

# Od płaszczyzn miedziowo-tlenowych do sieci kropek kwantowych: fizyka układów silnie skorelowanych

M. Zegrodnik<sup>1</sup>, P. Wójcik<sup>2</sup>, J. Spałek<sup>3</sup>  
A. Biborski<sup>1</sup>, M. N. Nowak<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Akademickie Centrum Materiałów i Nanotechnologii, Akademia Górniczo-Hutnicza*

<sup>2</sup>*Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza*

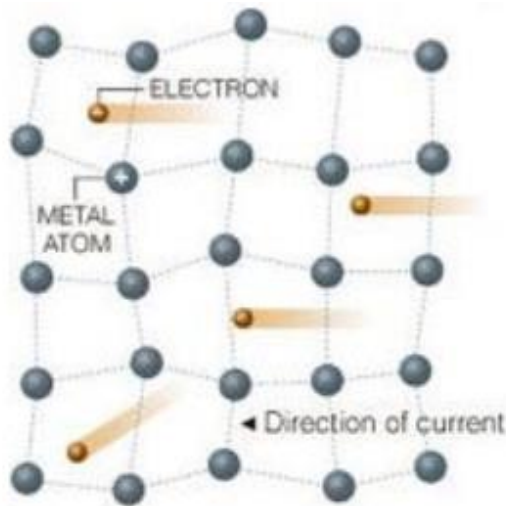
<sup>3</sup>*Instytut Fizyki Teoretycznej, Uniwersytet Jagielloński*

## Plan prezentacji

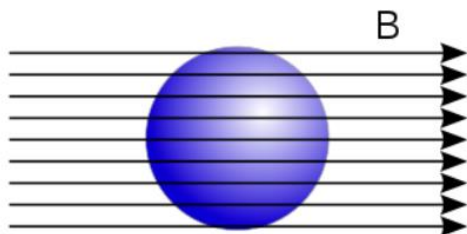
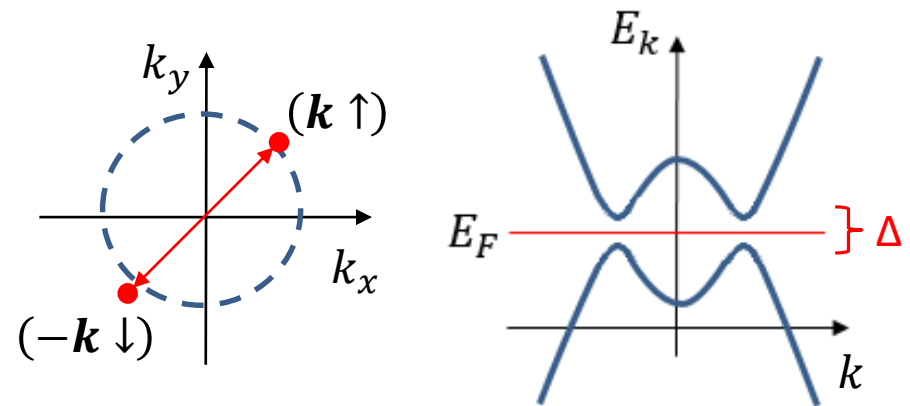
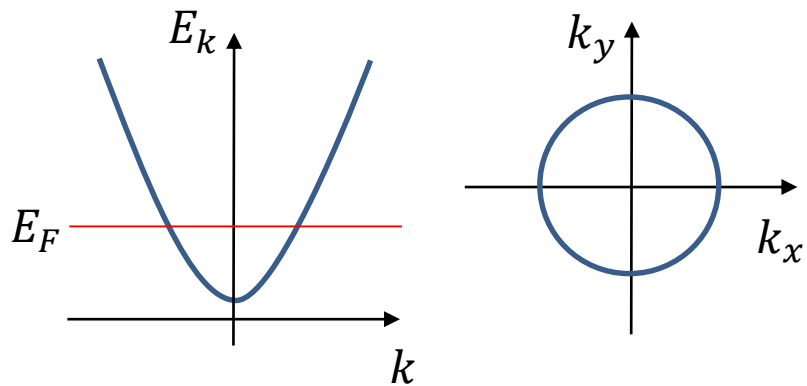
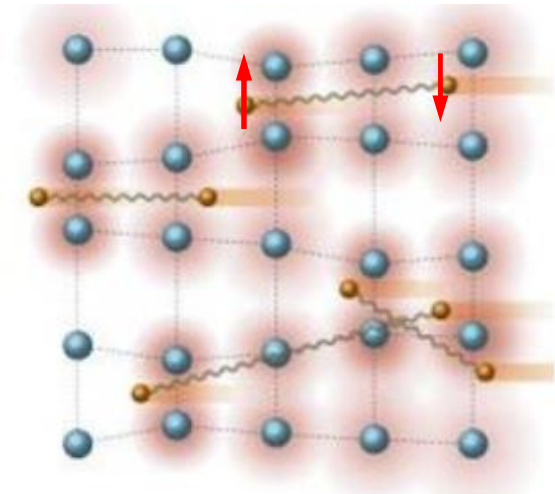
- Nadprzewodnictwo - przypomnienie
- Monowarstwy miedziowo-tlenowe oraz lite materiały na bazie miedzi
- Model oraz metoda
- Wyniki:
  - a) Nadprzewodnictwo typu *extended s-wave* oraz *d-wave*
  - b) Nie monotoniczne zachowanie średniej liczby cząstek
- Zjawiska skorelowane w sieciach kropek kwantowych
- Podsumowanie

# Nadprzewodnictwo: przypomnienie

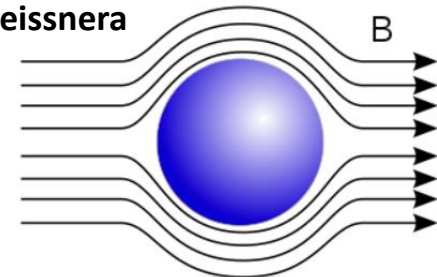
Metal ( $R \neq 0$ )



Nadprzewodnik ( $T < T_C$ ,  $R = 0$ )



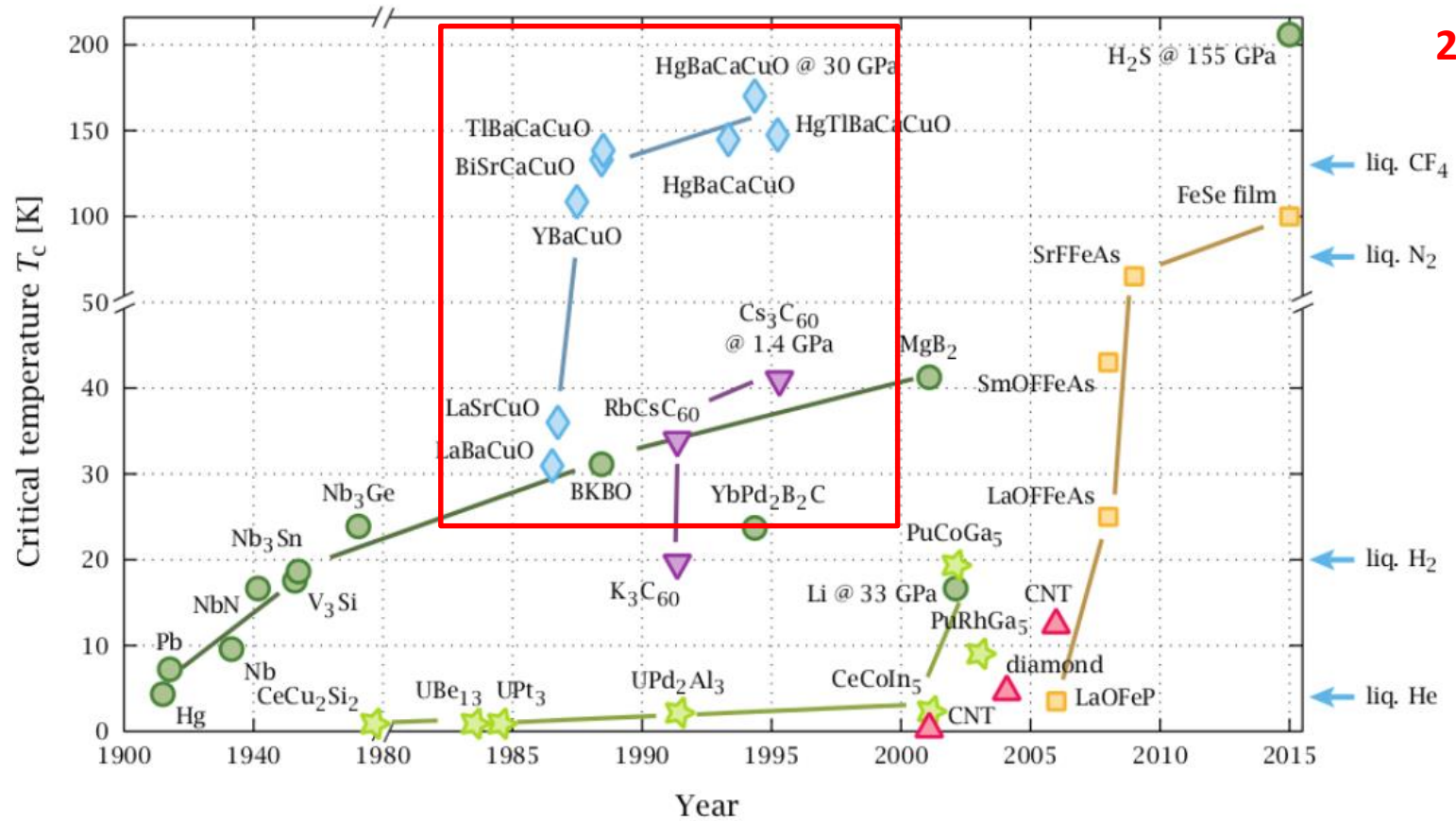
Efekt Meissnera



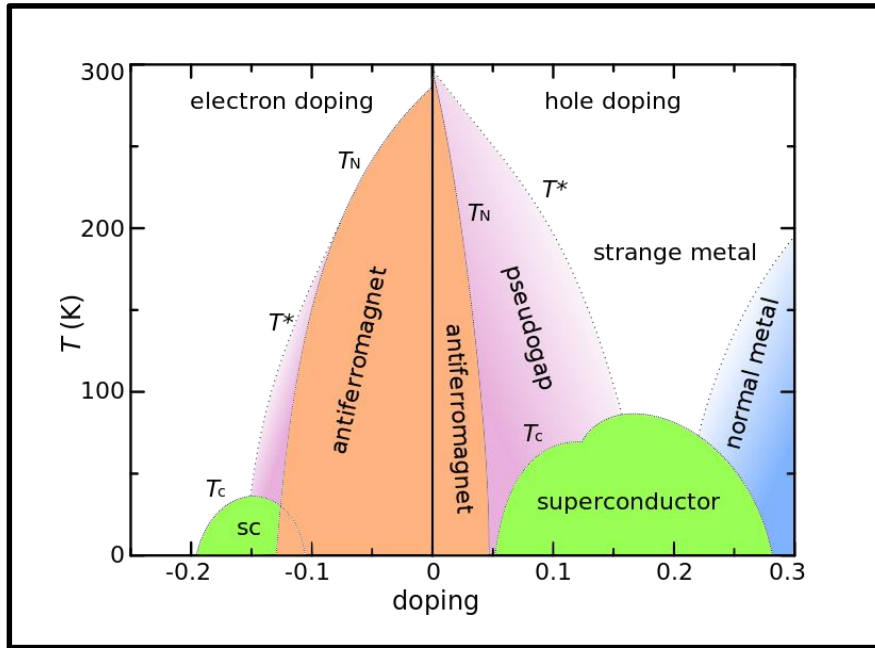
# Nadprzewodniki

288 K ( C-S-H @ 270 GPa )

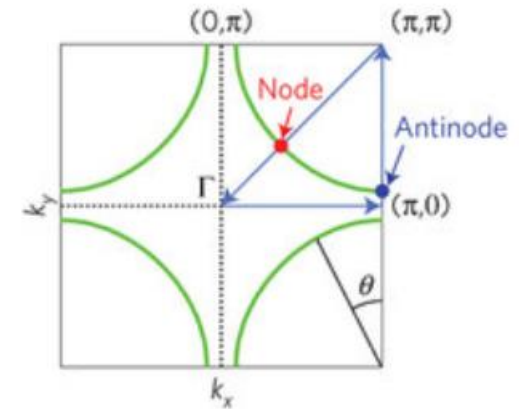
●  
↑  
2020



# Nadprzewodniki na bazie miedzi

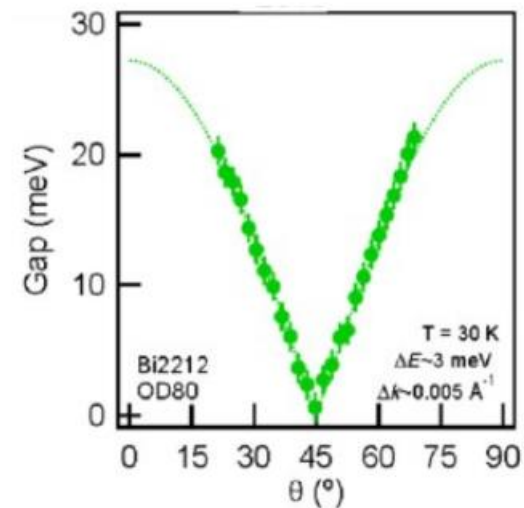


## Strefa Brillouin

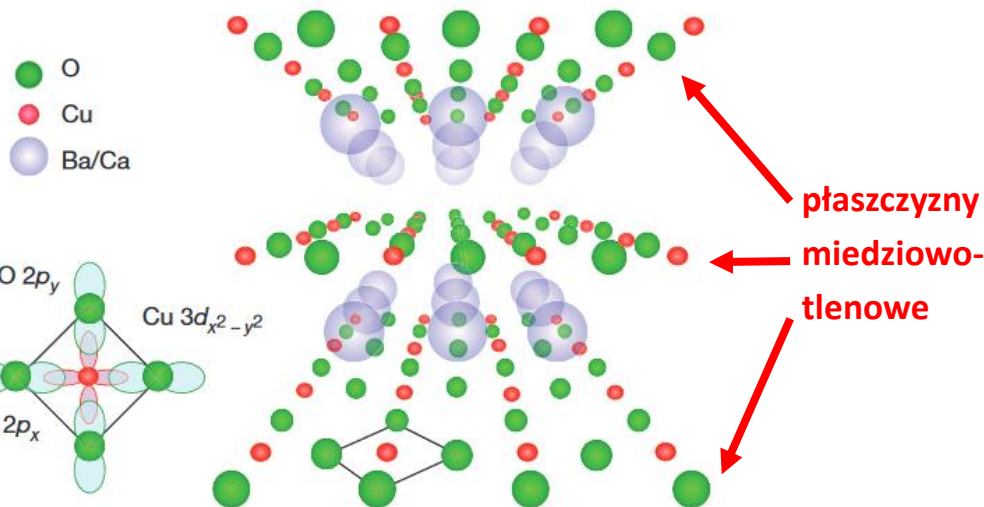


*symetria przerwy d-wave*

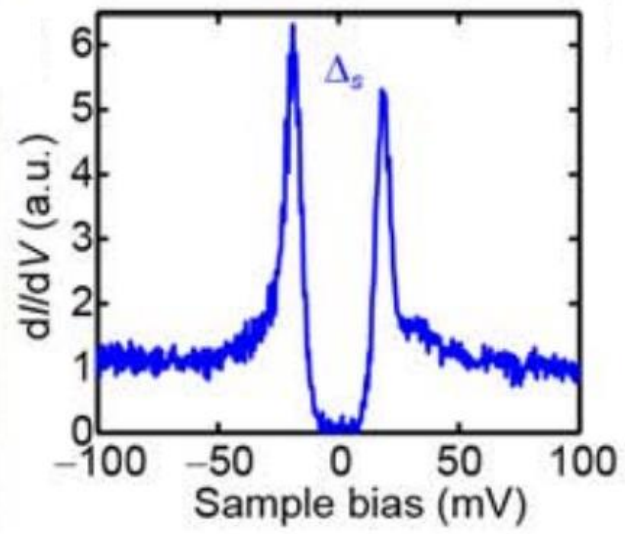
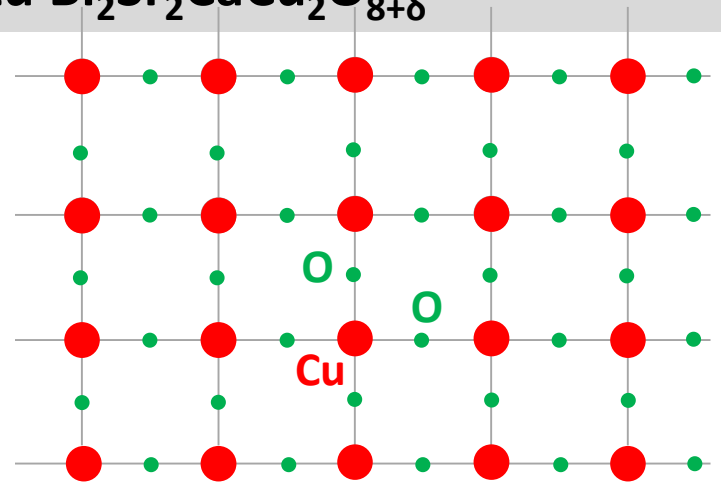
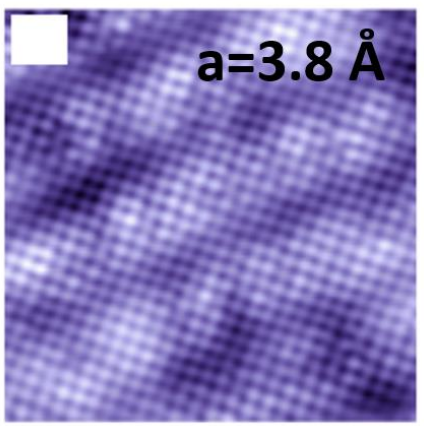
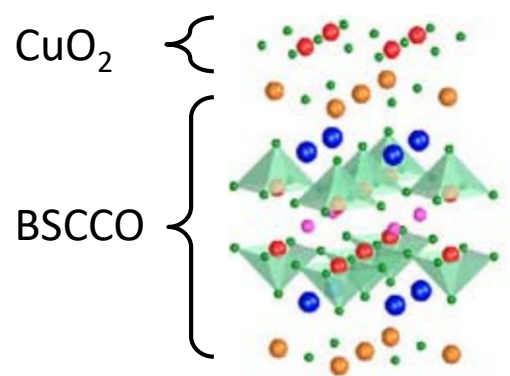
$$\Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta(\cos k_x - \cos k_y)$$



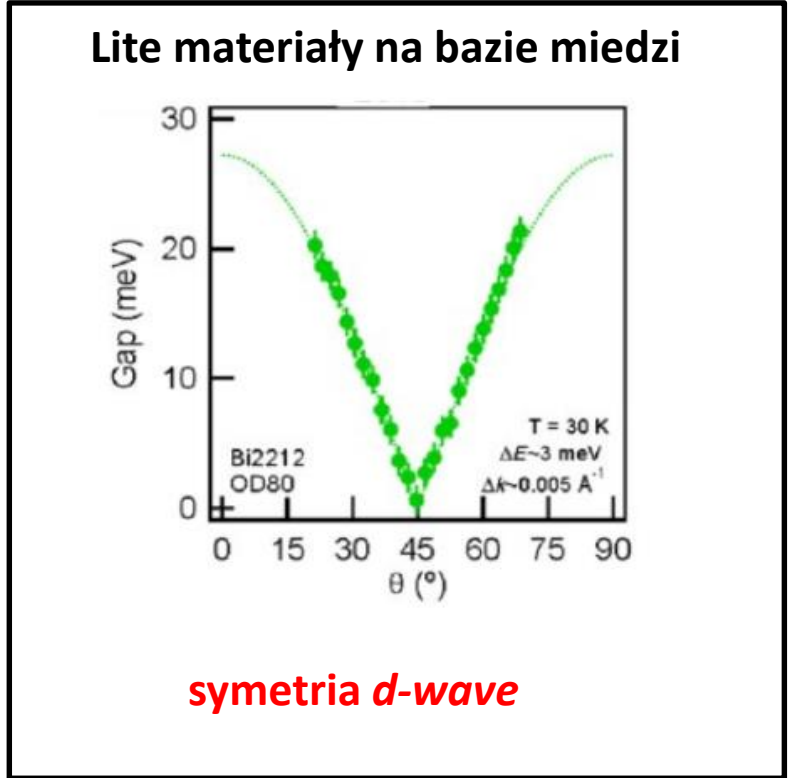
M. Hashimoto et al., Nature Physics 10, 483 (2014)



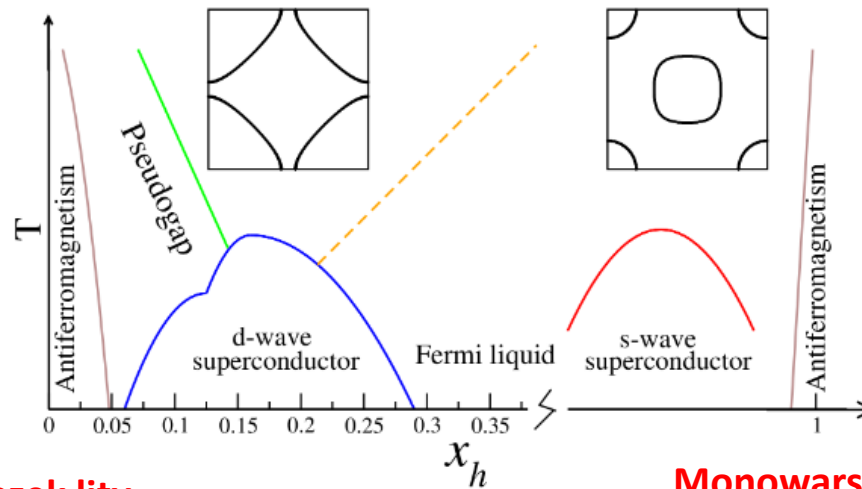
# Monowarstwy miedziowo tlenowe na podłożu $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$



U-shaped LDOS  
~~symetria d-wave~~

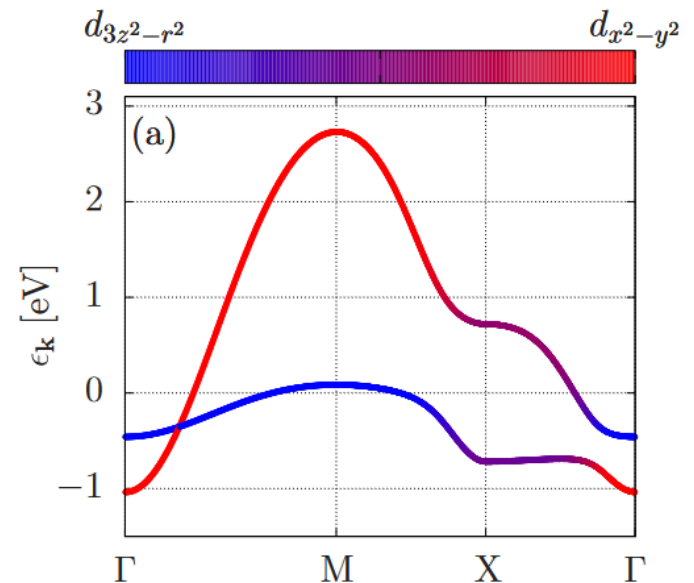
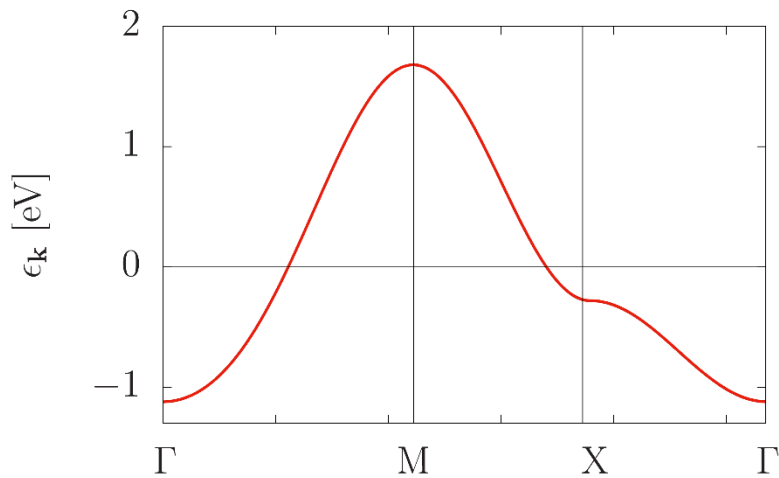


symetria d-wave



**Związek lity**  
 $3d^9$  ( $\text{Cu}^{2+}$ )  $n_e=3$   
 Efektywny opis  
 jednopasmowy ( $d_{x^2-y^2}$ )

**Monowarstwa  $\text{CuO}_2$**   
 $3d^8$  ( $\text{Cu}^{3+}$ )  $n_e=2$   
 Efektywny opis dwupasmowy  
 ( $d_{x^2-y^2}$  and  $d_{3z^2-r^2}$ )



# Dwu-pasmowy analog modelu $t$ - $J$ - $U$ do opisu monowarstwy $\text{CuO}_2$

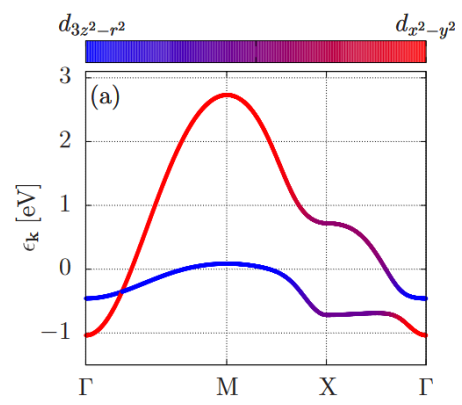
$$\hat{H} = \hat{H}_{TBA} + \hat{H}_J + \hat{H}_I$$

## 1) Część jednocząstkowa (TBA)

$$\hat{H}_{TBA} = \sum_{kl'l'\sigma} \epsilon_k^{ll'} \hat{c}_{kl\sigma}^\dagger \hat{c}_{kl'\sigma} + \sum_{kl\sigma} (\epsilon_0^l - \mu) \hat{n}_{kl\sigma}$$

$$\begin{aligned} \epsilon_0^x &= 0.0 \text{ eV} & l &= x \text{ (} d_{x^2-x^2} \text{)} \\ \epsilon_0^z &= -0.91 \text{ eV} & l &= z \text{ (} d_{3z^2-r^2} \text{)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon_k^{ll} &= -2t_l (\cos k_x + \cos k_y) - 4t_l' \cos k_x \cos k_y \\ &\quad - 2t_l'' (\cos 2k_x + \cos 2k_y) \\ \epsilon_k^{xz} &= 2t_{xz} (\cos k_x - \cos k_y) \\ &\quad + 2t_{xz}'' (\cos 2k_x - \cos 2k_y), \end{aligned}$$



## 2) Oddziaływanie wymiany kinteycznej ( $J$ )

$$\hat{H}_J = J \sum_{ijl} \hat{S}_{il} \hat{S}_{jl} - J' \sum_{ijll''} \hat{c}_{il\uparrow}^\dagger \hat{c}_{jl\downarrow}^\dagger \hat{c}_{il'\downarrow} \hat{c}_{j'l'\uparrow}$$

## 3) Odpychanie Coulomba i reguła Hunda ( $I$ )

$$\begin{aligned} \hat{H}_I &= U \sum_{il} \hat{n}_{il\uparrow} \hat{n}_{il\downarrow} + (V - \frac{1}{2} J_H) \sum_{ill''} \hat{n}_{il} \hat{n}_{il''} \\ &\quad - J_H \sum_{ill''} \hat{S}_{il} \cdot \hat{S}_{il''} + J_H \sum_{ill''} \hat{c}_{il\uparrow}^\dagger \hat{c}_{il\downarrow}^\dagger \hat{c}_{il'\downarrow} \hat{c}_{il''\uparrow} \end{aligned}$$

**extended s-wave**

$$\Delta_x = \Delta_y \Rightarrow \Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta^s (\cos k_x + \cos k_y)$$

**d-wave**

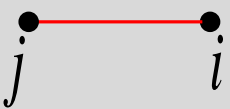
$$\Delta_x = -\Delta_y \Rightarrow \Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta^d (\cos k_x - \cos k_y)$$



# Rozwinięcie diagramatyczne funkcji Gutzwillera

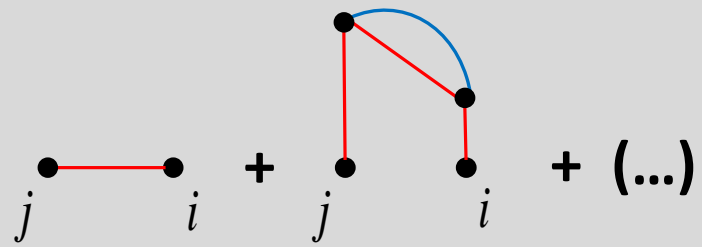
$$|\Psi_G\rangle = \hat{P}|\Psi_0\rangle = \prod_i \sum_{\Gamma} \lambda_{\Gamma} |\Gamma\rangle_{ii} \langle \Gamma | \Psi_0 \rangle$$

**RMFT**



$$\langle \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} \rangle_G = q \langle \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} \rangle_0$$

**DE-GWF**



$$\langle \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} \rangle_G = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \sum_{l_1, \dots, l_k} \langle \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} \hat{d}_{l_1}^{HF} \hat{d}_{l_2}^{HF} \dots \hat{d}_{l_k}^{HF} \rangle_0$$

$$\hat{P}_i^2 = 1 + x \hat{d}_i^{HF}$$

$$\hat{d}_i^{HF} = \hat{n}_{i\uparrow}^{HF} \hat{n}_{i\downarrow}^{HF}, \quad \hat{n}_{i\sigma}^{HF} = \hat{n}_{i\sigma} - \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle_0$$

$$E_G = \frac{\langle \Psi_G | \hat{H} | \Psi_G \rangle}{\langle \Psi_G | \Psi_G \rangle} = F(P_{ij}, S_{ij}, x)$$

$$P_{ij} = \langle \Psi_0 | \hat{c}_{i\sigma}^+ \hat{c}_{j\sigma} | \Psi_0 \rangle, \quad S_{ij} = \langle \Psi_0 | \hat{c}_{i\uparrow}^+ \hat{c}_{j\downarrow}^+ | \Psi_0 \rangle$$

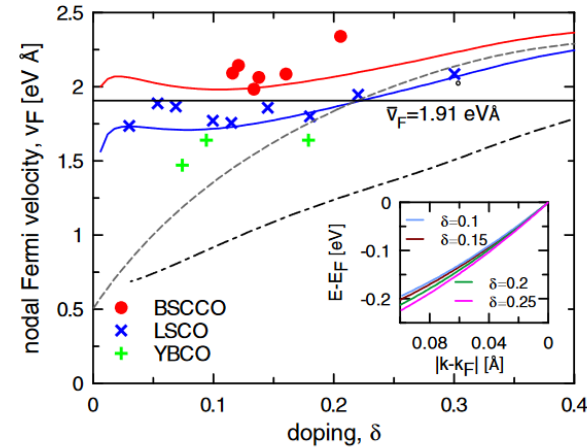
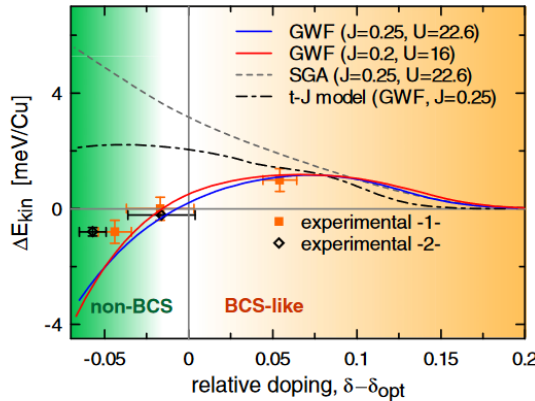
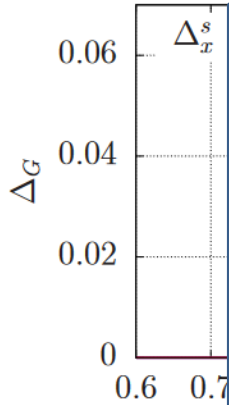
# Monowarstwa CuO<sub>2</sub> (silne domieszkowanie)

$d_{3z^2-r^2}$

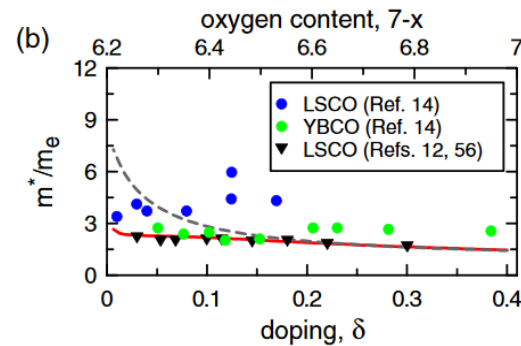
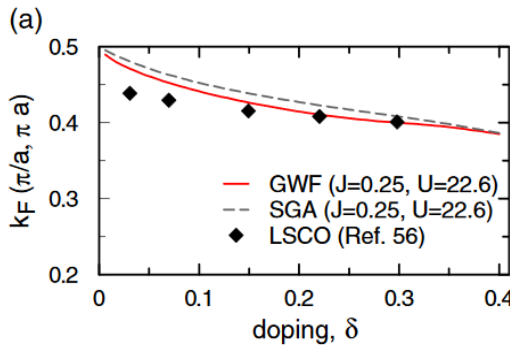
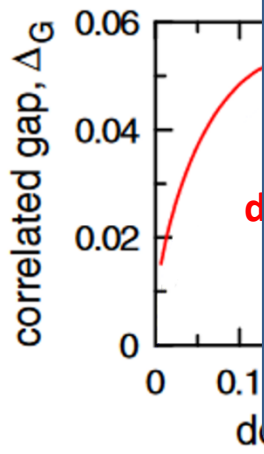
$d_{x^2-y^2}$

3

## Materiały lite na bazie miedzi (porównanie z eksperymentem)



## Materiały lite



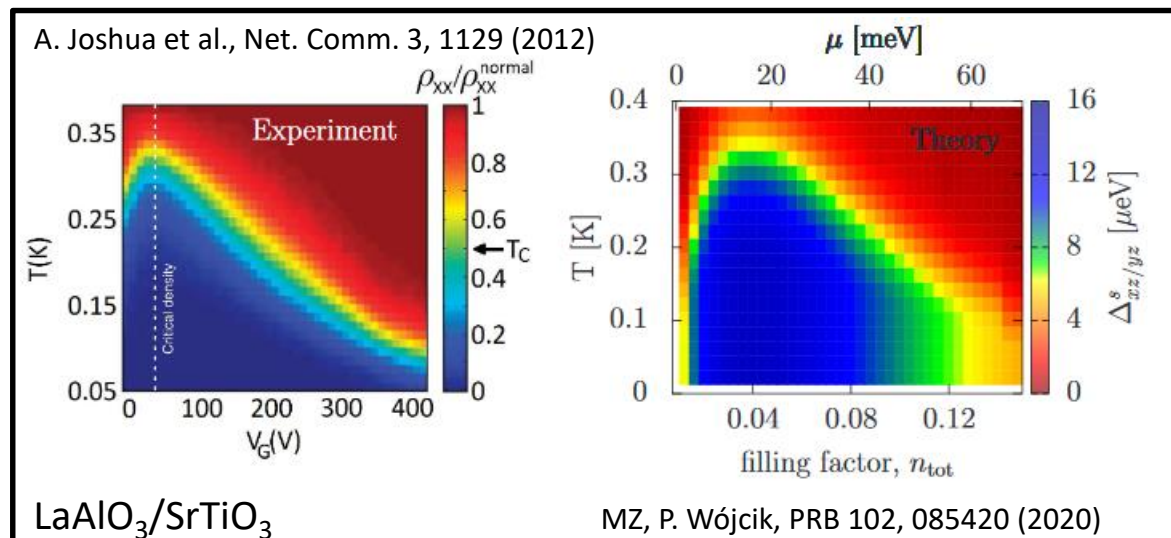
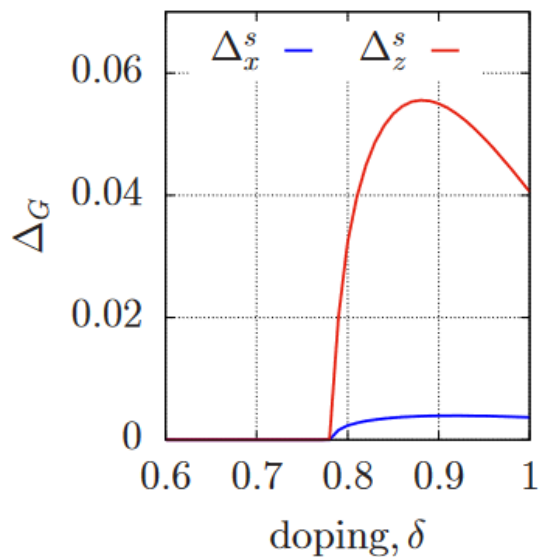
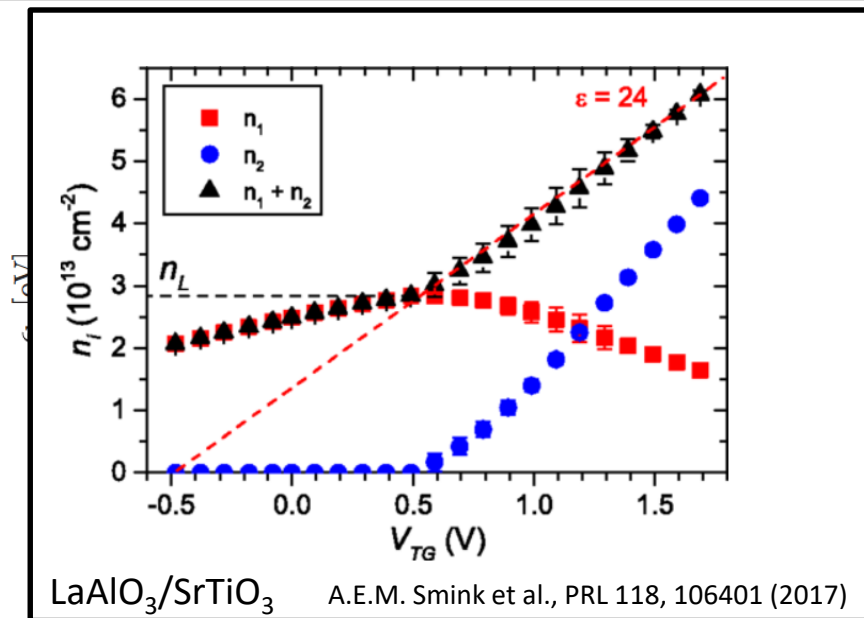
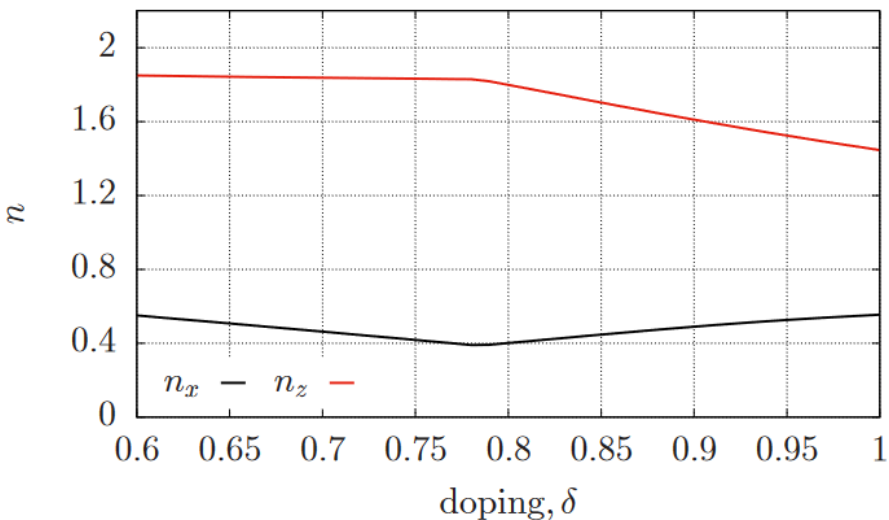
J. Spałek, MZ, and J. Kaczmarczyk, *Phys. Rev. B* 95, 024506 (2017)

MZ and J. Spałek, *Phys. Rev. B* 95, 024507 (2017); MZ and J. Spałek, *Phys. Rev. B* 96, 054511 (2017)

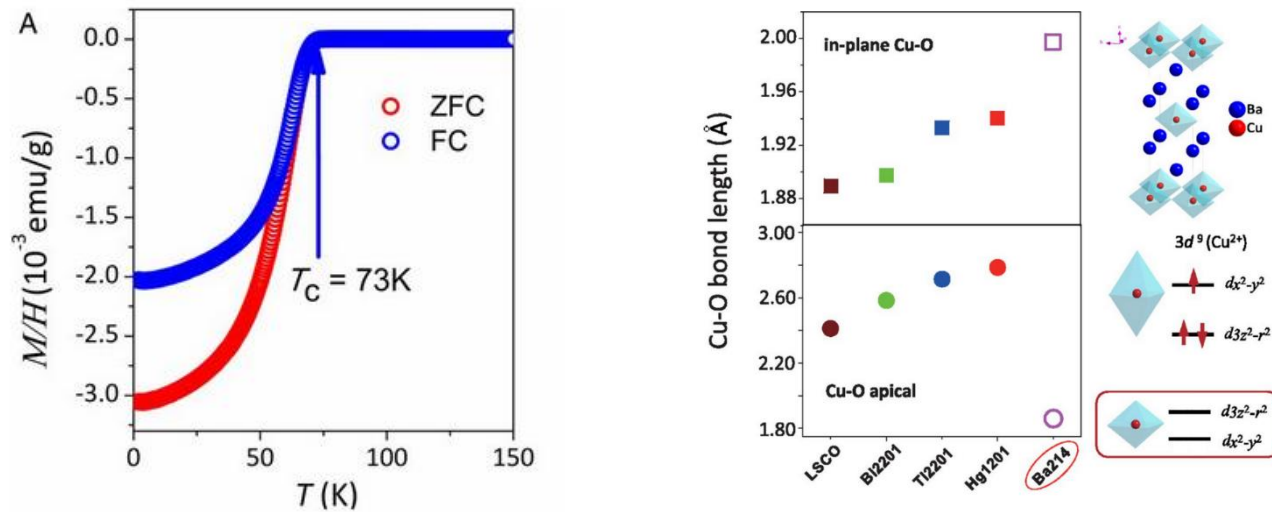
$$\Delta_x = -\Delta_y \Rightarrow \Delta(\mathbf{k}) = 2\Delta^d (\cos k_x - \cos k_y)$$

DOS [a.u.]

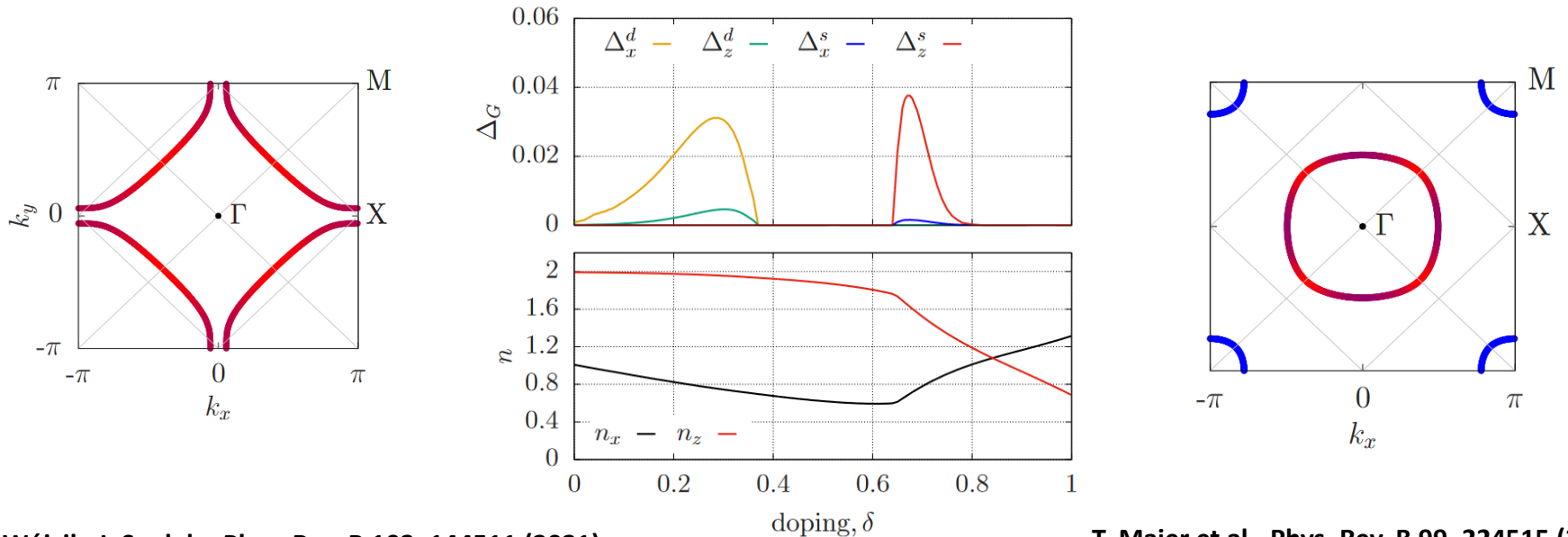
# Nie monotoniczne zachowanie liczby cząstek



# Dwie kopuły nadprzewodzące dla $\text{Ba}_2\text{CuO}_{4-\delta}$



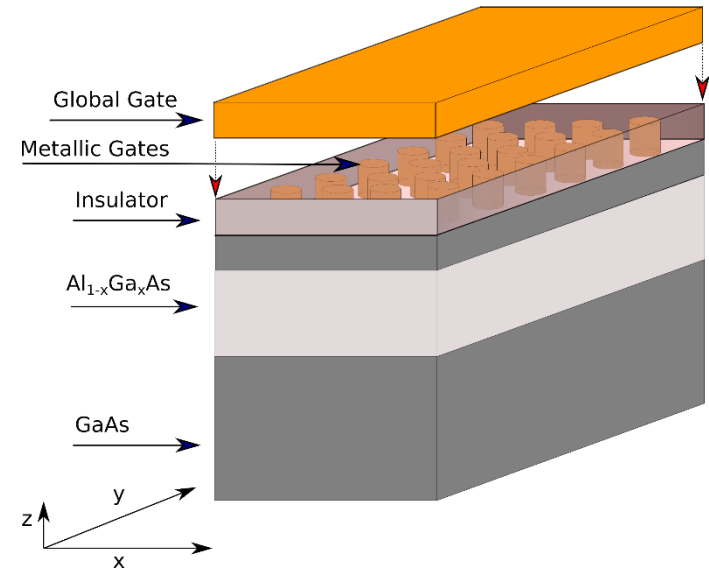
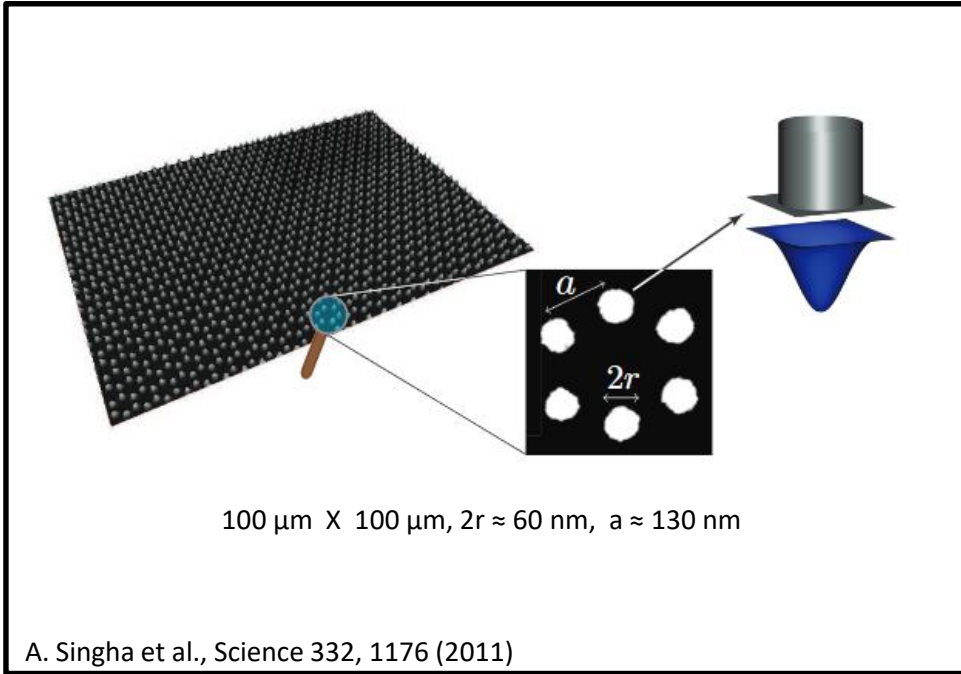
W. M. Li et al., PNAS 116, 12156 (2019)



MZ, P. Wójcik, J. Spałek., Phys. Rev. B 103, 144511 (2021)

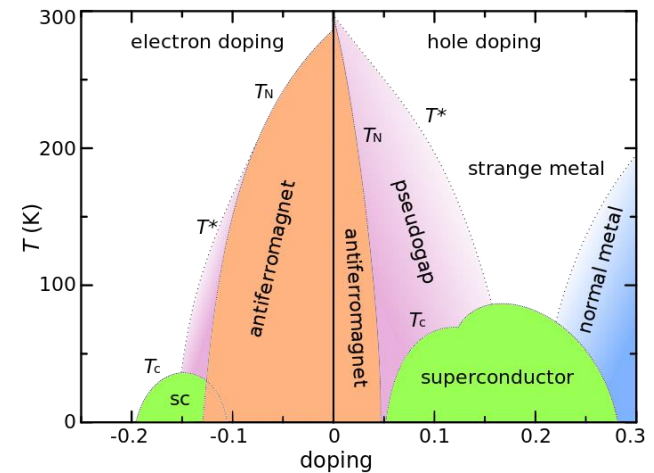
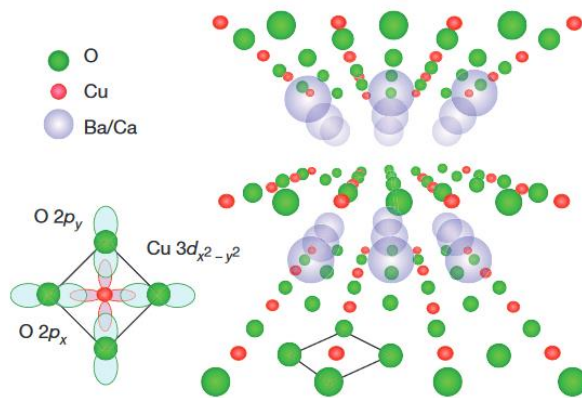
T. Maier et al., Phys. Rev. B 99, 224515 (2019)

# Sieć kropek kwantowych – sztuczny dwuwymiarowy kryształ



T. Byrnes et al., Phys. Rev. B 78, 075320 (2008)

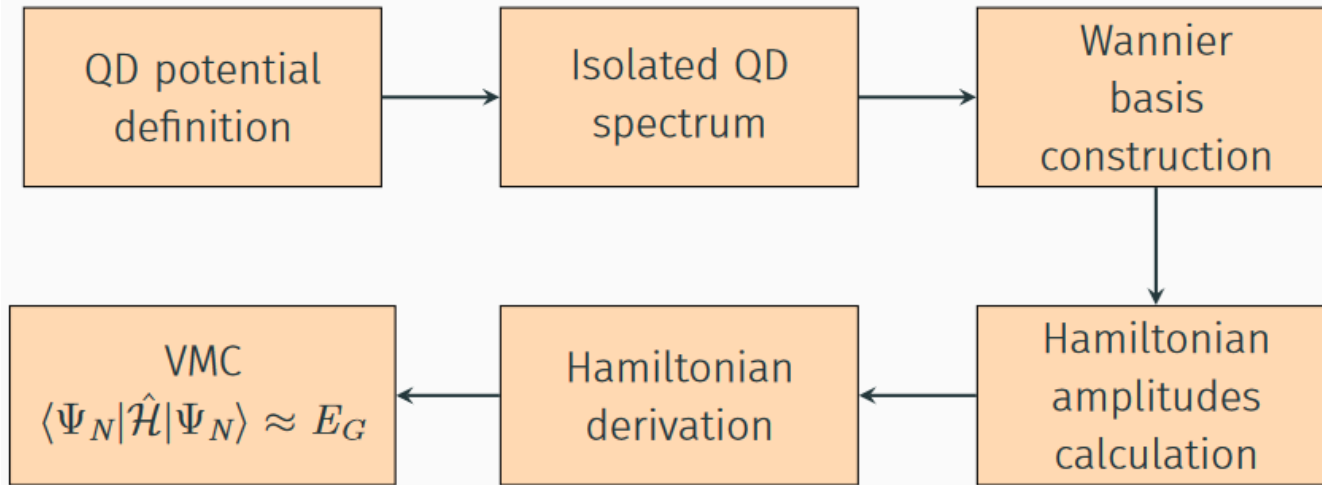
## Nadprzewodniki na bazie miedzi



# Sieć kropek kwantowych – teoria

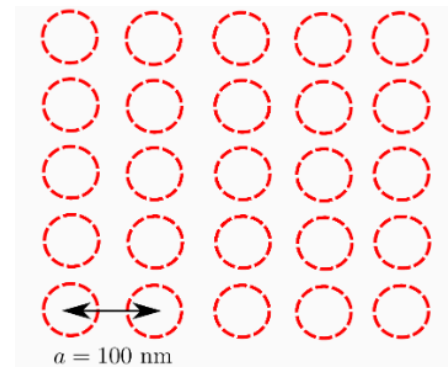
$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i,\mu,\sigma} \epsilon_i^\mu \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\mu,\sigma} + \sum_{i,j} \sum_{\mu,\nu} \sum_{\sigma} t_{ij}^{\mu\nu} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j, \\ k,l}} \sum_{\substack{\mu,\nu, \\ \gamma,\tau}} \sum_{\sigma,\sigma'} V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} \hat{c}_{i,\mu,\sigma}^\dagger \hat{c}_{j,\nu,\sigma'}^\dagger \hat{c}_{l,\tau,\sigma'} \hat{c}_{k,\gamma,\sigma}$$

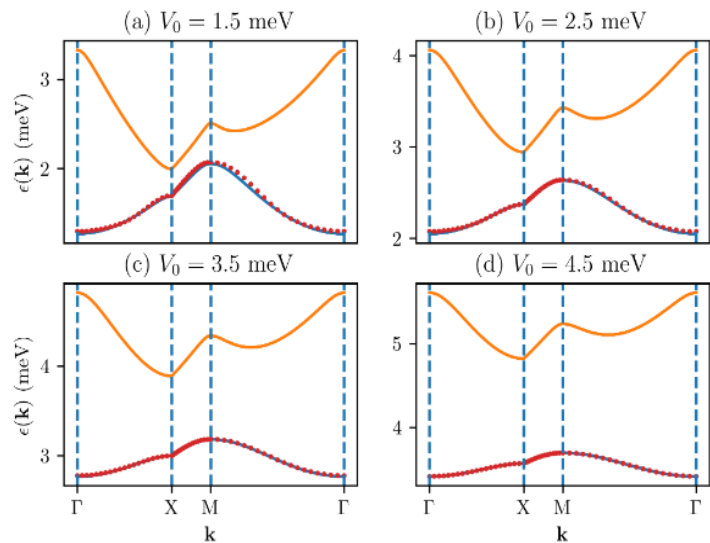


$$t_{ij}^{\mu\nu} = \left\langle w_\mu^i(\mathbf{r}) \left| -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_r^2 + V_a^C(\mathbf{r}) \right| w_\nu^j(\mathbf{r}) \right\rangle$$

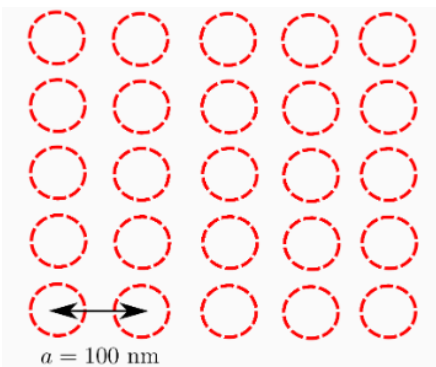
$$V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} = \left\langle \tilde{w}_\mu^i(\mathbf{r}, z) \tilde{w}_\nu^j(\mathbf{r}', z') \left| \hat{V}_{e-e} \right| \tilde{w}_\gamma^k(\mathbf{r}, z) \tilde{w}_\tau^l(\mathbf{r}', z') \right\rangle$$



# Siec kropek kwantowych – modyfikując własności układu za pomocą napięcia na bramce

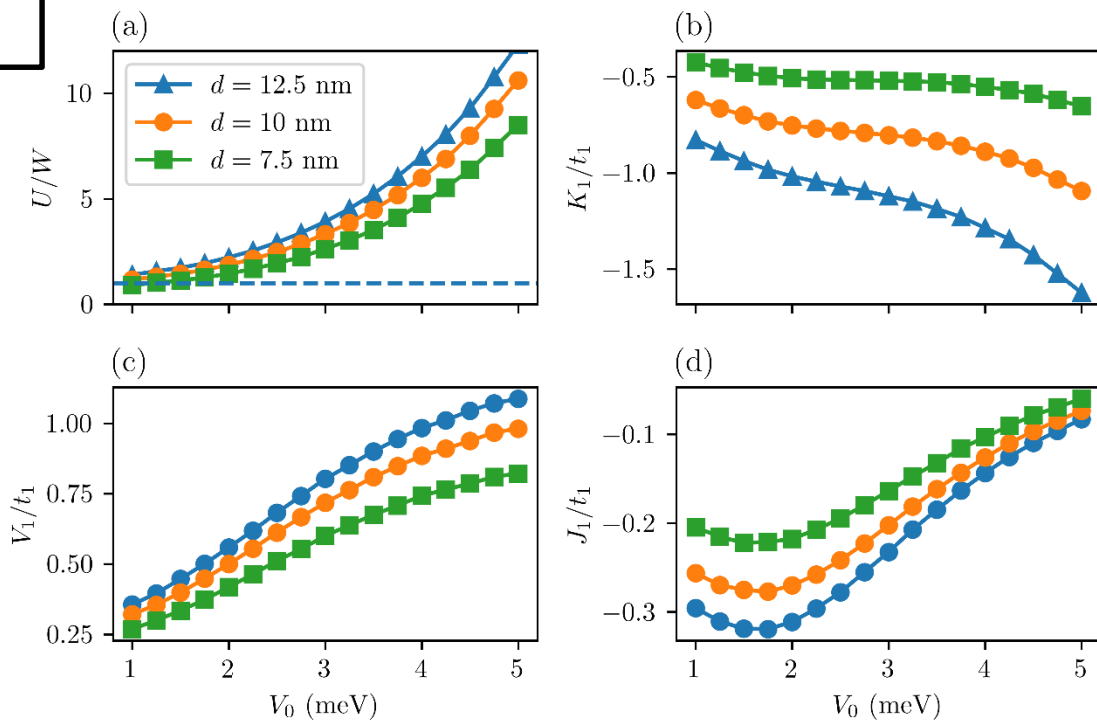


$$t_{ij}^{\mu\nu} = \left\langle w_{\mu}^i(\mathbf{r}) \left| -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_a^C(\mathbf{r}) \right| w_{\nu}^j(\mathbf{r}) \right\rangle$$



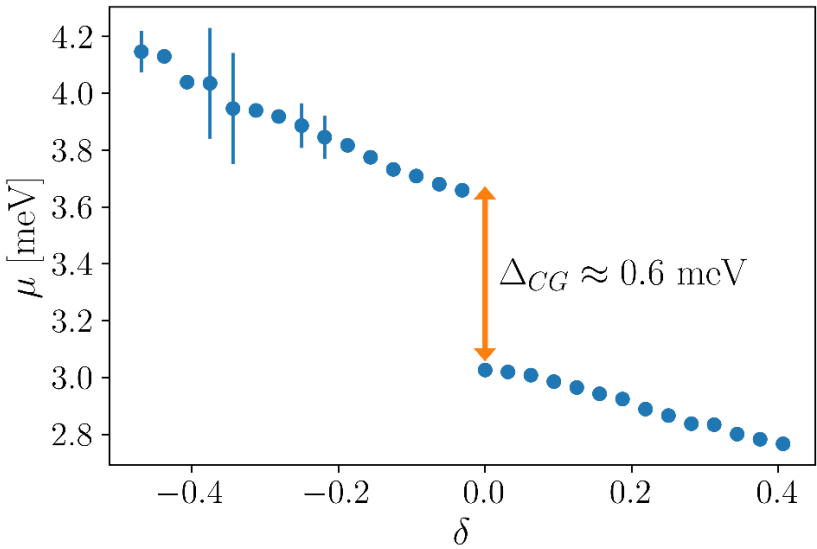
## Całki oddziaływań

$$V_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\tau} = \left\langle \tilde{w}_{\mu}^i(\mathbf{r}, z) \tilde{w}_{\nu}^j(\mathbf{r}', z') \left| \hat{V}_{e-e} \right| \tilde{w}_{\gamma}^k(\mathbf{r}, z) \tilde{w}_{\tau}^l(\mathbf{r}', z') \right\rangle$$

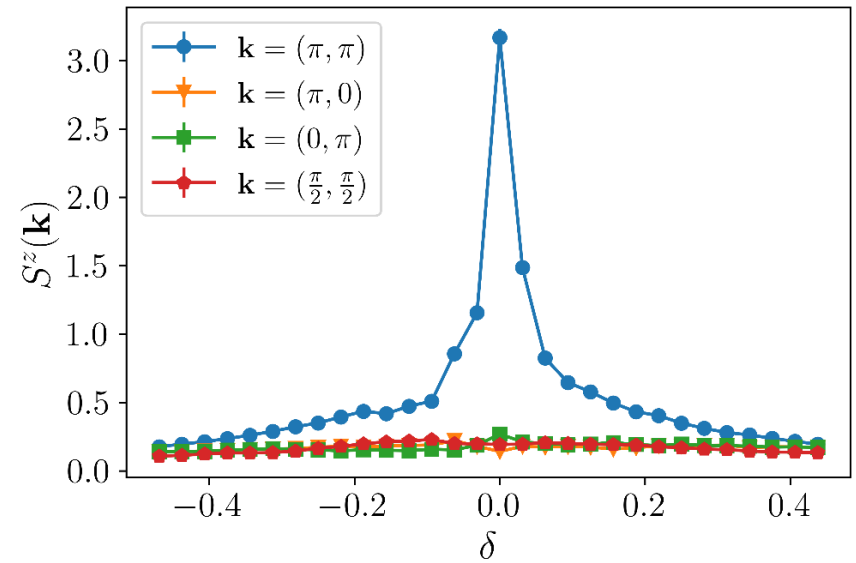


# Sieć kropek kwantowych – Antyferromagnetyzm i stan izolatora Motta

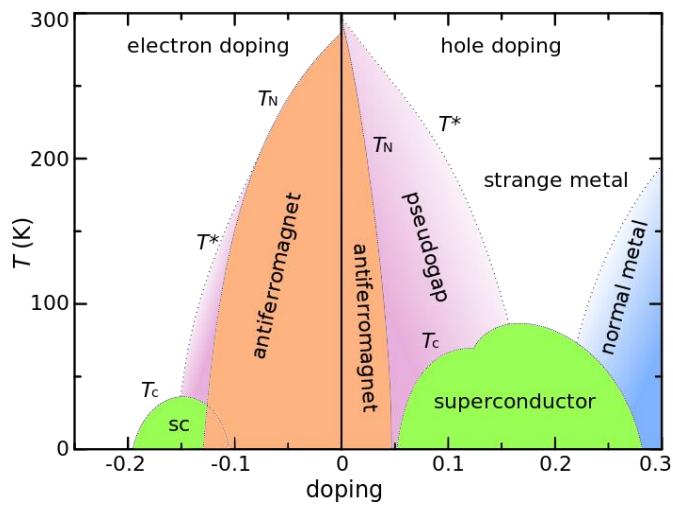
**Przerwa ładunkowa**



**Korelacje spin-spin**



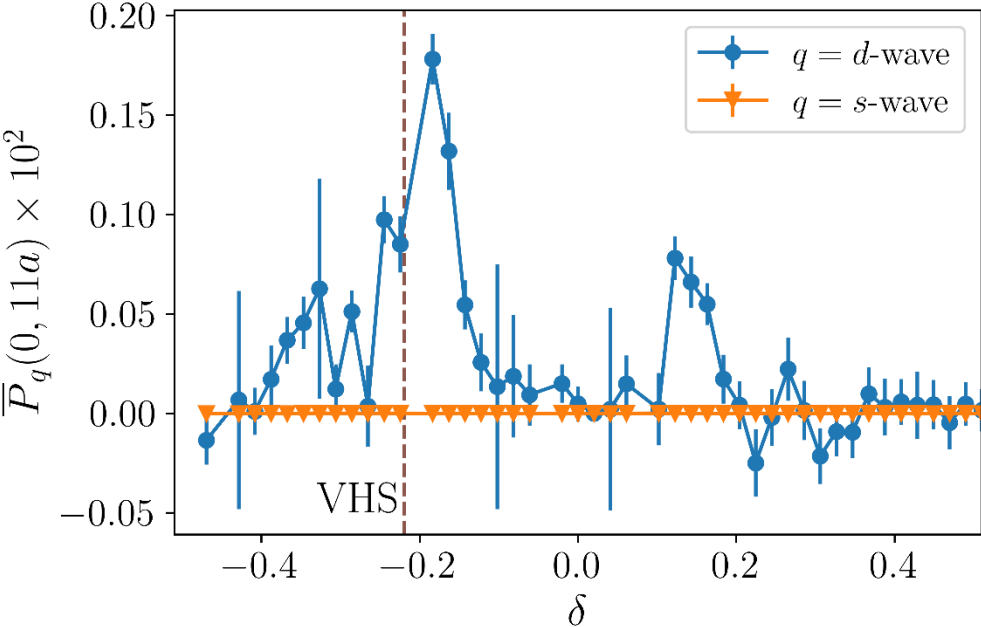
**Nadprzewodniki na bazie miedzi**



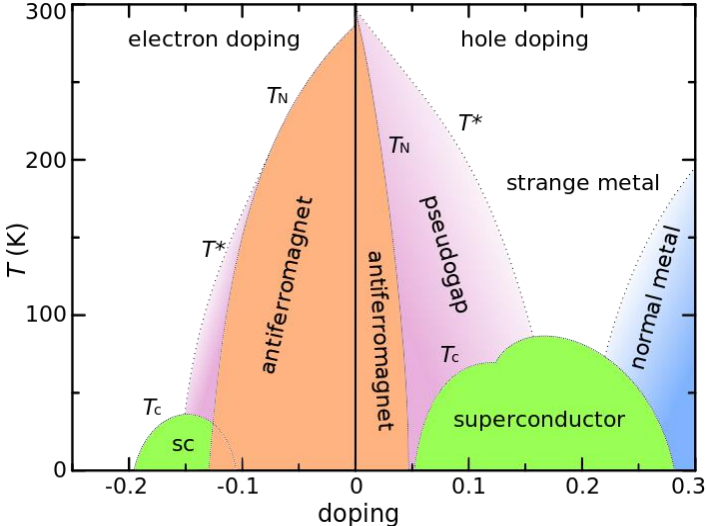


# Sieć kropek kwantowych – Nadprzewodnictwo

## Korelacje pair



## Nadprzewodniki na bazie miedzi



## Podsumowanie

- W rozszerzonym modelu  $t$ - $J$ - $U$  opisującym monowarstwę miedziowo-tlenową występuje obszar stabilności fazy nadprzewodzącej typu *extended s-wave*
- Dolne krytyczne domieszkowanie na wystąpienie stanu nadprzewodzącego w obszarze silnych domieszkowań dziurowych pokrywa się z przejściem Lifshitz
- Symetria parowania jest zdeterminowana przez relatywne położenie powierzchni Fermiego oraz linii nodalnych odpowiadających poszczególnej symetrii
- We have applied similar approach to the description of the recently identified superconductor (Ba214) and we have obtained a two dome structure of the gap
- W ramach naszych obliczeń pokazaliśmy, że sieci kropek kwantowych mogą służyć do symulowania zjawisk typowych dla układów silnie skorelowanych (MI, AF, SC).

**Dziękuję za uwagę**

————  $d_{x^2-y^2}$

————  $d_{3z^2-r^2}$