

Streszczenie

W niniejszej rozprawie przeprowadzono rozważania dotyczące uniwersalnych aspektów parowania trypletowego zaindukowanego regułą Hunda w dwupasmowym modelu Hubbarda na sieci kwadratowej. Dwa fizycznie różne obszary parametrów zostały przeanalizowane z osobna. Pierwszy z nich to tak zwany region oddziaływań przyciągających, który odnosi się do sytuacji, gdy międzyorbitalne wewnątrzatomowe odpychanie kulombowskie jest mniejsze od całki oddziaływań wymiennych typu Hunda ($U' < J$), natomiast dla drugiego z nich mamy do czynienia z czysto odpychającymi oddziaływaniami ($U' > J$).

W pierwszej części rozprawy rozważano sytuację, w której $U' < J$. Za pomocą przybliżenia Hartree-Focka (HF) połączonego z podejściem Bardeena-Coopera-Schrieffera (BCS) wyznaczone zostały diagramy fazowe, zawierające obszary stabilności fazy nadprzewodzącej, a także fazy nadprzewodzącej współlistniejącej z ferromagnetyzmem lub antyferromagnetyzmem. Przeanalizowany został wpływ międzywęzłowej hybrydyzacji na stabilność rozważanych faz, a także na zależność temperaturę momentu magnetycznego i przerwy nadprzewodzącej. Dzięki przedstawionemu podejściu diagramy fazowe wyznaczone wcześniej i zawierające jedynie fazy o uporządkowaniu magnetycznym zostały uzupełnione o obszary stabilności faz sparowanych trypletowo. Jak wynika z przeprowadzonej analizy, niezerowe namagnesowanie może wystąpić poniżej progu Stonera, jeśli faza ferromagnetyczna współlistnieje z nadprzewodnictwem, co z kolei prowadzi do konkluzji, że nadprzewodnictwo trypletowe typu A1 wspomaga uporządkowanie ferromagnetyczne.

W celu przeanalizowania wpływu korelacji międzyelektronowych na rozważane fazy użyto tzw. statystycznie konsystentego przybliżenia Gutzwillera (SGA), które zostało opracowane w ostatnich latach. Wyniki otrzymane w ramach przybliżeń HF oraz SGA są często podobne z jakościowego punktu widzenia. Główna różnica polega na tym, że dla metody SGA obszar stabilności fazy nadprzewodzącej typu A1 z fazą ferromagnetyczną nie występuje, natomiast jest on obecny gdy obliczenia przeprowadzi się zgodnie z przybliżeniem HF.

Następnie, odkryto, iż faza nadprzewodząca oraz faza antyferromagnetyczna współlistniejąca z nadprzewodnictwem, mogą być stabilne dla obszaru parametrów, który odpowiada czysto odpychającym oddziaływaniam, gdy obliczenia przeprowadzone są zgodnie z metodą SGA. W przybliżeniu Hartree-Focka fazy nadprzewodzące nie występują dla tego obszaru parametrów, co prowadzi do stwierdzenia, że korelacje międzyelektronowe wraz z regułą Hunda odgrywają najistotniejszą rolę w stabilizacji nadprzewodnictwa trypletowego. Co więcej, pomimo że w rozważanym modelu występują jedynie oddziaływania wewnątrzwęzłowe, to parowanie trypletowe ma charakter międzywęzłowy w stanie skorelowanym, co z kolei prowadzi do przerwy nadprzewodzącej zależnej od wektora falowego \mathbf{k} (extended s-wave).

W ostatniej części rozprawy, rozważany jest problem zachowania średniej ilości cząstek przy wykonywaniu projekcji Gutzwillera wielocząstkowej funkcji falowej. Zaproponowano modyfikacje poprzednio użytej metody SGA, która polega na dodaniu wyrazu do Hamiltonianu efektywnego, który to wyraz wymusza zachowanie średniej ilości cząstek bez wprowadzania odpowiednich współczynników wariacyjnych Fukushimy (fugacity factors) w operatorze projekcji Gutzwillera. Pokazano, że zaproponowana modyfikacja prowadzi do silnej redukcji wartości przerwy nadprzewodzącej w sytuacjach, dla których nadprzewodnictwo trypletowe jest silne. Niemniej jednak, trendy jakościowe pozostają bez zmiany. Konkludując metoda SGA może zostać uznana za realistyczną do zastosowania do konkretnych materiałów, które wymagają jednak odrębnej analizy ilościowej.

Abstract

In this Thesis the universal aspects of the Hund's-rule induced spin-triplet pairing are analyzed within the two-band extended Hubbard model for the case of square lattice. In the presented considerations, two physically distinct regions of parameters have been singled out. Namely, the so-called attractive-interaction regime when the intraatomic interorbital Coulomb repulsion magnitude is smaller than the Hund's coupling ($U' < J$) and the purely repulsive-interaction regime ($U' > J$).

First, the emphasis is placed on the $U' < J$ regime for which the phase diagram is calculated with the use of the Hartree-Fock (HF) approximation combined with the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) approach. Within this treatment the stable pure superconducting phase, as well as coexistent with either ferromagnetism or antiferromagnetism are obtained. Influence of the intersite hybridization on the stability of the paired phases, as well as the temperature dependences of both the magnetic moment and the superconducting gaps are discussed. The approach supplements the diagrams established earlier which now contain not only magnetically ordered phases, but also the spin-triplet paired states treated on equal footing. According to the performed calculations, the nonzero magnetization can appear slightly below the Stoner threshold when it is induced by the onset of the paired phase which leads to the conclusion that the spin-triplet pairing of A1 type enhances the magnetism.

To analyze the influence of interelectronic correlations, the so-called statistically consistent Gutzwiller approximation (SGA), which has been developed recently, is used for the same model. The results obtained within the HF and SGA methods are often similar from the qualitative point of view. The main difference is that in the SGA the region of stability of the spin-triplet paired phase coexisting with ferromagnetism is absent, whereas it appears in the HF-BCS situation.

Next, it was discovered that for the purely repulsive interactions regime the spin-triplet paired phases, both pure and coexisting with antiferromagnetism, can become stable but only when the calculations are performed within the SGA method. The absence of the stable paired states in that regime within the HF approximation shows explicitly, that the electron correlations, in conjunction with the Hund's-rule exchange, play a crucial role in stabilizing the spin-triplet superconducting state. Furthermore, even though the model contains only the intrasite interactions, an intersite pairing appears in the correlated regime that leads to the k -dependent superconducting gap (extended s -wave).

Finally, the problem of the average particle number conservation with respect to the Gutzwiller projection operation is discussed. A modification of the previously used method (SGA) is proposed and consists of inclusion of an additional term in the effective Hamiltonian which enforces the conservation of the average particle number when carrying out the Gutzwiller projection, without introducing the so-called fugacity factors in the projection operator. It is shown, that this modification leads to a significant reduction of the superconducting gap in the situation when the pairing is strong. Nevertheless, the qualitative trends remain the same. Concluding, it is claimed that the SGA method can be regarded as a realistic method of approach also when extended to concrete materials, which should be analyzed separately.