



Природно-математички факултет
Универзитет у Новом Саду



Хацугаи–Кохмотов модел јакo корелисаних електрона

- мастер рад -

Ментор: др Милан Пантић

Кандидат: Бојан Обрадовић

Нови Сад, 2022

Садржај

Увод	5
1 Моделни хамилтонијан електронског система	7
1.1 Хабардов модел	7
1.2 Недостаци Хабардовог модела	11
1.3 Фазни прелаз метал-изолатор у Хабардовом моделу	13
2 Модел јако корелисаног система електрона	20
2.1 Хамилтонијан ХК модела	20
2.2 Енергије и стања јако корелисаних електрона	23
2.2.1 Метод Гринових функција и енергетска структура	24
2.2.2 Основно стање ХК модела	30
2.3 ХК модел и симетрија електрон-шупљина	32
2.3.1 Термодинамичке карактеристике ХК модела	34
3 Термодинамичка својства ХК модела	36
3.1 Термодинамичке величине	36
3.2 Фактор попуњености и хемијски потенцијал ХК модела	39
3.3 Резултати термодинамичких величина	42
4 Јако корелисани систем суперпроводника	48
4.1 Основне идеје и неки резултати БЦС теорије	48
4.1.1 Неки важни резултати БЦС теорије	50
4.2 Основне експерименталне карактеристике	52
4.3 ХК модел и високотемпературски суперпроводници	53
4.3.1 Енергија везаног стања електронских парова ХК модела	54
4.3.2 Функција основног стања ХК модела и једначина енергетског процепа	57
4.3.3 Критична температура ХК модела суперпроводника	65
4.3.4 Екситациони спектар ХК модела суперпроводника	69
Закључак	71
А Брилуенова зона и прелазак са суме на интеграл	73
В Основне особине суперпроводника у БЦС теорији	76
В.1 Енергија везе Куперовог пара	76
В.2 Функција основног стања БЦС суперпроводника	79

В.3 Геп једначина и критична температура у БЦС теорији	82
С Ојлер-Маскеронијев интегрални идентитет	84
Литература	86

Увод

Кондензовани систем, као скуп веома великог броја честица, чије се међусобно дејство не може занемарити, већ дуги низ година представља предмет проучавања. Наиме, у питању су тела у *чврстом* и тела у *течном* агрегатном стању. Тела у течном стању поседују извесну покретљивост много мању у поређењу са гасовима, али много већу у поређењу са телима у чврстом стању [1]. Чврсто стање тела одликује се снажним интеракцијама, много јачим у поређењу са оним у течностима, тако да се саставни делови таквих система не могу слободно кретати. Чврста тела можемо груписати у две велике целин, а то су *кристали* и *аморфна тела*. У кристалима, на основу бројних експеримената спроведених методама дифракције зрачења високих фреквенција, као што је ренгенско (X) зрачење, на оваквим телима, на основу добијене дифракционе слике, потврђено је присуство правилног геометријског распореда саставних елемената (атома, молекула, или њихових група) у простору [1, 2]. Овакав геометријски правилан распоред назива се *кристална решетка*. За разлику од кристала, код аморфних чврстих тела није примећено овакво уређење стање. Кристалну структуру поседују многи метали, у којима, као што је познато, могу да се слободно крећу *електрони*, који учествују, између осталог, у провођењу електричне струје и између којих, такође, постоји међусобна интеракција.

У овом раду, изложено је детаљно разматрање једне посебне класе кондензованих система у кристалном чврстом стању, наиме, у питању су **системи јако корелисаних електрона** (или **јако корелисани системи електрона**). Под *корелацијом* честица подразумевамо појаву да једна честица има утисак на понашање друге честице. Дакле, у системима јако корелисаних електрона постоји снажно међудејство међу честицама. У случају да су те честице електрони, јасно, постоји интеракција путем електричног поља које сваки од електрона ствара око себе као резултат поседовања наелектрисања ($q = e = -1.6 \cdot 10^{-19}C$ - елементарно наелектрисање), услед којег се електрони, наравно, међусобно одбијају. Међутим, испоставиће се да јачина ове интеракције, као ни њен домет, често није довољан како би се објасниле одређене појаве, односно ефекти који су експериментално потврђени у оваквим системима. Стога ће бити искоришћена једна од особина међуелектронске интеракције, а то је њихово **далекодометно** међудејство.

У овом раду ћемо, коришћењем погодног теоријског модела, детаљно описати две најпознатије појаве, карактеристиче за овакве системе. Прва од њих, којом ћемо се бавити, је **фазни прелаз метал-изолатор** који се дешава у случају полупопуњене валентне

енергетске зоне¹. Према зонској теорији, систем би у том случају требао да се понаша као метал (проводник), али се испоставља да при довољно јаком међусобном одбијању систем не задржава проводно стање, већ прелази у изолаторску фазу. Изолаторско стање у које систем доспева као резултат промене јачине међусобне интеракције електрона, носи назив **Мотов (Mott) изолатор** [3–5]. Друга појава коју ћемо детаљно размотрити је **појава специфичне суперпроводне фазе**, односно **високотемпературска суперпроводност**, коју стандардна (БЦС) теорија није могла објаснити [6]. Показаћемо, наиме, да се одређене специфичности у односу на конвенционалне суперпроводнике појављују управо због јаке корелисаности која постоји међу електронима у систему. Између осталог, биће такође размотрене и неке термодинамичке карактеристике оваквих система.

Да бисмо приступили теоријској анализи неког система, потребно је, пре свега, да се изабере погодан² теоријски модел. За почетак, биће размотрен *Хабардов модел* као један од првих и најједноставнијих. Међутим, видећемо да ћемо, коришћењем овог модела, наићи на разне компликације, због којих ће бити неопходно увести одређене апроксимације. Из тог разлога, биће потребно *модификовати* међуелектронску интеракцију, на тај начин да уједно урачуна и јаку (далекодометну) корелисаност која постоји међу електронима и максимално поједностави даљу анализу. Показаћемо да нас увођење једног оваквог типа интеракције може одвести до правилног објашњења појаве фазног прелаза метал-Мотов изолатор, као и фазног прелаза кроз који пролазе високотемпературски суперпроводници.

¹За више детаља о зонској теорији, погледати [1].

²Под *погодним* подразумевамо такав модел који ће нам на што је могуће једноставнији, али и веродостојнији начин представити систем који посматрамо.

Глава 1

Моделни хамилтонијан електронског система

Приликом проучавања кондензованих система, као што је у уводном делу речено, неопходно је приступити коришћењем одговарајућег теоријског модела, у којем би требала да се огледају сва важна својства која један кондензовани систем поседује. Први теоријски модел који ћемо размотрити је уједно и најпознатији теоријски модел коришћен за описивање оваквих система, а у питању је *Хабардов модел* [2,7]. Конкретно, искористићемо овај модел за анализу фазног прелаза метал-изолатор.

Међутим, као што ћемо видети, ову анализу неће бити могуће спровести помоћу Хабардовог модела, услед специфичне природе међуелектронске интеракције. Наиме, коришћењем Хабардовог модела се можемо уверити да се са порастом одбојне интеракције међу електронима може десити фазни прелаз из металног у изолаторско стање, али да ће овај фазни прелаз бити описан на исправан начин само у одређеним апроксимацијама, које, ипак, у реалним системима не морају бити унапред испуњене.

У том циљу биће неопходно са Хабардовог модела прећи на нешто другачији модел, чијим ће коришћењем бити могуће спровести анализу без потребе за увођењем апроксимација приликом његовог решавања. Видећемо да ће се, на тај начин, добити очекиван резултат, веома сличан резултату Хабардовог модела, што ће уједно и оправдати његово коришћење.

Погледајмо најпре Хабардов моделни хамилтонијан и уверимо се да се модел не може користити за потребе анализе фазног прелаза метал-изолатор, као ни прелаза у суперпроводно стање.

1.1 Хабардов модел

Као што је познато, Хабардов модел је први и најједноставнији теоријски модел кондензованог система који разматра кретање међусобно интерагујућих електрона у кристалној решетки. Овај модел, дакле, урачунава неопходне доприносе енергији који потичу од ових процеса.

У основи имамо, дакле, два процеса: кретање електрона кроз решетку и њихову (одбојну¹) електростатичку интеракцију. Први допринос се изражава преко тзв. *интеграла*

¹Једини случај у ком је могуће да се електрони међусобно привлаче је посредством неке друге

преласка (у ознаци T_{ij}), који, дакле, потиче од тунелирања електрона између i -тог и j -тог чвора. Други допринос електронској енергији се састоји у Кулоновој одбојној интеракцији и карактерише се параметром $U(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$, односно интеракцијом Кулоновог одбијања електрона на i -том и j -том положају, при чему су са $\mathbf{r}_i$ и $\mathbf{r}_j$ означени вектори положаја i -тог и j -тог електрона, респективно. Дакле, на основу реченог, за хамилтонијан (оператор енергије) система (у ознаци $\hat{H}$) можемо писати израз облика:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad (1.1)$$

где смо са $\hat{H}_0$ означили кинетички део укупног хамилтонијана, односно члан који у себи садржи поменути интеграл T_{ij} , док $\hat{H}_1$ урачунава међуелектронску (одбојну) интеракцију, односно параметар U , за који, дакле, важи $U > 0$. Даље, Хабардов модел претпоставља један атом по чвору и једну орбиталу по атому. Другим речима, на једном чвору решетке могу да се нађу највише по два електрона супротно оријентисаних спинова. Размотримо сада сваки од чланова у (1.1) понаособ.

Приви члан ($\hat{H}_0$), као што смо рекли, описује енергију коју поседује електрон захваљујући процесу преласка (тунеловања) са чвора на чвор. Међутим, треба имати у виду да се електрон у кондензованом систему, чак и у одсуству интеракције са другим електронима, ипак налази у интеракцији са позитивно наелектрисаним јонима решетке. С обзиром на периодичну структуру кристала, овај потенцијал такође мора имати периодичну структуру. Наиме, посматрајмо атом (јон) на чвору $\mathbf{R}_i$ и замислимо да се на неком растојању од њега налази електрон. Потенцијал који овај електрон осети, а који потиче од Кулонове привлачне интеракције са овим јоном, даје управо поменути енергијски допринос. Означимо овај допринос са $V_{\mathbf{R}_i}^{(0)}$.

Нека у систему (решетки) има N_e електрона. Сваког од њих ћемо означити индексом α , односно $\alpha = 1, 2, \dots, N_e$. Потенцијал решетке који осећа електрон на положају $\mathbf{r}_\alpha$ (у ознаци $V^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha)$) потиче од свих (N) јона решетке:

$$V^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha) = \sum_{i=1}^N V^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_i). \quad (1.2)$$

Енергија (једног) електрона, без урачунавања енергије интеракције са другим електронима (у ознаци $\mathcal{H}_{0(\alpha)}$), према томе, има облик:

$$\mathcal{H}_{0(\alpha)} = \frac{\mathbf{p}_\alpha^2}{2m_\alpha} + V^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha), \quad (1.3)$$

где је са $\mathbf{p}_\alpha$ означен импулс електрона α , док је $m_\alpha = m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{kg}$, односно маса (једног) електрона. Укупну енергију система добијамо сумирањем израза (1.3) по свим електронима (од 1 до N_e):

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\alpha=1}^{N_e} \mathcal{H}_{0(\alpha)} = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^{N_e} \mathbf{p}_\alpha^2 + \sum_{\alpha=1}^{N_e} V^{(0)}(\mathbf{r}_\alpha). \quad (1.4)$$

интеракције, која може да надвлада електростатичко (Кулоново) одбијање. Пример за то је *електрон-фонон интеракција* која доводи до стварања Куперових електронских парова [8]. У наставку рада нећемо урачунавати овакав тип интеракције и узећемо да се електрони међусобно одбијају.

Уместо налажења укупне енергије, у наставку ћемо приступити на другачији начин.

Наиме, приликом анализе кондензованих система, често се показује погодним коришћење тзв. *приступа јаке везе*. У овом приступу, подразумевамо да су електрони претежно сконцентрисани у околини атома (чвора) решетке. Функцију стања електрона α у s -орбитали на растојању $|\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_i|$ од i -тог чвора ћемо означити са $d_s(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_i)$. Ове функције су познате као *Ванијерове (Wannier) функције* [2, 7]. Интеграл преласка електрона између i -тог и j -тог чвора управо се дефинише помоћу Ванијерових функција стања и означава са (као у [2])

$$T_{ij} = \int d_s^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left(\frac{\mathbf{p}^2(\mathbf{r})}{2m} + V^{(0)}(\mathbf{r}) \right) d_s(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d^3\mathbf{r}. \quad (1.5)$$

Даље, што се тиче интеракције међу електронима, у Хабардовом моделу се подразумева да важи тзв. *Хабардова апроксимација*, под којом се подразумева да Кулонова интеракција постоји само међу електронима са истог чвора². Даље, узима се да интерагујући електрони поседују међусобно оријентисане спинове, што је, с обзиром на претходно поменућу чињеницу о једној орбитали по чвору, у складу са Паулијевим принципом забране [9]. Параметар Кулонове интеракције ћемо, као у [2], означити са $\tilde{U}$ и дефинисати као

$$\tilde{U}(\mathbf{R}_i) = \int \int |d_s(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_i)|^2 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta|} \right) |d_s(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{R}_i)|^2 d^3\mathbf{r}_\alpha d^3\mathbf{r}_\beta, \quad (1.6)$$

где су $\mathbf{r}_{\alpha,\beta}$ ($\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N_e$), вектори положаја електрона³, док се интеграција врши по целој запремини кристала. Као што се из (1.5) јасно види, важи да је $\tilde{U}(\mathbf{R}_i) > 0$. С обзиром да је $\tilde{U}(\mathbf{R}_i)$ по својој природи Кулонова интеракција, на конкретном чвору у оквиру орбитале атома са истог чвора, узима се иста вредност на сваком чвору⁴, односно $\tilde{U}(\mathbf{R}_i) \rightarrow \tilde{U} \equiv \text{const}$. Колико тачно износи његова вредност, зависи од случаја до случаја, односно од конкретне посматране врсте атома, односно од конкретне орбитале. Испоставиће се, међутим, да ћемо за испитивање фазног прелаза морати да посматрамо међуелектронску интеракцију на сасвим другачији начин (више о томе у Глави 2).

Погодним за даљу анализу, показује се коришћење репрезентације друге квантизације [10]. Прелазак са претходно описаног начина представљања енергије на репрезентацију друге квантизације се врши, као што је познато [10], коришћењем тзв. *оператора креације*, односно *оператора анихилације*. У нашем случају, реч је о операторима који створе/униште *електрон* са одређеном оријентацијом спина у одређеној тачки простора. С обзиром на коришћени приступ јаке везе, узима се да се електрони могу наћи само на чворовима решетке ($(\mathbf{r}_\alpha \rightarrow \mathbf{R}_i)$), односно у орбиталама. Оператор креације $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ делује на вакуумско

²Оправданост коришћења ове апроксимације треба тражити у чињеници да су измерене вредности растојања између суседних чворова у решетки много већа од међуелектронског растојања унутар једне (појединачне) орбитале [2].

³Не морају да се поклапају са чворовима решетке $\mathbf{R}_i$ ($i = 1, 2, \dots, N$).

⁴Треба, ипак, бити опрезан. Иако се, према моделу, електрони могу наћи на истом чвору, док сваки чвор представља тачку, познато је да у квантним системима важи Хајзенбергов принцип неодређености [9, 10], према којем увек постоји нека коначна вредност неодређености положаја положаја (координате) честице (електрона, у нашем случају) $\{\Delta x_\alpha, \Delta y_\alpha, \Delta z_\alpha\}$. Према томе, електрони се заправо налазе на коначном међусобном растојању, карактеристичном за орбиталу конкретног атома на који се Хабардов модел примењује.

стање, односно стање без присутне честице (електрона) (у ознаци $|0\rangle$) и ствара електрон на положају $\mathbf{R}_i$ са спином σ (са одговарајућом ознаком стања $|1_{i\sigma}\rangle$), док оператор анихилације $\hat{c}_{i\sigma}$ делује на стање у ком већ постоји електрон на положају $\mathbf{R}_i$ са спином σ и од тог стања ствара вакуумско стање.

Деловање оператора креације (у ознаци $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$) и анихилације (у ознаци $\hat{c}_{i\sigma}$) електрона се, дакле, огледа у следећем:

$$\hat{c}_{i\sigma}^\dagger|0\rangle = |1_{i\sigma}\rangle, \quad \hat{c}_{i\sigma}|1_{i\sigma}\rangle = |0\rangle. \quad (1.7)$$

Дакле, Хабардов модел у репрезентацији друге квантизације има облик:

$$\hat{H} = \sum_{i,j=1}^N \sum_{\sigma=1}^2 T_{ij} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + \frac{\tilde{U}}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma=1}^2 \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}, \quad (1.8)$$

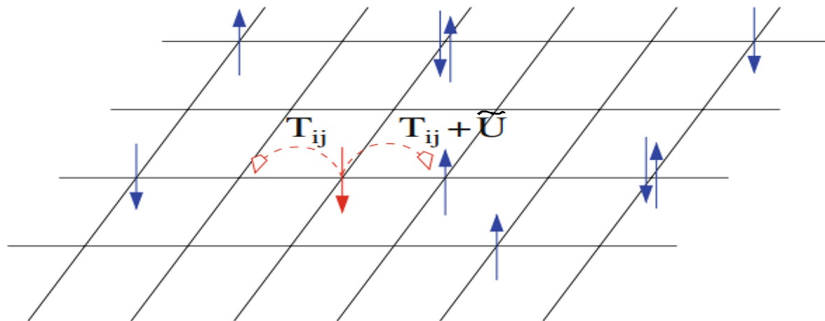
где $h.c.$ означава узастопно деловање анихилационог и креационог оператора, адјунговано првом члану (другим речима, $h.c. \equiv \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$).

Следећа апроксимација, која се често користи и која поједностављује даљи рачун, тиче се интеграла прескакања T_{ij} . Наиме, често се узима да се прелазак електрона са чвора на чвор, односно са атома на атом, одвија само међу најближим суседима суседима чворова. Дакле, једна од сума у првом члану иде по свим чворовима (од 1 до N), док друга сумира по чворовима најближим за сваки од N чворова решетке (за сваки од чворова), тзв. *координациони број* [11] износи $2D$, где је D димензионалност решетке. При томе, узима се да вредност T_{ij} не зависи од конкретног пара чворова i - j и износи $-t$, где је ($t \equiv const.$). Сума у првом члану се може скраћено записати као [2]:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + \frac{\tilde{U}}{2} \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}, \quad (1.9)$$

где $\langle i,j \rangle$ означава да се сумирање врши по најближим суседним чворовима⁵. Добијени израз (1.9) представља Хабардов модел у форми у којој се најчешће користи приликом изучавања кондензованих система.

На основу до сада реченог, систем који описује Хабардов модел можемо илустровати као на Сл. 1.



Сл. 1: Систем интерагујућих електрона, описан Хабардовим моделом

⁵У питању је скраћена ознака за двоструко сумирање $\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{2D}$.

Ипак, као што смо на почетку Главе рекли, може се показати да овај модел није погодан за егзактно описивање фазног прелаза. Зашто је ово случај, показаћемо у наставку рада.

1.2 Недостаци Хабардовог модела

Као што смо рекли, потребно је испитати могућност добијања информације о енергетској структури. У том циљу, полазимо од хамилтонијана (1.9). Размотримо, поступно, сваки члан посебно. Можемо видети да је први члан недијагоналан ($i \neq j$, $\forall i$), док други то јесте [10]. Да бисмо нашли могуће енергије електрона, потрено је извршити дијагонализацију *целог* хамилтонијана, односно добити облик у ком су сви чланови у хамилтонијану дијагонални. Поступак дијагонализације се веома ефикасно може спровести помоћу Фуријеове трансформације [2, 7]. Наиме, искористићемо Фурије-ликове креационог и анихилационог оператора:

$$\hat{c}_{i\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}, \quad \hat{c}_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i}. \quad (1.10)$$

Након једноставне замене релација (1.10) у први члан (1.9), налазимо хамилтонијан у $\mathbf{k}$ -простору у облику:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left\{ \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} \right) + \right. \\ &\quad \left. \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{q}\sigma} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} \right) \right\} \\ &= -\frac{t}{N} \sum_i \sum_{\vec{\delta}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i + \vec{\delta})} + \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i + \vec{\delta})} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} \right), \end{aligned} \quad (1.11)$$

при чему смо у последњем реду узели да се прелазак електрона врши само између суседних чворова, због чега смо векторе положаја чворова $\mathbf{R}_i$ и $\mathbf{R}_j$ "повезали" вектором њиховог релативног положаја $\vec{\delta}$ као: $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_i + \vec{\delta}$. Дакле, вектори $\vec{\delta}$ повезују сваки од чворова решетке са његовим најближим суседним чворовима. Груписањем сума по чворовима на положајима $\vec{\delta}$, добијамо:

$$\hat{H}_0 = -\frac{t}{N} \sum_{\vec{\delta}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \left(\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}\sigma} \left\{ \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \right\} e^{i\mathbf{q}\cdot\vec{\delta}} + \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}\sigma} \left\{ \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i} \right\} e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} \right). \quad (1.12)$$

Коришћењем Кронекерове делта-функције

$$\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}_i}, \quad (1.13)$$

израз (1.12) добија облик:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left\{ -t \sum_{\vec{\delta}} \left(e^{i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}} \right) \right\} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left\{ -2t \sum_{\vec{\delta}} \cos(\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}) \right\} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (1.14)$$

Функција у заградама одговара енергијама које поседују електрони услед својих прелазака на суседне чворове (означене векторима положаја $\vec{\delta}$) у $\mathbf{k}$ -простору, као у [2], је облика:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) := -2t \sum_{\vec{\delta}} \cos(\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}). \quad (1.15)$$

Функције $\varepsilon(\mathbf{k})$ садрже информацију о димензионалности система. Наиме, с обзиром да сума $\sum_{\vec{\delta}}$ иде по најближим суседним чворовима, чији број зависи од димензија посматране решетке⁶, јасно је да постоји зависност од димензионалности система. Дакле, након Фуријеове трансформације, члан $\hat{H}_{(0)}$ Хабардовог модела има облик:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}). \quad (1.16)$$

Видимо, дакле, да је овај члан дијагоналан у $\mathbf{k}$ -простору.

Овом се члану такође додаје и члан са тзв. *хемијским потенцијалом*⁷ (у ознаци μ):

$$\hat{H}_\mu = -\mu \sum_{i, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} = -\mu \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}) = -\mu \hat{N}_e, \quad (1.17)$$

где је $\hat{N}_e$ оператор укупног броја честица (електрона) у систему.

Преласком са директног на $\mathbf{k}$ -простор, лако се показује да и овај члан има дијагоналан облик:

$$\hat{H}_\mu = -\frac{\mu}{N} \sum_{i, \sigma} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{q}, \sigma} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_i} = -\mu \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = -\mu \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}). \quad (1.18)$$

С обзиром да су операторски делови израза (1.16) и (1.18) једнаки⁸, погодно је ове чланове груписати тако да имамо

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_\mu = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}), \quad (1.19)$$

где је

$$\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu. \quad (1.20)$$

Хемијски потенцијал зависи, као што ћемо видети у Глави 3, од односа броја електрона N_e и броја чворова (атома) N у систему, али и од температуре T на којој се посматрани систем налази.

⁶Подсетимо се да број најближих суседа има вредност $2D$ за D -димензионалну хиперкубну решетку [11].

⁷Хемијски потенцијал одговара енергији по јединици честице система [12]. Прецизније речено, у питању је енергија коју је потребно уложити да би се термодинамичком систему додала честица. Конкретно, уколико су те честице електрони у кристалној решетки, за додавање електрона је потребно уложити енергију због међуелектронског одбијања ($\mu > 0$), али, с обзиром да између електрона и јона решетке постоји привлачна интеракција, хемијски потенцијал може достићи и вредности $\mu < 0$. Наиме, свака од честица система поседује енергију услед тунелирања кроз решетку, али и услед интеракције са другим електронима. Додавање/одузимање честица у систему, самим тим, директно утиче на енергију система.

⁸Оба израза садрже оператор броја електрона у стању $\mathbf{k}$ са спином σ , односно $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$.

Физички смисао хемијског потенцијала може да се сагледа и на следећи начин. Наиме, на температури апсолутне нуле, сви електрони попуњавају енергетска стања од најнижег ка највишем, уз обавезно поштовање Паулијевог принципа [9,10]. Са порастом температуре, електрони добијају могућност преласка са чвора на чвор и њихова енергија на тај начин расте. Прави физички смисао "кинетики" електрона, самим тим, има разлика њихове енергије у односу на енергетски ниво хемијског потенцијала, односно $\xi(\mathbf{k}) \equiv \xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Ова вредност износи 0 на нивоу хемијског потенцијала, односно за $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \mu$. На температури апсолутне нуле, електрони попуњавају сва $\mathbf{k}$ -стања за која важи $\varepsilon_{\mathbf{k}} \leq \mu$, односно тада важи $\xi(\mathbf{k}) \leq 0$. На температурама $T > 0K$, дакле, електрони заузимају виша енергијска стања.

Размотримо сада интеракциони члан Хабардовог модела. Поступајући аналогно са кинетичким чланом $\hat{H}_0$, након одговарајућих Фуријеових трансформација (преласка у $\mathbf{k}$ -простор) [2], добијамо

$$\hat{H}_1 = \frac{\tilde{U}}{2N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q}} \sum_{\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}, \sigma} \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q}, -\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}, -\sigma}. \quad (1.21)$$

Дакле, јасно је да овај члан Хабардовог модела није дијагоналан у $\mathbf{k}$ -репрезентацији. Ово је управо чињеница која нам компликује анализу зонске структуре електронских стања.

У наставку ћемо се уверити у саму чињеницу да, коришћењем Хабардовог модела, наилазимо на одређене потешкоће. Наиме, видећемо да је потребно уводити апроксимације, као и да ће сам математички поступак бити веома сложен.

1.3 Фазни прелаз метал-изолатор у Хабардовом моделу

Сада ћемо показати до каквих нас резултата, везаних за фазни прелаз метал-изолатор, доводи Хабардов модел.

Полазимо од хамилтонијана Хабардовог модела у директном (координатном [1]) простору, са урачунатим хемијским потенцијалом:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i, j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + h.c. \right) + \frac{\tilde{U}}{2} \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i, -\sigma} - \mu \sum_{i, \sigma} \hat{n}_{i, \sigma}. \quad (1.22)$$

У следећем кораку, користимо тзв. *метод Гринових функција (скраћено ГФ)* [13]. Као што је познато, метод ГФ је погодан за налажење закона дисперзије, односно енергетских спектра система. У нашем случају, интересују нас енергије које електрон може достићи, као и могућност повезивања добијених резултата са теоријом енергијских зона [2].

Функција чији је облик потребно одредити је, дакле, Гринова функција за (за сада произвољне) операторе $\hat{A} = \hat{A}(\mathbf{r}, \tau)$ и $\hat{B} = \hat{B}(\mathbf{r}', \tau')$, коју дефинишемо изразом⁹ [13–15]

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau, \tau') := \theta(\tau - \tau') \left\langle \left[\hat{A}(\mathbf{r}, \tau), \hat{B}(\mathbf{r}', \tau') \right]_{\eta} \right\rangle \equiv \langle \langle \hat{A}(\mathbf{r}, \tau) | \hat{B}(\mathbf{r}', \tau') \rangle \rangle, \quad (1.23)$$

где су $\mathbf{r}$ и $\mathbf{r}'$ просторне координате у којима делују оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$, респективно, τ и τ' су тренуци времена у којима ови оператори делују, док је η фактор знака за који важи:

⁹У литератури је познато више тзв. *типова* ГФ, тзв. ретардоване, авансоване и каузалне ГФ. Конкретно, у наставку ћемо разматрати ретардовану ГФ, као најчешће коришћену.

$[\hat{A}, \hat{B}]_\eta := \hat{A}\hat{B} + \eta\hat{B}\hat{A}$. Дакле, за $\eta = +1$ имамо антикомутатор, док вредност $\eta = -1$ одговара комутатору¹⁰. Према томе, можемо разликовати и два типа GF према знаку овог фактора - комутаторске GF ($\eta = -1$) и антикомутаторске GF ($\eta = +1$).

Наиме, на основу добијеног конкретног облика GF, тражене вредности енергија електрона представљају, у ствари, вредности енергије за које GF дивергира ка $+\infty$. Због тога нам је потребан конкретан облик GF.

Да бисмо одредили GF, полазимо од једначине кретања, коју добијамо тако што израз (1.23) диференцирамо по τ и помножимо са $i\hbar$ [13, 15]:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau, \tau') = i\hbar \delta(\tau - \tau') Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \theta(\tau - \tau') \left\langle \left[[\hat{A}(\mathbf{r}, \tau), \hat{H}(\tau)], \hat{B}(\mathbf{r}', \tau') \right]_\eta \right\rangle, \quad (1.24)$$

где је уведена ознака $Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ за средњу вредност комутатора/антикомутатора оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$ у истом тренутку времена (тренутак τ)¹¹.

Такође ћемо искористити једну особину GF која важи у случају када оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$ не зависе експлицитно од времена, односно уколико за њих важи $\partial \hat{A} / \partial \tau = 0$ и $\partial \hat{B} / \partial \tau = 0$, може се показати (видети [13, 14] за више детаља) да тада важи $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \tau, \tau') \rightarrow G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau - \tau')$. Дакле, на основу реченог, следи:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau, \tau') \rightarrow G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \tau - \tau'). \quad (1.25)$$

Гринова функција коју ћемо овде користити има облик:

$$G_{ij\sigma}(\tau - \tau') = \langle \langle \hat{c}_{i\sigma}(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle \rangle_{\eta=+1}. \quad (1.26)$$

Надаље ћемо испустити $\eta = +1$ из индекса GF, подразумевајући, при томе, да је у питању антикомутаторска GF. Одговарајућа једначина кретања има облик

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} G_{ij\sigma}(\tau - \tau') = \delta(\tau - \tau') \langle [\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma}^\dagger]_+ \rangle + \langle \langle [\hat{c}_{i\sigma}, \hat{H}] | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \rangle, \quad (1.27)$$

где је $\hat{H}$ хамилтонијан Хабардовог модела (1.22). Неопходне комутаторске и антикомутаторске елементе израза налазимо тривијалним поступком.

Наиме, креациони и анихилациони Ферми-оператор задовољавају познату антикомутациону релацију

$$[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j\sigma}^\dagger]_+ = \delta_{ij} \hat{I}, \quad (1.28)$$

чија средња вредност $\langle \dots \rangle$, узета по Хабардовом хамилтонијану, износи $\delta_{ij} \langle \hat{I} \rangle = \delta_{ij}$.

¹⁰Уобичајено је да се антикомутатор користи у случају да се оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$ односе на фермионе, а комутатор у случају Бозе-оператора. Међутим, у општем случају, вредност η се бира у зависности од случаја, односно како је најпогодније.

¹¹С обзиром да оператори $\hat{A}$ и $\hat{B}$ делују у истом тренутку времена, њихов комутатор/антикомутатор зависи само од координата тачака у којима делују. На пример, уколико су ово Ферми-оператори креације и анихилације електрона на положају $\mathbf{r}_i$ са спином σ , за њихову антикомутациону релацију (у случају деловања у истом тренутку времена) ће важити $[\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j\sigma}]_+ = \delta_{i,j} \hat{I}$.

Затим, за комутатор оператора $\hat{c}_{i\sigma}$ и $\hat{H}$ се директно добија:

$$[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{H}] = -\mu\hat{c}_{i\sigma} - t \sum_m \hat{c}_{m\sigma} + U\hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}, \quad (1.29)$$

тако да једначина кретања (1.27) поприма облик:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} G_{ij\sigma}(\tau - \tau') = \delta(\tau - \tau')\delta_{ij} - \mu G_{ij\sigma}(\tau - \tau') - t \sum_m G_{mj\sigma}(\tau - \tau') + U\Gamma_{ij\sigma}(\tau - \tau'), \quad (1.30)$$

где смо са $\Gamma_{ij\sigma}(\tau - \tau')$ означили "нову", тзв. вишу Гринову функцију

$$\Gamma_{ij\sigma}(\tau - \tau') := \langle\langle (\hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma})(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle, \quad (1.31)$$

чији је облик, дакле, такође неопходно одредити. Наиме, функција $\Gamma_{ij\sigma}(\tau - \tau')$ такође има своју једначину кретања, која гласи:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} \Gamma_{ij\sigma}(\tau - \tau') &= \delta(\tau - \tau')\delta_{ij}\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle + (-\mu + U)\Gamma_{ij\sigma}(\tau - \tau') \\ &\quad - t \sum_l \left\{ \langle\langle \hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{l\sigma}(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle - \langle\langle \hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle\langle \hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{l,-\sigma}(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (1.32)$$

Проблем на који наилазимо је у томе што се овим поступком, као што можемо видети, изнова добијају нове $\Gamma\Phi$, а што би могло да се дешава бесконачно много пута. Другим речима, креира се бесконачан низ нових $\Gamma\Phi$ [13]. Конкретно, у изразу (1.32) фигуришу три нове $\Gamma\Phi$.

Да бисмо поступак одређивања конкретног облика полазне $\Gamma\Phi$, односно $G_{ij\sigma}(\tau - \tau')$, довели до краја, биће неопходно направити апроксимације.

Најједноставније су тзв. *Хабард-I апроксимације*, које нам дају:

$$\langle\langle (\hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma})(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \approx \langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle \langle\langle \hat{c}_{i\sigma} | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \equiv \langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle G_{ij\sigma}(\tau - \tau'), \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle (\hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma})(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle &\approx \langle\hat{c}_{l,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma}\rangle G_{ij\sigma}(\tau - \tau') \\ &\approx \delta_{il} \langle\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,-\sigma}\rangle G_{ij\sigma}(\tau - \tau') \\ &= \delta_{il} \langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle G_{ij\sigma}(\tau - \tau'), \end{aligned} \quad (1.34)$$

$$\begin{aligned} \langle\langle (\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{i,\sigma}\hat{c}_{l,-\sigma})(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle &= -\langle\langle (\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{l,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma})(\tau) | \hat{c}_{j\sigma}^\dagger(\tau') \rangle\rangle \\ &\approx -\delta_{il} \langle\hat{c}_{i,-\sigma}^\dagger\hat{c}_{l,-\sigma}\rangle G_{ij\sigma}(\tau - \tau') \\ &= -\delta_{il} \langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle G_{ij\sigma}(\tau - \tau'). \end{aligned} \quad (1.35)$$

Као што видимо, доприноси у (1.34) и (1.35) у збиру дају нулу, тако да нам остаје само допринос из (1.33).

У следећем кораку, искористићемо тзв. *временску* Фурије-трансформацију ГФ [13]:

$$\langle\langle\hat{c}_{i\sigma}|\hat{c}_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle_E \equiv G_{ij\sigma}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(\tau - \tau') G_{ij\sigma}(\tau - \tau') e^{iE(\tau - \tau')}, \quad (1.36)$$

где смо са $G_{ij\sigma}(E)$ означили $\langle\langle\hat{c}_{i\sigma}|\hat{c}_{j\sigma}^\dagger\rangle\rangle_E$. На основу правила (1.36), једначине кретања (1.30) и (1.32) постају:

$$(E + \mu)G_{ij\sigma}(E) + t \sum_l G_{lj\sigma}(E) - U\Gamma_{ij\sigma}(E) = \delta_{ij}, \quad (1.37)$$

$$(E + \mu - U)\Gamma_{ij\sigma}(E) + t\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle \sum_l G_{lj\sigma}(E) = \delta_{ij}\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle. \quad (1.38)$$

Изражавањем $\Gamma_{ij\sigma}(E)$ из (1.38) и уврштавањем у (1.37), добијамо:

$$(E + \mu)G_{ij\sigma}(E) + t \left\{ 1 + \frac{U\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle}{E + \mu - U} \right\} \sum_l G_{lj\sigma}(E) = \delta_{ij} \left\{ 1 + \frac{U\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle}{E + \mu - U} \right\}. \quad (1.39)$$

У наставку ћемо искористити да средњи број електрона на произвољном (било којем) чвору решетке и спином не зависи од тога који је чвор решетке у питању. Другачије речено, узимамо $\langle\hat{n}_{i\sigma}\rangle \rightarrow \langle\hat{n}_\sigma\rangle$, односно $\langle\hat{n}_{i,-\sigma}\rangle \rightarrow \langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle$.

Затим, извршићемо *просторну* Фурије-трансформацију, користећи правила [13]:

$$G_{ij\sigma}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}\sigma}(E) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad \delta_{ij} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (1.40)$$

чиме добијамо:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{\mathcal{G}_\sigma(E)}{1 - \varepsilon_{\mathbf{k}}\mathcal{G}_\sigma(E)}, \quad \text{где је} \quad \mathcal{G}_\sigma(E) = \frac{1}{E + \mu} + \frac{U\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle}{(E + \mu)(E + \mu - U)}. \quad (1.41)$$

Као што смо раније нагласили, с обзиром да је методом ГФ могуће добити информацију о енергијама екситација у систему, постављањем услова о њеној *дивергенцији*, можемо доћи до тражене дисперзионе релације. На основу израза (1.41), јасно је да ћемо до енергија електрона доћи постављањем следећег услова:

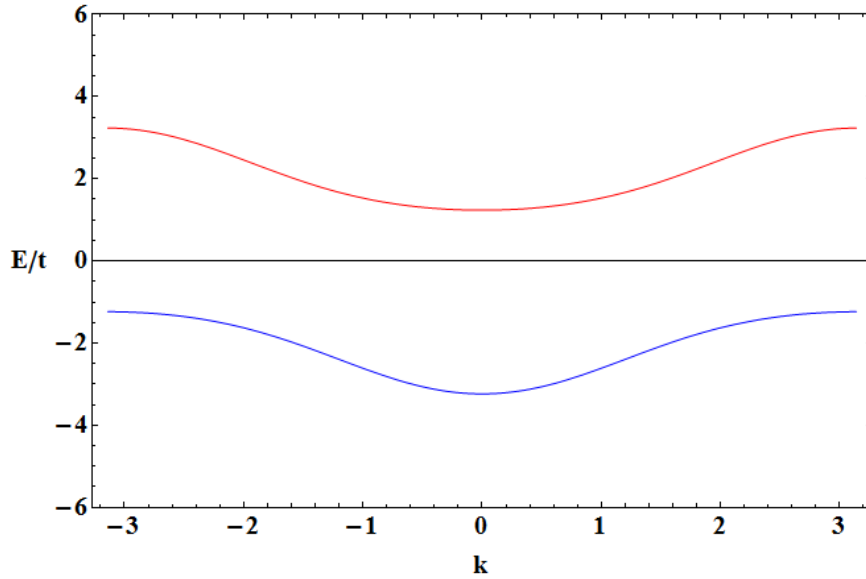
$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{1}{E + \mu} + \frac{U\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle}{(E + \mu)(E + \mu - U)} \right\} = 1. \quad (1.42)$$

Решавањем овог израза по E , коначно добијамо:

$$E_{\pm} = -\mu + \frac{U + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{U - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{2}\right)^2 + U\varepsilon_{\mathbf{k}}\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle}. \quad (1.43)$$

На основу резултата (1.43), јасно је да постоје две "групе" енергија које електрони могу поседовати (тзв. *дозвољене енергије*). Ове групе су познате као *горња* и *доња Хабардова трака* [4]. Графички приказ енергија $E_{\pm}$, у специјалном случају од интереса: $\langle\hat{n}_{-\sigma}\rangle =$

$1/2$ (полупопуњене валентне орбитале), дат је на Сл. 2, где су $E \in \{E_+, E_-\}$ могуће (дозвољене) енергије електрона.



Сл. 2: Енергије електрона према Хабардовом моделу, за $\tilde{U} = 4t$, $\mu = 2t$ и $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = 1/2$

Између суседних енергија у оквиру једне исте траке, у термодинамичком лимесу ($\lim(\Omega \rightarrow \infty)$) постоји бесконачно узак размак, због чега електрони могу да се "крећу" унутар (једне исте) траке без потребе за додавањем енергије. Међутим, као што такође можемо видети, горња и доња Хабардова трака су раздвојене. Другим речима, постоје енергије које електрони не могу поседовати (тзв. *забрањене (недозвољене) енергије*). Ове енергије чине тзв. **енергетски процеп (геп)**, чију ћемо величину (ширину) означити са Δ . Забрањене енергије потичу од међуелектронског Кулоновог одбијања $\tilde{U}$, у шта се можемо једноставно уверити. Наиме, ширина енергетског гема (вредност Δ) се, на основу Сл. 2, налази као разлика енергије дна горње траке и енергије врха доње траке. У случају $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = 1/2$, добијамо:

$$\Delta = E_+(\text{дно}) - E_-(\text{врх}) = -2t + \tilde{U} \sqrt{1 + 4 \left(\frac{t}{\tilde{U}} \right)^2}. \quad (1.44)$$

Уколико бисмо посматрали лимес $\tilde{U} \rightarrow \infty$, односно $t/\tilde{U} \rightarrow 0$, дошли бисмо до израза

$$\Delta = \tilde{U} - 2t. \quad (1.45)$$

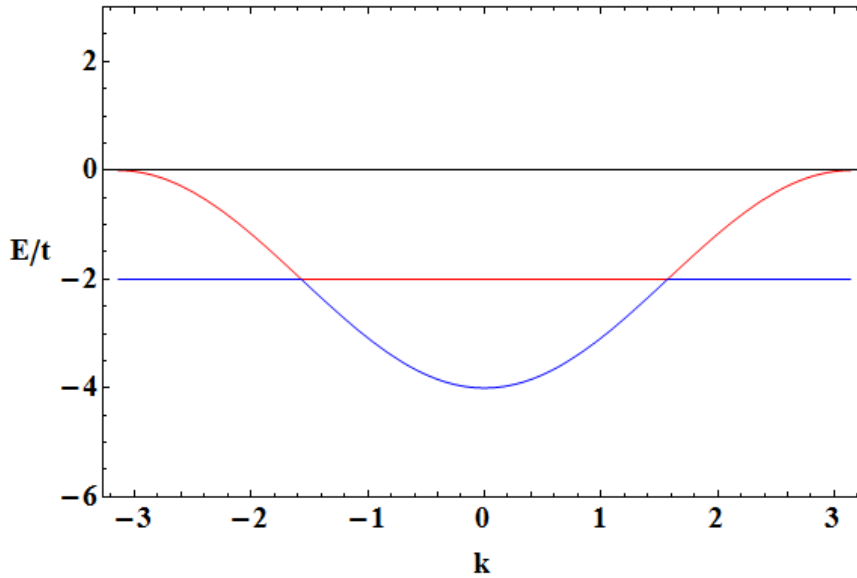
Са друге стране, коришћењем резултата (1.43), може се показати да, у случају $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = 1/2$, горња и доња Хабардова трака имају исту ширину ($W_{\pm} = E_{\pm}(\text{врх}) - E_{\pm}(\text{дно})$ - ширина горње/доње траке), која износи

$$W_+ = W_- \equiv W = 2t, \quad (1.46)$$

одакле следи да, у лимесу $\tilde{U} \rightarrow \infty$, постоји енергетски геп, чија ширина износи $\Delta = \tilde{U} - W$, услед којег је систем електрона доведен у *изолаторско стање*. Као што смо у уводном

делу рада нагласили, стање система у којем честице немају могућност кретања услед довољно јаке међусобне интеракције (јаке корелисаности) је у литератури познато под називом *Мотов изолатор*.

Са друге стране, у случају $\tilde{U} \rightarrow 0$, показује се да се ове две траке стапају у једну, при чему нестаје енергетски геп ($\Delta \rightarrow 0$). У овом случају, дакле, имамо управо једну (јединствену) траку, као што се може видети на Сл. 3. Ово стање одговара одсуству међуелектронских корелација, услед чега се систем електрона понаша као проводник.



Сл. 3: Енергије електрона према Хабардовом моделу, за $\tilde{U} = 0$, $\mu = 2t$ и $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = 1/2$

Такође, када је $\langle \hat{n}_{-\sigma} \rangle = 1/2$, с обзиром на облик графика косинусне функције, следи да се Фермијев ниво (у ознаци E_F) налази на енергији $E = -2t$. Узимањем у обзир међуелектронске интеракције, чак и при малим вредностима $\tilde{U}$, систем постаје изолатор.

Такође, показује се да, уколико би се Хабардов модел третирао у лimesу бесконачно јаке интеракције, познатијем и као *лимит јаког купловања*, а што управо одговара **јако корелисаном систему** [7], могли бисмо да одредимо да ли ће изолаторско стање система одговарати феромагнетном, или антиферомагнетном систему. Третирањем кинетичког члана Хабардовог модела као пертурбацију, резултати показују антиферомагнетно стање система. Прецизније речено, Хабардов модел ће се *ефективно* понашати као Хајзенбергов модел, који управо описује изолаторски систем. За ефективну константу међуелектронске интеракције (у ознаци J_{eff}) се испоставља да износи $J_{eff} = 4t^2/\tilde{U}$ [2, 6, 7]. Наравно, с обзиром на $\tilde{U} > 0$, очигледно је да ће увек бити $J_{eff} > 0$, као што је то случај у систему антиферомагнетика [2, 7].

Досадашњи резултати су добијени ослањањем на Хабардов модел и коришћење одређених *апроксимација*. Потреба за коришћењем апроксимација заправо следи из самог *недијагоналног* облика хамилтонијана Хабардовог модела. Такође, чак и у најједноставнијој апроксимацији, као што смо управо видели, поступак долажења до тражених резултата о енергијама електрона је поприлично обиман.

Да бисмо на много једноставнији начин и са пуно мање апроксимација испитали понашање

система јако корелисаних електрона, односно прелазак система из проводног стања у стање Мотовог изолатора, неопходно је приступити анализи међуелектронских корелација на другачији начин. У наредној Глави ћемо, полазећи од Хабардовог модела, формулисати нешто другачији хамилтонијан, а који ће нам чак омогућити и егзактно решавање и долажење до енергетске структуре електронског система и објашњење фазног прелаза метал-изолатор.

Глава 2

Модел јако корелисаног система електрона

До сада смо размотрили једноставан теоријски модел који описује електроне у кондензованом систему. Наиме, у питању је Хабардов модел, у којем, као што смо видели, фигуришу чланови који описују процесе релевантне за један овакав систем. Рекли смо, међутим, да се у оквиру овог модела не може егзактно одредити енергетски спектар електронског система. У овој Глави ћемо представити модел који се по неким карактеристикама битно разликује од Хабардовог модела, али и даље може да послужи за анализу претходно описаних електронских система. Овај модел је познат у литератури као **Хацугаи-Кохмотов (ХК) модел**¹, [3]. Наиме, као што ћемо у наставку видети, у питању је модел који омогућава егзактно налажење енергије електрона у посматраном систему. Притом ће бити искоришћен метод Гринових функција (ГФ) [13–15]. Погледајмо најпре како изгледа хамилтонијан овог модела.

2.1 Хамилтонијан ХК модела

Као што смо рекли, идеја је да се користи модел који описује понашање електрона у кондензованом систему, а који би заменио Хабардов модел². Дакле, треба нам модел који, као и Хабардов, урачунава процес преласка електрона са атома на атом (члан хамилтонијана са параметром t)³, заједно са међуелектронском интеракцијом, која, међутим, за разлику од Хабардовог модела (параметар $\tilde{U}$), у ХК моделу има сасвим другачији облик и смисао.

Наиме, у Хабардовом моделу је међуелектронска интеракција потицала од електростатичког одбијања и била ограничена на електроне који се налазе на истом чвору (у директном

¹Hatsugai & Kohmoto, *Exactly solvable Model of Correlated Lattice Electrons in Any Dimension*, 1992.

²Све апроксимације које смо у Глави 1 искористили за Хабардов модел, важиће и за ХК модел, осим члана који урачунава међуелектронску интеракцију.

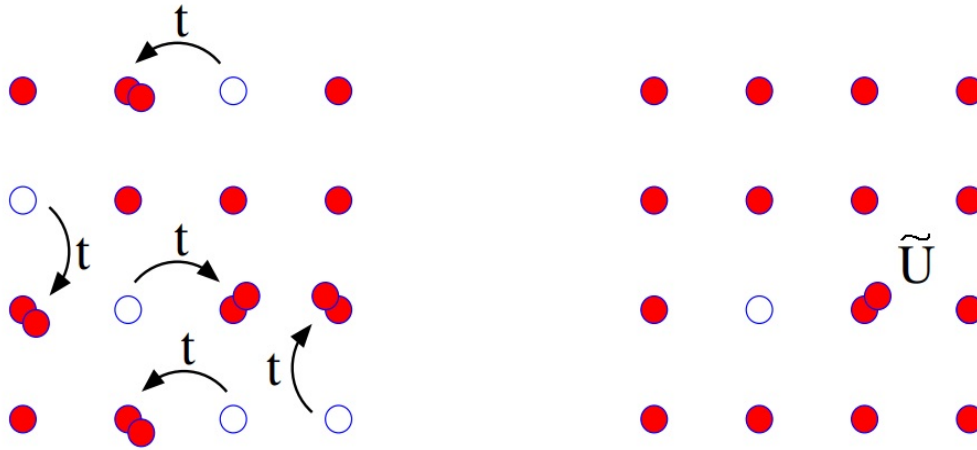
³Наравно, подразумевамо и урачунавање члана хамилтонијана са хемијским потенцијалом μ .

простору)⁴:

$$\hat{H}_1 = \frac{\tilde{U}}{2} \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \hat{n}_{i,-\sigma}. \quad (2.1)$$

Дискутујмо сада физички смисао овог израза. Као што видимо, с обзиром да важи $n_{i\sigma} = \{0, 1\}$, видимо да се интеракција дешава само ако важи $n_{i\sigma} \neq 0$ и $n_{i,-\sigma} \neq 0$ (за исти чвор i), при чему, како смо рекли, важи $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

Нагласили смо да се у лимиту $\tilde{U} \rightarrow \infty$ електронски систем описан Хабардовим моделом *ефективно* "понаша" као електронски систем описан Хајзенберговим моделом (Глава 1). Дакле, у лимиту јаке одбојне интеракције (док се сви остали параметри одржавају константним) електрони не поседују довољно енергије како би савладали одбојну интеракцију са другим електроном на истом чвору, што доводи систем до прелаза из металне у изолаторску фазу, *антиферромагнетног* карактера. Изолатор добијен на овај начин, као што смо рекли, познат је под називом *Мотов изолатор* [3, 5, 16]. Појава оваквог фазног прелаза је илустрована на Сл. 4.



Сл. 4: Фазни прелаз метал-изолатор са порастом интензитета одбојне интеракције: проводник (метална фаза) (лево); изолаторска фаза (Мотов изолатор) (десно)

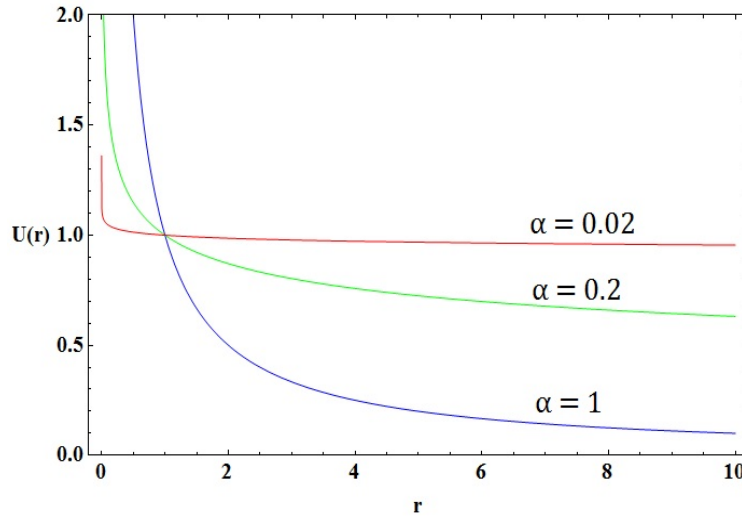
Показује се могућим да се међуелектронске корелације представе на други начин. Наиме, за разлику од Хабардовог модела, где се интеракција дешава само међу електронима са истог чвора у директној решетки и има вредност једнаку Кулоновој интеракцији на растојању у посматраној орбитали, разматра интеракција електрона са различитих чворова, односно узимамо у обзир *далекодометни карактер* међуелектронске интеракције. При томе, у формулисању интеракционог члана, искористићемо две апроксимације⁵. Прво, претпоставићемо да параметар међуелектронске интеракције, услед свог далеког домета, има интензитет који се практично не мења са променом међусобног растојања интерагујућих електрона. Математички, ова апроксимација се може јасније уочити и сагледати⁶ посматрајући

⁴У литератури је овакав тип интеракције познат као *on-site* (на-чвору) интеракција [3].

⁵Наиме, и сам Хабардов модел је формулисан коришћењем одређених апроксимација [2].

⁶На слици нису прецизиране мерне јединице за r и U , јер то не утиче на понашање функције $U(r)$.

графике са Сл. 5. На слици је, као што видимо, приказана функција $U(r) = K/|r|^\alpha = K/r^\alpha$, за $K = 1$, при чему, јасно, мањој вредности параметра α одговара већи домет (спорије слабљење) интеракције. С обзиром да више не важи закон промене $\sim 1/r$ са међуелектронским растојањем r , јасно је да ова интеракција, у строгом смислу, није исто што и Кулонова.



Сл. 5: График функције $U(r) = 1/r^\alpha$ за различите вредности параметра $\alpha = 1$ (плава крива), $\alpha = 0.2$ (зелена крива), $\alpha = 0.02$ (црвена крива)

Са графика можемо закључити да са порастом домета интеракција поприма облик константе, и то са вредношћу блиској $U(r \rightarrow 0)$. С обзиром да нам може помоћи у анализи Мотовог изолаторског стања, за интеракцију U ћемо користити назив **Мотова интеракција**. Самим тим што се интеракција U разликује од Кулонове, допустимоћу могућност негативног предзнака, односно размотрићемо могућност $U < 1$.

Друга апроксимација се састоји у издвајању одређених међуелектронских интеракција. Наиме, претпоставићемо да се у кристалој решетки одвијају једино интеракције у којима се положај центра масе одржава. Ово ћемо постићи тако што ћемо параметар интеракције U помножити Дираковом делта-функцијом $\delta(\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_k = \mathbf{r}_j + \mathbf{r}_l)$, где су $\mathbf{r}_i$ $\mathbf{r}_k$ почетни положаји интерагујућих електрона, а $\mathbf{r}_j$ $\mathbf{r}_l$ су њихови крајњи положаји. Ова апроксимација се, као што ћемо у наставку видети, показује веома погодним у поједностављивању форме теоријског модела у $\mathbf{k}$ -простору. С обзиром да у разматраном моделу узимамо да се електрони могу наћи само на чворовима решетке, следи замена $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{R}_i$, а Диракова делта функција прелази у Кронекерову.

Још једна важна особина мора бити урачуната. Наиме, истакли смо да настала изолаторска фаза има антиферромагнетни карактер, што значи да је, пре свега, неопходно да интеракција U постоји само између електрона са супротно оријентисаним спиновима.

Означавањем одговарајућих вектора положаја чворова индексима i, j, k, l ради краћег записа, на основу реченог, интеракциони члан ХК модела (у ознаци $\hat{H}_U$), коначно, има следећи облик:

$$\hat{H}_U = \frac{U}{2} \sum_{i,j,k,l} \sum_{\sigma} \delta_{i+k=j+l} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} \hat{c}_{k,-\sigma}^\dagger \hat{c}_{l,-\sigma} = \frac{U}{2} \sum_{i,j,k,l} \delta_{i+k=j+l} \left(\hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l\downarrow} + \hat{c}_{i\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j\downarrow} \hat{c}_{k\uparrow}^\dagger \hat{c}_{l\uparrow} \right), \quad (2.2)$$

којим су обухваћени случајеви $U < 0$ и $U > 0$. С обзиром да промена у оријентацији спина не носи никакву енергију, следи да су чланови у загради израза (2.2) једнаки, тако да се тај израз може краће писати као

$$\hat{H}_U = U \sum_{i,j,k,l} \delta_{i+k=j+l} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l\downarrow}. \quad (2.3)$$

Услед увођења делта-функције, надаље се показује погодним да се Мотова интеракција посматра по јединици запремине кристала. Уколико бисмо међуатомска растојања изражавали у јединицама константе (параметра) решетке ($a = 1$), запремина кристалне решетке постаје бројно једнака укупном броју чворова у кристалу - вредност N :

$$\hat{H}_U \rightarrow \frac{\hat{H}_U}{N} = \frac{U}{N} \sum_{i,j,k,l} \delta_{i+k=j+l} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l\downarrow}. \quad (2.4)$$

Ради краћег записа, $\hat{H}_U/N$ ћемо једноставно означити као $\hat{H}_U$, при томе подразумевајући да је у питању енергија интеракције по чвору решетке. Узимајући у обзир све што смо до сада рекли, укупни хамилтонијан система добија израз:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \right) + \frac{U}{N} \sum_{i,j,k,l} \delta_{i+k,j+l} \hat{c}_{i\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j\uparrow} \hat{c}_{k\downarrow}^\dagger \hat{c}_{l\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \quad (2.5)$$

У наставку ћемо, спровођењем аналогног поступка Фурије-трансформације као у Глави 1, проверити да ли апроксимације које смо овде увели заиста доводе до егзактног решења енергијске структуре. Показаћемо, такође да изолаторско стање може да се формира у случају одбојне (и то довољно јаке) интеракције, због чега ће, након тога, за наведене фазне прелазе бити разматран једино овај случај, односно $U > 0$ [3, 4].

2.2 Енергије и стања јако корелисаних електрона

Покажимо, за почетак, да се Фуријеовом трансформацијом израза (2.5) добија облик хамилтонијана система који је за даљу анализу знатно погоднији од Хабардовог модела. Наиме, показује се да нас овај поступак води на дијагоналан облик хамилтонијана $\hat{H}$.

Да бисмо ово постигли, прво ћемо искористити услов задат преко Диракове делта-функције. С обзиром да, према овом услову, важи $\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_k = \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_l$, можемо изразити један од ових вектора положаја помоћу остала три. На пример, можемо писати $\mathbf{R}_l = \mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k$.

Примењујући правила трансформације за креациони и анихилациони оператор (1.10), за интеракциони члан $\hat{H}_{(U)}$ у (2.5) добијамо:

$$\hat{H}_{(U)} = \frac{U}{N^3} \sum_{i,j,k} \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \hat{c}_{\mathbf{k}_1\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}_3\downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_4\downarrow} e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j} e^{-i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}_k} e^{i\mathbf{k}_4 \cdot (\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)}, \quad (2.6)$$

што се, након обједињавања експоненцијалних делова са једнаким векторима положаја, своди на:

$$\hat{H}_{(U)} = U \sum_{\mathbf{k}_1 \dots \mathbf{k}_4} \hat{c}_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2 \uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}_3 \downarrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_4 \downarrow} \frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{R}_i} \frac{1}{N} \sum_j e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{R}_j} \frac{1}{N} \sum_k e^{i(\mathbf{k}_4 - \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{R}_k}. \quad (2.7)$$

Коришћењем (1.13) коначно долазимо до следећег резултата:

$$\hat{H}_{(U)} = U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k} \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k} \downarrow}. \quad (2.8)$$

Коначно, Фурије-трансформација ХК модела (2.5) има облик:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k} \uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k} \downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k} \uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k} \downarrow}. \quad (2.9)$$

Дакле, хамилтонијан система је очигледно дијагоналан. Управо нам ова особина хамилтонијана омогућава да егзактним путем дођемо до енергије електрона, а потом и до одговарајуће функције стања [3]. Да бисмо то показали, користићемо раније описан метод ГФ.

2.2.1 Метод Гринових функција и енергетска структура

Гринова функција коју овде користимо има скоро исти облик као и у Поглављу 1.2.1, са једином разликом што се, овога пута, показује погодним да се у првом кораку изврши Фурије-трансформација просторних и временских координата. Дакле, са просторних координата прелазимо на импулсне, а са времена на енергију. Наведене трансформације се изражавају формулама:

$$G_{\mathbf{k}}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d(\tau - \tau') \int_{\Omega} d^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}') G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \tau - \tau') e^{i(E(\tau - \tau') - \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}'))}, \quad (2.10)$$

где је Ω запремина (целог) кристала. Дакле, у наставку ћемо користити "енергетско-импулсну" репрезентацију ГФ (видети (2.10)).

Пређимо сада на одређивање облика ГФ. Наиме, за операторе $\hat{A}$ и $\hat{B}$ (видети дефиницију ГФ у Поглављу 1.2.1) узимамо: $\hat{A} \rightarrow \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$, $\hat{B} \rightarrow \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$. Тада се за $G_{\mathbf{k}}(E)$ може писати:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) := \langle \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} | \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E. \quad (2.11)$$

За ГФ у енергетској репрезентацији, једначина кретања (1.24) поприма облик:

$$E G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle + \langle \langle [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}] | \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E, \quad (2.12)$$

Као што видимо, потребно је одредити тражене (анти)комутаторе из (2.12). Прво, за антикомутатор у првом члану важи [14]:

$$[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ = \hat{I} \quad \rightarrow \quad \langle [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle = \langle \hat{I} \rangle = 1. \quad (2.13)$$

Даље, комутатор оператора $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$ са хамилтонијаном $\hat{H}$ ћемо, ради боље прегледности, поделити на комутаторе са хамилтонијаном неинтерагујућег ($\hat{H}_0 + \hat{H}_\mu$) и интерагујућег ($\hat{H}_U$) дела хамилтонијана $\hat{H}$:

$$[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}] = [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}_0 + \hat{H}_\mu] + [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}_U]. \quad (2.14)$$

Размотримо сваки члан у (2.14) посебно. Први члан даје

$$[\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}_0 + \hat{H}_\mu]_- = \sum_{\mathbf{p}, s} \xi(\mathbf{p}) [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{p}s}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}s}]_- = \sum_{\mathbf{p}, s} \xi(\mathbf{p}) \hat{c}_{\mathbf{p}s} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta_{\sigma, s} = \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.15)$$

док се за други члан, након аналогно спроведеног поступка, као резултат добија

$$\begin{aligned} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}_U]_- &= \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{n}_{\mathbf{p}s} \hat{n}_{\mathbf{p}, -s}]_- = \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} \hat{n}_{\mathbf{p}s} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{n}_{\mathbf{p}, -s}]_- + \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{n}_{\mathbf{p}s}]_- \hat{n}_{\mathbf{p}, -s} \\ &= \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} \hat{n}_{\mathbf{p}s} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{p}, -s}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}, -s}]_- + \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{p}s}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}s}]_- \hat{n}_{\mathbf{p}, -s} \\ &= \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} \hat{n}_{\mathbf{p}s} \hat{c}_{\mathbf{p}, -s} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta_{s, -\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p}, s} \hat{c}_{\mathbf{p}s} \hat{n}_{\mathbf{p}, -s} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta_{s, \sigma} \\ &= \frac{U}{2} \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{U}{2} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} = U \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Уврстимо сада резултате из (2.15) и (2.16) у једначину кретања (2.12). Тако добијамо:

$$EG_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} + \xi(\mathbf{k})G_{\mathbf{k}\sigma}(E) + U\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E), \quad (2.17)$$

где смо последњи члан скраћено записали уводећи нову, вишу $\Gamma\Phi$:

$$\Gamma_{\mathbf{k}}(E) := \langle \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} | \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E. \quad (2.18)$$

Као што видимо, у изразу (2.17) фигурише непозната виша $\Gamma\Phi$ $\Gamma_{\mathbf{k}}(E)$, чија једначина кретања (према истом хамилтонијану $\hat{H}$) има облик:

$$E\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle \langle [\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle \rangle + \langle \langle [\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}] | \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E. \quad (2.19)$$

Аналогно полазној $\Gamma\Phi$, спроводимо поступак налажења потребних комутатора и антикомутатора. За антикомутатор првог члана са десне стране израза (2.19) добија се

$$[\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ = \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger + \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ = \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma}. \quad (2.20)$$

Усредњавањем по $\hat{H}$ (по великом канонском ансамблу [12]), следи:

$$\langle \langle [\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger]_+ \rangle \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \rangle. \quad (2.21)$$

Затим, комутатор са хамилтонијаном $\hat{H}$ поново тражимо из два дела (као и код $G_{\mathbf{k}}(E)$). За први део се добија

$$\begin{aligned} [\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}_0 + \hat{H}_\mu]_- &= \sum_{\mathbf{p}, s} \xi(\mathbf{p}) [\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{c}_{\mathbf{p}s}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}s}]_- = \sum_{\mathbf{p}, s} \xi(\mathbf{p}) [\hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{n}_{\mathbf{p}s}]_- \\ &= \xi(\mathbf{k}) \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

док за други налазимо

$$\begin{aligned} \left[\hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{H}_1 \right]_- &= \frac{U}{2} \sum_{\mathbf{p},s} [\hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{n}_{\mathbf{p},s} \hat{n}_{\mathbf{p},-s}]_- = \frac{U}{2} \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \sum_{\mathbf{p},s} [\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \hat{n}_{\mathbf{p}s} \hat{n}_{\mathbf{p},-s}]_- \\ &= U \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} (\hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}) = U \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma}^2 \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = U \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Уврштавањем резултата (2.21)-(2.23) у једначину кретања (2.19), добијамо:

$$\Gamma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle}{E - (\xi(\mathbf{k}) + U)}. \quad (2.24)$$

Остатак поступка је једноставан. Наиме, простим уврштавањем (2.24) у (2.17) коначно се добија:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \left\{ \frac{1}{E - \xi(\mathbf{k})} + \frac{U \langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle}{[E - \xi(\mathbf{k})][E - (\xi(\mathbf{k}) + U)]} \right\}, \quad (2.25)$$

Како би слика о енергетским стањима била јаснија, погодно је да се израз (2.25) сведе на облик у ком постоје два члана са јасно "раздвојеним" енергијама. Наиме, на тај начин ћемо добити информацију о мери попуњености енергетских стања (у $\mathbf{k}$ -простору). Другим речима, интересје нас облик:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \left\{ \frac{\tilde{A}_{\mathbf{k}\sigma}}{E - \xi(\mathbf{k})} + \frac{\tilde{B}_{\mathbf{k}\sigma}}{E - (\xi(\mathbf{k}) + U)} \right\}, \quad (2.26)$$

где би за $\tilde{A}$ и $\tilde{B}$ требало да важи: $\tilde{A} = \tilde{A}(\langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle)$ и $\tilde{B} = \tilde{B}(\langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle)$. Потребне изразе за $\tilde{A}$ и $\tilde{B}$ налазимо једноставним поређењем израза (2.25) и (2.26) након претходног свођења на заједнички именилац. Тако добијамо $\tilde{A} = 1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle$ и $\langle \tilde{B} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle$, односно:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{i\hbar}{2\pi} \left\{ \frac{1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle}{E - \xi(\mathbf{k})} + \frac{\langle \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \rangle}{E - (\xi(\mathbf{k}) + U)} \right\}. \quad (2.27)$$

Добијени резултат (2.27) представља, дакле, егзактно решење енергетске структуре ХК модела. Наиме, прво што можемо да приметимо је чињеница да вредностима тражених ексцитационих енергија одговарају два могућа облика, или две "траке", енергије:

$$E \equiv E_{(1)} = \xi(\mathbf{k}) \text{ и } E \equiv E_{(2)} = \xi(\mathbf{k}) + U, \quad (2.28)$$

при чему је $\xi(\mathbf{k})$ дато изразом (1.20). Ове две вредности енергије (са зависношћу од $\mathbf{k}$ -вектора) чине тзв. *енергетске траке*. Прецизније речено, електрон који се креће са чвора на чвор решетке кристала без ступања у интеракцију са другим електроном поседује енергију $E = \xi(\mathbf{k})$. У тренутку кад се нађе у $\mathbf{k}$ -стању са другим електроном⁷, на енергију $\xi(\mathbf{k})$, односно $E_{(1)}$, додаје се још и вредност U , односно електрон ће тада имати енергију $E = \xi(\mathbf{k}) + U$, при чему може бити $U > 0$, или $U < 0$.

Могуће вредности $\mathbf{k}$ -вектора припадају првој Брилуеновој зони⁸. Брилуенова зона се, као и кристал, може посматрати у различитим димензионалностима⁹. На пример, за

⁷Са обавезно супротним спином, према Паулијевом принципу.

⁸Број могућих нееквивалентних стања у првој Брилуеновој зони једнак је броју чворова кристалне решетке у директном простору [1].

⁹Димензионалност Брилуенове зоне једнака је димензионалности кристала и износи D .

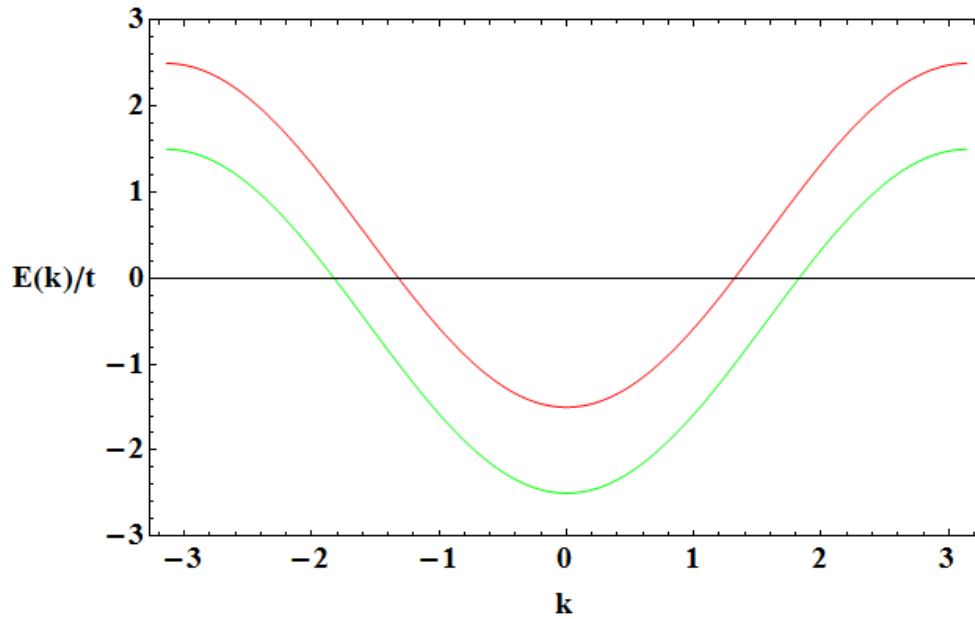
једнодимензиону Брилуенову зону (хиперкубне) решетке је познато да обухвата таласне векторе са вредностима $-\pi/a \leq |\mathbf{k}| \leq \pi/a$ [4]. У општем случају, за произвољну димензију D (такође хиперкубне) решетке, прва Брилуенова зона обухвата векторе $|\mathbf{k}| \in [-\pi/a, \pi/a]^D$. У наставку ћемо за вредност a узимати, као што смо и до сада користили, вредност $a = 1$, тако да можемо писати: $|\mathbf{k}| \in [-\pi, \pi]^D$. Затим, с обзиром да енергетске зоне настају преклапањем енергетских нивоа, услед чињенице да се атоми у кристалима налазе на релативно блиском растојању, услед чега долази до расплињавања таласних функција електрона, односно атомских орбитала, које тада постају веома блиске, односно сачињавају скуп међусобно блиских орбитала, између којих електрони, дакле, могу да се крећу. Сваком атому припада одређена орбитала и одређен број електрона који могу да попуњавају те орбитале. Када електрон пређе са једног атома на други, у енергетској структури ово одговара преласку електрона са једне орбитале на другу, односно "кретању" кроз енергетску зону.

На температури апсолутне нуле ($T = 0K$), електрони попуњавају енергетске нивое све до нивоа коме одговара највиша енергија, односно Фермијев ниво. Рачунање енергије од Фермијевог нивоа је практично већ урачунато, додавањем члана $\hat{H}_\mu$ и ова енергија има могуће вредности $\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ за доњу траку и $\xi(\mathbf{k}) + U = \varepsilon_{\mathbf{k}} + U - \mu$ за горњу траку. У Глави 3 ће бити показано да Фермијевом нивоу одговара енергија $E = 0$, односно да важи $E_F = 0$. Наиме, видећемо да на температури апсолутне нуле електрони заузимају само енергије $\xi(\mathbf{k}) - \mu < 0$ у доњој грани и¹⁰ енергије $\xi(\mathbf{k}) + U - \mu < 0$ у горњој грани.

Резултате досадашње анализе можемо приказати графички, при чему треба разликовати неколико случајева. Наиме, распоред електрона по $\mathbf{k}$ -стањима битно зависи од броја електрона (у ознаци N_e) у односу на број чворова (атома) (у ознаци N) у решетки и јачине Мотове интеракције U . Као што ћемо касније видети, помоћу ХК модела ће бити довољно посматрати једино случајеве за које важи $N_e \leq N$, због чега ће и на овом месту једино ови случајеви бити размотрени. У Глави 3 ћемо се уверити да за одређену вредност параметра интеракције U полупопуњеној валентној зони увек одговара вредност хемијског потенцијала $\mu = U/2$, док случају $N_e < N$ одговара $\mu < U/2$ и обрнуто. Размотримо најпре случај када је параметар U позитиван, тј. $U > 0$.

Случај $U < W$, $N_e = N$: Међуелектронско одбијање са вредношћу мањом од ширине валентне зоне ($W = 4tD$), при чему је број електрона једнак броју чворова решетки. Пример енергетске структуре, за $D = 1$, $\mu = 0.5t$ и $U = t$ је приказан на Сл. 6.

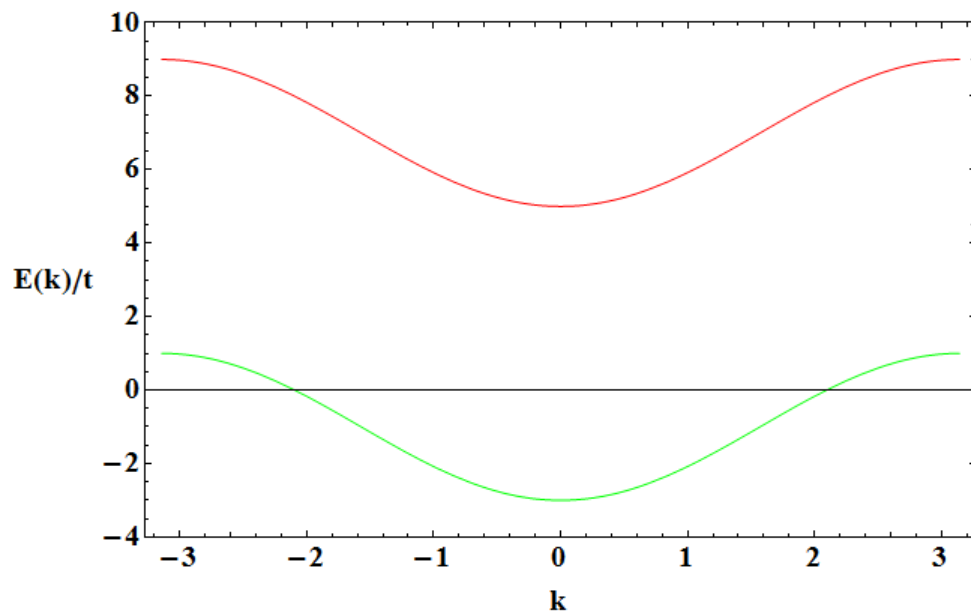
¹⁰Постоји могућност да $\xi(\mathbf{k}) + U - \mu < 0$ не буде задовољено.



Сл. 6: Могућа енергетска стања ($E = E(\mathbf{k})$) у првој Брилуеновој зони једнодимензионе ($D = 1$) решетке према једначини (2.27) за случај: $U = 2t < W = 4t$, $\mu = t = U/2$;

Оно што можемо одмах да приметимо је прекривање горње (означене црвеном бојом) и доње (означене зеленом бојом) енергетске под-траке. Дакле, у овом случају нема енергијског гена, тако да у систему влада метална фаза, у којој електрони могу слободно да се крећу кроз кристал.

Случај $U > W$, $N_e < N$: Међуелектронско одбијање са вредношћу већом од ширине валентне зоне ($W = 4tD$), при чему је број електрона мањи од броја чворова решетке. Пример енергетске структуре, за $D = 1$, $\mu = 2$ и $U = t$ је приказан на Сл. 7.

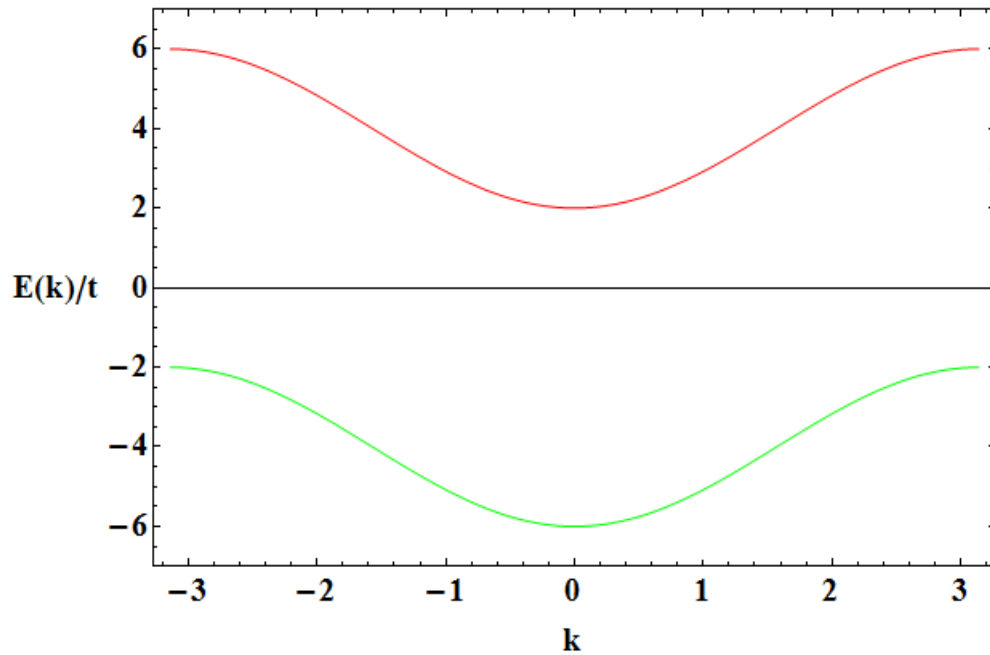


Сл. 7: Могућа енергетска стања ($E = E(\mathbf{k})$) у првој Брилуеновој зони једнодимензионе ($D = 1$)

решетке, према једначини (2.27) за случај: $U = 8t > W = 4t$, $\mu = t < 4t = U/2$;

У овом случају, електрони и даље могу да се крећу кроз кристал, с обзиром на чињеницу да, иако у овом случају постоји енергетски геп, такође и даље постоје празна (непопуњена) $\mathbf{k}$ -стања, доступна електронима, тако да се и у овом случају систем понаша као проводник.

Случај $U > W$, $N_e = N$: Међуелектронско одбијање са вредношћу већом од ширине валентне зоне ($W = 4tD$), при чему је број електрона једнак броју чворова решетке. Пример енергетске структуре, за $D = 1$, $\mu = 4t$ и $U = 8t$ је приказан на Сл. 8.



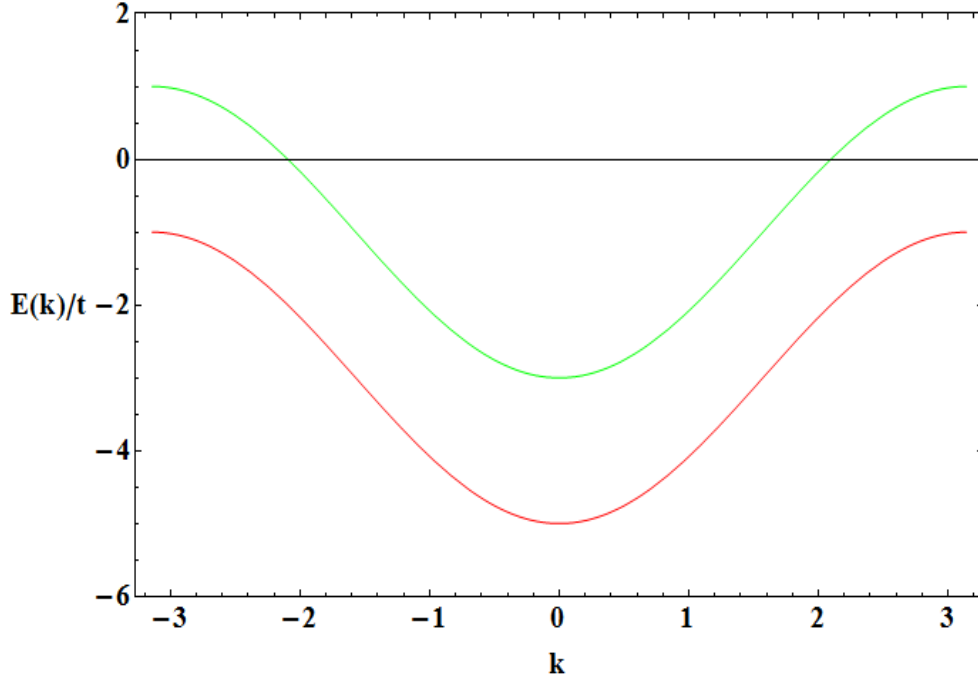
Сл. 8: Могућа енергетска стања ($E = E(\mathbf{k})$) у првој Брилуеновој зони једнодимензионе ($D = 1$) решетке, према једначини (2.27) за случај: $U = 8t > W = 4t$, $\mu = 4t = U/2$;

Овај случај је најинтересантнији. Наиме, с обзиром на присуство енергетског гена и одсуство непопуњених стања, јасно је да би за сваки прелазак електрона било неопходно улагање енергије за савладавање енергетског гена. Наиме, у овом случају су једино присутна једнострукто заузета стања, тако да бисмо, преласком било којег електрона из свог (почетног) стања у друго, добили двоструко попуњено стање, при којем електрони морају да пређу у горњу под-траку. Овакав прелазак се не може остварити са произвољно малом енергијом, с обзиром на постојање скупа забрањених енергија које би електрони морали да "прескоче" како би се могли слободно кретати.

Однос N_e/N се често скраћено означава са ρ *фактор попуњености*, односно *концентрација електрона*.

У случају $U < 0$, наравно, јасно је да у основном стању сви електрони попуњавају енергијска стања од дна доње енергијске траке до нивоа E_F (Фермијев ниво, чија вредност зависи од попуњености решетке, односно од односа N_e/N , као и од температуре система T). Наравно, енергетска трака која ће бити заузета је $\xi(\mathbf{k}) + U$, где је $U < 0$, с обзиром да овој траци, у том случају, одговарају најниже енергије. Посматрајући график на Сл. 9, јасно је да у овом случају¹¹ не може доћи до појаве Мотовог изолаторског стања.

¹¹Изолаторско стање је у случају $U < 0$ могуће једино за $N_e = 2N$.



Сл. 9: Могућа енергијска стања ($E = E(\mathbf{k})$) у првој Брилуеновој зони ($D = 1$) решетке, према једначини (2.27), за случај $U = -2t < 0$, $\mu = t$;

Ово се једноставно може објаснити и са квалитативне тачке гледишта. Дакле, с обзиром да постоји привлачна далекододетна интеракција која није ограничена на електроне са истог чвора и која има исту вредност за све парове електрона за које важи $\delta(\mathbf{R}_i + \mathbf{R}_k = \mathbf{R}_j + \mathbf{R}_l) \neq 0$, за прелазак електрона са чвора на чвор се не мора улагати енергија, с обзиром да ће електрон бити једнако привучен и од стране електрона са чвора на ком се тренутно налази, као и од електрона са осталих чворова. Дакле, уколико важи $N_e < N$, електрони могу да се крећу кроз решетку.

Према томе, закључујемо да *изолаторска фаза* настаје **само** у случају када су испуњена оба следећа услова: $U > W$ и $N_e = N$. У свим осталим случајевима, систем је у металном стању [3]. С обзиром да у одбојну интеракцију U улазе само електрони супротног спина, закључујемо да је у изолаторској фази сваки електрон окружен чворовима на којима се налазе електрони супротног спина, што одговара антиферромагнетном стању. Из тог разлога, у анализи термодинамичких величина и, касније, високотемпературских суперпроводника, биће разматран само случај $U > 0$.

Погледајмо сада како изгледа функција основног стања ХК модела.

2.2.2 Основно стање ХК модела

С обзиром да је хамилтонијан система у $\mathbf{k}$ -простору облика $\sum_{\mathbf{k}} \hat{H}_{\mathbf{k}}$, одговарајуће својствено стање (укупног хамилтонијана) је потребно записати у облику производа стања која одговарају појединачним вредностима $\mathbf{k}$ -вектора. Означимо ова стања са $\varphi_{\mathbf{k}}$. За одређен $\mathbf{k}$ -вектор, могућа су следећа стања:

$$|0\rangle, \quad |\varphi_{\mathbf{k},\sigma(\mathbf{k})}\rangle \in \{|\varphi_{\mathbf{k}\uparrow}\rangle, |\varphi_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle\}, \quad |\varphi_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}\rangle. \quad (2.29)$$

Коначан облик основног стања се добија као производ стања у (2.29). Искористимо ли чињеницу да чланови $\hat{H}_0$ и $\hat{H}_U$ у ХК моделу међусобно комутирају, долазимо до још једне олакшавајуће околности. Наиме, показује се да, услед међусобног комутирања које постоји међу операторима

$\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$, свако од $\mathbf{k}$ -стања се може окарактерисати бројем електрона које поседује, односно својом "попуњеношћу"¹². Дакле, познавајући основно стање ХК модела, уједно познајемо и број електрона у одређеном (било којем) $\mathbf{k}$ -стању.

Међутим, да ли имамо податак о тачном (конкретном) распореду електрона по стањима у $\mathbf{k}$ -простору? Одговор на то питање управо нам даје претходно добијен график $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k})$ (видети Одељак 2.2.1).

Са графика је могуће издвојити области одређене попуњености. Дакле, најпре уочавамо да мањим вредностима $|\mathbf{k}|$ одговарају двоструко попуњена стања, односно стања у којима за сваки $\mathbf{k}$ -вектор (унутар те области) постоје попуњена стања обе спинске оријентације ($\uparrow$ и $\downarrow$). Ову ћемо област означити са $\mathcal{O}_{(2)}$. Затим следи област у којој је свако $\mathbf{k}$ -стање заузето само једним електроном (са спинском оријентацијом $\uparrow$ или $\downarrow$) и коју ћемо означити са $\mathcal{O}_{(1)}$. Све остале вредности $\mathbf{k}$ -вектора валентне зоне су празна и ову област означавамо са $\mathcal{O}_{(0)}$.

На основу реченог, функција стања система описаног ХК моделом се, у општем случају, може записати као:

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_{(1)}} |\varphi_{\mathbf{k},\sigma(\mathbf{k})}\rangle \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_{(2)}} |\varphi_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}\rangle, \quad (2.30)$$

где се ознака G односи на основно стање¹³

Свако од (једноструко/двоструко) заузетих $\mathbf{k}$ -стања из (2.29) је "настало" деловањем одговарајућих оператора креације електрона:

$$|\varphi_{\mathbf{k}\uparrow}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad |\varphi_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad |\varphi_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}\rangle = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (2.31)$$

док за непопуњено (тзв. вакуумско) стање можемо писати $|0\rangle = \hat{1}|0\rangle$.

Уколико би међутим, одбојна међуелектронска интеракција била довољна јака (случај $U > W$) и уколико би број електрона био једнак броју чворова (што одговара полупопуњеној валентној зони), двоструко попуњених стања не би било, већ би у $\mathbf{k}$ -простору би постојала само област $\mathcal{O}_{(1)}$, односно важило би:

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k},\sigma(\mathbf{k})}\rangle. \quad (2.32)$$

Једноструко заузета стања поседују још једну веома важну особину. Наиме, с обзиром да енергија електрона не зависи од оријентације спина, примећујемо да стањима $|\varphi_{\mathbf{k}\uparrow}\rangle$ и $|\varphi_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle$ одговара иста енергија. Ако је број могућих конфигурација у области $\mathcal{O}_{(1)}$ управо 2^{N_1} , ова вредност представља тзв. *степен дегенерације*. Што је број једноструко заузетих стања већи, већи је и број стања у области $\mathcal{O}_{(1)}$, а тиме и степен дегенерације. Уколико би било $U > W$ и $N_e = N$, односно (2.32), област $\mathcal{O}_{(1)}$ заузима целу Брилуенову зону, тако да и степен дегенерације у том случају узима максималну вредност, 2^N .

Најзад, у случају привлачне интеракције ($U < 0$), јасно, имаћемо двоструко попуњена стања за енергије $E(\mathbf{k}) \leq E_F$, односно

$$|\Psi_G\rangle = \prod_{\mathbf{k}} |\varphi_{\mathbf{k}\uparrow\downarrow}\rangle, \quad E(\mathbf{k}) \leq E_F. \quad (2.33)$$

Разлог због којег је ово важно биће јасније изложен у Глави 3 приликом анализе понашања *ентропије* система, као мере његове неуређености.

¹²У литератури се за оваква стања каже да припадају тзв. *Фоковом простору* [4].

¹³У питању је енглески израз *ground state*, који значи *основно стање*.

2.3 ХК модел и симетрија електрон-шупљина

Хамилтонијан ХК модела описује, као што смо рекли, систем електрона у кристалној решетки који могу да прелазе са чвора на чвор (поседују кинетичку енергију кретања кроз решетку услед интеграла прескакања t [2]), између којих постоји одбојна интеракција U .

Приликом прелажења (тунеловања) са чвора на чвор, електрони остављају за собом празна места - *шупљине*. Шупљине, с обзиром на одсуство негативног наелектрисања електрона, поседују позитивно наелектрисање.

Увођењем концепта шупљина, природно је запитати се: да ли закони, које смо до сада описали, имају исти облик и за шупљине? Наиме, уколико би одговор био потврђан, то би нам у знатној мери могло олакшати даљу анализу, с обзиром да у том случају не би било неопходно да посматрамо вредности фактора попуњености у опсегу $1 \leq \rho \leq 2$, јер би за повећан број електрона у решетки важили исти закони као и у случају да уместо електрона посматрамо шупљине, тако да би било довољно посматрати само опсег $0 \leq \rho \leq 1$. Сада ћемо видети да ли ова особина важи и у случају ХК модела. Другим речима, занима нас да ли хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$ остаје непромењен уколико би, уместо електрона, посматране честице биле шупљине?

Посматрамо моделни хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$ у $\mathbf{k}$ -простору¹⁴:

$$\hat{H}_{HK} = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}. \quad (2.34)$$

Испитајмо шта би се десило уколико бисмо прешли са оператора креације/аниhilације електрона на операторе креације/аниhilације шупљина. Означимо операторе креације и аниhilације шупљина са $\hat{d}_{i\sigma}^\dagger$ и $\hat{d}_{i\sigma}$, редом. С обзиром да се шупљина у директној решетки налази на месту где електрон одсуствује, јасно је да су ови оператори повезани релацијом:

$$\hat{d}_{i\sigma}^\dagger = \hat{c}_{i\sigma}, \quad \hat{d}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger. \quad (2.35)$$

Прелазак са оператора електрона на операторе шупљина, према томе, подразумева $\hat{c}_{i\sigma} \rightarrow \hat{c}_{i\sigma}^\dagger$, односно $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \rightarrow \hat{c}_{i\sigma}$.

Оператори броја електрона $\hat{n}_{i\sigma}$, према томе, прелазе на операторе броја шупљина (означићемо их са $\hat{p}_{i\sigma} = \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{i\sigma}$), на следећи начин:

$$\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \rightarrow \hat{c}_{i\sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger = \hat{d}_{i\sigma}^\dagger \hat{d}_{i\sigma} = \hat{p}_{i\sigma} \quad (2.36)$$

Дакле, с обзиром на антикомутационе релације за Ферми-операторе¹⁵, видимо да важи $\hat{p}_{i\sigma} = \hat{1} - \hat{n}_{i\sigma}$. Применом Фуријеове трансформације, јасно је да важе следеће релације:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} &\rightarrow \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}, & \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} &\rightarrow \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i}, \\ \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} &\rightarrow \sum_{\mathbf{k}} (\hat{1} - \hat{n}_{-\mathbf{k}\sigma}) \equiv \sum_{\mathbf{k}} \hat{p}_{-\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Пре него што ове релације применимо на хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$, приметимо једну олакшавајућу околност. Наиме, кинетички члан хамилтонијана, односно

$$\sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}), \quad (2.38)$$

¹⁴За сада још увек нисмо прецизирали димензионалност система, односно вредност D .

¹⁵На основу правила (2.36), јасно је да су $\hat{d}_{i\sigma}$ и $\hat{d}_{i\sigma}^\dagger$ такође Ферми-оператори, јер задовољавају антикомутациону релацију истог облика.

заправо није потребно трансформисати. Зашто је ово случај? Дакле, с обзиром да овај члан описује прелазак електрона са чвора на чвор и на саму чињеницу да електрони, док врше ове прелазе, "поништавају" шупљину на месту на које прелазе, а "стварају" је на месту са којег су започели прелазак, процес прелазака електрона са атома на атом можемо посматрати и тако што уместо електрона пратимо померање шупљина. Како се помери електрон - тако се помери и шупљина, само у супротном смеру, наравно (о чему нам и говори знак "-" испред $\mathbf{k}$ -вектора у последњем реду израза (2.37)). Онолико колико у систему имамо "покретних" електрона, толико имамо и "покретних" шупљина, односно у члану (2.38) ће важити $\langle \hat{p}_{-\mathbf{k}\sigma} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$. То значи да кинетичка енергија којом располажу електрони, располажу и шупљине које "врше прескоке"¹⁶, тако да је члан (2.38) сам по себи инваријантан на пермутацију $\hat{c}_{i\sigma} \rightarrow \hat{c}_{i\sigma}^\dagger$, односно $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \rightarrow \hat{c}_{i\sigma}$.

Уколико бисмо ова правила применили на хамилтонијан (2.34), без мењања првог члана, добили бисмо

$$\begin{aligned} \hat{H}_{HK} \rightarrow \tilde{\hat{H}}_{HK} &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} (\hat{1} - \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow}) (\hat{1} - \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}], \end{aligned} \quad (2.39)$$

при чему смо у доњем реду (у другом и трећем члану) искористили могућност промене знака $-\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}$, с обзиром да се сумирање врши по свим $\mathbf{k}$ -векторима, укључујући оба смера.

Приметимо да се хамилтонијан $\tilde{\hat{H}}_{HK}$ може приказати помоћу оригиналног хамилтонијана $\hat{H}_{HK}$ на следећи начин:

$$\begin{aligned} \tilde{\hat{H}}_{HK} &= \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})] \\ &= \hat{H}_{HK} + U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})] \\ &\equiv \hat{H}_{HK} + \Delta \hat{H}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

Као што видимо, хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$ (у општем случају) није инваријантан на пермутацију $\hat{c} \rightarrow \hat{c}^\dagger$, односно $\hat{c}^\dagger \rightarrow \hat{c}$, осим у специјалном случају: $N_e = N$. Заиста, у том случају важи $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = 1$, па с обзиром да је увек $\langle \hat{1} \rangle = 1$, за средњу (измерену) вредност настале енергијске разлике бисмо добили $\langle \Delta \hat{H} \rangle = 0$. Дакле, у случају полупопуњене валентне зоне, хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$ је инваријантан на ову пермутацију. Међутим, за даљу анализу је потребно да овај услов буде испуњен за све могуће вредности фактора попуњености, односно ρ .

Дакле, јасно је да бисмо оригинални хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$ морали да допунимо још једним чланом, при чему би облик тог члана морао бити такав да се, након пермутације $\hat{c} \rightarrow \hat{c}^\dagger$ (односно $\hat{c}^\dagger \rightarrow \hat{c}$), у изразу за $\tilde{\hat{H}}_{HK}$, поред чланова у (2.40), појави и $-\Delta \hat{H}$, који би био поништен са $\Delta \hat{H}$ и тако омогућио тражену инваријантност. Међутим, с обзиром да би ХК модел био модификован, таква модификација би морала бити оправдана. Поставља се питање: Да ли бисмо онда имали хамилтонијан који описује систем на коректан начин?

Дакле, модификовани хамилтонијан (у ознаци $\hat{\mathcal{H}}_{HK}$) тражимо у облику

$$\hat{\mathcal{H}}_{HK} = \hat{H}_{HK} + \hat{H}^{(1)}, \quad (2.41)$$

при чему постављамо услов да, након пермутације електрон-шупљина, овај додатни члан доживи прелаз: $\hat{H}^{(1)} \rightarrow \tilde{\hat{H}}^{(1)} = -\Delta \hat{H}$. Да бисмо одредили облик члана $\hat{H}^{(1)}$, у члану $-\Delta \hat{H}$ ћемо да

¹⁶Наравно, шупљина врши овај прескок само ако то уради електрон!

урадимо пермутацију у обрнутом смеру (означимо је са $\Rightarrow$):

$$\begin{aligned}
 -\Delta\hat{H} &= -U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})] = -U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}] \\
 &= -U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} - \hat{1}] \Rightarrow -U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} - \hat{1}] \\
 &= U \sum_{\mathbf{k}} [\hat{1} - (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})] = \Delta\hat{H},
 \end{aligned} \tag{2.42}$$

при чему смо подразумевали и промену знака $-\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k}$, због чега знак "-" нисмо писали. Дакле, потребно је додати члан $\hat{H}^{(1)} = \Delta\hat{H}$. Дакле, овај допринос хамилтонијану система износи:

$$\Delta\hat{H} = U \sum_{\mathbf{k}} \hat{1} - U \sum_{\mathbf{k}} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) = U\hat{N} - U\hat{N}_e \equiv \text{const.} \tag{2.43}$$

Као што видимо, допринос $\Delta\hat{H}$, односно (2.43), одговара константи (у односу на $\mathbf{k}$). У наставку ћемо се уверити да чланови ове врсте не доводе до битних промена у анализи величина којима се описује термодинамички систем. Овиме ћемо уједно доказати да се моделни ХК хамилтонијан може користити без потребе за додавањем члана $\Delta\hat{H}$.

2.3.1 Термодинамичке карактеристике ХК модела

Као што је познато из статистичке физике, да бисмо са хамилтонијана прешли на анализу термодинамичких величина, односно на испитивање њиховог понашања са променом одређених параметара система, као што су температура, број честица у систему, итд. уводи се тзв. *статистичка сума*¹⁷ (у ознаци Z) полазећи од хамилтонијана система $\hat{H}$, на следећи начин [12]:

$$Z := \text{Tre}^{-\beta\hat{H}}, \tag{2.44}$$

где је са Tr означен траг [2], а $\beta = 1/T$ је температурски фактор (T - температура на којој се систем налази). Затим, величину Z даље користимо за дефинисање тзв. *термодинамичког потенцијала система* (у ознаци Φ) изразом [12]:

$$\Phi := -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln (\text{Tre}^{-\beta\hat{H}}) \tag{2.45}$$

Уколико бисмо са $\hat{H}$ уврстили израз за $\hat{H}_{HK} + \Delta\hat{H}$, односно

$$Z = \text{Tre}^{-\beta\hat{H}_{HK} - \beta\Delta\hat{H}}, \tag{2.46}$$

могли бисмо да проверимо утицај члана $\Delta\hat{H}$ на Z и Φ , па самим тим и на анализу осталих величина. Расписивањем хамилтонијана помоћу чланова за одређено $\mathbf{k}$ -стање, добијамо:

$$Z = \text{Tr} \left(\prod_{\mathbf{k}} e^{-\beta\hat{H}_{\mathbf{k}} - \beta\Delta\hat{H}_{\mathbf{k}}} \right) = \left[\prod_{\mathbf{k}} \text{Tr} \left(e^{-\beta[\hat{H}_{\mathbf{k}} - U(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})]} \right) \right] \cdot [e^{-2\beta U}], \tag{2.47}$$

при чему смо искористили $\text{Tr}\hat{1} = 2$, с обзиром да хамилтонијан система садржи операторе који се могу представити матрицама типа 2×2 . На основу (2.45) и (2.47), за термодинамички потенцијал

¹⁷У литератури се за ову величину често сусрећу називи *партициона функција* и *статистичка тежина* [12].

система Φ добијамо:

$$\begin{aligned}
 \Phi &= -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \left(\ln \left[\prod_{\mathbf{k}} \text{Tr} e^{-\beta [\hat{H}_{\mathbf{k}} - (U-2\mu)(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow})]} \right] \right) + 2U \\
 &= -\frac{1}{\beta} \left(\ln \left[\prod_{\mathbf{k}} \text{Tr} e^{-\beta [(\varepsilon(\mathbf{k}) - \mu - U)(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}] } \right] \right) + 2U \\
 &= -\frac{1}{\beta} \ln \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - (\mu + U))} + e^{-2\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - (\mu + U))} e^{-\beta U} \right) + 2U
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

С друге стране, у одсуству члана $\Delta\hat{H}$, за термодинамички потенцијал добијамо:

$$\Phi = -\frac{1}{\beta} \ln \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} + e^{-2\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} e^{-\beta U} \right) \tag{2.49}$$

Дакле, поређењем (2.48) и (2.49) закључујемо да присуство члана $\Delta\hat{H}$ у хамилтонијану система не мења даљу анализу, тако да можемо користити ХК хамилтонијан у свом оригиналном облику, с тим што ће, дакле, бити довољно да посматрамо само случај $0 \leq \rho \leq 1$.

У наредној глави ћемо, на бази формуле (2.49), спровести детаљну процедуру анализе термодинамичких величина које користимо за описивање система јако корелисаних електрона у кристалној решетки.

Глава 3

Термодинамичка својства ХК модела

У претходној глави смо дали хамилтонијан ХК модела и показали да одговарајући модел описује систем који може поседовати особине металног проводника (присуство електрона који се могу слободно¹ кретати кроз кристал), али да такође може и да испољи фазни прелаз из (оваквог) металног у изолаторско стање. Као што смо показали, ово се дешава (једино) у случају полупопуњене валентне зоне, уколико параметар интеракције U престигне вредност једнаку ширини под-траке ($W = 4tD$, где је t параметар преласка електрона са чвора на чвор (тзв. интеграл прескока [2]), а D је димензионалност система (решетке)). Дакле, за испуњене $U > W$ и $\rho = 1$, систем описан ХК хамилтонијаном се налази у изолаторској фази. Такође смо се уверили у предност ХК модела у односу на Хабардов, а што се огледа у дијагоналној форми (укупног) хамилтонијана система. Ово нам је, наиме, омогућило егзактан поступак добијања информације о енергетској структури система.

Сада ћемо размотрити и неке термодинамичке величине, чије ће нам познавање такође обезбедити јасније сагледавање неких важнијих особина система. Термодинамичке особине ХК модела које ће у овој Глави бити размотрете су: *хемијски потенцијал*, *енергија*, *топлотни капацитет* и *ентропија*. На крају, испитаћемо и како се мења степен двоструке попуњености $\mathbf{k}$ -стања, обрачунато по атому (чвору решетке). Погледајмо најпре како су ове величине дефинисане.

3.1 Термодинамичке величине

Као што смо нагласисли, од интереса ће нам бити разматрање одређених термодинамичких (ТД) величина. Започнимо од хамилтонијана система:

$$\hat{H}_{HK} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k})(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}, \quad (3.1)$$

где је, као што смо рекли (видети Главе 1 и 2)

$$\xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu = -2t \sum_{\alpha=1}^D \cos(\mathbf{k} \cdot \delta_{\alpha}) - \mu. \quad (3.2)$$

¹Треба имати у виду да ово кретање није сасвим слободно, с обзиром да су електрони све време изложени доловању периодичног потенцијала [2, 7]. Термин "слободно" узимаћемо само условно, односно подразумеваћемо само могућност да се електрони крећу.

За хамилтонијан (3.1) одговарајућа *статистичка сума* дата је са

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr } e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}_{HK}} = \text{Tr } \exp \left[-\beta \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) - \beta U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \right] \\ &= \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + 2z_{\mathbf{k}} + z_{\mathbf{k}}^2 e^{-\beta U} \right) \equiv \prod_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

при чему смо увели скраћене ознаке:

$$z_{\mathbf{k}} = e^{-\beta(\epsilon(\mathbf{k}) - \mu)} = e^{-\beta\xi(\mathbf{k})} \quad \text{и} \quad f_{\mathbf{k}} = 1 + 2z_{\mathbf{k}} + z_{\mathbf{k}}^2 e^{-\beta U}. \quad (3.4)$$

Као што видимо, у изразу (3.3) фигуришу параметри μ и T . Помоћу ове величине се, даље, може дефинисати *термодинамички потенцијал*, формула (2.48),

$$\Phi = -k_B T \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\prod_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \right) = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln(f_{\mathbf{k}}), \quad (3.5)$$

при чему ћемо узети $k_B = 1$ [2]. С обзиром да се број (нееквивалентних) стања у првој Брилуеновој зони поклапа са бројем чворова у директној решетки (вредност N) и да у термодинамичком лimesу, када $N \rightarrow \infty$, $\frac{N}{V} \neq 0$, следи оправдана могућност преласка са суме на интеграл у (3.5), односно²

$$\sum_{\mathbf{k}} \ln(f_{\mathbf{k}}) \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^D} \int_{[-\pi, \pi]^D} d^D \mathbf{k} \ln(f_{\mathbf{k}}). \quad (3.6)$$

Као што видимо, имамо могућност теоријског изражавања термодинамичких величина за систем (решетку) произвољних димензија D . Овде ћемо размотрити, као најједноставнији случај, *1D ХК модел*, односно $D = 1$. Тада термодинамички потенцијал (3.5), односно интеграл из (3.6), попреима знатно једноставнији облик:

$$\Phi = -\frac{1}{\beta} \int_{-\pi}^{\pi} dk \ln(f_k) = -\frac{1}{\beta} \int_{-\pi}^{\pi} dk \ln(1 + 2z_k + z_k^2 e^{-\beta U}). \quad (3.7)$$

Налажењем првог извода термодинамичког потенцијала (3.7) по одређеним параметрима (β , μ итд.) добијају се тражене термодинамичке величине. Рецимо, налажењем првог извода од Φ по хемијском потенцијалу μ , након узимања негативне вредности, добијамо израз за *средњи број честица (електрона)*:

$$\langle \hat{N} \rangle := -\frac{\partial \Phi}{\partial \mu} = 2\Omega \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k(1 + z_k e^{-\beta U})}{f_k}. \quad (3.8)$$

Дељењем ове вредности са запремином посматраног кристала Ω , добијамо *фактор попуњености* ρ :

$$\rho := \frac{\langle \hat{N} \rangle}{\Omega} = -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial \Phi}{\partial \mu} = 2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k(1 + z_k e^{-\beta U})}{f_k}. \quad (3.9)$$

Проблем на који овде наилазимо тиче се немогућности налажења егзактног (аналитичког) решења интеграла који се јавља у (3.9).

²За параметар решетке a ћемо узети јединичну вредност ($|\mathbf{a}| = a = 1$), а решетка коју ћемо посматрати је хиперкубна, што значи да се скаларни производ $(\mathbf{k}^D \cdot \mathbf{a})$ своди на чисто $ka = k$, односно $-ka = -k$ [4].

Међутим, појстоји могућност спровођења нумеричке интеграције. У овом, коришћен је програм **Wolfram Mathematica 8**, а процедура нумеричке интеграције је спроведена командом *NIntegrate*.

Даље, *енергија* по чвору (атому) решетке (у ознаци E) је дефинисана изразом³ [3, 12]

$$E := \frac{1}{\Omega} \left(-T^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial T^2} + \mu \langle \hat{N} \rangle \right). \quad (3.10)$$

Користећи израз (3.7) за (Гибсов) термодинамички потенцијал, као и $T = 1/\beta$, израз (3.10), односно енергија по чвору решетке, добија облик

$$E = 2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k \left[\varepsilon_k + \left(\varepsilon_k + \frac{U}{2} \right) e^{(-\beta(\varepsilon_k - \mu) - \beta U)} \right]}{1 + 2e^{(-\beta(\varepsilon_k - \mu))} + e^{(-2\beta(\varepsilon_k - \mu) - \beta U)}}, \quad (3.11)$$

односно, у скраћеном запису (видети (3.4)):

$$E = 2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k \left[\varepsilon_k + \left(\varepsilon_k + \frac{U}{2} \right) z_k e^{-\beta U} \right]}{f_k}. \quad (3.12)$$

Као што видимо, енергија E је функција температуре ($\beta = 1/T \equiv \beta(T)$) и хемијског потенцијала μ . Такође, с обзиром да је, на основу претходно добијеног израза (3.9), хемијски потенцијал функција температуре и фактора попуњености ρ , следи да је енергија E функција температуре и фактора попуњености, односно $E = E(\beta, \rho) \equiv E(T, \rho)$.

Даље, *топлотни капацитет* (по чвору решетке, у ознаци C) је дефинисан изразом [3, 12]:

$$C := \frac{\partial E}{\partial T}. \quad (3.13)$$

Такође, јасно је да и за ову величину важи $C = C(\beta, \rho) \equiv C(T, \rho)$. Овде ћемо узети овај извод без промене вредности ρ , односно пратићемо понашање $C = C(T)$ за фиксирани вредности ρ , као што смо радили и у анализи резултата за енергију. На основу реченог, можемо писати:

$$C \equiv \frac{\partial E(T, \mu(T, \rho))}{\partial T} \Big|_{\rho} = \frac{\partial E(T, \mu)}{\partial T} \Big|_{\mu} + \frac{\partial \mu(T, \rho)}{\partial T} \Big|_{\rho} \frac{\partial E(T, \mu)}{\partial \mu} \Big|_T, \quad (3.14)$$

при чему ћемо извод хемијског потенцијала по температури одредити постављајући следећи услов. Наиме, једина величина, од свих до сада наведених, коју ћемо сматрати унапред задатом и температура независном, је фактор попуњености ρ . Одавде следи услов:

$$\frac{\partial \rho(T, \mu(T, \rho))}{\partial T} \Big|_{\rho} = \frac{\partial \rho(T, \mu)}{\partial T} \Big|_{\mu} + \frac{\partial \mu(T, \rho)}{\partial T} \Big|_{\rho} \frac{\partial \rho(T, \mu)}{\partial \mu} \Big|_T = 0. \quad (3.15)$$

Након нешто дужег извођења, за топлотни капацитет $C = C(T, \rho)$ се добија:

$$C = \frac{2}{T^2} \left(C_1 - \frac{C_2 C_3}{C_4} \right), \quad (3.16)$$

где смо искористили краћи запис за изразе

$$C_1 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k}{f_k^2} \left(\varepsilon_k \xi_k + 2 \left(\varepsilon_k + \frac{U}{2} \right) \left(\xi_k + \frac{U}{2} \right) z_k e^{-\beta U} + (\varepsilon_k + U)(\xi_k + U) z_k^2 e^{-\beta U} \right) \quad (3.17a)$$

³И даље подразумевамо, као и за све наредне термодинамичке величине, да се ради о једнодимензионом ($D = 1$) систему, док не буде другачије речено.

$$C_2 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k}{f_k^2} \left(\varepsilon_k + 2 \left(\varepsilon_k + \frac{U}{2} \right) z_k e^{-\beta U} + (\varepsilon_k + U) z_k^2 e^{-\beta U} \right) \quad (3.17b)$$

$$C_3 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k}{f_k^2} \left(\xi_k + 2 \left(\xi_k + \frac{U}{2} \right) z_k e^{-\beta U} + (\xi_k + U) z_k^2 e^{-\beta U} \right) \quad (3.17c)$$

$$C_4 = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k}{f_k^2} \left(1 + 2z_k e^{-\beta U} + z_k^2 e^{-\beta U} \right). \quad (3.17d)$$

Израз за *ентропију* по чвору решетке (у ознаци S) можемо писати [12]:

$$S := -\frac{1}{\Omega} \frac{\partial \Phi}{\partial T} = \frac{1}{T} (E - \rho \mu - \Phi), \quad (3.18)$$

односно, након уврштавања (3.7) и (3.12), за ентропију добијамо следећу релацију:

$$S = \frac{1}{T} \left(2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k \left[\varepsilon_k + \left(\varepsilon_k + \frac{U}{2} \right) z_k e^{-\beta U} \right]}{f_k} - \rho \mu \right) + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \ln(f_k) \quad (3.19)$$

Такође, видимо да и за ентропију важи $S = S(\beta, \rho) \equiv S(T, \rho)$.

На крају, испитаћемо и понашање броја двоструко попуњених енергијских стања у односу на укупан број чворова решетке са променом параметра интеракције, односно вредности U . Ову величину ћемо означити са $\mathcal{D}$ и дефинисати као:

$$\mathcal{D} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k}, -\sigma} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \frac{2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \quad (3.20)$$

Коришћењем досадашњих израза за термодинамички потенцијал, статистичку суму, за 1D систем ($\mathbf{k} \rightarrow \pm k$) добијамо:

$$\mathcal{D} = 2 \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} \frac{z_k^2}{f_k} e^{-\beta U}, \quad (3.21)$$

при чему ћемо се ограничити на случај полупопуњене валентне зоне ($\rho = 1$, односно $\mu = U/2$), с обзиром на појаву фазног прелаза метал-изолатор.

Дакле, у наставку ћемо размотрити резултате нумеричке интеграције одређених термодинамичких величина, користећи се при томе графичким приказом. С обзиром да се, као што ћемо ускоро видети, код свих термодинамичких величина јавља хемијски потенцијал μ и с обзиром да је ова величина функција температуре и фактора попуњености, биће корисно да се резултати ове величине прво представе. Погледајмо, дакле, у каквој међусобној зависности стоје хемијски потенцијал μ , фактор попуњености ρ и температура система $T = 1/\beta$.

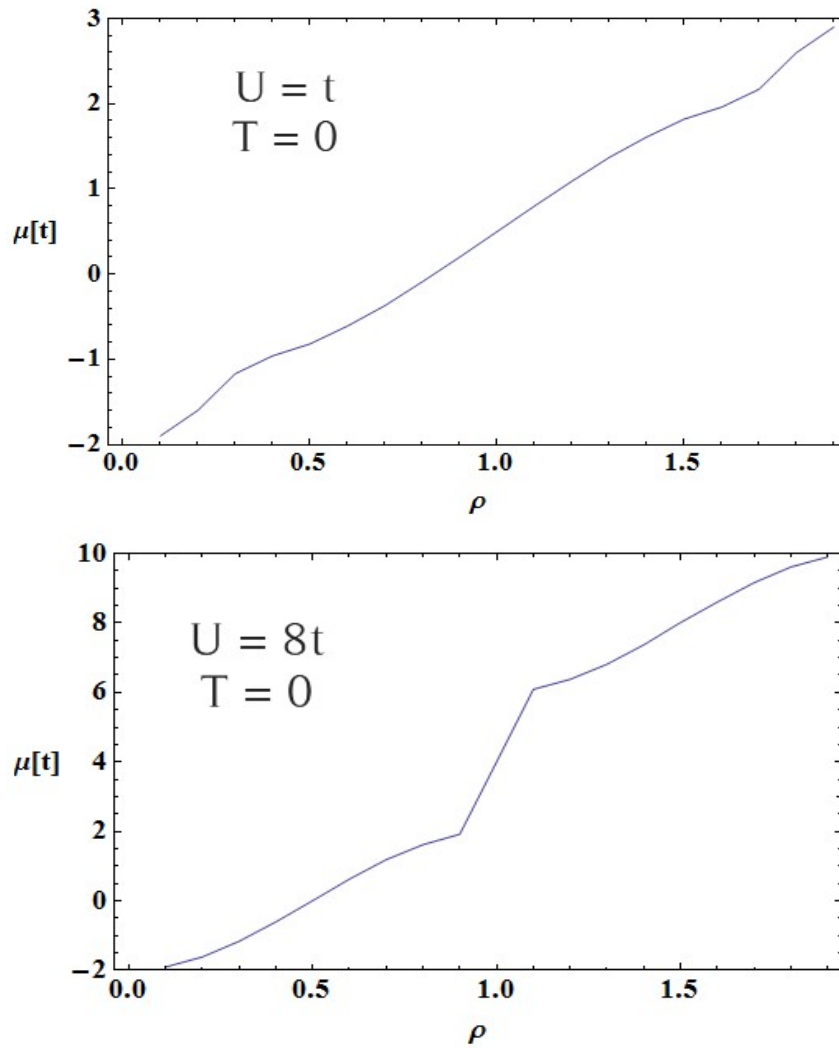
3.2 Фактор попуњености и хемијски потенцијал ХК модела

Погледајмо најпре понашање хемијског потенцијала μ са променом фактора попуњености ρ на унапред фиксираној температури T . За ово ће нам требати израз (3.9). Шта се дешава на температури апсолутне нуле? У том случају, израз под интегралом се може довести на облик

у ком ће интеграл бити могуће решити аналитички (слично и за остале ТД величине). Наиме, уколико између електрона влада одбојна Мотова интеракција ($U > 0$), добијамо да важи:

$$\rho = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} (\theta(\mu - \varepsilon_k) + \theta(\mu - \varepsilon_k - U)) , \quad T = 0, \quad (3.22)$$

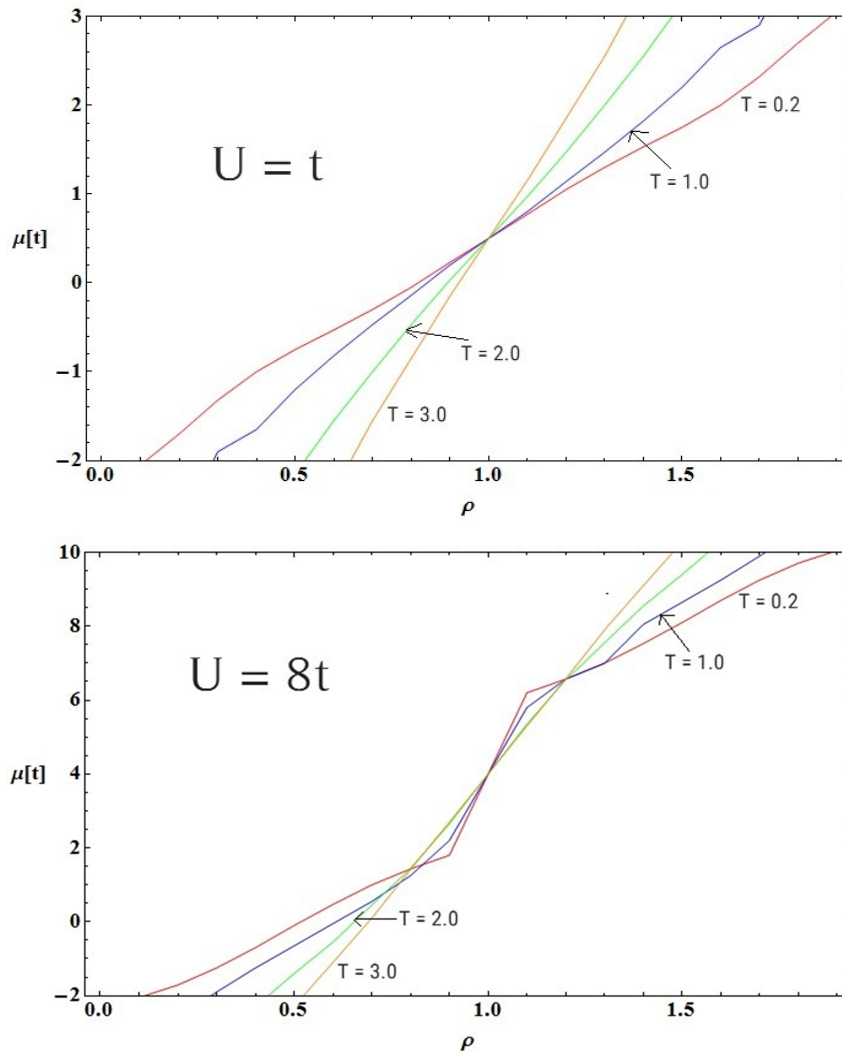
где је са $\theta(x)$ означена Хевисајдова степ функција [19]. Ова зависност се може приказати графички. При томе, треба направити разлику између два случаја: $U < W$ и $U > W$, где је $W = 4tD$ ширина валентне зоне (Глава 2). С обзиром да овде разматрамо једнодимензиони систем, узећемо $D = 1$. Изражавајући енергију у јединицама t , а температуру у јединицама t/k_B (k_B - Болцманова константа) [20], добијамо резултате као на Сл. 10.



Сл. 10: График зависности хемијског потенцијала једнодимензионог ($D = 1$) система и фактора попуњености на температури $T = 0$ за случај $U = t < W = 4t$ (горе) и $U = 8t > W = 4t$ (доле)

Као што можемо да видимо, у случају $U < W$ хемијски потенцијал се са променом попуњености решетке мења континуално, док при довољно јакој одбојној интеракцији, односно $U > W$, дешава се нагли пораст у околини вредности $\rho = 1$, након чега функција $\mu(\rho)$ наставља да расте.

Приликом добијања ових графика, коришћене су вредности фактора попуњености од 0.1 до 2, у корацима од 0.1. Оно што се такође може приметити, и то у оба случаја ($U < W$ и $U > W$) је и симетричност графика $\mu(\rho)$, која указује на симетрију честица у односу на шупљине, која постоји у самом хамилтонијану (видети (3.1)). Погледајмо сада шта се дешава са хемијским потенцијалом уколико расте температура у систему. Резултати су за неколико температура приказани графички на Сл. 11.



Сл. 11: График зависности хемијског потенцијала и фактора попуњености на температурама $T = 0.2, 1.0, 2.0$, и 3.0 , за случај $U = t < W = 4t$ (горе) и $U = 8t > W = 4t$ (доле)

Као што видимо, симетрија честица у односу на шупљине је сачувана⁴, а са порастом температуре се график функције $\mu(\rho)$ деформише, на тај начин да за више вредности T постаје све стрмији и све више наликује на праву. С обзиром да се у случају $U > W$ (доњи график) на апсолутној нули јасно примећује нагла промена у $\mu(\rho)$ на $\rho = 1$, овај нагли пораст на вишим температурама постаје све слабији, односно како се график приближава правој линији. Ову појаву објашњавамо тиме да на довољно високом температурама електрони увек поседују довољно енергије за савладавање

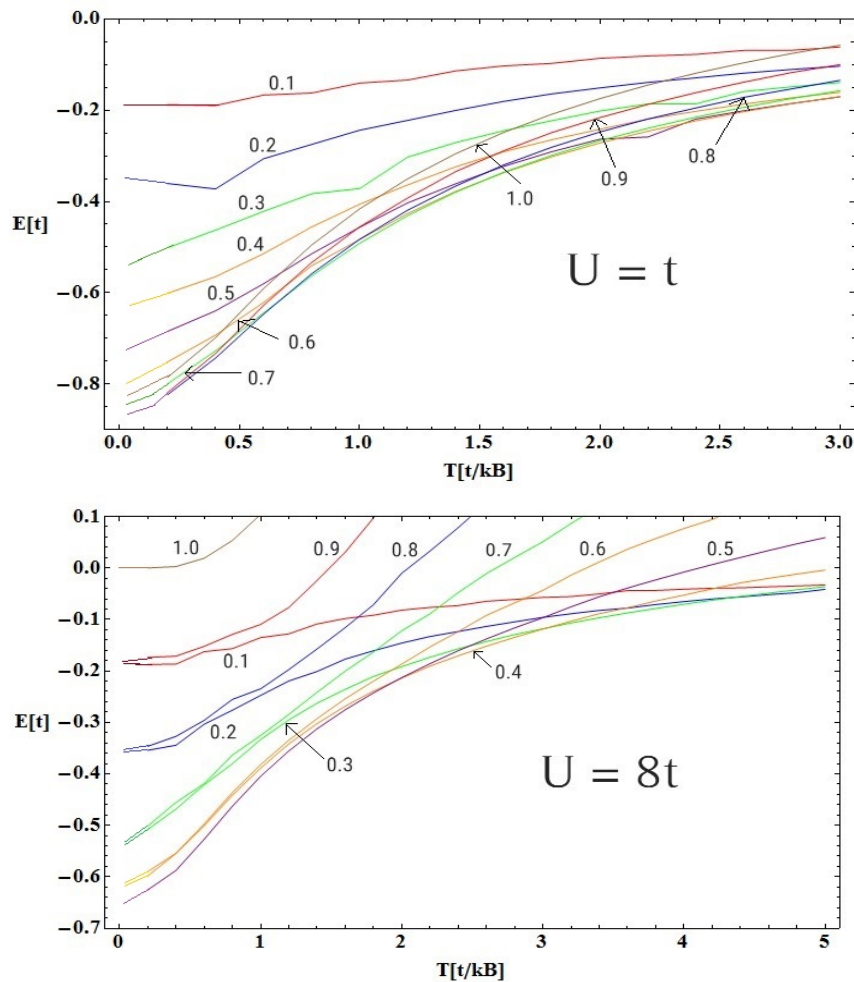
⁴Мисли се на симетричност графика $\mu(\rho)$ у односу на његову вредност на $\rho = 1$.

одбојне интеракције U , тако да електрони увек поседују могућност за кретање кроз решетку, услед чега изолаторска фаза одсуствује.

Сада, када нам је познато понашање вредности хемијског потенцијала са променом температуре и фактора попуњености, познате су нам и вредности μ за одређене вредности ових параметара⁵, тако да их можемо искористити за добијање осталих ТД величина. У наставку ћемо, за случај ХК модела за 1D систем, анализирати графичке резултате ТД величина које смо раније увели (Поглавље 3.1).

3.3 Резултати термодинамичких величина

Најпре ћемо дискутовати нумеричке резултате за енергију. Такође, као и у досадашњој анализи, направимо поређење случаја $U < W$ и $U > W$, без разматрања негативних вредности параметра интеракције, тј. $U < 0$. Резултати нумеричке анализе графички су приказани на Сл. 12.



Сл. 12: График зависности $E(T)$ за различите вредности ρ , за случај $U = t < W = 4t$ (горе) и $U = 8t > W = 4t$ (доле)

⁵ Детаљан списак вредности хемијског потенцијала 1D модела (μ) на различитим ρ и T су изложени у Додатку В овог рада.

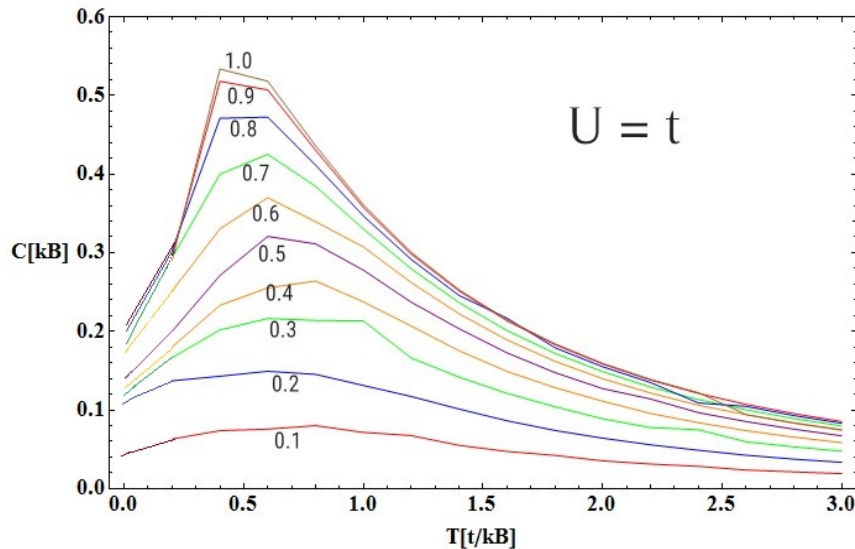
Нумеричка интеграција је обављена са температурским корацима 0.1 за $U < W$ и 0.2 за $U > W$ за концентрације електрона у опсегу од $\rho = 0.1$ до $\rho = 1$, са кораком 0.1.

Поређењем случајева $U < W$ и $U > W$, оно што прво јасно примећујемо је то да је у случају $U < W$ енергија увек негативна ($E < 0$ - везано стање), док у случају $U > W$ на довољно високим температурама може доћи и до позитивних вредности енергије ($E > 0$).

Како ово објашњавамо? Дакле, са порастом температуре, електрони повећавају своју кинетичку енергију. При довољно високим температурама, поседоваће и довољно високу вредност кинетичке енергије, која ће их све време држати на високим енергијама, услед чега они "успевају" да достигну и енергије $E > 0$ и да се на њима задрже⁶. За вредности $\rho \neq 1$, односно $\rho < 1$, постоје празна места у решетки, на које могу да дођу електрони, тако да за $E < 0$ такође постоје и доступне енергетске орбитале.

Затим, можемо да приметимо да се, у случају $U > W$, графици енергија $E(\rho)$ и $E(1 - \rho)$, како идемо ка нижим температурама, све више међусобно поклапају. Ово указује на симетрију шупљина у односу на честице (електроне), која, дакле, постаје егзактна на $T = 0$. Ово објашњавамо тиме што, на довољно ниским температурама, електрони не поседују довољно енергије како би савладали енергетску баријеру. Због тога, они ће се кретати само у доњој траци. У случајевима $\rho \neq \{0.5, 1\}$, уместо електрона можемо да пратимо кретање шупљина. Дакле, тада се праћење кретања електрона своди на праћење кретања шупљина. Уколико би важило $U < W$, енергетске баријере не би било и, самим тим, ситуација би била слична као и у случају $U > W$ на вишим температурама.

Даље, што се топлотног капацитета тиче, графички резултати су приказани на Сл. 13 и 14.

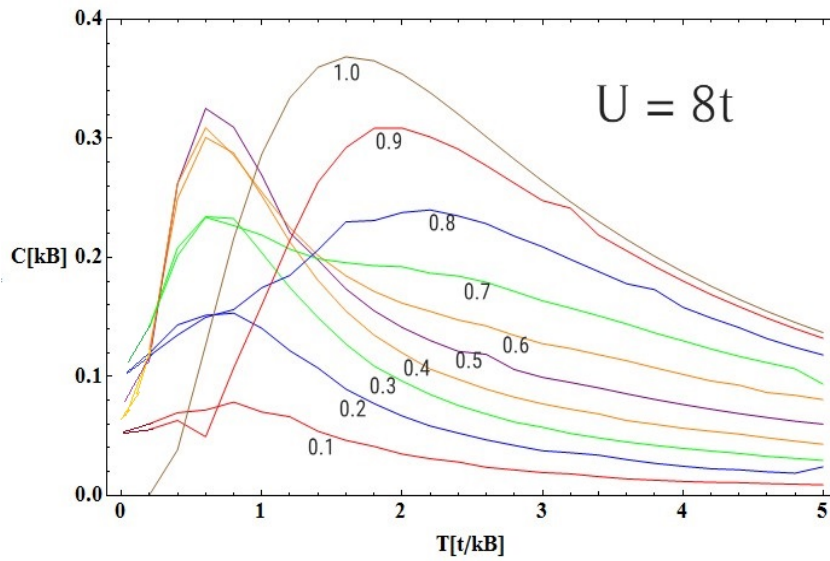


Сл. 13: График зависности $C(T)$ за различите вредности ρ , за случај $U < W$

Можемо да приметимо да у случају $U < W$ већим вредностима фактора попуњености одговарају и веће вредности C . Ово значи да се енергија E , коју смо претходно дискутовали, са порастом температуре (полазећи од апсолутне нуле) брже (интензивније) мења. Са графика на Сл. 13, видимо да је то заиста случај. Ово можемо објаснити тиме што при већем броју електрона имамо више честица које могу да располажу неком својом енергијом. На пример, при порасту температуре се, наравно, повећава енергија честица (електрона), што потврђују и добијени

⁶Према ХК хамилтонијану, енергетски губици су изостављени, односно занемарени.

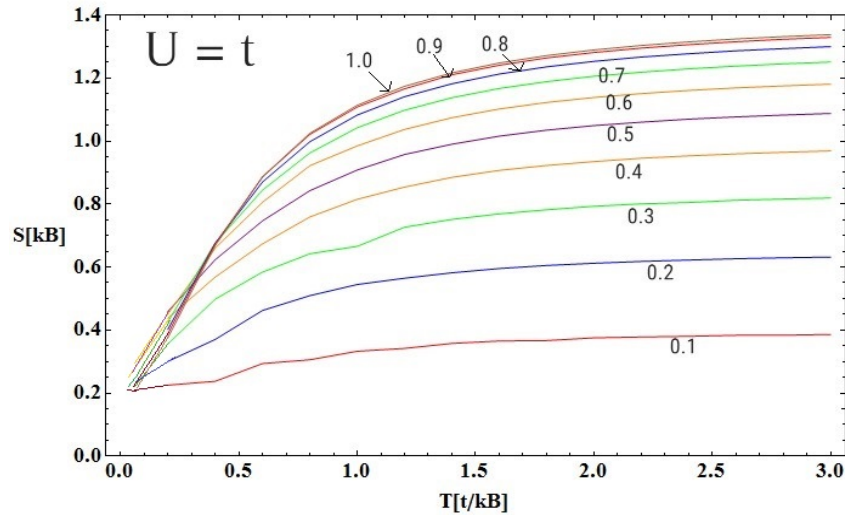
результати. Уколико је у систему више електрона, енергија се, у процесу повећавања температуре, брже повећава.



Сл. 14: График зависности $C(T)$ за различите вредности ρ , за случај $U > W$

Међутим, поређењем Сл. 14 са Сл. 13, видимо да ово важи само у случају $U < W$. Наиме, при довољно јакој одбојној интеракцији, и довољно високим температурама, ово престаје да важи (видети Сл. 14). Ово се дешава из већ претходно наведене чињенице да на веома ниским температурама долази до преклапања енергија $E(\rho)$ и $E(1 - \rho)$. На основу дефиниције (3.13), јасно је да ово правило мора важити и за топлотни капацитет. Дакле, при $T \rightarrow 0$ и $U > W$ важи $C(\rho) = C(1 - \rho)$.

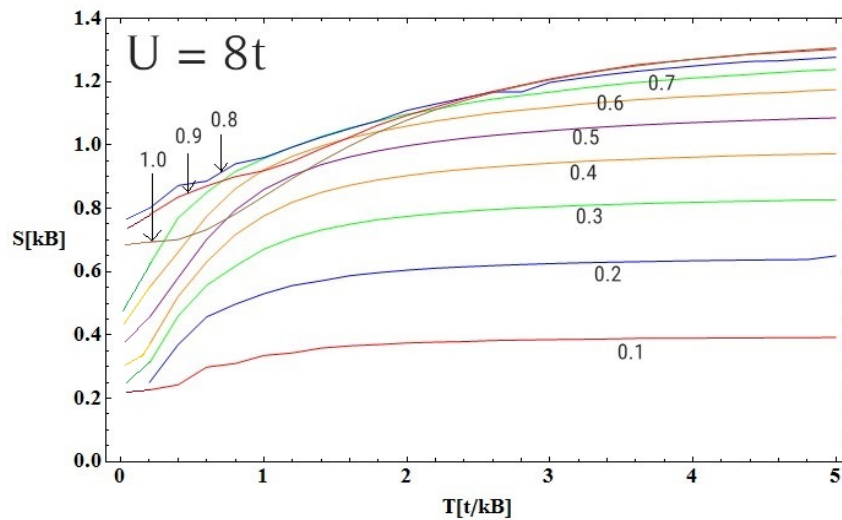
Затим, фазни прелаз метал-изолатор уочавамо у облику графика $C(T)$ за $U > W$ и $\rho = 1$ који, за разлику од свих осталих ситуација, пораст са повећањем температуре почиње да испољава тек приликом достизања одређене, довољно високе вредности температуре, с обзиром на присуство изолаторског стања, услед које се енергија електрона не повећава, све до успостављања довољно високе температуре у кристалној решетки. У свим осталим условима, топлотни капацитет показује пораст већ на самој апсолутној нули.



Сл. 15: График зависимости $S(T)$ за различные вредности ρ , за случај $U < W$

Погледајмо затим шта се дешава са ентропијом, обрачунаном по чвору решетке. Као што смо рекли, ознака коју користимо за ову величину је S , а дефиниција је дата изразима (3.18) и (3.19). На Сл. 15 и 16 је приказана температурска зависност ентропије за случајеве $U < W$ и $U > W$, редом.

Као што видимо, у случају $U < W$ већим вредностима ρ одговара већа вредност ентропије, док у случају $U > W$ ово престаје да важи на довољно ниским температурама, док у оба случаја видимо да ентропија расте са порастом температуре. Даље, при $T \rightarrow 0$ видимо да ентропија не пада на нулу⁷, већ има неку коначну вредност. Такође, можемо да уочимо одсуство правилности $S(\rho) = S(1 - \rho)$. Како објашњавамо овакво понашање на графицима?



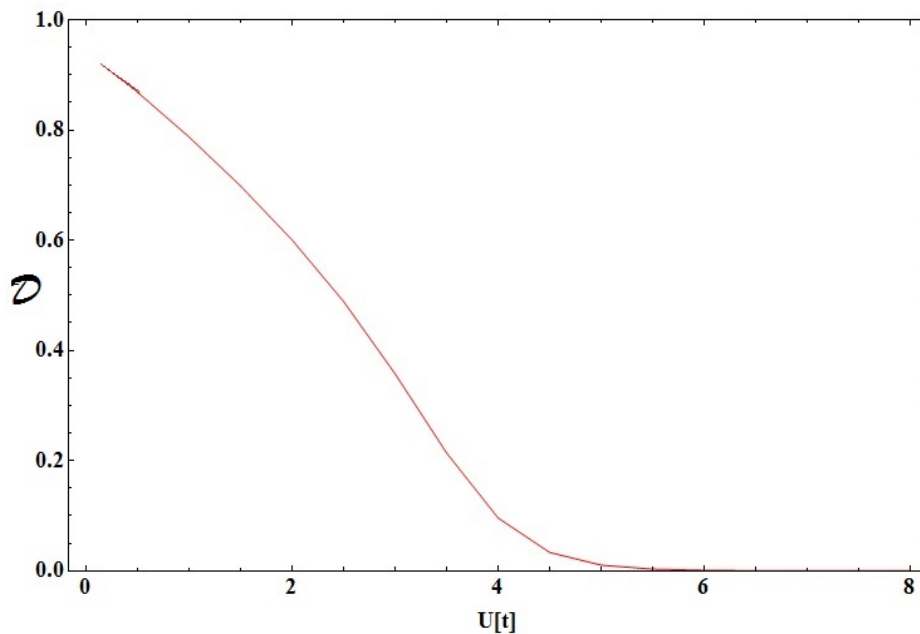
Сл. 16: График зависимости $S(T)$ за различные вредности ρ , за случај $U > W$

Пре свега, прво поменуто одступање у случају $U > W$ и $T \rightarrow 0$ потиче одатле што се ово

⁷Према *Нернстовој теореме* (Трећи закон термодинамике), ентропија система има нулту вредност на апсолутној нули, односно важи $S(T = 0) = 0$, [12].

одступање јавља и код енергије, која, према (3.18, улази у израз за ентропију. У анализи нумеричких резултата за енергију, истакли смо да нас управо ово доводи до одступања од правилности $\Delta\rho > 0 \rightarrow \Delta E > 0$, а што се онда одражава и на остале величине које зависе од енергије, а то је случај и са ентропијом. Међутим, зашто одступање изгледа баш тако као на слици? Да бисмо то објаснили, размотрићемо, пре свега, одступање од $S \rightarrow 0$ за $T \rightarrow 0$.

Наиме, одступање од нулте вредности за $T \rightarrow 0$ се објашњава чињеницом да ентропија има физички смисао мере неуређености у систему. Другим речима, што је систем неуређенији, ентропија система је већа и обрнуто. У области ниских температура ($T \approx 0$), систем је најуређенији, с обзиром да су електрони мање покретни, тако да практично задржавају своје првобитно стање, односно знатно мање прелазе из једног стања у друго. Наиме, што је већи број стања која електрони имају на располагању, то је систем неуређенији, односно ентропија је све већа. Уређеност је највећа на најнижим температурама, а посебно у случају $\rho = 1$ уз $U > W$, где се јавља изолаторско стање, у ком практично нема прелазака електрона између стања. Међутим, с обзиром на присуство огромне дегенерације (у односу на спинску оријентацију) у систему у овим условима, ентропија ипак не пада на нулу, иако је уређеност знатно већа у поређењу са осталим случајевима. Из тог разлога се и дешава одступање од правилности $\Delta\rho > 0 \rightarrow \Delta S > 0$.



Сл. 17: График зависности $\mathcal{D}(U)$ једнодимензионог ($D = 1$) система, за случај $\rho = 1$

На крају, погледајмо шта се дешава са степен двоструке попуњености $\mathbf{k}$ -стања, који смо дефинисали изразом (3.20). Као што смо раније нагласили, случај од интереса за анализу је управо полупопуњена валентна орбитала ($\rho = 1$) једнодимензионе решетке, при чему ћемо размотрити случај довољно ниских температура. Наиме, анализом енергије система, уверили смо се да у овом случају изолаторска фаза опстаје само при довољно ниским температурама. Погледајмо график на Сл. 17.

Као што смо и очекивали, када параметар Мотове интеракције U достигне вредност једнаку ширини валентне зоне ($W = 4t$ за једнодимензиони систем ($D = 1$)), вредност $\mathcal{D}$ пада на веома мале вредности, блиске нули. У супротно, у лимесу $U \rightarrow 0$ се приближавамо систему неинтерагујућих честица, тако да ће електрони тежити да, у валентној зони, попуне сваку орбиталу,

полазећи од најниже енергије, услед чега важи $\lim_{U \rightarrow 0} \mathcal{D}(U) = 1$.

Као што смо видели, полазећи од хамилтонијана ХК модела, детаљна анализа термодинамичких величина је спроведена без потребе за нумеричком анализом⁸. Наиме, захваљујући једноставном облику хамилтонијана у $\mathbf{k}$ -простору, анализа је спроведена, у знатној мери⁹, егзактним путем.

У наредној глави, показаћемо на који начин се ХК модел може искористити за анализу појаве високотемпературске суперпроводности. Наиме, покушаћемо да добијемо енергетски спектар, проверимо аналогију са стандардним (БЦС) суперпроводником и докажемо да специфичности произилазе из појаве међуелектронских корелација.

⁸На пример, коришћењем неке компјутерске симулације, као што би то морало бити урађено уколико бисмо кренули од хамилтонијана Хабардовог модела.

⁹Једини изузетак представља извођење нумеричке интеграције, због немогућности аналитичког решавања појединих интеграла.

Глава 4

Јако корелисани систем суперпроводника

Суперпроводници су материјали који поседују својство да им се специфична отпорност (самим тим и електрични отпор) нагло спушта на приближно нулту вредност (у границама експерименталне грешке) кад се температура спусти на одређену вредност. Температура на којој се ово догађа носи назив *критична температура*, или *температура фазног прелаза*. Дакле, можемо рећи да одређени метали (проводници) на овој температури доживљавају фазни прелаз у суперпроводно стање. Токм низа година формулисана је више теорија са намером да се ова објасни. Као најуспешнију и вероватно најпрецизнију од њих треба свакако издвојити теорију коју су формулисали научници Бардин, Купер и Шриффер 1957. године и која, као што смо раније споменули, носи назив **БЦС теорија**. Међутим, ова теорија се показала успешном само у случају извесног броја оваквих материјала. Конкретније речено, суперпроводност је помоћу ове теорије објашњена само код материјала са малим вредностима критичне температуре¹. На пример, за живу (Hg) ова температура износи $4,2K$, за кадмијум (Cd) вредност је $0,52K$ и, на пример, за легуру ниобијум-нитрид (NbN) критична температура је $16K$. Наиме, током 20. века је откривен изузетно велик број материјала са необично високим² вредностима критичне температуре. Посебну групу чине тзв. *купрати* - комплексна једињења која у себи садрже оксиде бакра [4], код којих су забележене температуре са вредностима чак и до $110 K$ [6].

У овој Глави ћемо најпре изложити основне саставне елементе БЦС теорије суперпроводности. Затим ћемо резултате ове теорије да повежемо са досадашњим резултатима у оквиру ХК модела, како бисмо могли, након свега тога, да искористимо ХК модел за описивање ексцитација карактеристичних за високотемпературне суперпроводнике.

4.1 Основне идеје и неки резултати БЦС теорије

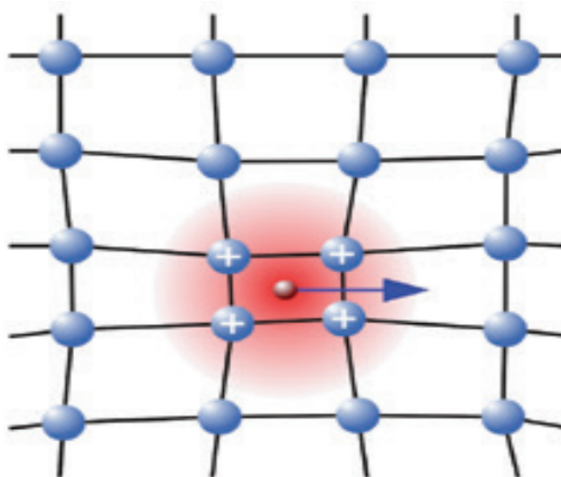
Испоставља се, наиме, да између ниско- и високотемпературских суперпроводника постоји велика разлика, али да постоје и елементи теорије који су у међусобној *аналогији* [4], због чега ће бити корисно изложити неке појединости БЦС теорије, пре него што будемо званично прешли на теорију високотемпературских суперпроводника.

¹Под *малом* вредношћу температуре подразумевамо да је у питању температура веома блиска апсолутној нули ($T \approx 0 K$).

²Кад кажемо *висока* вредност, мислимо на поређење са првобитно измереним (наведеним) вредностима.

Према БЦС теорији, суперпроводна фаза која се јавља и опстаје на ниским температурама, догађа се услед *електрон-фонон* интеракције³. Изложимо, најпре, идеју оваквог приступа у објашњавању суперпроводности.

Замислимо да у тачку простора у решетки наиђе електрон у кретању. Услед негативног наелектрисања, овај електрон ће изазвати електростатичко привлачење (позитивно наелектрисаних) јона решетке, што ће узроковати деформацију решетке (Сл. 18). Јони кристалне решетке имају много већу масу у односу на масу коју имају електрони. Из тог разлога ће, након што електрон напусти овај положај, јон неко време боравити у овом стању (изван свог равнотежног положаја). Ово ће довести до повећања количине позитивног наелектрисања у области где се налазио електрон. Због тога, ка овом делу простора могу да буду привучени и електрони из остатка решетке. Замислимо да је наишао један такав (други) електрон и био привучен ка том делу простора. Шта ће се догодити? Дакле, с обзиром да је електрон привучен ка првом електрону, јасно је да је дошла до изражаја нека врста *привлачне* интеракције, иако се електрони међусобно електростатички одбијају [8]. На тај начин, дошло је до формирања *електронских парова*. Овај феномен груписања у парове је познат као *Куперов феномен*, а парови електрона по њему носе назив *Куперови парови* [8].



Сл. 18: Електрон-фонон интеракција. Плавим круговима су представљени (позитивно наелектрисани) јони решетке, црвена тачка означава електрон, а стрелица означава (тренутни) смер кретања електрона. Црвеном бојом је означена област израженог привлачења електрона и јона.

Горе описана појава важи и за случај ниских температура. Са порастом температуре система долази до све интензивнијег осциловања чворова решетке, што доводи до све бржег померања јона око својих равнотежних положаја, што значи да би на довољно високим температурама⁴ могло да се деси да јони напусте област "првог" електрона пре доласка другог, услед чега се Куперов пар не би формирао.

Ако сада искористимо чињеницу да је феномен суперпроводности примећен код елемената који у нормалној⁵ фази имају већу специфичну отпорност у односу на метале који не доживљавају овај феномен, идеја коришћења динамике решетке у објашњење појаве постаје јасна.

Да бисмо могли да направимо поређење резултата ХК модела са БЦС теоријом и тако проверимо

³Под фононом подразумевамо квант осциловања кристалне решетке [10, 12].

⁴Конкретна вредност ове температуре зависи од конкретног материјала.

⁵Мисли се на фазу која одговара одсуству суперпроводности.

постојања аналогних особина, најпре ћемо изложити кључне резултате који важе у случају класичног суперпроводника. У наредном одељку ће бити приказани само крајњи резултати, док се детаљан поступак долажења до резултата налази у Додатку С овог рада.

4.1.1 Неки важни резултати БЦС теорије

Погледајмо најпре резултат за енергију везаног стања једног Куперовог пара. Као што смо рекли, идеја БЦС теорије јесте да посматра појаву спаривања електрона посредством фонона решетке, који се јављају као последица електростатичког привлачења између електрона и јона. Као резултат, други електрон бива привучен ка првом, што нам даје исти резултат као да је између ових електрона деловала некаква привлачна сила. Уколико бисмо параметар ове привлачне интеракције означили са g , може се показати да за енергију (једног) формираног Куперовог пара важи следећи израз [8]:

$$E = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{gN(0)}}, \quad (4.1)$$

где је $N(0)$ густина енергијских стања на $E = E_F$ (E_F - Фермијев ниво), $\hbar\omega_D$ максимална енергија осциловања фонона на датој температури, при чему је одговарајућа кружна фреквенција ω_D позната под називом *Дебајева фреквенција* [12]. С обзиром да је $\exp(-1/gN(0)) > 0$, као и $\omega_D > 0$ [13], следи да је $E < 0$, тако да је стање са Куперовим паром стабилније, односно E одговара енергији везаног стања. Другим речима, формирање Куперовог пара *снижава* енергију система.

Израз (4.1) одговара енергији *само једног, појединачног* Куперовог пара. У реалним системима је појава само једног Куперовог пара скоро немогућа. Наиме, увек их има више. Стога, да бисмо дошли да израза за енергију којом бисмо обухватили све Куперове парове, потребно је кренути од хамилтонијана система проводних (покретљивих, скоро⁶ слободних) електрона, са урачунавањем интеракције (ефективног) привлачења, односно спаривања. Тако долазимо до *БЦС хамилтонијана*, који има облик:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow}, \quad (4.2)$$

при чему величина $V(\mathbf{k}, \mathbf{p})$ има исти физички смисао као параметар g у (4.1), тако да ћемо ову ознаку и користити, односно $V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \rightarrow g$. Дакле, можемо рећи да мера у којој се електрони спарују не зависи од $\mathbf{k}$ -стања у ком се електрони налазе.

У даљој анализи, показује се погодним да се уведу тзв. *оператор креације и аниhilације електронског пара* [4]:

$$\hat{\Delta}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad \hat{\Delta} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (4.3)$$

Методом дијагонализације хамилтонијана помоћу тзв. *uv - трансформације* $\hat{H}_{BCS}$ (видети Додатак С), за енергију електрона у $\mathbf{k}$ -стању (у ознаци $E_{uk}(\mathbf{k})$) добијамо:

$$E_{uk}(\mathbf{k}) = E_0 + E_{\mathbf{k}}, \quad (4.4)$$

где је $E_{\mathbf{k}}$ енергија побуђења (ексцитације) у $\mathbf{k}$ -стању, за коју се показује да има облик:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}, \quad (4.5)$$

⁶Не треба изгубити из вида да су електрони окружени потенцијалом јона решетке.

док је E_0 енергија основног стања, одређена изразом

$$E_0 = \sum_{\mathbf{k}} \left(\xi(\mathbf{k}) - E_{\mathbf{k}} + \Delta_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \right), \quad (4.6)$$

где је средња вредност $\langle \dots \rangle$ узета по хамилтонијану $\hat{H}_{BCS}$ на некој температури система T . У изразима (4.5) и (4.6) са $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ је означен тзв. *енергијски процеп*, односно разлика у енергији која постоји услед побуђења електрона.

Даље, за функцију стања БЦС суперпроводника (у (Дираковој) ознаци $|\Psi_{BCS}\rangle$) се показује да важи [8]:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle, \quad (4.7)$$

где су $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ фактори коришћени приликом налажења дијагоналне форме хамилтонијана $\hat{H}_{BCS}$.

За величину $\Delta_{\mathbf{k}}$ се показује да зависи од температуре $T = 1/\beta$ и да важи тзв. *једначина енергијског процепа*:

$$1 = -gN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} dE \frac{1}{\sqrt{E^2 + |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\beta\sqrt{E^2 + |\Delta|^2}}{2}\right), \quad (4.8)$$

тако да је $\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta_{\mathbf{k}}(T)$. Од посебног значаја у БЦС теорији је специјалан случај $\Delta(T = 0) \equiv \Delta(\beta = \infty)$. Тада се BCS⁷, с обзиром да важи $\lim_{x \rightarrow \infty} \tanh x = 1$, своди на

$$1 = -gN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} dE \frac{1}{\sqrt{E^2 + |\Delta|^2}}. \quad (4.9)$$

Вредност $\Delta_{\mathbf{k}}$ може да има позитивну, али и негативну вредност, тако да је од значаја посматрати *укупан* енергијски процеп.

Најзад, једна од најважнијих величина у теорији суперпроводности је и сама критична температура (у ознаци T_C), на којој и долази до фазног прелаза метал-суперпроводник. Израз за критичну температуру можемо добити узимајући $\Delta = 0$, с обзиром да је то температура на којој се појављује суперпроводно стање, а самим тим се појављује и енергијски процеп.

У БЦС теорији постоји и тзв. *универзални однос енергијског процепа на $T = 0$ K* (у ознаци $2\Delta(0)$) и *критичне температуре*. Вредност овог односа се добија директно из једначине енергијског процепа (В.49) и износи (приближно) [4, 8]:

$$\frac{2\Delta(0)}{T_c} \approx 3,53. \quad (4.10)$$

Испоставиже се да, у случају високотемпературског суперпроводника, описаног ХК моделом хамилтонијана, бројна вредност односа ове две величине у великој мери одступа од вредности наведене у (4.10), односно универзалне БЦС вредности [4].

Ово су били неки важни резултати, којима су представљене величине које се односе на тзв. *конвенционалне* суперпроводнике. Експерименталне вредности ових величина су показале веома добро слагање са теоријом, односно БЦС теорија се показала исправним након упоређивања са експерименталним резултатима [8].

Међутим, као што смо на почетку Главе нагласили, уколико бисмо хтели да применимо изложене теоријске резултате на случај средина које испољавају суперпроводност на високим⁷

⁷Уколико бисмо извршили поређење са собном температуром, ово су и даље веома ниске температуре, али су много веће у поређењу са оним које су измерене у случају конвенционалних (БЦС) суперпроводника чак за читав један ред величине [6].

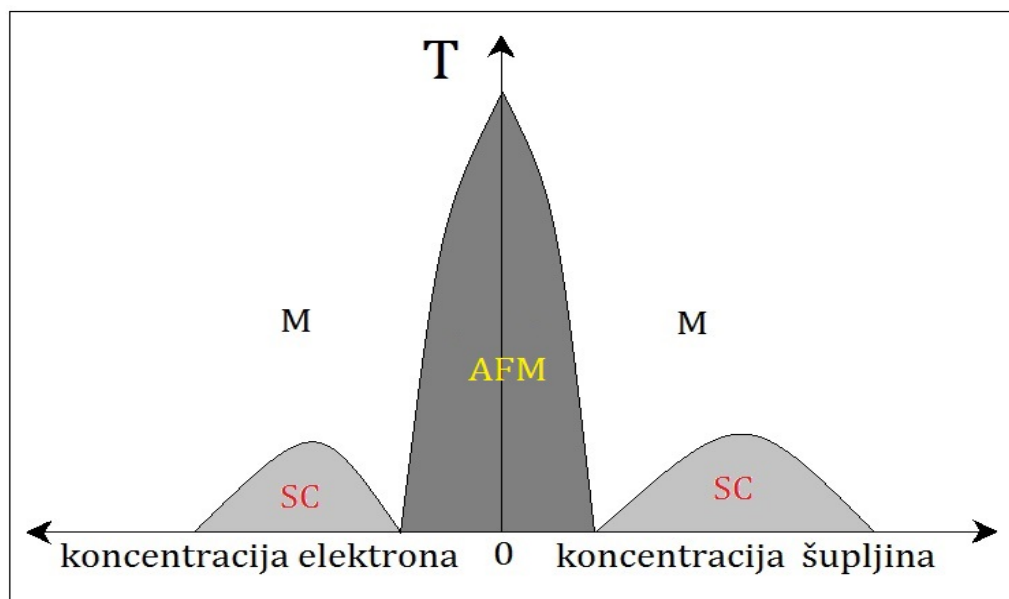
температурама, морали бисмо да применимо другачији теоријски приступ. Од сада ћемо користити скраћеницу *ВТС* за *високотемпературски суперпроводник*.

У наредном поглављу ћемо се на кратко осврнути на неке експерименталне податке који се односе на нека купратна једињења, за која је потврђено да на температурама реда величине 10^2 K прелазе у суперпроводно стање.

4.2 Основне експерименталне карактеристике

У овом поглављу ћемо, дакле, да истакнемо неке кључне особине које поседују високотемпературски суперпроводници (ВТС) и да се уверимо да се ХК модел, који смо у Главама 2 и 3 детаљно описали, заиста може користити као модел једног оваквог система.

Кључна особина је, наиме, сама чињеница да се ВТС понашају као типични Мотови изолатори. Другим речима, показује се да се са променом концентрације електрона и температуре могу постићи различита стања система, у која спадају управо сва она која смо претходно анализирали, а то су: метал (обичан, без електронских парова), изолатор и суперпроводник. Такође, изолаторско стање које испољавају ВТС има управо антиферромагнетни карактер. Сви ови процеси се могу приказати на једном месту помоћу одговарајућег *фазног дијаграма*. Фазни дијаграм типичног ВТС система има облик као на Сл. 19 [6,21].



Сл. 19: Фазни дијаграм типичног високотемпературског суперпроводника: М - метална фаза (проводник без електронских парова), SC - суперпроводна фаза, AFM - антиферромагнетна (изолаторска) фаза;

На вертикалној оси је, дакле, температура система T , док се дуж хоризонталне осе може пратити како се мења концентрација електрона/шупљина⁸, односно њихов број у односу на запремину кристала (број чворова). У ХК моделу, ова вредност управо одговара фактору попуњености

⁸Под шупљином ћемо подразумевати, како је и раније наглашеног (Глава 2), непопуњено место (чвор) у решетци. Другим речима - што је мање електрона, то је више шупљина у систему.

ρ . Одавде се може закључити да нултој концентраци одговара вредност $\rho = 1$, док је са леве стране $\rho > 1$, а са десне стране $\rho < 1$.

Посматрајући фазни дијаграм, уочавамо да се антиферомагнетна изолаторска фаза појављује управо кад је $\rho = 1$, као што смо раније добили разматрањем ХК модела. Дакле, уколико бисмо за описивање ВТС хтели да користимо ХК модел, морали бисмо да посматрамо случај $U > W$. Такође, видимо да се суперпроводна фаза јавља за $\rho < 1$ и $\rho > 1$. С обзиром да смо у Глави 2 доказали да су случајеви $\rho < 1$ и $\rho > 1$ међусобно еквивалентни, посматраћемо само случај $\rho < 1$. Иначе, и сам фазни дијаграм, као што можемо видети, испољава симетрију⁹ у односу на вредност $\rho = 1$, што нам додатно потврђује да је довољно посматрати $0 < \rho \leq 1$. Дакле, у даљој анализи ВТС, применићемо ХК модел и разматрати случај $U > W$ и $\rho < 1$.

4.3 ХК модел и високотемпературски суперпроводници

У Поглављу 2.2, у Одељку 2.2.3, објаснили смо изглед основног стања система описаног помоћу ХК модела хамилтонијана. Такође, у Глави 3 смо, анализом нумеричких резултата за случај једнодимензионог и дводимензионог модела приметили одсуство везаног стања у ком постоје спарени електрони, а што смо закључили анализом електронске корелационе функције $S_0(\mathbf{k})$ и уочили њен кратак домет.

Међутим, даље се поставља питање - шта ако бисмо хамилтонијану ХК додали још један члан, којим би спаривање електрона било укључено у енергији система? Да ли би, и под којим условима, појава везаног стања са спареним електронима тада била могућа и, ако је одговор да, да ли постоје неке специфичности у односу на стандардно (БЦС) основно стање суперпроводника?

Да бисмо ово испитали, за почетак ћемо, дакле, хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$ допунити још једним чланом, који, као што смо рекли, укључује појаву парова електрона (у ознаци $\hat{H}_{\text{par}}$). Дакле, хамилтонијан система постаје:

$$\hat{H}_{HK} \rightarrow \hat{H}_{HK} + \hat{H}_{\text{par}}, \quad (4.11)$$

при чему $\hat{H}_{\text{par}}$ има исти облик као последњи члан у (4.2). Дакле, експлицитним записом свих чланова, хамилтонијан система има облик:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} - \frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow}. \quad (4.12)$$

Дакле, узели смо у обзир привлачну особину *ефективне* међуелектронске интеракције, односно $g > 0$. Као што можемо видети, хамилтонијан (4.12) има облик БЦС хамилтонијана са додатним чланом Мотове одбојне интеракције (присуство параметра U), односно

$$\hat{H} = \hat{H}_{BCS} + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}, \quad (4.13)$$

са евентуалном разликом у енергијској области деловања¹⁰ оператора $\hat{\Delta}^\dagger$ и $\hat{\Delta}$. Као што смо видели у Поглављу 4.2, купратни суперпроводници поседују приближно дводимензиону структуру,

⁹У већини конкретних система ВТС, ова симетрија није идеална, али ћемо у даљој анализи претпоставити да јесте, с обзиром да одступања од ове симетрије неамју утицаја на понашање система са квалитативне тачке гледишта [6].

¹⁰Наиме, у стандардној БЦС теорији суперпроводности, познато је да постоји утицај електрон-фонон интеракције, услед чега се за интервал енергије Куперових парова узима интервал од $-\hbar\omega_D$ до $\hbar\omega_D$. С обзиром да, у купратним суперпроводницима механизам настајања суперпроводности није познат, такође не морају да важе ни ове границе интеграције.

односно постоје слојеви, односно равни које чине атоми бакра (Cu) и кисеоника (O), између којих постоји много јача интеракција у односу на интеракцију између суседних слојева, чиме је оправдано коришћење дводимензионог модела хамилтонијана, уколико је предмет разматрања један од купрата. Даље, с обзиром на особину фазног прелаза метал-изолатор, детаљно описану у Поглављу 2.3, можемо да закључимо да ХК модел хамилтонијана описује јако корелисан систем (у произвољној димензији D), у којем се испољава појава Мотовог изолаторског стања са променом параметра интеракције U и/или фактора попуњености решетке ρ . Може се, дакле, рећи да ХК модел представља неку врсту *прототипа Мотовог изолатора*. Ова особина је такође запажена код разних узорака купрата. Другим речима, 2D модел ХК хамилтонијана заиста одговара моделу купрата. Питање настанка и стабилности суперпроводне фазе у оваквим системима се, према томе, испитује управо "додавањем" електронских парова чланом $\hat{H}_{par}$.

У наставку Поглавља ћемо одредити карактеристике суперпроводне фазе, по аналогији са Поглављем 4.1, само користећи се ХК моделом хамилтонијана и његовим основним стањем (видети Поглавље 2.3).

4.3.1 Енергија везаног стања електронских парова ХК модела

Полазимо од хамилтонијана (4.12), којег ћемо записати у облику:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} - \frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{p}}, \quad (4.14)$$

где је уведена ознака $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}$, односно $\hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} = (\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger})^{\dagger}$, са циљем краћег записа. Облик основног стања ХК модела смо добили у Поглављу 2.3 и оно износи:

$$|\Psi\rangle_{HK} = \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} (\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma(\mathbf{k})}^{\dagger}) \prod_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_2} (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}) |0\rangle, \quad (4.15)$$

док је област $\mathcal{O}_0$ празна, односно ту се налазе непопуњена електронска стања. Као што смо рекли, идеја је испитати одзив система ХК модела на присуство члана $\hat{H}_{par}$, односно на појаву електронских парова какви су се појавили у БЦС теорији. На основу (4.15), видимо да оператори $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ не могу деловати на $\mathbf{k}$ стања из области $\mathcal{O}_2$, већ само на $\mathcal{O}_0$ и $\mathcal{O}_1$. Може се, међутим, показати да ће доприноси електронских парова из области $\mathcal{O}_1$ бити поништени услед важења $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = 1/2 + 1/2 = 1$, за $\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1$.

Испитајмо, дакле, шта се дешава када стању ((4.15)) електронске парове, односно какав то има утицај на енергију и функцију стања. Додавањем парова електрона, од овог стања добијамо ново стање (означимо га са $|\Psi\rangle_{par}$). Ово стање можемо написати у облику развоја по стањима $|\Psi\rangle_{HK}$ може се јавити електронски пар са неком вероватноћом. Међутим, вероватноћа за стања $\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0$, која су у потпуности празна, не мора бити једнака истој за $\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1$, тако да ћемо писати:

$$|\Psi\rangle_{par} = \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \alpha_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |\Psi\rangle_{HK} + \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \beta_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |\Psi\rangle_{HK}, \quad (4.16)$$

Користећи чињеницу да сваки од оператора креације и анихилације парова електрона делује у одређеном (свом) тренутку времена (у ознаци τ), јасно је да овде имамо посла са временски зависним дејством, тако да ћемо до енергије електронских парова доћи методом једначина кретања за оператор $\hat{b}_{\mathbf{k}}$, односно $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$. Једначина кретања за оператор $\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ гласи¹¹:

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} \hat{b}_{\mathbf{k}} = [\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{H}], \quad (4.17)$$

¹¹С обзиром да се једначина кретања за један од оператора добија простим адјунговањем, показује се довољним да размотримо само једначину кретања једног од њих.

где је $\hat{H} = \hat{H}_{HK} + \hat{H}_{par}$. Дакле, за коефицијенте $\alpha_{\mathbf{k}}$, односно $\beta_{\mathbf{k}}$, у развоју (4.16) важи $\alpha_{\mathbf{k}} = \alpha_{\mathbf{k}}(\tau)$ (аналогно, $\beta_{\mathbf{k}} = \beta_{\mathbf{k}}(\tau)$), односно временски су зависни. С обзиром да је физички смисао коефицијента $\alpha_{\mathbf{k}}$ (односно $\beta_{\mathbf{k}}$) управо вероватноћа да се формира електронски пар са електронима у стању $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ у области $\mathcal{O}_0$ (односно $\mathcal{O}_1$) и да хоћемо да и "нова" функција стања нема експлицитну временску зависност, као што нема и $|\Psi\rangle_{HK}$, временску зависност коефицијената $\alpha_{\mathbf{k}}$ и $\beta_{\mathbf{k}}$ пишемо у облику:

$$\alpha_{\mathbf{k}}(\tau) = \alpha_{\mathbf{k}}(0)e^{\frac{i}{\hbar}E\tau}, \quad \beta_{\mathbf{k}}(\tau) = \beta_{\mathbf{k}}(0)e^{\frac{i}{\hbar}E\tau}. \quad (4.18)$$

Вратимо се на једначину кретања (4.17) и одредимо комутатор са десне стране једнакости. Тривијалним поступком, коришћењем (4.14), добија се:

$$[\hat{b}_{\mathbf{k}}, \hat{H}] = (2\xi(\mathbf{k}) + U(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}))\hat{b}_{\mathbf{k}} - \frac{g}{\Omega}(\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) \sum_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}, \quad (4.19)$$

где сума у последњем члану са десне стране једнакости може да иде, или по области $\mathcal{O}_0$, или по области $\mathcal{O}_1$ реципрочног простора.

Дакле, једначина кретања за оператор $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ сада има облик:

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} \hat{b}_{\mathbf{k}} = (2\xi(\mathbf{k}) + U(\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}))\hat{b}_{\mathbf{k}} - \frac{g}{\Omega}(\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) \sum_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}. \quad (4.20)$$

Даље, с обзиром на чињеницу да оператори $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger$ и $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ делују на стање $|\Psi\rangle_{HK}$ и од њега праве $|\Psi\rangle_{par}$ и, с обзиром на ортонормираност стања $|\Psi\rangle_{HK}$, односно важење израза: ${}_{HK}\langle\Psi|\Psi\rangle_{HK} = 1$, следи да је у једначини кретања ((4.20)) неопходно деловати са леве стране стањем $|\Psi\rangle_{HK}$ (односно одговарајућим бра-вектором), а са десне $|\Psi\rangle_{par}$, с обзиром да оператор $\hat{b}_{\mathbf{k}}$ анихилира електронски пар. Дакле, деловањем помоћу ових стања на описан начин, једначина кретања (4.20), коришћењем (4.16), постаје:

$$\left(i\hbar \frac{d}{d\tau} - 2\xi(\mathbf{k}) - U\langle\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle\right) \alpha_{\mathbf{k}}(\tau) = -\frac{g}{\Omega}(\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) \sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_0} \alpha_{\mathbf{p}}(\tau), \quad (4.21a)$$

$$\left(i\hbar \frac{d}{d\tau} - 2\xi(\mathbf{k}) - U\langle\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle\right) \beta_{\mathbf{k}}(\tau) = -\frac{g}{\Omega}(\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} - \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) \sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_1} \beta_{\mathbf{p}}(\tau), \quad (4.21b)$$

где смо са $\langle \dots \rangle$ скраћено означили средњу вредност у стању $|\Psi\rangle_{HK}$. Сада, након сређивања средњих вредности са десне стране обе једнакости (4.21) и с обзиром на временску зависност облика (4.18), једначине (4.21) постају:

$$(E - 2\xi(\mathbf{k}) - U\langle\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle) \alpha_{\mathbf{k}}(\tau) = -\frac{g}{\Omega}(1 - \langle\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle) \sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_0} \alpha_{\mathbf{p}}(\tau), \quad (4.22a)$$

$$(E - 2\xi(\mathbf{k}) - U\langle\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle) \beta_{\mathbf{k}}(\tau) = -\frac{g}{\Omega}(1 - \langle\hat{n}_{\mathbf{k}} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle) \sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_1} \beta_{\mathbf{p}}(\tau). \quad (4.22b)$$

Затим, ако поделимо обе једнакости заградом која фигурише на левој страни уз $\alpha_{\mathbf{k}}$, односно $\beta_{\mathbf{k}}$ и извршимо сумирање $\sum_{\mathbf{k}}$ по одговарајућој области ($\mathcal{O}_0$ за $\alpha_{\mathbf{k}}$, односно $\mathcal{O}_1$ за $\beta_{\mathbf{k}}$), уз промену ознаке ($\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{p}$) са леве стране обе једнакости, у циљу јаснијег поређења, следи:

$$\sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_0} \alpha_{\mathbf{p}}(\tau) = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \frac{1 - \langle\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle}{E - 2\xi(\mathbf{k}) - U\langle\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle} \sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_0} \alpha_{\mathbf{p}}(\tau), \quad (4.23a)$$

$$\sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_1} \beta_{\mathbf{p}}(\tau) = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \frac{1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle}{E - 2\xi(\mathbf{k}) - U \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle} \sum_{\mathbf{p} \in \mathcal{O}_1} \beta_{\mathbf{p}}(\tau). \quad (4.23b)$$

Поређењем леве и десне стране једнакости, уочавамо:

$$1 = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \frac{1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle}{E - 2\xi(\mathbf{k}) - U \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle}, \quad (4.24a)$$

$$1 = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \frac{1 - \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle}{E - 2\xi(\mathbf{k}) - U \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle}. \quad (4.24b)$$

Међутим, што се тиче доње једнакости у ((4.24)), с обзиром да у овој области важи $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = 1$, сума са десне стране се поништава, односно увек је једнака нули, тако да налазимо да доња једнакост нема смисла, с обзиром да је лева страна увек једнака јединици. Одавде закључујемо да оператори креације и анихилације електронског пара могу једино да делују у области $\mathcal{O}_0$ у $\mathbf{k}$ -простору, док у области $\mathcal{O}_1$ њихово деловање није дефинисано. У области $\mathcal{O}_0$ важи $\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle = 0$, тако да горња једнакост у (4.24) гласи:

$$1 = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \frac{1}{E - 2\xi(\mathbf{k})}. \quad (4.25)$$

Како бисмо поређење са одговарајућим резултатом за енергију из БЦС теорије било могуће, прећи ћемо са суме на интеграл:

$$1 = -g \int_0^{\frac{W}{2} - \mu} d\varepsilon \frac{\mathcal{N}(\varepsilon)}{E - 2\varepsilon}, \quad (4.26)$$

при чему смо искористили $\varepsilon \equiv \xi(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) - \mu$, а границе интеграције следе на основу резултата ХК модела добијених у Поглављу 2.2, односно њиховог графичког приказивања датог у Поглављу 2.3. Такође, увиђамо да се густина енергијских стања, овде означена са $\mathcal{N}(\varepsilon)$, у општем случају разлике од $N(\varepsilon)$ из БЦС теорије, због чега смо и увели нову ознаку (N).

Упоредимо сада резултат (4.26) са одговарајућим БЦС резултатом (Додатак В):

$$1 = g \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{N(\varepsilon)}{2\varepsilon - E} \rightarrow \text{БЦС резултат} \quad (4.27a)$$

$$1 = g \int_0^{\frac{W}{2} - \mu} d\varepsilon \frac{\mathcal{N}(\varepsilon)}{2\varepsilon - E} \rightarrow \text{ХК резултат.} \quad (4.27b)$$

Дакле, разлика постоји само у границама интеграције и густини енергијских стања¹² [4]. Одавде очекујемо и постојање везаног стања ($E < 0$), аналогно БЦС резултату. Ово тврђење проверавамо директним решавањем интеграла (4.26).

Узмимо најпре да се ради о металу са полупопуњеном валентном зоном ($U < W$, $\rho = 1$, $\mu = U/2$). Одавде следи претпоставка за густину енергијских стања електрона:

$$\mathcal{N}(\varepsilon) := \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k})) = \frac{1}{W} \equiv \text{const}, \quad \text{за} \quad -\frac{W}{2} \leq E \leq \frac{W}{2}, \quad (4.28)$$

¹²Ако бисмо боље погледали, видели бисмо да разлика постоји и у параметру g , с обзиром да се физичка природа привлачне интеракције у ова два случаја разликује. Међутим, рачунски поступак остаје исти, због чега за овај параметар задржавамо исту ознаку g .

где је $W = 4tD$ (енергијска) ширина валентне зоне, што управо одговара границама интеграције у (4.26), тако да узимамо: $\mathcal{N}(\varepsilon) = 2/W$.

Увођењем смене $x = E - 2\varepsilon$, интеграл у (4.26) постаје:

$$1 = -\frac{g}{W} \int_E^{E-(W-U)} \frac{dx}{x} = -\frac{g}{W} \ln |x|_E^{E-(W-U)} = -\frac{g}{W} \ln \left(\frac{E - (W - U)}{E} \right), \quad (4.29)$$

при чему смо искористили да за посматрану енергијску област (област $\mathcal{O}_0$ за таласне векторе $\mathbf{k}$) важи $E > 0$, тако да уз $U < W$ следи $E - (W - U) > 0$, тако да се апсолутна вредност у (4.29) може испустити. Одавде се добија:

$$E = -\frac{(W - U)}{1 + e^{\frac{W}{g}}}. \quad (4.30)$$

С обзиром да формирање електронских парова сматрамо малом сметњом у односу на остале енергијске параметре (W, t, U), односно $g \ll W$, можемо да занемаримо јединицу уз експоненцијалну функцију у имениоцу израза, тако да добијамо:

$$E = -(W - U)e^{-\frac{W}{g}}. \quad (4.31)$$

С обзиром на $U < W$ и $e^{-\frac{W}{g}} > 0$, следи да је $E < 0$, односно видимо да постоји везано стање у односу на спаривање, чиме је постојање и одржање (стабилност) суперпроволне фазе.

Као што можемо видети, специјалан случај $U = 0$ нас води на решење истог облика као и БЦС резултат, с тим што је у БЦС резултату фигурирало $2\hbar\omega_D$ као ширина интервала енергијских стања, док је код модела то ширина валентне зоне W .

4.3.2 Функција основног стања ХК модела и једначина енергетског процена

У анализи конвенционалних (нискотемпературских) суперпроволника, имали смо посла са системом у ком се могу јавити Куперови парови електрона, при чему се сама појава електронског пара дешава са неком вероватноћом. Уколико се електронски пар не формира, имамо празно (непопуњено) стање у $\mathbf{k}$ -простору. На основу добијене функције стања оваквог система, функција стања оваквог система има облик:

$$|\Psi\rangle_{\text{BCS}} = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \equiv \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (4.32)$$

Дакле, $\mathbf{k}$ -стање се попуњава електронским паром са вероватноћом коју мери $v_{\mathbf{k}}$, док је вероватноћа да $\mathbf{k}$ -стање буде непопуњено одређена са $u_{\mathbf{k}}$. Постоји једна занимљива особина БЦС стања (4.32). Наиме, уколико бисмо у овом стању раздвојили међусобно супротно оријентисање $\mathbf{k}$ -стање, добили бисмо:

$$|\Psi\rangle_{\text{BCS}} = \prod_{\mathbf{k}>0} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \right) \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) |0\rangle = \prod_{\mathbf{k}>0} \left(u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \left(\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) \right) |0\rangle. \quad (4.33)$$

у чему се огледа предност оваквог поступка? Дакле, сагледавањем ХК модела и енергетске структуре електронских стања, с обзиром на издвојене три области у $\mathbf{k}$ -простору: област $\mathcal{O}_0$ са непопуњеним стањима, област $\mathcal{O}_{(1)}$ са једним електроном одређене оријентације импулса и спина и област $\mathcal{O}_2$ са по електрона супротно оријентисаних спинова у сваком од $\mathbf{k}$ -стања те области, јасно је да се у стању ((4.33)) са одређеном вероватноћом попуњава свака од ових области. Стање

представљено на овај начин управо одговара стању ХК модела. Уведимо ознаке $x_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^2$, $y_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^2$, $z_{\mathbf{k}} = \sqrt{2}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}$ [4, 8] и променом ознаке $|\Psi\rangle_{BCS} \rightarrow |\Psi\rangle_{HK}$, имамо:

$$|\Psi\rangle_{HK} = \prod_{\mathbf{k}>0} \left(x_{\mathbf{k}} + y_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \frac{z_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}) \right) |0\rangle. \quad (4.34)$$

Дакле, на основу реченог, можемо да закључимо да је БЦС стање специјалан случај ХК стања (4.34) [4]. Такође, можемо видети да важи:

$$\text{oblast } \mathcal{O}_0 \rightarrow x_{\mathbf{k}} = 1, y_{\mathbf{k}} = z_{\mathbf{k}} = 0, \quad (4.35a)$$

$$\text{oblast } \mathcal{O}_2 \rightarrow x_{\mathbf{k}} = 0, y_{\mathbf{k}} = 1, z_{\mathbf{k}} = 0, \quad (4.35b)$$

$$\text{oblast } \mathcal{O}_1 \rightarrow x_{\mathbf{k}} = y_{\mathbf{k}} = 0, z_{\mathbf{k}} = 1. \quad (4.35c)$$

Затим, као што се иначе ради, пожељно је да имамо стање нормирано на јединицу, односно ${}_{HK}\langle\Psi|\Psi\rangle_{HK} = 1$. Постављањем овог услова на стање (4.34), уз скраћену ознаку $|\Psi\rangle_{HK} \rightarrow |\Psi\rangle$, добијамо:

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Psi\rangle &= \langle 0 | \prod_{\mathbf{k}>0} \left(x_{\mathbf{k}}^* + y_{\mathbf{k}}^* \hat{b}_{-\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{z_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{2}} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \frac{z_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} \right) \prod_{\mathbf{k}>0} \left(x_{\mathbf{k}} + y_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \frac{z_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} + \frac{z_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \right) |0\rangle \\ &= \prod_{\mathbf{k}>0} |x_{\mathbf{k}}|^2 + \prod_{\mathbf{k}>0} |y_{\mathbf{k}}|^2 \langle 0 | \hat{b}_{-\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle + \prod_{\mathbf{k}>0} \frac{|z_{\mathbf{k}}|^2}{2} \langle 0 | \hat{b}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle + \prod_{\mathbf{k}>0} \frac{|z_{\mathbf{k}}|^2}{2} \langle 0 | \hat{b}_{-\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle \\ &= \prod_{\mathbf{k}>0} (|x_{\mathbf{k}}|^2 + |y_{\mathbf{k}}|^2 + |z_{\mathbf{k}}|^2) = 1. \end{aligned} \quad (4.36)$$

Очигледно, овај је услов испуњен једино уколико важи:

$$|x_{\mathbf{k}}|^2 + |y_{\mathbf{k}}|^2 + |z_{\mathbf{k}}|^2 = 1, \quad \forall \mathbf{k} \in [-\pi, \pi]^D. \quad (4.37)$$

Овај ће нам услов бити од користи у даљем поступку, као што ћемо видети. Даље, циљ нам је да искористимо стање $|\Psi\rangle$, односно (4.34), како бисмо поставили услов минимума енергије, односно:

$$E := \frac{\langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\Psi\rangle} = E_{MIN}, \quad (4.38)$$

где је $\hat{H} = \hat{H}_{HK} + \hat{H}_{par}$, дат изразом 4.14. Овај ће нам поступак, као што ћемо у наставку видети, бити од значаја за извођење једначине енергетског процепца ХК модела.

За почетак, запишимо још једном ХК модел хамилтонијана (са присутним спаривањем):

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} - \frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{p}}. \quad (4.39)$$

Да бисмо овим хамилтонијаном деловали на стање $|\Psi\rangle$, прво ћем раздвојити међусобно супротно оријентисане $\mathbf{k}$ -векторе, односно записаћемо:

$$\hat{H} = \hat{H}_{(1)} + \hat{H}_{(2)} + \hat{H}_{(3)}, \quad (4.40)$$

где смо увели ознаке за чланове хамилтонијана:

$$\hat{H}_{(1)} = \sum_{\mathbf{k}>0} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow}), \quad (4.41a)$$

$$\hat{H}_{(2)} = \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} + U \sum_{\mathbf{k}>0} (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow}\hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow}\hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow}), \quad (4.41b)$$

$$\hat{H}_{(3)} = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}>0, \mathbf{p}>0} (\hat{b}_{\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} + \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger}\hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}). \quad (4.41c)$$

Искористимо сада ХК стање, односно (4.34) и пронађимо:

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H}_{(1)} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_{(2)} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H}_{(3)} | \Psi \rangle \quad (4.42)$$

Размотрићемо поступно, члан по члан. Дејством првог члана на стање $|\Psi\rangle$, односно израз $\langle \Psi | \hat{H}_{(1)} | \Psi \rangle$, можемо писати:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H}_{(1)} | \Psi \rangle &= \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle) \\ &= \sum_{\mathbf{k}>0} \xi(\mathbf{k}) (\langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Међутим, показате се довољним да испитамо деловање само једног од четири члана у загради израза (4.43), јер се за остале добија идентичан резултат, што се може директно проверити. Тако, на пример, средња вредност једног од њих у стању $|\Psi\rangle$, тј. $\langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}} | \Psi \rangle$, може се приказати у облику:

$$\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} \left(x_{\mathbf{p}}^* + y_{\mathbf{p}}^* \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} + \frac{z_{\mathbf{p}}^*}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{\mathbf{p}} + \hat{b}_{-\mathbf{p}}) \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \prod_{\mathbf{p}>0} \left(x_{\mathbf{p}} + y_{\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} + \frac{z_{\mathbf{p}}}{\sqrt{2}} (\hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} + \hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger}) \right) | 0 \rangle. \quad (4.44)$$

Ради боље прегледности, овај ћемо израз да размотримо за сваки од параметара $x_{\mathbf{k}}$, $y_{\mathbf{k}}$ и $z_{\mathbf{k}}$. За део са $x_{\mathbf{k}}$, добијамо:

$$\left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} x_{\mathbf{p}}^* \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} x_{\mathbf{p}} | 0 \rangle \right) = \langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |x_{\mathbf{p}}|^2 \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} | 0 \rangle = 0, \quad (4.45)$$

јер у овој области $\mathbf{k}$ -простора нема попуњених стања, односно за вакуумско стање $|0\rangle$ важи $\hat{n}_{\mathbf{k}}|0\rangle = 0|0\rangle \equiv 0$. Даље, за део стања са $y_{\mathbf{k}}$, добијамо:

$$\left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |y_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} | 0 \rangle \right) = \langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |y_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} | 0 \rangle \right). \quad (4.46)$$

С обзиром да разматрамо оператор броја честица (електрона, у овом случају), од интереса нам је, наравно само стање $\mathbf{p} = \mathbf{k}$. Разматрањем само овог стања, имамо:

$$|y_{\mathbf{k}}|^2 (\langle 0 | \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} (\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} | 0 \rangle)). \quad (4.47)$$

Након деловања оператора креације фермиона на кет-стања, односно анихилационих оператора на бра-стања, добијамо:

$$|y_{\mathbf{k}}|^2 (\langle 1_{\mathbf{k}\downarrow} | \langle 1_{-\mathbf{k}\uparrow} | \langle 1_{-\mathbf{k}\downarrow} | \langle 1_{\mathbf{k}\uparrow} | \rangle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} (| 1_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle | 1_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle | 1_{-\mathbf{k}\uparrow} \rangle | 1_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle)). \quad (4.48)$$

Оператор $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ ће у кет-стањима $|1_{\mathbf{k}\uparrow}\rangle$ и $|1_{\mathbf{k}\downarrow}\rangle$, као и у бра-стањима $\langle 1_{\mathbf{k}\uparrow}|$ и $\langle 1_{\mathbf{k}\downarrow}|$, имати својствену вредност 1, с обзиром да је свако од ових стања важи особина ортонормираности, $\langle n_{\mathbf{k}\sigma_1} | n_{\mathbf{p}\sigma_2} \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{p}} \delta_{\sigma_1,\sigma_2}$, од (4.48) добијамо само вредност $|y_{\mathbf{k}}|^2$, односно за део са $y_{\mathbf{k}}$ смо добили:

$$\left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |y_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{-\mathbf{p}} \hat{b}_{\mathbf{p}} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{b}_{\mathbf{p}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^{\dagger} | 0 \rangle \right) = |y_{\mathbf{k}}|^2. \quad (4.49)$$

Резултат (4.49) се добија за било које σ , односно и за $\uparrow$ и $\downarrow$. Такође, с обзиром да израз (4.48) обухвата обе оријентације $\mathbf{k}$ -вектора за свако стање, исти се резултат добија и у случају $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, односно $\langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\sigma} | \Psi \rangle$. Даље, за део стања $|\Psi\rangle$ са $z_{\mathbf{k}}$ се, по аналогији са досадашњим поступком за $x_{\mathbf{k}}$ и $y_{\mathbf{k}}$, налази:

$$\frac{1}{2} \left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |z_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{\mathbf{p}} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle \right) = \frac{1}{2} |z_{\mathbf{k}}|^2 \langle 1_{-\mathbf{k}\downarrow} | \langle 1_{\mathbf{k}\uparrow} | \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} | 1_{-\mathbf{k}\uparrow} \rangle | 1_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle, \quad (4.50a)$$

$$\frac{1}{2} \left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |z_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{\mathbf{p}} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle \right) = \frac{1}{2} |z_{\mathbf{k}}|^2 \langle 1_{-\mathbf{k}\downarrow} | \langle 1_{\mathbf{k}\uparrow} | \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} | 1_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle | 1_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle, \quad (4.50b)$$

$$\frac{1}{2} \left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |z_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{-\mathbf{p}} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{b}_{\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle \right) = \frac{1}{2} |z_{\mathbf{k}}|^2 \langle 1_{\mathbf{k}\downarrow} | \langle 1_{-\mathbf{k}\uparrow} | \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} | 1_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle | 1_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle, \quad (4.50c)$$

$$\frac{1}{2} \left(\langle 0 | \prod_{\mathbf{p}>0} |z_{\mathbf{p}}|^2 \hat{b}_{-\mathbf{p}} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \left(\prod_{\mathbf{p}>0} \hat{b}_{-\mathbf{p}}^\dagger |0\rangle \right) = \frac{1}{2} |z_{\mathbf{k}}|^2 \langle 1_{\mathbf{k}\downarrow} | \langle 1_{-\mathbf{k}\uparrow} | \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} | 1_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle | 1_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \quad (4.50d)$$

С обзиром на особину ортонормираности стања $|n_{\mathbf{k}\sigma}\rangle$, следи да је само израз у другој једначини (4.50) различит од нуле. Према томе, у овом случају добијамо да је резултат $|z_{\mathbf{k}}|^2/2$.

Тако смо дошли до резултата деловања оператора броја честица $\hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}$ на стање $|\Psi\rangle$. Као што смо рекли, исти резултат се добија и за супротно оријентисан спин, и за супротно оријентисан импулс. Према томе, можемо коначно писати

$$\langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle = |y_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{|z_{\mathbf{k}}|^2}{2}. \quad (4.51)$$

Самим тим, сада знамо и резултат деловања овог стања на цео члан $\hat{H}_{(1)}$:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{H}_{(1)} | \Psi \rangle &= \sum_{\mathbf{k}>0} \xi(\mathbf{k}) (\langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle) \\ &= \sum_{\mathbf{k}>0} \xi(\mathbf{k}) (4|y_{\mathbf{k}}|^2 + 2|z_{\mathbf{k}}|^2). \end{aligned} \quad (4.52)$$

Следећи члан хамилтонијана, под дејством стања $|\Psi\rangle$, има облик

$$\langle \Psi | \hat{H}_{(2)} | \Psi \rangle = U \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle = U \sum_{\mathbf{k}>0} (\langle \Psi | \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{n}_{-\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{-\mathbf{k}\downarrow} | \Psi \rangle) \quad (4.53)$$

Аналогно резултату за $\hat{H}_{(1)}$, коначно за други члан добијамо

$$\langle \Psi | \hat{H}_{(2)} | \Psi \rangle = 2U \sum_{\mathbf{k}>0} |y_{\mathbf{k}}|^2. \quad (4.54)$$

Слично се може показати и за трећи члан, односно $\hat{H}_{(3)}$:

$$\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad \hat{b}_{-\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} = \hat{c}_{\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (4.55)$$

одакле се директно показује да важе изрази:

$$\langle \Psi | \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} | \Psi \rangle = |y_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{|z_{\mathbf{k}}|^2}{2}, \quad \langle \Psi | \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}} | \Psi \rangle = \frac{|z_{\mathbf{k}}|^2}{2}, \quad \langle \Psi | \hat{b}_{\mathbf{k}} | \Psi \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{\mathbf{k}}^* z_{\mathbf{k}} + z_{\mathbf{k}}^* y_{\mathbf{k}}), \quad (4.56a)$$

$$\langle \Psi | \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{p}} | \Psi \rangle = \frac{1}{2} (x_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}^* + z_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}^*) (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}), \quad (4.56b)$$

при чему су $\mathbf{k} > 0$, $\mathbf{p} > 0$ и $\mathbf{k} \neq \mathbf{p}$. Изрази идентични овим (из (4.56)) важе и за супротно оријентисане $\mathbf{k}$ -векторе (случај који добијамо заменом $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$). На тај начин, за $\langle \Psi | \hat{H}_{(3)} | \Psi \rangle$ добијамо:

$$\langle \Psi | \hat{H}_{(3)} | \Psi \rangle = -\frac{2g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p} > 0; \mathbf{k} \neq \mathbf{p}} (x_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}^* + z_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}^*) (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}). \quad (4.57)$$

Сада имамо резултате за средње вредности у стању $|\Psi\rangle$, свих чланова хамилтонијана.

Обједињавањем резултата (4.52), (4.54) и (4.57) у један, за очекивану вредност хамилтонијана, $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$, налазимо:

$$\langle \hat{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k} > 0} \xi(\mathbf{k}) (4|y_{\mathbf{k}}|^2 + 2|z_{\mathbf{k}}|^2) + 2U \sum_{\mathbf{k} > 0} |y_{\mathbf{k}}|^2 - 2\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p} > 0; \mathbf{k} \neq \mathbf{p}} (z_{\mathbf{k}}^* x_{\mathbf{k}} + y_{\mathbf{k}}^* z_{\mathbf{k}}) (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}). \quad (4.58)$$

Услов минимума (видети (4.38)) добијамо користећи се *варијационим принципом* [17]:

$$\frac{\partial}{\partial(x_{\mathbf{k}}, y_{\mathbf{k}}, z_{\mathbf{k}})} \left\{ \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} + \lambda_{\mathbf{k}} (|x_{\mathbf{k}}|^2 + |y_{\mathbf{k}}|^2 + |z_{\mathbf{k}}|^2 - 1) \right\} = 0, \quad (4.59)$$

где је са $\lambda_{\mathbf{k}}$ означен тзв. *Лагранжев мултипликатор (множител)* [17], док парцијални извод са левестране једнакости се обавља посебно¹³ и сваки од извода ($\partial/\partial x_{\mathbf{k}}$, $\partial/\partial y_{\mathbf{k}}$, $\partial/\partial z_{\mathbf{k}}$) треба изједначити са нулом. Погледајмо ове изводе једног по једног.

Прво, извод по $x_{\mathbf{k}}$ нам даје:

$$0 = -2\frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 > 0; \mathbf{p}_1 \neq \mathbf{p}_2} z_{\mathbf{p}_1}^* \frac{\partial x_{\mathbf{p}_1}}{\partial x_{\mathbf{k}}} (x_{\mathbf{p}_2}^* z_{\mathbf{p}_2} + z_{\mathbf{p}_2}^* y_{\mathbf{p}_2}) + \lambda_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}^*, \quad (4.60)$$

односно, коришћењем $\delta_{\mathbf{p}_1, \mathbf{k}} = \frac{\partial x_{\mathbf{p}_1}}{\partial x_{\mathbf{k}}}$, имамо

$$0 = -2\frac{g}{\Omega} z_{\mathbf{k}}^* \sum_{\mathbf{p} > 0} (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}) + \lambda_{\mathbf{k}} x_{\mathbf{k}}^*. \quad (4.61)$$

Слично, диференцирањем по $y_{\mathbf{k}}$, добијамо

$$0 = (4\xi(\mathbf{k}) + 2U) y_{\mathbf{k}} - 2\frac{g}{\Omega} z_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} > 0} (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}) + \lambda_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}, \quad (4.62)$$

док нам диференцирање по $z_{\mathbf{k}}$ даје:

$$0 = 2\xi(\mathbf{k}) z_{\mathbf{k}} - 2\frac{g}{\Omega} x_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} > 0} (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}) - 2\frac{g}{\Omega} y_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{p} > 0} (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}})^* + \lambda_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}}. \quad (4.63)$$

¹³Прво диференцирамо израз у заградама $\{\dots\}$, па поново почетни израз у заградама (у заградама $\{\dots\}$) по $y_{\mathbf{k}}$, па поново почети по $z_{\mathbf{k}}$. Важно је разумети да се ова три извода *не* обављају у корацима, један за другим.

Приметимо да нам у изразима (4.61), (4.62) и (4.63) фигурише члан са сумом $\sum_{\mathbf{p}>0}$, који има исти облик у сваком од ових задатака. У циљу краћег записа, њега можемо означити са

$$\frac{g}{L^D} \sum_{\mathbf{p}>0} (x_{\mathbf{p}}^* z_{\mathbf{p}} + z_{\mathbf{p}}^* y_{\mathbf{p}}) \equiv O_g. \quad (4.64)$$

Сада можемо да повезујемо добијене резултате. Наиме, на основу израза ((4.52)) добијамо да је

$$\lambda_{\mathbf{k}} = 2 \frac{z_{\mathbf{k}}^*}{x_{\mathbf{k}}^*} O_g, \quad (4.65)$$

након чега изрази (4.54) и (4.57) прелазе у:

$$2\xi(\mathbf{k}) + U = \left(\frac{z_{\mathbf{k}}}{y_{\mathbf{k}}} - \frac{z_{\mathbf{k}}^*}{x_{\mathbf{k}}^*} \right) O_g, \quad \xi(\mathbf{k}) = \left(\frac{x_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} - \frac{z_{\mathbf{k}}^*}{x_{\mathbf{k}}^*} \right) O_g + \frac{y_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} O_g^*, \quad (4.66)$$

редом. Одузимањем десне једначине у (4.66) од леве, добијамо

$$\xi(\mathbf{k}) + U = \left(\frac{z_{\mathbf{k}}}{y_{\mathbf{k}}} - \frac{x_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} \right) O_g - \frac{y_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} O_g^*. \quad (4.67)$$

Можемо, затим, узети да су $x_{\mathbf{k}}$, $y_{\mathbf{k}}$ и $z_{\mathbf{k}}$ реални [4], односно $x_{\mathbf{k}}^* = x_{\mathbf{k}}$, $y_{\mathbf{k}}^* = y_{\mathbf{k}}$ и $z_{\mathbf{k}}^* = z_{\mathbf{k}}$. Самим тим, следи и $O_g^* = O_g$. Ово нам даје:

$$\xi_{\mathbf{k}}^l = \left(\frac{x_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} + \frac{y_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} - \frac{z_{\mathbf{k}}}{x_{\mathbf{k}}} \right) O_g, \quad \xi_{\mathbf{k}}^u = - \left(\frac{x_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} + \frac{y_{\mathbf{k}}}{z_{\mathbf{k}}} - \frac{z_{\mathbf{k}}}{y_{\mathbf{k}}} \right) O_g, \quad (4.68)$$

где смо увели ознаке $\xi_{\mathbf{k}}^l = \xi(\mathbf{k})$ и $\xi_{\mathbf{k}}^u = \xi(\mathbf{k}) + U$. Након сређивања разломака, изрази (4.68) постају:

$$\xi_{\mathbf{k}}^l x_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = (x_{\mathbf{k}}^2 - z_{\mathbf{k}}^2 + x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}) O_g, \quad \xi_{\mathbf{k}}^u y_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = (z_{\mathbf{k}}^2 - y_{\mathbf{k}}^2 - x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}) O_g. \quad (4.69)$$

Да ли се овај израз може још више поједноставити? Посматрајмо производ $x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}$, присутан у обе једначине у (4.69). Присетимо се да је $x_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}^2$ и да даје вероватноћу да стање буде непопуњено, док за $y_{\mathbf{k}}$ важи $y_{\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}^2$. Посматрајући графички приказ енергетских стања (видети Сл. 6), можемо рећи да се на прелазу између области $\mathcal{O}_0$ у област $\mathcal{O}_2$, уколико важи $g \ll U, W$, важи $x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}} \neq 0$, јер се ове две области у овом региону $\mathbf{k}$ -простора (у малој мери) преклапају. С обзиром на (4.35), имајући у виду да се области $\mathcal{O}_0$ и $\mathcal{O}_2$ нигде не пресецају, узимамо да су производи типа $x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}}$ увек једнаки нули. Дакле, у (4.69) можемо ставити $x_{\mathbf{k}} y_{\mathbf{k}} = 0$, тако да ови изрази постају:

$$\xi_{\mathbf{k}}^l x_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = (x_{\mathbf{k}}^2 - z_{\mathbf{k}}^2) O_g, \quad \xi_{\mathbf{k}}^u y_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = (z_{\mathbf{k}}^2 - y_{\mathbf{k}}^2) O_g. \quad (4.70)$$

Користећи услов нормирања стања $|\Psi\rangle$, односно израз (4.37), показује се (видети [4]) да је могуће прећи на следеће променљиве:

$$x_{\mathbf{k}}^2 - z_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\xi_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}^l} (1 - y_{\mathbf{k}}^2), \quad 2x_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^l}{E_{\mathbf{k}}^l} (1 - y_{\mathbf{k}}^2), \quad (4.71a)$$

$$z_{\mathbf{k}}^2 - y_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\xi_{\mathbf{k}}^u}{E_{\mathbf{k}}^u} (1 - x_{\mathbf{k}}^2), \quad 2y_{\mathbf{k}} z_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^u}{E_{\mathbf{k}}^u} (1 - x_{\mathbf{k}}^2), \quad (4.71b)$$

где су $E_{\mathbf{k}}^l = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^{l2} + \Delta_{\mathbf{k}}^{l2}}$ и $E_{\mathbf{k}}^u = \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^{u2} + \Delta_{\mathbf{k}}^{u2}}$ укупна енергија електрона у доњој (l) и горњој (u) под-траци, респективно. Као што видимо, енергијски процеп (у ознаци Δ) се појављује у обема гранама. У доњој под-траци је означен са $\Delta_{\mathbf{k}}^l$, а у горњој са $\Delta_{\mathbf{k}}^u$.

Комбиновањем (4.71) и (4.70), уз (4.64), добијамо:

$$\Delta_{\mathbf{k}}^l = \Delta_{\mathbf{k}}^u = \frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{p} > 0} \left\{ \frac{\Delta_{\mathbf{p}}^l}{E_{\mathbf{p}}^l} (1 - y_{\mathbf{p}}^2) + \frac{\Delta_{\mathbf{p}}^u}{E_{\mathbf{p}}^u} (1 - x_{\mathbf{p}}^2) \right\}. \quad (4.72)$$

Из овог израза се види да за енергијски процеп $\Delta_{\mathbf{k}}^{l/u}$ важи $\Delta_{\mathbf{k}}^l = \Delta_{\mathbf{k}}^u \equiv \Delta$, односно да има исту вредност у свим $\mathbf{k}$ стањима (не зависи од $\mathbf{k}$) и у обема под-тракама ($\Delta^l = \Delta^u$).

Одавде добијамо јединствену једначину:

$$1 = \frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} > 0} \left\{ \frac{1 - y_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^{l2} + \Delta^2}} + \frac{1 - x_{\mathbf{k}}^2}{\sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^{u2} + \Delta^2}} \right\}, \quad (4.73)$$

што је управо *једначина енергијског процепа*. Даље, да бисмо добили израз аналоган резултату БЦС теорије, потребно је прећи са суме на интеграл:

$$1 = \frac{g}{2} \int dE \frac{\mathcal{N}_{\Delta}(E)}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}}, \quad (4.74)$$

при чему смо увели *ефективну* густину енергијских стања:

$$\mathcal{N}_{\Delta}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) (1 - y_{\mathbf{k}}^2) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) (1 - x_{\mathbf{k}}^2). \quad (4.75)$$

Израз (4.75) можемо још поједноставити. Наиме, с обзиром да у области $\mathcal{O}_2$ важи $y_{\mathbf{k}} = 1$, па самим тим и $y_{\mathbf{k}}^2 = 1$, али истовремено и $\xi_{\mathbf{k}}^u < 0$, док за област $\mathcal{O}_0$ важи $x_{\mathbf{k}} = 1$, односно $x_{\mathbf{k}}^2 = 1$, као и $\xi_{\mathbf{k}}^l > 0$, закључујемо да је заграде $(1 - y_{\mathbf{k}}^2)$ и $(1 - x_{\mathbf{k}}^2)$ могуће представити као:

$$1 - y_{\mathbf{k}}^2 = \theta(\xi_{\mathbf{k}}^u), \quad 1 - x_{\mathbf{k}}^2 = \theta(-\xi_{\mathbf{k}}^l), \quad (4.76)$$

одакле следи за густину стања $\mathcal{N}_{\Delta}(E)$ израз:

$$\mathcal{N}_{\Delta}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) \theta(\xi_{\mathbf{k}}^u) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) \theta(-\xi_{\mathbf{k}}^l). \quad (4.77)$$

Дакле, за област $\mathbf{k}$ -простора у којем су попуњена енергијска стања у доњој под-траци ($E = \xi_{\mathbf{k}}^l$) енергија горње гране има позитивну вредност ($\xi_{\mathbf{k}}^u > 0$), док за заузета стања у горњој под-траци ($E = \xi_{\mathbf{k}}^u$) важи $\xi_{\mathbf{k}}^l < 0$, односно $-\xi_{\mathbf{k}}^l > 0$. Изразом (4.77) смо заправо обухватили *сва* могућа енергијска стања, при чему је, како видимо, област $\mathcal{O}_1$ обухваћена и на енергијама $E > 0$ и на енергијама $E < 0$, док за област $\mathcal{O}_0$ важи $E > 0$, док за $\mathcal{O}_2$ важи $E < 0$. Одавде следи да се израз (4.77) може написати и у облику [4]:

$$\mathcal{N}_{\Delta}(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_2} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \left\{ \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) \right\}. \quad (4.78)$$

Дакле, добили смо израз за (ефективну) густину стања за једначину енергијског процепа. Коришћењем израза (4.78) у једначини процепа (4.74), можемо изразити енергијски процеп Δ .

Посматрајмо, наиме, једначину процепа у интегралном облику (израз (4.74)):

$$1 = \frac{g}{2} \int dE \frac{\mathcal{N}_{\Delta}(E)}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}}. \quad (4.79)$$

Сада ћемо да искористимо експерименталну чињеницу, описану у Поглављу 4.2. Наиме, с обзиром да се проводник са специфичном суперпроводношћу добија уколико се од параметара $U > W$ и $\rho = 1$ померимо на било који од два начина, било мењањем параметра U , било мењањем фактора ρ . Најпогоднијим поступком се показало разматрање система на $U < W$ и $\rho = 1$. У случају полупопуњене валентне зоне, као што смо раније добили, за хемијски потенцијал важи $\mu = U/2$.

Интеграцију спроводимо на следећи начин:

$$1 = \frac{g}{2} \int_{-\frac{(W-U)}{2}}^U dE \frac{\mathcal{N}_\Delta(E)}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}}. \quad (4.80)$$

Даљи рачун ћемо поједноставити на следећи начин. Наиме, за густину стања $\mathcal{N}(E)$ система, описан дисперзионом релацијом $E = -2t \sum_{\vec{\delta}} \cos(\mathbf{k} \cdot \vec{\delta}_\alpha) - \mu$ је познато да важи [7]:

$$\mathcal{N}(E) = \frac{1}{\sqrt{(2tD)^2 + E^2}} = \frac{2}{\sqrt{(4tD)^2 + (2E)^2}} \equiv \frac{2}{\sqrt{W^2 + (2E)^2}}. \quad (4.81)$$

Поједностављење се огледа у томе што ћемо узети да на свим енергијама E важи вредност густине стања на $E = 0$. На основу (4.81), у питању је вредност $2/W$. На основу реченог, израз (4.80) постаје:

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{g}{2W} \int_{-\frac{(W-U)}{2}}^{\frac{W-U}{2}} \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}} + \frac{g}{2W} \int_{-U}^U \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}} \\ &= \frac{g}{W} \int_0^{\frac{W-U}{2}} \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}} + \frac{g}{W} \int_0^U \frac{dE}{\sqrt{E^2 + \Delta^2}}. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Сваки од ових интеграла ћемо решити свођењем на таблични, који има облик

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}} = \ln|\sqrt{1+x^2} + x| + C, \quad (4.83)$$

где је C интеграциона константа. Извлачењем Δ^2 испред заграде под кореном, након узимања смене $x = E/\Delta \rightarrow dE = \Delta dx$, добијамо:

$$1 = \frac{g}{W} \int_0^{\frac{W-U}{2\Delta}} \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}} + \frac{g}{W} \int_0^{\frac{U}{\Delta}} \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}}. \quad (4.84)$$

Размотримо случај $\Delta \ll U, W$. Другим речима, јединица под коренима са може занемарити у поређењу са квадрираним изразима, док се за корен узима позитиван предзнак, јер функција $\ln(a)$ није дефинисана у тачки $a = 0$. На тај начин, израз (4.84) постаје:

$$1 = \frac{g}{W} \ln\left(\frac{W-U}{\Delta}\right) + \frac{g}{W} \ln\left(2\frac{U}{\Delta}\right). \quad (4.85)$$

Када изразимо Δ преко g, W и U , коначно добијамо резултат за енергијски процеп ¹⁴:

$$\Delta = \sqrt{2} (W - U)^{\frac{1}{2}} U^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{W}{2g}}. \quad (4.86)$$

Резултат (4.86) важи у лимиту ниских температура ($T \approx 0$). Специјалан случај, $T = 0$, ћемо искористити приликом одређивања односа $2\Delta/T_C$, у ком важи $\Delta = \Delta(T = 0)$. За ово нам, ипак, остаје да одредимо израз за критичну температуру суперпроводног фазног прелаза, односно T_C , што ћемо у наставку и урадити, користећи се раније уведеним методом Гринових функција (Поглавље 2.1).

¹⁴Наравно, укупна ширина енергијског процепа износи, као што смо раније истакли, $2|\Delta|$.

4.3.3 Критична температура ХК модела суперпроводника

До сада смо видели да систем описан ХК моделом испољава нестабилност на присуство привлачне интеракције која доводи до формирања електронских парова. У ово смо се уверили налажењем енергије електронског пара (у ознаци E) и доказивањем да важи $E < 0$ (Одељак 4.3.1). Затим смо дошли до израза за једначину енергијског процеп, као и до самог израза за енергијски процеп (Одељак 4.3.2), чиме смо додатно учврстили аналогију са БЦС суперпроводником и, у исто време, добили израз који ћемо искористити у $2\Delta/T_c$, како бисмо се уверили у специфичности суперпроводне фазе ХК модела у односу на БЦС систем.

Досадашњим резултатима смо, дакле, потврдили појаву суперпроводне фазе као стабилног (везаног) стања система.

Сада ћемо видети на који начин је могуће приступити добијању информације о критичној температури (у ознаци T_c), након чега ћемо проверити исправност универзалног односа $2\Delta/T_c$, који у БЦС теорији (код конвенционалних, нискотемпературских суперпроводника) поседује константну вредност од приближно 3,53 (Одељак 4.1.3). С обзиром на немогућност аналогног приступа као у БЦС теорији¹⁵, потребно је приступити на други начин. Нешто универзалнији приступ се састоји у налажењу тзв. *одзивне функције*, односно *сусцептибилности* система на спаривање. Наиме, када на систем делујемо неким спољашњим утицајем, систем показује некакву реакцију. У овом случају, под спољашњим утицајем се подразумева додавање члана $\hat{H}_{par}$ на хамилтонијан $\hat{H}_{HK}$, односно увођење интеракције која доводи до спаривања електрона. Сусцептибилност (у ознаци χ) је мера те реакције, односно одзива система на такав утицај. Познато је да на критичној температури (температури фазног прелаза) сусцептибилност система дивергира [4]. Дакле, уколико бисмо одредили сусцептибилност спаривања¹⁶, постављањем услова о њеној дивергенцији бисмо могли да дођемо до израза за критичну температуру.

Почнимо од дефиниције сусцептибилности спаривања. Наиме, с обзиром да ова величина карактерише реакцију система на спољашњу побуду, испоставља се да је то величина која управо одговара Гриновој функцији [22]. Овога пута, као погодна за анализу се показује *временски уређена* (тзв. *каузална*, у ознаци $\mathcal{G}$) ГФ, у облику:

$$\mathcal{G}(\tau_1, \tau_2) := -i\theta(\tau_1 - \tau_2)\langle \hat{T}_{1,2}\hat{\Delta}(\tau_1)\hat{\Delta}^\dagger(\tau_2) \rangle, \quad (4.87)$$

где је

$$\hat{T}_{1,2}\hat{\Delta}(\tau_1)\hat{\Delta}^\dagger(\tau_2) := \begin{cases} \hat{\Delta}(\tau_1)\hat{\Delta}^\dagger(\tau_2), & \text{za } \tau_1 > \tau_2 \\ \hat{\Delta}^\dagger(\tau_2)\hat{\Delta}(\tau_1), & \text{za } \tau_1 < \tau_2 \end{cases} \quad (4.88)$$

тзв. *оператор хронологизације*.

До временске зависности оператора $\hat{\Delta}$ и $\hat{\Delta}^\dagger$ долазимо решавањем следећих *једначина кретања*¹⁷:

$$i\hbar \frac{d}{d\tau} \hat{\Delta}(\tau) = [\hat{\Delta}(\tau), \hat{H}], \quad -i\hbar \frac{d}{d\tau} \hat{\Delta}^\dagger(\tau) = [\hat{\Delta}^\dagger(\tau), \hat{H}], \quad (4.89)$$

где је

$$\hat{H} = \hat{H}_{HK} + \hat{H}_{par} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) (\hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow}) + U \sum_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{n}_{\mathbf{k}\downarrow} + \frac{g}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{q}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{q}\uparrow}. \quad (4.90)$$

¹⁵С обзиром на добијене резултате везане за енергијску структуру, изостаје могућност једноелектронских ексцитација као у теорији Ферми-течности, до интерагујућег система, није могуће доћи пертурбативним методама [4].

¹⁶У страној литератури се сусреће назив *pairing susceptibility* [22].

¹⁷Једначина кретања у свом пуном облику садржи и члан првог парцијалног извода оператора по времену (са десне стране једнакости), односно $i\hbar \partial \hat{\Delta} / \partial \tau$ и $i\hbar \partial \hat{\Delta}^\dagger / \partial \tau$. Члан овог типа одсуствује уколико оператор у једначини кретања не поседује експлицитну временску зависност

Једначинама типа (4.89) одговарају изрази:

$$\hat{\Delta}(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}\hat{\Delta}(0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}, \quad \hat{\Delta}^\dagger(\tau) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau}\hat{\Delta}^\dagger(0)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\tau} \quad (4.91)$$

Погодност у коришћењу израза типа (4.87) за сусцептибилност огледа се у могућности преласка са средње вредности по $\hat{H}_{HK} + \hat{H}_{par}$ на средњу вредност по $\hat{H}_{HK} \equiv \hat{H}(g = 0)$. У том смислу, можемо разликовати тзв. *укупну* сусцептибилност (у ознаци χ_g) и *чисту* сусцептибилност (у ознаци χ_0 , односно $\chi_{g=0}$):

$$\chi_g(\tau_1, \tau_2) = -i\theta(\tau_1 - \tau_2)\langle\hat{T}_{1,2}\hat{\Delta}(\tau_1)\hat{\Delta}^\dagger(\tau_2)\rangle_g, \quad \chi_0(\tau_1, \tau_2) = -i\theta(\tau_1 - \tau_2)\langle\hat{T}_{1,2}\hat{\Delta}(\tau_1)\hat{\Delta}^\dagger(\tau_2)\rangle_0, \quad (4.92)$$

при чему се може показати¹⁸ важење тзв. *Дајсонове једнакости* [4]:

$$\chi_g(E) = \frac{\chi_0(E)}{1 - g\chi_0(E)}, \quad (4.93)$$

где су

$$\chi_g(E) = \frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \chi_g(\tau) e^{iE\tau}, \quad \chi_0(E) = \frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \chi_0(\tau) e^{iE\tau} \quad (4.94)$$

временско-енергијске Фуријеове трансформације сусцептибилности у (4.92), где је $\tau = \tau_1 - \tau_2$. На основу тога, с обзиром да критичној температури одговара тачка дивергенције сусцептибилности χ_g , за налажење T_C је потребно поставити услов $\chi_0 = 1/g$, који следи из (4.93), што значи да је довољно одредити χ_0 , а које се иначе налази знатно лакше (у односу на χ_g) кад је у питању ХК модел.

Чиста сусцептибилност $\chi_0(E)$, користећи изразе за операторе $\hat{\Delta}$ и $\hat{\Delta}^\dagger$, износи

$$\chi_0(E) = \frac{1}{\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle\hat{T}\hat{\Delta}(\tau)\hat{\Delta}^\dagger(0)\rangle_0 e^{iE\tau} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{q}\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger\rangle_0 e^{iE\tau}. \quad (4.95)$$

Искористимо ли сада чињеницу да кинетички и потенцијални део ХК хамилтонијана међусобно комутирају услед $[\hat{n}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}, \hat{n}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}] = 0$, односно да се у систему одржава број електрона у одређеном $\mathbf{k}$ -стању и са одређеном оријентацијом спина σ , уместо две суме у (4.95) ћемо посматрати само једну:

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{q}\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\mathbf{q}\downarrow}^\dagger\rangle_0 e^{iE\tau} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\rangle_0 e^{iE\tau}. \quad (4.96)$$

Даље, коришћењем облика временске зависности оператора $\hat{\Delta}$ и $\hat{\Delta}^\dagger$, добијамо

$$\langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\rangle_0 = \langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\rangle_0 \quad (4.97)$$

Затим, услед чињенице да се хамилтонијан ХК модела може записати као $\sum_{\mathbf{k}} \hat{H}_{HK}$ (у облику суме по $\mathbf{k}$ -стањима), следи могућност факторизације средње вредности операторског производа, за појединачна $\mathbf{k}$ -стања, у последњем изразу:

$$\langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\rangle_0 = \langle\hat{T}\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau)\hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\rangle_0 \langle\hat{T}\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau)\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\rangle_0 \quad (4.98)$$

¹⁸Видети математички додатак у [4] за више детаља.

Уколико искористимо дефиницију оператора $\hat{T}$ из (4.88), потребно је поделити интервал интеграције $(-\infty, +\infty)$ на интервале $(-\infty, 0]$ и $[0, +\infty)$, што нам даје:

$$\langle \hat{T} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau) \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle \hat{T} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle_0 = \begin{cases} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau) \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle_0 & \text{за } \tau > 0 \\ \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}(\tau) \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle_0 \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(\tau) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle_0 & \text{за } \tau < 0 \end{cases} \quad (4.99)$$

Средње вредности до којих смо дошли одговарају корелационим функцијама (ретардоване) Грине функције $G_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ до које смо дошли у Глави 2. У енергетској (E) репрезентацији, могу се добити помоћу формуле [13]

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{G_{-\mathbf{k}\downarrow}(E + i\varepsilon) - G_{-\mathbf{k}\downarrow}(E - i\varepsilon)}{e^{\beta E} + 1} \\ \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \rangle &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{G_{\mathbf{k}\uparrow}(E + i\varepsilon) - G_{\mathbf{k}\uparrow}(E - i\varepsilon)}{e^{\beta E} + 1} \end{aligned} \quad (4.100)$$

Узимајући у обзир изразе (3.10-3.13), уврштавањем израза (4.100) у (4.95), добијамо:

$$\chi_0(E) = \frac{i\hbar}{2\pi\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \int_0^\infty e^{E\tau} \sum_{a,b=l}^u n_{-\mathbf{k}\downarrow}^a n_{\mathbf{k}\uparrow}^b f(-\xi_{\mathbf{k}}^a) f(-\xi_{\mathbf{k}}^b) e^{-\tau(\xi_{\mathbf{k}}^a + \xi_{\mathbf{k}}^b)}, \quad (4.101)$$

где смо увели ознаке a, b за u, l , употребљене на одговарајући начин за сваки од чланова.

С обзиром да је феномен суперпроводности карактеристичан за област ниских температура ($0 - 100K$), односно $\beta \rightarrow \infty$, даљи поступак можемо олакшати, коришћењем следеће занимљиве особине:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \left\{ f(-\xi_{\mathbf{k}}^a) f(-\xi_{\mathbf{k}}^b) \right\} = 1 - f(\xi_{\mathbf{k}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}}^b), \quad a, b \in \{l, u\}, \quad (4.102)$$

у коју се можемо уверити посматрањем израза $f(-\xi_{\mathbf{k}}^a) f(-\xi_{\mathbf{k}}^b)$ и $1 - f(\xi_{\mathbf{k}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}}^b)$, расписивањем израза за Ферми-Диракову функцију расподеле [4].

Олакшање у даљем поступку се огледа у томе што ће се поништити чланови који садрже $\xi_{\mathbf{k}}^a$ и $\xi_{\mathbf{k}}^b$ за $a \neq b$, а што се дешава због тога што су могуће енергије електрона, за дато $\mathbf{k}$ -стање једино $\xi_{\mathbf{k}}^l = \xi_{\mathbf{k}}$ и $\xi_{\mathbf{k}}^u = \xi_{\mathbf{k}} + U$, тако да на датој температури $T = 1/\beta$ важи $f(\xi_{\mathbf{k}}^l) = 1 - f(\xi_{\mathbf{k}}^u)$, односно $1 - f(\xi_{\mathbf{k}}^l) - f(\xi_{\mathbf{k}}^u) = 0$.

Ако се задржимо у области ниских температура, уврштавањем (4.102) у (4.101), за суспенцибилност добијамо

$$\chi_0(E) = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}\downarrow}^l n_{\mathbf{k}\uparrow}^l \frac{\tanh\left(\frac{\beta \xi_{\mathbf{k}}^l}{2}\right)}{2\xi_{\mathbf{k}}^l - E} - \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} n_{-\mathbf{k}\downarrow}^u n_{\mathbf{k}\uparrow}^u \frac{\tanh\left(\frac{\beta \xi_{\mathbf{k}}^u}{2}\right)}{2\xi_{\mathbf{k}}^u - E}. \quad (4.103)$$

У наставку ћемо узети у обзир да се креирање електронских парова догађа на енергији $E = 0$ [4]. Затим, искористићемо прелазак са суме по $\mathbf{k}$ -стањима на интеграцију по енергијама, према правилу

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \rightarrow \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} F(\mathbf{k}) \rightarrow \int d\mathcal{E} \rho(\mathcal{E}) F(\mathcal{E}), \quad (4.104)$$

при чему интервал интеграције по енергијама $\mathcal{E}$ одговара опсегу енергија које одговарају дозвољеним електронским стањима у $\mathbf{k}$ -простору, а величина $\rho(\mathcal{E})$ је густина енергијских стања електрона, за коју ћемо, као и у анализи геп једначине, користити константну вредност $\rho(0) = 2/W$. Раније

добијен услов да се систем налази на критичној температури T_C сада гласи: $\chi_0(0) = 1/g$, одакле добијамо:

$$1 = \frac{g}{2} \int \rho(0) \mathcal{N}_C(\mathcal{E}) \frac{\tanh\left(\frac{\beta_C \mathcal{E}}{2}\right)}{\mathcal{E}} d\mathcal{E}, \quad (4.105)$$

где је $\beta_C = 1/T_C$, а $\mathcal{N}_C(\mathcal{E})$ представља ефективну густину енергијских стања, за коју се може показати да је у општем случају дата изразом

$$\mathcal{N}_C(\mathcal{E}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \delta(\mathcal{E} - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_2} \delta(\mathcal{E} - \xi_{\mathbf{k}}^u) + \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \left\{ \delta(\mathcal{E} - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \delta(\mathcal{E} - \xi_{\mathbf{k}}^u) \right\}. \quad (4.106)$$

Дакле, $\mathcal{N}_C$ има скоро идентичан облик као $\mathcal{N}_\Delta$, са једином разликом у фактору $1/4$ који множи суму у последњем члану, а којег нема у изразу за $\mathcal{N}_\Delta$. Поређењем резултата (4.105) са резултатима БЦС теорије (Додатак С), јасно се уочава аналогија у облику једначине енергетског гепа приликом важења услова $T = T_C$.

Оно што нам једино преостаје јесте да у (4.105) изразимо критичну температуру система. Поступак спроводимо у пуној аналогији са налажењем енергетског процепа (видети Одељак 4.3.2), при чему узимамо исте границе интеграције и поделу интервала на исте подинтервале. Међутим, можемо видети да ће, од свих интеграла, опстати само они који се односе на области $\mathcal{O}_{(0)}$ и $\mathcal{O}_{(1)}$, и то само они који се односе на интеграљење по енергијама $\mathcal{E} \geq 0$.

Означимо интеграл у изразу (4.105) за I . Расписивањем овог интеграла по свим члановима и узимањем смене $x = \beta_C \mathcal{E}/2$, следи

$$I = \frac{1}{W} \int_0^{\frac{\beta_C(W-U)}{4}} \frac{\tanh x}{x} dx + \frac{1}{4W} \int_0^{\frac{\beta_C U}{2}} \frac{\tanh x}{x} dx, \quad (4.107)$$

У циљу краћег и прегледнијег записа, уведемо ознаке J_1, J_2 за сваки од чланова:

$$J_1 = \frac{1}{W} \int_0^{\frac{\beta_C(W-U)}{4}} \frac{\tanh x}{x} dx, \quad J_2 = \frac{1}{4W} \int_0^{\frac{\beta_C U}{2}} \frac{\tanh x}{x} dx, \quad (4.108)$$

чијим интеграљењем добијамо:

$$J_1 = \frac{1}{W} \ln \left(\frac{\beta_C(W-U)}{4} \right) - \frac{1}{W} \mathcal{J}, \quad J_2 = \frac{1}{4W} \ln \left(\frac{\beta_C U}{2} \right) - \frac{1}{4W} \mathcal{J}, \quad (4.109)$$

при чему смо са $\mathcal{J}$ означили тзв. *Ојлер-Маскеронијев интеграл*, са вредношћу

$$\mathcal{J} = -\ln \left(\frac{4}{\pi} \right) - \gamma, \quad \text{где је } \gamma \approx 0.577, \quad (4.110)$$

чије је израчунавање детаљно описано у Прилогу С. Укупан интеграл I сада добија облик

$$I = J_1 + J_2 = \frac{1}{W} \ln \left(\frac{\beta_C(W-U)}{4} \right) + \frac{1}{4W} \ln \left(\frac{\beta_C U}{2} \right) + \frac{5}{4W} \ln \left(\frac{4}{\pi} \right) + \frac{5}{4W} \gamma. \quad (4.111)$$

Уврштавањем (4.111) у (4.105), добијамо

$$1 = \frac{g}{W} \ln \left(\frac{\beta_C(W-U)}{4} \right) + \frac{g}{4W} \ln \left(\frac{\beta_C U}{2} \right) + \frac{5g}{4W} \ln \left(\frac{4}{\pi} \right) + \frac{5g}{4W} \gamma. \quad (4.112)$$

Коначно, када у (4.112) изразимо критичну температуру T_C , следи тражени израз:

$$T_C = 2^{\frac{1}{5}} \frac{e^\gamma}{\pi} (W - U)^{\frac{4}{5}} U^{\frac{1}{5}} e^{-\frac{4}{5} \frac{W}{g}}. \quad (4.113)$$

Сада, када имамо изразе за¹⁹ $\Delta(0)$ и T_C , одредимо однос $2\Delta(0)/T_C$ и направимо поређење са БЦС резултатом (видети (4.10)). Изрази добијени за ХК систем, дакле, гласе:

$$\Delta(0) \propto (W - U)^{\frac{1}{2}} U^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{W}{2g}}, \quad T_C \propto (W - U)^{\frac{4}{5}} U^{\frac{1}{5}} e^{-\frac{4}{5} \frac{W}{g}}, \quad (4.114)$$

одакле за тражени однос следи:

$$2\Delta(0)/T_C \propto \left(\frac{U}{W - U} \right)^{\frac{3}{10}} e^{\frac{3W}{10g}}. \quad (4.115)$$

Поређењем са БЦС резултатом ($2\Delta(0)/T_C \approx 3.52$), јасно је да се у случају јако корелисаног система, односно након укључивања међуелектронске интеракције U , ситуација драстично мења. Наиме, у лимесу малог параметра g , односно $g \rightarrow 0$, однос $2\Delta(0)/T_C$ *дивергира*, у поређењу са БЦС резултатом који износи приближно 3.53.

Разлог оваквог понашања односа $2\Delta(0)/T_C$ можемо пронаћи у изразу за ефективну густину стања за критичну температуру, $\mathcal{N}_C$, која се у односу на ефективну густину стања коју смо користили у добијању израза за енергетски процеп, $\mathcal{N}_\Delta$. Поређењем израза за $\mathcal{N}_C$ и $\mathcal{N}_\Delta$:

$$\mathcal{N}_C = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_2} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) + \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \left\{ \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) \right\} \quad (4.116a)$$

$$\mathcal{N}_\Delta = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_0} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_2} \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \in \mathcal{O}_1} \left\{ \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^l) + \delta(E - \xi_{\mathbf{k}}^u) \right\}, \quad (4.116b)$$

примећујемо да испред трећег члана у $\mathcal{N}_C$ стоји фактор $1/4$, док је на истом месту у $\mathcal{N}_\Delta$, уместо $1/4$, само 1 .

Одавде можемо да донесемо следећи закључак: С обзиром да фактор $1/4$ множи члан који потиче од постојања области $\mathcal{O}_1$ у $\mathbf{k}$ -простору, с обзиром да ова област постоји управо због интензивног одбијања међу електронима, карактеристичног за јако корелисане системе, односно због (довољно) велике вредности параметра U , закључујемо да је присуство (јаких) корелација, односно интеракције међу електронима, последица специфичности суперпроводне фазе.

Дакле, показали смо да се феномен високотемпературске суперпроводности у купратним суперпроводницима може објаснити као последица (снажних) корелација које у систему постоје услед интензивног одбијања међу електронима.

Погледајмо, за крај, како би изгледали оператори аналогни онима који су коришћени приликом спровођења $u - v$ трансформације [8].

4.3.4 Екситациони спектар ХК модела суперпроводника

На основу чињенице да, у присуству одбојне међуелектронске интеракције долази до одбијања међу електронима и да се, као последица тога, валентна енергијска зона цепа на две "под-траке", при чему постоји могућност да се два електрона нађу у једном истом $\mathbf{k}$ -стању, да у $\mathbf{k}$ -стању

¹⁹С обзиром да смо у извођењу израза за Δ користили $\Delta \ll W, U$, можемо узети да добијени резултат важи и на температури апсолутне нуле, односно $\Delta(0)$.

буде само један електрон (са одређеном оријентацијом спина), или да стање буде непопуњено, можемо да закључимо да је природа електронских ексцитација сложенија у односу на елементарне ексцитације које се могу описати помоћу Ферми-оператора, $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ и $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$ [4].

Наиме, с обзиром на резултате добијене за енергијски спектар ХК модела, можемо да закључимо да би се, у овом случају, ексцитације електрона у систему креирале под дејством следећих оператора:

$$\hat{\zeta}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger (\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma}), \quad \hat{\eta}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger = \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma}, \quad (4.117)$$

док би деловање оператора

$$\hat{\zeta}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} (\hat{1} - \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma}), \quad \hat{\eta}_{\mathbf{k}\sigma} = \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} \hat{n}_{\mathbf{k},-\sigma} \quad (4.118)$$

довело до њиховог анихилирања. Показује се, међутим, као што смо на крају претходног Одељка нагласили, да је јединствену енергију ексцитација могуће добити формулисањем линеарне комбинације креационих и анихилационих оператора, сличну оној која се користи у БЦС теорији [8]. За разлику од БЦС теорије, с обзиром да се ексцитације у систему врше под дејством оператора (4.117) и (4.118), нове операторе (у ознаци $(\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{l/u})^\dagger$, односно $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{l/u}$) на следећи начин [4]:

$$\begin{aligned} (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^l)^\dagger &= \sqrt{2}x_{\mathbf{k}}\hat{\zeta}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger - \sigma(\pm)z_{\mathbf{k}}\hat{\zeta}_{-\mathbf{k},-\sigma}^\dagger & (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^u)^\dagger &= z_{\mathbf{k}}\hat{\eta}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger - \sigma(\pm)\sqrt{2}y_{\mathbf{k}}\hat{\eta}_{-\mathbf{k},-\sigma}^\dagger \\ \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^l &= \sqrt{2}x_{\mathbf{k}}\hat{\zeta}_{\mathbf{k}\sigma} - \sigma(\pm)z_{\mathbf{k}}\hat{\zeta}_{-\mathbf{k},-\sigma}^\dagger & \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^u &= z_{\mathbf{k}}\hat{\eta}_{\mathbf{k}\sigma} - \sigma(\pm)\sqrt{2}y_{\mathbf{k}}\hat{\eta}_{-\mathbf{k},-\sigma}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.119)$$

где је $\sigma(\pm)$ фактор знака који узима вредност 1 у случају $\sigma = \uparrow$, а вредност -1 када је $\sigma = \downarrow$.

Директним деловањем оператора (4.119) на основно стање ХК модела, $|\Psi\rangle$, дефинисано у Одељку 4.3.2, директно се показује да важи [4]:

$$\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{l/u}|\Psi\rangle = 0 \quad (4.120a)$$

$$E_{\mathbf{k}}^{l/u} \propto \langle \Psi | \hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{l/u} \hat{H} (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}\sigma}^{l/u})^\dagger | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle, \quad (4.120b)$$

где је $\hat{H} = \hat{H}_{HK} + \hat{H}_{par}$. У добијању израза (4.120) смо искористили апроксимацију $g \ll W, U$.

Величине $E_{\mathbf{k}}^{l/u} = \sqrt{(\xi_{\mathbf{k}}^{l/u})^2 + \Delta^2}$ (уведене у Одељку 4.3.2), где смо означили $\xi_{\mathbf{k}}^l = \xi(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$, док је $\xi_{\mathbf{k}}^u = \xi(\mathbf{k}) + U = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U$, одговарају, дакле, ексцитационим енергијама ХК модела.

На овај начин смо се, дакле, уверили да између суперпроводника јако корелисаног система и конвенционалног, БЦС суперпроводника, заиста постоји јасна аналогија. Специфичност суперпроводне фазе ХК модела се огледа у присуству јаких корелација услед којих се, дакле, ексцитациони спектар састоји из две енергијске "гране", у којима се ексцитације одвијају независно једна у односу на другу [4].

Закључак

Као што смо видели, избором ефикасног теоријског модела, испитали смо систем јако корелисаних електрона. Другим речима, показали смо да је могуће приступити и, на крајње једноставан начин испитати систем у ком постоји снажна интеракција међу електронима и на тај начин објаснити поједине физичке појаве, карактеристичне за овакве системе - фазни прелаз из металног у (Мотово) изолаторско стање и фазни прелаз из металног у специфично суперпроводно стање.

Наиме, у Глави 1 смо анализу започели увођењем Хабардовог модела, при чему смо јасно објаснили порекло сваког од чланова. Наиме, као што смо видели, у питању је теоријски модел који на једноставан начин описује чврсто тело са кристалном структуром, при чему су урачунати процеси тунелирања електрона између атома решетке и међуелектронска интеракција. Показали смо да, без обзира да ли теоријску анализу спроводимо у директном (координатном, $\mathbf{r}$), или реципрочном (импулсном, $\mathbf{k}$) простору, увек је један од чланова недијагоналан, што нам је управо отежавало даљи поступак. У то смо се нарочито уверили приликом спровођења методе Гринових функција (ГФ) на Хабардовом моделу, с обзиром да је било неопходно увести одређене апроксимације како би поступак био спроведен до краја. Међутим, апроксимација коју смо искористили, иако прилично једноставна, није нам много олакшала рачунски поступак. Поред тога, добијени резултат је важио само за температуру апсолутне нуле ($T = 0K$), док на коначним температурама (када електрони достижу енергије изнад Фермијевог нивоа) до изолаторског стања не долази.

У Глави 2, са циљем поједностављивања поступка и могућности анализе фазног прелаза метал-Мотов изолатор на коначним температурама (с обзиром да многи експериментални резултати то потврђују), извршена је модификација интеракционог члана у Хабардовом моделу и тако формулисан Хаџугаи-Кохмотов (ХК) модел. Овај модел се показао много погоднијим, једноставнијим за анализу (у односу на Хабардов модел), као и веродостојним, с обзиром на аналогију у добијеним резултатима теоријске анализе. Претпоставке које смо искористили у представљању модела су, наиме, *бесконечно велик домет интеракције*, односно *интеракција чија јачина не слаби са порастом електронског међурастојања* (интеракција типа $1/r^\alpha$), за $\alpha \rightarrow 0$, где је r растојање између интерагујућих електрона. Добијени резултати о енергијској структури и могућност спровођења анализе на коначним температурама, иако другачије у односу на Хабардов модел, довело нас је до објашњења појаве фазног прелаза из проводног стања у изолаторско стање Мотовог изолатора.

Затим, у Глави 3 смо анализу посветили испитивањем термодинамичких величина, чије се добијање показало могућим уколико се, при томе, пође од ХК модела. Термодинамичке величине које смо испитали су, дакле: хемијски потенцијал, (унутрашња) енергија система (обрачуната по чвору решетке), топлотни капацитет (такође по чвору решетке), ентропија система по атому (чвору) решетке, као и степен двоструке попуњености стања у $\mathbf{k}$ -простору. Резултати које смо

добили, коришћењем нумеричке интеграције командом *NIntegrate* у програму *Wolfram Mathematica* 8, као што смо видели, у сагласности су са очекивањима, у шта смо се и уверили, дискутовањем добијених графичких приказа, за сваку од наведених физичких величина.

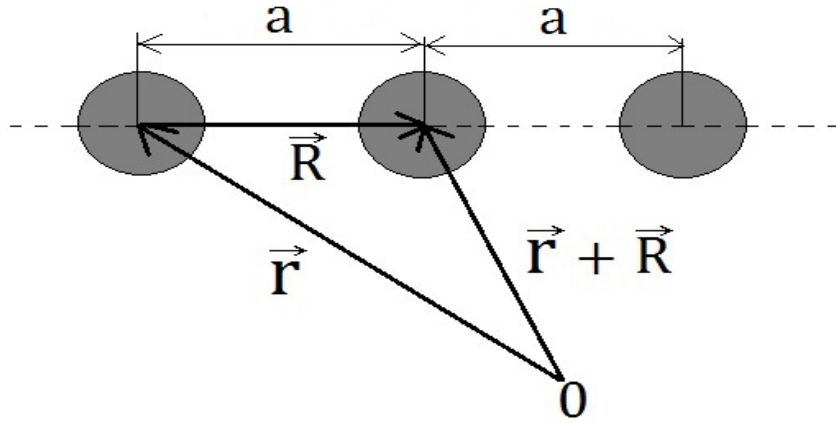
Коначно, у Глави 4 смо показали како се ХК модел, као типичан модел за анализу Мотовог изолатора, може применити у теоријској анализи високотемпературских суперпроводника, тако што смо искористили експерименталну чињеницу да се до специфичне суперпроводности може доћи уколико се над системом који испољава Мотову изолаторску фазу спроведе поступак допирања, односно мењања концентрације електрона, а што је познато да се ради заменом одређених хемијских елемената другим, који се од полазног разликује по валентности. Међутим, као што смо видели, додатна погодност ХК модела се огледала у чињеници да је могуће да, уместо промене концентрације електрона, само променимо вредност параметра међуелектронске интеракције U , услед чега је рачун значајно поједностављен, због специфичне зависности хемијског потенцијала, који се са температуром не мења уколико важи $N_e = N$, односно $\rho = 1$. Резултати које смо добили показали су очигледну аналогију са резултатима које добијамо анализом суперпроводника у БЦС теорији. Резултати које смо добили су: енергија (везаног) стања електронског пара, геп једначина, затим полазна једначина у одређивању критичне температуре, као и ексцитациона енергија. На основу добијених резултата, могли смо да закључимо да специфичности суперпроводне фазе потичу од присуства (јаких) међуелектронских корелација, односно одбојне интеракције која постоји међу електронима.

Дакле, можемо да закључимо да урачунавање ове јаке корелисаности међу електронима може да нам послужи у анализи оваквих ефеката. Наиме, постојање стања Мотовог изолатора није било могуће разјаснити у оквиру (стандардне) зонске теорије. Такође, феномен високотемпературске суперпроводности није било могуће објаснити у оквирима БЦС теорије. Према томе, урачунавањем међуелектронских корелација, уз помоћ ХК модела, решена су оба проблема у кондензованим системима ове врсте.

Додатак А

Брилуенова зона и прелазак са суме на интеграл

Кристална решетка представља систем у ком су атоми/молекули правилно геометријски распоређени у простору, односно налазе се у чворовима решетке (одређени векторима положаја $\mathbf{r}$), на тачно одређеном међусобном растојању (означеном са a_α дуж правца α , где је $\alpha = 1, 2, \dots, D$, где је D димензионалност решетке). Једноставности ради, посматрајмо један атом по чвору (видети Сл. 20 за пример једнодимензионалне решетке (низа)).



Сл. 20: Положаји атома у чворовима решетке, распоређених у низ ($D = 1$)

Ова периодичност се, пре свега, огледа у потенцијалу решетке (у ознаци $V(\mathbf{r})$) (Глава 1), што записујемо на следећи начин:

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

где смо са $\mathbf{R}$ означили вектор положаја једног чвора у односу на други (као на слици изнад), дефинисан са

$$\mathbf{R} = \sum_{\alpha=1}^D n_\alpha \mathbf{a}_\alpha = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + \dots + n_D \mathbf{a}_D, \quad (\text{A.2})$$

где су $\mathbf{a}_\alpha$, $\alpha = 1, 2, \dots, D$ основни вектори транслације решетке, а $n_\alpha \in \mathbb{Z}$.

Вектор положаја $\mathbf{r}$ у (А.1) чак не мора ни да се односи на сам чвор, већ може да представља произвољну тачку у простору, с обзиром да периодичност потенцијала "ствара услове" за постојање периодичности у читавом простору решетке. Можемо показати да се периодичност решетке огледа и у реципрчном ($\mathbf{k}$) простору, коришћењем Фуријеове трансформације [2]:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (\text{A.3})$$

Наиме, на основу (А.1), следи:

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = V(\mathbf{r}), \quad (\text{A.4})$$

тако да за таласне векторе $\mathbf{K}$, по којима се врши развој у (А.3), мора важити:

$$e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} = 1. \quad (\text{A.5})$$

Даље, може се показати да и својствене функције $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ хамилтонијана произвољног $\mathbf{k}$ стања електрона, $\hat{H}_{\mathbf{k}}$, важи тзв. *Блохова теорема*, према којој се $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ могу написати у форми производа функције равног таласа и функције периодичне по $\mathbf{R}$ [1]:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \text{где је} \quad u(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u(\mathbf{r}), \quad (\text{A.6})$$

за коју се периодичност у (директном) простору обезбеђује постављањем тзв. *Борн-Карманових граничних услова* [1, 10]:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha}) = u(\mathbf{r} + N_{\alpha}\mathbf{a}_{\alpha}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{iN_{\alpha}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}} = \Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}). \quad (\text{A.7})$$

Да би ово важило, очигледно, мора важити $\exp(iN_{\alpha}\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_{\alpha}) = 1$. Таласни вектори за које ово важи одговарају векторима положаја *чворова реципрчне решетке*.

Затим, ако бисмо посматрали својствене енергије $E(\mathbf{k})$ и $E(\mathbf{k} + \mathbf{K})$, при чему за $\mathbf{K}$ важи (А.5), а за $\mathbf{k}$ Борн-Карманов гранични услов, добили бисмо:

$$\hat{H}_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}}\Psi_{\mathbf{k}} \quad \text{и} \quad \hat{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} = E_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\Psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}} = E_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\Psi_{\mathbf{k}}, \quad (\text{A.8})$$

односно

$$\hat{H}_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\Psi_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}\Psi_{\mathbf{k}}, \quad (\text{A.9})$$

одакле можемо да закључимо да су енергетска стања $E_{\mathbf{k}}$ и $E_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}$ еквивалентна (енеригји $E_{\mathbf{k}}$ једнозначно одговара енергија $E_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}$) [1].

Другим речима, периодичност решетке огледа се и у периодичности (измерених) електронских енергија, односно $E_{\mathbf{k}} = E_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}$. Подручје енергија, односно $\mathbf{k}$ -простора, изван којег се енергије понављају, назива се (**првом**) **Брилуеновом зоном**.

Да бисмо дошли до правила за прелазак са суме на интеграл у $\mathbf{k}$ -простору, прво морамо да дефинишемо елемент запремине овог простора. Како бисмо то урадили, прво ћемо да изразимо произвољни $\mathbf{k}$ -вектор, аналоган вектору положаја $\mathbf{r}$ у директном простору.

Произвољни таласни вектор ($\mathbf{k}$ -вектор) у D -димензионом реципрчном простору дат је изразом

$$\mathbf{k} = \sum_{a=1}^D \frac{m_a}{N_a} \mathbf{b}_a, \quad (\text{A.10})$$

где су $\mathbf{b}_\alpha$ основни вектори translације у реципрочном простору, $m_\alpha \in \mathbb{Z}$, а N_α је број чворова у решетки дуж правца α , односно $N = \prod_{\alpha=1}^D N_\alpha$.

Сада можемо да дефинишемо елемент запремине $\mathbf{k}$ -простора. Наиме, овај елемент запремине (означимо га са $\delta^D \mathbf{k}$) је одређен векторима

$$\mathbf{k}_\alpha^{(0)} = \frac{1}{N_\alpha} \mathbf{b}_\alpha. \quad (\text{A.11})$$

На пример, у три димензије ($D = 3$), елемент запремине $\mathbf{k}$ -простора износи

$$\delta^3 \mathbf{k} = \frac{1}{N_1} \mathbf{b}_1 \cdot \left(\frac{1}{N_2} \mathbf{b}_2 \times \frac{1}{N_3} \mathbf{b}_3 \right) = \frac{1}{N} \mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3). \quad (\text{A.12})$$

Мешовити производ у (A.12) бројно је једнак запремини елементарне ћелије $\mathbf{k}$ -простора (у ознаци v^*), која је са запремином елементарне ћелије директног простора $v = V/N$ (V - запремина кристала (читавог директног простора)) повезана формулом [1] $v^* = (2\pi)^3/v = N(2\pi)^3/V$, одакле се добија

$$\delta^3 \mathbf{k} = \frac{(2\pi)^3}{V}. \quad (\text{A.13})$$

За произвољну димензију, овај израз има облик

$$\delta^D \mathbf{k} = \frac{(2\pi)^D}{\Omega}, \quad (\text{A.14})$$

где је $\Omega \equiv V_D$ запремина D -димензионалне решетке. Користећи (A.13), односно (A.14), можемо доћи до траженог правила преласка са суме на интеграл.

Урадићемо то на следећи начин. Посматрајмо произвољну функцију таласног вектора (означићемо је са $f(\mathbf{k})$) и просумирајмо је по свим таласним векторима, односно $\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})$. Уколико бисмо функцију $f(\mathbf{k})$ помножили и поделили елементом запремине датом у (A.14), имали бисмо

$$\sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \frac{\delta^D \mathbf{k}}{\delta^D \mathbf{k}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^D} \sum_{\mathbf{k}} \delta^D \mathbf{k} f(\mathbf{k}) \quad (\text{A.15})$$

У лимесу бесконачно малог елемента запремине, $\delta^D \mathbf{k} \rightarrow 0$, елемент запремине означавамо са $d^D \mathbf{k}$, тако да имамо:

$$\lim_{\delta^D \mathbf{k} \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) \rightarrow \Omega \int \frac{d^D \mathbf{k}}{(2\pi)^D} f(\mathbf{k}), \quad (\text{A.16})$$

што уједно представља и правило преласка са суме на интеграл, коришћено у овом раду.

Додатак В

Основне особине суперпроводника у БЦС теорији

Овде ћемо, на једном месту, изложити поступак извођења формула за неке важне величине којима је окарактерисан систем *конвенционалног суперпроводника*, односно суперпроводника описаног БЦС теоријом. Као што је у Глави 4 речено, ови су нам резултати неопходни ради упоређивања са резултатима ХК модела ВТС (високотемпературског суперпроводника). У Глави 4, изнети су крајњи резултати, чије ће детаљно извођење овде бити дато.

Ови резултати обухватају (као што смо видели у Глави 4): енергију једног Куперовог пара, функцију основног стања, једначину енергијског процепца и универзални БЦС однос $2\Delta(T = 0)/T_C$. Размотримо резултате наведеним редом.

В.1 Енергија везе Куперовог пара

Да би постојао Куперов пар, потребна су два електрона. Посматрајмо, дакле, систем два интерагујућа електрона, са енергијама блиским Фермијевој (у ознаци E_F). Полазимо од Шредингерове једначине [8, 13]:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_1^2} + -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_2^2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (E - 2E_F) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (\text{В.1})$$

где је $m = m_e$ (маса једног електрона), а E система два електрона¹.

Овде нам је циљ да добијемо управо вредност енергије E и покажемо да важи $E < 0$. Као први корак, уводимо нове променљиве [8]:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2. \quad (\text{В.2})$$

Дакле, јасно је да вектор $\mathbf{R}$ представља центар масе система ова два електрона, а $\mathbf{r}$ одређује њихов релативни (међусобни) положај. Коришћењем (В.2) у изразу (В.1), за Шредингерову једначину

¹Сваки од електрона има "своју" енергију, при чему енергије посматрамо у односу на Фермијев ниво (E_F). Енергију првог електрона можемо записати као $E_1 - E_F$, а другог $E_2 - E_F$, с обзиром да Фермијев ниво зависи само од температуре, на којој се цео систем налази, тако да има исту вредност (E_F) за оба електрона. Укупна енергија овог система је, дакле: $E_1 + E_2 - 2E_F \equiv E - 2E_F$.

добијамо облик:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}^2} + -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = (E - 2E_F) \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (\text{B.3})$$

где је $m^* = 2m$ (укупна маса система два електрона), а $\mu = m/2$ редукована маса овог система.

Израз (B.3) се може додатно упростити. Наиме, с обзиром да потенцијал међуелектронске интеракције $V(\mathbf{r})$ не зависи од координате центра масе $\mathbf{R}^2$, таласну функцију $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ пишемо у облику [8]:

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \quad (\text{B.4})$$

где је $\mathbf{K}$ вектор положаја центра масе у реципрочном простору ($\mathbf{K} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{R}}$)³. Сада Шредингерова једначина постаје:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \left(E - 2E_F - \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \right) \psi(\mathbf{r}), \quad (\text{B.5})$$

где је $K \equiv |\mathbf{K}|$. Уведимо сада Фуријеову трансформацију (Фурије-лик) функције $\psi(\mathbf{r})$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \psi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{B.6})$$

Уврстимо сада (B.6) у (B.5), затим помножимо целу једначину са $e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$ и проинтегралимо по $\mathbf{r}$. Као резултат добијамо:

$$\sum_{\mathbf{k}'} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi(\mathbf{k}') = \left(E - 2E_F - \frac{\hbar^2 k^2}{m} \right) \psi(\mathbf{k}), \quad (\text{B.7})$$

при чему смо искористили интегралну репрезентацију Диракове делта-функције:

$$\delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{\Omega} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{r}, \quad (\text{B.8})$$

где је Ω запремина кристала, као и увођење матричног елемента за интеракцију:

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{\Omega} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} d^3 \mathbf{r}. \quad (\text{B.9})$$

Далје, узимамо да интеракција V постоји *само* у близину Фермијевог нивоа, у интервалу који одговара опсегу енергија фонона $[-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D]$ ⁴, а да је изван тог интервала једнака нули. Такође, с обзиром на претходно речено, поставићемо услов да је интеракција V привлачна. Дакле:

$$V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \begin{cases} -\frac{W}{\Omega}, & \text{за } -\hbar\omega_D \leq \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq \hbar\omega_D \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (\text{B.10})$$

²Овај потенцијал зависи само од међусобног растојања интерагујућих честица (електрона).

³Овде је искоришћена нотација за тзв. набла оператор, односно оператор парцијалног извода: $\nabla_{\mathbf{R}} \equiv \partial/\partial \mathbf{R}$.

⁴Са ω_D је означена тзв. Дебајева фреквенција, која одговара максималној енергији осциловања кристалне решетке, односно фонона [8, 12]. Овај интервал је одабран на основу претходно изложене приче о електрон-фонон интеракцији.

где је $W > 0$, тако да је $V < 0$, односно интеракција између електрона је *привлачна*. Коришћењем (В.10) и његовим уврштавањем у (В.6), добијамо:

$$1 = -\frac{W}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{E - 2E_F - 2\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}. \quad (\text{В.11})$$

Показује се погоднијим да се ради у енергетској репрезентацији, тако да ћемо да пређемо са суме по $\mathbf{k}$ на интеграл, па затим са $\mathbf{k}$ (таласног вектора) на E (енергију). Дакле, најпре искористимо раније наведено правило преласка са суме на интеграл

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \varphi(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{k} \varphi(\mathbf{k}), \quad (\text{В.12})$$

где је $\varphi(\mathbf{k})$ произвољна функција таласног вектора. Тако добијамо:

$$1 = -\frac{W}{(2\pi)^3} \int_{-\mathbf{k}_D}^{\mathbf{k}_D} d^3\mathbf{k} \frac{1}{E - 2E_F - 2\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (\text{В.13})$$

С обзиром да је реч о вектору у тродимензионалном простору⁵, проблем даље решавамо преласком у сферни координатни систем, односно коришћењем сферних координата:

$$k \equiv |\mathbf{k}| \in [0, \infty), \quad \theta \in [0, \pi), \quad \varphi \in [0, 2\pi). \quad (\text{В.14})$$

На тај начин, интеграл у изразу (В.13) сводимо на

$$1 = -W \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_{-k_D}^{k_D} dk k^2 \frac{1}{E - 2E_F - 2\frac{\hbar^2 k^2}{2m}} \quad (\text{В.15})$$

Сада, искористимо релацију између кинетичке енергије слободног електрона у односу на Фермијев ниво (означимо је са $\varepsilon(\mathbf{k})$) и њој одговарајућег таласног вектора:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \equiv \varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 - E_F \rightarrow k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E + E_F)} \quad (\text{В.16})$$

Када искористимо (В.16) као смену за интеграл у (В.15), добијамо:

$$1 = \frac{2\pi W}{(2\pi)^3} \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \int_0^{\hbar\omega_D} \sqrt{\varepsilon + E_F} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E}. \quad (\text{В.17})$$

Затим, користећи правило за изражавање интеграла помоћу густине енергијских стања [1, 8]:

$$\frac{2\pi W}{(2\pi)^3} \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \sqrt{\varepsilon + E_F} \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E} \equiv 2W \int_0^{\hbar\omega_D} N(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{2\varepsilon - E}, \quad (\text{В.18})$$

где смо такође искористили формулу за густину енергијских стања, посматрану од Фермијевог нивоа (E_F) [8]:

$$N(\varepsilon) = \frac{2\pi}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon + E_F}. \quad (\text{В.19})$$

⁵ Димензионалност реципрочног простора једнака је димензионалности директног простора D [1].

Даље, с обзиром да се интеграција врши у танком енергетском слоју $|\varepsilon| \ll \omega_D$ ⁶, тако да ћемо апроксимирати: $N(\varepsilon) \approx N(0) \equiv \text{const.}$ Другим речима, густина стања се узима за константу, једнаку густини стања на Фермијевом нивоу.

Решавањем интеграла у (В.18), узимајући, наравно, $N(0) \neq N(\varepsilon)$, за енергију система електрона E добијамо:

$$E = -2\hbar\omega_D \frac{1}{e^{\frac{1}{WN(0)}} - 1}. \quad (\text{В.20})$$

Уколико бисмо узели да је параметар интеракције (W) мали, односно $N(0)W \ll 1$, јединица уз експоненцијалну функцију у (В.20), одакле се добија нешто једноставнији израз за енергију система спарених електрона:

$$E = -2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{WN(0)}}. \quad (\text{В.21})$$

С обиром да је експоненцијална функција у овом изразу увек позитивна, као и $\hbar\omega_D > 0$, добијамо да за енергију пара електрона важи $E < 0$. Дакле, уочавамо да постоји везано стање [8, 13].

Резултат за енергију (В.21) ћемо користити када будемо поредили резултате поступка спроведеног за систем описан ХК хамилтонијаном. Наиме, видећемо да се јављају некакве специфичности у односу на резултате који важе за нискотемпературске суперпроводнике [8, 13].

В.2 Функција основног стања БЦС суперпроводника

У БЦС теорији суперпроводника, као што је речено, суперпроводна фаза се третира као стање у ком постоје формирани Куперови парови. Њих, као што је претходно објашњено, чине електрони (по два електрона супротног спина у сваком Куперовом пару) који се крећу кроз решетку уз занемарљиво малу отпорност [6, 8]. Дакле, ови електрони поседују кинетичку енергију, као и енергију на рачун спаривања (енергија дата изразом (В.21), коју поседује један такав пар), која снижава енергију основног стања. Хамилтонијан укупне енергије суперпроводника према БЦС теорији (у ознаци $\hat{H}_{BCS}$) има, дакле, облик [8]:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow}, \quad (\text{В.22})$$

где можемо искористити *оператор креације* и *оператор аниhilације електронског пара* (Глава 4):

$$\hat{\Delta}^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad \hat{\Delta} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (\text{В.23})$$

респективно. БЦС хамилтонијан, као што видимо из (В.22), не урачунава међуелектронску интеракцију. Дакле, чланови који фигуришу у $\hat{H}_{BCS}$ описују Куперове парове електрона који се крећу кроз кристалну решетку.

Да бисмо дошли до израза за функцију основног стања, увешћемо нове операторе, поступком познатим као *u-v (Богољубовљева) трансформација* [8].

Такође, показује се да је, најпре, корисно применити тзв. *апроксимацију средњег поља* (МФА)⁷ на члан спаривања (други члан у (В.22)). Ова се апроксимација спроводи на следећи начин.

⁶Све време разматрамо случај ниских температура, на којима су јони решетке веома слабо побуђени, тако да енергије које достижу нису велике. Самим тим, ни максимална достигнута енергија $\hbar\omega_D$ такође није велика.

⁷Ова скраћеница потиче од назива *Mean field approximation* [8].

Посматрајмо последњи члан у $\hat{H}_{BCS}$ и означимо га скраћено као $\hat{H}_{par}$. Апроксимација средњег поља, примењена на операторски део овог члана гласи [8]:

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow} \rightarrow \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow} + \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \langle \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle - \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle \quad (\text{B.24})$$

Дакле, ова апроксимација нас доводи до разматрања проблема у виду "појединачног" дејства компонената (чланова суме) оператора $\hat{\Delta}^\dagger$ и $\hat{\Delta}$. Овде ћемо увести још једну ознаку ⁸:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \langle \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle, \quad \Delta_{\mathbf{k}}^* = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \langle \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow}^\dagger \rangle \quad (\text{B.25})$$

пре свега у циљу краћег записа, али ће нам физички смисао ове величине касније постати јаснији. Наиме, видећемо да се ради о *енергетском процепу* у спектру. Коришћењем (B.24) и (B.25), хамилтонијан (B.22) (у MFA) постаје:

$$\hat{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} \right) + \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \langle \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle \quad (\text{B.26})$$

Сада прелазимо на Богољубовљеву трансформацију. Наиме, за почетак уводимо "нове" операторе (у ознаци $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ и $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}$) помоћу "старих" Ферми-оператора:

$$\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma} = u_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\sigma} + v_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}, -\sigma}^\dagger, \quad \hat{c}_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger = u_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\sigma}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* \hat{C}_{\mathbf{k}, -\sigma}, \quad (\text{B.27})$$

при чему за величине $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ важи $u_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}$ и $v_{-\mathbf{k}} = v_{\mathbf{k}}$. Дакле, ове величине су парне по $\mathbf{k}$.

Даље, с обзиром да су оператори $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ и $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}$ Ферми-оператори, захтеваћемо да за нове операторе важе антикомутационе релације истог облика:

$$\left[\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma_1}, \hat{C}_{\mathbf{p}\sigma_2}^\dagger \right]_+ = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \delta_{\sigma_1, \sigma_2} \hat{I}, \quad (\text{B.28})$$

где је $\hat{I}$ јединични оператор. Користећи овај услов, на основу (B.27) и (B.28) долазимо до релације коју $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ функције морају задовољавати:

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1, \quad (\text{B.29})$$

што ћемо касније и искористити. Како ће нам трансформација (B.27) помоћи да добијемо функцију основног стања? Дакле, користећи ова правила, изразимо најпре нове операторе, $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}$ и $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$, преко старих, $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}$ и $\hat{c}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$:

$$\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \quad \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = u_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + v_{\mathbf{k}}^* \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (\text{B.30})$$

Оператор $\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}$, дакле, анихилира електрон са спином $\uparrow$ у стању $\mathbf{k}$, а креира електрон са спином $\downarrow$ са импулсом $-\mathbf{k}$ (супротног смера у односу на $\mathbf{k}$). На тај начин, можемо рећи да је дошло до стварања сложене квазичестице, познате као *Богољубон* [8]. Означимо са $\hat{N}_{\mathbf{k}\sigma}$ оператор броја ових (квази)честица $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}$, а са $N_{\mathbf{k}\sigma}$ својствену вредност оператора $\hat{N}_{\mathbf{k}\sigma}$. Основно БЦС стање одговара случају $N_{\mathbf{k}\sigma} = 0$, односно $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma} |\Psi_{BCS}\rangle = 0$, у шта се можемо уверити дијагонализацијом хамилтонијана $\hat{H}_{BCS}$, чиме се за енергију система добија

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \hat{C}_{\mathbf{k}\sigma} = E_0 + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} E_{\mathbf{k}} \hat{N}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (\text{B.31})$$

⁸Подразумева да је интеракција $V = V(\mathbf{k}, \mathbf{p})$ реална, односно да важи $V^* = V$.

где је E_0 енергија основног стања, док преостали члан представља енергију ексцитације ($E \geq E_0$), где је $E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta|^2}$ (са предзнаком "+") (енергија Богољубона у $\mathbf{k}$ -стању). Основно стање, дакле, заиста одговара стању у ком Богољубони одсуствују, односно $N_{\mathbf{k}\sigma} = 0$, за свако $\mathbf{k}$ ($-\pi \leq ka \leq \pi$) и $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$.

На основу реченог, деловање оператора $\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}$ у (В.30) на БЦС стање даје

$$u_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} |\Psi_{BCS}\rangle = v_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |\Psi_{BCS}\rangle. \quad (\text{В.32})$$

Запишимо функцију $|\Psi_{BCS}\rangle$ као произвољну комбинацију оператора⁹ $\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$. Као погодан облик за то, показује се експоненцијална функција:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \mathcal{A} \prod_{\mathbf{k}} e^{\alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle, \quad (\text{В.33})$$

где је $\mathcal{A} \in \mathbb{C}$ нормализациона константа, а $\alpha_{\mathbf{k}} \in \mathbb{C}$ коефицијент чији се конкретан облик налази постављем услова да функција стања $|\Psi_{BCS}\rangle$ буде нормирана [10, 19], односно $\langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle = 1$. Облик (В.33) је оправдано користити, самим тим што непопуњено (вакуумско) стање $|0\rangle$ треба да важи у одсуству електронског (Куперовог) пара, а то управо задовољава експоненцијална функција, с обзиром да је $e^{\hat{0}}|0\rangle = \hat{1}|0\rangle = |0\rangle$, где је $\hat{0}$ тзв. нула оператор. С обзиром на важење Паулијевог принципа, изрази облика $(\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)^m$, за $m > 1$ морају одсуствовати. На основу тога, развојем експоненцијалне функције у (В.33) у ред, опстају само чланови за које је $m = 0$ и $m = 1$:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \mathcal{A} \prod_{\mathbf{k}} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger)^m}{m!} |0\rangle = \mathcal{A} \prod_{\mathbf{k}} \left(\hat{1} + \alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{В.34})$$

Преостаје нам, дакле, да пронађемо конкретне изразе за $\alpha_{\mathbf{k}}$ и $\mathcal{A}$.

Да бисмо пронашли израз за $\alpha_{\mathbf{k}}$, увешћемо најпре сраћену ознаку $\theta_{\mathbf{k}} \equiv \alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$. Директно се показује да важи:

$$\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}} |0\rangle = \alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}^2 |0\rangle = 2\theta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad \dots, \quad \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} \theta_{\mathbf{k}}^m |0\rangle = m\theta_{\mathbf{k}}^{m-1} \alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{В.35})$$

што нас даље води на

$$\hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} \left(e^{\alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle \right) = \alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \left(e^{\alpha_{\mathbf{k}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger} |0\rangle \right). \quad (\text{В.36})$$

Поређењем са (В.32), видимо да важи:

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}}, \quad (\text{В.37})$$

тако да израз (В.34) постаје

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \mathcal{A} \prod_{\mathbf{k}} \left(\hat{1} + \frac{v_{\mathbf{k}}}{u_{\mathbf{k}}} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{В.38})$$

Затим, услов нормализације $\langle \Psi_{BCS} | \Psi_{BCS} \rangle = 1$ нас води на услов за $\mathcal{A}$:

$$\mathcal{A} = u_{\mathbf{k}} \equiv \mathcal{A}(\mathbf{k}), \quad (\text{В.39})$$

⁹У питању је оператора који креира пар.

одакле се коначно добија израз за функцију основног стања БЦС суперпроводника:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{c}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle, \quad (\text{B.40})$$

при чему смо скраћено означили $u_{\mathbf{k}} \equiv u_{\mathbf{k}} \hat{1}$.

Следеће што нас занима је једначина која се односи управо на наведени енергетски процеп у спектру екситација БЦС хамилтонијана, као и израчунавање одговарајуће критичне температуре.

В.3 Геп једначина и критична температура у БЦС теорији

Посматрамо израз (В.25), помоћу кога је уведен енергетски процеп $\Delta_{\mathbf{k}}$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \langle \hat{c}_{-\mathbf{p}\downarrow} \hat{c}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle. \quad (\text{B.41})$$

Ако бисмо искористили изразе за операторе $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ и $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}$, представљене у (В.27), за $\Delta_{\mathbf{k}}$ добијамо:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) u_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}} \left(1 - \langle \hat{C}_{-\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} \hat{C}_{-\mathbf{p}\downarrow} \rangle - \langle \hat{C}_{\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle \right), \quad (\text{B.42})$$

при чему смо искључили све оне доприносе који су недијагонални по $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ и $\hat{C}_{\mathbf{k}\sigma}$, с обзиром на претходно урађени процес дијагонализације БЦС хамилтонијана.

Даље, јасно је да средње вредности оператора у (В.42) одговарају Фермијевим функцијама расподеле по енергијама (на температури T):

$$\langle \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \langle \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \hat{C}_{-\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \frac{1}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} + 1}, \quad \text{за } E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\xi^2(\mathbf{k}) + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}, \quad (\text{B.43})$$

где је $\beta = 1/T$. На основу тога, израз у загради у (В.42) постаје:

$$1 - \langle \hat{C}_{-\mathbf{p}\downarrow}^{\dagger} \hat{C}_{-\mathbf{p}\downarrow} \rangle - \langle \hat{C}_{\mathbf{p}\uparrow}^{\dagger} \hat{C}_{\mathbf{p}\uparrow} \rangle = 1 - \frac{2}{e^{\beta E_{\mathbf{p}}} + 1} = \frac{e^{\beta E_{\mathbf{p}}} - 1}{e^{\beta E_{\mathbf{p}}} + 1} = \frac{\sinh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{p}}}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{p}}}{2}\right)} = \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{p}}}{2}\right). \quad (\text{B.44})$$

Такође, користећи горње резултате за производ $u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}$ налазимо:

$$u_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}} = |u_{\mathbf{p}}|^2 \frac{v_{\mathbf{p}}}{u_{\mathbf{p}}} = \frac{\Delta_{\mathbf{p}}}{2\sqrt{\xi^2(\mathbf{p}) + |\Delta_{\mathbf{p}}|^2}} \quad (\text{B.45})$$

На основу (В.44) и (В.45), након њиховог уврштавања у (В.42) добијамо једначину енергетског процепна $\Delta_{\mathbf{k}}$:

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{p}} \frac{V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) \Delta_{\mathbf{p}}}{2E_{\mathbf{p}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{p}}}{2}\right). \quad (\text{B.46})$$

Овде можемо да препознамо да параметру $V(\mathbf{k}, \mathbf{p})/\Omega$ одговара параметар представљен у (В.10). Дакле, према (В.10), ограничавамо се на енергијску "љуску" ширине $2\hbar\omega_D^{10}$, којој одговара $|\mathbf{k}| \leq |\mathbf{k}_D|^{11}$, док је изван тог интервала $V(\mathbf{k}, \mathbf{p}) = 0$. Ограничавањем на овај интервал, очигледно

¹⁰Мисли се на енергију $\xi(\mathbf{k})$, односно $E_{\mathbf{k}}$ без Δ .

¹¹Са $\mathbf{k}_D$ је означен тзв. Дебајев таласни вектор [7].

је да важи $V \neq V(\mathbf{k})$, односно V представља константу у посматраном опсегу $\mathbf{k}$ -вектора. Јасно је, дакле, да изостаје и зависност од $\mathbf{k}$ у изразу (В.41), одакле следи испуштање зависности од $\mathbf{k}$ -вектора и у $\Delta_{\mathbf{k}}$, односно $\Delta_{\mathbf{k}} \rightarrow \Delta$, одакле следи (уз промену ознаке $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{k}$):

$$1 = -\frac{W}{\Omega} \sum_{\mathbf{k} \leq \mathbf{k}_D} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\mathbf{k}}}{2}\right). \quad (\text{В.47})$$

Пређимо сада са суме на интеграл према правилу (В.12), као и у Одељку 4.1.1:

$$\begin{aligned} 1 &= -W \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{N(\varepsilon)}{2\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\beta\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{2}\right) \\ &= -WN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\beta\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{В.48})$$

Овде смо поново (као и раније у (В.18)) искористили $|\varepsilon| \ll \hbar\omega_D$, односно $N(\varepsilon) \approx N(0)$, где је $N(\varepsilon)$ дато у (В.19). Дакле, једначина енергијског процепа у интегралном облику гласи:

$$1 = -WN(0) \int_0^{\hbar\omega_D} d\varepsilon \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}} \tanh\left(\frac{\beta\sqrt{\varepsilon^2 + |\Delta|^2}}{2}\right). \quad (\text{В.49})$$

Овај израз нам даје релацију између енергијског процепа Δ^{12} и температуре ($T = 1/\beta$). На пример, можемо одредити величину енергијског процепа за било коју температуру. Дакле, важи да је $\Delta = \Delta(T)$.

Погледајмо најзад и универзални БЦС однос. Вредност овог односа се добија директно из геп једначине (В.49) узимањем вредности $\Delta = 0$ и износи, као што смо рекли, приближно

$$\frac{2\Delta(0)}{T_c} \approx 3,53. \quad (\text{В.50})$$

Као што смо видели (Глава 4), у случају ХК модела суперпроводника, могу се добити веома слични идентитети, али са јасном разликом у односу на резултате БЦС теорије.

¹²Наравно, ширина целог процепа је 2Δ , односно од $-\Delta$ до $+\Delta$.

Додатак С

Ојлер-Маскеронијев интегрални идентитет

Приликом изражавања критичне температуре у последњем поглављу Главе 4, добили смо интеграл облика

$$\mathcal{J} = \int_0^{\infty} dx \frac{\ln(x)}{\cosh^2(x)}, \quad (\text{C.1})$$

за који смо дали само крајњи резултат

$$\mathcal{J} = -\ln\left(\frac{4}{\pi}\right) - \gamma, \quad (\text{C.2})$$

где смо за γ рекли да износи приближно 0.577. Интеграл (C.1) је у литератури познат као *Ојлер-Маскеронијев*, или краће, *Ојлеров* интегрални идентитет (интеграл), док се γ назива *Ојлер-Маскеронијева константа* [23].

Доказивање вредности (C.2) започињемо коришћењем "помоћног" интеграла (означићемо га са P), датог са

$$P(\alpha) = \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\alpha}}{\cosh^2(x)}, \quad \text{za } \alpha \in \mathbb{C}, \quad \text{Re}(\alpha) > 0. \quad (\text{C.3})$$

Наиме, диференцијањем овог интеграла по α и узимањем, након тога, вредност $\alpha = 0$, добијамо управо интеграл (C.1):

$$\mathcal{J} = \frac{\partial P}{\partial \alpha}(\alpha = 0). \quad (\text{C.4})$$

Притом смо искористили да је (први) извод функције x^a по a једнак $x^a \ln(x)$.

За почетак ћемо у (C.3) расписати квадрат хиперболичног косинуса према својој дефиницији [19, 23] и испред заграде у имениоцу извући e^x , након чега добијамо:

$$P(\alpha) = 4 \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\alpha}}{(e^x + e^{-x})^2} = 4 \int_0^{\infty} dx \frac{x^{\alpha} e^{-2x}}{(1 + e^{-2x})^2}. \quad (\text{C.5})$$

Полазећи од идентитета

$$\frac{1}{(1 - x^2)^2} = \sum_{n=1}^{\infty} n x^{n-1}, \quad (\text{C.6})$$

израз (C.5) постаје:

$$P(\alpha) = 4 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} n \int_0^{\infty} x^{\alpha} e^{-2nx} dx. \quad (C.7)$$

Коришћењем идентитета [19]

$$\int_0^{\infty} x^{\beta} e^{-\alpha x} = \frac{\Gamma(\beta+1)}{\alpha^{\beta+1}}, \quad (C.8)$$

где је $\Gamma(\beta)$, за $\text{Re}(\beta) > 1$, тзв. *гама-функција* [19], за (C.7) добијамо

$$P(\alpha) = 4 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n-1} n \frac{\Gamma(\alpha+1)}{(2n)^{\alpha+1}} = \frac{2\Gamma(\alpha+1)}{2^{\alpha}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^{\alpha}}, \quad (C.9)$$

при чему смо у последњем кораку испред суме $\sum_n$ извукли све оно што не зависи од n . Ово смо урадили да бисмо искористили следећи идентитет [12]:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^{\alpha}} = (1 - 2^{1-\alpha}) \zeta(\alpha), \quad \text{који важи за } \text{Re}(\alpha) > -1, \quad (C.10)$$

где је $\zeta(\alpha)$ Риманова зета(ζ)-функција, дефинисана изразом [19]

$$\zeta(\alpha) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\alpha}}, \quad \text{за } \alpha \in \mathbb{C}. \quad (C.11)$$

Користећи резултате (C.9)-(C.11) долазимо до израза:

$$P(\alpha) = 2 \frac{\Gamma(\alpha+1)(1 - 2^{1-\alpha})\zeta(\alpha)}{2^{\alpha}}. \quad (C.12)$$

Дакле, добили смо израз који зависи од параметра α . Након диференцирања израза (C.12) по α и стављањем $\alpha = 0$, користећи (C.4), уз скраћену ознаку $A(\alpha) = (1 - 2^{1-\alpha})\zeta(\alpha)$, добијамо:

$$\mathcal{J} = 2 (\Gamma'(1)A(0) + A'(0) - A(0) \ln(2)), \quad (C.13)$$

при чему смо узели скраћене ознаке $\Gamma'(\beta)$ за $\frac{\partial \Gamma}{\partial \beta}(\beta)$, односно $A'(\alpha)$ за $\frac{\partial A}{\partial \alpha}(\alpha)$. Користећи познате резултате [23]: $\Gamma'(1) = -\gamma$, $\zeta(0) = -1/2$ и $\zeta'(0) = -\ln(2\pi)/2$, где је $\zeta'(\alpha) \equiv \frac{\partial \zeta}{\partial \alpha}(\alpha)$, добијамо тражену вредност:

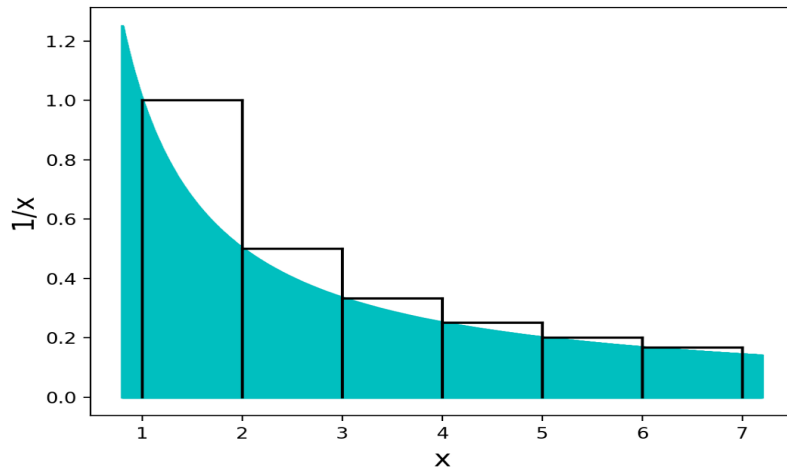
$$\mathcal{J} = 2 \left(-\frac{\gamma}{2} + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{2} \ln(2) \right) = -\ln\left(\frac{4}{\pi}\right) - \gamma, \quad (C.14)$$

чиме је доказ завршен.

Иако од мање важности за тему рада, за сам крај је занимљиво изложити и смисао константе γ . Наиме, вредност γ је у математици позната као вредност која нам говори за колико се сума хармонијског реда $\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{a=1}^n 1/a \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} H_n$ разликује од површине површи испод графика функције $1/x$, односно вредности интеграла $\int dx/x$, у интервалу $[1, \infty)$. Ово можемо концизно написати као [23]:

$$\gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\sum_{a=1}^n \frac{1}{a} - \int_1^n \frac{dx}{x} \right] \equiv \lim_{n \rightarrow \infty} [H_n - \ln(n)]. \quad (C.15)$$

Приметимо да је интеграл у (С.15) заправо континуални аналогон хармонијског реда. Графички, вредност γ се може сагледати са Сл. 21.



Сл. 21: Математички смисао Ојлер-Маскеронијеве константе γ

Дакле, као што можемо видети, у питању је површина малог сегмента у горњем десном углу сваког од правоугаоника. Користећи обиман математички поступак, може се доказати да вредност γ конвергира ка броју који припада интервалу између 0 и 1, односно да је $0 < \gamma < 1$.

Литература

- [1] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley Sons, (2004)
- [2] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer, Institutu für Physik, Department of Physics, (2009)
- [3] Y. Hatsugai, M. Kohmoto, *Exactly Solvable model of Strongly Correlated Lattice Electrons in Any Dimension*, J. Phys. Soc. Jpn., **61**, 6 (1992)
- [4] P. W. Phillips, L. Yeo, E. W. Huang, *Exact Theory for Superconductivity in a Doped Mott Insulator*, Nature Physics, Nature Publishing Group, **16**, 12 (2020)
- [5] N. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, CRC Press, (2004)
- [6] P. A. Lee, N. Nagaosa, X.-G. Wen, *Doping a Mott insulator: Physics of High-temperature Superconductivity*, Rev. Mod. Phys. **78**, 1 (2006)
- [7] М. Пантић, *Основи теорије кондензованог стања –концепт са предавања–*, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Департман за физику, (2006)
- [8] R. M. Fernandes, *Lecture Notes: BCS theory of superconductivity*, (2020)
- [9] И. Јанић, *Основи атомске физике 1. део (скрипта)*, Нови Сад, (1992)
- [10] М. Пантић, *Савремена теоријска физика – Квантна механика –концепт са предавања–*, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Департман за физику, (2019)
- [11] Д. М. Петровић, С. Р. Петровић, *Експериментална физика кондензоване материје* Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Департман за физику, (2000)
- [12] М. Пантић, *Савремена теоријска физика – Статистичка физика –концепт са предавања–*, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Департман за физику, (2019)
- [13] М. Пантић, *Квантна статистичка физика – концепт са предавања –*, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Департман за физику, (2018)
- [14] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press, (2013)
- [15] D. E. Soper, *Interacting Quantum Field Theory*, University of Oregon, (2001)
- [16] С. Радошевић, *Магнетне особине антиферомагнетних халогенида мангана*, Природно-математички факултет, Универзитет у Новом Саду, Департман за физику, (2009)
- [17] М. Кнежевић, *Основи класичне теоријске физике I део - ОСНОВИ КЛАСИЧНЕ МЕХАНИКЕ*, Универзитет у Београду, (1997)

- [18] P. V. Ubale, *Numerical Solution of Boole's rule in Numerical Integration By Using General Quadrature Formula*, Bulletin of Society for mathematical services & standards (B SO MA SS), **1**, 2 (2020)
- [19] С. Радосевић, П. Мали, *Збирка задатака из математичке физике*, Природно-математички факултет у Новом Саду, Департман за физику, "Grid" Нови Сад, (2017)
- [20] P. Kopietz, L. Bartosch, F. Schültz , *Introduction to the Functional Renormalization Group*, Springer, (2010)
- [21] C. P. Burgess, *Goldstone and pseudo-Goldstone bosons in nuclear, particle and condensed-matter physics*, Phys. Rep., **330**, 4 (2000)
- [22] C. Chen, R. Ma, X. Sui, B. Huang, T. Ma, *Antiferromagnetic Fluctuations and a Dominant dxy-wave Pairing Symmetry in Nickelate-based Superconductors*, Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing, (2022)
- [23] J. D. Walecka, A. L. Fetter, *Quantum Theory of Many-particle Systems*, Courier Corporation, (2012)

Универзитет у Новом Саду
Природно-математички факултет
Кључна документацијска информација:

Редни број:
РБР

Идентификациони број:
ИБР

Тип документације: Монографска документација
ТД

Тип записа: Текстуални штампани материјал
ТЗ

Врста рада: Мастер рад
ВР

Аутор: Бојан Обрадовић
АУ

Ментор: др Милан Пантић
МН

Наслов рада: Хаџугаи-Кохмотов модел јако корелисаних електрона
НР

Језик публикације: српски (ћирилица)
ЈП

Језик извода: српски (ћирилица) / енглески
ЈИ

Земља публикавања: Србија
ЗП

Уже географско подручје: Војводина
УГП

Година: 2022
ГО

Издавач: Ауторски репринт
ИЗ

Место и адреса: МА	Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 4, Нови Сад
Физички опис рада: ФО	(поглавља/страна/цитата/табела/графика/додатака) (4/88/23/0/21/3)
Научна област: НО	Физика
Научна дисциплина: НД	Теоријска физика кондензоване материје
Кључне речи: КР	Хабардов модел, Хаџугаи-Кохмотов модел, електрони, Мотов изолатор, високотемпературски суперпроводници
Чува се: ЧУ	Библиотека департмана за физику, ПМФ-а у Новом Саду
Важна напомена: ВН	нема
Извод: ИЗ	У овом раду се анализира Хаџугаи-Кохмотов модел и примењује у анализи фазног прелаза метал-Мотов изолатор и високотемпературских суперпроводника.
Датум прихватања теме од НН већа: ДП	
Датум одбране: ДО	
Чланови комисије: КО	
Председник комисије:	др Миодраг Крмар, редовни професор Природно-математички факултет, Нови Сад
Члан:	др Слободан Радошевић, редовни професор Природно-математички факултет, Нови Сад
Члан:	др Милан Пантић, редовни професор Природно-математички факултет, Нови Сад

University of Novi Sad

Faculty of Science

Key Words Documentation:

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Documentation type:

DT

Monograph documentation

Type of record:

TR

Textual printed material

Content code:

CC

Final paper

Author:

AU

Bojan Obradović

Mentor:

MN

dr Milan Pantić

Title:

TI

Hatsugai-Kohmoto model of strongly correlated electrons

Language of text:

LT

Serbian (cyrillic)

Language of abstract:

LA

English

Country of publication:

CP

Serbia

Locality of publication:

LP

Vojvodina

Publication year:

PY

2022

Publisher:

PU

Author's preprint

Publication place: PP	Faculty of Science, Dositej Obradović Square 4, Novi Sad
Physical description: PD	(4/88/23/0/21/3)
Scientific field: SF	Physics
Scientific discipline: SD	Theoretical Condensed Matter Physics
Key words: KW	Hubbard model, Hatsugai-Kohmoto model, electrons, Mott insulator, high-temperature superconductors
Holding data: HD	Library of Department of Physics, Faculty of Science, Novi Sad
Note: N	none
Abstract: AB	This paper analyses Hatsugai-Kohmoto model and its application in analysing the metal-Mott insulator phase transition and high-temperature superconductors.
Accepted by the Scientific Board: ASB	
Defended on: DE	
Thesis defend board: DB	
President:	dr Miodrag Krmar, Full professor Faculty of Science, Novi Sad
Member:	dr Slobodan Radošević, Associate Professor Faculty of Science, Novi Sad
Member:	dr Milan Pantić, Full professor Faculty of Science, Novi Sad