

TARTU ÜLIKOOL

Loodus- ja täppisteaduste valdkond

Füüsika instituut

Markus Must

**VARJATUD KAHEPILULISUS KAHETSOONILISES
ÜLIJUHTIVUSES**

Bakalaureusetöö (12 EAP)

Füüsika eriala

Juhendajad:

Teet Örd

Küllike Rägo

Tartu 2018

Varjatud kahepilulisus kahetsoonilises ülijuhtivuses

Käesolev bakalaureusetöö on pühendatud kahetsoonilise ülijuhi varjatud kahepilulisuse uurimisele. BCS-teooriast lähtudes näidatakse, et kindalate ülijuhti kirjeldavate parameetrite korral saavad kahetsoonilises ülijuhhis ülijuhtivuspilud võrdseteks, $\Delta_1 = \Delta_2$. Sellisel juhul on ülijuhtivuspilud eksperimentaalselt eristamatud ning tekib nn varjatud kahepilulisus.

Märksõnad: kahepiluline ülijuhtivus, Bardeen-Cooper-Schrieffer teooria

CERCS kood: P260 Tahke aine: elektrooniline struktuur, elektrilised, magneetilised ja optilised omadused, ülijuhtivus, magnetresonants, spektroskoopia

Hidden two-gap nature in two-band superconductivity

The present thesis is devoted to the study of superconductivity in a two-band system. Using the BCS model of superconductivity it is shown that in the case of certain parameters the superconduction gaps Δ_α ($\alpha = 1, 2$) of a two-band system are equal, $\Delta_1 = \Delta_2$, and therefore experimentally indistinguishable.

Keywords: two-gap superconductivity, Bardeen-Cooper-Schrieffer theory

CERCS code: P260 Condensed matter: electronic structure, electrical, magnetic and optical properties, superconductors, magnetic resonance, relaxation, spectroscopy

Sisukord

1 Sissejuhatus	4
1.1 Mitmekomponendiline ülijuhtivus	4
1.2 Töö eesmärk ja struktuur	5
2 Kahepilulise ülijuhtivuse BCS-tüüpi mudel	6
2.1 Kahetsoonilise ülijuhi hamiltoniaan	6
2.2 Ülijuhtivuspilud	7
2.3 Ülijuhtivuspilu võrrandid nulltemperatuuril	10
2.4 Faasisiirdetemperatuur	12
2.5 Termodünaamilised suurused	15
3 Varjatud kahepilulisus kahetsoonilises ülijuhis	18
3.1 Pilude võrdsus kahetsoonilises ülijuhis	18
3.1.1 Juht, kui $T = 0$	18
3.1.2 Temperatuuripiirkond $0 < T < T_c$	21
3.2 Ülijuhtivuspilude ja siirdetemperatuuri suhe	24
3.3 Võrdlus katseandmete ja teiste autorite teoreetiliste arvutustega	28
4 Soojusmahtuvus	30

Kokkuvõte	35
Summary	36
Viited	37

1 Sissejuhatus

Üljihtivuse nähtuse avastas 1911. aastal H. K. Onnes, kes uuris tahke elavhõbeda juhtivust veeldatud heeliumi abil. Onnes leidis, et temperatuuril 4,2 K kukkus elavhõbeda elektritakistus järsult nulliks ning jäigi nulliks ka madalamatel temperatuuridel [1]. Sellega kaasnev lõpmata suur elektrijuhtivus saigi nähtusele nimepanekul määravaks. Järgmise märkimisväärse sammu üljihtivuse olemuse väljaselgitamisel tegid 1933. aastal W. Meissner ja R. Ochsenfeld, kui nad avastasid, et üljuhitud tõrjuvad endast magnetvälja. Seda nähtust tuntakse nüüd Meissneri efektina. 1935. aastal näitasid F. London ja H. London, et Meissneri efekt on üljihtiva voolu elektromagnetilise vabaenergia minimeerimise ilming.

1957. aastal pakkusid J. Bardeen, L. N. Cooper ja J. R. Schrieffer välja esimese täielikult mikroskoopilise üljihtivusteooria. Seda tuntakse kui BCS teooriat. BCS teooria põhiliseks konseptsiooniks on elektron-foonon interaktsioonist tingitud elektronpaaride tekkimine ning sellega kaasnev üljihtivus. Bardeen, Cooper ja Schrieffer said loodud mudeli eest 1972. aastal Nobeli preemia.

1.1 Mitmekomponendiline üljihtivus

Algne mikroskoopiline BCS teooria oli lihtsustatud mudel isotroopse üljihtivuspilu kirjeldamiseks ning oli sobilik kirjeldamiseks üljihtivuse põhilisi omadusi üljuhitud jaoks, mis olid tuntud selleks ajahetkeks [2].

Peagi mõisteti, et antud mudelit on võimalik täiustada tuues sisse mitu üljihtivuspilu. Kaks aastat pärast algse BCS mudeli välja tulemist pakkusidki Suhl, Mattis ja Walker välja mudelile mitmetsoonilise üldistuse, millega sooviti selgitada suhteliselt kõrgeid siirdetempe-

ratuure, mida jälgiti mõnede siirdemetallide puhul [2], [3].

Mitmetsoonilise ülijuhtivuse teooria arendamist motiveeris tähelepanek, et ülijuhtidel on tüüpiliselt keeruline energiatsoonide struktuur, kus esinevad Fermi pinna läheduses kattuvad tsoonid. Sellisel juhul on võimalik, et ülijuhtivuse jaoks vajalik elektronpaaride teke toimub rohkem kui ühes tsoonis. Samuti toimub tsoonidevaheline elektronpaaride hajumine, mis on oluline, sest tagab ühtse ülijuhtiva faasi ning faasisiirdetemperatuuri ja võimaldab tunduvalt kõrgemaid ülemineku temperatuure ülijuhtivasse olekusse [4], [5].

1.2 Töö eesmärk ja struktuur

Antud töö eesmärgiks on uurida, kuidas sõltuvad kahekomponendilise ülijuhtivuse korral ülijuhtivuspilud tsoonidevahelisest interaktsioonist ning analüütiliselt näidata, et leidub selline tsoonidevaheline interaktsioon, mille korral saavad ülijuhtivuspilud võrdseteks ehk tekib nn varjatud kahepilulisus.

Töös on kasutatud kahekomponendilise ülijuhtivuse mudelit, kus ülijuhi mõlemas tsoonis esineb foononite vahendatav elektronide vaheline tõmbeinteraktsioon. Rakendatavas mudelis esineb ka tsoonidevaheline interaktsioon, mis on samuti tõmbuva iseloomuga.

Bakalaureusetöö koosneb sissejuhatusest, kolmest peatükist ning kokkuvõttest. Töö esimeses peatükis antakse ülevaade kahetsoonilise ülijuhi BCS-tüüpi teooriast. Teises peatükis rakendatakse seda teooriat näitamaks, et leidub selline tsoonidevaheline interaktsioon, mille korral esineb kahetsoonilises ülijuhis pilude võrdsus. Samuti võrreldakse saadud analüütilisi tulemusi artiklitest pärinevate katseandmetega. Töö kolmandas peatükis näidatakse, kuidas käitub ülijuhi soojusmahtuvus juhul kui ülijuhis esineb pilude võrdsus.

2 Kahepilulise ülijuhtivuse BCS-tüüpi mudel

Järgnevalt antakse lühike ülevaade kahetsoonilise ülijuhi BCS-tüüpi mudeli teooriast.

2.1 Kahetsoonilise ülijuhi hamiltoniaan

Kahetsoonilise elektronsüsteemi hamiltoniaan ülijuhtivuse kirjeldamiseks on kujul [3], [5], [6]

$$H = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\vec{k}} \sum_s \tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\vec{k}) a_{\alpha\vec{k}s}^+ a_{\alpha\vec{k}s} + 2 \sum_{\alpha,\alpha'=1}^2 \sum_{\vec{k},\vec{k}'} W_{\alpha,\alpha'}(\vec{k},\vec{k}') a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ a_{\alpha'-\vec{k}'\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}'\uparrow}, \quad (2.1.1)$$

kus $\tilde{\varepsilon}_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha} - \mu$; ε_{α} on elektronide energia tsoonides $\alpha = 1, 2$; μ on keemiline potentsiaal; $s = \uparrow, \downarrow$ on spinni projektsioonid; \vec{k} on elektroni lainevektor; a^+ ja a on vastavalt elektroni tekke- ja koooperaatorid; $W_{\alpha\alpha'}(\vec{k},\vec{k}')$ on tsoonisisene ($\alpha = \alpha'$) ning tsoonidevaheline ($\alpha \neq \alpha'$) interaktsioonikonstant.

Hamiltoniaanis (2.1.1) olev interaktsiooni liige on analüütilisteks arvutusteks liiga keerulisel kujul. Lihtsustamise eesmärgil loetakse BCS teoorias $W_{\alpha\alpha'}(\vec{k},\vec{k}')$ sõltumatuks lainevektorist ning võetakse kasutusele interaktsioonikonstant, mis on keskmistatud üle lainevektorite [1], [7]. Elektronide vaheline tõmbeinteraktsioon, mis on vajalik elektronpaaride tekkimiseks, avaldub juhul kui $W_{\alpha\alpha'} < 0$. Selline võrratus kehtib interaktsiooni vahendavate foononite sagedustel, mis on väiksemad Debay sagedusest (tüüpiline foononite sagedus) [1]. Sellest tulenevalt loetakse lihtsustamise eesmärgil elektron-elektron interaktsioonikonstant $W_{\alpha\alpha'}$ nullist erinevaks ainult kitsas Fermi pinda ümbritsevas $\pm\hbar\omega_D$ kihis. Eelnevast saame,

et interaktsioon rahuldab tingimust

$$W_{\alpha\alpha'}(\vec{k}, \vec{k}') = \begin{cases} W_{\alpha\alpha'} = \text{const} < 0, & \text{kui } |\tilde{\epsilon}_\alpha| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{kui teisiti.} \end{cases} \quad (2.1.2)$$

Arvestades tingimusega (2.1.2) jõuame lihtsustatud hamiltoniaanini

$$H = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\vec{k}} \sum_s \tilde{\epsilon}_\alpha(\vec{k}) a_{\alpha\vec{k}s}^+ a_{\alpha\vec{k}s} + 2 \sum_{\alpha,\alpha'=1}^2 W_{\alpha\alpha'} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ a_{\alpha'-\vec{k}'\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}'\uparrow}. \quad (2.1.3)$$

2.2 Ülijuhtivuspilud

Hamiltoniaani (2.1.3) vabaenergiat on võimalik minimaliseerida kasutades variatsioonarvutuse meetodit, mis on sisuliselt keskmistamine üle keskmise välja lähendusele vastava efektiivse hamiltoniaani.

Keskmise välja lähendusest lähtudes teeme hamiltoniaanis (2.1.3) asenduse

$$\begin{aligned} a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ a_{\alpha'-\vec{k}'\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}'\uparrow} &= \langle a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ \rangle a_{\alpha'-\vec{k}'\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}'\uparrow} \\ &+ a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ \langle a_{\alpha'-\vec{k}'\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}'\uparrow} \rangle \\ &- \langle a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ \rangle \langle a_{\alpha'-\vec{k}'\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}'\uparrow} \rangle. \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

ning defineerime ülijuhtivuspilud, mis kujutavad endast ülijuhtivat faasi ja faasisiiret kirjeldavaid korrastusparameetreid [8],

$$\Delta_\alpha = 2 \sum_{\alpha'=1}^2 W_{\alpha\alpha'} \sum_{\vec{k}} \langle a_{\alpha'-\vec{k}\downarrow} a_{\alpha'\vec{k}\uparrow} \rangle_{H_{\text{eff}}}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (2.2.2)$$

kus keskmistatakse üle keskmise välja lähendusele vastava efektiivse hamiltoniaani poolt määratud ansambli,

$$\langle \dots \rangle = Z^{-1} \text{Sp} \dots \exp\left(-\frac{H_{\text{eff}}}{k_B T}\right), \quad (2.2.3)$$

kus

$$Z = \text{Sp exp} \left(-\frac{H_{\text{eff}}}{k_B T} \right). \quad (2.2.4)$$

Silmas pidades asendust (2.2.1) ning ülijuhtivuspilude avaldist (2.2.2) avaldub efektiivne hamiltoniaan järgmiselt:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = & \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\vec{k}} \sum_s \tilde{\varepsilon}_\alpha(\vec{k}) a_{\alpha\vec{k}s}^+ a_{\alpha\vec{k}s} + \sum_{\alpha=1}^2 \Delta_\alpha \sum_{\vec{k}} a_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+ \\ & + \sum_{\alpha=1}^2 \Delta_\alpha^* \sum_{\vec{k}} a_{\alpha-\vec{k}\downarrow} a_{\alpha\vec{k}\uparrow} - \sum_{\alpha=1}^2 \Delta_\alpha^* \sum_{\vec{k}} \langle a_{\alpha-\vec{k}\downarrow} a_{\alpha\vec{k}\uparrow} \rangle_{H_{\text{eff}}}. \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

Pilu Δ_α ja selle kaaskompleks Δ_α^* täidavad siin vastavalt elektronpaari tekkimise ja kadumise allika rolli tsoonis α .

Hamiltoniaan (2.2.5) on täpselt diagonaliseeritav Bogoliubovi - Valatini teisenduse [1], [6], [7]

$$\begin{aligned} a_{\alpha\vec{k}\uparrow} &= u_{\alpha\vec{k}} A_{\alpha\vec{k}\uparrow} + v_{\alpha\vec{k}}^* A_{\alpha-\vec{k}\downarrow}^+, \\ a_{\alpha-\vec{k}\downarrow} &= u_{\alpha\vec{k}} A_{\alpha-\vec{k}\downarrow} - v_{\alpha\vec{k}}^* A_{\alpha\vec{k}\uparrow}^+, \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

abil, kus

$$|u_{\alpha\vec{k}}|^2 + |v_{\alpha\vec{k}}|^2 = 1, \quad u_{\alpha-\vec{k}} = u_{\alpha\vec{k}}, \quad v_{\alpha-\vec{k}} = -v_{\alpha\vec{k}}, \quad \alpha = 1, 2.$$

Kui teisenduse (2.2.6) koefitsiendid rahuldavad seoseid

$$|u_{\alpha\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_\alpha(\vec{k})}{E_\alpha(\vec{k})} \right], \quad |v_{\alpha\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_\alpha(\vec{k})}{E_\alpha(\vec{k})} \right], \quad u_{\alpha\vec{k}} v_{\alpha\vec{k}}^* = -\frac{\Delta_\alpha}{2E_\alpha(\vec{k})}, \quad (2.2.7)$$

siis diagonaliseerides hamiltoniaani (2.2.5) teisenduse (2.2.6) abil saame

$$H_{\text{eff}} = \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\vec{k}} D_{\alpha\vec{k}} + \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{\vec{k}} \sum_s E_\alpha(\vec{k}) A_{\alpha\vec{k}s}^+ A_{\alpha\vec{k}s}, \quad (2.2.8)$$

kus

$$D_{\alpha\vec{k}} = \tilde{\varepsilon}_\alpha(\vec{k}) - E_\alpha(\vec{k}) - \Delta_\alpha^* \left\langle a_{\alpha-\vec{k}\downarrow} a_{\alpha\vec{k}\uparrow} \right\rangle_{H_{eff}} \quad (2.2.9)$$

ning $E_\alpha(\vec{k}) = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2(\vec{k}) + |\Delta_\alpha|^2}$ on impulssi $\hbar\vec{k}$ omavate osakeste elementaarergastuse energia [6], [7]. Suurus Δ_α on minimaalne üheosakeselise ergastuse energia ehk niinimetatud ülijuhtivuspilu [7].

Võrrandid ülijuhtivuspilude määramiseks saame arvutades valemis (2.2.2) vajaliku keskvaärtuse. Kasutades valemeid (2.2.3), (2.2.4), (2.2.7) ning (2.2.8) saab teisenduse (2.2.6) abil anomaalsete keskmiste jaoks leida, et

$$\langle a_{\alpha-\vec{k}\downarrow} a_{\alpha\vec{k}\uparrow} \rangle_{H_{eff}} = -\frac{1}{2} \Delta_\alpha \xi_\alpha(\vec{k}), \quad (2.2.10)$$

kus

$$\xi_\alpha(\vec{k}) = E_\alpha^{-1}(\vec{k}) \tanh \left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{2k_B T} \right). \quad (2.2.11)$$

Avaldiste (2.2.2), (2.2.10) ja (2.2.11) abil jõuame võrranditeni ülijuhtivuspilude määramiseks:

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= -W_{11} \Delta_1 \sum_{\vec{k}} \xi_1(\vec{k}) - W_{12} \Delta_2 \sum_{\vec{k}} \xi_2(\vec{k}), \\ \Delta_2 &= -W_{12} \Delta_1 \sum_{\vec{k}} \xi_1(\vec{k}) - W_{22} \Delta_2 \sum_{\vec{k}} \xi_2(\vec{k}). \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

Minnes üle integreerimisele kasutades seost

$$\sum_{\vec{k}} g(\varepsilon(\vec{k})) = \int g(\varepsilon) \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.2.13)$$

saame võrrandid

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= -W_{11} \Delta_1 \rho_1 \eta(\Delta_1, T) - W_{12} \Delta_2 \rho_2 \eta(\Delta_2, T), \\ \Delta_2 &= -W_{12} \Delta_1 \rho_1 \eta(\Delta_1, T) - W_{22} \Delta_2 \rho_2 \eta(\Delta_2, T), \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

kus ρ_α on olekute tihedused Fermi pinnal vastavates tsoonides ning

$$\eta(\Delta_\alpha, T) = \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2}}{2k_B T}\right) d\tilde{\varepsilon}_\alpha. \quad (2.2.15)$$

2.3 Ülijuhtivuspilu võrrandid nulltemperatuuril

Leiame ülijuhtivuspilu võrrandid temperatuuril $T = 0$. Selleks läheneme piirile $T \rightarrow 0$. Kui temperatuur läheneb nullile, siis integraalvõrrandites (2.2.14) hüperboolne tangens annab

$$\lim_{T \rightarrow 0} \tanh\left(\frac{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + |\Delta_{\alpha 0}|^2}}{k_B T}\right) = 1,$$

kus $\Delta_{\alpha 0} = \Delta_\alpha(T) \Big|_{T=0}$. Nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude jaoks saame võrrandid

$$\Delta_{10} = -w_{11}\Delta_{10}\eta(\Delta_{10}, 0) - w_{12}\Delta_{20}\sqrt{r^{-1}}\eta(\Delta_{20}, 0), \quad (2.3.1)$$

$$\Delta_{20} = -w_{12}\Delta_{10}\sqrt{r}\eta(\Delta_{10}, 0) - w_{22}\Delta_{20}\eta(\Delta_{20}, 0), \quad (2.3.2)$$

kus

$$\eta(\Delta_{\alpha 0}, 0) = 2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + |\Delta_{\alpha 0}|^2}} d\tilde{\varepsilon}_\alpha. \quad (2.3.3)$$

Siinkohal tähistasime

$$w_{11} = \rho_1 W_{11}, \quad w_{22} = \rho_2 W_{22}, \quad w_{12} = \sqrt{\rho_1 \rho_2} W_{12}, \quad r = \frac{\rho_1}{\rho_2}. \quad (2.3.4)$$

Leiame järgnevalt integraali (2.3.3), kus on võetud arvesse, et integraalimärgi all on paarifunktsioon, mistõttu saame kahega korrutatud integraali, mille raja läheb nullist $\hbar\omega_D$ -ni.

Integreerides leiame, et

$$\begin{aligned}
\eta(\Delta_{\alpha 0}, 0) &= 2 \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + |\Delta_{\alpha 0}|^2}} d\tilde{\varepsilon}_\alpha = 2 \ln \left(\tilde{\varepsilon}_\alpha + \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\alpha^2 + |\Delta_{\alpha 0}|^2} \right) \Big|_0^{\hbar\omega_D} \\
&= 2 \left(\ln \left(\hbar\omega_D + \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + |\Delta_{\alpha 0}|^2} \right) - \ln |\Delta_{\alpha 0}| \right) \\
&= 2 \ln \left(\frac{\hbar\omega_D + \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 + |\Delta_{\alpha 0}|^2}}{|\Delta_{\alpha 0}|} \right).
\end{aligned} \tag{2.3.5}$$

Eeldatakse, et kehtib $\hbar\omega_D \gg |\Delta_\alpha|$. See eeldus kehtib piisavalt nõrga elektron-foonon vastastikmõju korral, mis on eelduseks eespool arendatud teoreetilise skeemi rakendamisel.

Seda arvesse võttes saame $\eta(\Delta_{\alpha 0}, 0)$ viia kujule

$$\eta(\Delta_{\alpha 0}, 0) = 2 \ln \left(\frac{\hbar\omega_D + \sqrt{\hbar^2\omega_D^2 \left(1 + \frac{|\Delta_{\alpha 0}|^2}{\hbar^2\omega_D^2} \right)}}{|\Delta_{\alpha 0}|} \right) \cong 2 \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_{\alpha 0}|} \right). \tag{2.3.6}$$

Asendades avaldise (2.3.6) võrranditesse (2.3.1) ning (2.3.2) on tulemuseks

$$\begin{aligned}
\Delta_{10} &= -2w_{11}\Delta_{10} \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_{10}|} \right) - 2w_{12}\Delta_{20}\sqrt{r^{-1}} \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_{20}|} \right), \\
\Delta_{20} &= -2w_{12}\Delta_{10}\sqrt{r} \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_{10}|} \right) - 2w_{22}\Delta_{20} \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_{20}|} \right).
\end{aligned} \tag{2.3.7}$$

Võrrandisüsteemi (2.3.7) teisendamine annab

$$\begin{aligned}
|\Delta_{10}| &= 2\hbar\omega_D \exp \left(\frac{w_{12}\kappa^{-1}\sqrt{r^{-1}} - w_{22}}{2(w_{12}^2 - w_{11}w_{22})} \right), \\
|\Delta_{20}| &= 2\hbar\omega_D \exp \left(\frac{w_{12}\kappa\sqrt{r} - w_{11}}{2(w_{12}^2 - w_{11}w_{22})} \right),
\end{aligned} \tag{2.3.8}$$

kus $\kappa = \frac{\Delta_{10}}{\Delta_{20}}$.

2.4 Faasisiirdetemperatuur

Lähtudes ülijuhtivuspilude võrranditest

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= -w_{11}\Delta_1\eta(\Delta_1, T) - w_{12}\Delta_2\sqrt{r^{-1}}\eta(\Delta_2, T), \\ \Delta_2 &= -w_{12}\Delta_1\sqrt{r}\eta(\Delta_1, T) - w_{22}\Delta_2\eta(\Delta_2, T),\end{aligned}\tag{2.4.1}$$

leiame süsteemi faasisiirdetemperatuuri ülijuhtivasse olekusse. Lähenedes kriitilisele temperatuurile $T \rightarrow -T_c$ lähenevad ülijuhtivuspilud nullile $\Delta_{1,2} \rightarrow 0$. Nullile lähenevate pilude leidmiseks saame lineaarse homogeennse võrrandisüsteemi

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= -w_{11}\Delta_1\eta(0, T_c) - w_{12}\Delta_2\sqrt{r^{-1}}\eta(0, T_c), \\ \Delta_2 &= -w_{12}\Delta_1\sqrt{r}\eta(0, T_c) - w_{22}\Delta_2\eta(0, T_c).\end{aligned}\tag{2.4.2}$$

Süsteemil (2.4.2) on mittetriviaalne lahend vaid juhul kui

$$\begin{vmatrix} (1 + w_{11}\eta) & w_{12}\sqrt{r^{-1}}\eta \\ w_{12}\sqrt{r}\eta & (1 + w_{22}\eta) \end{vmatrix} = 0\tag{2.4.3}$$

ehk

$$(w_{12}^2 - w_{11}w_{22})\eta(0, T_c)^2 - (w_{11} + w_{22})\eta(0, T_c) - 1 = 0.\tag{2.4.4}$$

Ruutvõrrandi (2.4.4) lahendid avalduvad

$$\eta(0, T_c^\pm) = \Theta^\pm,\tag{2.4.5}$$

kus

$$\Theta^+ = -\frac{2}{w_{11} + w_{22} + \sqrt{(w_{11} - w_{22})^2 + 4w_{12}^2}},\tag{2.4.6}$$

$$\Theta^- = -\frac{2}{w_{11} + w_{22} - \sqrt{(w_{11} - w_{22})^2 + 4w_{12}^2}}.\tag{2.4.7}$$

Teiselt poolt saame, kasutades valemit (2.2.15) ning tingimust $\hbar\omega_D \gg k_B T_c$ (faasisiirde-temperatuur T_c on üldiselt väga väike)

$$\eta(0, T_c) = 2 \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D \gamma}{\pi k_B T_c} \right), \quad (2.4.8)$$

kus γ on Euleri konstant $\gamma = e^{0,577}$.

Avaldisest (2.4.5) ja (2.4.8) järeldub, et üljuhul on kaks kriitilist temperatuuri

$$T_c^+ = \left(\frac{2\hbar\omega_D \gamma}{k_B \pi} \right) \exp \left(-\frac{\Theta^+}{2} \right), \quad (2.4.9)$$

$$T_c^- = \left(\frac{2\hbar\omega_D \gamma}{k_B \pi} \right) \exp \left(-\frac{\Theta^-}{2} \right). \quad (2.4.10)$$

Valemi (2.4.8) alusel on suurus $\eta(0, T_c)$ alati positiivne ning kuna $\Theta^- < \Theta^+$, siis $T_c^- > T_c^+$. Eelnevast järeldub, et kriitiline temperatuur T_c^- on alati suurem kui temperatuur T_c^+ .

Eeldusel, et $w_{12}^2 < w_{11}w_{22}$ on võrranditel (2.4.1) kaks lahendite klassi Δ_α^- ja Δ_α^+ ($\alpha = 1, 2$).

Minnes üle absoluutväärtustele, saame võrrandid (2.4.1) esitada järgmiselt:

$$\begin{aligned} |\Delta_1| &= -w_{11}|\Delta_1|\eta(|\Delta_1|, T) - \operatorname{sgn}(w_{12}) \frac{\operatorname{sgn}(\Delta_1)}{\operatorname{sgn}(\Delta_2)} |w_{12}||\Delta_2| \sqrt{r^{-1}} \eta(|\Delta_2|, T), \\ |\Delta_2| &= -\operatorname{sgn}(w_{12}) \frac{\operatorname{sgn}(\Delta_2)}{\operatorname{sgn}(\Delta_1)} |w_{12}||\Delta_1| \sqrt{r} \eta(|\Delta_1|, T) - w_{22}|\Delta_2|\eta(|\Delta_2|, T). \end{aligned} \quad (2.4.11)$$

Tulenevalt tsoonidevahelise interaktsiooni tüübist saame võrrandite (2.4.11) jaoks kirja panna järgmised märkide reeglid [9]:

$$\begin{aligned} w_{12} < 0 &\rightarrow \begin{cases} \operatorname{sgn}(\Delta_1^-) = \operatorname{sgn}(\Delta_2^-) \\ \operatorname{sgn}(\Delta_1^+) \neq \operatorname{sgn}(\Delta_2^+), \end{cases} \\ w_{12} > 0 &\rightarrow \begin{cases} \operatorname{sgn}(\Delta_1^-) \neq \operatorname{sgn}(\Delta_2^-) \\ \operatorname{sgn}(\Delta_1^+) = \operatorname{sgn}(\Delta_2^+). \end{cases} \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

Antud töös kasutame tsoonidevahelist tõmbeinteraktsiooni ($W_{12} < 0$), mistõttu saame lahendite klasside jaoks võrrandid

$$\begin{aligned} |\Delta_1^-| &= -w_{11}|\Delta_1^-|\eta(|\Delta_1^-|, T) + |w_{12}||\Delta_2^-|\sqrt{r^{-1}}\eta(|\Delta_2^-|, T), \\ |\Delta_2^-| &= |w_{12}||\Delta_1^-|\sqrt{r}\eta(|\Delta_1^-|, T) - w_{22}|\Delta_2^-|\eta(|\Delta_2^-|, T) \end{aligned} \quad (2.4.13)$$

ning

$$\begin{aligned} |\Delta_1^+| &= -w_{11}|\Delta_1^+|\eta(|\Delta_1^+|, T) - |w_{12}||\Delta_2^+|\sqrt{r^{-1}}\eta(|\Delta_2^+|, T), \\ |\Delta_2^+| &= -|W_{12}||\Delta_1^+|\sqrt{r}\eta(|\Delta_1^+|, T) - w_{22}|\Delta_2^+|\eta(|\Delta_2^+|, T). \end{aligned} \quad (2.4.14)$$

Võrranditel (2.4.13) eksisteerivad nullist erinevad lahendid Δ_α^- temperatuuridel $T < T_c^-$, kus temperatuuril T_c^- toimub faasiüleminek ülijuhtivasse olekusse. Lahenditele Δ_α^- vastavad stabiilsed vabaenergia miinimumid. Võrranditel (2.4.14) on olemas nullist erinevad lahendid Δ_α^+ temperatuuridel $T < T_c^+$ ning nad kirjeldavad metastabiilseid vabaenergia miinimume [5].

Tsoonidevahelise interaktsiooni olemasolu tõttu on T_c^- üleminekutemperatuuriks mõlemale tsoonile [5], mistõttu edaspidi tähistame faasisiirdetemperatuuri stabiilsesse ülijuhtivasse olekusse lihtsalt T_c -ga, st

$$T_c^- \equiv T_c. \quad (2.4.15)$$

Sellele olekule vastavaid ülijuhtivuspilusid tähistame

$$\Delta_\alpha^- \equiv \Delta_\alpha. \quad (2.4.16)$$

2.5 Termodünaamilised suurused

Ülijuhi termodünaamilised suurused on täielikult kirjeldatavad süsteemi vabaenergia muutusega ning selle temperatuuri järgi võetud tuletistega [5]

$$\Delta f = f - f_n, \quad \Delta s = -\Delta f', \quad \Delta C = -T\Delta f''. \quad (2.5.1)$$

Järgnevalt leiamegi kahetsoonilist ülijuhti kirjeldavad termodünaamilised suurused alustades vabaenergiast.

Asendades statistilise summa avaldisse (2.2.4) ülijuhi hamiltoniaani (2.2.8) võib leida, et

$$\begin{aligned} Z &= \text{Sp} \exp\left(-\frac{H_{\text{eff}}}{k_B T}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{E_0}{k_B T}\right) \prod_{\alpha} \prod_{\vec{k}} \prod_s \left[1 + \exp\left(-\frac{E_{\alpha}(\vec{k})}{k_B T}\right)\right] \\ &= \exp\left(-\frac{E_0}{k_B T}\right) \prod_{\alpha} \prod_{\vec{k}} \left[1 + \exp\left(-\frac{E_{\alpha}(\vec{k})}{k_B T}\right)\right]^2, \end{aligned} \quad (2.5.2)$$

kus

$$E_0 = \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left[\tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\vec{k}) - E_{\alpha}(\vec{k}) + \frac{|\Delta_{\alpha}|^2}{2} \xi_{\alpha}(\vec{k}) \right]. \quad (2.5.3)$$

Statistilist summat kasutades leiame Helmholtzi vabaenergia ja edasi entroopia. Vabaenergia avaldub

$$F = -k_B T \ln Z = J + \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{2} |\Delta_{\alpha}|^2 \xi_{\alpha}(\vec{k}), \quad (2.5.4)$$

kus

$$J = \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left\{ \tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\vec{k}) - E_{\alpha}(\vec{k}) - 2k_B T \ln \left[1 + \exp\left(-\frac{E_{\alpha}(\vec{k})}{2k_B T}\right) \right] \right\}. \quad (2.5.5)$$

Kasudades ülijuhtivuspilu võrrandeid (2.2.12) kujul

$$\Delta_\alpha + \sum_{\alpha'=1}^2 W_{\alpha\alpha'} \sum_{\vec{k}} \Delta_{\alpha'} \xi_{\alpha'}(\vec{k}) = 0, \quad (2.5.6)$$

esitame vabaenergia valemina, mis on sobivam entroopia leidmiseks:

$$F = J + \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left(|\Delta_\alpha|^2 \xi_\alpha(\vec{k}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha'} W_{\alpha\alpha'} \Delta_\alpha \Delta_{\alpha'} \xi_\alpha(\vec{k}) \xi_{\alpha'}(\vec{k}) \right). \quad (2.5.7)$$

Vabaenergia kujust (2.5.7) järeldub, et

$$\left. \frac{\partial F}{\partial \Delta_\alpha} \right|_{T=const} = 0 \quad (2.5.8)$$

ja seega

$$\frac{\partial F}{\partial T} = \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{\Delta_\alpha=const} + \sum_{\alpha} \left. \frac{\partial F}{\partial \Delta_\alpha} \right|_{T=const} \times \frac{\partial \Delta_\alpha}{\partial T} = \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_{\Delta_\alpha=const}. \quad (2.5.9)$$

Kasutades vabaenergia valemit (2.5.7) ning seost (2.5.9), leiame entroopia

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = 2k_B \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left\{ \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \right) \right] + f(E_\alpha(\vec{k})) \frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \right\}, \quad (2.5.10)$$

kus $f(E_\alpha(\vec{k})) = \left[\exp \left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \right) + 1 \right]^{-1}$ on elementaarergastuste keskmine arv antud kvantolekus [7].

Entroopiast tuletame kahetsoonilise ülijuhi soojusmahtuvuse:

$$\begin{aligned} C = T \frac{\partial S}{\partial T} &= 2k_B \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \frac{\left(E_\alpha(\vec{k}) - T \frac{\partial E_\alpha(\vec{k})}{\partial T} \right) f(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B T} \\ &- 2k_B \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \frac{E_\alpha(\vec{k}) \exp \left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \right) \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \right) f^2(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B} \\ &+ 2k_B \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left[\frac{\frac{\partial E_\alpha(\vec{k})}{\partial T} f(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B} - \frac{E_\alpha(\vec{k}) f(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B T} \right]. \end{aligned} \quad (2.5.11)$$

Arvestades, et

$$\frac{\frac{\partial E_\alpha(\vec{k})}{\partial T} f(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B} - \frac{E_\alpha(\vec{k}) f(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B T} = - \frac{f(E_\alpha(\vec{k})) \left(E_\alpha(\vec{k}) - T \frac{\partial E_\alpha(\vec{k})}{\partial T} \right)}{k_B T} \quad (2.5.12)$$

ning

$$\frac{\partial f(E_\alpha(\vec{k}))}{\partial E_\alpha(\vec{k})} = - \frac{\exp\left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T}\right) f^2(E_\alpha(\vec{k}))}{k_B T} \quad (2.5.13)$$

saame

$$\begin{aligned} C &= 2k_B T \sum_\alpha \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\partial f(E_\alpha(\vec{k}))}{\partial E_\alpha(\vec{k})} \right) \left(E_\alpha(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \right) \right) \\ &= 2k_B T \sum_\alpha \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\partial f(E_\alpha(\vec{k}))}{\partial E_\alpha(\vec{k})} \right) \left(\frac{E_\alpha(\vec{k})}{k_B T} \frac{\partial E_\alpha(\vec{k})}{\partial T} - \frac{E_\alpha^2(\vec{k})}{k_B T^2} \right) \\ &= \frac{2}{T} \sum_\alpha \sum_{\vec{k}} \left(- \frac{\partial f(E_\alpha(\vec{k}))}{\partial E_\alpha(\vec{k})} \right) \left(E_\alpha^2(\vec{k}) - E_\alpha(\vec{k}) T \frac{\partial E_\alpha(\vec{k})}{\partial T} \right) \\ &= \frac{2}{T} \sum_\alpha \sum_{\vec{k}} \left(- \frac{\partial f(E_\alpha(\vec{k}))}{\partial E_\alpha(\vec{k})} \right) \left(E_\alpha^2(\vec{k}) - T |\Delta_\alpha| \frac{\partial |\Delta_\alpha|}{\partial T} \right). \end{aligned} \quad (2.5.14)$$

Seega

$$C = \frac{2}{T} \sum_\alpha \sum_{\vec{k}} \left(- \frac{\partial f(E_\alpha(\vec{k}))}{\partial E_\alpha(\vec{k})} \right) \left(E_\alpha^2(\vec{k}) - \frac{T}{2} \frac{\partial |\Delta_\alpha|^2}{\partial T} \right). \quad (2.5.15)$$

Viimases avaldises esimene liidetav on oma kujult analoogne normaalse metalli soojusmahutavusega. Teine liidetav ilmub ainult ülijuhtivas faasis ning see kirjeldab temperatuuri mõju elektroni energiaspektrile, mis tekib seoses temperatuurist sõltuva pilu olemasoluga [7].

3 Varjatud kahepilulisus kahetsoonilises ülijuhis

3.1 Pilude võrdsus kahetsoonilises ülijuhis

3.1.1 Juht, kui $T = 0$

Antud töös fokuseerime juhtudele, kus leidub mingi kindel kriitiline tsoonidevaheline interaktsioonikonstant, mille korral $\Delta_1 = \Delta_2$. Sellise interaktsioonikonstandi saame leida pannes nulltemperatuursed piluvõrrandid (2.3.8) üksteisega võrduma. Saame

$$|\Delta_{10}| = |\Delta_{20}| \quad (3.1.1)$$

ehk

$$2\hbar\omega_D \exp\left(\frac{|w_{12}||\kappa|^{-1}\sqrt{r^{-1}} + w_{22}}{2(w_{11}w_{22} - |w_{12}|^2)}\right) = 2\hbar\omega_D \exp\left(\frac{|w_{12}||\kappa|\sqrt{r} + w_{11}}{2(w_{11}w_{22} - |w_{12}|^2)}\right). \quad (3.1.2)$$

Kuna $\Delta_{10} = \Delta_{20}$, siis $\kappa = 1$ ning võrrand (3.1.2) taandub kujule

$$|w_{12}|\sqrt{r^{-1}} + w_{22} = |w_{12}|\sqrt{r} + w_{11}. \quad (3.1.3)$$

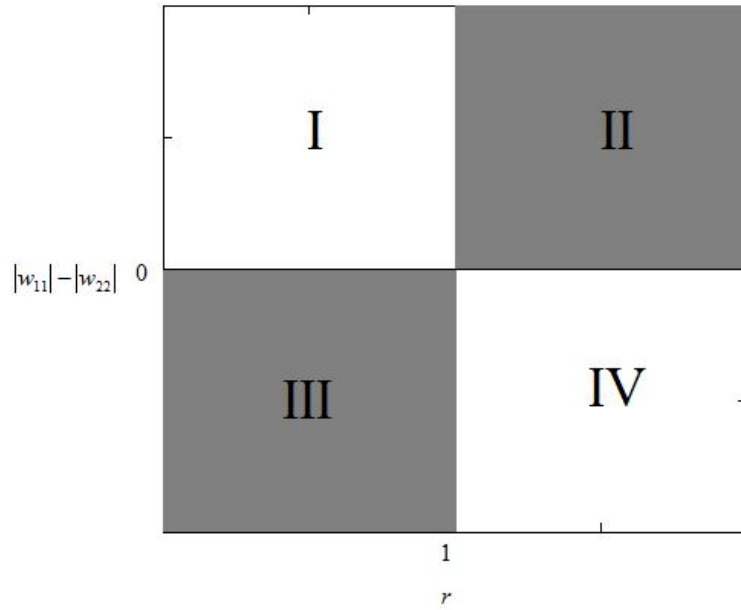
Avaldades $|w_{12}|$ saame interaktsioonikonstandi $|w_{12}^v|$, mille korral saavad pilud $\Delta_{\alpha 0}$ võrdseks:

$$|w_{12}^v| = \frac{(w_{11} - w_{22})\sqrt{r}}{1 - r}. \quad (3.1.4)$$

Näeme, et avaldis (3.1.4) omab mõtet ehk $|w_{12}^v| > 0$, kui on täidetud tingimused

$$|w_{12}^v| > 0, \text{ kui } \begin{cases} |w_{11}| > |w_{22}|, r > 1 \\ |w_{11}| < |w_{22}|, r < 1. \end{cases} \quad (3.1.5)$$

Ülijuhil leidub tsoonidevaheline interaktsioonikonstant w_{12}^v parameetrite väärtuste puhul, mis jäävad joonisel 1 piirkondadesse II ja III.

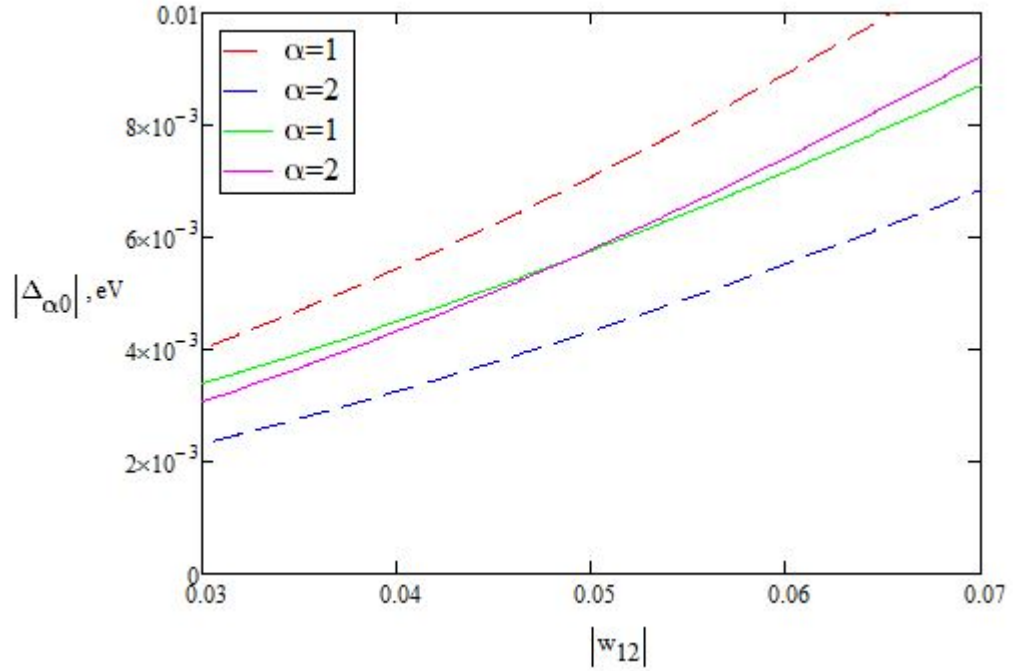


Joonis 1. Interaktsioonikonstandi $|w_{12}^v|$ olemasoluks vajalike tingimuste graafiline esitus.

Illustreerimaks eelnevat esitame graafiliselt nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude sõltuvuse tsoonidevahelisest interaktsioonist (vt joonis 2). Parameetrid valime vastavalt joonis 1 piirkondadele:

$$I : w_{11} = -0,1 \quad w_{22} = -0,08 \quad r = 0,5, \quad (3.1.6)$$

$$II : w_{11} = -0,1 \quad w_{22} = -0,08 \quad r = 1,5. \quad (3.1.7)$$



Joonis 2. Nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude $\Delta_{\alpha 0}$ sõltuvus tsoonidevahelisest interaktsioonikonstandist $|w_{12}|$, kui $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.

Katkendjoontega on tähistatud pilude sõltuvus $|w_{12}|$ -st parameetrite komplekti (3.1.6) puhul. Selliste parameetrite puhul ei ole valemil (3.1.4) lahentit ning seega ei leidu ka tsoonidevahelist interaktsioonikonstanti, mille korral $\Delta_{10} = \Delta_{20}$. See-eest leidub selline interaktsioonikonstant parameetrite komplekti (3.1.7) puhul. Pannes komplekti II kuuluvad parameetrid valemisse (3.1.4) saame

$$|w_{12}^v| = \frac{(-0,1 + 0,08)\sqrt{1,5}}{1 - 1,5} \cong 0,049, \quad (3.1.8)$$

mis on joonisel 2 pideva joonega antud kõverate $|\Delta_{\alpha 0}|_{vs}|w_{12}|$ lõikumispunktiks.

3.1.2 Temperatuuripiirkond $0 < T < T_c$

Nii nagu nulltemperatuursete piluvõrrandite puhul saab tsoonidevahelise interaktsiooni-
konstandi w_{12}^v leida ka temperatuurist sõltuvatest piluvõrranditest. Vaatame võrrandeid (2.4.13)
ning paneme nad omavahel võrduma

$$\begin{aligned} & -w_{11}|\Delta_1|\eta(|\Delta_1|, T) + |w_{12}||\Delta_2|\sqrt{r^{-1}}\eta(|\Delta_2|, T) = \\ & = |w_{12}||\Delta_1|\sqrt{r}\eta(|\Delta_1|, T) - w_{22}|\Delta_2|\eta(|\Delta_2|, T). \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

Arvestades, et

$$\Delta_1 = \Delta_2, \quad (3.1.10)$$

siis kehtib ka seos

$$\eta(|\Delta_1|, T) = \eta(|\Delta_2|, T). \quad (3.1.11)$$

Koondades võrrandis (3.1.9) mõlemal pool võrdusmärki olevad võrdsed liikmed saame

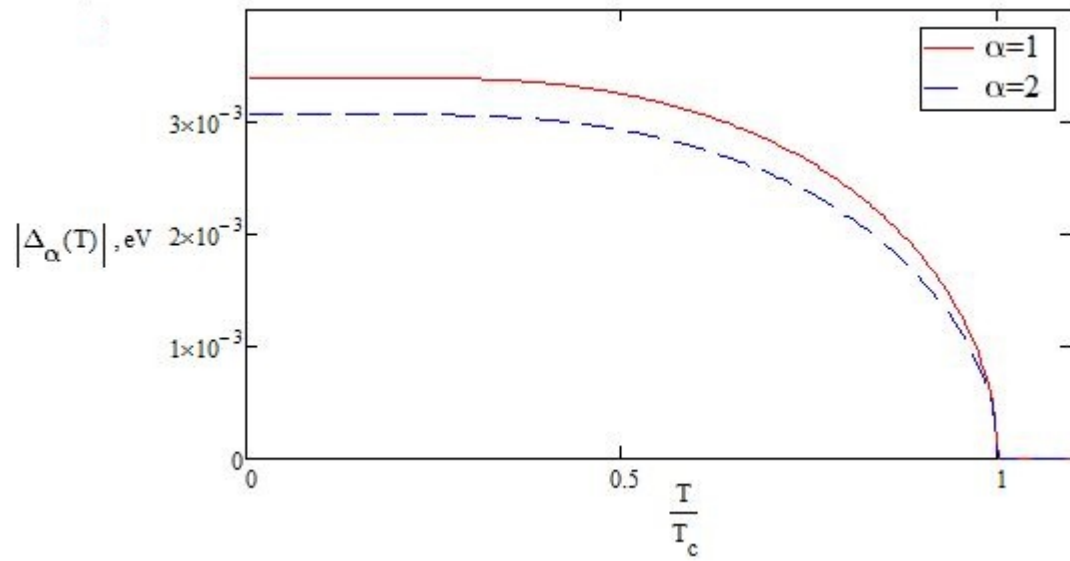
$$-w_{11} + |w_{12}|\sqrt{r^{-1}} = |w_{12}|\sqrt{r} - w_{22}. \quad (3.1.12)$$

Avaldades eelnevast $|w_{12}|$ saamegi

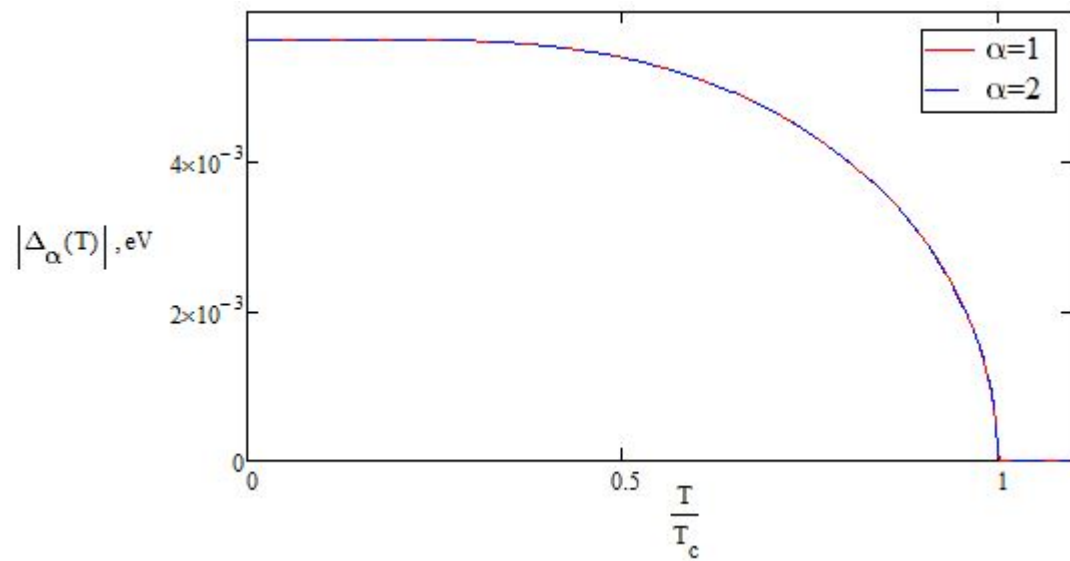
$$|w_{12}| = |w_{12}^v| = \frac{(w_{11} - w_{22})\sqrt{r}}{1 - r}. \quad (3.1.13)$$

Näeme, et saadud võrrand on üksühene võrrandiga (3.1.4). Seega kehtivad tingimused (3.1.5),
mitte ainult nulltemperatuuril, vaid kogu piirkonna $0 < T < T_c$ ulatuses.

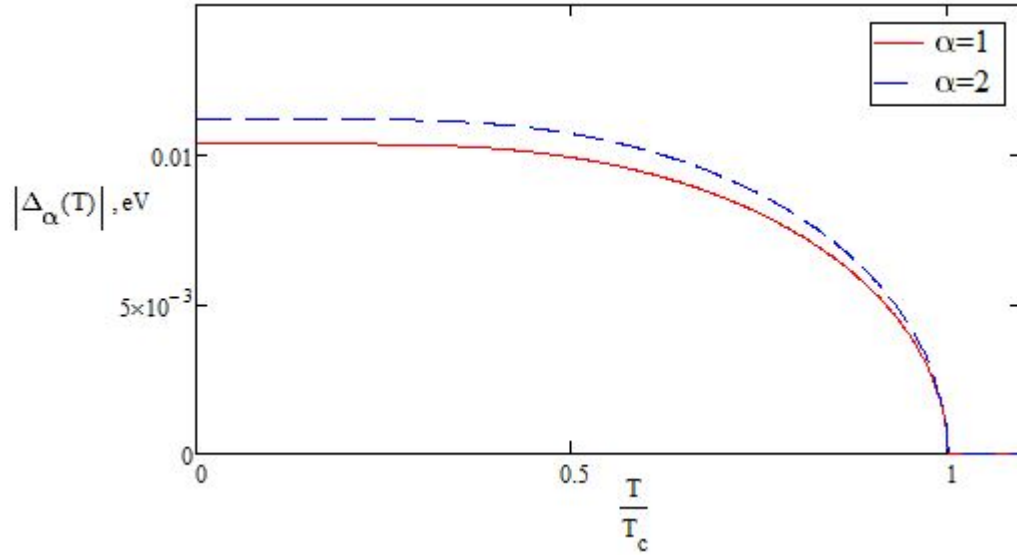
Parameetrite komplekti (3.1.7) kasutades esitame graafiliselt ülijuhtivuspilude temperatuurisõltuvused erinevate tsoonidevaheliste interaktsioonikonstantide väärtuste jaoks.



Joonis 3. Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist juhul, kui $|w_{12}| = 0,03$, $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.



Joonis 4. Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist juhul, kui $|w_{12}| = |w_{12}^v| = 0,049$, $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.



Joonis 5. Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist juhul, kui $|w_{12}| = 0,08$, $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.

Joonisel 3 tekib ülijuhtivus ($\Delta_\alpha > 0$) allpool temperatuuri T_c . Hoolimata sellest, et tsooniseste interaktsioonide vahel kehtib võrratus $|w_{11}| > |w_{22}|$ ning terve piirkonna ulatuses $|\Delta_1| > |\Delta_2|$, on T_c ühiseks kriitiliseks temperatuuriks mõlemale pilule. Antud asjaolu on tingitud tsoonidevahelisest interaktsiooni olemasolust.

Jooniselt 4 paistab välja, et tsoonidevahelise interaktsiooni kasvades tekib mingi kindla interaktsioonikonstandi väärtuse juures ülijuhise niinimetatud varjatud kahepilulisus ehk ülijuhtivuspilud saavad võrdseks ($|\Delta_1| = |\Delta_2|$). Samuti on tähelepanuväärne asjaolu, et sellisel juhul on pilud võrdsed kogu temperatuuripiirkonna ulatuses, mis on kooskõlas eespool saadud analüütilise tulemusega. Jõudes interaktsioonikonstandi väärtusteni $|w_{12}| > |w_{12}^v|$ näeme (joonis 5), et kuigi $|w_{11}| > |w_{22}|$, siis selles piirkonnas domineerib teine ülijuhtivuspilu ($|\Delta_2| > |\Delta_1|$).

3.2 Ülijuhtivuspilude ja siirdetemperatuuri suhe

Nulltemperatuursete ülijuhtivuspilude (2.3.7) ja siirdetemperatuuri (2.4.10) suhete võrrandid avalduvad

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp \left(\frac{|w_{12}| |\kappa|^{-1} \sqrt{r^{-1}} + w_{22}}{2(w_{11} w_{22} - |w_{12}|^2)} + \frac{\Theta^-}{2} \right) \quad (3.2.1)$$

$$\frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp \left(\frac{|w_{12}| |\kappa| \sqrt{r} + w_{11}}{2(w_{11} w_{22} - |w_{12}|^2)} + \frac{\Theta^-}{2} \right). \quad (3.2.2)$$

Analüüsime võrrandeid (3.2.1) ja (3.2.2), kui süsteemis puudub tsoonidevaheline interaktsioon ($w_{12} = 0$). Sellisel juhul kirjeldavad kõnealused võrrandid kahe üksteisest sõltumatu ülijuhtivuspilu ning temperatuuri $T_c = T_c^-$ suhteid. Võrrandid (3.2.1) ning (3.2.2) avalduvad nüüd

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp \left(\frac{1}{2w_{11}} + \frac{\Theta^-}{2} \right), \quad (3.2.3)$$

$$\frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp \left(\frac{1}{2w_{22}} + \frac{\Theta^-}{2} \right). \quad (3.2.4)$$

Juhul, kui

$$|w_{11}| > |w_{22}|, \quad (3.2.5)$$

siis on T_c kriitiliseks temperatuuriks pilule Δ_{10} , mistõttu vaatleme antud juhul vaid võrrandit (3.2.3). Näitame võrrandit (3.2.3) kasutades, et ühetsoonilise ülijuhi puhul on ülijuhtivuspilu ning $k_B T_c$ suhe BCS teooriast tuntud konstant 1,76 [1], [7].

Arvestades tingimusega (3.2.5) saame

$$\Theta^- = -\frac{2}{w_{11} + w_{22} - |w_{11} - w_{22}|} = -\frac{1}{w_{11}}. \quad (3.2.6)$$

Pannes seose (3.2.6) sisse võrrandisse (3.2.3) saamegi

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp \left(\frac{1}{2w_{11}} - \frac{1}{2w_{11}} \right) = \frac{\pi}{\gamma} \cong 1,76. \quad (3.2.7)$$

Samale tulemusele jõuame võrrandist (3.2.2) juhul, kui $|w_{22}| > |w_{11}|$.

Kui ülijuhis esineb tsoonidevaheline interaktsioon ($|w_{12}| > 0$), siis üldjuhul universaalne suhe $\Delta/k_B T_c = 1,76$ enam ei kehti. Seda kinnitab ka asjaolu, et võrrandites (3.2.1) ning (3.2.2) olevate eksponentide astmed on vastasmärgilised [10]. Seega sõltuvalt interaktsiooni w_{12} tugevusest jäävad kahepilulises süsteemis pilude ning $k_B T_c$ suhted piirkondadesse

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} > 1,76 > \frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c}, \quad \text{kui } |w_{12}| < |w_{12}^v|, \quad (3.2.8)$$

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} < 1,76 < \frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c}, \quad \text{kui } |w_{12}| > |w_{12}^v| \quad (3.2.9)$$

ning

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} = 1,76 = \frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c}, \quad \text{kui } |w_{12}| = |w_{12}^v|. \quad (3.2.10)$$

Seostest (3.2.8) ning (3.2.9) on näha, et reeglina on ühe pilu ja $k_B T_c$ suhe suurem ning teise pilu ja $k_B T_c$ suhe väiksem kui ühepilulisest juhtumist leitud BCS konstant 1,76. Esmakordselt näidati seda töös [10].

Seose (3.2.10) saab analüütiliselt tõestada asendades seose (3.1.4) võrranditesse (3.2.1) ning (3.2.2). Sellisel juhul saame

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp\left(-\frac{r-1}{2(w_{22}-rw_{11})} + \frac{\Theta^-}{2}\right), \quad (3.2.11)$$

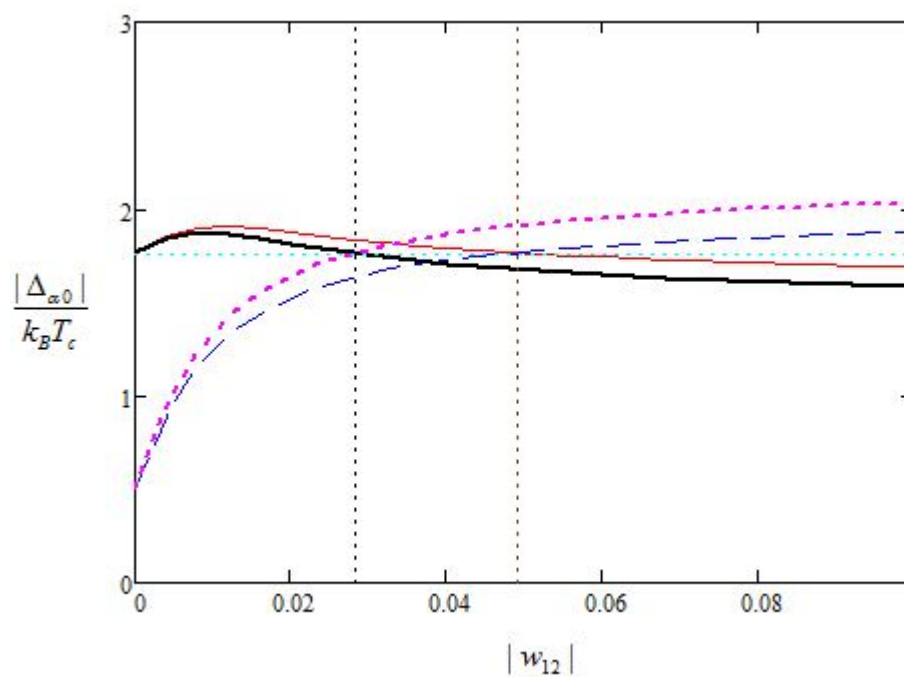
$$\frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \exp\left(-\frac{r-1}{2(w_{22}-rw_{11})} + \frac{\Theta^-}{2}\right). \quad (3.2.12)$$

Arvestades tingimustega (3.1.5) saame, et

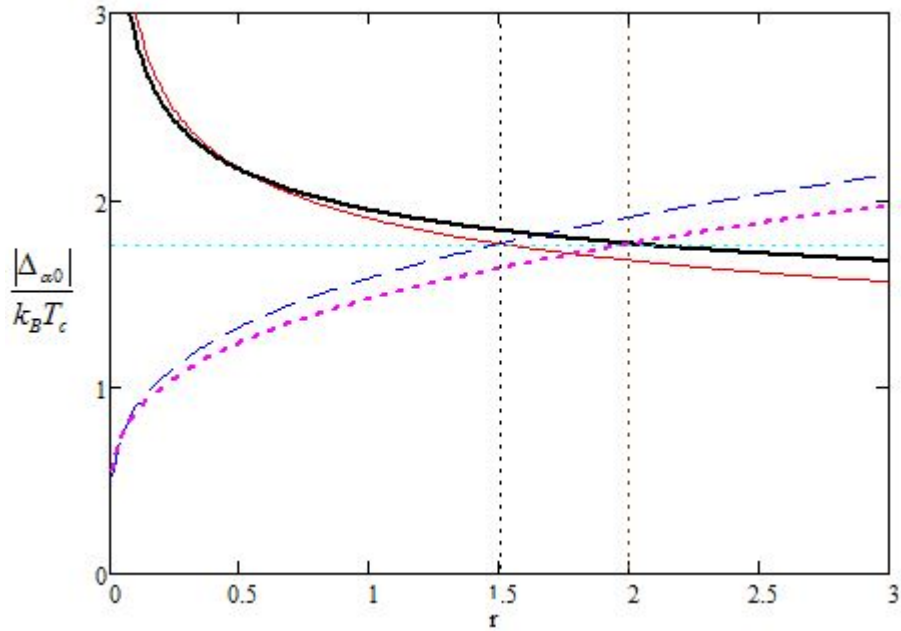
$$\Theta^- = \frac{r-1}{(w_{22}-rw_{11})}. \quad (3.2.13)$$

Pannes (3.2.13) võrranditesse (3.2.11) ja (3.2.12) saamegi

$$\frac{|\Delta_{10}|}{k_B T_c} = \frac{|\Delta_{20}|}{k_B T_c} = \frac{\pi}{\gamma} \cong 1,76. \quad (3.2.14)$$



Joonis 6. Suhete $\Delta_{10}/k_B T_c$ (pidevad jooned) ja $\Delta_{20}/k_B T_c$ (katkendjooned) sõltuvused tsoonidevahelisest interaktsioonist. Parameetrid: $w_{11} = -0,10$; $w_{22} = -0,08$; $r = 1,5$ (peened jooned); $r = 2$ (jämedad jooned); $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.



Joonis 7. Suhete $\Delta_{10}/k_B T_c$ (pidevad jooned) ja $\Delta_{20}/k_B T_c$ (katkendjooned) sõltuvused olekutiheduste suhtest r . Parameetrid: $w_{11} = -0,1$; $w_{22} = -0,08$; $|w_{12}| = 0,049$ (peened jooned); $|w_{12}| = 0,028$ (jämedad jooned); $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.

Jooniselt 6 on näha, et algselt domineerivama pilu väärtus kahaneb tsoonidevahelise interaktsiooni w_{12} kasvades. Interaktsioonikonstandi väärtuste $w_{12} = w_{12}^v$ juures saavad pilud BCS konstandi 1,76 korralt võrdseteks. w_{12} -e edasisel kasvamisel muutub teine pilu domineerivamaks.

Jooniselt 7 on näha, et mida väiksem on w_{12}^v , seda rohkem peavad olekute tihedused ρ_1 ja ρ_2 erinema, selleks et, võiks realiseeruda varjatud kahepilulisus.

3.3 Võrdlus katseandmete ja teiste autorite teoreetiliste arvutustega

Eelnevates punktides saadud analüütilised tulemused on kooskõlas artiklis [11] kirjeldatud eksperimentaalsete tulemustega.

Artikkelis [11] on kirjeldatud ühendi $\text{Mg}(\text{B}_{1-x}\text{C}_x)_2$ ülijuhtivuse sõltuvust süsiniku konsentratsioonist piirkonnas $0,047 \leq x \leq 0,132$. Kristalli juhtivust on mõõdetud kasutades punkt-kokkupuute spektroskoopiat, mille töö põhimõtteid on kirjeldatud artiklis [12]. Saadud tulemused on sobitatud Blonder-Tinkham-Klapwijk (BTK) teoreetilise mudeliga, millest on välja arvatud ülijuhtivuspilude ligikaudsed väärtused.

Kahetsoonilises BTK mudelis avaldub normeeritud punkt-kokkupuute juhtivus [11]

$$\sigma = (1 - w_\pi)\sigma_\sigma + w_\pi\sigma_\pi, \quad (3.3.1)$$

kus σ_σ ja σ_π on tsoonide σ ja π juhtivused ning w_π on π -tsooni panus juhtivusse. Eksperimentaalselt saadud andmete sobitamisel võrrandiga (3.3.1), saadi, et kuni C konsentratsioonini $x \approx 0,10$ käituvad ülijuhtivuspilud lisanditeta MgB_2 kristallile omaselt [11]. Konsentratsioonil $x = 0,132$ jälgiti aga, et BTK kahetsoonilise mudeliga sobimiseks peavad kahe pilu väärtused üksteisele väga lähedased olema. Mõõte tulemustega, mille korral ei olnud võimalik piludel vahet teha sobitati ka BTK ühetsoonilist mudelit, mis sobis antud juhul isegi paremini. Ühetsoonilisest mudelist arvatud pilu väärtuseks saadi $\Delta = 2,8 \pm 0,2$ meV.

Tulemuste kontrolliks ning täpsuse parandamiseks kasutati töös [11] ka teist meetodit. Antud meetod kujutab endast tsoonidele vastavate juhtivuste eraldamist. Vastavad juhtivuse panused eraldati ülijuhile magnetvälja rakendamise, mille abil kustutati ühe tsooni (σ_π) panus juhtivusse. Sellisel meetodiga mõõdetud andmed sobitati võrrandiga (3.3.1) võttes $\sigma_\pi = 1$. Teise tsooni juhtivuse saamiseks leiti $\sigma_0 - \sigma_B + 1$, kus σ_0 on juhtivus magnetvälja

puudumisel ning σ_B on juhtivus, millest on kustutatud σ_π tsooni panus juhtivusse. Saadud tulemused sobitati võrrandiga (3.3.1) võttes $\sigma_\sigma = 1$. Süsiniku kontsentratsiooni väärtuse $x = 0,132$ juures leiti, et sõltumata magnetvälja tugevusest jäävad juhtivus maksimumid samale energia positsioonile. Tulenevalt juhtivuse eksperimentaalsete väärtuste heast sobivusest BTK ühetsoonilise mudeliga ning juhtivus kõverate magnetväljast sõltuvusest järel-
dati, et tulemused viitavad ühetsoonilisele ülijuhile. BTK ühetsoonilisest mudelist arvatud pilu väärtuseks saadi antud meetodil $\Delta = 3,2 \pm 0,9$ meV, mis annab kriitilise temperatuuri väärtuse $T_c = 19$ K juures suhtest $2\Delta/k_B T_c \approx 3,9$ BCS konstandile lähedase väärtuse.

Töös [11] on saadud üheks tulemuseks, et suhted $\Delta_{10}/k_B T_c$ ja $\Delta_{20}/k_B T_c$ saavad võrdseks BCS konstandi 1,76 läheduses. Sellest tulemusest võime järeldada, et ühendis $\text{Mg}(\text{B}_{1-x}\text{C}_x)_2$ ei ole tugeva paardumise efektid eriti olulised.

Töös [13] on kirjeldatud ühendi $\text{Al}_{1-x}\text{Mg}_x\text{B}_2$ ülijuhivaid omadusi sõltuvalt Al kontsentratsioonist ühendis. Selleks on eksperimentaalselt leitud kahe paardumis interaktsiooni koha-
pealt tähtsaima foononmoodi energiatega sõltuvus Al kontsentratsioonist ning moduleeritud saadud andmeid kahetsoonilise BCS mudeliga. Tulemusena leiti, et tsoonidevaheline interaktsioon kasvab x-i kahanedes jõudes maksimum väärtusele $x=0,6$ juures. Saadud andmete sobitamisel BCS mudeliga saadi, et selles punktis saavad pilud võrdseks BCS konstandi läheduses ning Al kontsentratsiooni edasisel kasvamisel vahetub pilude dominantsus.

4 Soojusmahtuvus

Antud peatükis uurime, kuidas sõltub kahetsoonilise ülijuhi soojusmahtuvus temperatuurist, erinevate tsoonidevaheliste interaktsioonikonstantide väärtuste korral.

Soojusmahtuvuse numbriliseks arvutamiseks kasutame alapunktis (2.5) leitud soojusmahtuvuse valemit (2.5.15)

$$C = \frac{2}{T} \sum_{\alpha} \sum_{\vec{k}} \left(-\frac{\partial f(E_{\alpha}(\vec{k}))}{\partial E_{\alpha}(\vec{k})} \right) \left(E_{\alpha}^2(\vec{k}) - \frac{T}{2} \frac{\partial |\Delta_{\alpha}|^2}{\partial T} \right).$$

Esmalt läheme antud valemis summeerimiselt üle integreerimisele eelnevalt kasutatud seose (2.2.13) abil ning seejärel kasutame valemis oleva osatuletise $\frac{\partial |\Delta_{\alpha}|}{\partial T}$ numbriliseks arvutamiseks II järku täpsusega diferentsiaalvalemit

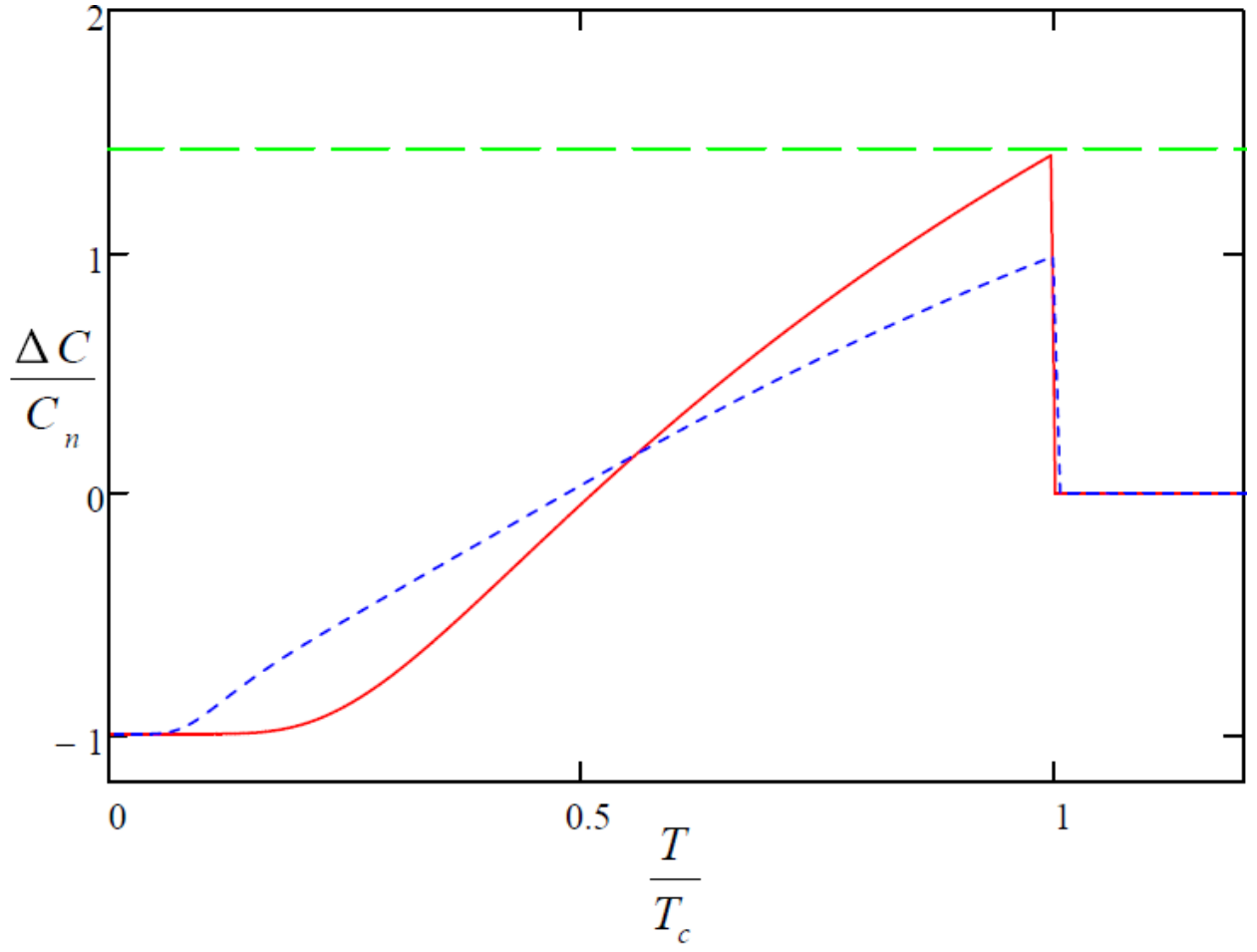
$$\frac{\partial |\Delta_{\alpha}(T)|}{\partial T} = \frac{|\Delta_{\alpha}(T + \Delta T)| - |\Delta_{\alpha}(T - \Delta T)|}{2\Delta T}, \quad (4.0.1)$$

kus ΔT on numbrilistes arvutustes võetud temperatuuri samm.

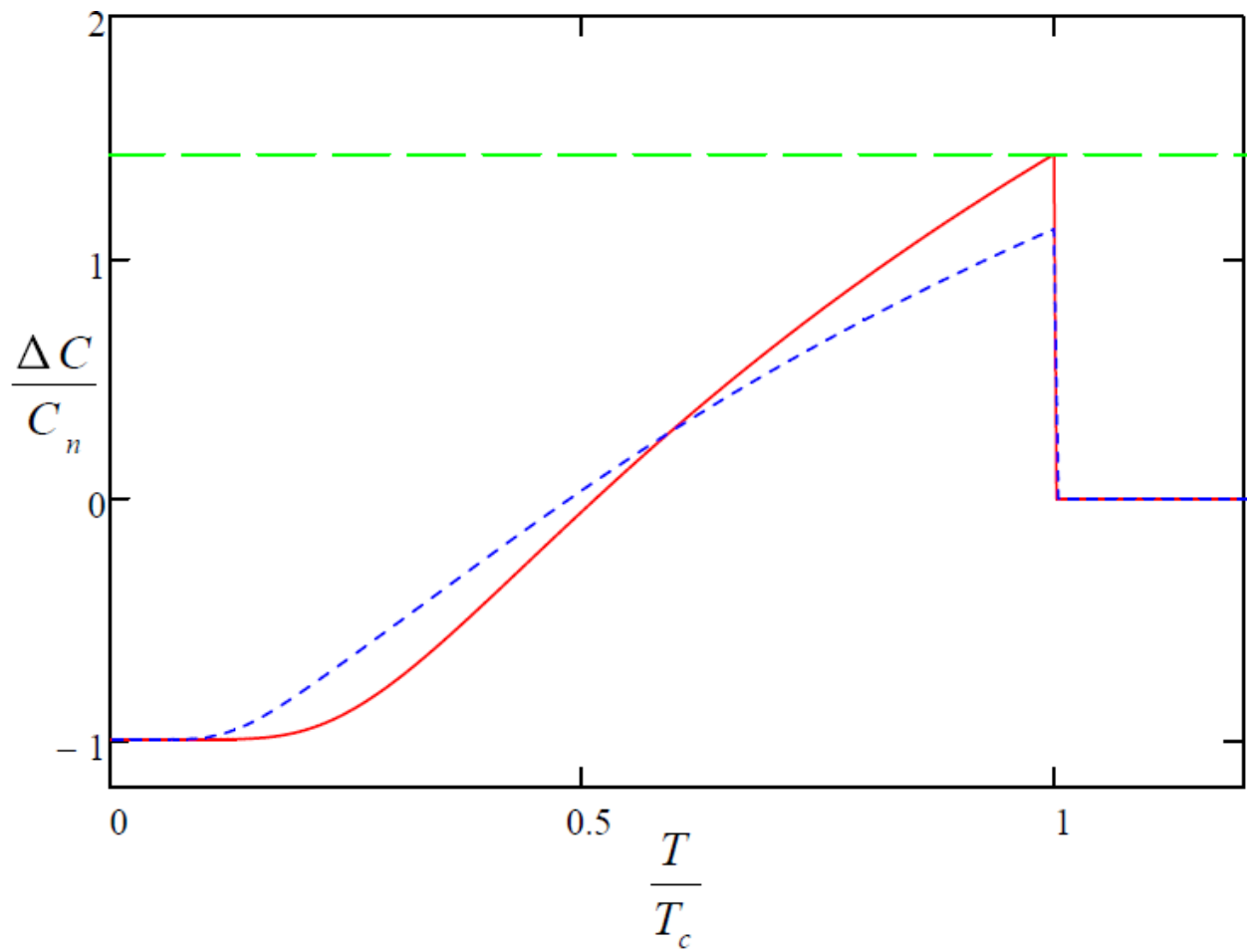
Seoses II liiki faasisiirdega muutub soojusmahtuvus faasisiirdepunktis $T = T_c$ hüppeliselt. Kui meid huvitav elektronsüsteem on normaalolekus ($T > T_c$), siis avaldub süsteemi soojusmahtuvus C_n avaldisest (2.5.15) kui võtame ülijuhtivuspilud võrdseks nulliga $\Delta_{\alpha} = 0$ ($\alpha = 1, 2$). Punktis $T = T_c$ toimuv soojusmahtuvuse hüpe on määratud vahega

$$\Delta C = C(T_c) - C_n(T_c). \quad (4.0.2)$$

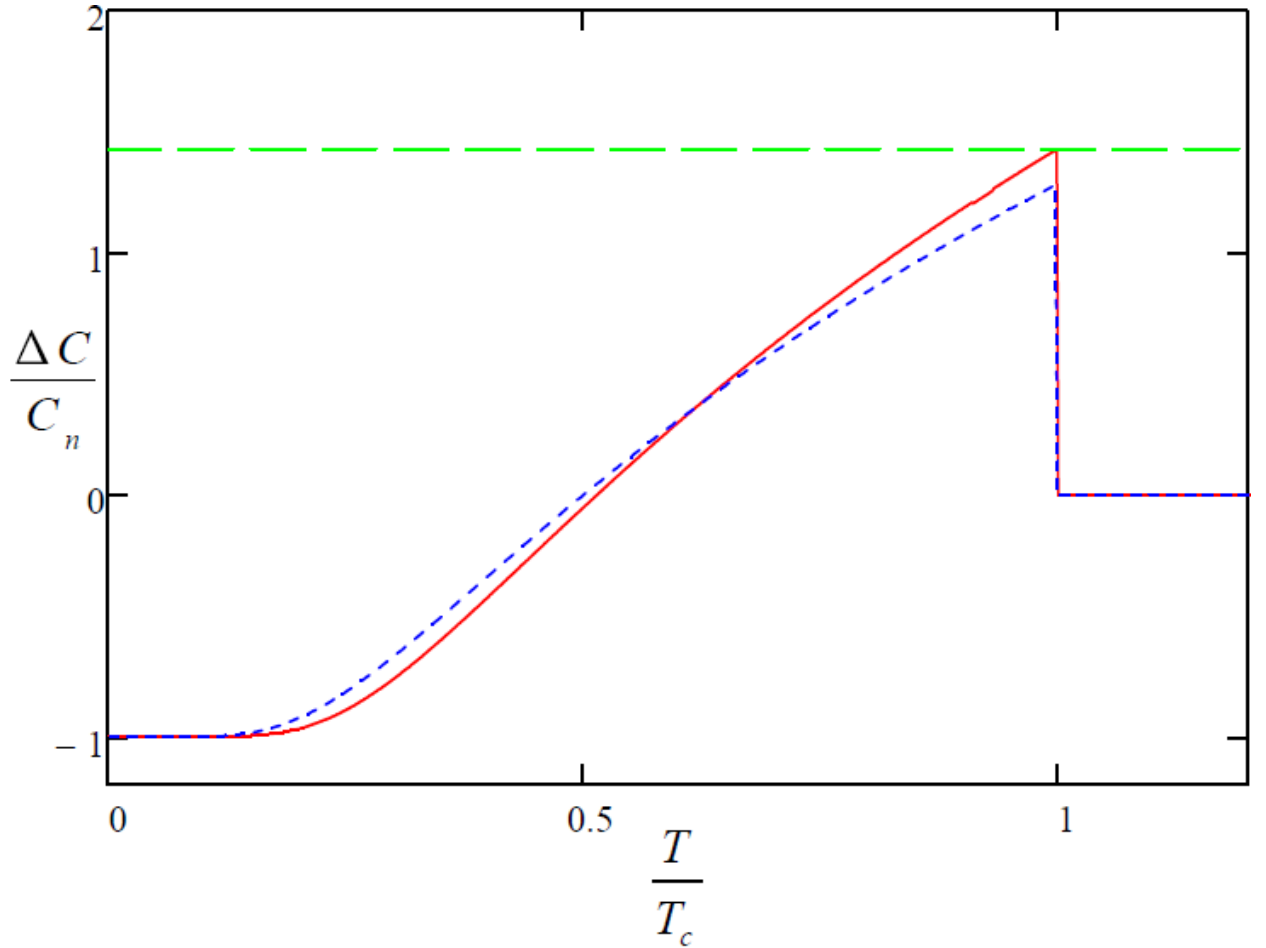
Esitame graafiliselt ΔC sõltuvuse temperatuurist erinevate tsoonidevaheliste interaktsioonikonstantide $|w_{12}|$ korral, mis jäävad mõlemale poole interaktsioonikonstandi väärtust $|w_{12}^v| = 0,049$.



Joonis 8. Suhte $\Delta C/C_n$ sõltuvus taandatud temperatuurist. Parameetrid: $w_{11} = -0,1$; $w_{22} = -0,08$ (pidevjoon); $w_{22} = 0$ (katkendjoon); $|w_{12}| = 0,03$; $r = 1,5$; $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.



Joonis 9. Suhte $\Delta C/C_n$ sõltuvus taandatud temperatuurist. Parameetrid: $w_{11} = -0,1$; $w_{22} = -0,08$ (pidevjoon); $w_{22} = 0$ (katkendjoon); $|w_{12}| = |w_{12}^v| = 0,049$; $r = 1,5$; $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.



Joonis 10. Suhte $\Delta C/C_n$ sõltuvus taandatud temperatuurist. Parameetrid: $w_{11} = -0,1$; $w_{22} = -0,08$ (pidevjoon); $w_{22} = 0$ (katkendjoon); $|w_{12}| = 0,08$; $r = 1,5$; $\hbar\omega_D = 0,1$ eV.

Joonistelt on näha, et soojusmahtuvus tõepoolest kasvab üleminekul ülijuhtivasse olekusse hüppeliselt. Sellegi poolest on erinevate interaktsiooni konstandi $|w_{12}|$ korral märgata mõningasi erisusi. Joonisel 8 on toodud olukord, kus $|w_{12}| < |w_{12}^v|$. Sellisel juhul on näha, et juhul kui $w_{22} = -0,08$, siis suhte $\Delta C/C_n$ väärtus punktis T_c on väiksem kui BCS-teooriast tuntud konstant 1,43 (horisontaaljoon joonistel), mis karakteriseerib ühepilulise

ülijuhi puhul suhet $\Delta C/C_n$ faasisiirdel [7]. Seega on soojusmahtuvusest näha, et tegemist pole ühepilulise ülijuhiga. Mitmepilulisus tuleb esile ka samal joonisel katkendjoonega esitatud olukorras. Katkendjoonega esitatud olukorras $w_{22} = 0$, mistõttu on teise tsooni ülijuhtivus tingitud ainult tsoonidevahelisest interaktsioonist ehk esimese tsooni ülijuhtivus tekitab tsoonidevahelise paariülekanne tõttu ülijuhtivuse ka teises tsoonis. Joonisel 9 on näha, et juhul kui on täidetud tingimused (3.1.5) varjatud kahepilulisuse tekkeks (joonisel pidevjoon), siis tsoonidevahelise interaktsioonikonstandi $|w_{12}^v|$ puhul on suhte $\Delta C/C_n$ väärtuseks 1,43. Seega käitub antud juhul ülijuht ühepilulisele ülijuhile kohaselt ning soojusmahtuvusest pole võimalik tuvastada, kas tegemist on kahepilulise ülijuhiga. Juhul kui $w_{22} = 0$, ei ole täidetud tingimused (3.1.5) ning varjatud kahepilulisust antud parameetrite komplekti korral ei esine. Samuti on joonistelt näha, et konstandi $|w_{12}|$ kasvades kasvab ka ülijuhi soojusmahtuvus.

Kokkuvõte

Käesolev bakalaureusetöö on pühendatud kahetsoonilise ülijuhi varjatud kahepilulisuse uurimisele. BCS-teooriast lähtudes näidatakse, et kindalate ülijuhti kirjeldavate parameetrite korral saavad kahetsoonilises ülijuhisis ülijuhtivuspilud võrdseteks $\Delta_1 = \Delta_2$. Sellisel juhul on ülijuhtivuspilud eksperimentaalselt eristamatud ning tekib nn varjatud kahepilulisus.

Bakalaureusetöös uuritakse kahetsoonilist ülijuhti, mille mõlemas tsoonis esineb elektron-foonon päritoluga elektronide vaheline efektiivne tõmbeinteraktsioon. Samuti on elektron-süsteemis tsoonidevaheline tõmbeinteraktsioon, mille tulemusena toimub tsoonidevaheline elektronpaaride hajumine. Tsoonidevaheline interaktsioon on ülijuhtivust soodustavaks teguriks ning põhjuseks, miks mõlemal tsoonil on sama faasisiirde temperatuur.

Töös antakse ülevaade kahetsoonilise ülijuhi BCS-tüüpi mudeli teooriast ning tuletatakse avaldised kahetsoonilise ülijuhi ülijuhtivuskarakteristikute jaoks. Saadud avaldistest leitakse ülijuhti iseloomustav parameetrite komplekt, mille tulemusel realiseerub töö pealkirjas kirjeldatav olukord. Antud parameetrite komplekti kasutades arvutatakse numbriliselt ülijuhti kirjeldavad karakteristikud ning esitatakse tulemused graafiliselt. Saadud tulemusi analüüsitakse ning võrreldakse kirjaldusest pärinevate katseandmetega.

Summary

The present thesis is devoted to the study of superconductivity with hidden two-gap nature in a two-band system. Using the BCS model of superconductivity it is shown that in the case of certain parameters the superconduction gaps Δ_α ($\alpha = 1, 2$) are equal, $\Delta_1 = \Delta_2$, and experimentally indistinguishable.

Two-band superconductivity has been examined, in the system where the phonon mediated electron-electron intraband interaction in both of the bands and interband interaction are present. Interband interaction has strengthening affect regards to the superconductivity and is the cause for both superconduction bands to have the same phase transition temperature.

A brief insight to the BCS theory has been given and general expressions for the basic superconducting characteristics of a two-gap superconductor have been developed. From these expressions a set of parameters, which allow the situation described in the titel of the thesis to develop, have been found. Using this set of parameters some basic superconductor characteristics have been numerically calculated and graphical representation of these results has been given. The results have then been analized and compared to experimental data found form literature.

Viited

- [1] J. F. Annett. Superconductivity, Superfluids and Condensates. *Oxford University Press*. (New York, 2004)
- [2] Y. Tanaka. Multicomponent superconductivity based on multiband superconductors. *Supercond. Sci. Technol.* **28** (2015) 034002.
- [3] H. Suhl, B. T. Matthias, L. R. Walker. Bardeen-Cooper-Schrieffer Theory of Superconductivity in the Case of Overlapping Bands. *Phys. Rev. Lett.* **3** (1959) 552-554.
- [4] A. Bussmann-Holder, H. Keller. Isotope and multiband effects in layered superconductors. *J. Phys.: Condens Matter* **24** (2012) 233201.
- [5] A. Vargunin, K. Rägo, T. Örd. Two-gap superconductivity: interband interaction in the role of an external field. *Supercond. Sci. Technol.* **26** (2013) 065008.
- [6] K. Rägo. Superconducting properties of MgB_2 in scenario with intra- and interband pairing channels. PhD thesis. *Tartu Ülikooli kirjastus*. (Tartu, 2008).
- [7] M. Tinkham. Introduction to superconductivity. (New York, 2004).
- [8] K. Kristoffel, T. Örd, K. Rägo. MgB_2 two-gap superconductivity with intra- and interband couplings. *Europhys. Lett.* **61** (1) pp. 109-115 (2003).
- [9] K. Rägo. Metastabiilsed seisundid kahetsoonilises ülijuhis. Bakalaureusetöö. (Tartu, 2000).
- [10] V. Z. Kresin, S. A. Wolf. Multigap structure in the cuprates. *Physica C* **169** (1990) 476-484.

- [11] R. S Gonnelli et al. Evidence for single-gap superconductivity in Mg (B_{1-x}C_x)₂ single crystals with $x = 0.132$ from point-contact spectroscopy. *Phys. Rev. B* **71**, 060503(R) (2005).
- [12] D. Daghero, R. S. Gonnelli. Probing multiband superconductivity by point-contact spectroscopy. *Supercond. Sci. Technol.* **23** (2010) 043001.
- [13] A. Bussmann-Holder, A. Bianconi. Raising the diboride superconductor transition temperature using quantum interference effects. *Phys. Rev. B* **67**, 132509 (2003).

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja lõputöö üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, **Markus Must**,

1. annan Tartu Ülikoolile tasuta loa (lihtlitsentsi) enda loodud teose

Varjatud kahepilulisus kahetsoonilises ülijuhtivuses

mille juhendajad on Teet Örd ja Küllike Rägo

- 1.1 reprodutseerimiseks säilitamise ja üldsusele kättesaadavaks tegemise eesmärgil, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace-is lisamise eesmärgil kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni;
- 1.2 üldsusele kättesaadavaks tegemiseks Tartu Ülikooli veebikeskkonna kaudu, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace'i kaudu kuni autoriõiguse kehtivuse tähtaja lõppemiseni.

2. olen teadlik, et punktis 1 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
3. kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei rikuta teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse seadusest tulenevaid õigusi.

Tartus, 31.05.2018