

AUTOREFERAT

Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów

Michał Zegrodnik

Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii
Akademia Górniczo-Hutnicza im. St. Staszica
w Krakowie

10 kwiecień 2019

Spis treści

1	Dane personalne	5
2	Posiadane dyplomy, stopnie naukowe – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej	5
3	Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych	5
4	Wskazanie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego	7
4.1	Wprowadzenie	8
4.2	Cel	10
4.3	Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe w ujęciu jednopasmowym (prace [H1, H2])	11
4.4	Wpływ efektów międzyplaszczynowych na podstawowe własności fazy nadprzewodzącej (praca [H3])	17
4.5	Uporządkowanie ładunkowe, nematyczność oraz faza antyferromagnetyczna w jednopasmowych modelach kupratów (prace [H4, H5, H6])	19
4.6	Nadprzewodnictwo w modelu trój-pasmowym kupratów (praca [H7])	26
4.7	Spontaniczne nadprzewodnictwo typu FFLO w modelu nadprzewodników na bazie żelaza (prace [H8, H9])	29
4.8	Podsumowanie	32
4.9	Literatura	34
5	Pozostałe osiągnięcia naukowo–badawcze	40
5.1	Przed uzyskaniem stopnia doktora nauk fizycznych	40
5.2	Po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych	41

Autoreferat

1 Dane personalne

Imię i nazwisko **Michał Zegrodnik**

Miejsce zatrudnienia Akademia Górniczo–Hutnicza im. St.Staszica
Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii
al. Mickiewicza 30
30-059 Kraków

Telefon +48 12 617 52 51

E-mail michal.zegrodnik@agh.edu.pl

ORCID 0000-0001-5801-5174

2 Posiadane dyplomy, stopnie naukowe – z podaniem nazwy, miejsca i roku ich uzyskania oraz tytułu rozprawy doktorskiej

Doktor nauk fizycznych 2013
Akademia Górniczo–Hutnicza im. St.Staszica w Krakowie, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Tytuł pracy **Nadprzewodnictwo niekonwencjonalne w skorelowanych ferromagnetykach pasmowych**
(obrona z wyróżnieniem)

Promotor Prof. dr hab. Józef Spałek

Recenzenci Prof. dr hab. Karol Wysokiński
Prof. dr hab. Maciej Maśka

Magister inżynier fizyki technicznej 2008
Akademia Górniczo–Hutnicza im. St.Staszica w Krakowie, Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej

Tytuł pracy **Poziomy energetyczne molekuly mionowej helu i wodoru wyznaczone metodą biegunów macierzy rozpraszania**

Promotor Dr Wilhelm Czapliński

Recenzent Dr hab. inż. Bartłomiej Spisak

3 Informacje o dotychczasowym zatrudnieniu w jednostkach naukowych

od 11/2015 adiunkt
Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii,
Akademia Górniczo–Hutnicza im. St.Staszica
w Krakowie

11/2013 – 11/2015 asystent
Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii,
Akademia Górniczo–Hutnicza im. St.Staszica
w Krakowie

4 Wskazanie osiągnięcia naukowego stanowiącego podstawę postępowania habilitacyjnego

Jako osiągnięcie naukowe w rozumieniu art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. 2016 r. poz. 882 ze zm. w Dz. U. z 2016 r. poz. 1311) przedstawiam cykl 9 powiązanych tematycznie publikacji:

- [H1] J. Spałek, M. Zegrodnik, J. Kaczmarczyk. “Universal properties of high- temperature superconductors from real-space pairing: t- J - U model and its quantitative comparison with experiment”. *Phys. Rev. B* **95** (2017), 024506.
- [H2] M. Zegrodnik, J. Spałek. “Universal properties of high-temperature superconductors from real-space pairing: Role of correlated hopping and intersite Coulomb interaction within the t - J - U model”. *Phys. Rev. B* **96** (2017), 054511.
- [H3] M. Zegrodnik, J. Spałek. “Effect of interlayer processes on the superconducting state within the t - J - U model: Full Gutzwiller wave-function solution and relation to experiment”. *Phys. Rev. B* **95** (2017), 024507.
- [H4] M. Zegrodnik, J. Spałek. “Stability of the coexistent superconducting-nematic phase under the presence of intersite interactions”. *New J. Phys.* **20** (2018), 063015.
- [H5] M. Abram M. nd Zegrodnik, J. Spałek. “Antiferromagnetism, charge density wave, and d -wave superconductivity in the extended t - J - U model: role of intersite Coulomb interaction and a critical overview of renormalized mean field theory”. *J. Phys. Condens. Matter* **29** (2017), 365602.
- [H6] M. Zegrodnik, J. Spałek. “Incorporation of charge- and pair-density-wave states into the one-band model of d-wave superconductivity”. *Phys. Rev. B* **98** (2018), 155144.
- [H7] M. Zegrodnik, A. Biborski, M. Fidrysiak, J. Spałek. “Superconductivity in the three-band model of cuprates: Variational wave function study and relation to the single-band case”. *Phys. Rev. B* **99** (2019), 104511.
- [H8] M. Zegrodnik, J. Spałek. “Spontaneous appearance of nonzero-momentum Cooper pairing: Possible application to the iron-pnictides”. *Phys. Rev. B* **90** (2014), 174507.
- [H9] M. Zegrodnik, J. Spałek. “Spontaneous Appearance of the Spin-Triplet Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov Phase in a Two-Band Model: Possible Application to $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ ”. *J. Supercond. Nov. Magn.* **28** (2015), 1155.

obejmujący oryginalne prace badawcze pod wspólnym tytułem:

“Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe oraz inne stany o złamanej symetrii w układach silnie skorelowanych elektronów”.

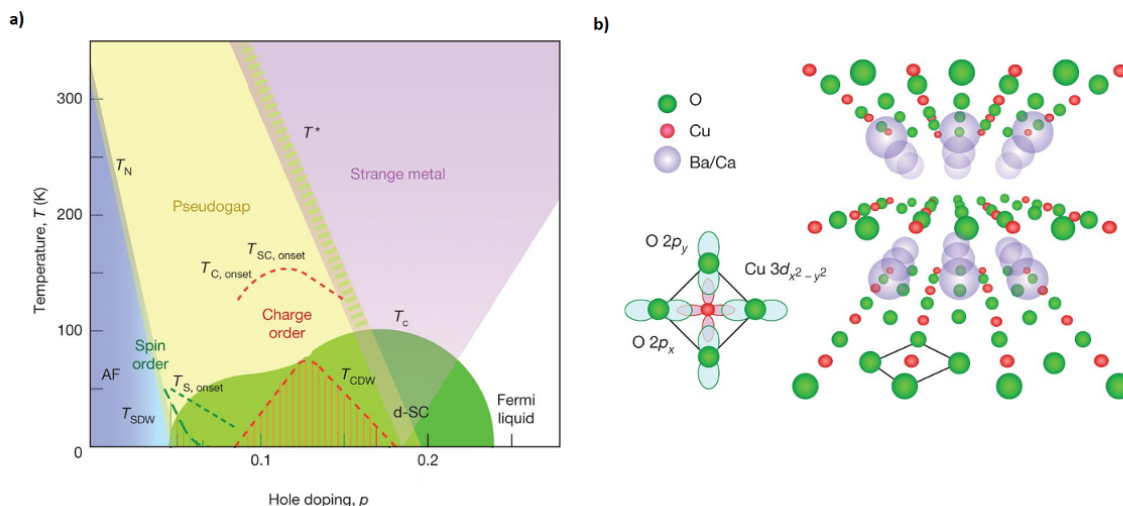
Szczegółowe omówienie prac składających się na cykl publikacji będących podstawą wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego

4.1 Wprowadzenie

Opis teoretyczny nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie miedzi od wielu lat pozostaje przedmiotem intensywnych badań. Podstawowe pytania pozostające bez definitywnej odpowiedzi dotyczą mikroskopowego mechanizmu powstawania niekonwencjonalnych faz obserwowanych we wspomnianych związkach, a także minimalnego modelu, który pozwoliłby na odtworzenie ich fundamentalnych własności fizycznych. Trudności związane ze sformuowaniem prawidłowego ujęcia teoretycznego wynikają w dużej mierze z faktu, iż miedziany zaliczyć należy do materiałów silnie skorelowanych, w których energia oddziaływań elektronowych jest większa od wkładu pochodzącego od energii kinetycznej. Ta okoliczność, która jest powodem komplikacji w opisie formalnym jednocześnie czyni kupraty tak interesującą rodziną materiałów z bogatym diagramem fazowym (por. rys.1a). Jak zostało ustalone, związki macierzyste (nie domieszkowane) miedzianów są antyferromagnetycznymi izolatorami ładunkowymi (*charge transfer insulators* [1]) z temperaturą Neéla wynoszącą od 240 K do 420 K [2]. Na skutek domieszkowania, układ przechodzi do fazy z uporządkowaniem kolejno spinowym (SDW–*spin-density wave*) oraz ładunkowym (CDW–*charge-density wave*), a także fazą nadprzewodzącą występującą w przedziale domieszkań dziurowych $\delta \lesssim 0.35$ z domieszkowaniem optymalnym $\delta \approx 0.1 - 0.2$, dla którego temperatura krytyczna osiąga wartość maksymalną [3, 4, 5]. Jak ustalono w ostatnich latach, w obszarze niskich domieszkań występować może faza nadprzewodząca z modulacją gęstości par Coopera (PDW–*pair-density wave*) o wektorze modulacji zgodnym z tym określającym periodyczność fali gęstości ładunku [6]. Ponadto, dla temperatur powyżej temperatury krytycznej obserwuje się występowanie tak zwanego stanu pseudoprzerwy [7]. Do tej pory nie udało się sformułować podejścia teoretycznego, które w jednolity sposób opisałoby wszystkie wymienione fazy i zjawiska im towarzyszące. Jednocześnie, nie jest jasne czy mamy do czynienia z sytuacją, w której cała różnorodność obserwacji fizycznych daje się wytłumaczyć w oparciu o jeden mechanizm. Ze względu na zasadniczą rolę oddziaływań kulombowskich w układzie zasadnym wydaje się przeanalizować sytuację, w której to one indukują zarówno nadprzewodnictwo, jak i inne interesujące nas zjawiska [8, 9, 10]. Niemniej jednak należy nadmienić, że istnieją alternatywne podejścia, w których przykładowo antyferromagnetyczne fluktuacje spinowe prowadzą do formowania się par Coopera w obszarze słabych korelacji [11]. Ponadto, mimo niekonwencjonalnego charakteru fazy nadprzewodzącej rozważa się również scenariusz, w którym klasyczne oddziaływanie fononowe odgrywa zasadniczą rolę w tworzeniu się fazy nadprzewodzącej [12, 13, 14].

Rodzina związków na bazie miedzi posiada strukturę warstwową, tj. składającą się z płaszczyzn miedziowo-tlenowych (1,2,3, lub więcej w komórce elementarnej) przedzielonych tzw. rezerwuaem ładunkowym o różnym składzie, w zależności od konkretnego materiału (por. rys. 1b). Uważa się, że to właśnie fizyka płaszczyzn miedziowo-tlenowych determinuje ciekawe własności kupratów oraz określa postać ich diagramu fazowego. Duża wartość całki oddziaływań kulombowskich odpowiadająca niezapełnionym powłoką $3d$ atomów miedzi powoduje, że użycie szeroko stosowanych metod *ab initio* (jak np. DFT) nie prowadzi do odtworzenia podstawowych własności fizycznych. Z drugiej jednak strony metody dedykowane do układów skorelowanych cechują się wysokim stopniem złożoności, co ogranicza ich stosowalność jedynie do uproszczonych modeli i/lub układów o znacząco ograniczonym rozmiarze. Dlatego bardzo ważnym elementem badań teoretycznych jest określenie modelu minimalnego na tyle prostego aby było możliwe uwzględnienie korelacji z odpowiednią dokładnością, a przy tym zawierającego te stopnie swobody, które odpowiedzialne są za powstanie interesujących nas zjawisk.

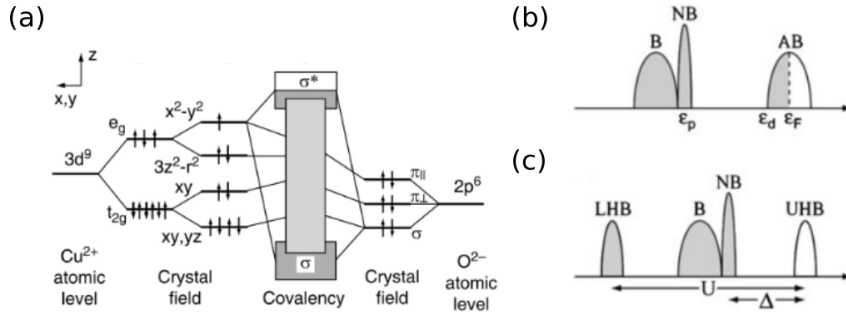
Najszerzej stosowane podejście opiera się o efektywny Hamiltonian jednopasmowy dla pojedynczej płaszczyzny Cu-O, w którym rolę kwazicząstek stanowią stany singletowe Zhanga-Ricea [15]. W ramach paradygmatu silnych korelacji, jednym z kanonicznych modeli jest model t -



Rysunek 1: a) Diagram fazowy nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie miedzi (kupratów/miedzianów) dla przypadku domieszkowania dziurowego; b) struktura krystaliczna kupratów z widocznymi płaszczyznami miedziowo-tlenowymi (czerwone oraz zielone kulki) oraz warstwą rezerwuaru ładunku (szare sfery), której skład zależy od konkretnego związku. Rysunki zaczerpnięte z pracy [3].

J [16, 1], gdzie wyraz oddziaływań wymiennych $\sim J$ pojawia się na skutek wyprojektowania tych konfiguracji elektronowych, które wiążą się ze wzrostem energii oddziaływania kulombowskiego na atomach miedzi. Szacowana teoretycznie całka wymiany przybiera wartość $J = 0.1 - 0.16$ eV [1], co dobrze zgadza się z pomiarami rozpraszania ramanowskiego [17, 18, 19] oraz nieelastycznego rozpraszania neutronów [20] dla związków macierzystych (nie domieszkowanych). Na poziomie teorii *renormalizowanego pola średniego* (RMFT) [21, 22] model t - J prowadzi w naturalny sposób do stabilności fazy nadprzewodzącej. Kolejnym modelem, jaki wzbudził zainteresowanie w kontekście nadprzewodników na bazie miedzi, jest model Hubbarda [23, 24], który jednak wymaga bardziej zaawansowanych metod obliczeniowych, aby można było otrzymać stabilność nadprzewodnictwa. Ta różnica wynika z faktu, że w modelu t - J korelacje parujące uwzględnione są już na poziomie samego Hamiltonianu za pośrednictwem kinetycznej wymiany, natomiast w przypadku modelu Hubbarda wspomniane korelacje muszą zostać uwzględnione przez wybraną metodę obliczeniową, co wymaga wyjścia poza *teorie renormalizowanego pola średniego*. Podejście jednopasmowe oparte w. w. modele było również analizowane w kontekście fazy antyferromagnetycznej [25, 26], z falą gęstości spinu [27, 28, 29] oraz falą gęstości ładunku [30, 31, 32]. Ponadto, ze względu na obserwowaną zależność pomiędzy temperaturą krytyczną, a ilością płaszczyzn Cu-O w komórce elementarnej rozważa się też modele mające na celu analizę wpływu procesów międzypłaszczyznowych na właściwości stanu nadprzewodzącego [33, 34, 35, 36, 37]. Podejście łączące cechy zarówno modelu t - J jak i Hubbarda opiera się o tak zwany model t - J - U rozpracowany w serii naszych prac [H1, H3, H2, H5, H6]. W ramach takiego opisu występuje zarówno wyraz wymienny $\sim J$, jak i dopuszczalna jest mała ilość podwójnych obsadzeń określona przez wartość całki oddziaływań kulombowskich, U .

Jednopasmowy obraz fizyki miedzianów, pomimo swojej prostoty, doprowadził do odtworzenia wybranych własności obserwowanych w tej rodzinie związków. Niemniej jednak, należy pamiętać, że tlenowe stopnie swobody płaszczyzny Cu-O, w ramach takiego opisu, uwzględnione są jedynie w sposób efektywny. Jednocześnie badania eksperymentalne pokazują, że domieszkowane dziury obsadzają głównie stany tlenowe [40], natomiast dobranie odpowiedniej proporcji pomiędzy obsadzeniami nośników na atomach miedzi oraz tlenu oraz zmniejszenie wartości energii dzielącej poziom atomowy orbitali miedziowych i tlenowych, ma zasadnicze znaczenie dla zmaksymalizowania temperatury krytycznej [41, 42, 43]. Te fakty skłaniają do przeprowadzenia



Rysunek 2: a) Rozszczepienie poziomów energetycznych dla konfiguracji $3d^9$ atomów miedzi oraz $2p^6$ atomów tlenu w płaszczyźnie Cu-O spowodowane polem krystalicznym oraz efektem Jahn-Tellera. Silne wiązania kowalencyjne tworzą stany $2p_\sigma$ atomów tlenu oraz $3d_{x^2-y^2}$ atomów miedzi wewnątrz płaszczyzny xy , które wchodzi w skład Hamiltonianu trzy-pasmowego nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie miedzi. b) Na skutek hybrydyzacji stanów $2p_\sigma$ oraz $3d_{x^2-y^2}$ powstają pasma antywiązące (AB), niewiązące (NB) oraz wiążące (B). c) Po uwzględnieniu roli silnego oddziaływania kulombowskiego pasmo AB rozszczepia się na górne oraz dolne podpasmo Hubbarda, co z kolei prowadzi do stanu izolatora z przerwą $\Delta \approx 1 - 2$ eV. Rysunki zaczerpnięte z pracy [38, 39].

analizy teoretycznej mającej na celu określenie w jaki sposób tlenowe stopnie swobody wpływają na fizykę kupratów. Najprostszy model, który można rozważyć w takim kontekście składa się z orbitali $3d_{x^2-y^2}$ atomów miedzi, a także orbitali $2p_x$ oraz $2p_y$ atomów tlenu. Na skutek hybrydyzacji stanów $2p_\sigma$ oraz $3d_{x^2-y^2}$ powstaje częściowo wypełnione pasmo antywiązące (AB) oraz w pełni zajęte pasma niewiązące (NB) i wiążące (B). Po uwzględnieniu roli silnego oddziaływania Coulomba pasmo AB rozszczepia się na górne oraz dolne podpasma Hubbarda, co z kolei prowadzi do stanu izolatora z przerwą $\Delta \approx 1 - 2$ eV dla związku macierzystego (rys. 2). Badania teoretyczne nad modelem trójpasnowym pokazały, że możliwe jest odtworzenie stanu izolatora z transferem ładunku dla układu macierzystego [44, 45, 46] oraz, podobnie jak w przypadku obrazu jednopasmowego, antyferromagnetyzm występuje dla niskich domieszkowań, natomiast typowa struktura obszaru nadprzewodzącego występuje dla domieszkowań $\delta \approx 0.05 - 0.3$ [47, 48]. Podobieństwo między dwoma podejściami zostało uwypuklone w pracy [49], natomiast zgodnie z niektórymi analizami uwzględnienie stanów tlenowych prowadzi do zasadniczych zmian w fizyce modelu [50, 51].

4.2 Cel

W ramach badań przedstawionych w niniejszym autoreferacie nacisk kładziony był głównie na opis teoretyczny fazy nadprzewodzącej, jak również faz antyferromagnetycznej oraz z falą gęstości ładunku w kontekście rodziny związków na bazie miedzi. Celem badań było odtworzenie szeregu podstawowych cech fizycznych miedzianów w ramach jednolitego opisu opartego o paradygmat silnych korelacji elektronowych (z uwzględnieniem oddziaływań kinetycznej wymiany) zgodnie z którym oddziaływania kulombowskie są źródłem interesujących nas zjawisk. W takim ujęciu ważne jest aby z odpowiednią dokładnością uwzględnić korelacje elektrone. W tym celu nowatorska metoda *diagramatycznego rozwinięcia funkcji falowej Gutzwillera* (DE-GWF, *diagrammatic expansion of the Gutzwiller wave function*) została rozszerzona w zasadniczy sposób co umożliwiło przeprowadzenie szczegółowej analizy wybranych modeli oraz niekonwencjonalnych faz. Podejście oparte o DE-GWF pozwala na wyjście poza szeroko stosowaną *teorię zrenormalizowanego pola średniego* (RMFT) w systematyczny sposób poprzez uwzględnienie nielokalnych korelacji o zwiększonym zasięgu w wyższych rzędach (zerowy rząd rozwinięcia jest równoważny z RMFT). Ponadto podejście to jest wydajne z punktu widzenia

numerycznego oraz nie jest ograniczone do małych układów, a także nie wiąże się z problemem znaku (takie ograniczenia występują w metodach opartych o techniki Monte Carlo). Te cechy pozwalają na przeprowadzenie kompleksowych badań biorących pod uwagę różne warianty stosowanych modeli oraz skanując szeroki zakres zmienności parametrów mikroskopowych.

W pierwszej kolejności przeanalizowano kilka modeli jednopasmowych aby wyszczególnić ten, w ramach którego w możliwie najlepszy sposób można odwzorować podstawowe obserwacje eksperymentalne dotyczące fazy nadprzewodzącej (podrozdział 4.3). Następnie, dla wybranego w ten sposób modelu (model t - J - U) przeprowadzono analizę wpływu efektów międzypłaszczyznowych na stan sparowany dla układu dwuwarstwy miedziowo-tlenowej (podrozdział 4.4). Kolejno, badania zostały skierowane w stronę pozostałych faz o złamanej symetrii, które obserwowane są w miedzianach (podrozdział 4.5). Mianowicie, analizie poddane zostały fazy antyferromagnetyczna, nematyczna (z możliwą koegzystencją z nadprzewodnictwem), jak również fazy z uporządkowaniem ładunkowym oraz falą gęstości par Coopera. To pozwoliło stworzyć dość kompletny obraz diagramu fazowego miedzianów w ramach jednolitego podejścia jednopasmowego, w którym przyczyną łamania symetrii dla poszczególnych faz są zjawiska kolektywne zaindukowane oddziaływaniami międzyelektronowymi, uwzględnionymi w wyższych rzędach rozwinięcia diagramatycznego (metoda DE-GWF). Ponadto, ze względu na wspomniane już wcześniej ograniczenia pojawiające się w opisie jednopasmowym, po raz pierwszy rozszerzono podejście oparte o DE-GWF na przypadek modelu trójpasmowego, który w sposób jawny uwzględnienia tlenowe stopnie swobody. Otrzymane w ten sposób wyniki przeanalizowano w kontekście dostępnych danych eksperymentalnych, a także porównano dwa stosowane podejścia (jedno- oraz trój-pasmowe) w celu oceny poprawności opisu efektywnego opartego o pojedyncze skorelowane pasmo (rozdział 4.6).

Prowadzone badania nad niekonwencjonalnym nadprzewodnictwem doprowadziły również do zaproponowania nietypowej fazy sparowanej typu Fulde-Ferrel-Larkin-Owczynnikowa (FFLO), która może występować spontanicznie, tj. bez konieczności przykładania zewnętrznego pola magnetycznego. Warunkiem koniecznym jest obecność kanału parowania międzypasmowego oraz odpowiedni stopień niedopasowania pomiędzy dwoma płatami powierzchni Fermiego, które biorą udział w parowaniu. Zaproponowany pomysł został przetestowany w oparciu model opisujący nadprzewodniki wysokotemperaturowe na bazie żelaza [52], ze względu na wielopasmowy charakter stanu nadprzewodzącego jaki występuję w przypadku tej grupy związków. Tak zwane żelazowce w wielu aspektach przypominają kupraty. To znaczy nadprzewodnictwo również stabilizują się na skutek domieszkowania związku macierzystego, a dla stosunkowo niskich domieszkowań układ cechują się uporządkowaniem magnetycznym. Nie mniej jednak związki na bazie żelaza uznaje się za słabiej skorelowane elektronowo niż kupraty oraz cechują się inną symetrią przerwy. Celem przeprowadzonej analizy było zweryfikowanie czy struktura pasmowa wybranego związku pozwala na stabilizację zaproponowanego stanu. Jedną z interesujących cech rozważanej koncepcji jest możliwość otrzymania materiału, w którym płynie prąd nadprzewodzący przy braku zewnętrznego czynnika w postaci pola magnetycznego lub elektrycznego. Wyniki przeprowadzonej analizy opisano w rozdziale 4.7.

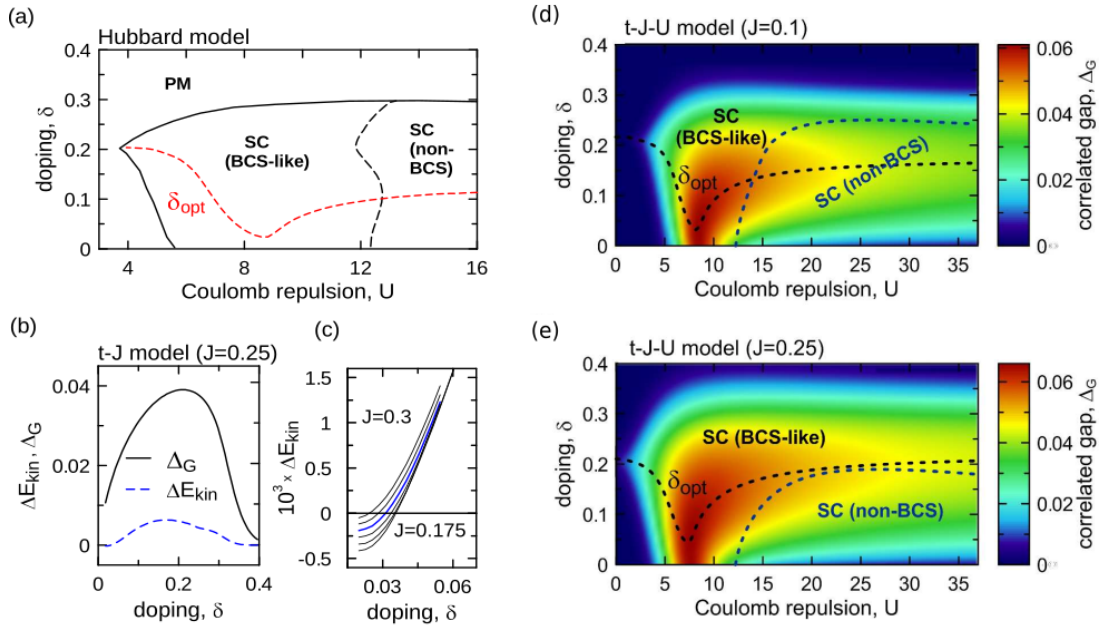
4.3 Nadprzewodnictwo wysokotemperaturowe w ujęciu jednopasmowym (prace [H1, H2])

W tym podrozdziale przedstawione zostaną wybrane wyniki badań mających na celu szczegółową analizę podstawowych własności fazy nadprzewodzącej przy użyciu różnych wariantów podejścia jednopasmowego do opisu płaszczyzn Cu-O wraz z ilościowym odniesieniem do eksperymentu (prace [H1, H2]). Celem tych badań było wyszczególnienie modelu jednopasmowego najlepiej nadającego się do opisu fazy nadprzewodzącej poprzez porównanie wyników teoretycznych z dostępnymi danymi eksperymentalnymi.

W pierwszej kolejności analizie poddane zostały modele Hubbarda, t - J oraz t - J - U (praca [H1]). Ogólna postać Hamiltonianu, która w różnych wariantach odpowiada trzem modelom przedstawiona jest poniżej.

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j, \quad (1)$$

gdzie $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ ($\hat{c}_{i\sigma}$) to operatory kreacji (anihilacji) cząstki w efektywnym ujęciu jednopasmowym. Sumy primowane oznaczają $i \neq j$ natomiast $\langle i, j \rangle$, $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ odnoszą się odpowiednio do najbliższych oraz kolejnych najbliższych sąsiadów, z całkami przeskoków $t = -0.35$ eV oraz $t' = 0.25|t|$. Dwa pierwsze wyrazy reprezentują model Hubbarda z wyrazem kinetycznym oraz silnym odpychaniem kulombowskim nawęzłowym. Natomiast trzeci wyraz reprezentuje antyferromagnetyczne oddziaływanie kinetycznej wymiany. Taka postać Hamiltonianu nazywana jest modelem t - J - U . Dla przypadku $J = 0$ dostajemy model Hubbarda, natomiast w limicie zerowych podwójnych obsadzeń, $d_G^2 \rightarrow 0$ ($U \rightarrow \infty$) otrzymujemy model t - J [16, 53]. Aby w odpowiednio dokładny sposób uwzględnić korelacje elektronowe zaindukowane znaczącą wartością odpychania kulombowskiego ($U \gg |t|$), zastosowana została metoda diagramatycznego rozwinięcia funkcji falowej Gutzwillera (*diagrammatic expansion of the Gutzwiller wave function*, DE-GWF), która uwzględnia korelacje elektronowe o zwiększonym zasięgu w wyższych rzędach rozwinięcia. Dla porównania, w wybranych przypadkach wykonano również obliczenia w oparciu o zerowy rząd rozwinięcia diagramatycznego, który jest równoważny metodzie zrenormalizowanego pola średniego (RMFT). W prezentowanych wynikach energie podane są w jednostkach $|t|$.



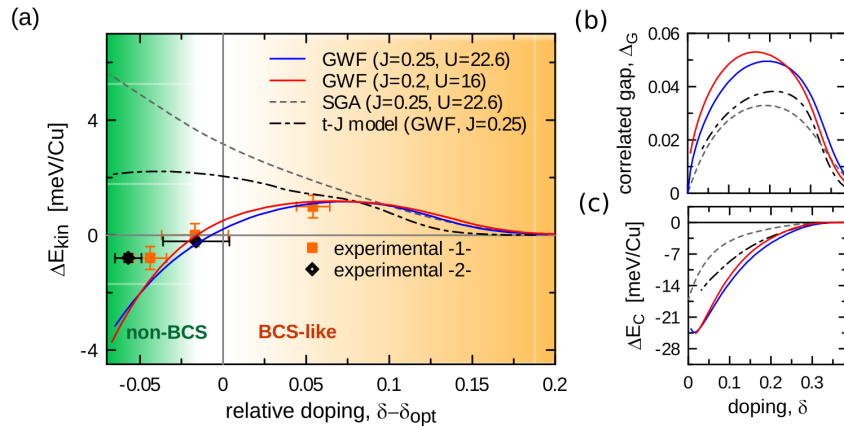
Rysunek 3: (a) Diagram fazowy na płaszczyźnie (δ, U) otrzymany dla przypadku modelu Hubbarda z widocznymi obszarami stabilności fazy nadprzewodzącej (SC) oraz paramagnetycznej (PM); (b,c) Amplituda skorelowanej przerwy nadprzewodzącej (Δ_G) oraz wkład do energii kondensacji pochodzący od energii kinetycznej ΔE_{kin} dla modelu t - J , dla wybranych wartości J ; (d,e) Diagramy fazowe dla modelu t - J - U dla dwóch wybranych wartości całki J . Na wykresach (a,d,e) zaznaczono wartości domieszekowań odpowiadające maksimum amplitudy nadprzewodzącej (domieszekowanie optymalne, δ_{opt}). Faza nadprzewodząca typu “non-BCS”, dla której $\Delta E_{\text{kin}} < 0$ pojawia się w obszarze $\delta < \delta_{\text{opt}}$ dla modelu t - J - U z $J = 0.25$ co jest zgodne z obserwacjami eksperymentalnymi [54, 55, 56] (e). Rysunki zaczerpnięto z pracy [H1].

Metoda DE-GWF posłużyła do sporządzenia diagramów fazowych na płaszczyźnie (U, δ) , dla podstawowych modeli jednopasmowych (rys. 3). Otrzymane wyniki teoretyczne zostały w pierwszej kolejności zweryfikowane w oparciu o znane dane eksperymentalne dotyczące przedzia-

lu stabilności fazy nadprzewodzącej, wartości domieszkowania optymalnego (δ_{opt}) oraz występowania fazy sparowanej typu “*non-BCS*” oraz “*BCS-like*”. Dwie ostatnie charakteryzują się odpowiednio negatywną i pozytywną wartością wkładu energii kinetycznej do energii kondensacji

$$\Delta E_{\text{kin}} \equiv E_{G|0}^{SC} - E_{G|0}^{PM}, \quad E_{G|0} \equiv \frac{1}{N} \sum'_{ij\sigma} t_{ij} \langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle_G, \quad (2)$$

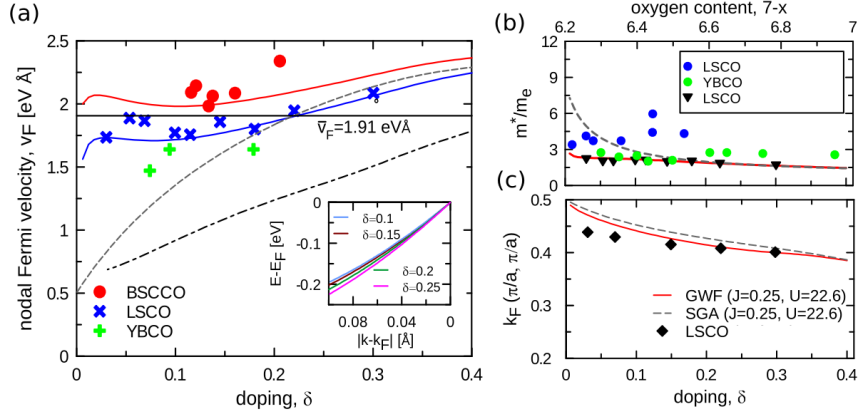
gdzie $E_{G|0}^{SC}$ oraz $E_{G|0}^{PM}$ oznaczają odpowiednio energie kinetyczną w stanie nadprzewodzącym oraz paramagnetycznym. Jak zostało wyznaczone w oparciu o pomiary przewodności optycznej dla miedzianów [54, 55, 56], w okolicy domieszkowania optymalnego następuje przejście pomiędzy dwoma reżimami, przy czym obszar typu “*non-BCS*” ($\Delta E_{\text{kin}} < 0$) występuje po stronie niskich domieszkowań ($\delta < \delta_{\text{opt}}$). Jak widać z rys. 3, wszystkie trzy modele w obszarze silnych korelacji ($U \gtrsim 10$) prowadzą do stabilności fazy nadprzewodzącej w przedziale domieszkowań $\delta \lesssim 0.35$, z domieszkowaniem optymalnym $\delta_{\text{opt}} \approx 0.1 - 0.2$, który odpowiada maksymalnej wartości przerwy skorelowanej, Δ_G . Taki wynik zgadza się dość dobrze z rezultatem eksperymentalnym [4, 1]. Różnice pojawiają się jednak, jeżeli chodzi o występowanie faz nadprzewodzących “*non-BCS*” oraz “*BCS-like*”. Mianowicie, zarówno model Hubbarda (a) jak i t - J (b,c) nie prowadzą do przejścia pomiędzy dwoma reżimami dla domieszkowań bliskich δ_{opt} . Natomiast takie przejście otrzymuje się dla modelu t - J - U z odpowiednio dużą wartością U ($U \gtrsim 20$) oraz $J \approx 0.25$ (e). Należy zauważyć, że wartości te odpowiadają tym, które wynikają z wcześniejszych oszacowań dla odpychania kulombowskiego oraz całki wymiany między atomami miedzi w płaszczyźnie Cu-O [57, 58, 59, 1]. Jak pokazano na rys. 4 (a), dla wybranych dwóch zestawów parametrów modelu t - J - U daje się bardzo dobrze dopasować wyliczone wartości ΔE_{kin} do dostępnych danych eksperymentalnych [54]. Należy zauważyć, że ten sam model nie daje podobnej zgodności jeżeli w obliczeniach uwzględnimy jedynie zerowy rząd rozwinięcia, co wskazuje, że dopiero uwzględnienie wyrazów wyższego rzędu pozwala na odtworzenie niekonwencjonalnego charakteru stanu nadprzewodzącego w rozważanym podejściu.



Rysunek 4: (a) Wkład do energii kondensacji pochodzący od energii kinetycznej dla wybranych dwóch zestawów parametrów modelu t - J - U (niebieska oraz czerwona krzywa). Dane eksperymentalnie zaczerpnięte zostały z Ref. [54]. Dodatkowo wykreślono również wyniki dla modelu t - J - U ale w zerowym rzędzie rozwinięcia (szara przerywana krzywa dla metody SGA, która jest modyfikacją RMFT) oraz dla modelu t - J (czarna przerywana krzywa), w wyższych rzędach; (b,c) skorelowana przerwa nadprzewodząca oraz energia kondensacji dla takich samych parametrów oraz modeli jakie wykreślone są w (a). Dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi otrzymano jedynie dla modelu t - J - U przy uwzględnieniu wyższych rzędów rozwinięcia diagramatycznego. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H1].

Kolejną charakterystyczną cechą kupratów jest bardzo słaba zależność prędkości Fermiego w kierunku nodalnym oraz masy efektywnej od domieszkowania [60, 61, 62, 63]. Bezpośrednie porównanie wyników obliczeń z dostępnymi danymi eksperymentalnymi przedstawione jest na

rys. 5. Podobnie jak w poprzednim przypadku najlepsza zgodność występuje dla modelu t - J - U z tymi samymi wartościami parametrów modelu co na rys. 4. Dodatkowo wyznaczone wartości pędu Fermiego dla poszczególnych poziomów domieszkowań pokrywają się stosunkowo dobrze z odpowiednikami eksperymentalnymi [rys. 5 (c)]. Należy zauważyć, że w obszarze wysokich domieszkowań, gdzie korelacje elektronowe stają się coraz słabsze z powodu dużej ilości dziur w układzie, zarówno podejście RMFT jak i DE-GWF dają zbliżone wyniki.



Rysunek 5: Nodalna prędkość Fermiego (a) względna masa efektywna (b) oraz pęd fermiego (c) w zależności od domieszkowania wyznaczone dla tych samych parametrów oraz modeli co na rys. 4 (oznaczenia krzywych również są takie same). Bardzo dobrą zgodność z eksperymentem otrzymano dla modelu t - J - U przy użyciu metody DE-GWF. Na rys. Dane eksperymentalne zostały wzięte z prac [62, 63, 60, 61, 4]. Dodatkowo, wstawka na Rys. (a) przedstawia obliczoną relację dyspersji w pobliżu punktu nodalnego. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H1].

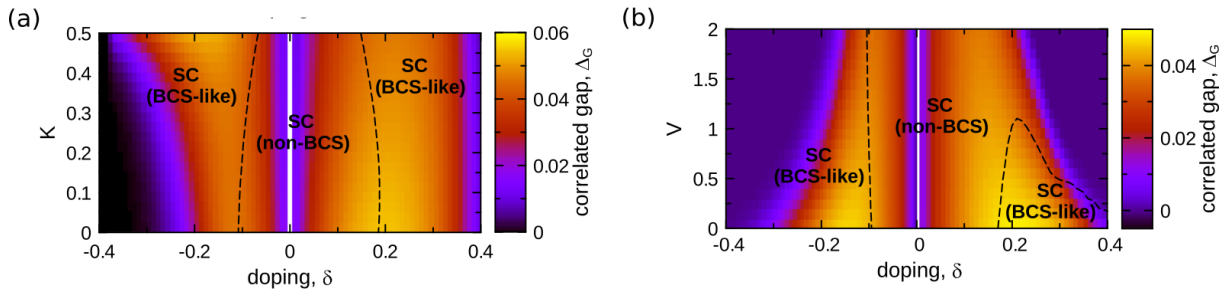
Z przeprowadzonej analizy trzech podstawowych modeli jednopasmowych wynika, że najlepsze dopasowanie do eksperymentu otrzymuje się dla modelu t - J - U z uwzględnieniem wyższych rzędów rozwinięcia diagramatycznego. Niemniej jednak, w ramach takiego podejścia wciąż zaniebuje się część procesów dwuwęzłowych, które potencjalnie mogą prowadzić do zmiany obrazu fizycznego. Dlatego też na dalszym etapie badań przeanalizowano wpływ dwóch podstawowych wyrazów oddziaływań, które w większości prowadzonych rozważań są zaniebywane (praca [H3]). Mianowicie, w rozważanym wcześniej Hamiltonianie t - J - U uwzględniono dodatkowo wyraz skorelowanego przeskoku elektronów oraz wyraz międzywęzłowego odpychania Kulomba, które zamieszczone są poniżej,

$$\hat{H}_K = \sum_{\langle ij \rangle \sigma} K (\hat{n}_{i\bar{\sigma}} + \hat{n}_{j\bar{\sigma}}) \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}, \quad \hat{H}_V = V \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j. \quad (3)$$

Ten pierwszy wynika z pozadiagonalnych elementów macierzowych odpychania Kulombowskiego pomiędzy najbliższymi sąsiadami z całą oddziaływania $K_{ij} = \langle \mathbf{i} | V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{j} \rangle$. Jak zostało pokazane we wcześniejszych badaniach może on prowadzić do stabilizacji stanu nadprzewodzącego już na poziomie teorii pola średniego [64, 65]. Z kolei przewiduję się, że drugi wyraz ($V_{ij} = \langle \mathbf{i} | V(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | \mathbf{j} \rangle > 0$) będzie miał negatywny wpływ na nadprzewodnictwo jako, że podwyższa energię związaną z konfiguracją odpowiadającą międzywęzłowej parze Coopera. Na tym etapie badań rozszerzono przedział domieszkowań, który poddany jest analizie na przypadek domieszkowań elektronowych ($\delta < 0$).

Jak widać na rys. 6, dla modelu t - J - U poszerzonego o wspomniane wyrazy po stronie elektronowej nadprzewodnictwo jest słabsze (skorelowana przerwa przyjmuje mniejsze wartości) oraz zajmują węższy przedział domieszkowania, co odtwarza jakościowo sytuację eksperymentalną [39]. Skorelowany hopping poszerza obszar stabilności fazy nadprzewodzącej głównie po stronie domieszkowań elektronowych oraz nieznacznie przesuwają domieszkowanie odpowiadające

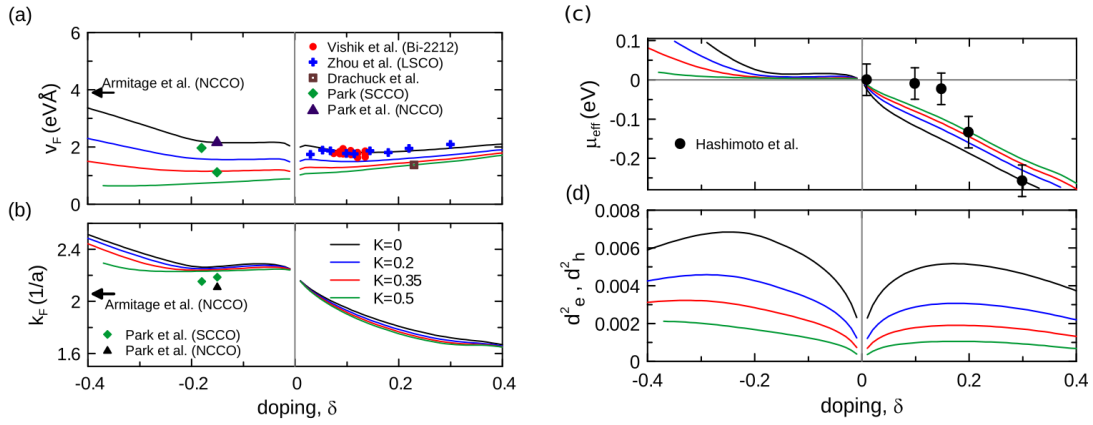
przejściu pomiędzy obszarami “*non-BCS*” oraz “*BCS-like*” w stronę $\delta = 0$. Natomiast, międzywęzłowe odpychanie kulomba zgodnie z oczekiwaniami wpływa negatywnie na nadprzewodnictwo zmniejszając wartość górnego krytycznego domieszkowania. Wykonane obliczenia pokazują, że zarówno skorelowany hopping jak i międzywęzłowe odpychanie kulombowskie nie mają zasadniczego wpływu na obraz fizyczny nadprzewodnictwa w ujęciu jednopasmowym, odpowiednio dla $K \lesssim 0.2$ oraz $V < 1.0$. Ponadto, w tym obszarze parametrów zmniejszenie górnego krytycznego domieszkowania wywołane obecnością wyrazu $\sim V$ poprawia zgodność z wartością eksperymentalną, nie wpływając negatywnie na inne aspekty opisu. Należy wspomnieć, że wykonane obliczenia dla modelu Hubbarda, rozszerzonego o wyraz skorelowanego hoppingu, już dla wartości $K \approx 0.1$ pokazywały nietypowy przebieg skorelowanej przerwy nadprzewodzącej w funkcji domieszkowania (z możliwością wystąpienia separacji faz), co nie odpowiada sytuacji eksperymentalnej.



Rysunek 6: Skorelowana przerwa nadprzewodząca w funkcji domieszkowania oraz całki skorelowanego hoppingu (a), a także całki międzywęzłowych oddziaływań kulombowskich (b), dla modelu t - J - U z parametrami $U = 21$ oraz $J = 0.25$. Skorelowany hopping nie wpływa zasadniczo na obraz fizyczny stanu nadprzewodzącego w obszarze $K \lesssim 0.2 - 0.3$ (a), natomiast międzywęzłowe odpychanie Coulomba wpływa negatywnie na nadprzewodnictwo zmniejszając górne krytyczne domieszkowanie na tworzenie się fazy SC (b). Rysunki zaczerpnięto z pracy [H2].

Podobnie jak dla czystego modelu t - J - U , również dla przypadku modelu rozszerzonego wyznaczono charakterystyki związane z kwazicząstkową relacją dyspersji. Tym razem, dla pełnego zakresu domieszkowań oraz dla przypadku z $K \neq 0$. Wpływ skorelowanego hoppingu na wartość potencjału chemicznego oraz pędu Fermiego jest niewielki. Porównanie otrzymanych wartości pędu Fermiego z eksperymentem dla domieszkowań dziurowych zostało już pokazane wcześniej (rys. 5). Natomiast, niewielka ilość danych pomiarowych dla domieszkowań elektronowych [66, 67] dobrze zgadza się z wynikami obliczeń teoretycznych. Zmierzone wartości przesunięcia potencjału chemicznego w LSCO [4] również dobrze zgadzają się z teorią w obszarze $\delta > \delta_{\text{opt}} \approx 0.2$. Dla $\delta < \delta_{\text{opt}}$ odstępstwa są bardziej widoczne. Ze wzrostem wartości parametru K prędkość Fermiego w kierunku nodalnym maleje. Niemniej jednak, wciąż przyjmuje wartości, które mieszczą się w granicach wyznaczonych na podstawie dostępnych danych eksperymentalnych [66, 67]. W szczególności, dla $K \lesssim 0.35$ słaba zależność v_F od domieszkowania jest zachowana.

Podsumowując, przedstawione w tym rozdziale wyniki badań wskazują że spośród analizowanych modeli jednopasmowych tym, który pozwolił na najlepszą zgodność z eksperymentem jest model t - J - U . W połączeniu z metodą DE-GWF pozwala on na odwzorowanie podstawowych uniwersalnych własności fizycznych stanu nadprzewodzącego w związkach na bazie miedzi. Mianowicie, (i) wyznaczona teoretycznie skorelowana amplituda parowania odzwierciedla strukturę “domu” nadprzewodzącego (ang. *superconducting dome*), z górnym domieszkowaniem krytycznym wynoszącym $\sim 0.35 - 0.4$ oraz domieszkowaniem optymalnym $\sim 0.1 - 0.2$, co zgadza się dość dobrze z obrazem eksperymentalnym; (ii) obserwuje się asymetrię pomiędzy “domem” nadprzewodzącym po stronie domieszkowań elektronowych oraz dziurowych, na korzyść tych drugich, tak jak to ma miejsce w rodzinie związków na bazie miedzi; (iii) otrzymano przejście pomiędzy



Rysunek 7: Prędkość Fermiego w kierunku nodalnym (a), wektor falowy Fermiego (b), potencjał chemiczny (c) oraz podwójne obsadzenia dziurowe oraz elektronowe (d) w zależności od domieszkowania dla modelu t - J - U ($U = 21$, $J = 0.25$) z uwzględnieniem wyrazu skorelowanego hoppingu dla wybranych wartości parametru K . Dane eksperymentalne zaczerpnięte z prac [66, 67, 68, 62, 69, 4]. Rysunki zaczerpnięte z pracy [H3].

stanem sparowanym typu “*non-BCS*” oraz “*BCS-like*” w okolicach domieszkowania optymalnego, z fazą typu “*non-BCS*” mieszczącą się w obszarze poddomieszkowania (ang. *underdoped*) - ilościowa zgodność z eksperymentem dla $\Delta E_{\text{kin}}(\delta)$; (iv) obliczona prędkość Fermiego w kierunku nodalnym, pęd Fermiego oraz masa efektywna słabo zależą od domieszkowania i zgadzają się ilościowo z dostępnymi danymi doświadczalnymi.

Należy zwrócić uwagę, że zgodność we wszystkich wyżej wymienionych aspektach zachodzi dla pojedynczego zestawu parametrów modelu. Mianowicie, całki przeskoków elektronów mają wartości typowe dla kupratów oraz są zbliżone do tych, które zostały wyznaczone w ramach wcześniejszych badań na drodze obliczeń *ab initio* oraz dopasowania powierzchni Fermiego do sytuacji eksperymentalnej [1]. Całka oddziaływań wymiennych antyferromagnetycznych (J) w ramach naszego podejścia wynika z nadwymiany pomiędzy orbitalami miedziowymi typu $3d_{x^2-y^2}$ poprzez stany tlenowe $2p_{\sigma}$. Wcześniejsze obliczenia na klastrach dały wartość $J = 0.1 - 0.13$ eV, natomiast wyznaczona wartość całki kulombowskiego odpychania na orbitalach typu d atomów miedzi przyjmuje wartość $U = 7 - 10$ eV. Obie wartości są zbliżone do tych, dla których otrzymaliśmy zgodność w ramach modelu t - J - U ($J = 0.09$ eV oraz $U = 8$ eV). Co równie ważne, otrzymany obraz fizyczny stanu nadprzewodzącego jest zachowany dla modelu rozszerzonego o kolejne dwuwęzłowe wyrazy oddziaływań (skorelowany hopping oraz międzywęzłowe odpychanie Coulomba), a niezbędne składowe opisu teoretycznego są zawarte już na poziomie czystego modelu t - J - U . Dwie podstawowe cechy jakie charakteryzują takie podejście to obecność wyrazu oddziaływań wymiennych (występuje również w modelu t - J) oraz dozwolone niezerowe podwójne obsadzenia, których wartość jest jednak niewielka ze względu na silne odpychanie Coulomba. Przy wartości $U \sim 8$ eV oraz $d^2 \sim 10^{-2}$ otrzymujemy wkład energetyczny pochodzący od wyrazu Coulomba $Ud^2 \lesssim 80$ meV. Ponadto całka oddziaływań wymiennych $J \sim 90$ meV oraz szacowania dla energii kinetycznej $4|t| \approx 140$ meV dla $\delta = 0.1$ (okolice domieszkowania optymalnego). Z takiego szacowania widać, że dla niezerowych domieszkowań sytuacja modelowa odpowiada prawdziwie skorelowanemu stanowi, w którym każdy z trzech czynników odgrywa istotną rolę. Ze wzajemnego oddziaływania wszystkich trzech, przy jednoczesnym uwzględnieniu korelacji elektronowych w wyższych rzędach rozwinięcia diagramatycznego, wyłania się niekonwencjonalny charakter stanu nadprzewodzącego jaki prowadzi do zgodności z podstawowymi obserwacjami eksperymentalnymi.

4.4 Wpływ efektów międzypłaszczyznowych na podstawowe własności fazy nadprzewodzącej (praca [H3])

Zgodnie z wynikami przedstawionymi w poprzednim rozdziale modelem jednopasmowym, który najlepiej odwzorowuje własności fizyczne nadprzewodnictwa w związkach na bazie miedzi, jest model t - J - U . Niemniej jednak, badania te ograniczały się do opisu pojedynczej płaszczyzny Cu-O. Jak wiadomo, w rodzinie związków na bazie miedzi istnieją układy posiadające więcej niż jedną płaszczyznę miedziowo-tlenową w komórce elementarnej, a temperatura krytyczna jest wprost proporcjonalna do ilości płaszczyzn dla $n \leq 3$ [70]. Dlatego, w kolejnym etapie badań przeprowadzono analogiczne obliczenia dla struktury składającej się z dwóch płaszczyzn, a uwaga skupiona była na analizie wpływu efektów międzypłaszczyznowych na kształt stanu nadprzewodzącego. Część wewnątrzpłaszczyznowa rozpatrywanego teraz Hamiltonianu określona jest przez model t - J - U zadany przez równanie (1). Natomiast międzypłaszczyznowa część przedstawiona jest poniżej

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{\perp} = & \sum_{ijl'l'\sigma}'' t_{ij}^{\perp} \hat{c}_{il\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j'l'\sigma} + \sum_{ijl'l'}'' J_{ij}^{\perp} \hat{\mathbf{S}}_{il} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{j'l'} + U'' \sum_{ijl'l'}'' (\hat{c}_{il\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j'l\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j'l'\downarrow} \hat{c}_{il'\uparrow} + \hat{c}_{il\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j'l\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{il'\downarrow} \hat{c}_{j'l'\uparrow}) \\ & + U' \sum_{ill'}'' \hat{c}_{il\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{il\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{il'\downarrow} \hat{c}_{il'\uparrow}, \end{aligned} \quad (4)$$

gdzie i, j indeksują węzły sieci wewnątrz płaszczyzn miedziowo-tlenowych, l, l' to indeksy numeryczne płaszczyzn ($l = 1, 2$), a sumy podwójnie primowane zawierają ograniczenia $i \neq j, l \neq l'$. Kolejne wyrazy reprezentują przeskoki elektronów między płaszczyznami, międzypłaszczyznowe oddziaływanie wymiany, a także przeskoki par elektronów nawęzłowe oraz międzywęzłowe.

Obecność wyrazów związanych z przeskocami elektronów pomiędzy płaszczyznami prowadzi do rozszczepienia powierzchni Fermiego na część odpowiadającą stanom wiążącym oraz antywiązącym. Wartości parametrów przeskoku dobrane są tak, aby część jednoczątkowa w przestrzeni odwrotnej miała postać [71]

$$\mathcal{H}_{\perp}^t = \sum_{\mathbf{k}ll'\sigma}'' \left[t_{bs} + \frac{t_z}{4} (\cos k_x - \cos k_y)^2 \right] \hat{c}_{\mathbf{k}l\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}l'\sigma}, \quad (5)$$

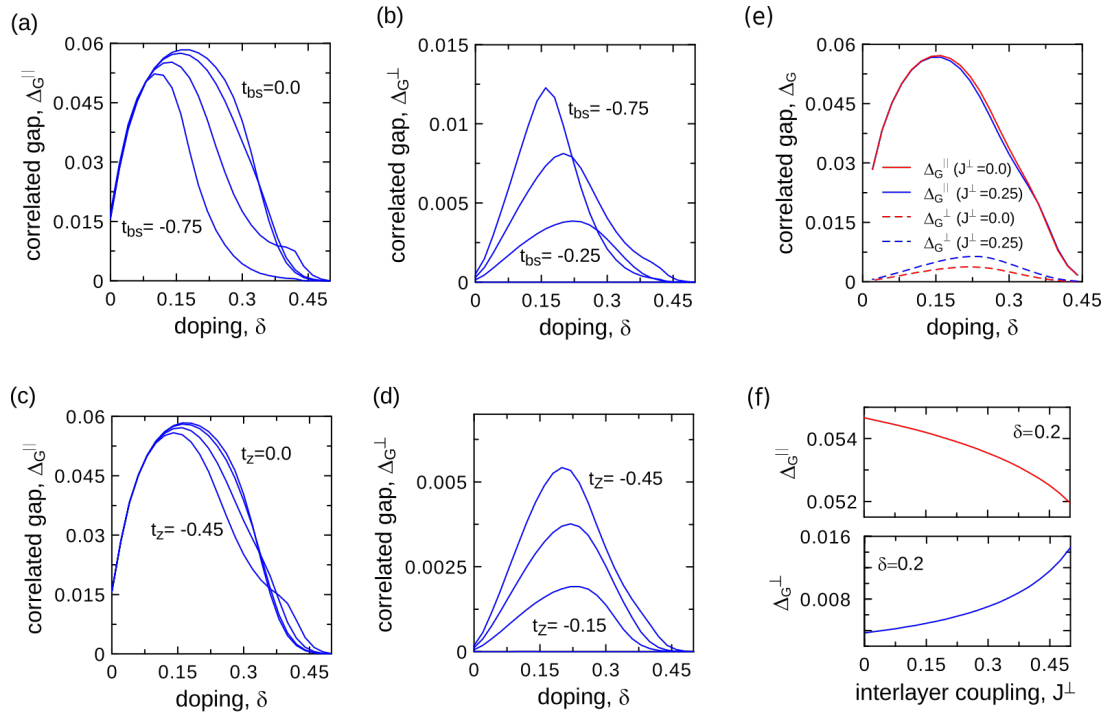
gdzie t_{bs} oraz t_z odpowiadają odpowiednio za izotropową oraz anizotropową część rozszczepienia powierzchni Fermiego. To drugie reguluje głównie rozszczepienie w kierunku antynodalnym, a to pierwsze w kierunku nodalnym. Ze względu na to, że wyraz $\sim U''$ ma charakter czterowęzłowy, to uwzględnienie go w ramach wyższych rzędów metody DE-GWF byłoby bardzo skomplikowane. Jednakże, wartość U'' jest niewielka w stosunku do U , dlatego uzasadnione jest uwzględnienie tego wyrazu tylko w zerowym rzędzie rozwinięcia.

W rozpatrywanym obecnie przypadku, poza parowaniem wewnątrz płaszczyzny, należy także uwzględnić międzypłaszczyznowe kanały parowania, które mogą prowadzić do odchyłek od czystej symetrii typu d - $wave$, jakie są obserwowane w niektórych eksperymentach [72, 73] oraz mogą mieć wkład do stabilności fazy nadprzewodzącej, a także modyfikować temperaturę krytyczną. W prowadzonych rozważaniach obrano wewnątrzpłaszczyznowe parowanie z symetrią typu d - $wave$ z domieszką międzypłaszczyznowego parowania typu s^{\pm} . Skorelowana przerwa nadprzewodząca w przestrzeni odwrotnej przyjmuje wtedy postać

$$\Delta_G(\mathbf{k}) = 2\Delta_G^{\parallel} (\cos k_x + \cos k_y) \pm \Delta_G^{\perp}, \quad (6)$$

gdzie znak \pm odpowiada wiążącej oraz antywiążącej części powierzchni Fermiego, a Δ_G^{\parallel} (Δ_G^{\perp}) to wewnątrzpłaszczyznowa (międzypłaszczyznowa) amplituda parowania w stanie skorelowanym.

Zgodnie z przeprowadzoną analizą niezerowe wartości Δ_G^{\perp} występują już dla przypadku $J^{\perp} = 0$, $U' = U'' = 0$, $t_{bs} \neq 0$, $t_z \neq 0$ (rys. 8 a, b, c, d). Zatem, międzypłaszczyznowy hopping wystarczy aby zaindukować międzypłaszczyznowe parowanie w układzie. Natomiast,

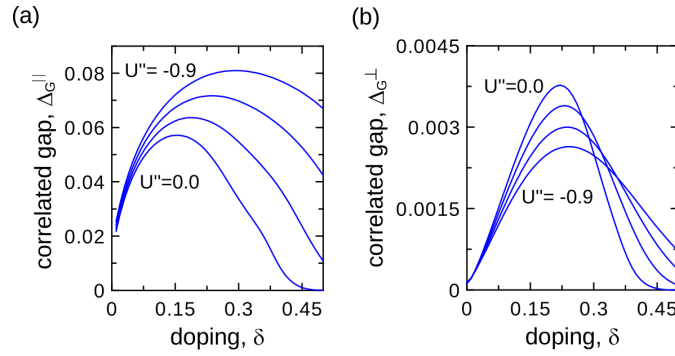


Rysunek 8: Skorelowane przerwy nadprzewodzące wewnątrzpłaszczyznowe (a,c) oraz międzypłaszczyznowe (b,d) w zależności od domieszkowania dla wybranych wartości międzypłaszczyznowego hoppingu izotropowego (t_{bs}) oraz anizotropowego (t_z) dla $J^\perp = 0$, $U' = U'' = 0$; (e) Δ_G^\perp oraz Δ_G^\parallel w zależności od domieszkowania dla $t_z = -0.3$, $t_{bs} = 0$, dla wybranych wartości J^\perp ; (f) Δ_G^\perp oraz Δ_G^\parallel w zależności od J^\perp dla wybranej wartości domieszkowania blisko domieszkowania optymalnego, $\delta = 0.2$. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H3].

efekt taki nie występuje w ramach obliczeń w zerowym rzędzie (RMFT), co po raz kolejny pokazuje znaczenie wyrazów wyższych rzędów rozwinięcia diagramatycznego na powstanie fazy nadprzewodzącej. Amplituda parowania międzypłaszczyznowego jest o rząd wielkości mniejsza od jej odpowiednika wewnątrzpłaszczyznowego (rys. 8), a maksima obu komponentów do parowania w układzie występują blisko siebie, zatem Δ^\perp nie powinna mieć znaczącego wpływu na obserwowaną w kupratach strukturę domu nadprzewodzącego. Zarówno anizotropowe jak i izotropowe rozszczenie powierzchni Fermiego wpływają podobnie na amplitudy parowania, zwiększając Δ_G^\perp oraz nieznacznie modyfikując Δ_G^\parallel , głównie dla obszaru dużych domieszkowań $\delta > \delta_{opt}$. Niemniej jednak, ogólny obraz przebiegu Δ_G^\parallel w funkcji domieszkowania jest zachowany i podobny jak w przypadku jednopłaszczyznowym (por. rys. 8 a, c oraz 4 b). Wpływ parowania międzypłaszczyznowego w realistycznym zakresie wartości parametru J^\perp również nie wpływa istotnie na dominujące w układzie parowanie wewnątrzpłaszczyznowe (rys. 8 e, f). Zgodnie z oczekiwaniami, wraz ze wzrostem J^\perp rośnie również Δ^\perp . Niemniej jednak, ta ostatnia wciąż przyjmuje stosunkowo małe wartości.

W przeciwieństwie do procesów analizowanych powyżej, międzypłaszczyznowe tunelowanie par Coopera stanowi czynnik, który w znaczący sposób wpływa na stabilność fazy nadprzewodzącej. Jak widać na rys. 9, wraz ze wzrostem $|U''|$ poszerza się obszar stabilności fazy nadprzewodzącej oraz rośnie maksymalna wartość wewnątrzpłaszczyznowej amplitudy parowania. Efekt ten jest wyraźny mimo, że wybrane wartości U'' są niewielkie w stosunku do obranego U . Zatem, w ramach takiego opisu wzrost wartości temperatury krytycznej dla materiałów z większą ilością płaszczyzn Cu-O w komórce elementarnej powinien być spowodowany głównie międzypłaszczyznowym tunelowaniem par Coopera.

W kolejnym etapie badań wybrano parametry modelu tak aby jak najlepiej dopasować się do



Rysunek 9: Skorelowane przerwy nadprzewodzące wewnątrzpłaszczyznowe (a) oraz międzypłaszczyznowe (b) w zależności od domieszkowania dla $t_{bs} = 0$, $t_z = -0.3$, $J^{\perp} = 0$ dla wybranych wartości U'' oddziaływania związanego z międzypłaszczyznowym tunelowaniem par, przebiegających przedział od 0.0 do -0.9 z krokiem 0.3 przy założeniu $U' = -2U''$. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H3].

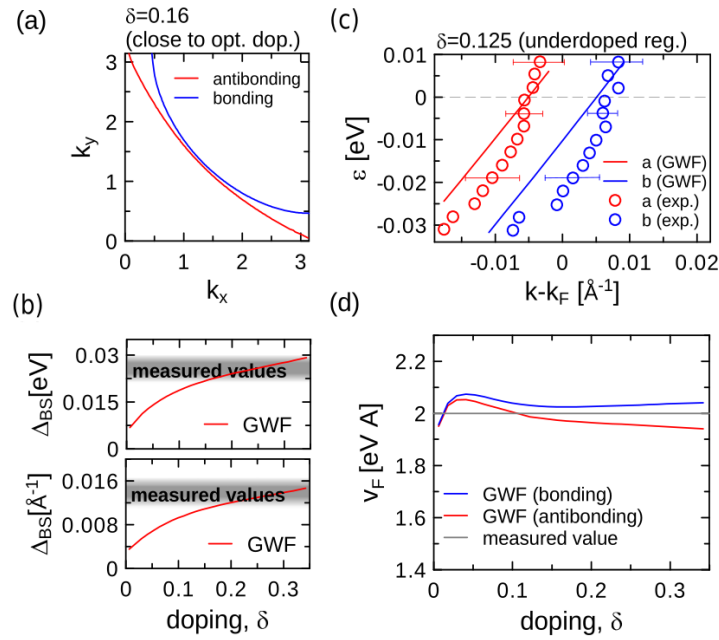
podstawowych charakterystyk mierzonych przez spektroskopie elektronową w stanie nadprzewodzącym w dwupłaszczyznowym związku Bi-2212 [60]. Jak widać z rysunku 10 (a), rozszczepienie powierzchni Fermiego ma charakter silnie anizotropowy, tak samo jak, to ma miejsce w eksperymencie [60]. Wartość rozszczepienia w kierunku nodalnym w obszarze $\delta > \delta_{opt}$ zgadza się z wartościami mierzonymi. Dla domieszkowań poniżej δ_{opt} , obliczona wartość Δ_{BS} spada, rozbiegając się z tym samym z wynikami eksperymentalnymi. Niemniej jednak, istnieją doniesienia eksperymentalne o całkowitym spadku Δ_{BS} poniżej domieszkowania optymalnego [74]. Ta rozbieżność pomiędzy różnymi zestawami wyników eksperymentalnych [60, 61, 74] z jednej strony oraz wynikami teoretycznymi z drugiej, wymaga dalszej analizy. Wyznaczone wartości prędkości Fermiego są bliskie tym mierzonym eksperymentalnie i wynoszą $\approx 2 \text{ eV}\text{\AA}$ zarówno dla części wiążącej oraz antywiążącej. Niestety, zgodnie z wiedzą autora nie ma dostępnych wyników pomiarów, które rozróżniałyby dwie prędkości Fermiego, dlatego niemożliwe jest bezpośrednie porównanie dla obu prędkości wyznaczonych dla modelu dwuwarstwy. Dobra zgodność została również otrzymana jeżeli chodzi o porównanie relacji dyspersji w pobliżu energii Fermiego dla wybranej wartości domieszkowania.

Podsumowując wyniki zamieszczone w tym podrozdziale, należy stwierdzić, że badania dla struktury dwuwarstwy miedziowo-tlenowej wskazują na to, że podstawowe własności stanu nadprzewodzącego, otrzymane w ramach opisu opartego o jednopasmowy model t - J - U , nie zmieniają się zasadniczo na skutek efektów międzypłaszczyznowych. Natomiast w układach z większą ilością warstw, wzrost temperatury krytycznej jest głównie spowodowany przez międzypłaszczyznowe przeskoکی par. Ponadto, dla modelu dwuwarstwy udało się otrzymać całkiem dobrą zgodność wyników teoretycznych z eksperymentalnymi dla związku Bi-2212, jeżeli chodzi o wielkości mierzone za pomocą kątowno rozdzielczej spektroskopii elektronowej (por. rys. 10).

4.5 Uporządkowanie ładunkowe, nematyczność oraz faza antyferromagnetyczna w jednopasmowych modelach kupratów (prace [H4, H5, H6])

W poprzednich rozdziałach przedstawione zostały podstawowe wyniki badań dotyczące fazy nadprzewodzącej w ujęciu jednopasmowym. W tym podrozdziale do analizy włączone zostaną pozostałe niekonwencjonalne stany o złamanej symetrii jakie obserwuje się w kupratkach oraz w wybranych przypadkach przeanalizowana zostanie możliwość ich współistnienia z nadprzewodnictwem.

Pierwszym rodzajem uporządkowania jakie zostanie omówione jest uporządkowanie nematyczne z możliwą koegzystencją z nadprzewodnictwem. Nematyczność wiąże się ze spontanicznym złamaniem symetrii obrotowej (C_4) z zachowaniem symetrii translacyjnej wynikającej z sieci

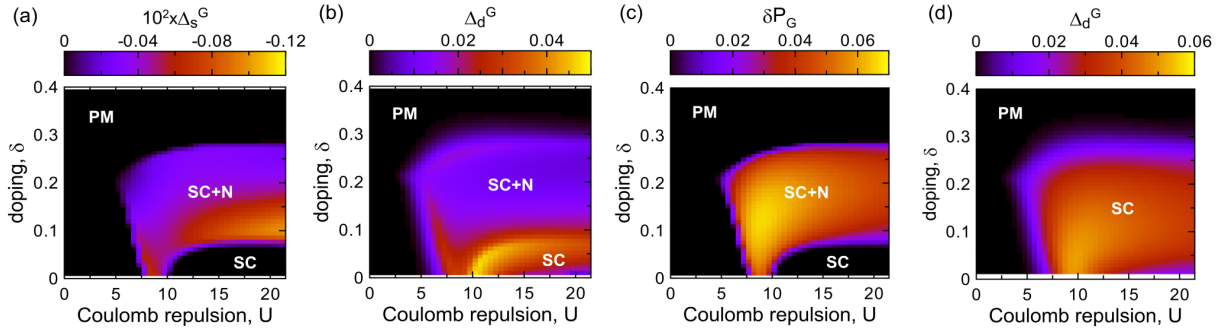


Rysunek 10: (a) Płaty powierzchni Fermiego dla wybranej wartości domieszkowania blisko domieszkowania optymalnego; (b) rozszczepienie powierzchni Fermiego w kierunku nodalnym w funkcji domieszkowania. Szare obszary reprezentują wartości mierzone eksperymentalnie [60]; (c) relacje dyspersji teoretyczne (linie) oraz eksperymentalne (kółka) [60] w funkcji domieszkowania; (d) nodalna prędkość Fermiego odpowiadająca pasmu wiążącemu oraz antywiązącemu w funkcji domieszkowania. Prezentowane wyniki zostały otrzymane dla parametrów $t' = 0.36$, $t_z = -0.15$, $t_{bs} = -0.06$, $U = 13.5$, oraz $J = 0.25$. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H3].

krystalicznej. Ponieważ w niektórych materiałach na badzie miedzi występuje mała dystorsja romboedryczna, to nie jest łatwo zidentyfikować nematyczność ze względu na fakt, że symetria C_4 jest złamana już przez samą sieć krystaliczną. Niemniej jednak, pomimo bardzo małej dystorsji, obserwuje się stosunkowo dużą anizotropię wielkości fizycznych [75, 76, 77]. To wskazuje, że anizotropia w związkach na bazie miedzi nie jest trywialną konsekwencją dystorsji sieci, a wynika raczej z podatności elektronowej funkcji falowej na spontaniczne złamanie symetrii C_4 , co może być indukowane korelacjami elektronowymi [78, 79]. Ta ostatnia hipoteza została przeanalizowana w pracy [H4] w ujęciu jednopasmowym za pomocą metody DE-GWF. Ponadto, podejrzewa się, że stan nematyczny może stanowić swego rodzaju prekursor przejścia do stanu z uporządkowaniem ładunkowym dla odpowiedniego przedziału domieszkowań oraz temperatur [78]. To powoduje, że nematyczność jest interesująca z punktu widzenia całości diagramu fazowego dla kupratów oraz innych faz w nich występujących.

Obliczenia dla modelu Hubbarda [Hamiltonian (1) z $J = 0$] zaprezentowane są na rys. 11 z typowymi dla kupratów całkami hoppingu $t = -0.35$ eV, oraz $t' = 0.25|t|$. Jak widać spontaniczne łamanie symetrii C_4 występuje w stosunkowo dużym obszarze diagramu fazowego, z niezerową wartością parametru porządku fazy nematycznej $\delta P_G = P_{1,0}^G - P_{0,1}^G \neq 0$, gdzie $P_{X,Y}^G = \langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle_G$ [por. rys. 11 (c)]. Niemniej jednak faza nematyczna współistnieje tam z fazą nadprzewodzącą, która w tym przypadku posiada mieszaną symetrię przerwy [s -wave (a) + d -wave (b)]. Jak widać amplituda typu s -wave jest dwa rzędy wielkości mniejsza od d -wave oraz przybiera niezerowe wartości tylko tam gdzie również δP_G jest niezerowe. Na Rys. 11 (d) przedstawiony jest wynik obliczeń dla przypadku gdy możliwość wystąpienia fazy nematycznej została zaniedbana. Z porównania Rys. 11 (b) oraz (d) widać, że nematyczność stosunkowo silnie negatywnie wpływa na nadprzewodnictwo typu d -wave. To wskazuje na konkurencję pomiędzy dwoma fazami (SC oraz N), która jednak nie jest na tyle silna aby jedna z faz całkowicie

zdominowała druga. To pozwala na występowanie znaczącego regionu koegzystencji.

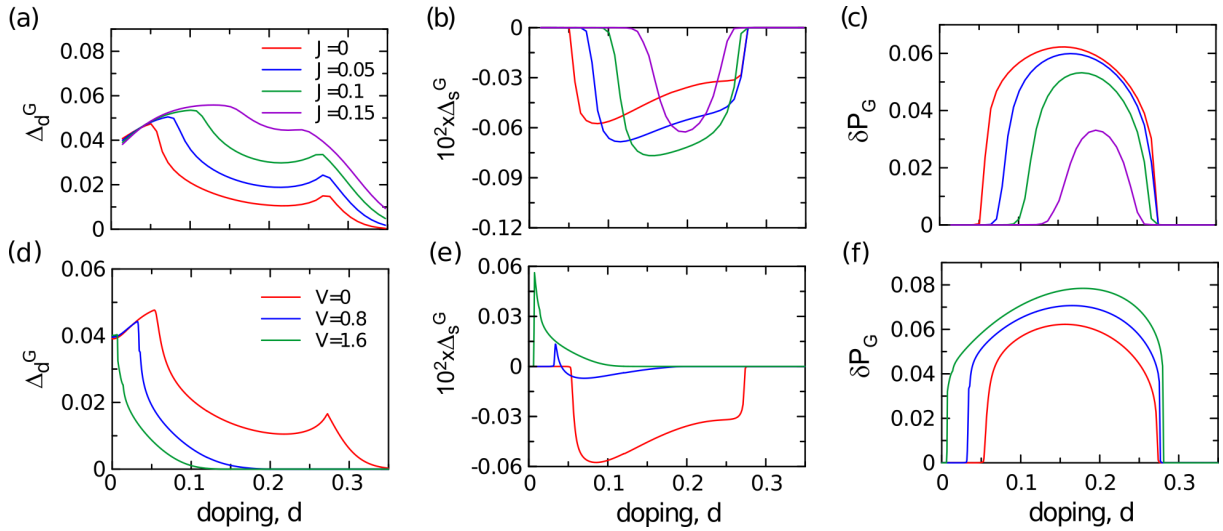


Rysunek 11: Amplitudy parowania odpowiadające za symetrie typu *s-wave* (a) oraz *d-wave* (b), a także parametr porządku fazy nematycznej (c) w funkcji domieszkowania oraz nawęzłowego odpychania Coulomba. Dodatkowo na rys. (d) przedstawiony jest przypadek bez uwzględnienia fazy nematycznej (tylko nadprzewodnictwo typu *d-wave*). Rysunki zaczerpnięto z pracy [H4].

Jak wynika z przeprowadzonej analizy, duży wpływ na konkurencję między fazami SC oraz N mają dwa wyrazy występujące w rozszerzonych wersjach Hamiltonianu jednopasmowego, które w tym względzie mają przeciwne działanie. Mianowicie, jak się okazało, wyraz wymienny $\sim J$ promuje fazę nadprzewodzącą kosztem fazy nematycznej. Rysunki 12 (a), (b) oraz (c) pokazują jak redukuje się obszar, w którym otrzymuje się niezerowy parametr porządku fazy nematycznej δP_G wraz ze wzrostem całki J . Ponadto, amplituda parowania typu *d-wave* rośnie, a ta odpowiadająca symetrii typu *s-wave* maleje, gdy zwiększamy J . W szczególności, dla zestawu parametrów modelu (w takim przypadku modelu *t-J-U*), dla którego otrzymano zgodność z eksperymentem jeżeli chodzi o czystą fazę nadprzewodzącą (patrz por. rozdział 4.3), faza nematyczna jest całkowicie usunięta z diagramu fazowego przez wyraz $\sim J$. Efekt odwrotny otrzymuje się dla przypadku wyrazu międzywęzłowego oddziaływania Coulomba [por. rysunki 12 (d), (e) oraz (f)], który promuje fazę nematyczną kosztem nadprzewodnictwa. To powoduje, że dla znaczących wartości parametru V nematyczność może wciąż wystąpić w modelu *t-J-U-V* (por. rys. 5 z pracy [H4]).

Ponadto zbadano, że wpływ wyrazu odpowiadającemu tak zwanym skorelowanym przeskokom elektronów na omawiane zjawiska nie jest znaczący w przedziale sięgającym stosunkowo dużych wartości stałej K ($K \lesssim 1$) (por. rys. 6 w pracy [H4]). Dla kompletności wykonano również obliczenia dla różnych przypadków struktury elektronowej, która charakteryzowana jest przez parametr t' [rys. 4 (b), (d), (f) w pracy [H4]]. Jego wartość może różnić się nieznacznie dla różnych związków z rodziny miedzianów. Wraz ze zmniejszaniem t' górna krytyczna wartość domieszkowania na wystąpienie nematyczności zmniejsza się, podczas gdy ogólny obraz faz nematycznej oraz nadprzewodzącej w rozważanych modelach nie zmienia się.

Należy zwrócić uwagę, że w obecnej analizie rozważano sieć kwadratową bez dystorsji romboedrycznej. To znaczy, że obserwowany efekt tworzenia się fazy nematycznej, a także jej koegzystencja z nadprzewodnictwem w odpowiednim zakresie parametrów, mają charakter czysto spontaniczny oraz są skutkiem silnych korelacji elektronowych zaindukowanych odpychaniem kulombowskim. Podobnie jak w przypadku fazy nadprzewodzącej, również tutaj zasadnicze znaczenie mają wyrazy wyższego rzędu rozwinięcia diagramatycznego, a obliczenia w zerowym rzędzie (które są równoważne z RMFT) nie prowadzą do stabilności fazy nematycznej. W tym sensie wykonana analiza wspiera hipotezę, że efekty wyższych rzędów wynikające z korelacji elektronowych prowadzą do podatności elektronowej funkcji falowej względem łamania symetrii C_4 . Wykonano również obliczenia dla przypadku z obecnością dystorsji w ramach metody DE-GWF, które pokazały, że dla małej dystorsji występuje znacząca anizotropia jeżeli chodzi o średnie z przeskoków elektronów w kierunkach (1,0) oraz (0,1) (rys. 7 w pracy [H4]), co odpowiada sytuacji znanej z eksperymentu [75, 76, 77]. Jednakże, ten aspekt wymaga bardziej szczegółowej analizy.



Rysunek 12: Skorelowana przerwa nadprzewodząca typu *d-wave* (a) oraz *s-wave* (b), a także parametr porządku fazy nematicznej (c) w funkcji domieszkowania dla modelu *t-J-U* dla różnych wartości całki wymiany J . Na rysunkach (d), (e), oraz (f) zamieszczono analogiczne wyniki dla modelu Hubbarda rozszerzonego o międzywęzłowe odpychanie Coulomba, dla różnych wartości całki odpychania, V . Dla obu modeli przyjęto $U = 11.5$. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H4].

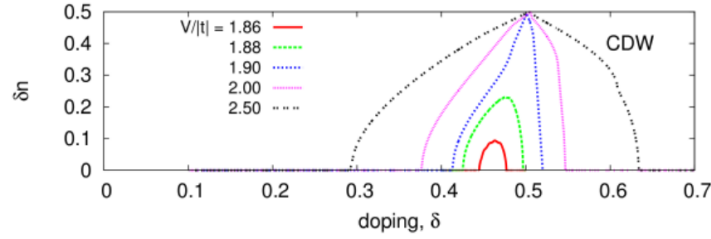
Podsumowując badania przeprowadzone dla fazy nematicznej oraz jej koegzystencji z nadprzewodnictwem, należy powiedzieć, że zasadniczym wynikiem jest łamanie symetrii C_4 w sposób spontaniczny na skutek korelacji elektronowych, i to już na poziomie modelu Hubbarda. W ramach tego modelu występuje stosunkowo duży obszar stabilności fazy SC+N (koegzystencja nadprzewodnictwa i fazy nematicznej), co powodowałoby zaburzenie mierzonych eksperymentalnie uniwersalnych własności w kupratkach dla kierunku nodalnego przez pojawienie się składowej przerwy nadprzewodzącej typu *s-wave* w stanie SC+N. Niemniej jednak, dla modelu *t-J-U*, dla którego wcześniej otrzymano zgodność z podstawowymi obserwacjami dotyczącymi stanu nadprzewodzącego (patrz rozdział 4.3) nematiczność jest niszczone przez wyraz oddziaływań wymiennych. Dzięki temu, otrzymane wcześniej własności mogą być zachowane nawet po uwzględnieniu fazy nematicznej, która wciąż może wystąpić, ale w bardzo ograniczonym obszarze domieszkowań, po uwzględnieniu słabej dystorsji romboedrycznej lub/i wyrazu międzywęzłowego odpychania Coulomba.

Kolejną fazą, jaka poddana została analizie jest faza z falą gęstości ładunku (CDW - *charge density wave*). Wstępne obliczenia były wykonane w ramach przybliżenia SGA, które jest modyfikacją RMFT z narzuconymi warunkami samozgodności statystycznej [H5]. W ogólności, koncentracja elektronów na węzłach sieci dla przypadku modulacji z zadaniem wektorem, gdy zakładamy brak uporządkowania magnetycznego, określona jest wzorem

$$n_i = n + \delta_n e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}_i}, \quad (7)$$

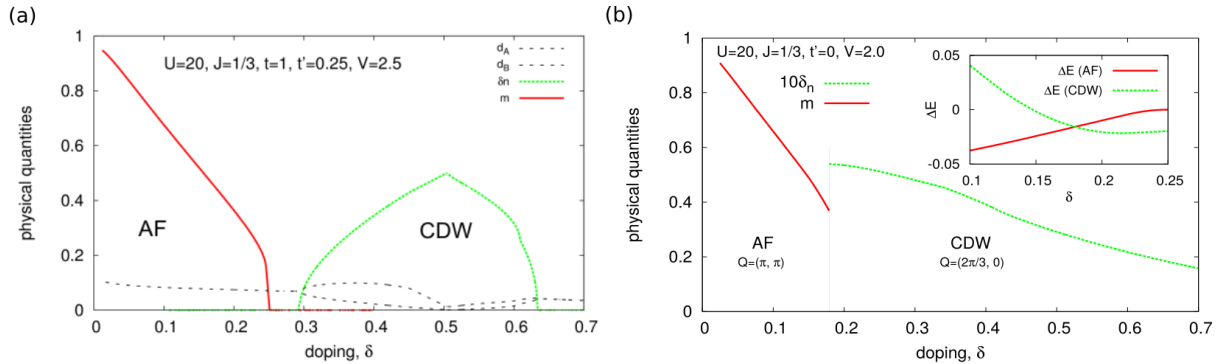
gdzie n to wartość średnia, a δ_n to amplituda fali gęstości ładunku, która może być interpretowana jako parametr porządku CDW. Najprostsza forma fazy CDW zdefiniowana jest przez wektor modulacji $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)/a$. W takim przypadku układ dzieli się na dwie podsieci. Dla jednej z nich koncentracja elektronów jest mniejsza, a dla drugiej odpowiednio większa. Zgodnie z przeprowadzonymi obliczeniami w ramach metody SGA dla modelu Hubbarda oraz *t-J-U*, rozważana faza CDW nie stabilizuje się. Niemniej jednak, jak pokazane jest na rys. 13, po dodaniu wyrazu międzywęzłowych oddziaływań kulombowskich (model *t-J-U-V*), począwszy od pewnej krytycznej wartości parametru V , obszar stabilności fazy z uporządkowaniem ładunkowym pojawia się i jest tym szerszy im większa jest wartość parametru V . Indukowanie uporządkowania CDW przez wyraz $\sim V$ ma charakter trywialny wynikający z minimalizacji energii oddziaływań międzywęzłowych w sytuacji gdy koncentracja elektronów na sąsiadujących węzłach jest różna.

Należy zauważyć, że graniczna wartość $V \approx 1.85$ po osiągnięciu, której faza CDW pojawia się na diagramie fazowym jest na tyle duża, że nadprzewodnictwo jest już całkowicie zniszczone.



Rysunek 13: Amplituda fali gęstości ładunku dla przypadku $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ dla modelu t - J - U - V z $U = 20$, $J = 1/3$ oraz dla wybranych wartości V . Rysunki zaczerpnięto z pracy [H5].

Wyników zamieszczonych na rysunku 13 nie można odnieść bezpośrednio do obserwacji eksperymentalnych dla kupratów, ponieważ zgodnie z rozpatrywanym podejściem teoretycznym faza CDW występuje dla zbyt dużych domieszkowań. Natomiast wyniki pomiarów dostępne w literaturze pokazują, że takie uporządkowanie powinno pojawiać się w obszarze niskich domieszkowań, tj. poniżej $\delta \approx 0.15 - 0.2$ [7]. Ponadto wyznaczone eksperymentalnie wektory modulacji odbiegają od tych wziętych do omawianej wstępnej analizy. Mianowicie, zgodnie z danymi doświadczalnymi wektory modulacji ładunkowej przyjmują postać $(0, Q)2\pi/a$ oraz $(Q, 0)2\pi/a$, gdzie $Q \approx 0.25 - 0.3$ [80, 81, 82]. Wciąż nie jest jasne czy te dwa wektory są realizowane jednocześnie w kupratach, czy w próbce formują się domeny, w ramach których tylko jeden z mierzonych wektorów definiuje postać uporządkowania ładunkowego [83]. W celu przebadania wpływu wektora modulacji na wyznaczony teoretycznie obszar stabilności fazy CDW przeprowadzono obliczenia dla przypadku wektora \mathbf{Q} bliskiego temu, który faktycznie jest mierzony eksperymentalnie, czyli $Q = 1/3$ [H5]. Dodatkowo, w obliczeniach uwzględniono występowanie fazy antyferromagnetycznej. Wyniki dla $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)/a$ oraz $\mathbf{Q} = (1/3, 0)2\pi/a$ są przedstawione odpowiednio na rysunkach 14 (a) oraz (b). Jak widać, po zmianie wektora modulacji przedział stabilności fazy CDW zmienia się zasadniczo przesuwając maksimum parametru porządku δ_n w stronę niższych domieszkowań, co nieco zbliża wyniki teoretyczne do danych eksperymentalnych. Ponadto, faza z uporządkowaniem antyferromagnetycznym (AF) występuje dla niskich domieszkowań, co również jest obserwowane doświadczalnie. Niemniej jednak, górne domieszkowanie krytyczne na tworzenie się stanu AF wychodzi zbyt duże w porównaniu z badaniami eksperymentalnymi [3]. Jak zostało przedyskutowane w Dodatku B do pracy [H5], ten ostatni wynik można znacząco poprawić gdy zastosuje się alternatywny schemat wyznaczania parametrów renormalizacji w fazie AF.

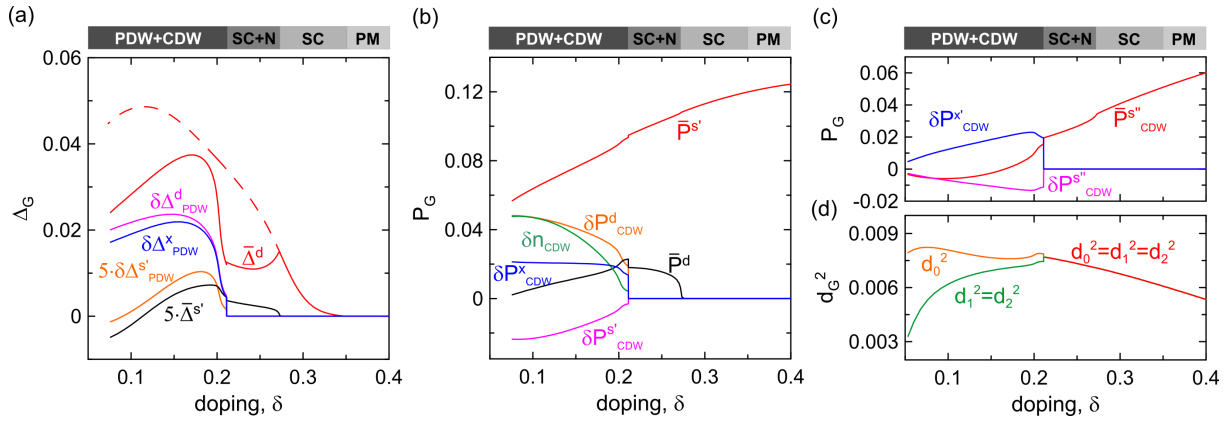


Rysunek 14: Diagram fazowy dla modelu t - J - U - V zawierający antyferromagnetyzm (z parametrem porządku $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$) oraz fazę z falą gęstości ładunku [z parametrem porządku δ_n zdefiniowanym w (7)] odpowiadającą wektorowi modulacji $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)/a$ (a) oraz $\mathbf{Q} = (1/3, 0)2\pi/a$ (b). Rysunki zaczerpnięto z pracy [H5].

Ze względu na to, że otrzymane w ramach wstępnych obliczeń diagramy fazowe nie zgadzają się w zadowalający sposób z obrazem eksperymentalnym [3, 7, 80], przeprowadzono także obliczenia z uwzględnieniem wyższych rzędów rozwinięcia diagramatycznego w ramach metody DE-GWF. Analiza ta miała na celu weryfikację czy takie podejście pozwoli na zrekonstruowanie sytuacji eksperymentalnej, w której w obszarze powyżej domieszkowania optymalnego ($\delta_{\text{opt}} \approx 0.15 - 0.2$) stabilna jest czysta faza nadprzewodząca o symetrii przerwy typu *d-wave*, natomiast poniżej δ_{opt} ma miejsce formowanie się uporządkowania ładunkowego. Należy zauważyć, że doniesienia eksperymentalne ostatnich lat pokazują, że w kupratach tworzyć się może również faza z falą gęstości par Coopera (PDW - *pair density wave*) o wektorze modulacji bardzo zbliżonym do tego, jaki wcześniej zmierzony został dla fazy CDW [6]. Dlatego przeanalizowano przypadek, w ramach którego faza nadprzewodząca dopasowuje się do fali gęstości ładunku poprzez wytworzenie własnej modulacji gęstości par Coopera z takim samym wektorem \mathbf{Q} . Taka sytuacja prowadzi do współlistnienia fazy CDW z falą PDW. W fazie z koegzystencją (PDW+CDW) modulacji podlegają zarówno koncentracja nośników na węzłach sieci $n_{i\sigma} = \langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \rangle_G$, średnie dopowiadające przeskokom elektronów między węzłami sieci $P_{ij\sigma}^G = \langle \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \rangle_G$, jak i anomalne średnie odpowiadające za nadprzewodnictwo $\Delta_{ij}^G = \langle \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow}^\dagger \rangle_G$. Każdej z tych trzech wymienionych średnich odpowiadać będą amplitudy modulacji oznaczone odpowiednio δn_{CDW} , $\delta P_{CDW}^{d,s',s'',x,x''}$, oraz $\delta \Delta_{CDW}^{d,s',x}$. Poszczególne literki *d*, *s'*, *s''*, *x'*, *x''* odpowiadają poszczególnym symetriom dla fali ładunkowej (CDW) oraz dla fali gęstości par Coopera (PDW) i są w szczegółowy sposób zdefiniowane w pracy [H6]. Amplitudy modulacji pełnią rolę parametrów porządku dla tak złożonej fazy PDW+CDW.

W pierwszej kolejności przeprowadzono obliczenia dla modelu Hubbarda. Wyznaczone diagramy fazowe zamieszczone są na rysunku 15. Idąc od wysokich wartości domieszkowań widać, że czyste nadprzewodnictwo typu *d-wave* (SC) zaczyna być stabilne poniżej $\delta \approx 0.35$. Następnie symetria C_4 zostaje spontanicznie złamana poniżej $\delta \approx 0.28$ i formuje się faza nematyczna współlistniająca z nadprzewodnictwem (SC+N). W tej fazie występuje mieszanka symetrii parowania typu *s-wave* oraz *d-wave*, a także niezerowe wartości przyjmuje różnica $P_{(1,0)}^G - P_{(0,1)}^G$ (por. rys. 11 oraz 12). Następnie, poniżej $\delta \approx 0.2$ znajduje się obszar stabilności fazy modulowanej CDW+PDW. Jak widać na wykresach niezerowe wartości przyjmują tam amplitudy modulacji dotyczące zarówno koncentracji elektronowej jak i średnich parujących oraz średnich z przeskoków elektronów. Faza nematyczna, pojawiająca się podczas zmniejszania domieszkowania może być rozumiana jako prekursor (faza przejściowa) fazy z modulacją zarówno ładunkową oraz gęstości par Coopera, w której również ma miejsce łamanie symetrii C_4 . Jak można zobaczyć na rysunku 13 wyraz $\sim V$ był konieczny do stabilizacji fazy CDW w ramach przybliżenia RMFT, gdzie mechanizm indukowania CDW miał charakter trywialny. Natomiast dla obliczeń zgodnych z metodą DE-GWF faza z modulacją ładunkową (tym razem współlistniająca z falą PDW) stabilizuje się już dla przypadku modelu Hubbarda z uwzględnieniem jedynie wewnątrzwęzłowego odpychania Coulomba. Ponadto, jej obszar stabilności sięga maksymalnie do $\delta \approx 0.2$, co w lepszy sposób odzwierciedla sytuację eksperymentalną. Jest to kolejny przykład pokazujący ograniczenia przybliżenia RMFT oraz tego, jak znaczący wpływ na wyniki mają dla układów skorelowanych elektronowo wyrazy wyższych rzędów rozwinięcia diagramatycznego. Podobny wynik dla modelu Hubbarda jednak w węższym obszarze domieszkowań i bez uwzględnienia fazy nematycznej otrzymany został w ramach metody VCA (*Variational Cluster Approximation*) [31].

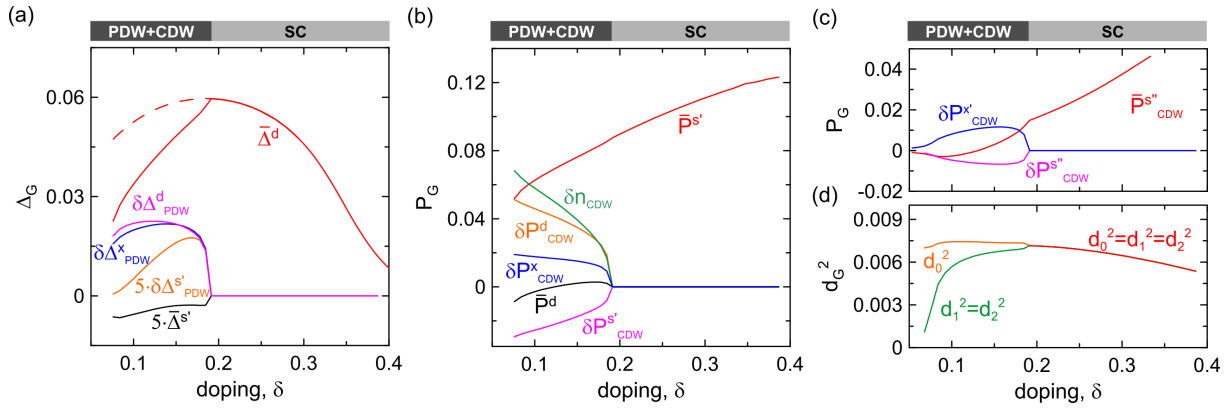
Pomimo ciekawego wyniku otrzymanego dla modelu Hubbarda, nie udało się w ramach tego podejścia odtworzyć poprawnej sekwencji faz, jaka występuje w eksperymencie [3, 7]. Dlatego, na kolejnym etapie badań wykonano obliczenia dla modelu *t-J-U*, który już wcześniej dostarczył bardzo dobrej zgodności z eksperymentem, jeśli chodzi o czystą fazę nadprzewodzącą zarówno w strukturze składającej się z jednej jak i dwóch płaszczyzn miedziowo-tlenowych (patrz rozdziały 4.3, 4.4). Jak widać na rys. 16 po uwzględnieniu wyrazu oddziaływania wymiennego $\sim J$, faza nadprzewodząca wypycha z diagramu fazowego uporządkowanie nematyczne, w wyniku czego otrzymujemy sekwencje faz podobną do tej, jaka znana jest z badań ekspery-



Rysunek 15: Diagram fazowy dla modelu Hubbarda (równ. 1 z $J = 0$) dla $U = 18$. (a) Wartości referencyjne amplitudy parowania typu d -wave ($\bar{\Delta}^d$) oraz $extended$ s -wave ($\bar{\Delta}^{s'}$), a także amplitudy modulacji $\delta\Delta_{PDW}^d$, $\delta\Delta_{PDW}^{s'}$ oraz $\delta\Delta_{PDW}^{s''}$ w funkcji domieszkowania. (b), (c) średnie z przeskoków elektronów odpowiadające symetrii typu s -wave ($\bar{P}^{s'}$, $\bar{P}^{s''}$) oraz d -wave (\bar{P}^d), a także amplitudy modulacji δP_{CDW}^d , $\delta P_{CDW}^{s'}$, $\delta P_{CDW}^{s''}$, $\delta P_{CDW}^{s''}$, and $\delta P_{CDW}^{s''}$ w funkcji domieszkowania. (d) Podwójne obsadzenia na kolejnych węzłach sieci (0,1,2), które tworzą powtarzający się schemat w fazie z modulacją PDW+CDW (por. rys. 1b z pracy [H6]). Nad każdym wykresem na szarym tle zaznaczony jest zakres domieszkowań w którym stabilna jest dana faza. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H6].

talnych [7, 80]. To oznacza, że dla stosunkowo wysokich domieszkowań mamy stabilną czystą fazę nadprzewodzącą typu d -wave, która tworzy strukturę “domu” nadprzewodzącego z domieszkowaniem optymalnym $\delta_{opt} \approx 0.18$. Natomiast, w obszarze poniżej domieszkowania optymalnego $\delta < \delta_{opt}$ obserwujemy uporządkowanie ładunkowe. W naszym przypadku faza CDW występuje w koegzystencji z fazą PDW, która również została zweryfikowana w związku należącym do rodziny miedzanów [6]. Amplitudy modulacji opisujące uporządkowanie CDW rosną wraz ze zmniejszaniem się domieszkowania, co odpowiada obserwowanym eksperymentalnie zmianami temperatury krytycznej na formowanie się fazy CDW z domieszkowaniem [84, 80]. Ponadto, z otrzymanych wyników widać, że fazy z uporządkowaniem ładunkowym oraz faza nadprzewodząca typu d -wave konkurują ze sobą. W obszarze stabilności fazy PDW+CDW wartość referencyjna odpowiedzialna za symetrie parowania typu d -wave zostaje zredukowana względem tej która miałaby miejsce w sytuacji bez uwzględnienia faz z modulacją [por. czerwona linia przerywana na rys. 16 (a)]. Podobna konkurencja pomiędzy dwoma fazami jest również obserwowana eksperymentalnie, gdzie temperatura krytyczna fazy nadprzewodzącej ulega redukcji w obszarze stabilności fazy CDW [7, 84].

Podsumowując, wyniki przedstawione w tym rozdziale wskazują, że jeśli chodzi o fazę z uporządkowaniem ładunkowym, to najlepsza zgodność z dostępnymi danymi doświadczalnymi została otrzymana dla modelu t - J - U z parametrami mikroskopowymi bliskimi tym, dla których wcześniej udało się odtworzyć w sposób ilościowy podstawowe własności czystej fazy nadprzewodzącej. Stabilizacja fazy CDW zachodzi dzięki efektom korelacji elektronowych, które uwzględnione zostały poprzez wyższe rzędy rozwinięcia diagramatycznego (metoda DE-GWF). Dzięki takiemu podejściu udało się odtworzyć właściwą sekwencję faz jaka jest obserwowana na diagramie fazowym dla kupratów z fazą nadprzewodzącą typu d -wave powyżej domieszkowania optymalnego oraz fazą z modulacją ładunkową poniżej domieszkowania optymalnego, gdzie występuje konkurencja pomiędzy fazami SC oraz CDW. Niemniej jednak, zgodnie z dostępnymi analizami doświadczalnymi, w dużej grupie związków na bazie miedzi dominującą amplitudą jeżeli chodzi o fazę CDW jest ta odpowiadająca symetrii typu d -wave (δP_{CDW}^d). W ramach naszego opisu teoretycznego δP_{CDW}^d jest większa co do wartości bezwzględnej od pozostałych amplitud, za wyjątkiem tej odpowiadającej za modulację koncentracji elektronowej δn_{CDW} [patrz rys. 16 (b) oraz (c)]. Ta rozbieżność z obrazem doświadczalnym wymaga dalszej analizy, być może



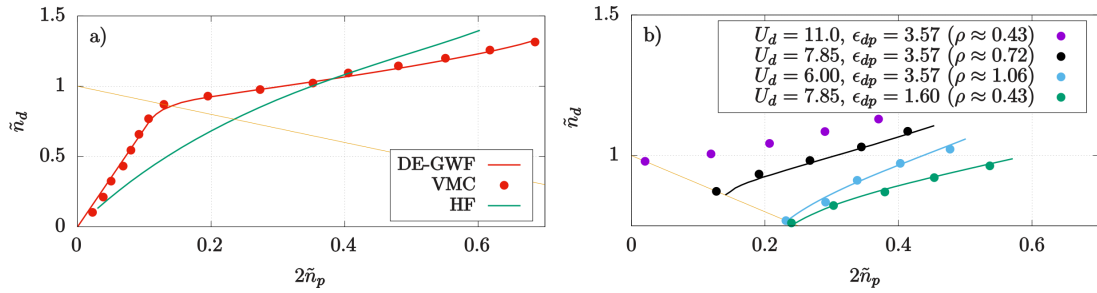
Rysunek 16: Diagram fazowy dla modelu t - J - U (równ. 1) dla $U = 18$ oraz $J = 0.3$. (a) Wartości referencyjne amplitudy parowania typu d -wave ($\bar{\Delta}^d$) oraz rozszeżone s -wave ($\bar{\Delta}^{s'}$), a także amplitudy modulacji $\delta\Delta_{PDW}^d$, $\delta\Delta_{PDW}^{x'}$ oraz $\delta\Delta_{PDW}^x$ w funkcji domieszkowania. (b), (c) średnie z przeskoków elektronów odpowiadające symetrii typu s -wave ($\bar{P}^{s'}$, $\bar{P}^{s''}$) oraz d -wave (\bar{P}^d), a także amplitudy modulacji δP_{CDW}^d , $\delta P_{CDW}^{s'}$, $\delta P_{CDW}^{s''}$, δP_{CDW}^x , and $\delta P_{CDW}^{x'}$ w funkcji domieszkowania. (d) Podwójne obsadzenia na kolejnych węzłach sieci (0,1,2), które tworzą powtarzający się schemat w fazie z modulacją PDW+CDW (por. rys. 1b z pracy [H6]). Nad każdym wykresem na szarym tle zaznaczony jest zakres domieszkowań, w którym stabilna jest dana faza. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H6].

wykraczającej poza jednopasmowy obraz kupratów.

4.6 Nadprzewodnictwo w modelu trój-pasmowym kupratów (praca [H7])

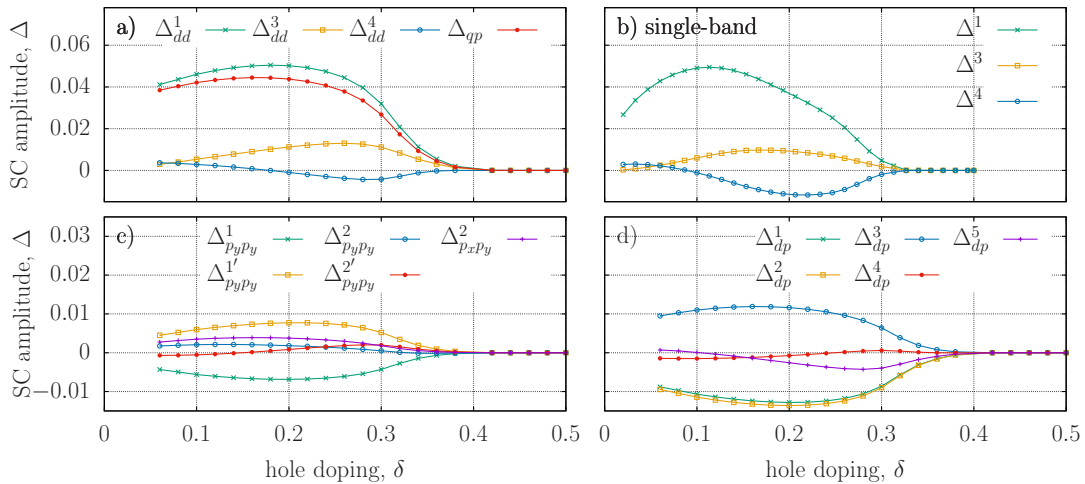
Przedstawione powyżej rozważania dotyczące związków na bazie miedzi zostały przeprowadzone w ramach efektywnego ujęcia jednopasmowego. Jak zostało nadmienione we Wstępie, pewne fakty eksperymentalne wskazują na ograniczenia takiego opisu [41, 42, 43, 40]. Dlatego przeprowadzono również obliczenia dla stanu normalnego oraz nadprzewodzącego w rozszerzonym modelu, w którym orbitale tlenowe płaszczyzny Cu-O są uwzględnione w sposób jawny. Modelem, który odpowiada takiemu podejściu jest tak zwany model d - p , który uwzględnia orbitale $3d_{x^2-y^2}$ atomów miedzi oraz orbitale $2p_x/2p_y$ atomów tlenu (szczegóły modelu w pracy [H7]). Do obliczeń wzięto typowe wartości parametrów hoppingu $t_{dp} = 1.13$ eV, $t_{pp} = 0.49$ eV, oraz różnicy pomiędzy położeniami poziomów orbitali d oraz p , $\epsilon_{dp} = 3.57$ eV.

W ramach wstępnej analizy wykonano obliczenia dla stanu normalnego zgodnie z metodami DE-GWF, wariacyjnym Monte Carlo (VMC - *Variational Monte Carlo*), a także przybliżeniem Hartee-Focka (HF). Dla metody VMC użyto rozszerzonej wersji korelatora, który przez uwzględnienie tak zwanych współczynników Jastrowa uwzględnia jawnie międzywęzłowe korelacje. Rysunek 17 przedstawia jak zmienia się koncentracja dziur ($\tilde{n}_d = 2 - n_d$, $\tilde{n}_p = 2 - n_p$) odpowiednio na orbitalach miedziowych oraz tlenowych wraz ze zmianą domieszkowania dziurowego czy elektronowego. Jak widać, wyniki dla metod DE-GWF oraz VMC są praktycznie takie same pokazując, że już na poziomie funkcji falowej Gutzwillera (metoda DE-GWF) korelacje elektronowe są brane pod uwagę z zadowalającą dokładnością i nie jest niezbędne uwzględnianie korelatorów Jastrowa (metoda VMC). Wynik ten stanowi także dodatkowy test weryfikujący poprawność wykonanego rozszerzenia podejścia zgodnego z metodą DE-GWF na model trój-pasmowy. Metoda Hartee-Focka, która zaniedbuje korelacje elektronowe z oczywistych względów prowadzi do zasadniczo innych wyników oraz wyższej energii układu niż te pochodzące z metod DE-GWF oraz VMC (por. rys. 6 w pracy [H7]). Dostępne dane eksperymentalne pokazują, że współczynnik względnych zmian koncentracji nośników dziurowych na orbitalach miedziowych oraz tlenowych ($\rho = \Delta\tilde{n}_d/2\Delta\tilde{n}_p$) dla kupratów wynosi $\rho \approx 0.2-1.0$, w zależności od konkretnego związku. Dla wybranych parametrów modelu metody DE-GWF i VMC dają wartość $\rho = 0.72$,



Rysunek 17: (a) Rozkład koncentracji dziurowej pomiędzy orbitale d oraz p ($\tilde{n}_d = 2 - n_d$, $\tilde{n}_p = 2 - n_p$) dla pełnego zakresu domieszkowań dziurowych oraz elektronowych. Ciągła pomarańczowa linia, określona przez równanie $\delta = 1 - \tilde{n}_d - 2\tilde{n}_p = 0$, odpowiada związkowi macierzy-stemu, a górny prawy (dolny lewy) narożnik rysunku odpowiada domieszkowaniom dziurowym (elektronowym). Obliczenia wykonane dla $U_d = 7.85$ eV oraz $U_p = 4.1$ eV przy użyciu metod DE-GWF, VMC oraz HF; (b) Rozkład koncentracji dziurowej pomiędzy orbitale d oraz p dla przypadku domieszkowania dziurowego dla różnych wartości parametrów U_d oraz ϵ_{dp} . Dla każdego przypadku wyznaczono współczynnik dystrybucji koncentracji dziur ($\rho = \Delta\tilde{n}_d/2\Delta\tilde{n}_p$) przez dopasowanie prostej do wyznaczonych punktów. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H7].

natomiast HF prowadzi do dużo większych nierealistycznych wartości $\rho = 2.0$. To wskazuje, że niskie wartości współczynnika ρ mierzone dla kupratów są efektem silnych korelacji branych pod uwagę w ramach podejścia DE-GWF oraz VMC.

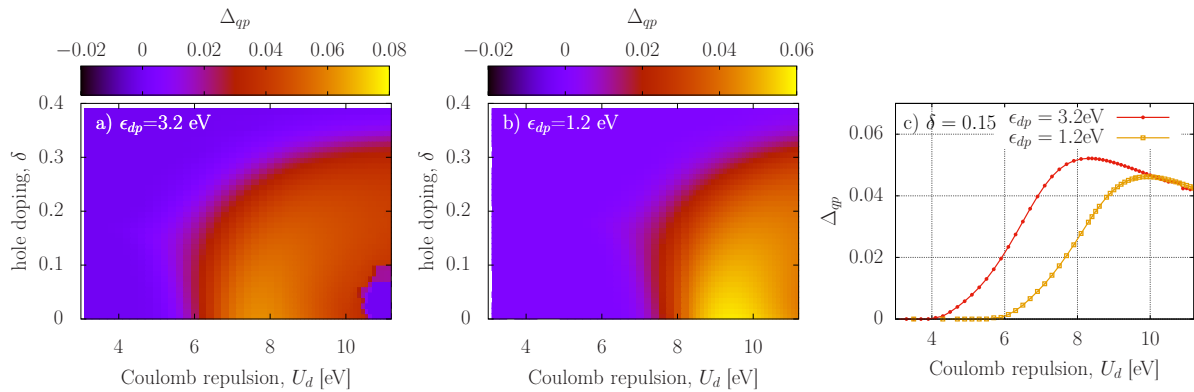


Rysunek 18: Amplitudy parowania pomiędzy orbitalami $d-d$ (a), $p-p$ (c), oraz $d-p$ (d) w zależności od domieszkowania dla $U_p = 4.1$ eV oraz $U_d = 10.3$ eV. Indeks górny przy oznaczeniu każdej amplitudy określa numer kolejnych najbliższych sąsiadów, pomiędzy którymi następuje parowanie (por. rys. 3 z pracy [H7]). Na wykresie (b) zamieszczone są amplitudy parowania dla pierwszego, trzeciego oraz czwartego (drugi jest zerowy ze względu na symetrię d -wave) sąsiada dla jednopasmowego modelu Hubbarda z typowymi parametrami ($t = -0.35$, $t' = 0.25|t|$, $U = 6$ eV). Rysunki zaczerpnięto z pracy [H7].

Zgodnie z niedawnymi doniesieniami eksperymentalnymi w rodzinie kupratów wartość współczynnika ρ jest skorelowana z maksymalną temperaturą krytyczną [42]. Dzięki temu możliwe jest wyciągnięcie pewnych wstępnych wniosków dotyczących stanu nadprzewodzącego już w oparciu o wyniki przedstawione na rysunku 17. Jak widać na rys. (b) dla mniejszych wartości odpychania Coulomba na atomach miedzi otrzymujemy większe wartości parametru ρ . Zatem mniejsze U_d powinno wzmacniać nadprzewodnictwo. Taki wniosek również zgadza się z niedawnymi obliczeniami w oparciu o metodę GW połączoną z DFT [85] zgodnie, z którymi wyższej maksy-

malnej temperaturze krytycznej odpowiadają mniejsze wartości U_d ($\text{HgBa}_2\text{CuO}_4 - T_C \approx 90\text{K}$, $U_d = 8.84\text{ eV}$ oraz $\text{La}_2\text{CuO}_4 - T_C \approx 40\text{K}$, $U_d = 9.61\text{ eV}$).

W kolejnym etapie badań przeprowadzono obliczenia dla stanu nadprzewodzącego w podejściu DE-GWF. Na rysunku 18 przedstawione są skorelowane amplitudy parowania pomiędzy różnymi orbitalami rozważanego układu, w zależności od domieszkowania. Kolejne amplitudy zdefiniowane są na rys. 3 w pracy [H7]. Jak widać, dominujący wkład do fazy nadprzewodzącej ma parowanie $d-d$ pomiędzy najbliższymi sąsiadami miedziowymi (Δ_{dd}^1). Wskazuje na to również fakt, że amplituda Δ_{dd}^1 w zasadniczy sposób determinuje zależność skorelowanej przerwy kwazicząstkowej (Δ_{qp}) od domieszkowania. Ta ostatnia jest najbardziej reprezentatywną amplitudą parowania w układzie ze względu na fakt, że odpowiada ona kwazicząstkowym operatorom kreacji i anihilacji w stanach z pasma zhybrydowanego, na którym w stanie nadprzewodzącym otwiera się przerwa. Jak widać na rysunkach 18 (a) oraz (b), zależności od domieszkowania dla amplitud parowania pomiędzy kolejnymi sąsiadami miedziowymi przypominają te odpowiadające parowaniu pomiędzy kolejnymi sąsiadami sieci kwadratowej modelu jednopasmowego [patrz rys. 18 (a) oraz (b)]. Oba podejścia (jedno- oraz trój-pasmowe) prowadzą także do struktury “domu” nadprzewodzącego z podobną wartością górnego krytycznego domieszkowania na obecność fazy nadprzewodzącej $\delta_c \approx 0.3 - 0.35$ oraz optymalnym domieszkowaniem w granicach $\delta_{\text{opt}} = 0.1 - 0.2$, co zgadza się również z danymi eksperymentalnymi [2]. Co więcej, wyznaczona zależność skorelowanej przerwy nadprzewodzącej na płaszczyźnie (U_d, δ) [por. rys. 19 (a) oraz (b)] dla modelu $d-p$ przypomina sytuację, jaka ma miejsce w modelach jednopasmowych [diagramy na płaszczyźnie (U, δ) - por. rys. 11 (d) oraz 3]. Mianowicie, na wyznaczonych diagramach wyróżnić można trzy obszary: (i) obszar słabych korelacji gdzie amplituda parowania rośnie wraz ze wzrostem U_d (U dla przypadku jednopasmowego); (ii) obszar średnich korelacji umieszczony wokół maksimum amplitudy parowania w funkcji U_d lub U ; (iii) obszar silnych korelacji, gdzie amplituda parowania spada wraz ze wzrostem U_d lub U . Ponieważ kupraty należy umieścić w obszarze silnych korelacji, ale w pobliżu obszaru średnich korelacji, to zgodnie z otrzymanymi wynikami skorelowana przerwa nadprzewodząca (a także temperatura krytyczna) powinna być większa dla związków z mniejszą wartością parametru U_d . Taki wniosek jest z zgodzie z przeprowadzoną wcześniej analizą współczynnika ρ (rys. 17) w kontekście dostępnych danych pomiarowych wykonanych w oparciu o technikę NMR [42].

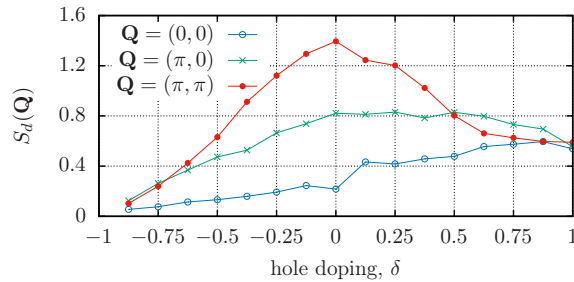


Rysunek 19: Kwazicząstkowa przerwa nadprzewodząca w funkcji domieszkowania (δ) oraz odpychania Coulomba na orbitalach typu d (U_d) dla $\epsilon_{dp} = 3.2\text{ eV}$ (a) oraz $\epsilon_{dp} = 1.3\text{ eV}$ (b). Oba przypadki odpowiadają $U_p = 4.1\text{ eV}$. Na rys. (c) przedstawiona jest zależność $\Delta_{qp}(U_d)$ dla dwóch wybranych wartości ϵ_{dp} , dla domieszkowania $\delta = 0.15$. Rysunki zaczerpnięto z pracy [H7].

Pomimo wymienionych podobieństw pomiędzy dwoma typami modeli, występują także różnice. Mianowicie, w ramach podejścia jednopasmowego energia związana z najniższym stanem wzbudzonym odpowiada przeniesieniu elektronu pomiędzy dwoma pojedynczo obsadzonymi węzłami sieci, co prowadzi do podwójnego obsadzenia podnoszącego energię układu o U . Natomiast

w ramach opisu trój-pasmowego najniższe energetycznie wzbudzenie odpowiada przeniesieniu elektronu pomiędzy podwójnie obsadzonym atomem tlenu a pojedynczo obsadzonym atomem miedzi. Taki proces prowadzi do podwyższenia energii układu o $\Delta E = U_d - U_p + \epsilon_{dp}$. W modelu d - p to wartość ΔE reguluje stopień korelacji w układzie. Zatem, zmniejszenie wartości ϵ_{dp} powinno przenieść cały obszar stabilności fazy SC (indukowanej właśnie korelacjami) w stronę wyższych wartości parametru U_d na diagramie (U_d, δ) . Efekt taki widać na rysunkach 19 gdzie zmniejszenie ϵ_{dp} o 2 eV doprowadziło do przesunięcia w U_d o tę samą wartość. Taki mechanizm prowadzi do sytuacji, w której zarówno niższe wartości ϵ_{dp} jak i U_d będą odpowiadać związkom, które na diagramie fazowym są bliżej obszaru średnich korelacji gdzie amplituda parowania jest maksymalizowana, co z kolei odpowiadać powinno większej temperaturze krytycznej.

W ramach badań nad modelem trój-pasmowym wyznaczono również funkcje korelacji spin-spin pomiędzy orbitalami typu d atomów miedzi dla trzech wybranych wektorów modulacji. Jak widać na rys. 20 korelacja spin-spin odpowiadająca wektorowi modulacji $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ jest dominująca i posiada maksimum dla układu niedomieszkowanego, co odpowiada sytuacji eksperymentalnej dla kupratów, gdzie faza antyferromagnetyczna jest obserwowana w związkach macierzystych oraz dla bardzo niskich wartości domieszkowań dziurowych ($\delta \lesssim 0.05$). Niemniej jednak, funkcje korelacji nie pozwalają nam na wyznaczenie konkretnej wartości górnego domieszkowania krytycznego na tworzenie się uporządkowania antyferromagnetycznego. Dlatego ten aspekt, a także kwestia występowania ewentualnej koegzystencji fazy nadprzewodzącej z antyferromagnetyzmem dla niskich wartości δ w modelu trój-pasmowym wymaga dalszych badań.



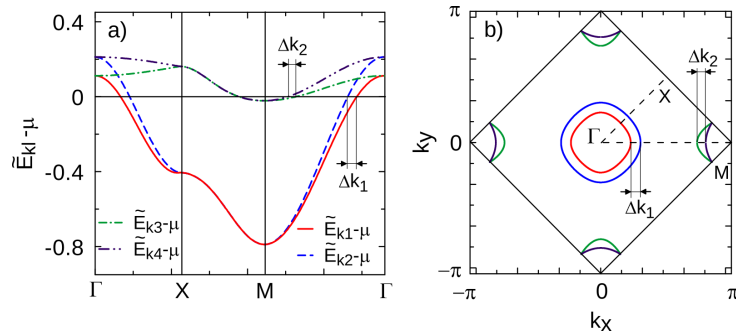
Rysunek 20: Funkcje korelacji spin-spin pomiędzy orbitalami typu d atomów miedzi w zależności od domieszkowania dla trzech wybranych wektorów modulacji wyznaczone za pomocą metody VMC. Rysunek zaczerpnięto z pracy [H7].

Podsumowując, wyniki przedstawione w tym rozdziale wskazują, że oba podejścia jedno- oraz trój-pasmowe prowadzą do zbliżonego ogólnego obrazu fazy nadprzewodzącej. To przemawia za poprawnością efektywnego opisu jednopasmowego oraz wyników dotyczących uniwersalnych charakterystyk dla rodziny kupratów, przedstawionych w poprzednich rozdziałach. Niemniej jednak, jawne uwzględnienie tlenowych stopni swobody wydaje się konieczne w celu przeprowadzenia dokładnego opisu poszczególnych związków na bazie miedzi, oraz odwzorowania różnic, jakie między nimi występują, takich jak np. różne wartości maksymalnej temperatury krytycznej. Przedstawiona tutaj analiza współczynnika dystrybucji koncentracji dziur ρ , który związany jest z tym ostatnim aspektem pokazuje zgodność jakościową z dostępnymi danymi eksperymentalnymi [42]. Ponadto, uwzględnienie tlenowych stopni swobody może odgrywać ważną rolę w celu otrzymania pełnej zgodności, jeżeli chodzi o opis fazy z uporządkowaniem ładunkowym [5] oraz tak zwanej fazy pseudoprzerwy [7]. Wykracza to jednak poza zakres przedstawionej tutaj analizy.

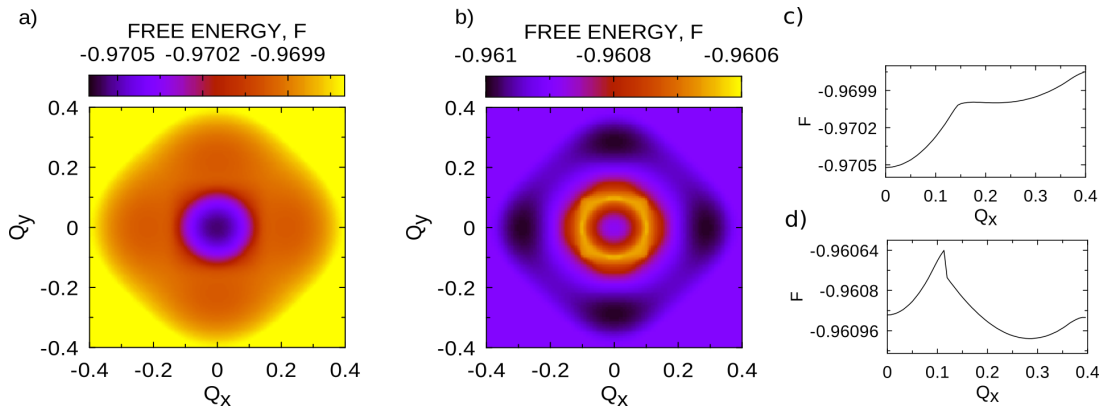
4.7 Spontaniczne nadprzewodnictwo typu FFLO w modelu nadprzewodników na bazie żelaza (prace [H8, H9])

W ramach badań przedstawionych w tym rozdziale przeanalizowana została koncepcja tworzenia się fazy typu Fulde-Ferrella (FF) na skutek niedopasowania powierzchni Fermiego po-

chodzących od różnych pasm w modelu z parowaniem międzypasmowym. Jak zostało zaproponowane w pracy [H8], tego typu faza może powstać spontanicznie przy braku zewnętrznego pola, które z kolei jest konieczne w przypadku oryginalnej koncepcji Fulde oraz Ferrella, a także Larkina i Owczynnikowa [86, 87]. W ramach takiego podejścia niedopasowanie powierzchni Fermiego może być kompensowane przez niezerowy pęd środka masy par Coopera, co prowadzi do powstania fazy FF. Modelem, który wybrano do analizy zaproponowanego efektu jest model opisujący dwa pasma dziurowe oraz dwa elektronowe nadprzewodnika na bazie żelaza, który uzupełniono o wyraz singletowego parowania międzypasmowego. Relacje dyspersji oraz odpowiadające im powierzchnie Fermiego są przedstawione na rysunku 21, natomiast operatory parowania singletowego zdefiniowane są wzorem (4) w pracy [H8]. Rozpatrujemy sytuację, w której pary Coopera mogą mieć niezerowy pęd środka masy (\mathbf{Q}), a przerwa nadprzewodząca ma symetrię s -wave + *extended s*-wave. Jak pokazano w pracy [H8], w takim modelu można regulować niedopasowanie poszczególnych płatów powierzchni Fermiego pomiędzy pasmami dziurowymi Δk_1 oraz pasmami elektronowymi Δk_2 zmieniając ilość nośników w układzie (patrz rys. 21). Dzięki temu, dobierając odpowiednio domieszkowanie próbki można stworzyć korzystne warunki do powstania zaproponowanej fazy FF.



Rysunek 21: Struktura elektronowa (a) oraz powierzchnie Fermiego (b) dla wypełnienia pasma $n = 1.94$ odpowiadające rozważanemu modelowi czteropasmowemu. Niedopasowanie powierzchni Fermiego pomiędzy pasmami dziurowymi oraz elektronowymi określone jest przez parametry Δk_1 , Δk_2 .



Rysunek 22: Energia swobodna stanu sparowanego w funkcji pędu par Coopera dla $n = 1.75$ (a) oraz $n = 1.79$ (b), dla modelu opisującego dwa dziurowe pasma nadprzewodnika na bazie żelaza. Stała w wyrazie parującym została obrana jako $U_0 = 0.39$. Rysunki (c) oraz (d) przedstawiają energię swobodną odpowiednio dla $n = 1.75$ oraz $n = 1.79$, w funkcji Q_x dla $Q_y = 0$. Minima widoczne w (b) oraz (d) świadczą o możliwości spontanicznego tworzenia się fazy FF.

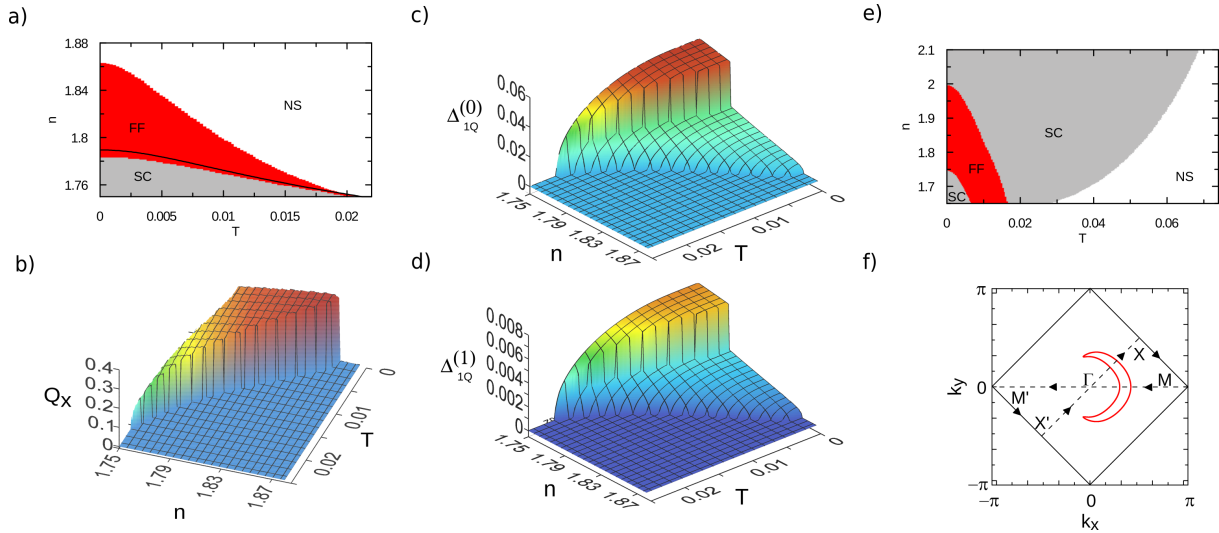
W pierwszej kolejności przeanalizowano model uproszczony, na który składają się jedynie dwa pasma dziurowe. W takiej sytuacji mamy dwie koncentryczne powierzchnie Fermiego umieszczone wokół punktu Γ , a parowanie następuje pomiędzy nimi [patrz rys. 21 (b)]. Na rys. 22

przedstawiono jak energia swobodna układu zależy od pędu par Coopera dla dwóch wybranych wartości domieszki. Dla $n = 1.75$ układ wybierze stan nadprzewodzący z $\mathbf{Q} = (0, 0)$ (a), natomiast po zwiększeniu domieszki o 0.04, co prowadzi do zwiększenia Δk_1 , pojawiają się cztery minima odpowiadające niezerowej wartości pędu par Coopera (b). Jak widać na rys. 22 (d) energia swobodna dla niezerowego \mathbf{Q} posiada niższą wartość niż dla $\mathbf{Q} = (0, 0)$. Zatem, układ spontanicznie przejdzie do stanu, w którym płynie prąd nadprzewodzący. Fakt, że pojawiają się cztery równoważne minima leżące na osiach k_x oraz k_y wynika z symetrii sieci krystalicznej oraz z symetrii przerwy nadprzewodzącej (*s-wave*). Przeprowadzono obliczenia również w nieco innym ujęciu teoretycznym dla symetrii typu *d-wave*, dla której podobne minima leżały na kierunkach $k_x = k_y$ oraz $k_x = -k_y$ (patrz rys. 6 w pracy [H9]).

Wyznaczony diagram fazowy na płaszczyźnie temperatura, wypełnienie pasma [rys. 23 (a)] przypomina ten, jaki otrzymuje się dla standardowej fazy FFLO zaindukowanej polem magnetycznym [88, 89]. Jednakże, w tym drugim przypadku zamiast osi z domieszkowaniem występuje oś odpowiadająca indukcji pola magnetycznego. Równocześnie, w obu przypadkach przejście pomiędzy fazą SC, a FF jest przejściem nieciągłym na co wskazuje nagły spadek amplitud parowania odpowiadających symetrią *s-wave* oraz *extended s-wave* ($\Delta_{1Q}^{(0)}$ oraz $\Delta_{1Q}^{(1)}$) na granicy SC/FF [por. rys. 23 (c) oraz (d)]. Ponadto, wyznaczone zależności amplitud parowania oraz wektora \mathbf{Q} od domieszki i temperatury są zbliżone do tych, jakie prezentowane zostały w pracy [89] dla przypadku konwencjonalnego charakteru fazy FF. W rozważanym modelu, sytuacja odpowiadająca spinowemu-singletowi z orbitalnym-trypletami jest równoważna spinowemu-trypletowi z orbitalnym-singletem. Zatem, zaproponowana faza typu FF może też występować w odmianie z trypletowymi parami Coopera, gdzie parowanie międzypasmowe zaindukowane jest np. przez regułę Hunda. Taki scenariusz rozważany był w pracy [H9]).

Zaproponowaną koncepcję przetestowano również dla pełnego modelu czteropasmowego. Jak widać na rys 21, w takim przypadku rozbieżność pomiędzy dwoma pasmami dziurowymi (określona przez Δk_1) może być różna od tej jaka odpowiada pasmom elektronowym (określona przez Δk_2). Zatem, można w ogólności rozważać sytuację, w której mamy do czynienia z dwoma różnymi wektorami \mathbf{Q} , z których każdy prowadzi do kompensacji niedopasowania powierzchni Fermiego w innej parze pasm. Niemniej jednak, ze względu na wyraz transferu par Coopera pomiędzy pasmami dziurowymi, a elektronowymi, który nie wiąże się ze zmianą pędu, pary Coopera w obu pasmach, powinny mieć taki sam pęd środka masy. Zatem, przy założeniu, że podczas transferu par Coopera nie dochodzi do zmiany pędu, należy minimalizować energię układu względem pojedynczego wektora \mathbf{Q} , który odpowiada całemu układowi.

Jak pokazano w pełnym modelu czteropasmowym, podobnie jak wcześniej, istnieje możliwość otrzymania minimów energii układu dla niezerowych wektorów \mathbf{Q} leżących na osiach k_x oraz k_y (patrz rys. 8 z pracy [H8]) dla odpowiednio dobranego wypełnienia pasm. Diagram fazowy z wyraźnym obszarem stabilności fazy FF na płaszczyźnie wypełnienie pasma, temperatura jest przedstawiony na rys. 23 (e). Podobnie jak wcześniej, przejścia fazowe pomiędzy fazą SC oraz FF są przejściami nieciągłymi. Tym razem diagram fazowy ma dość niekonwencjonalny charakter. Mianowicie, w miarę jak zwiększamy domieszkowanie, faza FF przechodzi z powrotem do fazy SC zamiast bezpośrednio do fazy normalnej jak to miało miejsce poprzednio [por. rys. 23 (a)]. Niemniej jednak, położenie obszaru stabilności fazy FF na diagramie jest podobne jak w przypadku uproszczonego modelu dwu-pasmowego, co jest spowodowane faktem, że to kształt powierzchni Fermiego dla dwóch pasm dziurowych determinuje w dominującym stopniu wartość wektora \mathbf{Q} w fazie FF. Jak wynika z przeprowadzonej analizy, przerwa nadprzewodząca dla pasm elektronowych jest większa niż dla dziurowych co powoduje, że dla zadanego przedziału domieszki mimo niezerowego Δk_2 nadprzewodnictwo w tych pasmach mogłoby istnieć bez konieczności kompensacji Δk_2 poprzez niezerowy pęd par Coopera. Zatem, faza FF jest indukowana ze względu na korzystną energetycznie kompensację Δk_1 , która występuje w pasmach dziurowych. Wskazuje na to również kształt wyznaczonego obszaru "deparowania" w strefie Brillouina [rys. 23 (f)], który zajmowany jest przez niesparowane cząstki w jednym z pasm dziurowych. Wszystkie cząstki w pasmach elektronowych są sparowane; dlatego też ob-



Rysunek 23: (a) Diagram fazowy na płaszczyźnie (T, n) dla modelu opisującego dwa dziurowe pasma nadprzewodnika na bazie żelaza. Czarna ciągła linia określa górne krytyczne domieszkowania w sytuacji kiedy faza FF nie jest brana pod uwagę w obliczeniach; (b) wartości składowej Q_x pędu par Coopera w zależności od n oraz T , które odpowiadają stabilności fazy FF; (c) oraz (d) amplitudy przerwy nadprzewodzącej typu s -wave oraz $extended\ s$ -wave w zależności od n oraz T ; (e) diagram fazowy na płaszczyźnie (T, n) dla $U_o = 0.39$ oraz $\gamma = 0.01$ dla modelu czteropasmowego; (f) obszar zajmowany przez niesparowane cząstki pochodzące z jednego z pasm dziurowych dla wybranego wypełnienia pasma $n = 1.795$.

szar deparowania zlokalizowany jest w pobliżu powierzchni Fermiego (*underlying Fermi surface*) odpowiadającej jednemu z pasm dziurowych.

Podsumowując wyniki przedstawione w tym rozdziale stwierdzamy, że przeprowadzone obliczenia wskazują, że zaproponowana niekonwencjonalna faza typu Fulde-Ferrella może być stabilna w materiałach, w których nadprzewodnictwo ma charakter wielopasmowy z dominującym parowaniem międzypasmowym oraz odpowiednią topologią powierzchni Fermiego. Przykładową grupą materiałów, które mogłyby spełniać te warunki są nadprzewodniki wysokotemperaturowe na bazie żelaza. Jak pokazano, w modelu adekwatnym to tego typu materiałów przy dobraniu odpowiedniego domieszkowania następuje stabilizacja fazy FF, a podstawowe jej charakterystyki są zbliżone do tych jakie obserwuje się dla standardowej sytuacji, w której niezerowy pęd par Coopera zaindukowany jest obecnością zewnętrznego pola magnetycznego. Przedstawiona koncepcja jest interesująca także ze względu na możliwość otrzymania materiału, w którym prąd nadprzewodzący jest indukowany przy doborze odpowiedniego poziomu domieszkowania, bez konieczności przykładania zewnętrznego pola magnetycznego. Niemniej jednak w dalszym ciągu dyskusyjne pozostaje to, czy w zaproponowanej grupie materiałów możliwe jest parowanie z dominującym kanałem międzypasmowym. Należy również zauważyć, że do tej pory zaproponowany efekt nie został zaobserwowany doświadczalnie. Dlatego temat ten wymaga dalszej analizy, zarówno teoretycznej jak i eksperymentalnej.

4.8 Podsumowanie

Przeprowadzona kompleksowa analiza jednopasmowych modeli teoretycznych nadprzewodników na bazie miedzi pokazała, że ważnymi elementami opisu, które pozwalają na otrzymanie dobrej zgodności z doświadczeniem, są: (i) uwzględnienie wyrazu oddziaływań wymiennych ($\sim J$) pomiędzy najbliższymi sąsiadami, który w sposób efektywny reprezentuje nadwymianę pomiędzy orbitalami typu d poprzez stany tlenowe płaszczyzny Cu-O; (ii) dozwolone niezerowe podwójne obsadzenia, których wartość jest jednak niewielka ze względu na wyraz silnego odpychania kulombowskiego; (iii) uwzględnienie efektów wynikających z silnych korelacji elek-

tronowych na poziome wyższym niż RMFT.

Wymienione cechy posiada podejście oparte o model t - J - U przy użyciu metody DE-GWF z uwzględnieniem wyższych rzędów rozwinięcia diagramatycznego. W oparciu o taki opis płaszczyny miedziowo-tlenowej udało się otrzymać następujące wyniki:

- Otrzymano dobrą zgodność z dostępnymi danymi eksperymentalnymi dla podstawowych wielkości charakteryzujących stan nadprzewodzący w kupratkach. Mianowicie, (i) wyznaczona teoretycznie skorelowana amplituda parowania odzwierciedla strukturę domu nadprzewodzącego z górnym domieszkowaniem krytycznym wynoszącym $\sim 0.35 - 0.4$ oraz domieszkowaniem optymalnym $\sim 0.1 - 0.2$; (ii) Obserwuje się asymetrię pomiędzy domem nadprzewodzącym po stronie domieszkowań elektronowych oraz dziurowych na korzyść tych drugich; (iii) otrzymano przejście pomiędzy stanem sparowanym typu “non-BCS” oraz “BCS-like” w okolicach domieszkowania optymalnego z fazą typu “non-BCS” mieszczącą się w obszarze słabych domieszkowań [ilościowa zgodność z eksperymentem dla $\Delta E_{\text{kin}}(\delta)$]; (iv) Obliczona prędkość Fermiego w kierunku nodalnym, pęd Fermiego oraz masa efektywna słabo zależą od domieszkowania i zgadzają się ilościowo z dostępnymi danymi pomiarowymi.
- Otrzymany obraz fizyczny stanu nadprzewodzącego w oparciu o model t - J - U jest zachowany dla modelu rozszerzonego o kolejne dwuwęzłowe wyrazy oddziaływań (skorelowany hopping oraz międzywęzłowe odpychanie Coulomba). Taka sytuacja świadczy o uniwersalności opisu, tj. o poprawnym wyborze minimalnego modelu prowadzącego do rekonstrukcji podstawowych wybranych własności nadprzewodników wysokotemperaturowych na bazie miedzi.
- Badania dla struktury dwuwarstwy miedziowo-tlenowej wskazują, że podstawowe własności stanu nadprzewodzącego otrzymane w ramach opisu opartego o jednopasmowy model t - J - U nie zmieniają się zasadniczo na skutek efektów międzyplaszczynowych. Natomiast, w układach z większą niż jeden ilością warstw Cu-O w komórce elementarnej wzrost maksymalnej temperatury krytycznej jest głównie spowodowany przez międzyplaszczynowe przeskoki par. Ponadto, dla modelu dwuwarstwy udało się otrzymać całkiem dobrą zgodność wyników teoretycznych z eksperymentalnymi dla związku Bi-2212 jeżeli chodzi o wielkości mierzone za pomocą kątowno-rozdzielczej spektroskopii elektronowej (ARPES).
- Udało się odwzorować właściwą sekwencję faz jaka obserwowana jest na eksperymentalnym diagramie fazowym dla kupratów z fazą nadprzewodzącą typu d -wave powyżej domieszkowania optymalnego oraz fazą z modulacją ładunkową poniżej domieszkowania optymalnego, gdzie występuje konkurencja pomiędzy fazami SC oraz CDW. Ponadto, faza z modulacją ładunkową w rozważanym przypadku wystąpiła w postaci koegzystującej z falą gęstości par Coopera (PDW+CDW). Ta ostatnia w została zaobserwowana eksperymentalnie w ostatnich latach. Aspektem, który wymaga dalszych badań w tym kontekście jest balans pomiędzy amplitudami modulacji, jakie odpowiadają poszczególnym symetriom.

W ramach przeprowadzonych badań rozszerzono również podejście DE-GWF na przypadek modelu trójpasmowego kupratów, który w sposób jawny uwzględnia tlenowe stopnie swobody. W pewnych ogólnych aspektach podejścia jedno- oraz trój-pasmowe prowadzą do zbliżonych wyników dotyczących fazy nadprzewodzącej, co przemawia za poprawnością efektywnego opisu jednopasmowego oraz wyników opisanych powyżej. Niemniej jednak, jawne uwzględnienie tlenowych stopni swobody wydaje się konieczne w celu przeprowadzenia dokładnego opisu poszczególnych związków należących do rodziny kupratów oraz odwzorowania różnic jakie między nimi występują takich jak np. różne wartości maksymalnej temperatury krytycznej. Przedstawiona tutaj analiza współczynnika dystrybucji koncentracji dziur ρ , który związany jest z tym ostatnim aspektem, pokazuje zgodność jakościową z dostępnymi danymi eksperymentalnymi.

Przedstawione badania teoretyczne nad nadprzewodnikami na bazie miedzi w oparciu o paradygmat silnych korelacji doprowadziły do wyników, które w jednolity sposób rekonstruuja

fundamentalne własności część diagramu fazowego kupratów. Niemniej jednak, wciąż nie udało się stworzyć w pełni kompletnej teorii wszystkich niekonwencjonalnych faz obserwowanych w tej rodzinie związków. W szczególności, wciąż brakuje prawidłowego opisu fazy pseudoprzerwy oraz określenia jej związku z takimi fazami, jak nadprzewodnictwo czy np. fazy CDW lub PDW. Wydaje się, że w tym celu konieczne może być przeprowadzenie analogicznej analizy, która jednak uwzględnia zarówno efekty wynikające z silnych korelacji o charakterze lokalnym (tak jak tutaj), jak i daleko-zasięgowe fluktuacje kwantowe. Takie podejście cechuje się znacznie większym stopniem złożoności i wymaga dalszej szczegółowej analizy.

W ramach badań nad niekonwencjonalnym nadprzewodnictwem zaproponowano również nietypową fazę Fulde-Ferrella, która może powstać spontanicznie, tj. bez konieczności przykładania zewnętrznego czynnika w postaci pola magnetycznego. Zgodnie z rozważaną koncepcją, w materiale z dominującym parowaniem międzypasmowym niedopasowanie występujące pomiędzy dwoma powierzchniami Fermiego może zostać skompensowane przez niezerowy pęd par Coopera co prowadzi do powstania fazy FF. Ten pomysł przetestowano w modelu adekwatnym do opisu nadprzewodników na bazie żelaza. Jak pokazano, stabilizacja fazy FF występuje w ramach stosowanego podejścia po odpowiednim doborze poziomu domieszkowania. Przedstawiona koncepcja jest interesująca także ze względu na możliwość otrzymania materiału, w którym prąd nadprzewodzący jest indukowany przez odpowiedni poziom domieszkowania bez konieczności przykładania zewnętrznego pola. Niemniej jednak, w dalszym ciągu dyskusyjne pozostaje to, czy w zaproponowanej grupie materiałów możliwe jest parowanie z dominującym kanałem międzypasmowym. Ten ostatni aspekt wymaga dalszej analizy.

4.9 Literatura

- [1] M. Ogata, H. Fukuyama. “The $t - J$ model for the oxide high- T_c superconductors”. *Rep. Prog. Phys.* **71** (2008), 036501.
- [2] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa, Xiao-Gang Wen. “Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity”. *Rev. Mod. Phys.* **78** (2006), 17.
- [3] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, J. Zaanen. “From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides”. *Nature* **518** (2015), 179.
- [4] M. Hashimoto, M. Vishik, R.-H. He, T. P. Devereaux, Z.-X. Shen. “Energy gaps in high-transition-temperature cuprate superconductors”. *Nature Physics* **10** (2014), 483.
- [5] R. Comin, R. Sutarto, F. He, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, A. Fraño, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, Y. Yoshida, H. Eisaki, A. J. Achkar, D. G. Hawthorn, B. Keimer, G. A. Sawatzky, A. Damascelli. “Symmetry of charge order in cuprates”. *Nature Materials* **14** (2015), 796.
- [6] M. H. Hamidian, S. D. Edkins, S. H. Joo, A. Kostin, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E.-A. Kim, A. P. Mackenzie, K. Fujita, J. Lee, J. C Séamus Davis. “Detection of a Cooper-pair density wave in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ ”. *Nature* **532** (2016), 343.
- [7] S. Badoux, W. Tabis, F. Laliberté, G. Grissonnanche, B. Vignolle, D. Vignolles, J. Béard, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, N. Doiron-Leyraud, L. Taillefer, C. Proust. “Change of carrier density at the pseudogap critical point of a cuprate superconductor”. *Nature* **531** (2016), 210.
- [8] P. W. Anderson. *in Frontiers and Borderlines in Many Particle Physics, edited by R. A. Broglia and J. R. Schrieffer, pp. 1-47* (North-Holland, Amsterdam, 1988).
- [9] P. W. Anderson. “More is Different”. *Science* **177** (1972), 393.
- [10] V. N. Krasnov, S.-O. Katterwe, A. Rydh. “Signatures of the electronic nature of pairing in high- T_c superconductors obtained by non-equilibrium boson spectroscopy”. *Nat. Commun.* **4** (2013), 2970.

- [11] D. J. Scalapino. “A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors”. *Rev. Mod. Phys.* **84** (2012), 1383.
- [12] R. Szczśniak, A. P. Durajski. “The Energy Gap in the $(\text{Hg}_{1-x}\text{Sn}_x)\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+y}$ Superconductor”. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **27** (2014), 1363–1367.
- [13] R. Szczśniak, A. P. Durajski. “Description of High-Temperature Superconducting State in BSLCO Compound”. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism* **28** (2015), 19–24.
- [14] S. Johnston, F. Vernay, B. Moritz, Z.-X. Shen, N. Nagaosa, J. Zaanen, T. P. Devereaux. “Systematic study of electron-phonon coupling to oxygen modes across the cuprates”. *Phys. Rev. B* **82** (2010), 064513.
- [15] F. C. Zhang, T. M. Rice. “Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides”. *Phys. Rev. B* **37** (1988), 3759.
- [16] K. A. Chao, J. Spałek, A. M. Oleś. “Kinetic exchange interaction in a narrow s-band”. *J. Phys. C* **10** (1977), L271.
- [17] K. B. Lyons, P. A. Fleury, L. F. Schneemeyer, J. V. Waszczak. “Spin fluctuations and superconductivity in $\text{Ba}_2\text{YCu}_3\text{O}_{6+\delta}$ ”. *Phys. Rev. Lett.* **60** (1988), 732–735.
- [18] Shunji Sugai, Shin-ichi Shamoto, Masatoshi Sato. “Two-magnon Raman scattering in $(\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x)_2\text{CuO}_4$ ”. *Phys. Rev. B* **38** (1988), 6436–6439.
- [19] G. Blumberg, P. Abbamonte, M. V. Klein, W. C. Lee, D. M. Ginsberg, L. L. Miller, A. Zibold. “Resonant two-magnon Raman scattering in cuprate antiferromagnetic insulators”. *Phys. Rev. B* **53** (1996), R11930–R11933.
- [20] P. Bourges, H. Casalta, A. S. Ivanov, D. Petitgrand. “Superexchange Coupling and Spin Susceptibility Spectral Weight in Undoped Monolayer Cuprates”. *Phys. Rev. Lett.* **79** (1997), 4906–4909.
- [21] B. Edegger, V. N. Muthukumar, C. Gros. “Gutzwiller–RVB theory of high-temperature superconductivity: Results from renormalized mean-field theory and variational Monte Carlo calculations”. *Advances in Physics* **56** (2007), 927–1033.
- [22] F. C. Zhang, C. Gros, T. M. Rice, H. Shiba. “A renormalised Hamiltonian approach to a resonant valence bond wavefunction”. *Superconductor Science and Technology* **1** (1988), 36.
- [23] E. Dagotto. “Correlated electrons in high-temperature superconductors”. *Rev. Mod. Phys.* **66** (1994), 763–840.
- [24] Arun Paramekanti, Mohit Randeria, Nandini Trivedi. “Projected Wave Functions and High Temperature Superconductivity”. *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001), 217002.
- [25] Leonardo Spanu, Massimo Lugas, Federico Becca, Sandro Sorella. “Magnetism and superconductivity in the $t-t'-J$ model”. *Phys. Rev. B* **77** (2008), 024510.
- [26] Sandeep Pathak, Vijay B. Shenoy, Mohit Randeria, Nandini Trivedi. “Competition between Antiferromagnetic and Superconducting States, Electron-Hole Doping Asymmetry, and Fermi-Surface Topology in High Temperature Superconductors”. *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009), 027002.
- [27] Philippe Corboz, T. M. Rice, Matthias Troyer. “Competing States in the t - J Model: Uniform d -Wave State versus Stripe State”. *Phys. Rev. Lett.* **113** (2014), 046402.
- [28] Steven R. White, D. J. Scalapino. “Competition between stripes and pairing in a $t - t' - J$ model”. *Phys. Rev. B* **60** (1999), R753–R756.
- [29] A. Himeda, T. Kato, M. Ogata. “Stripe States with Spatially Oscillating d -Wave Superconductivity in the Two-Dimensional $t - t' - J$ Model”. *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002), 117001.

- [30] Yuxuan Wang, Daniel F. Agterberg, Andrey Chubukov. “Coexistence of Charge-Density-Wave and Pair-Density-Wave Orders in Underdoped Cuprates”. *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015), 197001.
- [31] J. P. L. Faye, D. Sénéchal. “Interplay between d -wave superconductivity and a bond-density wave in the one-band Hubbard model”. *Phys. Rev. B* **95** (2017), 115127.
- [32] Hermann Freire, Vanuildo S. de Carvalho, Catherine Pépin. “Renormalization group analysis of the pair-density-wave and charge order within the fermionic hot-spot model for cuprate superconductors”. *Phys. Rev. B* **92** (2015), 045132.
- [33] Krzysztof Byczuk, Jozef Spalek. “Transition temperature and a spatial dependence of the superconducting gap for multilayer high-temperature superconductors”. *Phys. Rev. B* **53** (1996), R518–R521.
- [34] R. Rüger, L. F. Tocchio, R. Valentí, C. Gros. “The phase diagram of the square lattice bilayer Hubbard model: a variational Monte Carlo study”. *New Journal of Physics* **16** (2014), 033010.
- [35] Voo K.-K. “Ground states of bilayered and extended t-J-U models”. *Physics Letters A* **379** (2015), 1743.
- [36] K. Nishiguchi, K. Kuroki, R. Arita, T. Oka, H. Aoki. “Superconductivity assisted by interlayer pair hopping in multilayered cuprates”. *Phys. Rev. B* **88** (2013), 014509.
- [37] T. A. Maier, D. J. Scalapino. “Pair structure and the pairing interaction in a bilayer Hubbard model for unconventional superconductivity”. *Phys. Rev. B* **84** (2011), 180513.
- [38] P. Plakida. *High-Temperature Cuprate Superconductors, Chapters 5, 7* ((Springer, 2010)).
- [39] Andrea Damascelli, Zahid Hussain, Zhi-Xun Shen. “Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors”. *Rev. Mod. Phys.* **75** (2003), 473–541.
- [40] Y. Sakurai, M. Itou, B. Barbiellini, P. E. Mijnen, R. S. Markiewicz, S. Kaprzyk, J.-M. Gillet, S. Wakimoto, M. Fujita, S. Basak, Yung Jui Wang, W. Al-Sawai, H. Lin, A. Bansil, K. Yamada. “Imaging Doped Holes in a Cuprate Superconductor with High-Resolution Compton Scattering”. *Science* **332**.6030 (2011), 698–702.
- [41] Guo-qing Zheng, Yoshio Kitaoka, Kenji Ishida, Kunisuke Asayama. “Local Hole Distribution in the CuO₂ Plane of High-T_c Cu-Oxides Studied by Cu and Oxygen NQR/NMR”. *Journal of the Physical Society of Japan* **64** (1995), 2524–2532.
- [42] D. Rybicki, M. Jurkutat, S. Reichardt, C. Kapusta, J. Haase. “Perspective on the phase diagram of cuprate high-temperature superconductors”. *Nat. Commun.* **7** (2016), 11413.
- [43] W. Ruan, C. Hu, J. Zhao, P. Cai, Y. Peng, C. Ye, R. Yu, X. Li, Z. Hao, C. Jin, X. Zhou, Z.-Y. Weng, Y. Wang. “Relationship between the parent charge transfer gap and maximum transition temperature in cuprates”. *Science Bulletin* **61** (2016), 1826.
- [44] Cédric Weber, Kristjan Haule, Gabriel Kotliar. “Optical weights and waterfalls in doped charge-transfer insulators: A local density approximation and dynamical mean-field theory study of La_{2-x}Sr_xCuO₄”. *Phys. Rev. B* **78** (2008), 134519.
- [45] Ara Go, Andrew J. Millis. “Spatial Correlations and the Insulating Phase of the High-T_c Cuprates: Insights from a Configuration-Interaction-Based Solver for Dynamical Mean Field Theory”. *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015), 016402.
- [46] Y. F. Kung, C.-C. Chen, Yao Wang, E. W. Huang, E. A. Nowadnick, B. Moritz, R. T. Scalettar, S. Johnston, T. P. Devereaux. “Characterizing the three-orbital Hubbard model with determinant quantum Monte Carlo”. *Phys. Rev. B* **93** (2016), 155166.
- [47] C. Weber, C. Yee, K. Haule, G. Kotliar. “Scaling of the transition temperature of hole-doped cuprate superconductors with the charge-transfer energy”. *EPL (Europhysics Letters)* **100** (2012), 37001.

- [48] T. Yanagisawa, M. Miyazaki, K. Yamaji. “Incommensurate Antiferromagnetism Coexisting with Superconductivity in Two-Dimensional d-p Model”. *J. Phys. Soc. Jpn.* **78** (2009), 013706.
- [49] A. Avella, F. Mancini, F. Paolo Mancini, E. Plekhanov. “Emery vs. Hubbard model for cuprate superconductors: a composite operator method study”. *The European Physical Journal B* **86** (2013), 265.
- [50] H Ebrahimnejad, G. A Sawatzky, M. Berciu. “The dynamics of a doped hole in a cuprate is not controlled by spin fluctuations”. *Nature Physics* **10** (2014), 951.
- [51] H. Ebrahimnejad, G. A. Sawatzky, M. Berciu. “Differences between the insulating limit quasiparticles of one-band and three-band cuprate models”. *Journal of Physics: Condensed Matter* **28** (2016), 105603.
- [52] H. Hosono, K. Kuroki. “Iron-based superconductors: Current status of materials and pairing mechanism”. *Physica C* **514** (2015), 399.
- [53] Jozef Spalek. “t-J model then and now: a personal perspective from pioneering times”. *Acta Phys. Polon. A* **111** (2012), 409.
- [54] Guy Deutscher, Andrés Felipe Santander-Syro, Nicole Bontemps. “Kinetic energy change with doping upon superfluid condensation in high-temperature superconductors”. *Phys. Rev. B* **72** (2005), 092504.
- [55] F. Carbone, A. B. Kuzmenko, H. J. A. Molegraaf, E. van Heumen, V. Lukovac, F. Marsiglio, D. van der Marel, K. Haule, G. Kotliar, H. Berger, S. Courjault, P. H. Kes, M. Li. “Doping dependence of the redistribution of optical spectral weight in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ”. *Phys. Rev. B* **74** (2006), 064510.
- [56] C. Giannetti, F. Cilento, S. Dal Conte, G. Coslovich, F. Ferrini, H. Molegraaf, M. Raichle, R. Liang, H. Eisaki, M. Greven, A. Damascelli, D. van der Marel, F. Parmigiani. “Revealing the high-energy electronic excitations underlying the onset of high-temperature superconductivity in cuprates”. *Nat. Commun.* **2** (2011), 1.
- [57] D. van der Marel, J. van Elp, G. A. Sawatzky, D. Heitmann. “X-ray photoemission, bremsstrahlung isochromat, Auger-electron, and optical spectroscopy studies of Y-Ba-Cu-O thin films”. *Phys. Rev. B* **37** (1988), 5136–5141.
- [58] A. Fujimori. “Character of doped oxygen holes in high- T_c Cu oxides”. *Phys. Rev. B* **39** (1989), 793–796.
- [59] H. Eskes, L. H. Tjeng, G. A. Sawatzky. “Cluster-model calculation of the electronic structure of CuO: A model material for the high- T_c superconductors”. *Phys. Rev. B* **41** (1990), 288–299.
- [60] A. A. Kordyuk, S. V. Borisenko, A. N. Yaresko, S.-L. Drechsler, H. Rosner, T. K. Kim, A. Koitzsch, K. A. Nenkov, M. Knupfer, J. Fink, R. Follath, H. Berger, B. Keimer, S. Ono, Yoichi Ando. “Evidence for CuO conducting band splitting in the nodal direction of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ ”. *Phys. Rev. B* **70** (2004), 214525.
- [61] S. V. Borisenko, A. A. Kordyuk, V. Zabolotnyy, J. Geck, D. Inosov, A. Koitzsch, J. Fink, M. Knupfer, B. Büchner, V. Hinkov, C. T. Lin, B. Keimer, T. Wolf, S. G. Chiuzbăian, L. Patthey, R. Follath. “Kinks, Nodal Bilayer Splitting, and Interband Scattering in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ”. *Phys. Rev. Lett.* **96** (2006), 117004.
- [62] X. J. Zhou, T. Yoshida, A. Lanzara, P. V. Bogdanov, S. A. Kellar, K. M. Shen, W. L. Yang, F. Ronning, T. Sasagawa, T. Kakeshita, T. Noda, H. Eisaki, S. Uchida, C. T. Lin, F. Zhou, J. W. Xiong, W. X. Ti, Z. X. Zhao, A. Fujimori, Z. Hussain, Z.-X. Shen. “Universal nodal Fermi velocity”. **423** (2003), 398.
- [63] W. J. Padilla, Y. S. Lee, M. Dumm, G. Blumberg, S. Ono, Kouji Segawa, Seiki Komiya, Yoichi Ando, D. N. Basov. “Constant effective mass across the phase diagram of high- T_c cuprates”. *Phys. Rev. B* **72** (2005), 060511.

- [64] J. E. Hirsch, F. Marsiglio. “Superconducting state in an oxygen hole metal”. *Phys. Rev. B* **39** (1989), 11515–11525.
- [65] F. Marsiglio, J. E. Hirsch. “Hole superconductivity and the high- T_c oxides”. *Phys. Rev. B* **41** (1990), 6435–6456.
- [66] N. P. Armitage, D. H. Lu, C. Kim, A. Damascelli, K. M. Shen, F. Ronning, D. L. Feng, P. Bogdanov, X. J. Zhou, W. L. Yang, Z. Hussain, P. K. Mang, N. Kaneko, M. Greven, Y. Onose, Y. Taguchi, Y. Tokura, Z.-X. Shen. “Angle-resolved photoemission spectral function analysis of the electron-doped cuprate $\text{Nd}_{1.85}\text{Ce}_{0.15}\text{CuO}_4$ ”. *Phys. Rev. B* **68** (2003), 064517.
- [67] Seung Ryong Park, D. J. Song, C. S. Leem, Chul Kim, C. Kim, B. J. Kim, H. Eisaki. “Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy of Electron-Doped Cuprate Superconductors: Isotropic Electron-Phonon Coupling”. *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008), 117006.
- [68] I. M. Vishik, W. S. Lee, F. Schmitt, B. Moritz, T. Sasagawa, S. Uchida, K. Fujita, S. Ishida, C. Zhang, T. P. Devereaux, Z. X. Shen. “Doping-Dependent Nodal Fermi Velocity of the High-Temperature Superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ Revealed Using High-Resolution Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy”. *Phys. Rev. Lett.* **104** (2010), 207002.
- [69] Gil Drachuck, Elia Razzoli, Rinat Ofer, Galina Bazalitsky, R. S. Dhaka, Amit Kanigel, Ming Shi, Amit Keren. “Linking dynamic and thermodynamic properties of cuprates: An angle-resolved photoemission study of $(\text{Ca}_x\text{La}_{1-x})(\text{Ba}_{1.75-x}\text{La}_{0.25+x})\text{Cu}_3\text{O}_y$ ($x = 0.1$ and 0.4)”. *Phys. Rev. B* **89** (2014), 121119.
- [70] T. A. Zaleski, T. K. Kopeć. “Dependence of the superconducting critical temperature on the number of layers in a homologous series of high- T_c cuprates”. *Phys. Rev. B* **71** (2005), 014519.
- [71] O. K. Andersen, A. I. Liechtenstein, O. Jepsen, F. Paulsen. “LDA energy bands, low-energy hamiltonians, t' , t , $t_\perp(\mathbf{k})$ and J_\perp ”. *J. Phys. Chem. Sol.* **56** (1995), 1573.
- [72] Guo-meng Zhao. “Precise determination of the superconducting gap along the diagonal direction of $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+y}$: Evidence for an extended s -wave gap symmetry”. *Phys. Rev. B* **75** (2007), 140510.
- [73] H. Ding, J. C. Campuzano, A. F. Bellman, T. Yokoya, M. R. Norman, M. Randeria, T. Takahashi, H. Katayama-Yoshida, T. Mochiku, K. Kadowaki, G. Jennings. “Momentum Dependence of the Superconducting Gap in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ ”. *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995), 2784–2787.
- [74] D. Fournier, G. Levy, Y. Pennec, J. L. McChesney, A. Bostwick, E. Rotenberg, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, I. S. Elfimov, A. Damascelli. “Loss of nodal quasiparticle integrity in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ ”. *Nature* **6** (2010), 905.
- [75] M. J. Lawler, K. Fujita, J. Lee, A. R. Schmidt, Y. Kohsaka, C. K. Kim, H. Eisaki, S. Uchida, J. C. Davis, J. P. Sethna, E. -A. Kim. “Intra-unit-cell electronic nematicity of the high- T_c copper-oxide pseudogap states”. *Nature* **466** (2010), 347.
- [76] R. Daou, J. Chang, D. LeBoeuf, O. Cyr-Choinière, F. Laliberté, N. Doiron-Leyraud, B. J. Ramshaw, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, L. Taillefer. “Broken rotational symmetry in the pseudogap phase of a high- T_c superconductor”. *Nature* **463** (2010), 519.
- [77] V. Hinkov, D. Haug, B. Fauqué, P. Bourges, Y. Sidis, A. Ivanov, C. Bernhard, C. T. Lin, B. Keimer. “Electronic Liquid Crystal State in the High-Temperature Superconductor $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.45}$ ”. *Science* **319** (2008), 597–600.
- [78] D. Pelc, M. Vučković, H. -J. Grafe, S. -H. Baek, M. Požek. “Unconventional charge order in a co-doped high- T_c superconductor”. *Nat. Commun* **7** (2016), 12775.

- [79] A. J. Achkar, M. Zwiebler, Christopher McMahon, F. He, R. Sutarto, Isaiah Djianto, Zhihao Hao, Michel J. P. Gingras, M. Hücker, G. D. Gu, A. Revcolevschi, H. Zhang, Y.-J. Kim, J. Geck, D. G. Hawthorn. “Nematicity in stripe-ordered cuprates probed via resonant x-ray scattering”. *Science* **351** (2016), 576–578.
- [80] W. Tabis, Y. Li, M. Le Tacon, L. Braicovich, A. Kreyssig, M. Minola, G. Dellea, E. Weschke, M. J. Veit, M. Ramazanoglu, A. I. Goldman, T. Schmitt, G. Ghiringhelli, N. Barišić, M. K. Chan, C. J. Dorow, G. Yu, X. Zhao, B. Keimer, M. Greven. “Charge order and its connection with Fermi-liquid charge transport in a pristine high- T_c cuprate”. *Nat. Commun.* **5** (2014), 5875.
- [81] R. Comin, A. Frano, M. M. Yee, Y. Yoshida, H. Eisaki, E. Schierle, E. Weschke, R. Sutarto, F. He, A. Soumyanarayanan, Yang He, M. Le Tacon, I. S. Elfimov, Jennifer E. Hoffman, G. A. Sawatzky, B. Keimer, A. Damascelli. “Charge Order Driven by Fermi-Arc Instability in $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_6$ ”. *Science* **343** (2014), 390–392.
- [82] Eduardo H. da Silva Neto, Pegor Aynajian, Alex Frano, Riccardo Comin, Enrico Schierle, Eugen Weschke, András Gyenis, Jinsheng Wen, John Schneeloch, Zhijun Xu, Shimpei Ono, Genda Gu, Mathieu Le Tacon, Ali Yazdani. “Ubiquitous Interplay Between Charge Ordering and High-Temperature Superconductivity in Cuprates”. *Science* **343** (2014), 393–396.
- [83] R. Comin, R. Sutarto, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, F. He, G. A. Sawatzky, A. Damascelli. “Broken translational and rotational symmetry via charge stripe order in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ ”. *Science* **347** (2015), 1335–1339.
- [84] J. Chang, E. Blackburn, A. T. Holmes, N. B. Christensen, J. Larsen, J. Mesot, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, A. Watenphul, M. v. Zimmermann, M. V. Forgan, S. M. Hayden. “Direct observation of competition between superconductivity and charge density wave order in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.67}$ ”. *Nature Physics* **8** (2012), 871–876.
- [85] Motoaki Hirayama, Youhei Yamaji, Takahiro Misawa, Masatoshi Imada. “Ab initio effective Hamiltonians for cuprate superconductors”. *Phys. Rev. B* **98** (2018), 134501.
- [86] Peter Fulde, Richard A. Ferrell. “Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field”. *Phys. Rev.* **135** (1964), A550–A563.
- [87] A. I. Larkin, Y. N. Ovchinnikov. “Nonuniform state of superconductors”. *Sov. Phys. JETP* **20** (1965), 762.
- [88] A. Buzdin. “Non-uniform Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) state Author links open overlay panel”. *Physica B* **407** (2012), 1912.
- [89] M. M. Maška, M. Mierzejewski, J. Kaczmarczyk, J. Spałek. “Superconducting Bardeen-Cooper-Schrieffer versus Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov states of heavy quasiparticles with spin-dependent masses and Kondo-type pairing”. *Phys. Rev. B* **82** (2010), 054509.

5 Pozostałe osiągnięcia naukowo–badawcze

5.1 Przed uzyskaniem stopnia doktora nauk fizycznych

Badania prowadzone w ramach prac nad rozprawą doktorską skupiały się na teoretycznej analizie niekonwencjonalnego nadprzewodnictwa o charakterze trypletowym wraz z jego koegzystencją z magnetyzmem. Materiałami, w których obserwuje się parowanie trypletowe są UGe_2 , UIr , $URhGe$, $UCoGe$, UNi_2Al_3 , a także Sr_2RuO_4 . Związki z tej grupy należy zaliczyć do średnio lub silnie skorelowanych elektronowo, a w wielu z nich obserwuje się również uporządkowanie magnetyczne. W ramach prowadzonych badań analizie poddany został mechanizm parowania trypletowego zaindukowany regułą Hunda w dwupasmowym modelu Hubbarda. Takie podejście pozwala na jednolity opis zarówno fazy nadprzewodzącej jak i magnetycznej.

Sporządzone diagramy fazowe w oparciu o przybliżenie Hartree-Focka zawierały obszary stabilności zarówno fazy nadprzewodzącej trypletowej, jak i nadprzewodnictwa współistniejącego z antyferromagnetyzmem oraz ferromagnetyzmem [1, 2, 3, 4]. Jak pokazano uporządkowanie ferromagnetyczne może być stabilne poniżej progu Stonera gdy występuje w koegzystencji z nadprzewodnictwem. Ponadto, obserwuje się wzrost wartości przerwy nadprzewodzącej w obszarze, w którym stabilna zaczyna być faza ferromagnetyczna. Te dwa efekty świadczą o tym, że nadprzewodnictwo trypletowe typu A1 oraz uporządkowanie ferromagnetyczne wspomagają się nawzajem.

W kolejnym etapie badań uwzględniono wpływ korelacji elektronowych na rozważane zjawiska za pomocą metody tzw. statystycznie konsystentnego przybliżenia Gutzwillera (SGA) [5, 6, 7]. Zasadnicza różnica pomiędzy dwoma zestawami wyników (metody HF oraz SGA) polegała na tym, że po uwzględnieniu korelacji elektronowych obszar stabilności fazy nadprzewodzącej z ferromagnetyzmem nie występuje w odróżnieniu do wyników pochodzących z metody opartej o przybliżenie HF. W pozostałych aspektach wyniki pochodzące z obu metod były podobne z jakościowego punktu widzenia.

Zasadniczy wpływ korelacji elektronowych uwzględnionych w oparciu o metodę SGA zaobserwowano dla tak zwanego obszaru czysto odpychających oddziaływań ($U > J$) [6]. Mianowicie, dla tego przypadku otrzymano stabilność trypletowego nadprzewodnictwa dla obliczeń zgodnych z SGA. Natomiast, nie było możliwe otrzymanie stabilności fazy nadprzewodzącej w oparciu o przybliżenie HF. To prowadzi do stwierdzenia, że korelacje elektronowe wraz z regułą Hunda odgrywają zasadniczą rolę w indukowaniu mechanizmu parującego o charakterze trypletowym w obszarze czysto odpychających oddziaływań.

- [1] M. Zegrodnik, J. Spalek. “Coexistence of spin-triplet superconductivity with antiferromagnetism in orbitally degenerate system: Hartree-Fock approximation”. *Acta Phys. Polon.* **121** (2012), 801.
- [2] M. Zegrodnik, J. Spalek. “Spin-Triplet Pairing Induced by Hund’s Rule Exchange in Orbitally Degenerate Systems: Hartree—Fock Approximation”. *Acta Phys. Polon. A* **121** (2012), 1051.
- [3] M. Zegrodnik, J. Spalek. “Coexistence of spin-triplet superconductivity with magnetic ordering in an orbitally degenerate system: Hartree-Fock-BCS approximation revisited”. *Phys. Rev. B* **86** (2012), 014505.
- [4] M. Zegrodnik. “Hund’s rule induced spin-triplet superconductivity coexisting with magnetic ordering in the degenerate band Hubbard model”. *Proceedings of the ISD Workshops, Faculty of Physics and Applied Computer Science, AGH, Kraków. ISBN: 978-83-925779-3-5* (2013).
- [5] M. Zegrodnik, J. Spalek, J. Bünnemann. “Coexistence of spin-triplet superconductivity with magnetism within a single mechanism for orbitally degenerate correlated electrons: statistically consistent Gutzwiller approximation”. *New J. Phys.* **15** (2013), 073050.

- [6] M. Zegrodnik, J. Bünemann, J. Spałek. “Even-parity spin-triplet pairing by purely repulsive interactions for orbitally degenerate correlated fermions”. *New J. Phys.* **16** (2014), 033001.
- [7] Spałek, M. Zegrodnik. “Spin-triplet paired state induced by Hund’s rule coupling and correlations: a fully statistically consistent Gutzwiller approach”. *J. Phys. Condens. Matter* **25** (2013), 435601.

5.2 Po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych

W pracy [1] przeprowadzono badania teoretyczne nad nadprzewodnictwem w metalicznych nanostrukturach. W szczególności jak zostało zbadane w nanowarstwach nadprzewodzących, na skutek efektów kwantowych wynikających z uwiązania elektronów w kierunku prostopadłym do płaszczyzny warstwy, wartość pola krytycznego może nie spełniać relacji Clogstona-Chandrasekhara. W pracy [2] przebadano również wpływ efektów orbitalnych na wartość pola krytycznego dla nanowarstw nadprzewodzących. Jak pokazano efekt orbitalny zmniejsza wartość pola krytycznego oraz redukuje amplitudę oscylacji pola krytycznego w funkcji szerokości warstwy. Ponadto, wyznaczona zależność nachylenia $H_c(T_C)$ w $T_C(0)$ jest w zgodzie z dostępnymi danymi eksperymentalnymi.

W pracy [3] przeanalizowano możliwość tworzenia się fazy Fulde-Ferrel-Larkin-Owczynnikowa w metalicznych nanowarstwach w zewnętrznym polu magnetycznym. W szczególności jak zostało pokazane na skutek efektów wielopasmowych wynikających z uwiązania elektronów w kierunku poprzecznym warstwy, obszar stabilności fazy FFLO rozdziela się na serie mniejszych obszarów. Każdy z nich odpowiada dopasowaniu pędu środka masy par Coopera tak aby kompensować niedopasowanie powierzchni Fermiego pochodzące z innego pasma. Poddano również analizie możliwość indukowania fazy Fulde-Ferrel przez efekty orbitalne w nanodrucie umieszczonym w zewnętrznym polu magnetycznym [4]. Ponadto, w pracy [5] analizie poddane zostały własności transportowe heterostruktury HM/CM/SC (półmetal/ stożkowy magnetyk/nadprzewodnik) w ramach samozgodnego podejścia opartego na połączeniu formalizmu BTK z równaniami BdG.

W pracy [6] przedstawione zostało alternatywne podejście do metody opartej o diagramatyczne rozwinięcie funkcji falowej Gutzwillera, w ramach którego sumowanie diagramów wykonywane było w przestrzeni odwrotnej dzięki temu można było w ścisły sposób wykonywać rachunki w granicy termodynamicznej. Takie podejście zostało użyte do analizy podstawowych modeli służących do opisu układów silnie skorelowanych fermionów. W ramach przeprowadzonych badań otrzymano dobrą zgodność z eksperymentem jeżeli chodzi o dwie wartości prędkości Fermiego w związkach na bazie miedzi.

W pracy [7] przeprowadzone zostały obliczenia dla efektywnego modelu opisującego układ składający się z dwóch warstw grafenowych skręconych względem siebie o kąt magiczny. Dzięki wykonanym obliczeniom udało się zrekonstruować dwie kopuły nadprzewodzące występujące po dwóch stronach pasma wypełnionego do połowy ze znaczącym obszarem separacji fazowej, podobnie jak to ma miejsce w eksperymencie. Ponadto, przebadano własności topologiczne rozważanej fazy nadprzewodzącej.

- [1] P. Wójcik, M. Zegrodnik. “Quantum size effect on the paramagnetic critical field in free-standing superconducting nanofilms”. *J. Phys. Condens. Matter* **26** (2014), 455302.
- [2] P. Wójcik, M. Zegrodnik. “Orbital effect on the in-plane critical field in free-standing superconducting nanofilms”. *Phys. Status Solidi B* **252** (2015), 2096–2103.
- [3] P. Wójcik, M. Zegrodnik. “Interplay between quantum confinement and Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov phase in superconducting nanofilms”. *Physica E* **83** (2016), 442.
- [4] P. Wójcik, M. Zegrodnik, J. Spałek. “Fulde-Ferrell state induced by the orbital effect in a superconducting nanowire”. *Phys. Rev. B* **91** (2015), 224511.

- [5] P. Wójcik, M. Zegrodnik. “Tunneling conductance through the half-metal/conical magnet/superconductor junctions in the adiabatic and non-adiabatic regimes: Self-consistent calculations”. *Physica E* **83** (2016), 466.
- [6] M. Fidrysiak, M. Zegrodnik, J. Spalek. “Realistic estimates of superconducting properties for the cuprates: reciprocal-space diagrammatic expansion combined with variational approach”. *J. Phys. Condens. Matter* **30** (2018), 475602.
- [7] M. Fidrysiak, M. Zegrodnik, J. Spalek. “Unconventional topological superconductivity and phase diagram for an effective two-orbital model as applied to twisted bilayer graphene”. *Phys. Rev. B* **98** (2018), 085436.

Marek Zegrodnik