

# Właściwości ciekłego ${}^3\text{He}$ jako skorelowanej cieczy kwantowej

Marcin Mateusz Wysokiński

Praca magisterska

Opiekun naukowy: prof. dr hab. Józef Spałek



Zakład Teorii Materii Skondensowanej i Nanofizyki  
Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego  
Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Kraków, Czerwiec 2011



## Podziękowania

W pierwszej kolejności chciałbym podziękować mojemu opiekunowi naukowemu profesorowi **Józefowi Spałkowi** za owocną dwuletnią współpracę, która doprowadziła do powstania poniższej pracy. Ponadto za zaproponowanie tak ciekawego tematu oraz za bezcenną dyskusję i wielokrotne korekty treści.

Z tej okazji chciałbym podziękować również Jakubowi Jędrakowi, Janowi Kaczmarczykowi i Marcinowi Abramowi za wiele stymulujących dyskusji w temacie pracy. Chciałbym też dodatkowo podziękować Marcinowi Abramowi za wszelką informatyczną pomoc.

Niniejsza praca stanowiła składnik grantu TEAM otrzymanego przez nasz zespół na lata 2011-14 od Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej (FNP). Autor dziękuje także za dofinansowanie z grantu Nr NN 202 128 736 przyznanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

## Abstract

The goal of this thesis is to present quantum and correlated nature of liquid  ${}^3\text{He}$ . As a main part of this thesis there is presented Gutzwiller variational method with additional statistical consistency constraints introduced by our team. As a result magnetization curve is obtained and its shape is compared for various lattices with experiment. Good qualitative agreement shows conception significance of liquid  ${}^3\text{He}$  as a correlated Fermi liquid and indicates that its solidification can be considered as a Mott-Hubbard transition from mobile fermions states (liquid) to localized states (solid). Additionally this result is qualitative better in comparison to those obtained within normal Gutzwiller approach widely used for liquid  ${}^3\text{He}$  description.

The thesis is organized as follows. The beginning (**chapter I**) focus on experimental confirmation of large effective mass renormalization of  ${}^3\text{He}$  atoms in liquid and on basic quantum properties of liquid  ${}^3\text{He}$ . In next section (**chapter II**) for the sake of completeness there is introduced Landau theory of Fermi liquid. Subsequently in **chapter III** there is presented Hubbard model and its application to liquid  ${}^3\text{He}$ . To explore the role of quantum localization effects as induced by strong localization there is presented in **chapter IV** Hubbard Hamiltonian solved within Gutzwiller approach in different band filling regimes: half-filled band and almost localized Fermi liquid. Next in **chapter V** there is introduced SGA method formalism. All technical details concerning selected lattices such as shape of first Brillouin Zone, dispersion relation and density of states are collected in **chapter VI**. In **chapter VII** there are presented results of magnetization curves obtained within SGA method for selected lattices. At the end **chapters VIII** and **IX** contain conclusion of the thesis and direction of foreseeable future research.

## Streszczenie

Celem pracy jest omówienie kwantowej i skorelowanej natury ciekłego  ${}^3\text{He}$ . Jako główny trzon pracy została zaprezentowana metoda Gutzwillera z dodatkowymi warunkami konsystencji statystycznej wprowadzona w naszym zespole (SGA). Jako rezultat otrzymano wyniki dla krzywej magnetyzacji, a jej kształt został porównany dla różnych sieci z eksperymentem. Otrzymana jakościowo dobra zgodność pokazuje istotność koncepcji  ${}^3\text{He}$  jako skorelowanej cieczy Fermiego i wskazuje, iż jego zestalenie się może być rozważane jako przejście Motta-Hubbarda od stanów wędrownych fermionów (ciecz) do zlokalizowanych (ciało stałe). Dodatkowo rezultat ten jest jakościowo lepszy w stosunku do otrzymanego w ramach podejścia Gutzwillera, który jest szeroko stosowany do opisu  ${}^3\text{He}$ .

Praca jest uporządkowana następująco. Początek pracy (**rozdział I**) skupia się na doświadczalnym potwierdzeniu dużej renormalizacji masy efektywnej atomów i na podstawowych kwantowych właściwościach cieczy  ${}^3\text{He}$ . W **rozdziale II** omówiono teorię Landaua cieczy Fermiego. Następnie w **rozdziale III** został przedstawiony model Hubbarda i jego zastosowanie do opisu ciekłego  ${}^3\text{He}$ . W ramach badania roli kwantowej lokalizacji, indukowanej dużym oddziaływaniem w **rozdziale IV** zostało zaprezentowane rozwiązanie Hamiltonianu Hubbarda w podejściu Gutzwillera dla różnego stopnia wypełnienia pasma. Rozważano limit w połowie wypełnionego pasma i prawie zlokalizowanej cieczy Fermiego. Następnie **rozdział V** wprowadza formalizm metody SGA. Wszystkie techniczne detale dotyczące wybranych sieci takich jak pierwsza strefa Brillouina, relacje dyspersji i gęstość stanów zostały zebrane w **rozdziale VI**. W **rozdziale VII** zaprezentowane zostały wyniki krzywych magnetyzacji otrzymanych w ramach modelu SGA dla różnych sieci. **Rozdziały VIII i IX** stanowią podsumowanie pracy i przedstawienie kierunku dalszych badań.



# Spis treści

<b>Cel i metodyka pracy</b>	<b>1</b>
<b>1 Przesłanki o naturze kwantowej i skorelowanej ciekłego <math>^3\text{He}</math></b>	<b>3</b>
1.1 Podstawowe właściwości $^3\text{He}$ . . . . .	3
1.2 Silne korelacje w ciekłym $^3\text{He}$ . . . . .	4
1.3 Ciekły $^3\text{He}$ jako ciecz fermionów . . . . .	6
1.4 Krzywa namagnesowania dla ciekłego $^3\text{He}$ . . . . .	8
<b>2 Teoria Landaua cieczy Fermiego: krótkie podsumowanie</b>	<b>10</b>
2.1 Gaz Fermiego . . . . .	10
2.2 Ciecz Fermiego-Landaua . . . . .	11
<b>3 Model Hubbarda: omówienie ogólne</b>	<b>14</b>
<b>4 Podejście Gutzwillera dla modelu Hubbarda</b>	<b>16</b>
4.1 Ogólna charakterystyka . . . . .	16
4.2 Szczególny przypadek w połowie wypełnionego pasma - przejście Motta . . . . .	18
4.3 Prawie zlokalizowana ciecz Fermiego . . . . .	22
<b>5 Statystycznie konsyistentne podejście Gutzwillera</b>	<b>26</b>
<b>6 Opis wyników dla wybranych sieci</b>	<b>28</b>
6.1 Pierwsza strefa Brillouina . . . . .	28
6.2 Przybliżenie ciasnego wiązania (TBA-tight binding approximation) . . . . .	29
6.3 Gęstości stanów . . . . .	30
<b>7 Magnetyzacja w przybliżeniu SGA dla różnych sieci</b>	<b>32</b>
7.1 Sieć kubiczna prosta . . . . .	32
7.2 Sieć kubiczna powierzchniowo centrowana . . . . .	34
7.3 Sieć dwuwymiarowa trójkątna . . . . .	36
<b>8 Podsumowanie</b>	<b>38</b>
<b>9 Co dalej?</b>	<b>39</b>
<b>Dodatki</b>	<b>40</b>
A Renormalizacja wybranych wielkości w teorii Landaua . . . . .	40
A.1 Masa efektywna . . . . .	40
A.2 Ciepło właściwe . . . . .	41
B Kombinatoryczne wyprowadzenie współczynników Gutzwillera	42
C Metody Numeryczne . . . . .	43





## Cel i metodyka pracy

Celem pracy jest bardziej szczegółowe omówienie właściwości  ${}^3\text{He}$  jako prawie zlokalizowanej cieczy Fermiego, czyli stanu skondensowanego w pobliżu przejścia ciec-ciało stałe (krzywej topnienia). Taki punkt widzenia jest różny od pionierskiego podejścia zapoczątkowanego przez Landaua w 1956 roku z kilku względów. Zasadniczym z nich jest przyjęcie, że wszystkie cząstki mają znormalizowane charakterystyki, a nie tylko te w pobliżu powierzchni Fermiego, jak to się postuluje w teorii Landaua cieczy Fermiego. Tak musi być, gdyż są to właściwości w pobliżu przejścia fazowego do fazy stałej uważanego za nieciągłe kwantowe przejście fazowe Motta-Hubbarda wszystkich cząstek w układzie (tj, mające miejsce wskutek konkurencji energii kinetycznej i oddziaływania Van der Waalsa modelowanego przez oddziaływanie kontaktowe typu Hubbarda).

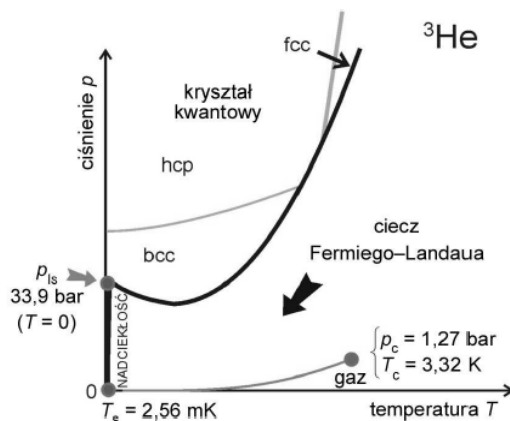
Jako przykład do dokładniejszej analizy wybrano krzywe namagnesowania dla  ${}^3\text{He}$ , gdyż to wielkość jest zmierzona z dobrą dokładnością w szerokim zakresie pól magnetycznych i różnych geometrii. W tym celu zastosujemy metodę opisu teoretycznego zaproponowaną ostatnio w naszym zespole [1] zwaną statystycznie konsystentnym przybliżeniem Gutzwillera (SGA). Pozwoli to na bezpośrednie zastosowanie naszego modelu do układu doświadczalnego i w ten sposób na przetestowanie jakości podejścia teoretycznego. Jedną z trudności jest zamodelowanie gęstości stanów dla takiego stanu ciekłego przez przybliżone gęstości dla sieci ciasno upakowanej z małą ilością wakansów kwantowych.



# 1 Przesłanki o naturze kwantowej i skorelowanej ciekłego ${}^3\text{He}$

## 1.1 Podstawowe właściwości ${}^3\text{He}$

Jako pierwiastek  ${}^3\text{He}$  jest stabilnym izotopem z jednym neutronem, dwoma protonami i dwoma elektronami. Ze względu na nieparzystą liczbę nukleonów całkowity spin jądra jest połówkowy i równy  $1/2$ . Gazowy stan  ${}^3\text{He}$  zwykle jest opisywany przez model gazu idealnego. Pomimo, iż diagram fazowy dla  ${}^3\text{He}$  (rys. 1) wydaje się tego samego typu co dla klasycznej cieczy w dwóch aspektach obserwowanych doświadczalnie spektakularnie się różni. Przede wszystkim  ${}^3\text{He}$  nie zestala się pod niskim ciśnieniem (mniejszym niż 34 bary) w temperaturze  $T = 0\text{K}$ . Dzieje się to na skutek stosunkowo dużych drgań zerowych dla atomów helu [2]. Drugą charakterystyczną właściwością ciekłego  ${}^3\text{He}$  jest przejście w stan nadciekły poniżej temperatury  $T = 2.6\text{mK}$  przy normalnym ciśnieniu.



**Rysunek 1:** Diagram fazowy dla skondensowanego  ${}^3\text{He}$  [3]; bcc oznacza strukturę kryształu przestrzennie centrowaną, hcp strukturę heksagonalną ciasno upakowaną, a fcc strukturę powierzchniowo centrowaną. Obszar cieczy Fermiego-Landaua obejmuje temperatury poniżej  $1\text{K}$ . Charakterystyczną cechą krzywej topnienia jest występowanie minimum dla  $T = 0.32\text{K}$  oraz  $p = 29.2\text{ bar}$ , które jest nieobecne na krzywej topnienia izotopu  ${}^4\text{He}$ , którego atomy w stanie ciekłym tworzą ciecz bozonową.

Z tych powodów próba zrozumienia zachowania  ${}^3\text{He}$  w stanie ciekłym wymaga innej teorii niż w przypadku klasycznej cieczy. Jedną z pierwszych przesłanek o kwantowej naturze ciekłego  ${}^3\text{He}$  było porównanie długości termicznej fali de Broglie'a jądra atomu  ${}^3\text{He}$  w temperaturze  $1\text{K}$  z średnią odległością pomiędzy nimi w cieczy. Z prostego rachunku [4] można zobaczyć iż obie te wielkości są tego samego rzędu

$$\begin{aligned} \lambda_{\text{He}} &= h/\sqrt{2\pi m_3 k_B T} \approx 1.01\text{nm}, \\ a &\sim V_{\text{mol}}^{1/3} \approx 0.39\text{nm}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

Ciśnienie P (bar)	0	3	6	9	12	15	18	21	24	27	30	33
$2N(0)[10^{28}/(\text{erg} \cdot \text{cm}^3)]$	1.08	1.26	1.42	1.56	1.69	1.82	1.93	2.04	2.14	2.25	2.35	2.46
$p_F[10^{-20} \text{g} \cdot \text{cm}/\text{s}]$	8.28	8.52	8.67	8.79	8.89	8.98	9.06	9.12	9.18	9.23	9.28	9.34
$v_F[10^3 \text{cm}/\text{s}]$	5.48	4.97	4.58	4.29	4.05	3.84	3.67	3.52	3.40	3.27	3.16	3.05
$m_3^*/m_3$	3.01	3.42	3.78	4.09	4.38	4.67	4.93	5.17	5.39	5.63	5.86	6.10
$a[\text{Å}]$	3.94	3.83	3.76	3.71	3.67	3.63	3.60	3.58	3.56	3.53	3.51	3.50

**Tablica 1:** Tabela podstawowych wielkości dla ciekłego  ${}^3\text{He}$  wg. Wheatleya [5] w zależności od ciśnienia:  $N(0)$ -gęstość stanów,  $p_F$  - pęd Fermiego,  $v_F$  - prędkość Fermiego,  $m_3^*/m_3$  - współczynnik renormalizacji masy efektywnej i  $a$  - średnia odległość pomiędzy atomami.

gdzie  $m_3$  oznacza masę atomu  ${}^3\text{He}$ , a  $V_{mol}$  objętość molową w ciśnieniu atmosferycznym równą  $36.8 \text{ cm}^3/\text{mol}$  [6]. Oznacza to, iż układ musi zachowywać się kwantowo gdyż sąsiednie funkcje falowe się nakładają.

Dla temperatur  $T$  pomiędzy 3 mK a 1 K  ${}^3\text{He}$  (faza ciekła) zachowuje się w wielu aspektach jak słabo oddziałujący gaz Fermiego. Przykładowo ciepło właściwe jest proporcjonalne do  $T$ , lepkość do  $T^{-2}$ , a podatność magnetyczna nie zależy od temperatury. Jednak  ${}^3\text{He}$  w tych temperaturach jest cieczą o bardzo dużej gęstości, w której średnie odległości międzyatomowe są porównywalne z długością fali materii jądra helu. Wynika stąd idea korelacji pomiędzy atomami, którego źródłem jest głównie silne odpychanie jądrowe i słabe przyciąganie van der Waalsa. Przykładowe wyznaczone eksperymentalnie wielkości (gęstość stanów, pęd Fermiego, prędkość Fermiego i renormalizacja masy efektywnej dla ciekłego  ${}^3\text{He}$  pod różnym ciśnieniem zawarte są w tabeli 1 [5].

## 1.2 Silne korelacje w ciekłym ${}^3\text{He}$

W wielu artykułach, między innymi [5, 7], autorzy przedstawiają eksperymentalne wyniki dotyczące zachowania ciekłego  ${}^3\text{He}$  w zależności od ciśnienia. Na podstawie zmierzonych wielkości Greywall [6, 7] podaje wartości obserwowanej masy efektywnej atomów ciekłego  ${}^3\text{He}$  i liniowego współczynnika ciepła właściwego  $\gamma$  w zależności od ciśnienia (por. wyniki przedstawione na rysunku 2).

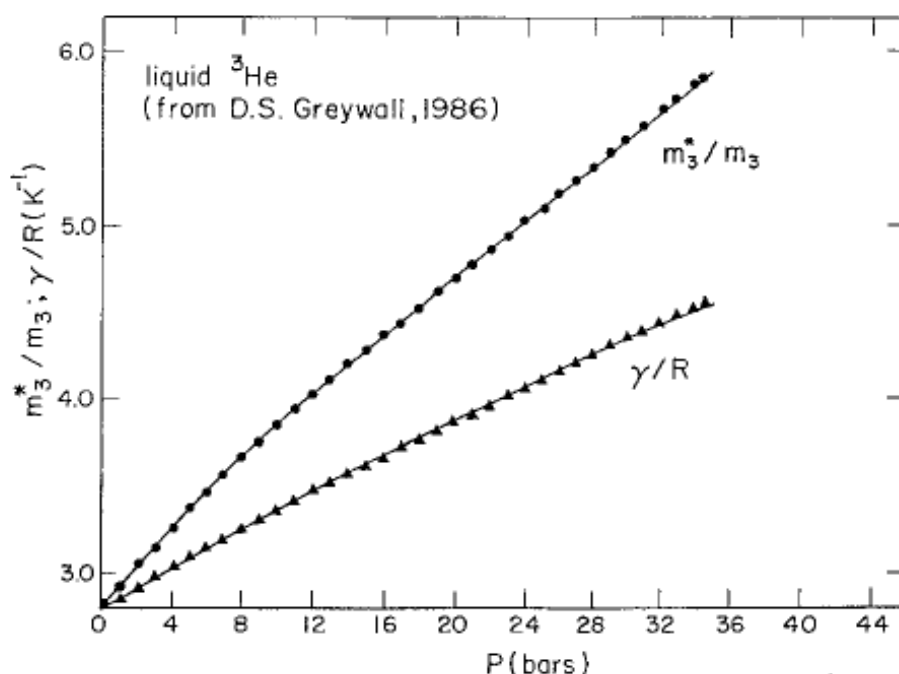
Obserwowany w doświadczeniu wzrost masy efektywnej wraz ze wzrostem ciśnienia sugeruje obecność silnych korelacji w układzie  ${}^3\text{He}$ . Stąd w przeciwieństwie do zwykłej krystalizacji np. wody w lód, solidyfikacja  ${}^3\text{He}$  ma naturę kwantową, gdyż np. entropia fazy stałej jest większa niż entropia fazy ciekłej, jak to omówił po raz pierwszy Pomeranczuk [8].

Dodatkowo można policzyć temperaturę Fermiego zdefiniowaną jako

$$T_F = \frac{\epsilon_F}{k_B} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_F^2}{2m_3^* k_B} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2 N/V)^{2/3}}{2m_3^* k_B}, \quad (1.2)$$

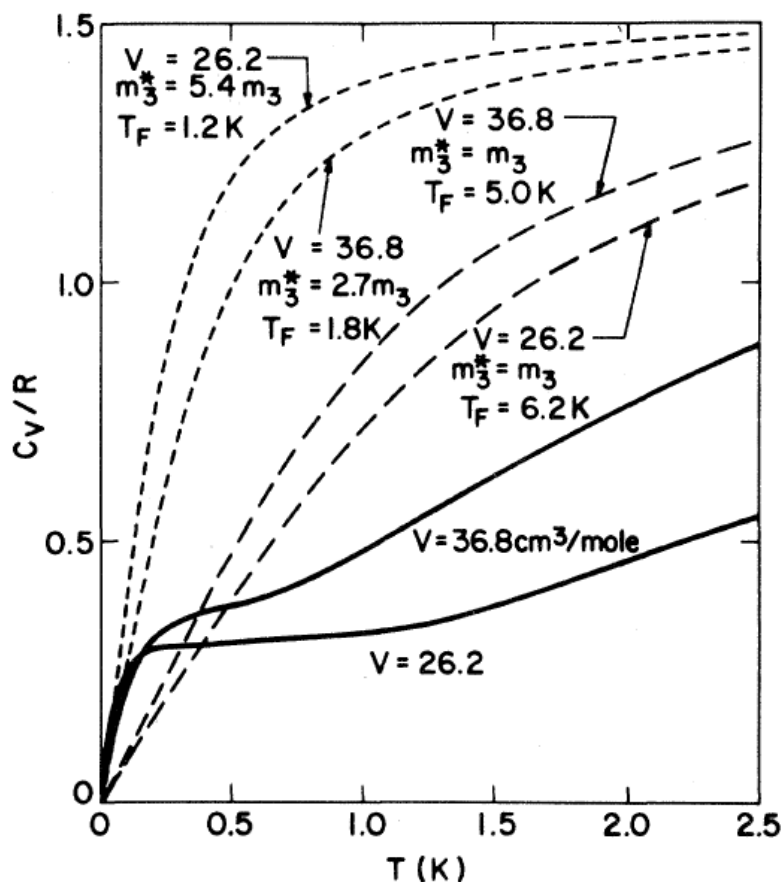
gdzie dla normalnego ciśnienia objętość molowa wynosi  $V_{mol} \simeq 36.8 \text{ cm}^3$  a liczba cząstek  $N \simeq N_{Av} = 6 \cdot 10^{23}$ . Wstawiając do powyższego wzoru masę atomu  ${}^3\text{He}$   $m_3 = 5.5 \cdot 10^{-24} \text{ g}$ , otrzymujemy temperaturę Fermiego równą 4.8 K. Natomiast temperatura Fermiego wyznaczona doświadczalnie [9] (więcej w następnym

podrozdziale) wynosi  $T_F = 1.8\text{K}$ . Aby otrzymać poprawny wynik należy zrenormalizować masę o czynnik 2.8 ( $m_3^* = 2.8m_3$ ). Ten ostatni wynik zgadza się z kolei z renormalizacją masy wyznaczoną z wartości liniowego współczynnika ciepła właściwego  $\gamma$ , przy normalnym ciśnieniu w pracy Greywalla [7] (por. rys. 2). Fakt, iż wartość renormalizacji temperatury Fermiego ( $T_F = T_F^0 \frac{m_3}{m_3^*}$ , gdzie  $T_F^0$  jest temperaturą Fermiego dla gazu o tej samej gęstości co ciecz) zgadza się z tą dla  $\gamma = \gamma^0 \frac{m_3^*}{m_3}$  ma głębokie znaczenie. A mianowicie, renormalizacja  $T_F^0$  to renormalizacja wielkości globalnej całej cieczy Fermiego ( $\epsilon_F$ ), a renormalizacja  $\gamma^0$  to czynnik renormalizacji tylko kwazicząstek na poziomie Fermiego. Fakt, że te dwie wielkości się zgadzają oznacza renormalizację wszystkich stanów jednocząstkowych a nie tylko tych na poziomie Fermiego, jak to postuluje się w teorii Landaua cieczy Fermiego.



**Rysunek 2:** Zależność liniowego współczynnika ciepła właściwego w jednostkach stałej gazowej ( $\gamma/R$ ) od ciśnienia i wynikającej z niego zrenormalizowanej masy efektywnej ( $m_3^*/m_3$ ) ciekłego  ${}^3\text{He}$ , gdzie  $m_3$  oznacza masę atomu  ${}^3\text{He}$ . Wykres został sporządzony przy użyciu danych z pracy Greywalla [7]. Silna renormalizacja masy atomów  ${}^3\text{He}$  w cieczy ( $m^*/m > 2.8$ ) świadczy o znacznych korelacjach międzycząstkowych w tym układzie[10].

Na rysunku 3 [6] jest przedstawiona zależność zmierzonego ciepła właściwego od temperatury (ciągła linia) i jej porównanie z odpowiednią zależnością dla gazu idealnego (linie kreskowane długie) dla tych samych parametrów. Widoczne odstępstwo obu krzywych jest kolejnym argumentem, iż ciekły  ${}^3\text{He}$  musi być traktowany jako silnie skorelowany układ. W niskich temperaturach możliwe jest dopasowanie krzywych dla gazu idealnego ale z uwzględnieniem



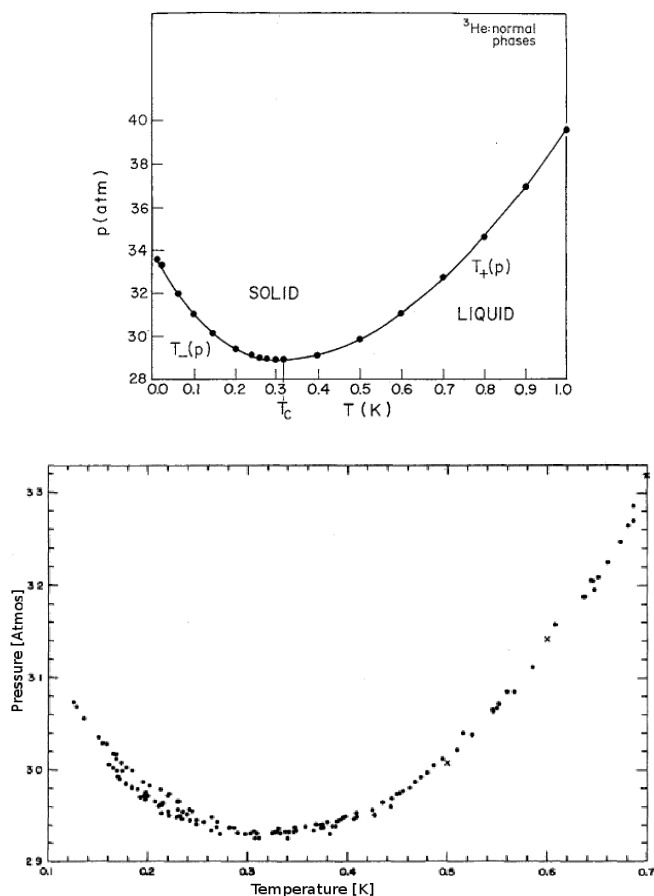
**Rysunek 3:** Zależności ciepła właściwego obserwowanego doświadczalnie od temperatury (ciągła linia), i porównanie ich z odpowiednimi zależnościami dla gazu idealnego dla tych samych parametrów (linie kreskowane długie) i dla gazu idealnego o masie efektywnej  $m_3^* \approx 5.4m_3$  (linie kreskowane krótkie) wg Greywalla [6]. Poszczególne objętości molowe  $V$  i masy efektywne (w jednostkach masy atomu  ${}^3\text{He}$ ) są wyszczególnione na krzywych.

masy efektywnej,  $m_3^* \approx 5.4m_3$  dla objętości molowej  $V = 26.2 \text{ cm}^3/\text{mol}$  (linie kreskowane krótkie).

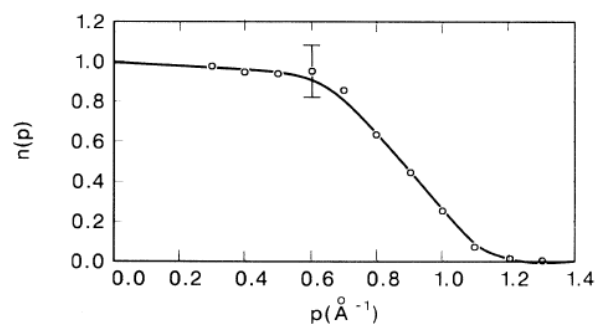
Zgodność obserwujemy również pomiędzy krzywą topnienia otrzymaną teoretycznie przy uwzględnieniu silnych korelacji w ciekłym  ${}^3\text{He}$  [10] a doświadczalnie wyznaczoną przez Baum et.al. [11] (por. rys. 4).

### 1.3 Ciekły ${}^3\text{He}$ jako ciecz fermionów

W swojej pracy Mook [9] przedstawił wyniki rozkładu statystycznego liczby cząstek w funkcji pędu atomów w ciekłym  ${}^3\text{He}$  dla ciśnienia normalnego. Do otrzymanych punktów doświadczalnych dopasował rozkład Fermiego-Diraca (rys. 5). Tym samym potwierdził, iż ciekły  ${}^3\text{He}$  powinien być traktowany jako ciecz fermionów, co ponownie wskazuje na jej kwantową naturę.



**Rysunek 4:** Krzywe topnienia dla  ${}^3\text{He}$  wyznaczone teoretycznie [10] (górny wykres) i wyznaczone doświadczalnie wg Bauma et. al.[11] (dolny wykres). Występowanie minimum na krzywej topnienia świadczy o skorelowanej naturze ciekłego  ${}^3\text{He}$  i stanowi podstawę efektu Pomeranczuka [8].



**Rysunek 5:** Rozkład liczby cząstek  ${}^3\text{He}$  w funkcji pędu  $n(p)$  dla ciekłego  ${}^3\text{He}$  zmierzony techniką rozpraszania neutronów przy ciśnieniu normalnym i temperaturze 0.37 K wg Mooka [9]. Krzywa została dopasowana dla znormalizowanej masy  $m_3^* = 3.08 m_3$ . Otrzymana temperatura Fermiego jako parametru fitującego wynosi  $E_F/k_B = 1.8 \pm 0.2\text{K}$ .

Krzywa rozkładu Fermiego-Diraca

$$n(p) = \frac{1}{\exp[(E(p) - E_F)/k_B T] + 1} \equiv \frac{1}{\exp[(\frac{p^2}{2m_3^* k_B T} - \frac{T_F^0 m_3}{T m_3^*}] + 1}, \quad (1.3)$$

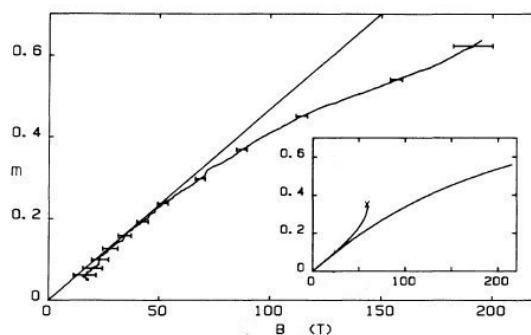
dopasowana została do punktów doświadczalnych metodą najmniejszych kwadratów, gdzie parametrem dopasowania była temperatura Fermiego  $T_F \equiv E_F/k_B = 1.8 \pm 0.2 K$ , z użyciem masy efektywnej  $m_3^* = 3.08 m_3$ , co jest spójne z wynikami Greywalla [7] przytoczonymi w poprzednim podrozdziale.

## 1.4 Krzywa namagnesowania dla ciekłego ${}^3\text{He}$

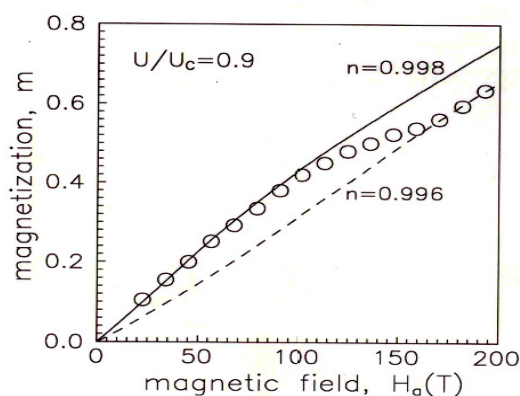
W eksperymencie przeprowadzonym przez Wiegarsa, Wolfa i Puecha [12] została zmierzona magnetyzacja ciekłego  ${}^3\text{He}$  (rysunek 6). Były przeprowadzone próby dopasowania wyników teoretycznych do doświadczalnej krzywej magnetyzacji, które w przypadku osiągnięcia dobrej zgodności mogłyby przemawiać za poprawnością jednej z kwantowych teorii ciekłego  ${}^3\text{He}$ . Między innymi jako jeden z lepszych wyników zostało zaprezentowane dopasowanie krzywej teoretycznej wyznaczonej metodą pomocniczych bozonów w przybliżeniu punktu siodłowego przez Spałka i Wójcika [13] (por. rys. 7). Można też porównać wynik otrzymany przez Vollhardta [14] w ramach podejścia Gutzwillera (omówione w szczegółach w kolejnych rozdziałach) który dla dużych magnetyzacji jest zdecydowanie rozbieżny z eksperymentem (rys. 6: górna krzywa we wstawce). Jako kolejny argument za kwantową naturą  ${}^3\text{He}$  i główny wynik tej pracy w dalszej części przedstawiony jest formalizm i metody, dzięki którym otrzymano dobra zgodność z eksperymentem krzywych magnetyzacji wyznaczonych teoretycznie.

W rozdziale 3 wprowadzimy metodę opisu teoretycznego a następnie zastosujemy je do opisu konkretnych wyników doświadczalnych. Najpierw jednak ze względu na kompletność podsumujemy teorię Landaua.





**Rysunek 6:** Krzywa namagnesowania dla ciekłego  $^3\text{He}$  wg Wiegiersa, Wolfa i Puecha[12]; ciągła linia przedstawia ekstrapolację liniowej zależności dla niższych pól magnetycznych.  $B$  oznacza zaaplikowane zewnętrzne pole magnetyczne. We wstawce zaprezentowane są teoretyczne wyniki magnetyzacji: górna krzywa w podejściu Gutzwillera [14] i dolna krzywa metodą RPA (random phase approximation). Punkt  $x$  we wstawce oznacza punkt metamagnetyczny otrzymany w metodzie Gitzwillera, nieobecny w danych doświadczalnych.



**Rysunek 7:** Dopasowanie do eksperymentu [12] metodą pomocniczych bozonów w przybliżeniu punktu siodłowego wg Spałka i Wójcika [13]. Zaznaczono stopień wypełnienia pasma rozumianych jako liczbę  $n$  atomów  $^3\text{He}$  przypadających na jeden węzeł wirtualnej sieci krystalicznej modelującej dość ciasno upakowany stan cieczy. Zmienne  $n$  od wartości pola oznaczałoby zmienną liczbę wakansów kwantowych przy zmieniającej się wartości pola

## 2 Teoria Landaua cieczy Fermiego: krótkie podsumowanie

Zanim przystąpimy do właściwego opisu teoretycznego w tej pracy scharakteryzujemy pokrótce pionierskie podejście Landaua do opisu ciekłego  ${}^3\text{He}$ .

Lev D. Landau sformułował kwazifenomenologiczną teorię cieczy Fermiego w niskich temperaturach ( $T < 1\text{K}$ ) w 1956 roku. Poprzez wprowadzenie idei kwazicząstek o efektywnej masie  $m_3^*$  (jak już wiemy 3-6 razy większej niż masa atomu  ${}^3\text{He}$  w próżni) i efektywnego oddziaływania pomiędzy nimi z sukcesem opisał pewne właściwości oddziałującej cieczy fermionów.

### 2.1 Gaz Fermiego

Ponieważ w pewnym zakresie parametrów ciekły hel można efektywnie opisać jako gaz słabo oddziałujących cząstek o statystyce fermionowej, na początku przedstawimy podstawowe właściwości gazu Fermiego.

W swobodnym gazie zawierającym  $N$  cząstek o spinie  $1/2$ , stanami własnymi są fale płaskie scharakteryzowane przez wektor falowy  $\mathbf{k}$ , pęd  $\hbar\mathbf{k}$ , rzut spinu  $\sigma_z = \pm\frac{1}{2}$ , o energii  $\epsilon_k = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$ . Wszystkie jednocząstkowe stany wypełniają sferę Fermiego, aż do tak zwanego wektora falowego Fermiego zadanego przez [15]

$$k_F = (3\pi^2 N)^{\frac{1}{3}}, \quad (2.4)$$

który jednocześnie definiuje odpowiednio pęd  $p_F$ , energię  $\epsilon_F$  i prędkość Fermiego  $v_F$ , a mianowicie

$$\begin{aligned} p_F &\equiv \hbar k_F = \hbar (3\pi^2 N)^{\frac{1}{3}}, \\ \epsilon_F &\equiv \frac{p_F^2}{2m}, \\ v_F &\equiv \left(\frac{d\epsilon}{dp}\right)_{p_F} = \frac{p_F}{m}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Wtedy gęstość stanów na jednostkę objętości ze zmianą energii (dla obydwu spinów) na powierzchni Fermiego wynosi

$$\begin{aligned} N^0(\epsilon_F) &\equiv \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right)_{\epsilon_F} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(\partial^{\frac{4}{3}}\pi p_F^3)}{\partial p_F} \frac{dp_F}{d\epsilon} = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p_F^2}{(d\epsilon/dp)_{p_F}} \equiv \\ &\equiv \frac{p_F^2}{\pi^2\hbar^3 v_F} = \frac{3N}{p_F v_F} = \frac{3Nm}{p_F^2}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Niskotemperaturowe statyczne właściwości gazu są określone całkowicie przez ten parametr oraz wartość  $\epsilon_F$ . Przykładowo, ciepło właściwe i podatność magnetyczna są odpowiednio określone wzorami [16]

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right)_{\epsilon_F} k_B^2 T, \\ \chi &= \frac{1}{4} \gamma^2 \hbar^2 \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right)_{\epsilon_F}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

gdzie  $\gamma \equiv 2\mu_n/\hbar$  jest stosunkiem żyromagnetycznym jądra  ${}^3He$ , a  $\mu_n$  nuklearnym momentem magnetycznym (jądrowym odpowiednikiem magnetonu Bohra). Przykładowe wartości wielkości tutaj podanych są wyszczególnione w tabeli 1.

## 2.2 Ciecz Fermiego-Landaua

Landau w swojej fenomenologicznej teorii przedstawił przejście z opisu gazu Fermiego do opisu cieczy Fermiego. Jeżeli oddziaływanie jest 'wyłączone' wszystkie stany o energii mniejszej niż energia Fermiego dla gazu swobodnego będą wypełnione a powyżej puste. Dla niezerowej temperatury pojawiają się stany wzbudzone termicznie (kwazicząstki) powyżej energii Fermiego  $\epsilon_F^0$  i stany niezapełnione (dziury) pod powierzchnią Fermiego. Jeżeli powoli (adiabaticznie) włączymy oddziaływanie międzyatomowe, zmieni się energia stanów jednocząstkowych. Nie będzie to już pojedyncza wzbudzona cząstka ale raczej cząstka i koherentny ruch chmury innych cząstek w jej otoczeniu [17]. W ten sposób Landau wprowadził kwazicząstki i kwazidziury jako nowy opis stanu wzbudzonego układu. Energie kwazicząstek powinny być określone liczbami kwantowymi. Landau zapostulował, że ich energia jest dalej funkcją wektora falowego  $\mathbf{k}$ , a wektor falowy Fermiego  $\mathbf{k}_F$  jest taki sam jak w przypadku gazu swobodnego (2.4). Ten postulat został później udowodniony formalnie za pomocą metody funkcji Greena (twierdzenie Luttingera) [18]. Dodatkowo, kwazicząstki spełniają zasadę Pauliego, jest ich tyle samo, co cząstek i również mają rzut składowej spinu  $\pm\frac{1}{2}$ . Stany wzbudzone kwazicząstek są tworzone poprzez ich propagację na lub powyżej sfery Fermiego. Każdy stan  $\mathbf{p}\sigma$  można opisać poprzez podanie średniej liczby kwazicząstek w tym stanie  $n(\mathbf{p}\sigma)$  lub równoważnie przez różnice  $\delta n(\mathbf{p}\sigma)$  względem stanu podstawowego. Energia pojedynczej cząstki, oraz wielkości opisujące energię Fermiego jest zdefiniowana tymi samymi wzorami co w przypadku gazu Fermiego (2.5) z tym, że zamiast masy występuje masa efektywna  $m^*$

$$\begin{aligned}\delta\epsilon(p) &= \epsilon(p) - \epsilon_F = \frac{p^2}{2m^*} - \epsilon_F \approx \hbar v_F(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F), \\ v_F &= \frac{p_F}{m^*} = v_F^0 \frac{m^*}{m}, \\ N(0) &\equiv \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right)\Big|_{\epsilon_F} = \frac{3N}{p_F v_F} = \frac{3Nm^*}{p_F^2} = N^0(\epsilon_F) \frac{m^*}{m}.\end{aligned}\tag{2.8}$$

Możemy powiedzieć, że wskutek renormalizacji masy, kwazicząstki są cięższe i wolniejsze niż wyjściowe nieoddziałujące cząstki  ${}^3He$ . Oprócz wprowadzenia masy efektywnej, drugim bardzo ważnym elementem teorii cieczy Fermiego jest wprowadzenia efektywnego oddziaływania pomiędzy tymi kwazicząstkami. Na początku przypuścimy, że oddziaływanie nie zależy od spinu, a tylko od pędów cząstek: dla dwóch kwazicząstek o pędach  $\mathbf{p}$  i  $\mathbf{p}'$  oddziaływanie zdefiniowane jest przez  $f(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ . Wtedy całkowitą energię układu wyraża się wzorem [16]

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p}\sigma} (\epsilon(p) - \epsilon_F) \delta n(\mathbf{p}\sigma) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'; \sigma\sigma'} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}\sigma) \delta n(\mathbf{p}'\sigma').\tag{2.9}$$

Widzimy, że drugi i trzeci wyraz opisuje zmianę energii układu względem wybranego stanu podstawowego. Teraz rozważmy oddziaływanie zależne od spinu. Kwazicząstka w stanie  $\mathbf{p}$  nie musi być w stanie własnym rzutu spinu  $\sigma_z$  - może być liniową kombinacją stanów  $\sigma_z = \pm\frac{1}{2}$ , to znaczy może mieć spin  $\vec{S}$  wskazujący w dowolnym kierunku. Aby rozwiązać ten problemem należy zamienić  $n(\mathbf{p}\sigma)$  na macierz  $2 \times 2$   $\hat{n}(\mathbf{p})$  i sumę po  $\sigma$  przez ślad macierzy. Niech  $\tilde{n}(\mathbf{p})$  oznacza całkowitą liczbę kwazicząstek w stanie  $\mathbf{p}$ , a  $\delta\tilde{n}(\mathbf{p})$  będzie zmianą tej liczby w stosunku do stanu podstawowego

$$\delta\tilde{n}(\mathbf{p}) \equiv \text{Tr} \delta\hat{n}(\mathbf{p}). \quad (2.10)$$

Jeżeli oddziaływania są niezmiennicze względem obrotu spinów, definiujemy efektywną energię oddziaływania pomiędzy kwazicząstkami w stanach  $\mathbf{p}$  i  $\mathbf{p}'$ .

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{p}} \delta\epsilon(p) \delta\tilde{n}(\mathbf{p}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta\tilde{n}(\mathbf{p}) \delta\tilde{n}(\mathbf{p}') + \zeta(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \vec{\sigma}(\mathbf{p}) \cdot \vec{\sigma}(\mathbf{p}'). \quad (2.11)$$

Konwencjonalnie definiuje się bezwymiarowe wielkości  $F$  i  $Z$  przez pomnożenie  $f$  i  $\zeta$  przez gęstość stanów  $N(0)$ . Ze względu na to, że teoria ma opisywać układ w niskiej temperaturze, wartości wzbudzeń  $\mathbf{p}$  i  $\mathbf{p}'$  leżą w pobliżu poziomu Fermiego. Układ ciekły izotropowy taki jak  ${}^3\text{He}$  jest niezmienniczy względem przestrzennych obrotów, co pozwala wyznaczyć wielkości  $F$  i  $Z$  jako funkcje tylko kąta  $\theta$  pomiędzy  $\mathbf{p}$  i  $\mathbf{p}'$ . Kryje się za tym założenie, że część oddziaływania jest praktycznie wzięte dla cząstek na poziomie Fermiego, a rozproszenie spowodowane takim oddziaływaniem to elastyczne rozproszenie kwazicząstek jednej na drugiej. Zatem możemy rozwinąć je w zupełny szereg wielomianów Legendre'a  $P_l(\cos\theta)$

$$\begin{aligned} \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right) f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &\equiv F(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_l F_l P_l(\cos\theta), \\ \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right) \zeta(\mathbf{p}, \mathbf{p}') &\equiv Z(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = \sum_l Z_l P_l(\cos\theta). \end{aligned} \quad (2.12)$$

W tym podejściu oddziaływanie pomiędzy dwoma cząstkami jest całkowicie opisywane przez nieskończony zbiór parametrów Landaua  $F_l$  i  $Z_l$ . Co najmniej pierwsze cztery parametry ( $F_0, F_1, Z_0, Z_1$ ) mogą być wyznaczone eksperymentalnie. Zazwyczaj  $F_0$  jest bardzo duży i dodatni,  $F_1$  duży i dodatni,  $Z_0$  ujemny i równy około  $-3$  na granicy ferromagnetycznej i  $Z_1$  bliski zera [16].

W ramach tego modelu można wyjaśnić podobieństwa w podobnym zachowaniu się swobodnego gazu fermionów i cieczy Fermiego. Ciepło właściwe ( $c_v$ ), podatność magnetyczną ( $\chi_S$ ) i ściśliwość ( $\kappa$ ) zostały opisane przez odpowiadające im wielkości dla swobodnego gazu ( $c_v^0, \chi_S^0, \kappa^0$ ), parametry Landaua ( $F_l$  i  $Z_l$ ) i masę efektywną ( $m^*$ ) [16]

$$\begin{aligned} \gamma &= \frac{m^*}{m} \gamma^0, \\ \chi_S &= \frac{m^*/m}{1 + Z_0} \chi_S^0, \\ \kappa &= \frac{m^*/m}{1 + F_0} \kappa^0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

gdzie stosunek masy efektywnej do masy również można wyrazić za pomocą parametru Landaua

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_0}{3}. \quad (2.14)$$

Dla kompletności zależności zrenormalizowanej masy efektywnej i ciepła właściwego (2.13, 2.14) wyprowadzone są w dodatku A.

Podsumowując, teoria Landau'a wprowadzona została w celu opisu stanów wzbudzonych o niskich energiach - czyli do opisu właściwości termodynamicznych i dynamicznych układu w bardzo niskich temperaturach, tzn wzbudzonych w pobliżu powierzchni Fermiego. Dodatkowo, opisuje ona wzbudzenia kolektywne (dźwięki) [26], którymi nie będziemy się zajmować w ramach tej pracy. Należy nadmienić, że zawodzi ona w przypadku gdy ciecz Fermiego solidyfikuje się, gdyż wtedy należy uwzględnić wszystkie cząstki, a nie tylko te w pobliżu powierzchni Fermiego. Taki opis musi opierać się o oddziaływanie w przestrzeni rzeczywistej. Tak, więc właściwości globalne całego układu (energia stanu podstawowego i swobodna, przejście ciecz-ciało stałe, uporządkowanie magnetyczne w fazie stałej, diagram fazowy faz nadciekłych uwzględniający fazy A, A1, B) muszą być opisane modelem uwzględniającym wszystkie atomy tworzące układ. Stąd nasza próba mikroskopowego opisu, jakkolwiek w modelu z prostą strukturą, oddziaływania międzycząstkowego. W pozostałej części pracy skoncentrujemy się zatem wyłącznie na naszym modelu.

### 3 Model Hubbarda: omówienie ogólne

W celu opisu cząstek oddziałujących krótkozasięgowo na sieci Hubbard [19, 20] zaproponował uproszczony hamiltonian zawierający część kinetyczną i część oddziaływania w następujący sposób. Rozważmy  $N$  cząstek na sieci. Właściwą bazą stanów jednocząstkowych są funkcje Wanniera. Są to funkcje scentrowane na węzłach sieci. Cząstki mogą się przemieszczać pomiędzy różnymi węzłami sieci. Amplituda prawdopodobieństwa przeskoku z  $i$ -tego do  $j$ -tego węzła wynosi  $t_{ij}$ . Natomiast pomiędzy dwoma cząstkami znajdującymi się na tym samym węźle i w tym samym stanie Wanniera różniącymi się jedynie spinem ma miejsce oddziaływanie odpychające. Wszystkie inne elementy macierzowe oddziaływania są pomijane. Uzyskany w ten sposób hamiltonian nazywany jest hamiltonianem Hubbarda

$$\mathcal{H} = \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.15)$$

gdzie  $c_{i\sigma}^{\dagger}$  jest operatorem kreacji cząstki o spinie  $\sigma$  w stanie Wanniera na węźle  $i$ -tym,  $c_{j\sigma}$  jest operatorem anihilacji cząstki o spinie  $\sigma$  w stanie Wanniera na węźle  $j$ -tym,  $n_{i\uparrow} = c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow}$  - operatorem liczby cząstek na węźle  $i$ -tym o spinie w górę i odpowiednio  $n_{i\downarrow} = c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}$  - operatorem liczby cząstek na węźle  $i$ -tym o spinie w dół.

Hamiltonian Hubbarda można też wyrazić w reprezentacji pędowej na sieci

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow}, \quad (3.16)$$

gdzie  $\epsilon(\mathbf{k})$  jest energią pasmową (jednocząstkową), która wyraża się jako transformata Fouriera na sieci

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (3.17)$$

$c_{\mathbf{k}\sigma}$  jest operatorem anihilacji cząstki w stanie o pędzie  $\mathbf{k}$  i spinowej liczbie kwantowej  $\sigma = \pm 1$

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_i c_{i\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad (3.18)$$

a  $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$  jest operatorem kreacji cząstki w stanie o pędzie  $\mathbf{k}$  i spinowej liczbie kwantowej  $\sigma = \pm 1$

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{N^{\frac{1}{2}}} \sum_i c_{i\sigma}^{\dagger} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}. \quad (3.19)$$

Dodatkowo jeżeli rozważamy układ oddziałujący z zewnętrznym polem magnetycznym niezbędne jest dodanie do Hamiltonianu wyrazu Zeemana

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\mathbf{q}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}'\downarrow} - \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma h c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (3.20)$$

gdzie  $h$  jest zredukowanym polem magnetycznym  $h \equiv \frac{1}{2} g \mu_B H_a$ .

Zazwyczaj zakłada się układ, w którym w przybliżeniu niezerowe są jedynie całki przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami  $t_{\langle ij \rangle} = -t$  i ewentualnie między drugimi najbliższymi sąsiadami  $t_{\langle\langle ij \rangle\rangle} = t'$ . Pomimo prostoty Hamiltonian Hubbarda bardzo dobrze opisuje oddziałujący układ w pobliżu przejścia metal-izolator. Bez oddziaływania ( $U=0$ ) mamy do czynienia z pasmem przewodnictwa, którego źródłem jest małe ale niezerowe przekrycie się sąsiednich funkcji falowych. W granicy atomowej ( $t=0$ ) wszystkie cząstki są zlokalizowane na węzłach (atomach). Z tego powodu Hamiltonian Hubbarda opisuje układ, który może przechodzić z jednej granicy w drugą. Oczywiście najbardziej interesujący zakres jest gdy  $W \sim U$ , gdzie  $W = 2Zt$  jest szerokością wyjściowego pasma energetycznego a  $Z$  - liczbą najbliższych sąsiadów. W tym przypadku mamy do czynienia z rywalizacją pomiędzy zachowaniem pasmowym (stany rozciągnięte na cały układ), a lokalizacją zaindukowaną korelacjami. Często również rozważa się też granice bardzo silnych korelacji gdy  $U \gg W$  między innymi w pracach dotyczących nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego [21, 22, 23] i nadprzewodnictwa niekonwencjonalnego [24, 25].

Ciekły  ${}^3\text{He}$  jest z tego punktu widzenia układem jednopasmowym ale z nieuporządkowanymi węzłami sieci. W pierwszym przybliżeniu traktujemy go jako układ sieciowy z ciasno upakowanymi atomami. Duże drgania zerowe tych atomów nałożone na ich ruch postępowy mogą oznaczać, że wybór do rozważań konkretnej modelowej sieci ma znaczenie drugorzędne. Przetestujemy to założenie przez rozważenie różnych struktur sieciowych. Po drugie, fermionami są tutaj całe atomy  ${}^3\text{He}$ . Zatem, oddziaływanie pomiędzy tymi atomami jako cząstkami ma charakter oddziaływania van der Waalsa [26], które może być modelowane np. przez potencjał Lennarda-Jonesa. W naszym modelu te oddziaływania uwzględnione są jako kontaktowe typu Hubbarda. Oznacza to, iż uwzględniamy przede wszystkim część odpychającą potencjału Lennarda-Jonesa.

## 4 Podejście Gutzwillera dla modelu Hubbarda

### 4.1 Ogólna charakterystyka

Rozważmy układ  $N$  fermionów na sieci zawierającej  $L$  węzłów. Zgodnie z zasadą Pauliego na węzle mogą znajdować się co najwyżej dwie cząstki o przeciwnych spinach. Stąd możliwe są cztery różne konfiguracje na węzle: może nie być żadnej cząstki, może być jedna o spinie w górę lub w dół, bądź dwie cząstki o przeciwnych spinach. Ze względu na oddziaływanie odpychające pomiędzy cząstkami ostatnia konfiguracja - podwójnie obsadzony węzeł - nie jest korzystna energetycznie. Dzieje się tak ponieważ energia układu z takim obsadzeniem wzrasta o energię  $U$ .

Do rozwiązania Hamiltonianu Hubbarda w temperaturze  $T=0$  można użyć metody wariacyjnej. Oznaczmy punkty sieci obsadzone przez cząstki o spinie w górę symbolem  $N_\uparrow$ , o spinie w dół  $N_\downarrow$  a podwójnie okupowane węzły przez  $D$ . Ponadto wprowadźmy oznaczenia

$$\begin{aligned} n_\uparrow &= \frac{N_\uparrow}{L}, \\ n_\downarrow &= \frac{N_\downarrow}{L}, \\ d^2 &= \frac{D}{L}. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Niech funkcja  $|\psi_0\rangle$  opisuje stan nieskorelowany ( $U=0$ ) układu. Wtedy średnia liczba podwójnie obsadzonych węzłów wynosi  $D_0 = n_\uparrow n_\downarrow L$ . Po włączeniu oddziaływania następuje wzrost energii o  $U$  na każdym podwójnie obsadzonym węzle. Stąd ich liczba musi zostać zmniejszona w celu skompensowania dodatkowej energii. Funkcja falowa stanu skorelowanego została zaproponowana przez Gutzwillera w postaci [27]

$$|\psi\rangle = \prod_i [1 - (1-g)n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}] |\psi_0\rangle = g^D |\psi_0\rangle. \quad (4.22)$$

Aby otrzymać stan skorelowany stopniowo jest zmniejszana amplituda stanu nieskorelowanego. Parametr  $g$  jest parametrem wariacyjnym, wyznaczanym z minimalizacji energii stanu podstawowego, która jest dana wzorem

$$E = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} + \frac{\langle \psi | U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (4.23)$$

W granicy termodynamicznej gdy liczba cząstek  $N$  dąży do nieskończoności, funkcja  $|\psi\rangle$  jest stanem własnym operatora liczby cząstek, stąd z wyrazu oddziaływania we wzorze na energię stanu podstawowego otrzymujemy  $UD$  i jest to wynik dokładny. Aby obliczyć wyraz kinetyczny Gutzwiller założył, iż ruch cząstek o spinie w górę i ruch cząstek o spinie w dół na sieci odbywają się niezależnie od siebie. Przyjął też, że cząstki o spinie w dół mogą być traktowane jako nieskończenie ciężkie i działają tylko jako przeszkoda dla cząstek o



spinie w górę. To przybliżenie pozwoliło po minimalizacji względem parametru wariacyjnego  $g$  otrzymać wyrażenie na energię stanu podstawowego [1]

$$\frac{E_g}{L} = q_\uparrow(d, n_\uparrow, n_\downarrow) \bar{\epsilon}_\uparrow + q_\downarrow(d, n_\uparrow, n_\downarrow) \bar{\epsilon}_\downarrow + U d^2. \quad (4.24)$$

Współczynniki  $q_\uparrow$  i  $q_\downarrow$  są współczynnikami renormalizującymi energie  $\epsilon$  cząstek o spinie w górę i w dół.

$$q_\sigma = \frac{\{[(n_\sigma - d^2)(1 - n_\sigma - n_{\bar{\sigma}} + d^2)]^{\frac{1}{2}} + [(n_{\bar{\sigma}} - d^2)d^2]^{\frac{1}{2}}\}^2}{n_\sigma(1 - n_\sigma)} \quad (4.25)$$

Są one nazywane współczynnikami Gutzwillera. Wyprowadzenie wzorów na postać tych współczynników znajduje się w dodatku B. Ponadto średnia energia dla spinu  $\sigma$  w nieskorelowanym stanie wyraża się wzorem

$$\bar{\epsilon}_\sigma = \frac{1}{L} \langle \psi_0 | \sum_{ij} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} | \psi_0 \rangle = \sum_{|\mathbf{k}| < k_{F\sigma}} \epsilon(\mathbf{k}), \quad (4.26)$$

gdzie  $k_{F\sigma}$  jest wektorem falowym Fermiego dla podukładu cząstek o spinie  $\sigma$ . Wyrażenie (4.24) wciąż musi być zminimalizowane względem parametru  $d$  - liczby podwójnie obsadzonych węzłów sieci.

Wygodna jest zmiana zmiennych z  $n_\sigma$  i  $n_{\bar{\sigma}}$  na  $n = n_\sigma + n_{\bar{\sigma}}$  i  $m = n_\sigma - n_{\bar{\sigma}}$ , gdzie  $n$  reprezentuje wypełnienie pasma, a  $m$  moment magnetyczny przypadający na węzeł. W nowych zmiennych współczynniki Gutzwillera wyrażają się przez

$$q_\sigma = \frac{\{[(\frac{n+m}{2} - d^2)(1 - n + d^2)]^{\frac{1}{2}} + [(\frac{n-m}{2} - d^2)d^2]^{\frac{1}{2}}\}^2}{\frac{n+m}{2}(1 - \frac{n+m}{2})}. \quad (4.27)$$

Jeżeli zinterpretujemy wyrażenie (4.24) jako wartość oczekiwaną z jedno-cząstkowego efektywnego hamiltonianu  $\mathcal{H}_{GA}$  w stanie  $|\psi_0\rangle$

$$E_g = \langle \psi_0 | \mathcal{H}_{GA} | \psi_0 \rangle, \quad (4.28)$$

to możemy wydedukować formę hamiltonianu  $\mathcal{H}_{GA}$  odpowiadającemu przybliżeniu Gutzwillera

$$\mathcal{H}_{GA}(d, n, m) = \sum_{ij\sigma} q_\sigma(d, n, m) t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \sum_{i\sigma} \sigma h c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + LU d^2, \quad (4.29)$$

lub w reprezentacji pędowej

$$\mathcal{H}_{GA}(d, n, m) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (q_\sigma(d, n, m) \epsilon(\mathbf{k}) - \sigma h) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + LU d^2, \quad (4.30)$$

gdzie w obydwu wzorach został dodany wyraz Zeemana.

Podójście Gutzwillera może być alternatywnie traktowane jako teoria wprowadzająca efektywny zrenormalizowany hamiltonian dla kwazicząstki. To podejście nazywa się renormalizowaną teorią średniego pola (RMFT-renormalized

mean-field theory). Hamiltonian jest wyrażony przez  $n$ ,  $m$ , które możemy określić jako wartości oczekiwane jednocząstkowych operatorów  $\hat{N}$  i  $\hat{M}$

$$\begin{aligned} n &= \frac{N}{L} \equiv \frac{\langle \hat{N} \rangle}{L} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \\ m &= \frac{M}{L} \equiv \frac{\langle \hat{M} \rangle}{L} = \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Pomimo, iż podejście Gutzwillera zostało wyprowadzone dla zerowej temperatury, skonstruujmy funkcjonal Landaua

$$\mathcal{F}^{(GA)} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \ln[1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}\sigma}^{(GA)}}] + LUd^2, \quad (4.32)$$

gdzie

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(GA)} = q_\sigma \epsilon(\mathbf{k}) - \sigma h - \mu \quad (4.33)$$

jest energią kwazicząstki, a  $\mu$  potencjałem chemicznym. Ponieważ  $d^2$  jest parametrem wariacyjnym należy względem niego zminimalizować potencjał Landaua (4.32), skąd bezpośrednio dostajemy warunek na  $d$

$$\frac{\partial \mathcal{F}^{(GA)}}{\partial d} = 2LUd^2 + \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q_\sigma}{\partial d} f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(GA)}) \epsilon(\mathbf{k}) = 0, \quad (4.34)$$

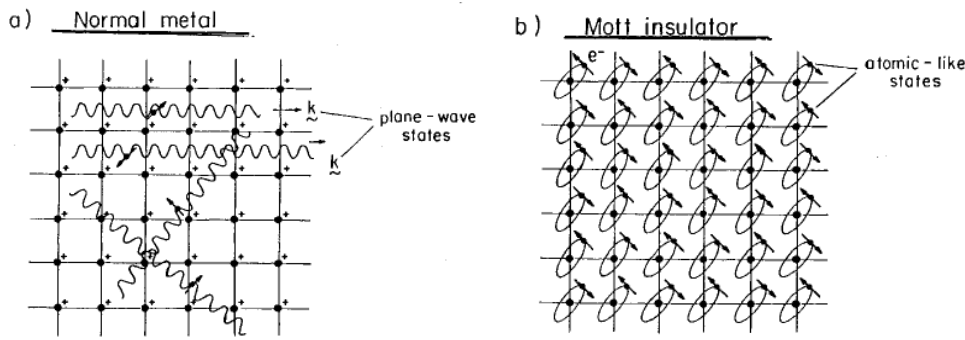
gdzie  $f(E)$  jest rozkładem Fermiego-Diraca. Natomiast magnetyzacja  $m$  i wypełnienie pasma  $n$  nie są parametrami wariacyjnymi i są wyznaczone z równań (4.31)

$$\begin{aligned} m &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(GA)}), \\ n &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(GA)}). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Równania (4.34) i (4.35) dla zadanego wypełnienia pasma jednoznacznie określają wartość parametru wariacyjnego  $d$ , magnetyzacji  $m$  i potencjału chemicznego  $\mu$ . W tym formalizmie pojawiła się w literaturze próba dopasowania krzywej magnetyzacji do eksperymentu [14].

## 4.2 Szczególny przypadek w połowie wypełnionego pasma - przejście Motta

Celem tego podrozdziału jest opis przejścia metal-izolator, opisanego po raz pierwszy przez Motta [28]. O izolatorze Motta mówimy wtedy gdy cząstki (np. elektrony) lokalizują się na punktach sieci gdyż oddziaływanie Coulombowskie nie pozwala im opuścić węzła ( $U \gg t$ ), natomiast o metalu wtedy gdy cząstki mogą swobodnie poruszać się na sieci ( $U \sim t$ ). Jednym z przykładów przejścia fazowego Motta metal-izolator uważana jest solidyfikacja ciekłego  ${}^3\text{He}$ . Różnica pomiędzy stanami w cieczy (metal) a w ciele stałym (izolator) według idei Motta przedstawiona jest na rysunku 8.



**Rysunek 8:** Schematyczna reprezentacja stanów elektronów jako (a) stanów Blocha i (b) w porządku antyferromagnetycznym zlokalizowanych na atomach sieci w kryształach [10]. Takie samo przejście od stanów zdelokalizowanych do zlokalizowanych na miejsce w przypadku solidyfikacji  $^3\text{He}$  z tym, że w stanie ciekłym nie ma jonów dodatnich, a zatem i ściśle mówiąc, węzłów sieci.

W przypadku w połowie wypełnionego pasma  $n=1$ , jest tyle samo cząstek co węzłów sieci. Bardzo duże oddziaływanie  $U \gg t$  nie pozwala na ruch cząstek, które lokalizują się więc w punktach sieci, tworząc izolator Motta. W przypadku nieskorelowanych cząstek są cztery równie prawdopodobne konfiguracje na węzle sieci: brak cząstek, cząstka o spinie w górę lub w dół i podwójne obsadzenie. Nieskorelowany stan opisuje funkcja  $|\psi_0\rangle$ . Jeżeli 'włączymy' oddziaływanie natychmiast zmniejsza się prawdopodobieństwo podwójnego obsadzenia na węzle i równocześnie w takim samym stopniu zmniejsza się prawdopodobieństwo braku obsadzenia, a wzrasta prawdopodobieństwo pojedynczych obsadzeń. Konstruujemy podobnie jak w poprzednim rozdziale funkcję skorelowanych cząstek

$$|\psi\rangle = \prod_i [1 - (1-g)n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}] |\psi_0\rangle, \quad (4.36)$$

gdzie  $g \in (0,1)$ . Dla  $g=1$  otrzymujemy nieskorelowaną funkcję stanu a dla  $g=0$  nie ma żadnych podwójnych obsadzeń. Energia w stanie skorelowanym wyraża się wzorem

$$E(g) = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (4.37)$$

Aby obliczyć  $E(g)$  odseparujemy stany dwóch określonych węzłów. Tworzymy funkcję stanu  $N$  cząstek skorelowanych jako następującą superpozycję

$$|\psi_N\rangle = \sum_{\alpha\beta} a(\alpha\beta) |\alpha\beta\rangle |\psi_{N-N_{\alpha\beta}}^{\alpha\beta}\rangle, \quad (4.38)$$

gdzie  $\alpha, \beta = 0, \uparrow, \downarrow, d$ , a  $a(\alpha\beta)$  jest amplitudą prawdopodobieństwa pojawienia się stanu  $|\alpha\beta\rangle$ . Zauważmy, że możemy tak zapisać tę funkcję i wysumować po wszystkich stanach  $\alpha\beta$  gdyż wszystkie konfiguracje sieci z wyłączeniem wybranych węzłów są równo prawdopodobne. Zatem wystarczy zmieniać konfigurację na wybranych węzłach. Ponadto w wypadku wypełnienia pasma  $n=1$  gdziekolwiek pojawi się pusty węzeł oznacza to pojawienie się podwójnego obsadzenia w innym miejscu. Stąd możemy pusty węzeł traktować zamiennie z

i j	i j	i j	i j	$a(\alpha\beta)$
00	dd	0d	d0	$g$
$0\uparrow$	$0\downarrow$	$\uparrow 0$	$\downarrow 0$	$\sqrt{g}$
$d\uparrow$	$d\downarrow$	$\uparrow d$	$\downarrow d$	$\sqrt{g}$
$\uparrow\uparrow$	$\uparrow\downarrow$	$\uparrow\uparrow$	$\downarrow\downarrow$	1

**Tablica 2:** Wykaz konfiguracji dwuwęzłowych wraz z odpowiednimi średnimi amplitudami prawdopodobieństwa tych konfiguracji.

węzłem podwójnie obsadzonym [29]. Współczynnik  $a(\alpha\beta)$  zawiera informacje o amplitudzie występowania konfiguracji  $\alpha\beta$ . Można je obliczyć licząc iloczyn funkcji  $|\psi\rangle = [1 - (1-g)n_{\uparrow}n_{\downarrow}]|\alpha\beta\rangle$  (4.22) dla dwóch węzłów (i-tego i j-tego) dla różnych konfiguracji  $\alpha\beta$ , pamiętając, że stan 0 jest równoważny podwójnemu obsadzeniu.

Stąd

$$\langle \psi_N | \psi_N \rangle = \sum_{\alpha\beta} |a(\alpha\beta)|^2 = 4(g^2 + g + g + 1) = 4(g+1)^2. \quad (4.39)$$

Energię rozbijamy na dwie części: kinetyczną i oddziaływania, które są obliczane osobno

$$E(g) = \frac{\langle \psi_N | \mathcal{H} | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle} = \frac{\langle \psi_N | \mathcal{H}_{kin} | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle} + \frac{\langle \psi_N | \mathcal{H}_{int} | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle}. \quad (4.40)$$

Aby znaleźć energię oddziaływania należy policzyć wartość oczekiwaną w stanie  $|\psi_N\rangle$  operatora liczby podwójnych obsadzeń, która wynosi

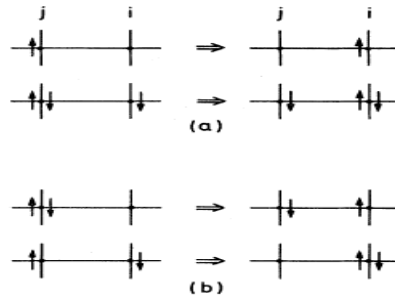
$$\frac{\langle \psi_N | n_{i\downarrow} n_{i\uparrow} | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle} = \frac{2g^2 + 2g}{4(g+1)^2} = \frac{g}{2(g+1)} = d^2, \quad (4.41)$$

gdzie  $d^2$  jest prawdopodobieństwem czyli liczbą podwójnych obsadzeń przypadającą na jeden węzeł. Natomiast, aby policzyć część kinetyczną, należy wyznaczyć wartość oczekiwaną z operatora przeskoku z węzła j-tego na i-ty

$$\begin{aligned} & \frac{\langle \psi_N | c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle} = \\ & = \frac{g}{4(g+1)^2} \left( \langle \psi_{N-1}^{i0} | \psi_{N-1}^{0\uparrow} \rangle + \langle \psi_{N-2}^{i\downarrow} | \psi_{N-2}^{0d} \rangle \right. \\ & \quad \left. + \langle \psi_{N-2}^{d0} | \psi_{N-2}^{i\uparrow} \rangle + \langle \psi_{N-3}^{d\downarrow} | \psi_{N-3}^{i\downarrow} \rangle \right). \end{aligned} \quad (4.42)$$

W każdym z czterech możliwych procesów przeskoku (por. rys.9) nie zmienia się sumaryczna liczba cząstek na węzle i-tym plus j-tym. Prowadzi to do tego, iż wszystkie iloczyny stanów w powyższej równości są równe 1. Wtedy

$$t_{ij} \frac{\langle \psi_N | c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow} | \psi_N \rangle}{\langle \psi_N | \psi_N \rangle} = t_{ij} \frac{4g}{4(g+1)^2} = t_{ij} \frac{g}{(g+1)^2} = E_{kin}. \quad (4.43)$$



**Rysunek 9:** Schematyczne przedstawienie czterech możliwych procesów przeskoku cząstki o spinie w górę w modelu Hubbarda; (a) pozostawiająca sumaryczną liczbę podwójnie okupowanych miejsc bez zmian, (b) zmieniając ich liczbę o jeden wg Vollhardta [14].

Korzystając z powyższych wyników (4.43) i (4.41) możemy wyrazić całkowitą energię przypadającą na jeden węzeł sieci

$$\frac{E(g)}{L} = \frac{1}{L} E_{kin} + U d^2 = \frac{4g}{(g+1)^2} \bar{\epsilon} + U \frac{g}{2(g+1)}, \quad (4.44)$$

gdzie  $\bar{\epsilon} = E_k(g=1)$ . W granicy  $g \rightarrow 0$  oddziaływanie  $U$  jest dużo większe niż całka przeskoku  $t$ , co oznacza, że usuwamy wszystkie podwójne obsadzenia. W tej granicy ignorując wyrazy kwadratowe dostajemy zależność

$$\frac{E(g)}{L} \simeq 4g\bar{\epsilon} + \frac{1}{2}Ug. \quad (4.45)$$

Minimalizując energię względem  $g$  otrzymamy następujące wyniki: (i) W pobliżu  $g \approx 0$  energia jest w przybliżeniu równa zero. Przy  $U \rightarrow U_c$  nie tylko każdy z wyrazów zmierza do zera, ale także te dwa wyrazy są porównywalnymi wielkościami o przeciwnych znakach. Oznacza to, iż w granicy tej znormalizowana energia kinetyczna (pasmowa) jest porównywalna z energią oddziaływania. Stąd możemy oszacować wartość oddziaływania krytycznego  $U_c$ , dla którego nie ma podwójnych obsadzeń

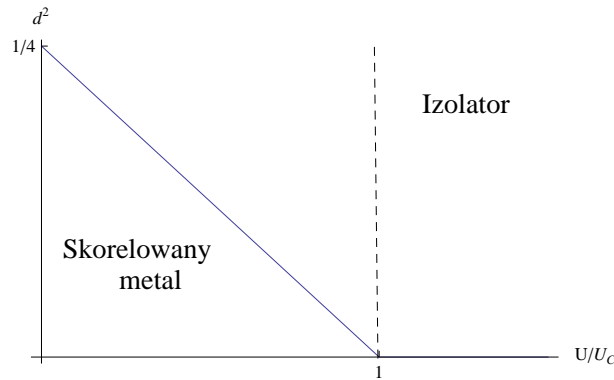
$$U_c = 8|\bar{\epsilon}|. \quad (4.46)$$

(ii) Dla stanu nieskorelowanego gdy  $U = 0$  liczba podwójnie obsadzonych węzłów wynosi  $d^2(g=1) = \frac{1}{4}$  (4.41).

(iii) W ogólności można podać następujący wzór na liczbę podwójnych obsadzeń w funkcji  $U$

$$d^2 = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{U}{U_c}\right). \quad (4.47)$$

Wynik ten można zinterpretować jako przejście pomiędzy metalem gdzie są podwójne obsadzenia czyli cząstki mogą się poruszać z jednego węzła na drugi, a izolatorem gdzie wszystkie podwójne obsadzenia są usunięte i każda cząstka



**Rysunek 10:** Schematyczne przedstawienie przejścia Motta-Hubbarda metal-izolator w obrazie Brinkmana i Rice'a [33] na podstawie zależności prawdopodobieństwa podwójnego obsadzenia na węźle. Liczba podwójnych obsadzeń odgrywa tutaj rolę parametru porządku odróżniającego stan metaliczny od stanu izolatora Motta, które są odrębnymi fazami także w sensie termodynamicznym.

znajduje się na węźle sieci, z którego nie może uciec przez zaporowe oddziaływanie (rysunek 10). To przejście fazowe nosi nazwę przejścia Motta. Solidyfikacja ciekłego  ${}^3\text{He}$  jest uważana za modelowy przykład tego przejścia.

Dla obszaru niskich temperatur została też zaproponowana termodynamiczna teoria przejścia metal izolator przez przez Spalka, Datta i Honiga [30].

### 4.3 Prawie zlokalizowana ciecz Fermiego

Bardzo interesującą i szeroko badaną sytuacją graniczną jest ta gdy średnia liczba cząstek przypadająca na jeden węzeł,  $n$ , plasuje się pomiędzy 0.9 a 1. Ciecz w tym zakresie parametru  $n$  nazywana jest **prawie zlokalizowana cieczą Fermiego** [14, 31, 32]. W ostatnich dwóch pracach Vollhardt i współpracownicy, i Spalek i współpracownicy ciekły  ${}^3\text{He}$  określają tym mianem i rozważają go w powyższym zakresie parametru  $n$  (a nawet  $n \gtrsim 0.99$ , o czym niżej).

Wzorując się na pracy [32] w przypadku zerowego pola magnetycznego, możemy następująco przepisać równanie (4.24) w postaci

$$E/L = \Phi(\eta)\bar{\epsilon} + U\eta, \quad (4.48)$$

gdzie  $\eta \equiv \langle n_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rangle \equiv d^2$  i  $\Phi(\eta)$  jest funkcją opisującą ograniczenia na ruch cząstek (hopping) pod wpływem odpychania coulombowskiego. Tak, jak w poprzednim rozdziale  $\bar{\epsilon}$  oznacza średnią energię pasmową stanów obsadzonych przypadającą na węzeł sieci. Dla  $n \rightarrow 1$  ale przy  $n < 1$ , przy rosnącej amplitudzie oddziaływania  $U$  wartość parametru  $\eta$  dąży do zera. Dlatego też, można wyrazić funkcję  $\Phi(\eta)$  przez rozwinięcie jej w szereg Taylora względem  $\eta$ , które bierzemy z dokładnością do wyrazów kwadratowych

$$\Phi(\eta) = f_0 + f_1\eta + f_2\eta^2. \quad (4.49)$$

Aby otrzymać energię fizyczną układu, należy zminimalizować (4.48) względem parametru (ekstra wariacyjnego)  $\eta$  korzystając z warunku

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \eta} \right|_{\eta=\eta_0} = 0, \quad (4.50)$$

skąd wynika, iż

$$\eta_0 = -\frac{1}{2f_2} \left( f_1 + \frac{U}{\bar{\epsilon}} \right). \quad (4.51)$$

Dodatkowo można policzyć średnią energię  $\bar{\epsilon}$

$$\bar{\epsilon} = \frac{t}{L} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \rangle_0 = \frac{2t}{L} \sum_{j(i)} \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} \rangle_0 \quad N = 2t \sum_{j(i)} (1 - \bar{n}_{i\sigma}) \bar{n}_{j\sigma}, \quad (4.52)$$

gdzie  $\bar{n}_{i\sigma}$  jest średnią liczbą cząstek o spinie  $\sigma$  na węźle  $i$ -tym i wynosi w średniej  $\frac{n}{2}$ , Ostatecznie otrzymujemy

$$\bar{\epsilon} = -2|t| \frac{n}{2} \left( 1 - \frac{n}{2} \right) \mathcal{Z} = -W \frac{n}{2} \left( 1 - \frac{n}{2} \right), \quad (4.53)$$

gdzie  $\mathcal{Z}$  jest liczbą najbliższych sąsiadów i  $W$  szerokością pasma bez oddziaływania. Współczynniki  $f_0, f_1, f_2$  mogą być teraz znalezione z (4.51) i następujących dodatkowych warunków fizycznych:

(i) dla oddziaływania  $U = 0$  parametr  $\eta_0$  można policzyć jako

$$\eta_0|_{U=0} = \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle = \bar{n}_\sigma \bar{n}_{\bar{\sigma}} = \frac{n^2}{4}. \quad (4.54)$$

(ii) dla  $U=0$  energia pasma musi być równa średniej energii  $\bar{\epsilon}$ , czyli

$$\Phi\left(\eta = \frac{n^2}{4}\right) = 1. \quad (4.55)$$

(iii) dla  $\eta = 0$  (brak podwójnych obsadzeń) szerokość pasma wyraża się wzorem wyprowadzonym analogicznie do (4.52). W tym wypadku rozważamy proces przeskoku z okupowanego węzła o spinie  $\sigma$  (średnie obsadzenie węzła spinem  $\sigma$  wynosi  $\bar{n}_{j\sigma} = \frac{n}{2}$ ) na pusty węzeł których średnia liczba przypadająca na pojedynczy punkt sieci wynosi  $1 - n$  (nie ma przeskoków z tworzeniem podwójnych obsadzeń), tj.

$$\Phi(\eta = 0) \bar{\epsilon} = -2|t| \mathcal{Z} (1 - n) \frac{n}{2} = -\frac{W}{2} (1 - n)n. \quad (4.56)$$

Z równań (4.51-4.54) wynika, że

$$\frac{f_1}{f_2} = -\frac{n^2}{2} \quad (4.57)$$

Ponadto korzystając z (4.56) i przybliżenia, że parametr  $n$  jest bliski 1 ( $(n-1)^2 \approx 0$ ) otrzymujemy postać współczynnika  $f_0$ , natomiast z równań (4.55,4.57) obliczamy współczynniki  $f_1$  i  $f_2$ . Tak więc ostatecznie mamy, że

$$\begin{aligned} f_0 &= \frac{1-n}{1-n/2}, \\ f_1 &= \frac{4}{n(1-n/2)}, \\ f_2 &= \frac{-8}{n^3(1-n/2)}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Podstawiając powyższe formy współczynników do (4.51) i ponownie korzystając z przybliżenia  $n$  bliskiego 1 ( $n(2-n) \approx 1$ ) otrzymujemy wartość  $\eta_0$

$$\eta_0 = \frac{n^2}{4} \left(1 - \frac{U}{U_c}\right), \quad (4.59)$$

gdzie  $U_c \equiv 8|\bar{\epsilon}| = 2W$ , jest wartością oddziaływania  $U$ , powyżej której nie ma podwójnych obsadzeń. Dla przypadku  $n = 1$  odtwarzamy wynik (4.47) z poprzedniego podrozdziału

$$\eta_0 = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{U}{U_c}\right). \quad (4.60)$$

Ponadto odtworzone są wyniki z pracy Brinkmana i Rice'a [33] dla  $n = 1$

$$\begin{aligned} q(d^2) &\equiv \Phi(\eta_0) = 1 - \left(\frac{U}{U_c}\right)^2, \\ \frac{E_G}{L} &= \left(1 - \frac{U}{U_c}\right)^2 \bar{\epsilon}, \end{aligned} \quad (4.61)$$

gdzie  $E_G$  jest fizyczną wartością energii stanu podstawowego. Aby zobaczyć naturę zmiany stanu podstawowego dla w połowie wypełnionego pasma dla oddziaływania  $U = U_c$  można obliczyć kwadrat operatora spinu cząstki  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle$ , gdzie operator spinu ma postać

$$\mathbf{S}_i = (S_i^+, S_i^-, S_i^z) = (a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}, a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\uparrow}, (n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})/2). \quad (4.62)$$

Mamy mianowicie, że

$$\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle = \left(\frac{3}{4}\right)(1 - 2\eta_0). \quad (4.63)$$

Dla  $U \rightarrow U_c$ ,  $\langle \mathbf{S}_i^2 \rangle \rightarrow \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)$ ; to znaczy że dla oddziaływania  $U_c$  otrzymujemy atomowe wartości oczekiwanej spinu cząstek. Zatem pomimo tego, iż cząstki nie mogą poruszać się z miejsc ich lokalizacji ich spiny mogą fluktuować i oddziaływać z innymi spinami z otoczenia. Ta ostantia cecha zlokalizowanych (i wędrownych) spinów nie jest poprawnie uwzględniona w obecnym sformułowaniu jednowęzłowym.

Podejście powyższe można podać w ogólniejszej formie z uwzględnieniem polaryzacji magnetycznej np. w obecności zewnętrznego pola magnetycznego.



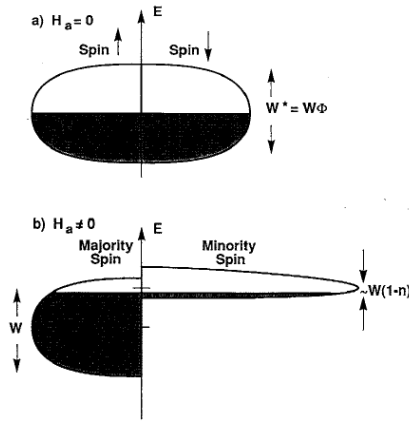
Wtedy funkcja  $\Phi(\eta)$  staje się zależna od spinu i odpowiednio dostajemy ostateczne wartości współczynników rozwinięcia  $\Phi_\sigma(\eta) = f_{0\sigma} + f_{1\sigma}\eta + f_{2\sigma}\eta^2$

$$\begin{aligned} f_{0\sigma} &= \frac{1-n}{1-n_\sigma}, \\ f_{1\sigma} &= \frac{2}{n_\sigma(1-n_\sigma)}, \\ f_{2\sigma} &= \frac{1}{n_\sigma^2 n_{\bar{\sigma}}(1-n_\sigma)}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Funkcja  $\Phi_\sigma(\eta)$  jest równa współczynnikowi Gutzwillera  $q_\sigma$  (4.25) dla  $n = 1$  i  $n_\sigma = n_{\bar{\sigma}} = n/2$ . Dodatkowo, renormalizacja masy efektywnej wyraża się wzorem

$$\frac{m_\sigma^*}{m_B} = q_\sigma^{-1}, \quad (4.65)$$

gdzie dla  $n < 1$  jest ona zależna od spinu. Ponieważ współczynnik  $q_\sigma^{-1}$  jest niezależny od wektora falowego  $\mathbf{k}$  możemy go utożsamić z współczynnikiem zwężenia pasma  $\Phi^{-1}$ . Dla  $T = 0$  i dla  $w$  w połowie wypełnionego pasma otrzymujemy, że dla  $U \rightarrow U_c$  masa efektywna cząstek jest rozbieżna. Na rysunku (11) przedstawiamy schematycznie, jak zależy współczynnik zwężenia pasma w obecności zewnętrznego pola magnetycznego. Podpasmo ze spinem większościowym cząstek staje się coraz szersze, podczas gdy podpasmo spinu mniejszościowego się zwęża. Równoważnie, masa efektywna dla podpasma większościowego  $m_\uparrow^*$  jest redukowana do masy (gołej) pasma bez oddziaływania  $m_B$ , gdy magnetyzacja  $m = \langle n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow} \rangle$  dąży do 1, podczas gdy masa efektywna podpasma mniejszości radykalnie rośnie. Obsadzenie podpasma mniejszościowego dla  $n < 1$  znika w stanie nasycenia magnetycznego.



**Rysunek 11:** Schematyczna reprezentacja stanów kwazicząstek na wykresie spinowo rozszczepionych gęstości stanów dla pola magnetycznego  $H = 0$  (górny rysunek) i  $H \neq 0$  (dolny rysunek) - zwężenie podpasma mniejszościowego. [32].

Dla obszaru niskich temperatur został też wprowadzony formalizm prawie zlokalizowanej cieczy Fermiego przez Spałka, Kokowskiego i Honiga [31] w przybliżeniu pola średniego.

## 5 Statystycznie konsystentne podejście Gutzwillera

Standardowym zadaniem w rozwiązywaniu problemów metodą z użyciem wariacyjnej funkcji falowej jest optymalne wyznaczenie parametrów średniego pola pojawiających się w efektywnym hamiltonianie. Poprzez wprowadzenie zasady maksymalizacji entropii metoda statystycznie konsystentnego podejścia Gutzwillera (ang. statistically consistent Gutzwiller approximation - SGA) zaproponowana niedawno przez J. Jędraka, J. Kaczmarczyka, J. Spałka [1] okazała się efektywniejsza, i usuwająca fizyczne nieścisłości w standardowego przybliżenia Gutzwillera. Została, także z sukcesem zastosowana między innymi do modelu  $t$ - $J$  w pracach [21, 22] do opisu nadprzewodników wysokotemperaturowych.

Rozważmy układ jak w poprzednim rozdziale, z takimi samymi oznaczeniami dla  $q_\sigma$  zależącego od magnetyzacji  $m$  (4.27). Można pokazać, iż dla niezerowej magnetyzacji  $m$  pochodna efektywnego funkcjonału Landaua po magnetyzacji jest różna od zera

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q_\sigma(d, n, m)}{\partial m} \epsilon_{\mathbf{k}} f(E_{\mathbf{k}\sigma}) \neq 0. \quad (5.66)$$

Fizycznie oznacza to, iż przez zmianę liczby cząstek z jednego podpasma spinowego do drugiego, czyli przez zmianę magnetyzacji  $m$  zmniejszamy całkowitą energię układu. W ramach metody SGA magnetyzacja  $m$  i inne parametry średniego pola, są traktowane jako parametry wariacyjne względem, których minimalizowany jest efektywny funkcjonał Landaua. Aby zbudować nowy formalizm, wprowadzić należy mnożniki Lagrange'a, dzięki którym możliwe jest zapisanie warunków na  $m$  i  $n$ . Tworzymy na bazie efektywnego hamiltonianu w ramach standardowego przybliżenia Gutzwillera nowy hamiltonian

$$\mathcal{H}_{SGA} \equiv \mathcal{H}_{GA} - \lambda_m (\hat{M} - M) - \lambda_n (\hat{N} - N). \quad (5.67)$$

Mnożniki Lagrange'a pełnią funkcje jednorodnych pól molekularnych, które są sprzężone do magnetyzacji oraz całkowitej liczby cząstek. Kolejnym krokiem jest konstrukcja potencjału Landaua dla efektywnego hamiltonianu  $\mathcal{H}_{SGA}$

$$\mathcal{F}^{SGA} \equiv -\beta^{-1} \ln Z_\lambda, \quad Z_\lambda \equiv \text{Tr}[e^{-\beta(\hat{H}_\lambda - \mu \hat{N})}]. \quad (5.68)$$

Dokładnie otrzymujemy

$$\mathcal{F}^{SGA} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \ln[1 + e^{-\beta E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)}}] + L(\lambda_n n + \lambda_m m + U d^2), \quad (5.69)$$

gdzie energia kwazicząstek jest zdefiniowana jako

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)} = q_\sigma \epsilon_{\mathbf{k}} - \sigma(h + \lambda_m) - \mu - \lambda_n. \quad (5.70)$$

Wartości równowagowe parametrów średniego pola (w porównaniu do standardowego podejścia Gutzwillera dodatkowo mamy mnożniki Lagrange'a jako

parametry średniego pola) osiąga się poprzez spełnienie warunków:

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda_m} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \lambda_n} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial d} = 0. \quad (5.71)$$

Stąd otrzymujemy układ pięciu równań do rozwiązania

$$\begin{aligned} \lambda_n &= -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q_\sigma}{\partial n} f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)}) \epsilon_{\mathbf{k}}, \\ \lambda_m &= -\frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q_\sigma}{\partial m} f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)}) \epsilon_{\mathbf{k}}, \\ d &= -\frac{1}{2LU} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{\partial q_\sigma}{\partial d} f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)}) \epsilon_{\mathbf{k}}, \\ n &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)}), \\ m &= \frac{1}{L} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sigma f(E_{\mathbf{k}\sigma}^{(SGA)}). \end{aligned} \quad (5.72)$$

Układ tych równań rozwiązujemy numerycznie (por. dodatek C). Wyniki uzyskane dla różnych sieci i różnych wartości parametrów przedstawione są szczegółowo w dalszych rozdziałach pracy.

## 6 Opis wyników dla wybranych sieci

### 6.1 Pierwsza strefa Brillouina

Strukturę kryształów określamy za pomocą sieci i bazy [34]. Do opisu sieci wprowadzamy 3 wektory translacji  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$  takie, że:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (6.73)$$

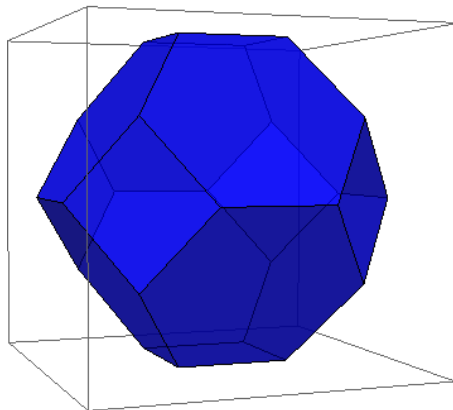
gdzie  $n_1$ ,  $n_2$ ,  $n_3$  są dowolnymi liczbami całkowitymi, a układ wektorów  $\mathbf{r}'$  definiuje punkty sieci. Objętość, w której zawiera się jeden punkt sieci zdefiniowana przez prymitywne wektory translacji nazywamy komórką elementarną, lub inaczej komórką Wignera-Seitza. Jej objętość opisuje wzór:

$$V_c = |\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3| \quad (6.74)$$

Możemy też zdefiniować sieć odwrotną, którą aby otrzymać należy zrobić transformację Fouriera sieci. Wektory tej sieci  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$ ,  $\mathbf{b}_3$  definiujemy następująco:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{|\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{|\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|} \end{aligned} \quad (6.75)$$

W sieci odwrotnej również możemy zdefiniować komórkę Wignera-Seitza, która tworzy pierwszą strefę Brillouina. Dla sieci kubicznej prostej jest to sześcian, dla sieci trójkątnej heksagon, natomiast dla sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej jest to ścięty oktahedron, który został przedstawiony na rysunku 12.



**Rysunek 12:** Pierwsza strefa Brillouina dla sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej (FCC).

## 6.2 Przybliżenie ciasnego wiązania (TBA-tight binding approximation)

Rozważmy trójwymiarową sieć funkcji Wanniera typu s zlokalizowanych na węzłach sieci [15]. Niech stan  $|i\rangle$  oznacza funkcję zlokalizowaną na  $i$ -tym węźle.

$$|i\rangle = \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (6.76)$$

Natomiast, amplituda przejścia ze stanu  $|i\rangle$  do stanu  $|j\rangle$  zależy jedynie od różnicy  $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ .

$$H(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \langle i | \mathcal{H} | j \rangle, \quad (6.77)$$

tak samo jak przekrycie się funkcji falowych

$$S(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) = \langle i | j \rangle, \quad (6.78)$$

gdzie funkcje są znormalizowane  $S(0) = \langle i | i \rangle = 1$ . Przekrycie funkcji falowych wraz ze wzrostem odległości pomiędzy węzłami maleje i staje się bardzo małe, ale niekoniecznie 0. Aby zobaczyć jak wielki wpływ na zmiany poziomów energetycznych funkcji atomowej mają kolejni sąsiedzi na sieci wygodnie jest przejść do reprezentacji pędów.

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} |i\rangle. \quad (6.79)$$

Powyższa funkcja nosi nazwę funkcji Bloch'a. W kryształach gdy  $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$  hamiltonian ma wyrazy tylko i wyłącznie diagonalne co oznacza, że  $\langle \mathbf{k} | \mathcal{H} | \mathbf{k}' \rangle = 0$ . Wtedy funkcja Blocha  $|\mathbf{k}\rangle$  jest funkcją własną hamiltonianu  $g$ .

$$\mathcal{H}|\mathbf{k}\rangle = E(\mathbf{k})|\mathbf{k}\rangle. \quad (6.80)$$

Korzystając z powyższych zależności możemy obliczyć w tym formalizmie relacje dyspersji  $E(\mathbf{k})$ .

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= \frac{\langle \mathbf{k} | \mathcal{H} | \mathbf{k} \rangle}{\langle \mathbf{k} | \mathbf{k} \rangle} = \frac{\sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle i | \mathcal{H} | j \rangle}{\sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle i | j \rangle} \\ &= \frac{\sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} H(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}{\sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} S(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\ &= \frac{\sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i)} H(\mathbf{R}_i)}{\sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i)} S(\mathbf{R}_i)} \equiv \frac{\tilde{H}(\mathbf{k})}{\tilde{S}(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (6.81)$$

W poniższej tabeli wymienione są relacje dyspersji dla wybranych sieci z dokładnością do drugich najbliższych sąsiadów, w wypadku gdy sąsiednie funkcje atomowe się nie przekrywają.

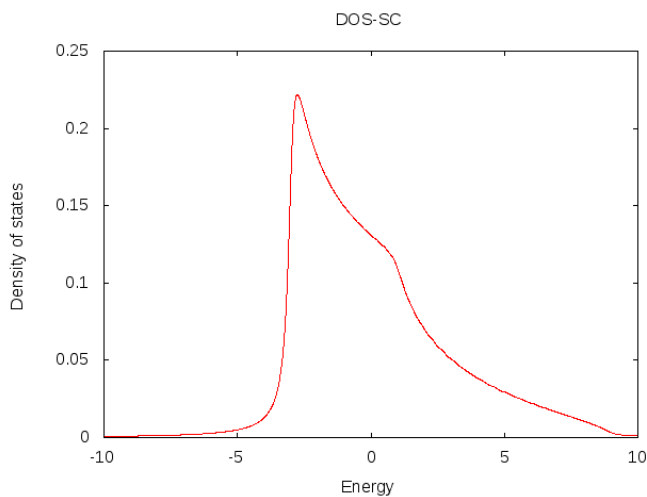
rodzaj sieci	relacja dyspersji, $\epsilon(\mathbf{k}) =$
SQ	$-2t[\cos(k_x) + \cos(k_y)] + 4t'[\cos(k_x) \cos(k_y)]$
TRG	$-2t[\cos(k_x) + 2 \cos(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{\sqrt{3}k_y}{2})]$ $+2t'[\cos(\sqrt{3}k_y) + 2 \cos(\frac{3k_x}{2}) \cos(\frac{\sqrt{3}k_y}{2})]$
SC	$-2t[\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z)]$ $+4t'[\cos(k_x) \cos(k_y) + \cos(k_z) \cos(k_y) + \cos(k_x) \cos(k_z)]$
FCC	$-4t[\cos(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{k_y}{2}) + \cos(\frac{k_z}{2}) \cos(\frac{k_y}{2}) + \cos(\frac{k_x}{2}) \cos(\frac{k_z}{2})]$ $+2t'[\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z)]$

Oznaczenia na rodzaje sieci są następujące:

- SQ (simple quadratic) - kwadratowa prosta,
- TRG (triangular) - trójkątna,
- SC (simple cubic) - kubiczna prosta,
- FCC (face centered cubic) - kubiczna powierzchniowo centrowana.

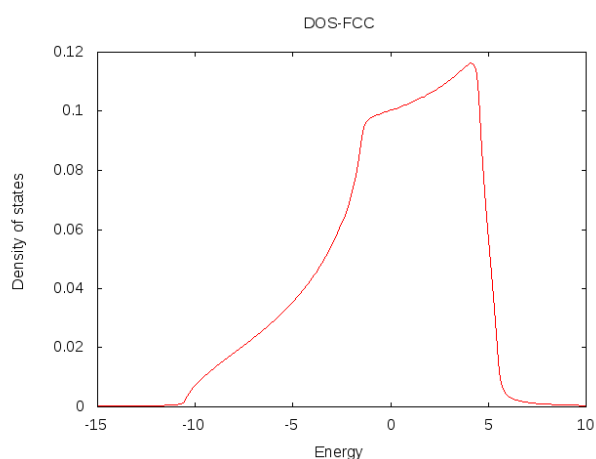
### 6.3 Gęstości stanów

Poniższe rysunki prezentują gęstości stanów dla sieci trójwymiarowych kubicznej prostej i kubicznej powierzchniowo centrowanej, oraz dla sieci dwuwymiarowej trójkątnej z dokładnością do całki przeskoku pomiędzy drugimi najbliższymi sąsiadami ( $t' = 0.25t$ ). Energia na każdy z wykresów jest wyrażona w jednostkach całki przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami,  $t = 1$ .

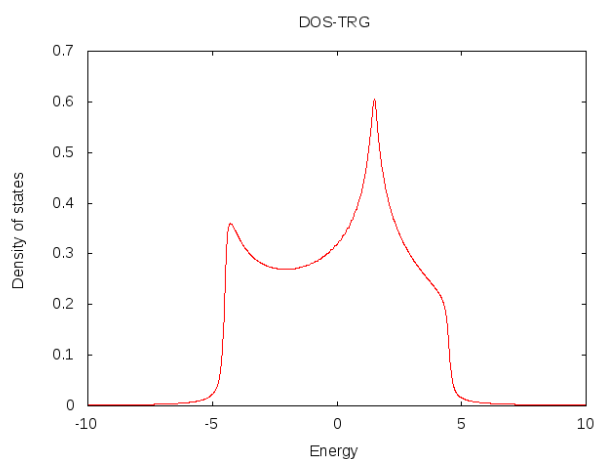


**Rysunek 13:** Gęstość stanów dla sieci kubicznej prostej (SC) dla wartości całek hoppingu  $t = 1$ ,  $t' = 0.25t$ .

We wszystkich tych przypadkach symetria cząstka-dziura jest złamana dla  $t' \neq 0$ . Należy także pamiętać, że wyniki te przedstawiają gęstość stanów dla



**Rysunek 14:** Gęstość stanów dla sieci kubicznej powierzchniowo centrowanej (FCC) dla wartości całek hoppingu  $t = 1$ ,  $t' = 0.25t$ .



**Rysunek 15:** Gęstość stanów dla sieci trójkątnej (TRG) dla wartości całek hoppingu  $t = 1$ ,  $t' = 0.25t$ .

nieoddziałujących cząstek (tzw. gołe gęstości stanów, bez uwzględnienia efektów korelacyjnych np. zwiężenia szerokości pasma wskutek dominującej roli oddziaływania pomiędzy cząstkami).

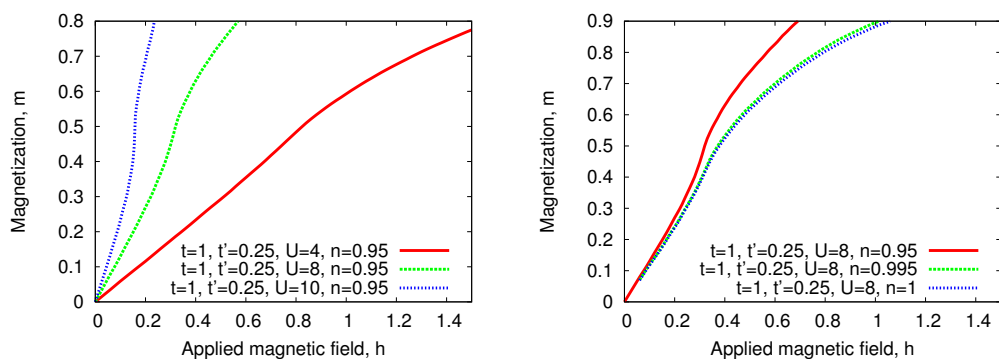
## 7 Magnetyzacja w przybliżeniu SGA dla różnych sieci

Ciekły charakter  ${}^3\text{He}$  ze względów oczywistych nie jest układem sieciowym. Jednakże, przetestujemy obecnie, jak taki układ może być modelowany przez różne geometrie sieciowe. Jest to ciecz kwantowa, więc różne typy ciasno upakowanych sieci winny być przybliżone w ten sposób. We wszystkich obliczeniach numerycznych temperatura rozważana w modelu wynosi  $T = 1/\beta = 0.002$  w jednostkach całki przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami są wzięte jako punkt odniesienia energii,  $t = 1$ .

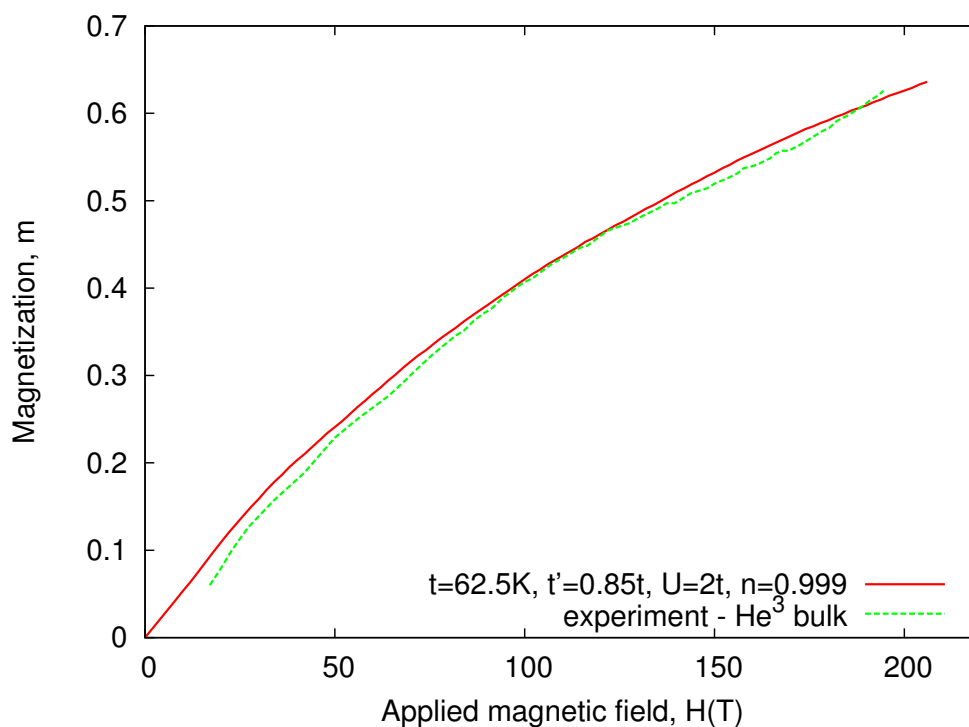
### 7.1 Sieć kubiczna prosta

W pierwszej ogólnej analizie tendencji zależności magnetyzacji w układzie trójwymiarowym od zewnętrznego pola magnetycznego w ramach metody SGA została wykorzystana sieć kubiczna prosta (SC - simple cubic). Do celów obliczeń numerycznych sumowania po wektorze falowym  $\mathbf{k}$  Pierwsza Strefa Brillouina dla sieci SC została podzielona siatką  $100 \times 100 \times 100$ , czyli jej objętość zawiera  $10^6$  punktów sumowania. Porównanie krzywych magnetyzacji ze względu na zmianę oddziaływania na węzle  $U$  i wypełnienia pasma  $n$  prezentuje rysunek 16. Wraz ze wzrostem oddziaływania  $U$  obserwujemy tendencję do szybszego wzrostu magnetyzacji (lewy wykres, rys.16). Analiza krzywych magnetyzacji w zależności od wypełnienia pasma  $n$  (prawy wykres, rys.16) w zakresie prawie zlokalizowanej cieczy Fermiego (Rozdział 5.3) pokazała, że krzywe silnie zależą od zmiany tego parametru. Na rys.17 przedstawione jest dopasowanie wyników numerycznych dla sieci SC do krzywej otrzymanej eksperymentalnie [12]. Pole magnetyczne w eksperymencie jest podane teslach natomiast obliczenia numeryczne zostały przeprowadzone dla pól w jednostkach pierwszej całki przeskoku. Łączącą wielkością jest całka przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami  $t$ , którą przyjąłem równą  $62,5K$ . Parametry dopasowania nie zgadzają się z ogólną ideą rozważania ciekłego  ${}^3\text{He}$  jako cieczy silnie skorelowanej ponieważ oddziaływanie  $U$  jest tylko dwa razy większe niż całka hoppingu  $t_1$  pomiędzy najbliższymi sąsiadami. Ponadto, całka przeskoku pomiędzy drugimi sąsiadami wydaje się zdecydowanie za duża  $t' = 0.85t$ . Z tego względu kolejną rozważaną siecią jest sieć kubiczna powierzchniowo centrowana (FCC - face centered cubic) ze względu na ciaśniejsze upakowanie. Ponadto, ponieważ rozważamy układ bliski lokalizacji wydaje się też, że uzasadniony wybór sieci FCC ze względu na diagram fazowy dla skondensowanego  ${}^3\text{He}$  (rys.1), który sugeruje, iż krystalizuje się on w sieciach ciasno upakowanych (BCC, HCP, FCC- w zależności od temperatury i ciśnienia).





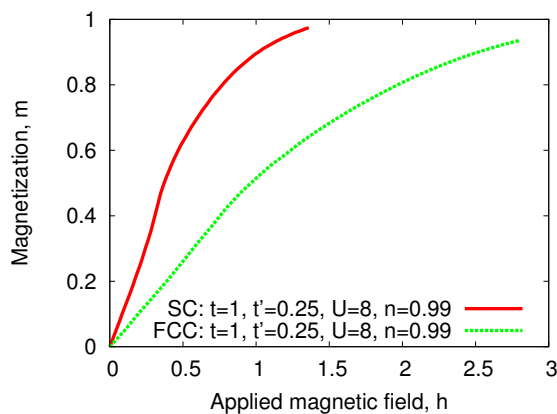
**Rysunek 16:** Magnetyzacja w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego dla sieci SC: lewy wykres - porównanie ze względu na zmianę parametru Hubbarda  $U$ , prawy wykres - porównanie ze względu na zmianę stopnia wypełnienia pasma  $n$ .



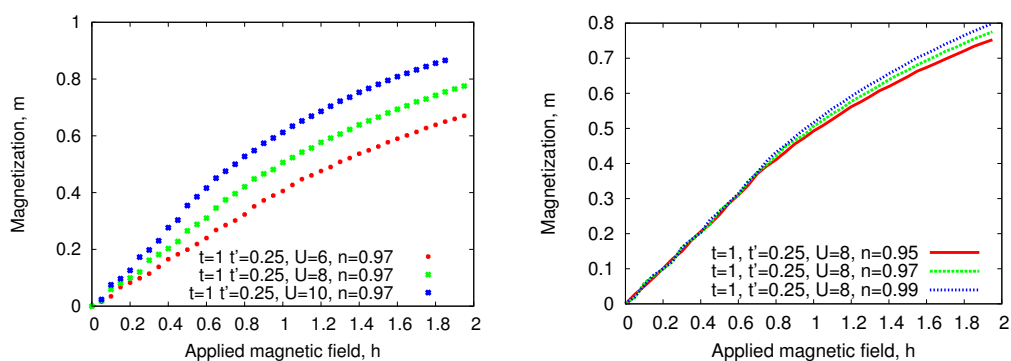
**Rysunek 17:** Dopasowanie do eksperymentu dla ciekłego  $^3\text{He}$ [12] krzywej namagnesowania wyznaczonej dla sieci SC.

## 7.2 Sieć kubiczna powierzchniowo centrowana

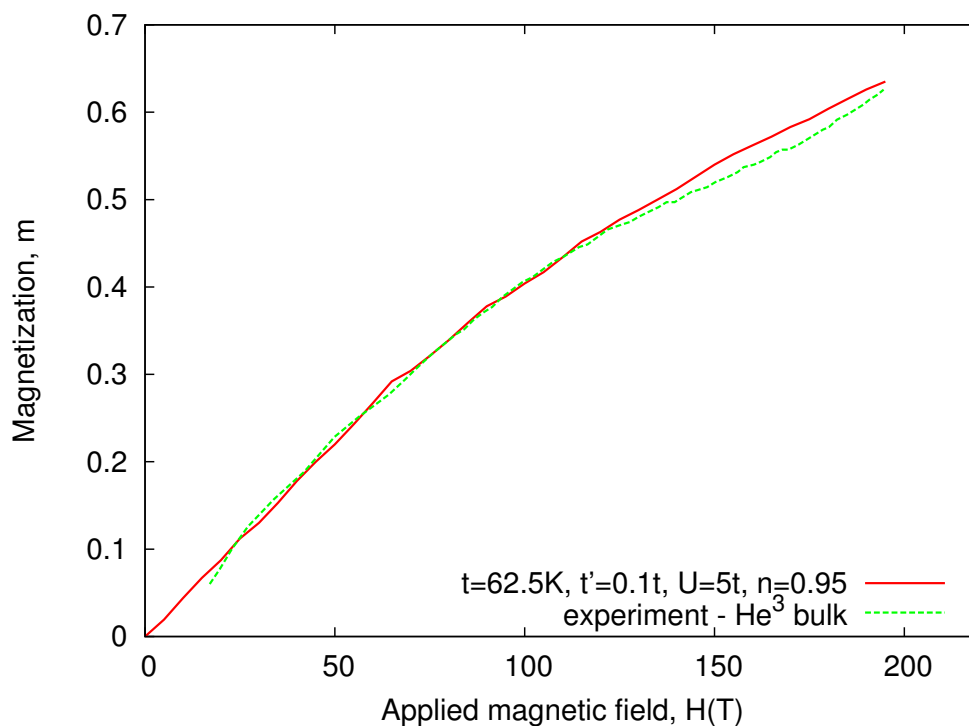
W analogii do poprzedniego podrozdziału, przeprowadzone zostały obliczenia numeryczne krzywych magnetyzacji ponownie w ramach metody SGA przy założeniu struktury FCC. Do celów obliczeń numerycznych sumowania po wektorze falowym  $\mathbf{k}$  Pierwsza Strefa Brillouina dla sieci FCC zawierała  $4 \cdot 10^6$  punktów sumowania. Porównanie wyników otrzymanych dla struktur SC i FCC znajduje się na rysunku 18. Jak można zaobserwować zwiększenie liczby najbliższych sąsiadów spowodowało zmniejszenie wzrostu magnetyzacji wraz ze wzrostem pola  $H$ . Ponownie została przeprowadzona analiza zachowania krzywych magnetyzacji dla tej struktury w zależności od zmiany parametrów, oddziaływania  $U$  i wypełnienia pasma  $n$ . Rezultaty są przedstawione na rysunku 19. Zachowanie jakościowe wraz ze zmianą parametrów  $U$  i  $n$  są analogiczne, jak w przypadku wzięcia do rozważań struktury SC. Ostatecznie przedstawione zostało na rysunku 20 dopasowanie wyników numerycznych dla sieci FCC do krzywej otrzymanej eksperymentalnie [12]. Ponownie pole magnetyczne w eksperymencie jest podane w teslach natomiast obliczenia numeryczne zostały przeprowadzone dla pól w jednostkach pierwszej całki przeskoku. Łączącą wielkością jest całka przeskoku pomiędzy najbliższymi sąsiadami  $t$ , którą przyjąłem ponownie jako równą  $62,5K$ . Parametry dopasowania mieszczą w zakresie wartości rzeczywistych. Przede wszystkim oddziaływanie  $U = 5$  jest bliskie 8 i wypełnienie pasma  $n=0.95$  bliskie 1, co sugeruje, iż faktycznie możemy rozważać ciekły  ${}^3\text{He}$  jako ciecz kwantową silnie skorelowaną i prawie zlokalizowaną. Jest to kolejny argument, iż solidyfikacja ciekłego  ${}^3\text{He}$  powinna być rozważana jako przejścia Motta-Hubbarda.



*Rysunek 18: Porównanie magnetyzacji dla sieci FCC i SC*



**Rysunek 19:** Magnetyzacja w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego dla sieci FCC: lewy wykres - dla różnych wartości parametru Hubbarda  $U$ , prawy wykres - dla różnych wartości stopnia wypełnienia pasma  $n$ .

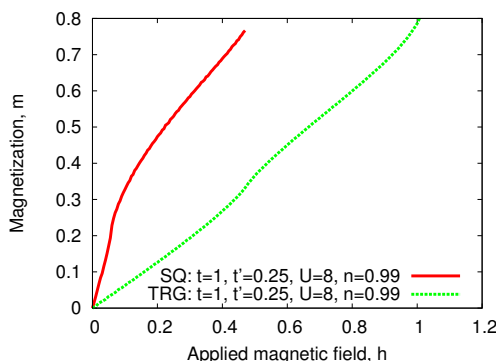


**Rysunek 20:** Dopasowanie do eksperymentu dla ciekłego  ${}^3\text{He}$ [12] krzywej magnetyzacji wyznaczonej dla sieci FCC. Jakość dopasowania jest nieco lepsza, niż dla przypadku SC.

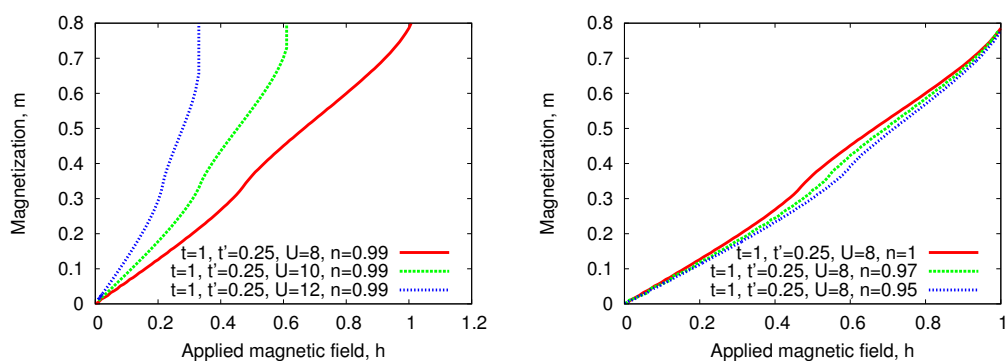
### 7.3 Sieć dwuwymiarowa trójkątna

Przez wzgląd na nietrywialną geometrię, monowarstwa  ${}^3\text{He}$  naniesiona na grafit tworząca dwuwymiarową strukturę trójkątną ze spinem nuklearnym  $1/2$  [35] jest układem szeroko badanym teoretycznie w ramach różnych modeli [36, 37, 38, 39]. Równolegle, wiele zespołów bada ten układ doświadczalnie [40, 41, 42]. Z powodu powszechności problemu przedstawione zostały również wyniki numeryczne krzywych magnetyzacji w ramach modelu SGA dla tej sieci.

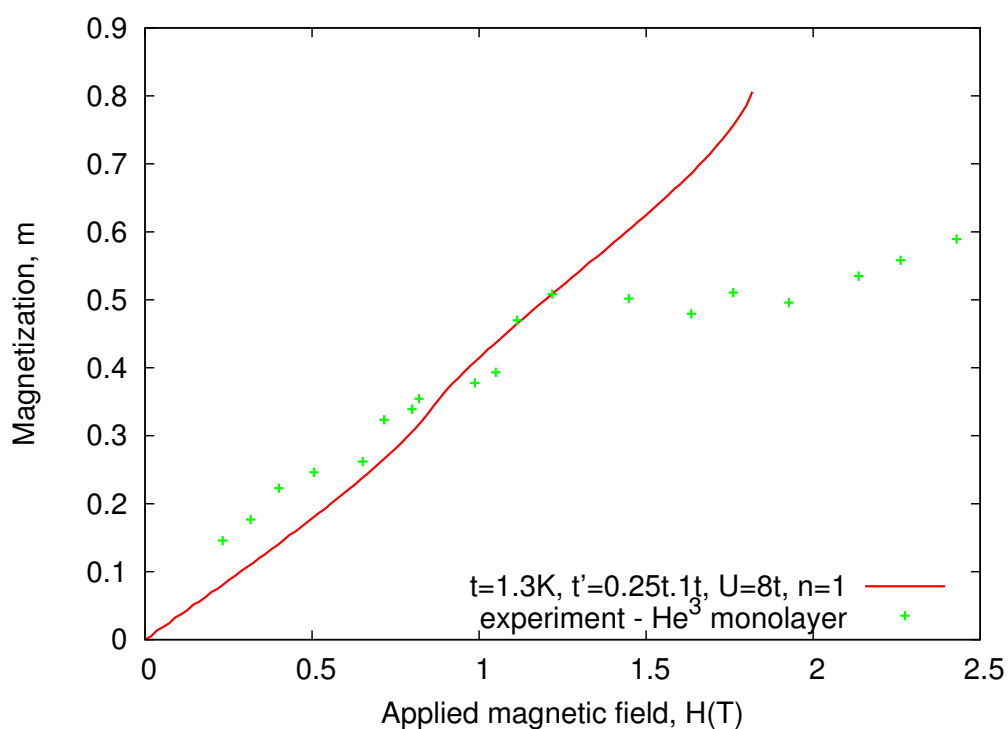
Do celów obliczeń numerycznych sumowania po wektorze falowym  $\mathbf{k}$  pierwsza strefa Brillouina zawierała  $12 \cdot 10^4$  punktów sumowania. Różnice pomiędzy magnetyzacją dla dwuwymiarowej sieci trójkątnej a sieci kwadratowej prostej pokazuje rysunek 21. Natomiast na rysunku 22 przedstawiono ewolucję krzywych magnetyzacji w zależności od wielkości oddziaływania  $U$ . Ciekawe zachowanie prezentują krzywe magnetyzacji wraz ze zmianą wypełnienia pasma w zakresie  $0.9 \leq n < 1$  - dla niskiej i bardzo wysokiej magnetyzacji krzywe się zbiegają, a jedyne różnice wykazują w pobliżu magnetyzacji równej  $0.3 - 0.5$ . Dodatkowo zachowanie krzywych dla  $n \rightarrow 1$  sugeruje chwilowe wypłaszczenie w okolicach wartości magnetyzacji  $0.5$ . Mogłoby to sugerować, iż obserwowane wypłaszczenie krzywej magnetyzacji otrzymanej eksperymentalnie nie jest sugerowanym w pracy [41] przejściem ze stanu cieczy spinowej do stanu uudd, a zachowaniem wynikającym czysto z relacji dyspersji dla sieci trójkątnej w modelu SGA. Zmiana nachylenia krzywej otrzymanej numerycznie jest zbyt niewielka, aby można było ją utożsamić z wypłaszczeniem otrzymanym eksperymentalnie dla jednowarstwy  ${}^3\text{He}$ . Jednakże, wciąż dla magnetyzacji nie większej niż  $0,5$  zaproponowane zostało dość dobre dopasowanie krzywej otrzymanej numerycznie do eksperymentu [41] (Rys.23). Łączącą wielkością jest całka przeskoku  $t_1$ , którą przyjąłem równą około  $1,7K$ . W modelu SGA nie są uwzględnione korelacje międzyatomowe, które prawdopodobnie odgrywa kluczową rolę w wyjaśnieniu obserwowanego wypłaszczenia doświadczalnej krzywej magnetyzacji.



**Rysunek 21:** Porównanie krzywych magnetyzacji w funkcji pola  $h$  dla sieci TRG i SQ.



**Rysunek 22:** Magnetyzacja w funkcji zewnętrznego pola magnetycznego dla sieci trójkątnej (TRG): lewy wykres - porównanie ze względu na zmianę parametru Hubbarda  $U$ , prawy wykres - porównanie ze względu na zmianę parametru  $n$ .



**Rysunek 23:** Dopasowanie krzywej magnetyzacji otrzymanej numerycznie dla sieci trójkątnej z eksperymentem [41]

## 8 Podsumowanie

${}^3\text{He}$  jest napewno jednym z najczęściej badanych i najlepiej poznanych fermionowych układów skorelowanych. Z powodu jego zadziwiających właściwości w niskich temperaturach, zaprezentowano wiele teorii próbujących wyjaśnić zachowanie tej cieczy kwantowej. W pracy zostały zaprezentowane wyniki dopasowania krzywych magnetyzacji w ramach SGA do eksperymentalnych wyników [12]. Początkowo została założona sieć kubiczna prosta, w którą krystalizuje się ciekły hel w wysokim ciśnieniu. Dla tej sieci otrzymano nierealistyczne wartości parametrów dopasowania. Energia oddziaływania była tylko dwa razy większa od całki przeskoku pomiędzy pierwszymi sąsiadami i potrzebna była zbyt duża wartość całki przeskoku pomiędzy drugimi sąsiadami ( $t' = 0.85t$ ). Można stąd wywnioskować, że uwzględniona powinna być ciaśniej upakowana struktura. W ramach struktury kubicznej powierzchniowo centrowanej otrzymano dopasowanie do eksperymentu dla realistycznych wartości parametrów:  $U=5t$ ,  $t'=0.1t$ . Jest to kolejny argument za tym, iż możemy traktować solidyfikację  ${}^3\text{He}$  jako przejście Motta-Hubbarda. W pracy przeanalizowano również zachowanie magnetyzacji monowarstwy  ${}^3\text{He}$  naporowanej na graficie. W tym celu założono sieć trójkątną, taką samą, jak dla podłoża. Także w tym przypadku przedstawione zostało dopasowanie do krzywej eksperymentalnej [41]. Zgodność została otrzymana jedynie dla magnetyzacji mniejszych niż 0.5. Odstępstwo krzywej wyliczonej numerycznie od eksperymentu dla wyższych pól prawdopodobnie ma związek z faktem, iż układ spinów na sieci trójkątnej jest silnie sfrustrowany i nasze przybliżenie pola średniego jest nieadekwatne.

## 9 Co dalej?

Kolejnymi krokami formalnymi w rozwijaniu zaprezentowanej metody może być uwzględnienie korelacji międzyatomowych dla sieci trójkątnej poprzez zastosowanie modelu t-J-U [44, 45], który to bierze pod uwagę oddziaływania wymienne kinetycznej wymiany.

Ponadto, model może być użyty do analizy stanów elektronowych dla sieci heksagonalnej w celu porównania teorii z eksperymentem przeprowadzonym całkiem niedawno przez Singha et. al. [46] na elektronach uwięzionych w dwuwymiarowej studni potencjalnej w arsenku galu, gdzie zaobserwowano m. in. rozszczepienie Hubbarda. Powinno to pozwolić na określenie względnej roli stanów kwazicząstkowych i rozszczepienia Hubbarda.

Z punktu widzenia fizycznego wydaje się koniecznym wyjście poza przybliżenie pola średniego (typu SGA) i uwzględnienie zrenormalizowanych fluktuacji spinowych. Pozwoliłoby to z jednej strony na realistyczne oszacowanie np. wkładu  $T^3 \ln T$  do ciepła właściwego pochodzącego od fluktuacji spinowych (paramagnonów), a z drugiej określenie renormalizacji potencjału parującego pochodzącego od wymiany wirtualnej takiej fluktuacji.

W końcu, należy sobie zdać sprawę, że nasze modelowanie ciekłego  $^3\text{He}$  przez model sieciowy jest zgrubne. Dobrze, że ten opis przez ciasno upakowaną sieć krzywej namagnesowania jest realistyczny, oczywiście kosztem wprowadzenia pewnej ilości (5%) dziur grających rolę 'wakansów kwantowych' w tej sieci. Byłoby wskazane zamodelować stany jednocząstkowe w sieci przez inne funkcje gęstości stanów (np. gaussowską, sieć Bethego). Takie podejście, jak i to obecne, różni się od tego, w którym stan cieczy udokładnia się przez wprowadzenie funkcji korelacji typu Jastrowa, itd. Uważamy bowiem, że  $^3\text{He}$  zwłaszcza w pobliżu solidyfikacji nie jest normalną cieczą, a prawie zlokalizowanym układem cząstek kwantowych. Nasz opis jest z pewnością bardziej efektywny do obliczeń i pozwala na prostą interpretację fizyczną wyników, ale wymaga dalszych testów.

## Dodatki

### A Renormalizacja wybranych wielkości w teorii Landaua

#### A.1 Masa efektywna

W celu wyznaczenia stosunku masy efektywnej kwazicząstki  ${}^3\text{He}$  w cieczy Fermiego, do masy atomu  ${}^3\text{He}$  w próżni rozważmy transformację Galileusza do układu poruszającego się z prędkością  $\mathbf{v}$ . Całkowita energia i całkowity pęd układu zmienia się wtedy następująco

$$\begin{aligned} E' &= E - \mathbf{P} \cdot \mathbf{v} + \frac{M\mathbf{v}^2}{2}, \\ \mathbf{P}' &= \mathbf{P} - M\mathbf{v}. \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Dodajemy teraz do układu jedną kwazicząstkę o pędzie  $\mathbf{p}$  w układzie laboratoryjnym. Dodanie jednej kwazicząstki oznacza dodanie jednego atomu  ${}^3\text{He}$  do układu, stąd całkowita masa zmienia się jak  $M \rightarrow M + m$ . W układzie laboratoryjnym pęd wzrasta o  $\mathbf{p}$  a energia o  $\epsilon_{\mathbf{p}}$ . Natomiast w układzie poruszającym się pęd wzrasta o  $\mathbf{p} - m\mathbf{v}$  a energia o  $\epsilon_{\mathbf{p}} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{m\mathbf{v}^2}{2}$ . Zmiana energii w poruszającym się układzie musi być równa energii dodanej kwazicząstki

$$\epsilon'_{\mathbf{p}-m\mathbf{v}} = \epsilon_{\mathbf{p}} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} + \frac{m\mathbf{v}^2}{2}. \quad (\text{A.83})$$

Natomiast rozwijając  $\epsilon_{\mathbf{p}-m\mathbf{v}}$  w szereg Taylora względem  $\mathbf{v}$ , wokół  $\mathbf{p}$  z liniową dokładnością otrzymujemy

$$\epsilon'_{\mathbf{p}-m\mathbf{v}} = \epsilon'_{\mathbf{p}} - \mathbf{v}_F(\mathbf{p}) \cdot m\mathbf{v} = \epsilon'_{\mathbf{p}} - \frac{m}{m^*} \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{A.84})$$

Zależności (A.83 i A.84) z dokładnością liniową względem  $\mathbf{v}$  dają ostatecznie

$$\epsilon'_{\mathbf{p}} = \epsilon_{\mathbf{p}} + \frac{m - m^*}{m^*} \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}. \quad (\text{A.85})$$

Z punktu widzenia poruszającego się układu wygląda jakby powierzchnia Fermiego była wycentrowana w  $\mathbf{p} = -m\mathbf{v}$ . Stąd można zapisać

$$n'_{\mathbf{p}} = n_{\mathbf{p}+m\mathbf{v}}^0 \approx n_{\mathbf{p}}^0 + m\mathbf{v} \cdot \frac{\partial n_{\mathbf{p}}^0}{\partial \mathbf{p}}, \quad (\text{A.86})$$

gdzie górny indeks 0 oznacza układ laboratoryjny.

Dodatkowo mamy, iż

$$\frac{\partial n_{\mathbf{p}'}}{\partial \mathbf{p}'} = \frac{\partial n_{\mathbf{p}'}^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}'}} \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{p}'}}{\partial \mathbf{p}'} = \frac{\partial n_{\mathbf{p}'}^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}'}} \mathbf{v}_F(\mathbf{p}'). \quad (\text{A.87})$$

Stąd

$$\begin{aligned} \epsilon'_{\mathbf{p}} &= \epsilon_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') \delta n(\mathbf{p}') = \epsilon_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (n'_{\mathbf{p}'} - n_{\mathbf{p}'}^0) = \\ &= \epsilon_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (m\mathbf{v} \cdot \frac{\partial n_{\mathbf{p}'}^0}{\partial \mathbf{p}'}) = \epsilon_{\mathbf{p}} + \sum_{\mathbf{p}'} f(\mathbf{p}, \mathbf{p}') (m\mathbf{v} \cdot \frac{\partial n_{\mathbf{p}'}^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{p}'}} \mathbf{v}_F(\mathbf{p}')) \approx \\ &\approx \epsilon_{\mathbf{p}} - \frac{F_0}{3} \frac{m}{m^*} \mathbf{p} \cdot \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (\text{A.88})$$



Porównując zależności (A.85) i (A.88) otrzymujemy zależność na renormalizację masy efektywnej

$$\frac{m}{m^*} = 1 + \frac{F_0}{3}. \quad (\text{A.89})$$

## A.2 Ciepło właściwe

Zdefiniujmy entropię kwazicząstek tak, jak dla gazu nieoddziałujących cząstek (fundamentalne założenie Landaua na poziomie statystycznym)

$$S = -\frac{k_B}{V} \sum_{v\sigma} [f_\sigma(\mathbf{p}) \ln f_\sigma(\mathbf{p}) + (1 - f_\sigma(\mathbf{p})) \ln(1 - f_\sigma(\mathbf{p}))], \quad (\text{A.90})$$

gdzie  $f_\sigma(\mathbf{p})$  jest rozkładem Fermiego-Diraca

$$f_\sigma(\mathbf{p}) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu}{k_B T}\right)}, \quad (\text{A.91})$$

a  $\epsilon_\sigma(\mathbf{p})$  energią wzbudzenia kwazicząstki. Różniczka z entropii wynosi natomiast

$$\delta S \approx \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}\sigma} \frac{\partial f_\sigma(\mathbf{p})}{\partial \epsilon_\sigma(\mathbf{p})} (\epsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu)^2 \frac{\delta T}{T^2}. \quad (\text{A.92})$$

Zamieniając sumę po pędach na całkę otrzymujemy

$$\begin{aligned} \delta S &= -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3\mathbf{p} \frac{\partial f_\sigma(\mathbf{p})}{\partial \epsilon_\sigma(\mathbf{p})} (\epsilon_\sigma(\mathbf{p}) - \mu)^2 \frac{\delta T}{T^2} = \\ &= -\frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int p^2 \frac{dp}{d\epsilon} 4\pi d\epsilon \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left[ \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\epsilon - \mu}{k_B T}\right)} \right] (\epsilon - \mu)^2 \frac{\delta T}{T^2} = \\ &= -k_B^2 \frac{dn}{d\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{1}{1 + e^x} \right) x^2 \delta T. \end{aligned} \quad (\text{A.93})$$

Stąd możemy wyznaczyć wiodący rząd przyczynku do entropii kwazicząstek w niskich temperaturach

$$S = \frac{\pi^2}{3} \frac{dn}{d\epsilon} k_B^2 T. \quad (\text{A.94})$$

Stąd ciepło właściwe wynosi

$$C_V = T \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_V = \frac{\pi^2}{3} \frac{dn}{d\epsilon} k_B^2 T = \frac{m^* p_F}{3\hbar^3} k_B^2 T = \frac{m^*}{m} C_V^0, \quad (\text{A.95})$$

gdzie  $C_V^0$  jest ciepłem właściwym dla gazu swobodnego.

W niniejszej pracy nie rozpatrujemy wzbudzeń kolektywnych (dźwięków, fluktuacji spinowych). Nie zostały więc one też omówione tutaj w ramach teorii Landaua.

## B Kombinatoryczne wyprowadzenie współczynników Gutzwillera

Sklassyfikujmy konfiguracje spinowe poprzez liczbę podwójnych obsadzeń  $D$  [14]. Wtedy liczba różnych konfiguracji spinowych dla zadanych  $L, N_\uparrow, N_\downarrow$  wynosi

$$N_D(L, N_\uparrow, N_\downarrow) = \frac{L!}{(N_\uparrow - D)!(N_\downarrow - D)!D!(L - N_\uparrow - N_\downarrow + D)!}, \quad (\text{B.96})$$

a prawdopodobieństwo otrzymania konfiguracji spinów  $\sigma$

$$P(L, N_\sigma) = n_\sigma^{N_\sigma} (1 - n_\sigma)^{L - N_\sigma}. \quad (\text{B.97})$$

Korzystając z powyższych wzorów i postaci funkcji falowej jak w (4.22) możemy policzyć

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_D g^{2D} N_D(L, N_\uparrow, N_\downarrow) P(L, N_\uparrow) P(L, N_\downarrow), \quad (\text{B.98})$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | \sum_{ij} t_{ij} c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} | \psi \rangle = & \sum_D g^{2D} [N_D(L - 2, N_\uparrow - 1, N_\downarrow) + g^2 N_D(L - 2, N_\uparrow - 1, N_\downarrow - 2) + \\ & + 2g N_D(L - 2, N_\uparrow - 1, N_\downarrow - 1)] P(L - 2, N_\uparrow - 1) P(L, N_\downarrow) \bar{\epsilon}_\uparrow, \end{aligned} \quad (\text{B.99})$$

$$\langle \psi | \sum_i n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} | \psi \rangle = L \sum_D g^{2D+2} N_D(L - 1, N_\uparrow - 1, N_\downarrow - 1) P(L, N_\uparrow) P(L, N_\downarrow). \quad (\text{B.100})$$

Wyrażenia dla cząstek ze spinem w dół we wzorze (B.99) można otrzymać poprzez zamienienie spinów w górę na spin w dół a spinów w dół na spiny w górę. Powyższe wzory są otrzymane w ramach następującego rozważania. Weźmy sieć składającą się z  $L$  punktów i wyszczególnijmy dwa z nich pomiędzy którymi następuje przeskok cząstki o spinie w górę, tak że liczba podwójnych obsadzeń w pozostałych punktach wynosi  $D$ . Liczba konfiguracji  $N_D$  zależy od liczby spinów na tych dwóch wyszczególnionych miejscach. Korzystając z rys. 9 możemy zanalizować pierwszy proces (a), w którym tylko jeden spin do góry jest zaangażowany. Stąd liczba konfiguracji na pozostałych punktach sieci wynosi  $N_D(L - 2, N_\uparrow - 1, N_\downarrow)$ . W drugim rozważanym procesie przeskoku z rys. 9 (a) jest jeden spin do góry i dwa w dół. W tym przypadku liczba różnych konfiguracji wynosi odpowiednio  $N_D(L - 2, N_\uparrow - 1, N_\downarrow - 2)$ . Analogicznie definiujemy liczbę różnych konfiguracji dla pierwszego i drugiego procesu przeskoku z rys. 9 (b):  $N_D(L - 2, N_\uparrow - 1, N_\downarrow - 1)$ . Ponadto w pierwszym procesie nie zmienia się całkowita liczba podwójnych obsadzeń  $D$  w początkowym i końcowym stanie, dając czynnik  $g^{2D}$ . W drugim przypadku początkowa i końcowa ilość podwójnych obsadzeń wynosi  $D + 1$ , stąd otrzymujemy czynnik  $g^{2D+2}$ . W ostatnim procesie analogiczne rozważanie dają czynnik  $g^{2D+1}$ . Natomiast prawdopodobieństwo znalezienia cząstki o spinie w górę na tych dwóch wybranych punktach sieci jest równe znalezieniu  $N_\uparrow - 1$  spinów w górę w pozostałych

$L-2$  punktach sieci:  $P(L-2, N_{\uparrow}-1)$ . Energia stanu podstawowego w podejściu Gutzwillera jest zdefiniowana jako

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\langle \psi | \sum_{ij} \sum_{\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} + \frac{\langle \psi | U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (\text{B.101})$$

którą można zapisać w następującej postaci

$$\frac{Eg}{L} = q_{\uparrow}(d, n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) \bar{\epsilon}_{\uparrow} + q_{\downarrow}(d, n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) \bar{\epsilon}_{\downarrow} + U d^2. \quad (\text{B.102})$$

Osiągając limit termodynamiczny, czyli  $L, N_{\uparrow}, N_{\downarrow} \rightarrow \infty$  można przybliżyć sumy w (B.98, B.99, B.100) przez największe wyrazy, otrzymujemy relację wiążącą  $g$  z  $d = D/L$  [27, 43]

$$g^2 = \frac{d(1 - n_{\uparrow} - n_{\downarrow} + d)}{(n_{\uparrow} - d)(n_{\downarrow} - d)}, \quad (\text{B.103})$$

i postać współczynników normalizujących energię dla cząstek o spinie w dół i w górę (po wyeliminowaniu współczynnika  $g$ )

$$q_{\sigma} = \frac{\{[(n_{\sigma} - d^2)(1 - n_{\sigma} - n_{\bar{\sigma}} + d^2)]^{\frac{1}{2}} + [(n_{\bar{\sigma}} - d^2)d^2]^{\frac{1}{2}}\}^2}{n_{\sigma}(1 - n_{\sigma})}. \quad (\text{B.104})$$

## C Metody Numeryczne

Do rozwiązywania nieliniowych układów równań została użyta biblioteka GSL na licencji gnu do języka programowania C++. Obliczenia zostały wykonane z dokładnością  $10^{-7}$ .

## Literatura

- [1] J. Jędrak, J. Kaczmarczyk, J. Spałek, arXiv:1008.0021v1 [cond-mat.str-el].
- [2] J. Wilks, D.S. Betts, *An introduction to liquid helium*, Oxford: Caledron Press (1987).
- [3] J. Spałek, *Postępy Fizyki* **57**, 5 (2006).
- [4] Zijun Yan, *Eur. J. Phys* **21**, 625-631 (2000).
- [5] J.C. Wheatley, *Experimental properties of superfluid  $^3\text{He}$* , *Rev. Mod. Phys.* **47**, 415-470 (1975).
- [6] D.S. Greywall, *Phys. Rev. B.* **37**, 5 (1983).
- [7] D.S. Greywall, *Phys. Rev. B.* **33**, 11 (1986).
- [8] I.Ya. Pomeranczuk, *ŽETF* **20**, 919 (1950);
- [9] H.A. Mook, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 22 (1985).
- [10] J. Spałek, *Correlated fermions: a new paradigm in physics on the example of solid-state physics* *Eur. J. Phys.* **21**, 511-534 (2006).
- [11] J.L. Baum, D.F. Brewer, J.G. Daunt, D.O. Edwards, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 3 (1959).
- [12] S. Wieggers, P. Wolf and L. Puech, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2895–2898 (1991).
- [13] J. Spałek, W. Wójcik, *Magnetic Properties of Almost Localized Fermions: Application to liquid  $^3\text{He}$* , unpublished notes.
- [14] D. Vollhardt, *Normal helium 3 - almost localized Fermi liquid*, *Rev. Mod. Phys.* **56**, 1 (1984).
- [15] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*. Harcourt, Inc 1976, roz. **4,5,10**
- [16] A.J. Leggett, *Theoretical description of the new phases of liquid  $^3\text{He}$* , *Rev. Mod. Phys.* **47**, 331 (1975).
- [17] J.B. Ketterson, S.N. Song, *Superconductivity*, Cambridge University Press 1999, roz. **24**.
- [18] L.D. Landau, *Sov. Phys. JETP* **8**, 70 (1959).
- [19] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **276**, 238 (1963).
- [20] J. Hubbard, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **281**, 401 (1964).
- [21] J. Jędrak and J. Spałek, *Phys. Rev. B* **83**, 104512 (2011).

- [22] J. Jędrak and J. Spałek, Phys. Rev. B **81**, 073108 (2010).
- [23] J. Jędrak, Rozprawa doktorska 'Real-space pairing in an extended t-J model', Uniwersytet Jagielloński, Kraków, 2011 - niepublikowane.
- [24] M.M. Mańska, M. Mierzejewski, J. Kaczmarczyk, J. Spałek Phys. Rev. B, **82**, 054509 (2010).
- [25] J. Kaczmarczyk, Rozprawa doktorska 'Unconventional superconductivity in correlated fermions systems', Uniwersytet Jagielloński, Kraków, 2011 - niepublikowane.
- [26] R. Dobbs, *Helium Three*, Oxford Science Publication 2000, roz. **3-5**.
- [27] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).
- [28] N.F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London 1990.
- [29] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*. World Scientific Ltd. 1999, roz. **4**.
- [30] J. Spałek, A. Datta, J.M. Honig, Phys. Rev. Lett. **59**, 728 (1987).
- [31] J. Spałek, M. Kokowski, J.M. Honig, Phys. Rev. B, **39**, 4175 (1989).
- [32] J. Spałek, *Fermi Liquid Behavior and the Metal-Insulator Transition of Almost Localized Electrons*. J. Solid State Chemistry, **88**, 70-93 (1990).
- [33] W.F. Brinkman, T.M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 4302 (1970).
- [34] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, Inc 1996, roz. **1-2**.
- [35] H. Godfrin, R.E. Rapp, Adv. Phys. **44**, 113 (1995).
- [36] A. Benlagra, C. Pépin, Phys. Rev. Lett. **100**, 176401 (2008).
- [37] A. Benlagra, C. Pépin, Phys. Rev. B **79**, 045112 (2009).
- [38] G. Misguich, B. Bernu, C. Lhuillier, C Waldtmann, Phys. Rev. Lett. **81**, 1098 (1998).
- [39] T. Momoi, H. Sakamoto, K. Kubo, Phys. Rev. B **59**, 949 (1999).
- [40] A. Casey, H. Patel, J. Nyékie, B.P. Cowan, J. Saunders, Phys. Rev. Lett. **90**, 115301 (2003);
- [41] H. Nema, A. Yamaguchi, T. Hayakawa, H. Ishimoto, Phys. Rev. Lett. **102**, 075301 (2009);
- [42] M. Neumann, A.J. Casey, L.V. Levitin, B. Cowan, J. Saunders, J. Low. Temp. Phys. **158**, 207-212 (2010).

- 
- [43] T. Ogawa, K. Kanda, T. Matsubara, *Prog. Theor. Phys.* **53**, 614 (1975).
- [44] J. Spałek, *Phys. Rev. B*, **37**, 533–536 (1988);
- [45] J. Spałek, *J. Phys.: Cond. Mat.* **11**, 455 (2008);
- [46] A. Singha, M. Gibertini, B. Karmakar, S. Yuan, M. Polini, G. Vignale, M. I. Katsnelson, A. Pinczuk, L. N. Pfeiffer, K. W. West, V. Pellegrini *Science*, **332**, 1176 (2011);