacji, zawiera znacznie mniej informacji o układzie niż funkcja $\mathcal{K}(\xi, \varphi)$. Dlatego mamy prawo twierdzić, że scenariusz Van Hove'a dla wszystkich innych układów niż układy z czystym s sparowaniem musi uwzględniać skalarne pole gęstości stanów a nie jedynie gęstość stanów.

Rozpocznijmy prezentację szczegółowych rozważań od pewnych ogólnych formuł. Wykorzystanie odpowiednio zaadoptowanego formalizmu funkcji Greena zawierającego normalne i anomalne funkcje Matsubary-Greena dla układów ze sparowaniem pozwala w oparciu o całkiem ogólną samozgodną procedurę i równanie Dysona wyznaczyć standardową postać równania na szczelinę. Ponieważ równanie to jest wyrażone we współrzędnych pędowych dowolnej anizotropowej przestrzeni, w której widmo wzbudzeń elementarnych ma, w ogólności, nieparaboliczną postać zakładamy, że stosując odpowiednią transformację konforemną lub złożenie takich transformacji możemy przetransformować otrzymane równanie na szczelinę do innej ortonormalnej przestrzeni pędów z paraboliczną, lub liniową w okolicy powierzchni Fermiego, relacją dyspersji. Dokonując transformacji obu układów należy uwzględnić, że chociaż transformacje przekształcające pędy jednej przestrzeni w pędy drugiej przestrzeni mogą być opisane złożonymi funkcjami, to jednakże pędy równe 0 i odpowiadające im energie wzbudzeń w obu przestrzeniach muszą być sobie równe. Ponadto, na mocy twierdzenia Luttingera energię lub pęd Fermiego w drugiej przestrzeni pędów należy wyznaczyć z warunku, że liczby kwazicząstek są zachowane. Wówczas wprowadzając jacobian takiego przekształcenia w formie diagonalnej macierzy jacobianów, $\hat{\mathbf{J}}(\mathbf{q})$, co pozwala uwzględnić w równaniu na szczelinę różnicę stanów cząstek ze spinem w górę i spinem w dół spowodowaną np. obecnością pola magnetycznego, równanie na szczelinę energetyczną otrzymuje postać

$$\hat{\Delta}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{q}'} \hat{\mathbf{G}}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \hat{\mathbf{J}}(\mathbf{q}') \frac{\tanh\left(\frac{1}{2T} \sqrt{[\hat{\xi}(\mathbf{q}')]^2 + \hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{q}')\hat{\Delta}(\mathbf{q}')}\right)}{\sqrt{[\hat{\xi}(\mathbf{q}')]^2 + \hat{\Delta}^\dagger(\mathbf{q}')\hat{\Delta}(\mathbf{q}')}} \hat{\Delta}(\mathbf{q}'). \quad (4.2)$$

Aby uprościć dalsze rozważania zakłada się pełną symetrię stanów spinowych cząstek, a współrzędne q_1 i q_2 zostają zastąpione przez współrzędne ξ i φ biegunowego układu współrzędnych. Ponadto, wprowadza się ograniczenie na potencjał oddziaływania parującego, zgodnie z którym potencjał ten rozwinięty w szereg Fouriera względem funkcji $\cos[l(\varphi - \varphi')]$, gdzie l jest liczbą naturalną, posiada tylko jeden dla $l = 2$ ujemny, odpowiedzialny za przyciąganie, element $-g_2(\xi, \xi')$, będący symetryczną i dającą się rozseparować funkcją ξ i ξ' , tj.

$$g_2(\xi, \xi') = g(\xi) g(\xi'). \quad (4.3)$$

Funkcja ta jest stała w modelu BCS i może być traktowana jako stała, w innych modelach gdy jest funkcją wolnozmienną i zmienia się w zanedbywalny sposób w obszarze istnienia sparowania. Wówczas funkcja szczeliny energetycznej, wyrażona we współrzędnych ξ i φ , ma być postaci

$$\begin{aligned} \hat{\Delta} &= \Delta(T) D(\xi, \varphi) i\tau^2 \\ D(\xi, \varphi) &= d_1(\xi) \cos(2\varphi) + d_2(\xi) \sin(2\varphi) \end{aligned} \quad (4.4)$$

gdzie $d_{1,2}(\xi) = |d_{1,2}(\xi)| \exp(i\theta_{1,2}(\xi))$ są zespolonymi współczynnikami spełniającymi warunek normalizacji

$$|d_1(\xi)|^2 + |d_2(\xi)|^2 = 2. \quad (4.5)$$

W przypadku, gdy można przyjąć, że $g_2(\xi, \xi') = \text{const}$, współczynniki $d_{1,2}$ są niezależne od ξ , a więc takie same jak dla $\xi = 0$. To założenie pozwala przepisać równanie (4.2) w postaci

$$D(0, \varphi) = \frac{\lambda_2}{2\pi m^*} \left\langle \cos 2(\varphi - \varphi') D(0, \varphi') \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi J(\xi, \varphi') \frac{\tanh \left(\frac{1}{2T} \sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} |D(0, \varphi')|^2 \right)}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} |D(0, \varphi')|^2} \right\rangle \quad (4.6)$$

gdzie $\lambda_2 = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} g_2$ jest bezwymiarowym parametrem oddziaływania parującego,

$$\langle \dots \rangle = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{2\pi} \dots$$

oraz sumowanie po przestrzeni $\mathbf{q}$ zostało zgodnie z zasadami rozwiniętego podejścia zastąpione całkowaniem po ξ i φ .

4.2 Przypadek temperatur podkrytycznych

Ponieważ istotne informacje o układzie uzyskuje się z pomiarów eksperymentalnych prowadzonych w okolicy przejść fazowych przeprowadzone badania zostały skoncentrowane na obszarze temperatur podkrytycznych tj., gdy $T_c - T \ll T_c$. Podstawiając jawną postać $D(0, \varphi)$ do równania na szczelinę (4.6) otrzymuje się równanie:

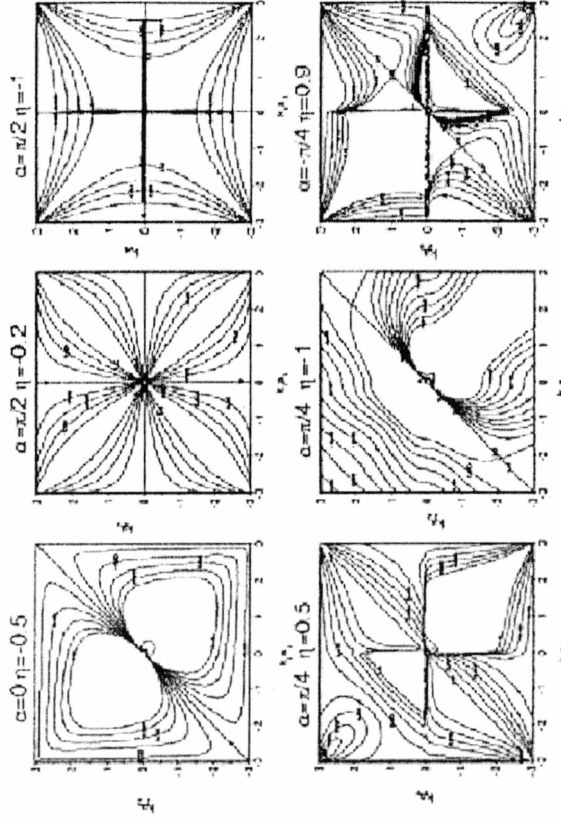
$$\begin{aligned} \frac{m^* t_0 a_1 a_2}{\Lambda \lambda_2} d_{1,2} &= d_{1,2} \left\{ \ln \frac{\omega_D}{2T} [\Gamma(\omega_D) - \frac{1}{2} \Pi(\omega_D)] \right. \\ &- \int_0^\infty du \ln u \frac{d}{du} \left(\tanh u [\Gamma(2T_c u) - \frac{1}{2} \Pi(2T_c u)] \right) \\ &+ \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \int_0^\infty du \ln u \frac{d}{du} \left(u \tanh u \frac{d}{du} [\Gamma(2T_c u) - \frac{1}{2} \Pi(2T_c u)] \right) \Big\} \\ &+ \frac{[\Delta(T)]^2}{8T_c^2} \int_0^\infty \frac{du}{u} \left(\frac{d}{du} \frac{\tanh u}{u} \right) \cdot \{ d_{1,2} |d_{1,2}|^2 [\Gamma(2T_c) - \frac{1}{2} \Pi(2T_c u)] \\ &+ (2d_{1,2} |d_{2,1}|^2 + d_{1,2}^* d_{2,1}^2 - d_{1,2} |d_{1,2}|^2) [\frac{1}{2} \Pi(2T_c u) - \Sigma(2T_c u)] \} \end{aligned} \quad (4.7)$$

gdzie $u = \xi/2T_c$,

$$\begin{aligned} \Gamma(\xi) &= \frac{t_0 a_1 a_2}{\Lambda} \langle [J(\xi, \varphi) + J(-\xi, \varphi)] \rangle, \\ \Pi(\xi) &= \frac{8t_0 a_1 a_2}{\Lambda} \langle [J(\xi, \varphi) + J(-\xi, \varphi)] \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi \rangle, \\ \Sigma(\xi) &= \frac{16t_0 a_1 a_2}{\Lambda} \langle [J(\xi, \varphi) + J(-\xi, \varphi)] \sin^4 \varphi \cos^4 \varphi \rangle, \\ \Lambda &= \frac{t_0 a_1 a_2}{\omega_D} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \langle J(\xi, \varphi) \rangle. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Oszacowanie wartości funkcji $\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi$ i $\sin^4 \varphi \cos^4 \varphi$ oraz wykorzystanie relacji

$$\langle \cos^{2n} \varphi \rangle = \frac{1}{2^{2n}} \binom{2n}{n} \quad (4.9)$$



Rysunek 4.1: Linie konturów funkcji szczeliny $D(p)$ dla stanu d w przypadku dwuwymiarowym dla wybranych parametrów modelu.

pozwała stwierdzić, że funkcje $\Gamma(\xi)$, $\Pi(\xi)$ oraz $\Sigma(\xi)$ spełniają nierówności

$$\Gamma(\xi) - \Pi(\xi) + \Sigma(\xi) \geq 0, \quad 2\Gamma(\xi) \geq \Pi(\xi) \geq 2\Sigma(\xi). \quad (4.10)$$

Aby móc porównywać stabilność otrzymywanych rozwiązań w prowadzonych badaniach należy uzupełnić równanie (4.7) wyrażeniem na różnicę potencjałów termodynamicznych pomiędzy fazą nadprzewodzącą z d sparowaniem a fazą normalną, które jest postaci

$$\begin{aligned} \Delta\Omega = & \frac{\Lambda}{32t_0a_1a_2} \cdot \frac{\Delta^4}{T_c^2} \int_0^\infty \frac{du}{u} \left(\frac{d \tanh u}{du} \frac{1}{u} \right) \{ |d_{1,2}|^2 [\Gamma(2T_c) - \frac{1}{2}\Pi(2T_cu)] \\ & + (|d_{2,1}|^2 + |d_{2,1}|^2 e^{-i2(\theta_{1,2}-\theta_{2,1})} - |d_{1,2}|^2) [\frac{1}{2}\Pi(2T_cu) - \Sigma(2T_cu)] \}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Ponieważ $\Delta\Omega$ jest funkcją rzeczywistą, różnica $\theta_{1,2} - \theta_{2,1}$ musi być równa $\frac{1}{2}\pi n$, gdzie $n = 0, 1, 2$ lub 3 co odpowiada wartości współczynnika ± 1 . Uwzględniając, że

$$\frac{d \tanh u}{du} \frac{1}{u} < 0, \quad \Gamma(2T_cu) > 0, \quad \Pi(2T_cu) > 0, \quad \Sigma(2T_cu) > 0 \quad (4.12)$$

dla dowolnych u oraz wykorzystując nierówność (4.10) można stwierdzić, że wartość $\Delta\Omega$ jest ujemna dla wszystkich możliwych stanów d . Jednakże wartość $\Delta\Omega$ zależy od konkretnej postaci

jakobianu, a to powoduje, że pewne stany powinny wykazywać uprzywilejowanie. Analiza równania (4.7) prowadzi do następujących rozwiązań

$$d_1 = \pm d_2, \quad \text{zatem} \quad |d_1| = |d_2|$$

oraz odpowiednio

$$d_1 = 0 \quad \text{lub} \quad d_2 = 0, \quad \text{wtedy} \quad |d_2| = \sqrt{2} \quad \text{lub} \quad |d_1| = \sqrt{2}, \quad (4.13)$$

gdzie rozwiązanie pseudoizotropowe zostało pominięte. Zatem $D(0, \varphi)$ można przedstawić w postaci

$$D(0, \varphi) pm \sqrt{2} \cos(2\varphi + \alpha_0) \quad (4.14)$$

gdzie α_0 równe $0, \pm \frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{2}$ definiuje możliwe stany równowagowe. Stany (4.13), po zastosowaniu odwrotnej transformacji konforemnej, w podstawowej przestrzeni pędów $\mathbf{p}$ przekształcają się w postaci

$$D(\mathbf{p}) = \pm \frac{1}{(\tan \frac{p_1 a_1}{2})^2 |\sin p_1 a_1|^{-2\eta} + (\tan \frac{p_2 a_2}{2})^2 |\sin p_2 a_2|^{-2\eta}} \times \begin{cases} \sqrt{2} \left[(\tan \frac{p_1 a_1}{2})^2 |\sin p_1 a_1|^{-2\eta} - (\tan \frac{p_2 a_2}{2})^2 |\sin p_2 a_2|^{-2\eta} \right], & \text{gdy } \alpha_0 = 0 \\ 2\sqrt{2} \left[\tan \frac{p_1 a_1}{2} \tan \frac{p_2 a_2}{2} |\sin p_1 a_1 \sin p_2 a_2|^{-\eta} \right], & \text{gdy } \alpha_0 = \frac{\pi}{2} \\ (\tan \frac{p_1 a_1}{2})^2 |\sin p_1 a_1|^{-2\eta} - (\tan \frac{p_2 a_2}{2})^2 |\sin p_2 a_2|^{-2\eta} \\ \pm 2 \tan \frac{p_1 a_1}{2} \tan \frac{p_2 a_2}{2} |\sin p_1 a_1 \sin p_2 a_2|^{-\eta} & \text{gdy } \alpha_0 = \pm \frac{\pi}{4}, \end{cases} \quad (4.15)$$

które determinują ich kształt na powierzchni (linii) Fermiego z uwzględnieniem kształtu krzywej Fermiego w przestrzeni $\mathbf{p}$. Otrzymane rezultaty odzwierciedlają złożoną strukturę stanów sparowanych o symetrii d , co jest konsekwencją przyjętych dla układu symetrii tetragonalnej i relacji dyspersji. Wybrane postacie funkcji (4.16) zostały przedstawione na rysunku 4.1. Funkcja ta zachowuje symetrię wejściowego układu.

Kładąc $\eta = 0$, $D(\mathbf{p})$ redukuje się do w postaci

$$D(\mathbf{p}) = \pm \frac{1}{1 - \cos p_1 a_1 \cos p_2 a_2} \times \begin{cases} \sqrt{2} (\cos p_2 a_2 - \cos p_1 a_1), & \text{gdy } \alpha_0 = 0 \\ \sqrt{2} \sin p_1 a_1 \sin p_2 a_2, & \text{gdy } \alpha_0 = \frac{\pi}{2} \\ \cos p_2 a_2 \pm \sin p_1 a_1 \sin p_2 a_2 |\sin p_2 a_2|^{-2\eta} - \cos p_2 a_2 & \text{gdy } \alpha_0 = \pm \frac{\pi}{4} \end{cases} \quad (4.16)$$

Zauważmy, że otrzymane funkcje są wciąż bardziej złożone niż inne zdefiniowane jako nieprzywiedne parzyste reprezentacje grupy D_{4h} [65]. Niemniej formuły otrzymane dla $\alpha_0 = 0$ i $\alpha_0 = \frac{\pi}{2}$ odpowiadają symetrii $x^2 - y^2$ oraz xy , podczas gdy $\alpha_0 = \pm \frac{\pi}{4}$ jest ona ich prostą kombinacją.

W celu określenia własności termodynamicznych stanów d należy wykorzystać postać równania (4.7), gdy $T = T_c$

$$\frac{m^* t_0 a_1 a_2}{\Lambda \lambda_2} = \left\{ \ln \frac{\omega_D}{2T_c} [\Gamma(\omega_D) - \frac{1}{2} \Pi(\omega_D)] - \int_0^\infty du \ln u \frac{d}{du} \left([\Gamma(2T_c u) - \frac{1}{2} \Pi(2T_c u)] \tanh u \right) \right\}. \quad (4.17)$$

Porównując je z formułą otrzymaną w teorii BCS ($\Gamma(\epsilon) = \Pi(\epsilon) \equiv 1$ i $m^*t_0a_1a_2 = \Lambda$) można z wykorzystaniem metody kolejnych przybliżeń oszacować zmianę temperatury krytycznej z następującego równania

$$T_c = \frac{\omega_D}{2} \exp \left\{ -\frac{1}{\Gamma(\omega_D) - \frac{1}{2}\Pi(\omega_D)} \left[\frac{m^*t_0a_1a_2}{2\Lambda} \ln \frac{2\omega_De^C}{\pi T_{co}} + \int_0^\infty du \ln u \frac{d}{du} \left([\Gamma(2T_cu) - \frac{1}{2}\Pi(2T_cu)] \tanh u \right) \right] \right\} \quad (4.18)$$

Jednakże do wykonania szczegółowych obliczeń potrzebna jest znajomość jawnej postaci jacobianu. Ponadto równania (4.7) i (4.17) pozwalają oszacować amplitudę szczeliny energetycznej dla temperatur podkrytycznych w następujący sposób

$$\frac{\Delta(T)}{2T_c} = \sqrt{1 - \frac{T}{T_c}} \times \left\{ \frac{\Gamma(\omega_D) - \frac{1}{2}\Pi(\omega_D) + \int_0^\infty du \ln u \frac{d}{du} \left(u \tanh u \frac{d}{du} [\Gamma(2T_cu) - \frac{1}{2}\Pi(2T_cu)] \right)}{-\int_0^\infty \frac{du}{u} \left(\frac{d \tanh u}{du} \frac{1}{u} \right) \left(3[\Gamma(2T_cu) - \frac{1}{2}\Pi(2T_cu)] \pm [\Gamma(2T_cu) - \frac{5}{2}\Pi(2T_cu) + 4\Sigma(2T_cu)] \right)} \right\} \quad (4.19)$$

gdzie $\alpha_0 = 0, \frac{\pi}{2}$, gdy w równaniu (4.19) uwzględnia się plus oraz $\alpha_0 = \pm \frac{\pi}{4}$, gdy minus. Podstawiając równanie (4.18) do równania (4.10) można zauważyć, że stan $\alpha_0 = \pm \frac{\pi}{4}$ jest faworyzowany przez układ, jeśli $\Gamma(\epsilon) - \frac{5}{2}\Pi(\epsilon) + 4\Sigma(\epsilon) \geq 0$.

Ważnym parametrem układu jest współczynnik $\mathcal{R}_2 \equiv \Delta C(T_c)/C_N(T_c)$, gdzie $\Delta C(T_c) = C_S(T_c) - C_N(T_c)$ jest skokiem ciepła właściwego pomiędzy fazami nadprzewodzącą i normalną w temperaturze przejścia. Współczynnik ten można wyrazić następująco [39, 83]

$$\Delta C(T_c) = -\frac{\Lambda}{\pi t_0 a_1 a_2} \lim_{T \rightarrow T_c} \Delta(T) \frac{\partial \Delta(T)}{\partial T}, \quad (4.20)$$

co pozwala wykorzystując równanie (4.7), otrzymać

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C(T_c)}{T_c} = & -\frac{4\Lambda}{\pi t_0 a_1 a_2} \left\{ \Gamma(\omega_D) - \frac{1}{2}\Pi(\omega_D) + \int_0^\infty du \ln u \frac{d}{du} \left(u \tanh u \frac{d}{du} [\Gamma(2T_cu) - \frac{1}{2}\Pi(2T_cu)] \right) \right\} \\ & \times \left\{ \int_0^\infty \frac{du}{u} \left(\frac{d \tanh u}{du} \frac{1}{u} \right) \left(3[\Gamma(2T_cu) - \frac{1}{2}\Pi(2T_cu)] \pm [\Gamma(2T_cu) - \frac{5}{2}\Pi(2T_cu) + 4\Sigma(2T_cu)] \right) \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.21)$$

Ponieważ ciepło właściwe w stanie normalnym wyraża się formułą

$$\frac{C_n(T)}{T} = \frac{4\Lambda}{\pi t_0 a_1 a_2} \int_0^\infty du u^2 \cosh^{-2} u \Gamma(2Tu), \quad (4.22)$$

więc relacja $C_s(T) = \Delta C(T) + C_n(T)$ określa ciepło właściwe poszczególnych stanów fazy nadprzewodzącej ze sparowaniem d w obszarze temperatur podkrytycznych. Równanie (4.22) po uwzględnieniu postaci $\Gamma(\xi)$, (4.8) i przybliżonej formuły dla gęstości stanów [73, 84] $N(\xi) = A \ln(B/|\xi - t_2|)$ redukuje się do postaci otrzymanej w [24].

W rozszerzonym scenariuszu Van Hove'a uwzględnia się funkcję skalarnego pola gęstości stanów wyrażającą się za pomocą jakobianu transformacji konforemnej, a nie, jak w zwykłym scenariuszu Van Hove'a, jedynie jej wartości uśrednione po kącie φ określające gęstość stanów, $N(\xi)$. Niemniej przyjmując, że jakobian jest niezależny od kąta φ można łatwo zredukować otrzymane rezultaty do odpowiadającym im postaci będących następstwem zastosowania standardowego scenariusza Van Hove'a. Wówczas funkcje $\Pi(\xi)$ oraz $\Sigma(\xi)$ dają się wyrazić za pomocą funkcji $\Gamma(\xi)$, a w konsekwencji $N(\xi)$, gdyż

$$\Pi(\xi) = \Gamma(\xi) \quad \text{oraz} \quad \Sigma(\xi) = \frac{3}{8}\Gamma(\xi), \quad (4.23)$$

gdzie

$$\Gamma(\xi) = \frac{\pi t_0 (a_1 a_2)^2}{\Lambda} [N(\xi) + N(-\xi)] \quad \text{oraz} \quad \Lambda = \frac{\pi t_0 (a_1 a_2)^2}{\omega_D} \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi N(\xi), \quad (4.24)$$

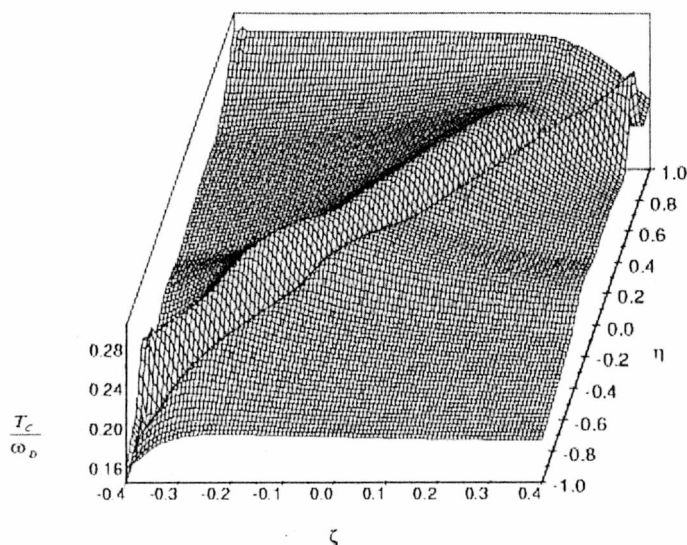
takie uproszczenie wyników prowadzi do pomijania stopni swobody układu wynikających z wzajemnych relacji parametrów η i ζ . W ogólnym przypadku funkcje $\Pi(\xi)$ i $\Sigma(\xi)$ nie dają się wyrazić za pomocą funkcji $\Gamma(\xi)$, a ich postaci zależą w istotny sposób od η i ζ , lub innych parametrów widma wzbudzeń związanych z innym badanym modelem, co pozwala na subtelniejsze rozróżnianie poszczególnych układów ze sparowaniem typu d .

4.3 Wyniki numeryczne

W Obliczeniach numerycznych wymagana jest pełna znajomość postaci jakobianu, który dla dowolnych wartości parametru η może zostać wyznaczony jedynie numerycznie. Znajomość jakobianu umożliwia wyznaczenie funkcji $\Gamma(\xi)$, $\Pi(\xi)$, $\Sigma(\xi)$ oraz wartości Λ które zostały zdefiniowane w równaniu 4.8. Aby otrzymane wyniki mogły być odniesione do nadprzewodników wysokotemperaturowych w obliczeniach należy uwzględnić wartości parametrów t_0, t_1 i t_2 występujące w realnych układach. Z danych eksperymentalnych otrzymanych dla nadprzewodzących związków LSC i YBaCuO parametry te można oszacować następująco: $t_0 = 0.24\text{eV}$, $t_1 = 0.045 \div 0.11\text{eV}$ i $t_2 = -0.43\text{eV}$ ([29]). Ponieważ energia Debye'a $\omega_D = 0.026 \div 0.065\text{eV}$ przyjęto, że $\omega_D = 0.043\text{eV}$, co odpowiada temperaturze Debye'a około 500K . W konsekwencji zredukowane parametry $\eta = 2t_1/t_0$ i $\zeta = t_2/2t_0$ mogły się zmieniać w przedziałach $-1 < \eta < 1$ i $-0,4 < \zeta < 0,4$. Otrzymane wyniki zostały przedstawione w bezwymiarowych jednostkach.

4.3.1 Temperatura krytyczna

Wykorzystując formułę (4.18) można wyznaczyć wartości temperatury krytycznej T_c , dla wybranych parametrów modelu. Na rysunku 4.2 przedstawiono wartości temperatury krytycznej w zależności od parametrów η i ζ , zmieniających się w przedziałach $-1 < \eta < 1$ i $-0,4 < \zeta < 0,4$. Jak można zauważyć temperatura krytyczna jako funkcja ζ dla ustalonego η posiada dwa maksima i jedno minimum przesuwające się w poprzek płaszczyzny η, ζ wraz z parametrem



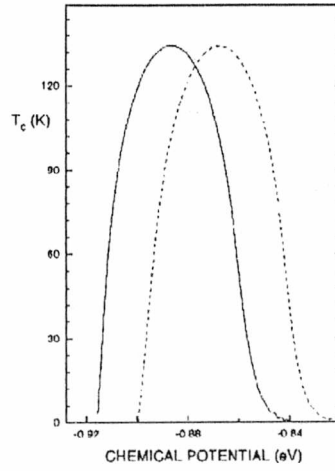
Rysunek 4.2: Temperatura krytyczna w zależności od parametrów η i ζ

η . Wyniki jakie uzyskano są zgodne z obliczeniami wykonanymi innymi metodami oraz intuicją, tzn. maksymalna temperatura krytyczna powinna odpowiadać sytuacji, kiedy osobliwość związana z gęstością stanów leży dokładnie na powierzchni Fermiego oraz T_c powinna zmniejszać się wraz z oddalaniem się osobliwości od powierzchni Fermiego. Dla porównania na rysunku 4.3 przedstawiono wartości temperatury krytycznej w zależności od parametr t_2 identyfikowanego z potencjałem chemicznym otrzymane w modelu t-J w [24]. Wyniki te dotyczą jedynie przypadku $t_1 = 0$ ($\eta = 0$), podczas gdy wyniki otrzymane w ramach rozwiniętego podejścia pozwalają uwzględniać szeroki zakres zmienności parametrów η i ζ .

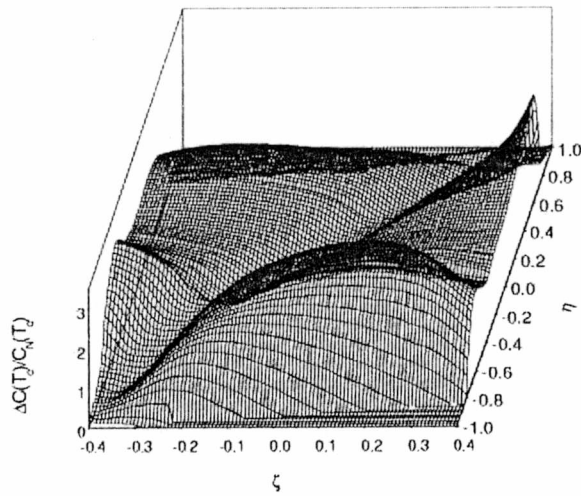
4.3.2 Skok ciepła właściwego i ciepło właściwe fazy normalnej

Skok ciepła właściwego został wyznaczony z równań (4.21) i (4.22). Na rysunku 4.4 przedstawiono zredukowane wartości skoku ciepła właściwego $\Delta C(T_c)/C_N(T_c)$ w zależności od parametrów η i ζ . Funkcja $\Delta C(T_c)/C_N(T_c)$ posiada jedno wyraźne minimum i dwa rozległe obszary o podwyższonych wartościach rozciągające się po obu stronach obszaru minimum, w których mogą być osiągane lokalne maksima.

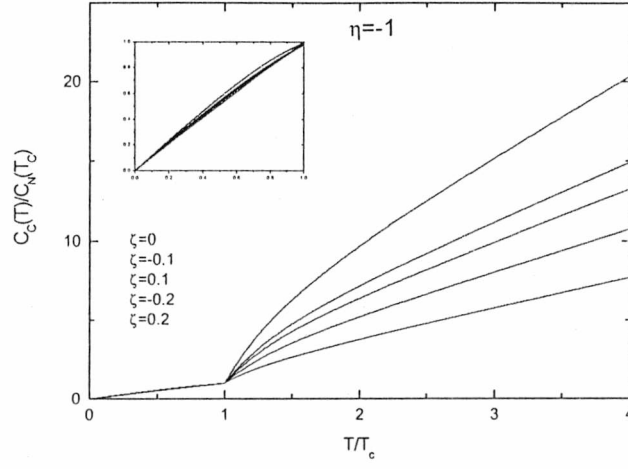
Ponieważ rozwinięty formalizm dotyczy dwuwymiarowych układów anizotropowych z relacją dyspersji (2.60) wykorzystując równanie (4.22) można wyznaczyć ciepło właściwe w stanie normalnym w szerokim zakresie temperatur. Na rysunkach 4.5, 4.6, cn3 przedstawiono przykładowe przebiegi zmienności ciepła właściwego $C_N(T)/C_N(T_c)$ w zależności od T/T_c . Ciepło właściwe w normalnej cieczy Fermiego wzrasta liniowo wraz z temperaturą. Uwzględnienie gęstości stanów otrzymanej w modelu ciasnego wiązania narusza tę relację w sposób zależny od wartości parametrów modelu.



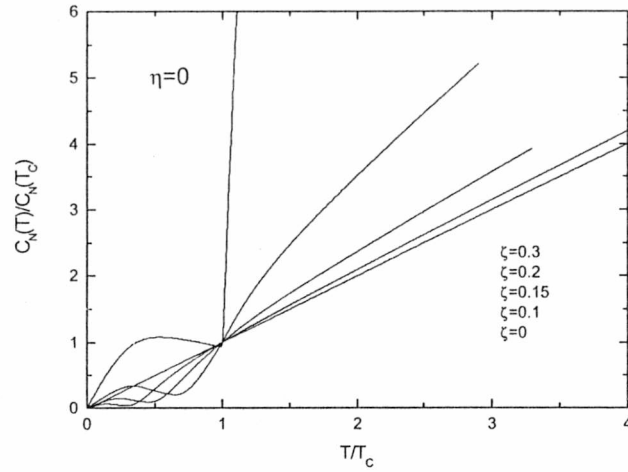
Rysunek 4.3: Wartości temperatury krytycznej w zależności od potencjału chemicznego (t_2) obliczone na podstawie modelu t-J, [24].



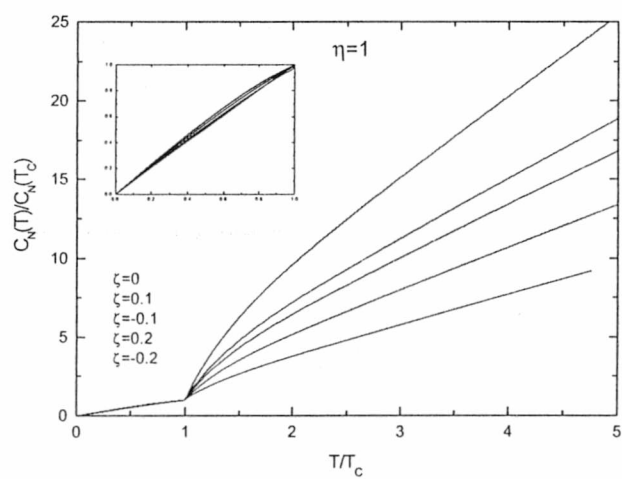
Rysunek 4.4: Wartości skoku ciepła właściwego w zależności od parametrów η i ζ



Rysunek 4.5: Przebieg funkcji ciepła właściwego fazy normalnej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości parametrów modelu $t_0 = 0.24\text{eV}$, $\eta = -1$ oraz $\zeta = 0; -0.1; 0.1; -0.2; 0.2$



Rysunek 4.6: Przebieg funkcji ciepła właściwego fazy normalnej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości parametrów modelu $t_0 = 0.24\text{eV}$, $\eta = 0$ oraz $\zeta = 0.3; 0.2; 0.15; 0.1; 0$



Rysunek 4.7: Przebieg funkcji ciepła właściwego fazy normalnej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości parametrów modelu $t_0 = 0.24\text{eV}$, $\eta = 1$ oraz $\zeta = 0; 0.1; -0.1; 0.2; -0.2\text{eV}$.

Rozdział 5

Podsumowanie

5.1 Wnioski

W pracy zaprezentowano formalizm *rozszerzonego scenariusza Van Hove'a*. Opiera się on na założeniu możliwości opisanego nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego w terminach formalizmu cieczy Fermiego, wykorzystywanych do opisu nadprzewodnictwa w modelu BCS. Ponieważ nadprzewodniki wysokotemperaturowe te wykazują silną anizotropię nie można takiego formalizmu cieczy Fermiego stosować bezpośrednio. Rozszerzając formalizm Landaua można założyć, że symetria układu ulega płynnej modyfikacji od układu izotropowego do układu anizotropowego w procesie adiabatycznego włączania oddziaływania. Aby uzyskać formalizm zbieżny z modelem cieczy Fermiego pokazuje się, że anizotropowa przestrzeń pędów z nieparabolicznym widmem wzbudzeń odpowiadająca rzeczywistemu układowi może być przetransformowana do przestrzeni izotropowej z parabolicznym spektrum. Standardowe informacje o układzie dotyczące rzeczywistej symetrii i określonego widma wzbudzeń jednocząstkowych zostają zapisane w formie dodatkowego pola skalarnego nakładanego na izotropową przestrzeń pędów, które modyfikuje rozmiar stanów kwantowo-mechanicznych zgodnie z symetrią wyjściowego układu. Szczegółowe obliczenia w pracy wykonano dla hamiltonianu typu Hubbarda. Przedstawiono obliczenia własności termodynamicznych dla stanów nadprzewodzących typu s i d . W ogólności energia wzbudzeń jednocząstkowych $\xi(\mathbf{p})$ jest funkcją różniczkowalną, której postać można ustalić lub zapostulować, a efektywny potencjał oddziaływania parującego jest odpowiedzialny za tworzenie się par Coopera o określonej lub mieszanej symetrii. Wykonując transformacje ortonormalizacji oraz konforemne (krzywoliniowe) można przenieść prowadzone rozważania do innej ortogonalnej przestrzeni, w której jedną współrzędną jest energia widma wzbudzeń ξ , a pozostałe (jedna lub dwie) są np. kątami odpowiednio: biegunowego φ , lub sferycznego φ, ϑ układu współrzędnych. Wówczas sumowanie lub całkowanie po przestrzeni sieci odwrotnej tj. po wektorze $\mathbf{p}$ zostaje zastąpione całkowaniem po energii ξ i kącie φ , lub kątach φ i ϑ , w którym należy dodatkowo uwzględnić jacobian transformacji przestrzeni sieci odwrotnej w przestrzeń $[\xi, \varphi]$, lub w przestrzeń $[\xi, \varphi, \vartheta]$, a współrzędne wektora $\mathbf{p}$ we wszystkich wyrażeniach podcałkowych zostają wyrażone jako funkcje nowych współrzędnych. Jacobian transformacji określa zmiany gęstości, jakie należy moltiplikatywnie uwzględnić w stosunku do poszczególnych stanów kwantowo-mechanicznych zdefiniowanych w zależności do nowych współrzędnych. W rozwiniętym formalizmie zostało stwierdzone, że uwzględnienie zmian lokalnej gęstości stanów ma formę skalarnego pola nakładanego na przestrzeń, nazwanego skalarnym polem gęstości stanów $\mathcal{K}$, które odzwierciedla symetrię badanego układu. Pole gęstości stanów $\mathcal{K}$ uśrednione po pozostałych współrzędnych (z wyjątkiem ξ) wyznacza standardową gęstość stanów $N(\xi)$

stanowiącą fundamentalny element scenariusz Van Hove'a, w którym sumowanie lub całkowanie po przestrzeni sieci odwrotnej jest zastąpione jedynie całkowaniem po energii wzbudzeń ξ przy uwzględnieniu gęstości stanów $N(\xi)$ zawierającej osobliwości. A zatem w rozszerzonym scenariuszu Van Hove'a obowiązuje relacja

$$\sum_{\mathbf{p}} \dots = \int d\xi \langle \mathcal{K}(\xi, \phi, \cdot) \dots \rangle, \quad (5.1)$$

gdzie funkcja $\mathcal{K}$ jest wyznaczana w oparciu o relację dyspersji $\xi(\mathbf{p})$, wielokropek odnosi się do pozostałych wyrazów, a $\langle \dots \rangle$ oznacza uśrednienie po kątach, podczas gdy w zwykłym standardowym scenariuszu Van Hove'a analogiczna relacja ma postać

$$\sum_{\mathbf{p}} \dots = \int d\xi N(\xi) \langle \dots \rangle, \quad (5.2)$$

gdzie gęstość stanów $N(\xi)$ jest wyznaczana w oparciu o pierwszą z formuł (2.25) lub formuły jej równoważne, które nie wymagają znajomości transformacji przestrzeni, oraz zachodzi związek

$$N(\xi) = \langle \mathcal{J}(\xi, \phi, \cdot) \rangle. \quad (5.3)$$

Z porównania relacji (5.1) i (5.2) wynika, że zwykły scenariusz Van Hove'a może być stosowany jedynie, gdy

$$\langle \mathcal{J}(\xi, \phi, \cdot) \dots \rangle = \langle \mathcal{J}(\xi, \phi, \cdot) \rangle \langle \dots \rangle. \quad (5.4)$$

Oznacza to, że pozostałe wyrażenia występujące w równaniu nie mogą zależeć od kątów, gdyż w przeciwnym przypadku

$$\langle \mathcal{J}(\xi, \phi, \cdot) \dots \rangle \neq \langle \mathcal{J}(\xi, \phi, \cdot) \rangle \langle \dots \rangle. \quad (5.5)$$

Warunek (5.4) jest spełniony jedynie dla czystego sparowania s , gdy $\langle \dots \rangle = \dots$, natomiast w przypadku sparowań typu d , p lub innych oraz mieszanych scenariusz Van Hove'a staje się niepoprawny i należy zastąpić go rozszerzonym scenariuszem Van Hove'a, który wymaga znajomości odpowiednich jacobianów. Oznacza to, że symetria sieci krystalicznej nie ma bezpośredniego wpływu na własności nadprzewodników, w których realizowany jest czysto izotropowy stan s .

W przedstawionym formalizmie rozszerzonego scenariusza Van Hove'a zasadniczym elementem zapewniającym jego stosowalność dla układów anizotropowych jest konsekwentne zachowanie liczby uwzględnianych współrzędnych, tj. liczby stopni swobody, równej z wymiarowi przestrzeni wyjściowego układu. Współrzędna ξ odpowiadająca energii wzbudzeń jednocząstkowych posiada jednoznaczną interpretację fizyczną. Chociaż ze względów rachunkowych i interpretacyjnych wygodnie jest wybrać jako jedną lub dwie pozostałe współrzędne φ , lub φ i ϑ , to jednakże należy stwierdzić, że wybór pozostałych współrzędnych w układzie krzywoliniowym jest całkowicie dowolny, co oznacza, że zakres ich zmienności może być także nieograniczony. Wówczas uśrednianie po kątach w równaniach (5.1) i (5.3) należy zastąpić całkowaniem po dodatkowych współrzędnych np. ξ_2 , ξ_3 w odpowiadającym im zakresie zmienności uwzględniając czynnik $2^{d-1}\pi$, a nierówność (5.5) otrzymuje postać

$$\int d\xi_2 \int d\xi_3 \mathcal{J}(\xi, \xi_2, \xi_3) \dots \neq \left[\int d\xi_2 \int d\xi_3 \mathcal{J}(\xi, \xi_2, \xi_3) \right] \frac{1}{\int d\xi_2 \int d\xi_3} \int d\xi_2 \int d\xi_3 \dots, \quad (5.6)$$

która silnie uwydatnia ograniczony zakres słuszności formuły (5.4) i w której dla układów dwuwymiarowych należy konsekwentnie pominąć ξ_3 .

Najdalej idącą konsekwencją zaprezentowanego formalizmu jest możliwość odwzorowania układu cząstek z dowolnym (różniczkowalnym) widmem wzbudzeń opisanego w anizotropowej dwu- lub trójwymiarowej przestrzeni pędów $\mathbf{p}$ na układ kwazicząstek z parabolicznym widmem wzbudzeń opisany w izotropowej przestrzeni kwazipędów $\mathbf{q}$, w której należy dodatkowo uwzględnić istnienie skalarne go pola gęstości stanów $\mathcal{K}'(\mathbf{q})$. Taką transformację można zawsze ustalić składając transformację ortogonalizującą i konforemną do układu o współrzędnych ξ, φ lub ξ, φ, ϑ oraz transformację odwrotną do transformacji przenoszącej opis cieczy Fermiego ze zlinearyzowanym widmem wzbudzeń z kartezjańskiego układu współrzędnych w przestrzeni pędów do układu biegunowego lub sferycznego, co szczegółowo zostało omówione w rozdziale 2.4. Istnienie takiej transformacji prowadzi do stwierdzenia, że dowolny anizotropowy dwu- lub trójwymiarowy układ cząstek będący w fazie normalnej lub tworzący stan nadprzewodzący, dla którego można określić modelowy hamiltonian typu Hubbarda, t-J lub inny, może być rozważany jako normalna lub nadprzewodząca ciecz Fermiego w izotropowej przestrzeni pędów, na którą nałożono skalarne pole gęstości stanów odzwierciedlające symetrię. W takim izotropowym układzie, analogiczne jak w modelu BCS, nie znikający wyraz lub nie znikające wyrazy potencjału oddziaływania parującego rozłożonego w szereg Fouriera, dla układu dwuwymiarowego, lub w szereg wielomianów Legendre'a, dla układu trójwymiarowego, determinują symetrię parametru porządku fazy nadprzewodzącej. Współczynnikami rozwinięcia są separowalne funkcje energii, ξ , które określają energię i zasięg sparowania.

Z przedstawionych rozważań wynika, że dla dowolnego dwu- lub trójwymiarowego układu nadprzewodzącego, dla którego efektywny hamiltonian ma postać (3.1) z potencjałem oddziaływań dwucząstkowych o strukturze (3.2), można formalnie zastosować podejście typu BCS z liniową relacją dyspersji, uwzględniając w równaniach dodatkową funkcję $\mathcal{K}'$. Dokonując zamiast zmiennych i przechodząc odpowiednio do biegunowego lub sferycznego układu współrzędnych równania te otrzymują postać adekwatną dla rozszerzonego scenariusza Van Hove'a. Gdy w układzie jest realizowany izotropowy stan nadprzewodzący s , żadna z funkcji podcałkowych z wyjątkiem $\mathcal{K}$ nie zależy od kątów. Wówczas wykonując całkowanie po kątach pole gęstości stanów $\mathcal{K}$ zostaje zredukowane do gęstości stanów $N(\xi)$, a równania otrzymują postać zgodną ze scenariuszem Van Hove'a. Ponieważ w przypadku, gdy parametr porządku nie jest izotropowy w równaniach występują inne funkcje podcałkowe zależne od kątów, dlatego procedura polegająca na uśrednieniu po kątach funkcji $\mathcal{K}$ i wprowadzeniu w to miejsce gęstości stanów $N(\xi)$ oraz dołożeniu do równań dodatkowego uśredniania po kątach jest niepoprawna. Pomimo tego wynikające z niej równania są powszechnie wykorzystywane w badaniach uwzględniających scenariusz Van Hove'a dla układów ze sparowaniem typu d [18, 24, 28, 29, 38, 40, 42, 43, 44, 45, 46].

Rezultaty rozwiniętej teorii pozwoliły wykazać, że zastosowanie rozszerzonego scenariusza Van Hove'a zarówno do nadprzewodników wysokotemperaturowych, które opisywane są modelami opartymi na hamiltonianie Hubbarda, jak i do nadprzewodników niskotemperaturowych, dla których istnieje teoria BCS, prowadzi do uniwersalnej postaci równań na szczelinę energetyczną i liczbę cząstek. Równania te są wyrażone we współrzędnych kątowych i ξ , lub w zależności od składowych wektora o wymiarze pędu $\mathbf{q}$. Zawierają one pewną szczególną funkcję $\mathcal{K}$, a w równaniu na szczelinę energetyczną współczynniki rozwinięcia potencjału oddziaływania parującego zależą od energii wzbudzeń. W przypadku modelu BCS $\mathcal{K} \equiv 1$, a współczynniki rozwinięcia są stałe. Niemniej zastosowanie scenariusza Van Hove'a dla nadprzewodników niskotemperaturowych, w których realizowany jest wyłącznie izotropowy stan s , prowadzi do uwzględnienia zmiennej gęstości stanów $N(\xi)$, wyznaczonej np. eksperymentalnie, która chociaż może nie posiadać osobiwości to jej dokładna postać powinna poprawić zgodność wyników teoretycznych z eksperymentem.

Z przedstawionych rozważań wynika, że równania otrzymane w ramach rozszerzonego scenariusza Van Hove'a i wynikające z nich relacje stają się uniwersalne dla modeli nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego i niskotemperaturowego. Pozwoliło to m. in. na wyznaczenie uniwersalnych zależności pomiędzy amplitudą szczeliny energetycznej, a potencjałem termodynamicznym, entropią i ciepłem właściwym dla szerokiej klasy modeli nadprzewodnictwa ze sparowaniem singletowym [86, 87, 88].

Pomimo wykazanej unifikacji zasadniczych równań należy podkreślić, że modele odnoszące się do nadprzewodnictwa niskotemperaturowego i wysokotemperaturowego posiadają wiele istotnych różnic.

Model nadprzewodnictwa BCS został sformułowany w ramach teorii słabego wiązania z uwzględnieniem konieczności zachowania określonej dokładności stosowanych formuł. W realnych metalach, w których może być realizowany stan nadprzewodzący niskotemperaturowy, istnieje szerokie pasmo przewodnictwa wypełnione w połowie nośnikami prądu — elektronami. Dlatego można przyjąć, że cząstki są rozlokowane w całej przestrzeni pędów, energia wzbudzeń cząstek, lub kwazicząstek, gdy wprowadza się model cząstka-dziura, leżących przy powierzchni Fermiego zależy liniowo od wartości pędu, gęstość stanów elektronowych jest stała, a powierzchnia Fermiego jest sferą lub okręgiem. Jest to związane z dużą wartością energii Fermiego ($\epsilon_F/k_B \sim 10^5 K$), co pozwala w wyliczeniach przesunąć dolną i górną granicę energii kwazicząstek do nieskończoności. W modelu BCS mechanizm parujący jest fononowy, dlatego sparowaniu podlegają wyłącznie kwazicząstki wokół powierzchni Fermiego, które znajdują się w obszarze odległym od niej o co najwyżej ω_D , gdzie $\omega_D \sim 10^2 \div 10^3 K$ jest energią Debye'a czyli maksymalną energią drgań fononowych. Ponieważ $\epsilon_F \gg \omega_D$ oraz $\omega_D \gg k_B T_c$ ($\Delta(0) = 1.76 k_B T_c$), aby nie przewyższać rzędu dokładności modelu słabego wiązania parametr ϵ_F nie występuje jawnie w modelu, a wyrażenia postaci $k_B T_c / \omega_D$ w potęgach 2 i wyższych są pomijane. Dlatego zachowując dokładność formuł w ramach modelu BCS jest uprawnione przejście graniczne $\omega_D / k_B T_c \rightarrow \infty$ we wszystkich zbieżnych wyrażeniach, co dla modelu oznacza rozszerzenie zasięgu sparowania na większą liczbę cząstek. Nie ma jednakże wpływu na otrzymywane wyniki.

W nadprzewodnikach wysokotemperaturowych szerokość pasma przewodnictwa wypełnionego na ogół częściowo i niesymetrycznie nośnikami ładunku elektrycznego, dziurami lub elektronami, jest mała w porównaniu z szerokością pasma przewodnictwa w metalach. Przykładowe wartości energii Fermiego, energii Debye'a i temperatury krytycznej wyrażone w skali temperaturowej dla typowych związków nadprzewodzących są następujące [26], [47]:

- La-Sr-Cu-O $\epsilon_F \simeq 5500K$, $\omega_D \sim 400K \div 750K$, $T_c \simeq 40K$,
- Y-Ba-Cu-O $\epsilon_F \simeq 8800K$, $\omega_D \sim 300K \div 750K$, $T_c \simeq 90K$,

co oznacza, że $\epsilon_F / \omega_D \sim 10$, a ω_D / T_c może stać się porównywalne z $\Delta(0) / T_c$. Wszystko to powoduje, że w badaniach własności nadprzewodników wysokotemperaturowych, w których wykorzystuje się scenariusz Van Hove'a, należy uwzględniać wzajemne relacje pomiędzy parametrami układu. Dlatego metody obliczeniowe pozwalające wyznaczać z otrzymanych równań własności termodynamiczne nadprzewodników, opracowane dla modelu BCS, mogą być stosowane w przypadku nadprzewodników wysokotemperaturowych wyłącznie przy zachowaniu pełnej kontroli ich dokładności.

W zakończeniu, odnosząc się do przedstawionych rozważań i zaprezentowanych wyników badań, należy podkreślić, że w niniejszej rozprawie zostały one usystematyzowane zgodnie z postawionymi tezami rozprawy doktorskiej.

Wpływ fluktuacji gęstości stanów na własności termodynamiczne nadprzewodnika został zbadany w rozdziale *Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu s*. W pierwszej części tego rozdziału szczegółowo rozważono postać równania na szczelinę i obliczono numerycznie gęstość stanów w przybliżeniu ciasnego wiązania. Następnie obliczono własności termodynamiczne nadprzewodnika z modelowymi gęstościami stanów w podejściu scenariusza Van Hove'a. Gęstości stanów, jakie rozważono to gęstość stanów typu Lorentza, typu trójkątnego oraz wykazująca rozbieżność typu logarytmicznego, która pochodzi z modelu ciasnego wiązania. Stosowane procedury numeryczne, wykorzystujące metody perturbacyjne pozwoliły wyznaczyć zależność szczeliny energetycznej od temperatury dla dowolnej postaci funkcji gęstości stanów. Przykładowe wyniki obliczeń przedstawiono w sposób graficzny. W pracy oszacowano również zmiany temperatury krytycznej związane z istnieniem fluktuacji gęstości stanów oraz obliczono skok ciepła właściwego w temperaturze krytycznej. Pokazano, że istnienie fluktuacji gęstości stanów nie zmienia asymptotycznych zależności funkcji szczeliny energetycznej od temperatury w granicznych przypadkach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$, natomiast udowodniono, że istnienie osobliwości podwyższa wartość współczynnika R_1 .

Kolejna teza pracy **Model anizotropowej cieczy Fermiego z nieparabolicznym widmem wzbudzeń** został omówiony w rozdziale *Transformacje przestrzeni i gęstość stanów*. W podrozdziale *Model anizotropowej cieczy Fermiego* podano koncepcję rozszerzenia modelu cieczy Fermiego na przypadek anizotropowy z nieparabolicznym widmem wzbudzeń poprzez transformację konforemną w przestrzeni odwrotnej. Transformacja ta wprowadza do równań dodatkową wielkość- skalarne pole gęstości stanów, które zachowuje symetrię wejściowego układu i zawiera informację o mechanizmach oddziaływania poprzez relację dyspersji. Szczegółowe obliczenia przeprowadzono dla dwuwymiarowego modelu Hubbarda na sieci prostokątnej. Wskazano na możliwość zastosowania otrzymanych wyników do formułowania i badania modeli nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego z uwzględnieniem anizotropii układu i rozważanych modelowo mechanizmów oddziaływania, co wiązało się z realizacją kolejnej tezy **Zmodyfikowane równanie na szczelinę w układach anizotropowych o złożonych mechanizmach oddziaływania**. Zmodyfikowaną postać równania na szczelinę uwzględniającą skalarne pole gęstości stanów rozważono w rozdziałach *Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu s* oraz *Rozszerzony scenariusz Van Hove'a dla nadprzewodnika typu d*, gdzie wyznaczono stany równowagowe i własności termodynamiczne nadprzewodnika z dominującą składową d oraz podano przykładowe postacie funkcji szczeliny energetycznej. Przeniesienie rozważań do nowej przestrzeni z nałożonym skalarnym polem gęstości stanów, umożliwiło uzyskanie nowych formuł, uwzględniających symetrię i oddziaływania w układzie oraz pozwalających na bardziej precyzyjne oszacowania temperatury krytycznej i skoku ciepła właściwego w temperaturze przejścia. Szczegółowe obliczenia przeprowadzono z polem gęstości stanów uzyskanym poprzez transformację konforemną relacji dyspersji w modelu Hubbarda w rozdziale *Transformacja przestrzeni i gęstość stanów*. Zmiany temperatury krytycznej oraz skok ciepła właściwego zostały oszacowane w szerokim zakresie dozwolonych wartości parametrów modelu Hubbarda. Wykazano również wpływ skalarnej pola gęstości i związanych z nim osobliwości na zależność ciepła właściwego od temperatury w stanie normalnym

Spis rysunków

1.1	Wartość temperatury krytycznej i współczynnika izotopowego w zależności od położenia osobliwości logarytmicznej	8
1.2	Teoretyczny diagram fazowy	10
1.3	Linie ekwienergetyczne dla modelu Hubbarda	11
1.4	Spektrum energetyczne dla sieci prostokątnej	13
1.5	Wartości temperatury krytycznej dla $Y_{0.8}Ca_{0.2}Ba_2(Cu_{1-y}Zn_y)_3O_{7-y}$ w zależności od parametru domieszkania tlenem	14
1.6	Możliwe postacie szczeliny energetycznej dla dwuwymiarowej sieci kwadratowej.	15
1.7	Teoretycznie oszacowana wartość temperatury krytycznej dla nadprzewodnika typu d w zależności od parametru zapelnienia pasma	15
1.8	Ciepło właściwe w stanie nadprzewodzącym w zależności od temperatury dla stanów s , d i stanu mieszanego w niskich temperaturach oraz w całym przedziale temperatur od 0 do T_c	16
1.9	Kształt i przebieg linii izoenergetycznych w układach w układach o symetrii typu s i d oraz symetrii mieszanej dla stanów postaci $s + d$ i $s + id$	18
2.1	Skalarne pole gęstości stanów w zależności od φ i z dla $t_1 = 0$	33
2.2	Skalarne pole gęstości stanów w zależności od φ i z dla $t_1/t_0 = 0.5$	33
2.3	Skalarne pole gęstości stanów w zależności od φ i z dla $t_1/t_0 = -0.5$	34
2.4	Skalarne pole gęstości stanów w zależności od zredukowanego wektora falowego dla $t_1/t_0 = 0.5$	34
2.5	Skalarne pole gęstości stanów w zależności od zredukowanego wektora falowego dla $t_1/t_0 = -0.5$	35
2.6	Skalarne pole gęstości stanów w zależności od zredukowanego wektora falowego dla $t_1 = 0$	36
2.7	Linie ekwienergetyczne i odpowiadające im linie równych wartości pola gęstości stanów dla wybranych parametrów układu	37
2.8	Charakterystyczny przebieg funkcji gęstość stanów w obszarze stosowalności teorii.	38
3.1	Gęstość stanów otrzymana metodami numerycznymi w zależności od parametrów η i z w zredukowanych, bezwymiarowych jednostkach	47
3.2	Gęstość stanów określona przybliżeniem funkcji logarytmicznej przedstawionej w zredukowanych, bezwymiarowych jednostkach	48
3.3	Różnica pomiędzy dokładną (wyznaczoną numerycznie) i przybliżoną analitycznie postaciami funkcji gęstości stanów w zredukowanych, bezwymiarowych jednostkach	49
3.4	Wartość skoku ciepła właściwego przy przejściu układu od fazy nadprzewodzącej do fazy normalnej w $T = T_c$	53

3.5	Wzrost temperatury krytycznej w odniesieniu do modelu BCS	53
3.6	Zmiany wartości temperatury krytycznej od szerokości połówkowej fluktuacji typu Lorentza	55
3.7	Szczelina energetyczna w zależności od temperatury dla wybranych parametrów modelu (fluktuacje trójkątne). Wysokość fluktuacji x jest stała	56
3.8	Szczelina energetyczna w zależności od temperatury dla wybranych parametrów modelu (fluktuacje trójkątne). Szerokość podstawy trójkąta jest stała $b = 0,3$. Fluktuacja jest zlokalizowana na poziomie Fermiego, $r = 0$	56
3.9	Zmiany temperatury krytycznej w zależności od szerokości fluktuacji (fluktuacje trójkątne). Wysokość trójkąta jest stała $x = 0,5$	57
3.10	Zmiany temperatury krytycznej w zależności od szerokości fluktuacji (fluktuacje trójkątne). Fluktuacja jest zlokalizowana na poziomie Fermiego, $r = 0$	57
4.1	Linie konturów funkcji szczeliny $D(\mathbf{p})$ dla stanu d w przypadku dwuwymiarowym dla wybranych parametrów modelu.	68
4.2	Temperatura krytyczna w zależności od parametrów η i ζ	72
4.3	Wartości temperatury krytycznej w zależności od potencjału chemicznego (t_2) obliczone na podstawie modelu t-J, [24].	73
4.4	Wartości skoku ciepła właściwego w zależności od parametrów η i ζ	73
4.5	Przebieg funkcji ciepła właściwego fazy normalnej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości parametrów modelu	74
4.6	Przebieg funkcji ciepła właściwego fazy normalnej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości parametrów modelu	74
4.7	Przebieg funkcji ciepła właściwego fazy normalnej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości parametrów modelu	75

Bibliografia

- [1] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Zs. Phys. Rev. B **64** 189 (1986)
- [2] M.K. Wu *et al.*, Phys. Rev. Lett. **58** 908 (1987),
P.H. Hor *et al.*, Phys. Rev. Lett. **58** 911 (1987)
- [3] H. Maeda *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **27** L209 (1988)
- [4] Z.Z. Sheng, A.M. Hermana, Nature **332** 55 (1988)
- [5] J. Stankowski, B. Czyżak, *Nadprzewodnictwo*, Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, Warszawa 1999
- [6] M. Cyrot, D. Pavuana, *Wstęp do nadprzewodnictwa – Nadprzewodniki wysokotemperaturowe*, Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1996
- [7] P. W. Anderson, Science **64** 188 (1986)
- [8] P. W. Anderson, Science **235** 1996 (1987)
- [9] P. W. Anderson, *The Theory of High- T_c Superconductivity in the Cuprates*, Princeton Univ. Press 1997
- [10] W. Zheng, Phys. Rev. Lett. **83** 3534 (1999)
- [11] T. M. Rice, Physica C **341-348** 41 (2000)
- [12] S. Maekava, T. Tohyama, Physica C **341-348** 55 (2000)
- [13] W. Zheng, Physica C **341-348** 257 (2000)
- [14] J.R. Schrieffer, P.A. Wolff, Phys. Rev. **149** 491 (1966)
- [15] S.J. Nettel and H. Thomasń, Solid State Commun. **21** 683 (1977)
- [16] S.G. Lie and J.P. Carbotte, Solid State Commun. **26** 511 (1978)
- [17] Warren E. Pickett, Phys. Rev. B **21** 3897 (1980)
- [18] B. Mitrović, J.P. Carbotte, Can. J. Phys. **61** 758 (1983)
- [19] E. Schachinger, B. Mitrović, J.P. Carbotte, J. Phys I Met. Phys. **12** 1771 (1982)
- [20] P. Piekarz, J. Konior, J. H. Jefferson, Phys. Rev. B **59** 14697 (1999)

- [21] J. E. Hirsch and D. J Scalapino, Phys. Rev. Lett. **56** 2732 (1986)
- [22] L. Van Hove, Phys. Rev. **89** 1189 (1953)
- [23] R.S. Markiewicz, Physica C **168** 195 (1990),
R. S. Markiewicz, Physica C **183** 303 (1991)
- [24] J. Bouvier, J. Bok, Physica C **288** 217 (1997),
J. Bouvier, J. Bok, Physica C **282-287** 294 (1997)
- [25] J. Bouvier, J. Bok, w książce *The Gap Symmetry and Fluctuations in High T_c Superconductors*, Eds J. Bok, G. Deutscher, D. Pavuna and S. Wolf, Plenum Press, New York, 1998 p.37
- [26] C. C. Tsuei, D. M. Newns, C. C. Chi, P. C. Pattnaik, Phys. Rev. Lett. **65** 2724 (1990),
C. C. Tsuei, D. M. Newns, C. C. Chi, P. C. Pattnaik, Phys. Rev. Lett. **68** 1091 (1992)
- [27] A. Gama Goicochea, Phys. Rev. B **49** 6864 (1993)
- [28] R. Baquero, D. Quesada, C. Trallero-Giner, Physica C **271** 122 (1996)
- [29] R. S. Markiewicz, J. Phys. Chem. Solids **58** 1179 (1997)
- [30] D. M. Newns, C. C. Tsuei, P. C. Pattnaik, Phys. Rev. B **52** 13611 (1995)
- [31] R. Gonczarek, Appl. Phys. A **47** 111 (1988)
- [32] J. Y. T. Wei, C. C. Tsuei, P. J. M. van Bentum, Q. Xiong, C. W. Chu, M. K. Wu, Phys. Rev. B **57** 6864 (1998)
- [33] M.L. Kulić, Physics Reports **338** 1-264 (2000)
- [34] R. S. Markiewicz, C. Kusko, V. Kidambi, Phys. Rev. B **60** 627 (1999)
- [35] A. V. Chubukov and D. K. Morr, Phys. Rev. Lett. **81** 4716 (1998)
- [36] B. K. Agrawal, S. Agrawal, P. S. Yadav, Phys. Rev. B **60** 9305 (1998)
- [37] D. H. Lu, M. Schmidt, T. R. Cummins, S. Schuppler, F. Lichtenberg, J. G. Bednorz, Phys. Rev. Lett. **76** 4845 (1996)
- [38] X. Tiefeng, B. Guiru, Z. Phys. B - Condensed Matter **89** 35 (1992)
- [39] M. Gładysiewicz, R. Gonczarek, M. Mulak, Acta Phys. Pol. **A97** 1039 (2000)
- [40] Y. Yokoya, Y. Oi Nakamura, Solid State Commun. **98** 133 (1996)
- [41] G. Litak, phys. stat. sol. (b) **229** 1427 (2002)
- [42] Jian-Xin Zhu, D. N. Sheng, C.S. Ting, Phys. Rev. Lett. **85** 4944 (2000)
- [43] S. Dorbolo, M. Houssa, M. Ausloos, Physica C **267** 24 (1996)
- [44] Y. Yokoya and Y. Oi Nakamura, Physica C **248** 83 (1995)

- [45] P. Udomsamuthirun, S. Ratanaburi, N. Seantalard, S. Yoksan, J. Superconductivity **9** 603 (1996)
- [46] R. Grassme and P. Seidel, J. Superconductivity **9** 619 (1996)
- [47] J. M. Getino, M. de Llano, H. Rubio, Phys. Rev. B **48** 597 (1993)
- [48] S. Takács, Phys. Rev. B **48** 593 (1994)
- [49] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London **276A** 238 (1963)
- [50] L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **30** 1058 (1956),
L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **32** 59 (1957)
- [51] V. P. Silin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **33** 1227 (1957)
- [52] J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **44** 7764 (1991)
- [53] H. Q. Lin, J. E. Hirsch, Phys. Rev. B **35** 3359 (1987)
- [54] K. Machida, M. Kato, Phys. Rev. B **36** 854 (1987),
K. Machida, M. Kato, Jpn. J. Appl. Phys. **26** L660 (1987)
- [55] M. Liu, D. Y. Xing, Z. D. Wang, Phys. Rev. B **55** 169 (1999)
- [56] M. R. Beasley, IEEE Trans. Appl. Supercond. **5** 141 (1995)
- [57] D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, W. C. Lee, D. M. Ginsberg, A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **71** 2134 (1993)
- [58] A. G. Sun, D. A. Gajewski, M. B. Maple, R. C. Dynes, Phys. Rev. Lett. **72** 2267 (1994)
- [59] J.R. Kirtley *et al.*, Nature **373** 225 (1995)
- [60] B. J. Radtke, M. R. Norman, Phys. Rev. B **50** 9554 (1994)
- [61] B. J. Radtke, K. Kevin, H. -B. Schüttler, R. Norman, Phys. Rev. B **48** 15957 (1993)
- [62] K. A. Müller, Nature **377** 133 (1995)
- [63] M. Takigwa, J.L. Smith, W. L. Hults, Phys. Lett. **52** 13611 (1995)
- [64] C. C. Tsuei *et al.*, Phys. Rev. B **52** 13611 (1995)
- [65] L. Chen, A. M. S. Tremblay, J. Phys. Chem. Solids **54** 1381 (1993)
- [66] R. Gonczarek, I. H. Krzyżanowski, Phys. Lett. A **171** 107 (1992)
- [67] C. C. Tsuei, J. R. Kirtley, Rev. Mod. Phys. **72** 969 (2000)
- [68] D. Quesada, R. Pena, C. Trallero-Giner, Physica C **322**, 1381 (1993)
- [69] E. A. Pashitskii, V. I. Pentegov, E. Abraham, JETP Lett. **67** 495 (1998)

- [70] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Shrieffer, Phys. Rev. **106** 162 (1957),
J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Shrieffer, Phys. Rev. **108** 1175 (1957)
- [71] J. Bok, Physica C **209** 107 (1993)
- [72] J. M. Getino *et al.*, Phys. Rev. B **48** 597 (1993)
- [73] R. Gonczarek, M. Gładysiewicz, M. Mulak, Int. J. Phys. Rev. B **15** 491 (2001)
- [74] R. Gonczarek, M. Gładysiewicz, M. Mulak, phys. stat. sol. (b) **233** 351 (2002)
- [75] M. Pfitzner, P. Wölffe, J. Low Temp. Phys. **51** 535 (1983)
- [76] W. Kumala, R. Gonczarek, phys. stat. sol. (b) **197** K11 (1996)
- [77] R. Gonczarek, M. Mulak, Acta Phys. Pol. **A86** 929 (1994)
- [78] W. Kumala, R. Gonczarek, Acta Phys. Pol. **A93** 539 (1998)
- [79] R. Gonczarek, M. Mulak, W. Kumala, Acta Phys. Pol. **A95** 231 (1999)
- [80] W. Kumala, R. Gonczarek, M. Mulak, Acta Phys. Pol. **A97** 693 (2000)
- [81] N. M. Matwiejew, *Metody całkowania równań różniczkowych zwyczajnych* Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1972
- [82] W. I. Smirnow, *Matematyka wyższa*, Tom II, Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa 1966
- [83] R. Gonczarek, M. Mulak, Phys. Lett. A **251** 262 (1999)
- [84] M. Gładysiewicz, R. Gonczarek, M. Mulak, Acta Phys. Pol. **A101** 865 (2002)
- [85] M. Mulak, R. Gonczarek, Acta Phys. Pol. **A89** 689 (1996)
- [86] M. Mulak, R. Gonczarek, Acta Phys. Polon. **A92** 1177 (1997)
- [87] R. Gonczarek, M. Mulak, phys. stat. sol. (b) **208** 457 (1998)
- [88] R. Gonczarek, M. Krzyżosiak, phys. stat. sol. (b) **000** xxx (2003)
- [89] C. P. Enz, Phys. Rev. B **54** 3589 (1996)
- [90] J. E. F. Assad, M. Imada, D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **77** 4592 (1996)
- [91] J. Yu, A. J. Freeman, J. H. Xn, Phys. Rev. Lett. **58** 1035 (1997)
- [92] A. J. Leggett, Phys. Rev. A **140** 1869 (1965)
- [93] A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. **47** 331 (1975)
- [94] L. Force, J. Bok, Solid State Commun. **85** 975 (1993)

