

TARTU ÜLIKOOL

Loodus- ja täppisteaduste valdkond

Füüsika instituut

Taimo Priinits

**INTERAKTSIOONIKANALITE SEGUNEMINE KAHETSOONILISES
ÜLIJUHIS**

Magistritöö (30 EAP)

Füüsika

Juhendajad:

Teet Örd, PhD

Küllike Rägo, PhD

Tartu 2022

Interaktsioonikanalite segunemine kahetsoonilises ülijuhis

Kahetsoonilises ülijuhis panustavad nii tsooniseesmist kui ka tsoonidevahelised interaktsioonikanalid ülijuhtivasse seisundisse. Viies ülijuhtivuspilude võrrandid kanoonilisele kujule, grupeeruvad algsed interaktsioonikonstandid niinimetatud efektiivseteks interaktsioonikonstantideks. Osutub, et kasutades efektiivseid interaktsioonikonstante on võimalik genereerida ülijuhtivates materjalides esinevaid efekte mitmete erinevate algsete interaktsioonikonstantide kombinatsioonidega. Töös lähtuti elektronalamsüsteemi Hamiltoni operaatorist, kus arvestati eraldi tsoonideseesmist ja tsoonidevaheliste tõmbe- ja tõuke interaktsioonidega. Rakendades keskmise välja lähendust Hamiltoni operaatorile, defineeriti ülijuhtivuspilude võrrandid. Saadud funktsioon diagonaliseeriti Bogoljubovi-Valatini teisendusega ning tõuke- ja tõmbe interaktsioonid lähendati vastavalt erinevatele energeetilistele ulatustele Heaviside'i astmefunktsiooniga, saades võrrandisüsteemi ülijuhtivuspilude arvutamiseks. Analüüsiti kanoonilise kuju efektiivsete interaktsioonikonstantide sõltuvusi algsetest interaktsioonikonstantidest, vaadeldi tingimusi nõrga efektiivse tsoonidevahelise interaktsiooni ja pilude kõdumise genereerimiseks.

Märksõnad: kahepiluline ülijuhtivus, interaktsioonide segunemine

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

Mixing of intra- and interband interactions in a two-band superconductor

In a two-band superconductors both intra- and interband interactions contribute to superconducting state. Converting the equations of superconducting gaps to canonical form, the initial interaction constants are grouped into so-called effective interaction constants. It turns out that by using the effective interaction constants, it is possible to generate effects in superconducting materials with several different combinations of initial interaction constants. We used Hamiltonian operator of electronic subsystem, which considered intra- and interband attractive and repulsive interactions explicitly. By applying mean field approximation to the Hamiltonian operator, equations of superconductivity gaps were defined. Mean-field Hamilton operator was diagonalized with Bogoljubov-Valatin transformation, the attractive and repulsive interaction constants were approximated to Heaviside step functions at different energy ranges respectively, obtaining a system of equations which we can use to calculate superconducting gaps. Using the canonical form, the dependences of the effective interaction constants on the initial interaction constants were analyzed, and the conditions for generating weak effective interband interaction and degenerate bands were examined.

Keywords: two-band superconductivity, mixing of interactions

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

Sisukord

Sissejuhatus	4
1 Kuue interaktsioonikanaliga mudel kahetsoonilise ülijuhi jaoks	6
1.1 Hamiltoniaan	6
1.2 Keskmise välja lähendus	8
1.3 Bogoljubovi-Valantini teisendus	9
1.4 Interaktsioonikonstantide lähendused	11
1.5 Võrrandisüsteemi teisendamine	13
2 Efektiivsed interaktsioonikonstandid	14
2.1 Pilude võrrandisüsteemi kanooniline kuju ja efektiivsed interaktsioonikonstandid	14
2.2 Efektiivsete interaktsioonikonstantide analüüs	18
2.2.1 Tuletised	18
2.2.2 Erijuhud	18
2.2.3 Efektiivse interaktsioonikonstandi lõpmatuse läbimise tingimus	19
2.3 Faasisiirde temperatuur	21
2.4 Faaside vahe	23
2.5 Nulltemperatuurne ülijuhtivus	25
2.6 Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist	27
3 Piludevahelise seose nõrgenemine	28
4 Varjatud kahepilulisus	31
4.1 Nulltemperatuurse ülijuhtivuspilu ja faasisiirde temperatuuri suhe	31
4.2 Ülijuhtivuspilude kõdumine	33
Kokkuvõte	35
Viited	40
Lisa 1. Efektiivsete interaktsioonikonstantide tuletiste avaldised	41
Lihtlitsents	43

Sissejuhatus

Fermi pinnal kahe elektrontsoonilise struktuuriga ülijuhtivad materjalid võimaldavad võrreldes ühetsoonilistega palju suurema temperatuuriga faasisiiret ülijuhtivasse seisundisse, ühetsooniline teooria seab teoreetiliseks ülemiseks piiriks umbes 40 K-it [1]. Ülijuhtivas olekusse siirdudes langeb materjali elektriline takistus hüppeliselt nulli lähedale [2], väiksemaks olemasolevate mõõteseadmete tundlikusest, mis on suureks motivatsiooniks antud valdkonna edasi arendamiseks ja ülijuhtivuse, kui nähtuse mõistmiseks, et ülijuhtuvaid materjale oleks võimalik kasutada toatemperatuuril igapäeva elus. Mitmetsoonilises materjalis eksisteerivad nii tsooniseesmisel kui ka tsoonidevahelistel interaktsioonid [3]. Need interaktsioonid kombineeruvad ning genereerivad neile vastava nii-öelda efektiivse interaktsiooni, kusjuures efektiivsetesse tsooniseesmistesse ja tsoonidevahelistesse interaktsioonidesse panustavad mõlemad nii algsed tsooniseesmisel kui ka tsoonidevahelistel interaktsioonid. Oluline on uurida, kuidas genereeritud efektiivsed interaktsioonid mõjutavad ülijuhtivat seisundit, et mõista paremini ülijuhtivuse olemust.

Antud töös kasutatakse ülijuhtivust kirjeldavast ja seletavast mikroskoopilisest BCS teooriast [4] edasi arendatud mitmetsoonilise teooria üldistust. BCS teooria põhineb ideel, et läbi kristallvõre interaktsiooni hakkavad elektronid teatud tingimustel tõmbuma, moodustades Cooper-i paari. Paardunud elektronid hakkavad käituma just kui bosonid, mis lubab neil kondenseeruda Fermi pinnast madalama energiaga olekusse [5].

Mitmetsoonilise struktuuriga materjalide s- ja p-elektronikihtidel asuvate elektronide vahel tekivad nii tõuke- kui ka tõmbeinteraktsioonid. Viimased on genereeritud läbi positiivsete kristallvõre tuumade kulonilisest tõmbeinteraktsioonist elektronidele, mis on teisendatud elektronide vaheliseks efektiivseks tõmbeinteraktsiooniks [6].

Mitte ainult kahe vaid ka üldisemalt mitmekomponendilise elektrontsoonide struktuuriga materjalid on pakkunud suurt huvi eksootilistest uute ülijuhtivate materjalide uurimiseks ja leidmiseks. Üks tuntumaid kahetsoonilisi ülijuhte on MgB_2 [7], kuid mitte vähem tähtsad ei ole kupraatide ühendid [8], V_3Si [9], raud-arsen ühendid [10] ja paljud teised ühendid ning materjalide klassid. Kahetsoonilised materjalid on juba aastakümneid olnud huviorbiidil mitmel Tartu töögruppidel, kus on kasutatud erinevaid mudeleid, millega võiks kirjeldada ülijuhtivust. Otseselt MgB_2 -ga kirjeldamiseks on publitseeritud mitmeid töid, kus on analüüsitud nii üldist nõrga interaktsiooni mudeli kehtivust ja rakendamist antud materjalile [11, 12, 13], kui ka spetsiaalselt tsoonidevahelist elektronide paardumist [14] ja interaktsioone [15]. Lisaks nõrga seose teooriale on rakendatud ka kaheorbitaalset negatiivse U-ga Hubbardi mudelit [16] karaktersete pikkuste modelleerimiseks kahetsoonilistes ülijuhtides.

Magistritöö eesmärgiks on analüüsida mudelit, kus on eraldi arvestatud tsoonideseesmisi ja vahelisi tõmbe- ja tõukeinteraktsioone. Mudelile vastavast hamiltoniaanist tuletatakse ülijuh-

tivus pilude arvutamiseks võrrandid ning analüüsitakse võrranditesse tekkinud niinimetatud efektiivsete interaktsioonikonstantide sõltuvust algsetest tõmbe- ja tõukeinteraktsioonikonstantidest. Vaatleme ülijuhtivat süsteemi kirjeldavate parameetrite sõltuvust efektiivsetest interaktsioonikonstantidest ning leiame tingimused, mille korral tekivad antud süsteemile vastavad isearalikud olukorrad.

Antud magistritöö on bakalaureusetöös [17] edasiarendus. Lisaks tsoonidevahelisele tõukinteraktsioonile on võetud arvesse ka tsoonideseesmise tõukeinteraktsioone. Sisse on toodud interaktsioonikanalite segunemise kontseptsioon, mis võiks katseandmete interpreteerimisel olla oluliseks lähtekohaks ning mis on muuhulgas aktuaalne ülijuhtivuspilude vahelise seose nõrgenemise mõistmisel tsooniseesmist tõukeinteraktsioonide arvestamise korral. Vaatluse alla on võetud veel ülijuhtivuspilude kõdumise nähtus, kus ilmutab ennast sammuti teatud liiki interaktsioonikanalite segunemine.

1 Kuue interaktsioonikanaliga mudel kahetsoonilise ülijuhi jaoks

1.1 Hamiltoniaan

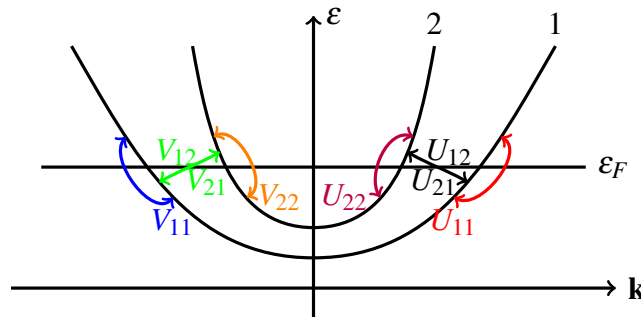
Kirjeldagu kahetsoonilise ülijuhi elektronalamsüsteemi järgnev Hamiltoni operaator:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) a_{\alpha\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{\alpha\mathbf{k}s} + \\ & + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [V_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + U_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\alpha\mathbf{k}'\uparrow} + \\ & + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [V_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{\alpha'-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\alpha'\mathbf{k}'\uparrow},\end{aligned}\quad (1.1)$$

kus:

1. $a^{\dagger}$ ja a on ülijuhitivus elektroni tekke ja kadumise operaatorid;
2. $\alpha = 1, 2$ on tsooni indeks;
3. $\mathbf{k}$ on elektroni lainevektor;
4. $s = \uparrow, \downarrow$ on spinni indeks;
5. $\tilde{\varepsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{k}) - \mu$ on elektroni energia tsoonis α , μ on keemiline potentsiaal;
6. $V_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ on tsooniseesmise ($\alpha = \alpha'$) või tsoonidevahelise ($\alpha \neq \alpha'$) efektiivse tõmbeinteraktsioonikonstant;
7. $U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ on tsooniseesmise ($\alpha = \alpha'$) või tsoonidevahelise ($\alpha \neq \alpha'$) tõukeinteraktsioonikonstant.

Hamiltoni operaator (1.1) on kirja pandud kujul, kus võetakse arvesse nii tsooniseesmise kui ka tsoonidevahelisi tõuke- ja tõmbeinteraktsioone.



Joonis 1.1: Elektrontsoonide struktuur ja interaktsioonid.

Joonisel 1.1 on nooltega sümbolsest kujutatud kõige tõenäolisemaid paarisülekande protsesse, mis panustavad vastavatesse interaktsioonikanalitesse. Fermi energia lähedal on kaks elektrontsoon, esimene ja teine tsoon on täistatud vastavalt numbritega "1" ja "2". Nooled, mis algavad ja lõpevad samas tsoonis kujutavad tsooniseesmise interaktsioone, kus elektronid kaovad mingist elektrontsoonist ja tekivad tagasi samasse tsooni, vahendades sellega tsooniseesmise tõmbe- ja tõukeinteraktsioone. Hamiltoni operaatoris (1.1) tähistatakse sellist interaktsiooni liikmega, mille interaktsioonikonstandi indeksid ning elektronpaari tekke- ja kadumise operaatorite indeksid on tähistatud sama numbriga – "11" või "22". Nooled, mis algavad ühes elektrontsoonis ja lõpevad teises, kujutavad tsoonidevahelisi interaktsioone, kus elektronid kaovad mingist elektrontsoonist ja tekivad teises tsoonis, vahendades sellega tsoonidevahelisi interaktsioone. Hamiltoni operaatoris tähistatakse sellist interaktsiooni liikmega, mille interaktsioonikonstandi indeksid ning elektronpaari tekke- ja kadumise operaatorite indeksid on tähistatud erineva numbriga – "12" või "21". Joonisel 1.2 kujutatud interaktsioonide piirkonnad näitavad joonisel 1.1 olevate interaktsioonikanalite energeetilist ulatust mõlemale poole Fermi energiat.

1.2 Keskmise välja lähendus

Asendame hamiltoniaanis (1.1) oleva elektron-elektron interaktsiooni elektronpaarile mõjuva keskmise väljaga [18]. Selleks teeme järgmise asenduse:

$$a^\dagger a^\dagger aa \rightarrow \langle a^\dagger a^\dagger \rangle aa + a^\dagger a^\dagger \langle aa \rangle - \langle a^\dagger a^\dagger \rangle \langle aa \rangle. \quad (1.2)$$

Elektron-elektron vastastikmõju tulemusena tekivad ülijuhtivuselektronide jaoks nullist erineva keskväärtusega tekke- ja kadumiseoperaatorite paarid, antud keskväärtused grupperitakse kokku ülijuhtivuspilu definitsiooniks, saadud pilu võrrandid kirjeldavad ülijuhtivat seisundit ning faasisiirde punkti.

Keskmise välja lähenduses saab Hamiltoni operaator kuju

$$\begin{aligned} \hat{H}_{mf} = & \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s \tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) a_{\alpha\mathbf{k}s}^{\dagger} a_{\alpha\mathbf{k}s} + \\ & + \sum_{\alpha} \left\{ \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \sum_{\mathbf{k}'} \Delta_{\alpha\mathbf{k}'}^* a_{\alpha-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\alpha\mathbf{k}'\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \langle a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

kus oleme defineerinud ülijuhtivuspilud

$$\begin{aligned} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \equiv & \sum_{\mathbf{k}'} \left\{ [V_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + U_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \langle a_{\alpha-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\alpha\mathbf{k}'\uparrow} \rangle + \right. \\ & \left. + [V_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + U_{\alpha\alpha'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \langle a_{\alpha'-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\alpha'\mathbf{k}'\uparrow} \rangle \right\}, \\ \Delta_{\alpha\mathbf{k}'}^* \equiv & \sum_{\mathbf{k}} \left\{ [V_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + U_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \langle a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle + \right. \\ & \left. + [V_{\alpha'\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + U_{\alpha'\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \langle a_{\alpha'\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha'-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (1.4)$$

kus $\alpha = 1, 2$ ja $\alpha \neq \alpha'$.

Valemites (1.3) ja (1.4) keskmistatakse üle elektronalamsüsteemi Hamiltoni operaatorile vastava kanoonilise ansambli,

$$\langle \dots \rangle_{\hat{H}_{mf}} = Z^{-1} Sp \left[\dots \exp \left(-\frac{\hat{H}_{mf}}{k_B T} \right) \right], \quad (1.5)$$

kus

$$Z = Sp \left[\exp \left(-\frac{\hat{H}_{mf}}{k_B T} \right) \right]. \quad (1.6)$$

1.3 Bogoljubovi-Valantini teisendus

Selleks, et hamiltoniaani diagonaliseerida, kasutame Bogoljubovi-Valatini (BV) teisendusega defineeritud operaatoreid [19]:

$$\begin{cases} a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} = u_{\alpha\mathbf{k}}\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} + v_{\alpha\mathbf{k}}^*\alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} = u_{\alpha\mathbf{k}}\alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} - v_{\alpha\mathbf{k}}^*\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^\dagger. \end{cases} \quad (1.7)$$

Teisenduse kordajad peavad rahuldama tingimusi

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1, \quad u_{-\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}, \quad v_{-\mathbf{k}} = -v_{\mathbf{k}}. \quad (1.8)$$

Arvestame, et fermionid peavad rahuldama kommutatsiooni reegleid

$$[\alpha_{\mathbf{k}s}, \alpha_{\mathbf{k}'s'}^\dagger]_+ = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{ss'}, \quad [\alpha_{\mathbf{k}s}, \alpha_{\mathbf{k}'s'}]_+ = 0, \quad [\alpha_{\mathbf{k}s}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}'s'}^\dagger]_+ = 0, \quad (1.9)$$

kus $[A, B]_+$ on operaatorite A ja B antikommutaator.

Peale operaatorite asendust ja gruppeerimist saame Hamiltoni operaatori

$$\hat{H}_{mf} = \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \begin{aligned} &2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})|v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}v_{\alpha\mathbf{k}}u_{\alpha\mathbf{k}}^* + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*u_{\alpha\mathbf{k}}v_{\alpha\mathbf{k}}^* - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}\langle a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \rangle + \\ &+ [\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})(|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 - |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2) - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}v_{\alpha\mathbf{k}}u_{\alpha\mathbf{k}}^* - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*u_{\alpha\mathbf{k}}v_{\alpha\mathbf{k}}^*] \times \\ &\quad \times (\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} + \alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}) + \\ &+ (2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})u_{\alpha\mathbf{k}}^*v_{\alpha\mathbf{k}} + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}(u_{\alpha\mathbf{k}}^*)^2 - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*(v_{\alpha\mathbf{k}}^*)^2)\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^\dagger\alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \\ &+ (2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})v_{\alpha\mathbf{k}}u_{\alpha\mathbf{k}} - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}(v_{\alpha\mathbf{k}})^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*(u_{\alpha\mathbf{k}})^2)\alpha_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}\alpha_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} \end{aligned} \right\}. \quad (1.10)$$

Selleks, et hamiltoniaan oleks diagonaliseeritud nõuame, et operaatorite $\alpha\alpha$ ja $\alpha^\dagger\alpha^\dagger$ kordajad oleksid võrdsed nulliga

$$\begin{aligned} 2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})v_{\alpha\mathbf{k}}u_{\alpha\mathbf{k}} - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}(v_{\alpha\mathbf{k}})^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*(u_{\alpha\mathbf{k}})^2 &= 0, \\ 2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})u_{\alpha\mathbf{k}}^*v_{\alpha\mathbf{k}} + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}(u_{\alpha\mathbf{k}}^*)^2 - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*(v_{\alpha\mathbf{k}}^*)^2 &= 0. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Kokku saame keskmise välja lähenduses diagonaliseeritud Hamiltoni operaatori

$$H_{mf} = E_0 + \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \sum_s E_{\alpha}(\mathbf{k})\alpha_{\alpha\mathbf{k}s}^\dagger\alpha_{\alpha\mathbf{k}s}, \quad (1.12)$$

kus oleme defineerinud põhiseisundi- ja ergastusenergia

$$E_0 \equiv \sum_{\alpha} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ 2\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 + \Delta_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* + \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} - \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \langle a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \rangle \right\}, \quad (1.13)$$

$$E_{\alpha}(\mathbf{k}) \equiv \tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k}) \left(|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 - |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \right) - \Delta_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* - \Delta_{\alpha\mathbf{k}}^* u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}.$$

Seostest (1.11) ja tingimustest (1.8) saame avaldada BV teisenduse kordajad (1.14) sõltuvana põhiseisundienergiast, ergastusenergiast ja ülijuhtivuspilust

$$|u_{\alpha\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})}{E_{\alpha}(\mathbf{k})} \right), \quad |v_{\alpha\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\epsilon}_{\alpha}(\mathbf{k})}{E_{\alpha}(\mathbf{k})} \right), \quad (1.14)$$

$$v_{\alpha\mathbf{k}} u_{\alpha\mathbf{k}}^* = -\frac{\Delta_{\alpha\mathbf{k}}^*}{2E_{\alpha}(\mathbf{k})}, \quad u_{\alpha\mathbf{k}} v_{\alpha\mathbf{k}}^* = -\frac{\Delta_{\alpha\mathbf{k}}}{2E_{\alpha}(\mathbf{k})}.$$

Tehes BV teisenduse operaatorite keskväärtusele ning kasutades kommutatsioonireegleid (1.9) ja BV kordajate sõltuvusi (1.14) saame tulemuseks seose

$$\langle a_{\alpha\mathbf{k}\uparrow} a_{\alpha-\mathbf{k}\downarrow} \rangle = \frac{1}{2} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \xi_{\alpha\mathbf{k}}, \quad (1.15)$$

kus

$$\xi_{\alpha\mathbf{k}} = E_{\alpha}^{-1}(\mathbf{k}) \tanh \frac{E_{\alpha}(\mathbf{k})}{2k_B T}. \quad (1.16)$$

Asendades seostesse (1.13) saadud keskväärtused (1.15) ja BV kordajad (1.14) saab arvutada põhiseisundi ja ergastuse energia:

$$E_0 = \sum_{\alpha\mathbf{k}} \tilde{\epsilon}_{\alpha\mathbf{k}} - E_{\alpha}(\mathbf{k}) + \frac{1}{2} |\Delta_{\alpha\mathbf{k}}|^2 \xi_{\alpha\mathbf{k}}, \quad (1.17)$$

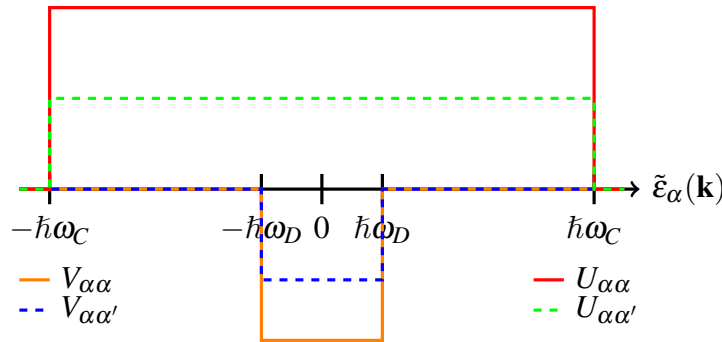
$$E_{\alpha}(\mathbf{k}) = \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\alpha\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\alpha\mathbf{k}}|^2}.$$

1.4 Interaktsioonikonstantide lähendused

Lähendame interaktsioonikonstandid neile vastavatele energetilistes piirkondades Heaviside'i funktsioonile

$$\begin{aligned}
 V_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= V_{\alpha\alpha} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k}')|), \\
 U_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= U_{\alpha\alpha} \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k}')|), \\
 V_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= V_{12} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k}')|), \\
 V_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= V_{21} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k}')|), \\
 U_{12}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= U_{12} \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k}')|), \\
 U_{21}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') &= U_{21} \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_2(\mathbf{k})|) \Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_1(\mathbf{k}')|),
 \end{aligned} \tag{1.18}$$

kus $\hbar\omega_C \geq \hbar\omega_D$, $V_{\alpha\alpha} < 0$, $V_{12} = V_{21} < 0$, $U_{\alpha\alpha} > 0$ ja $U_{12} = U_{21} > 0$.



Joonis 1.2: Interaktsioonikonstantide lähendusi illustreeriv joonis.

Joonisel 1.2 on illustreeritud interaktsioonipiirkondi (1.18), kusjuures on arvestatud interaktsiooni märki ning interaktsiooni ulatust Fermi energia suhtes. On tekkinud kaks piirkonda ülijuhtivuspilude jaoks, kitsam kiht kristallvõre poolt indutseeritud tõmbeinteraktsiooni ja kuloni-lise tõukeinteraktsiooni ning laiem kiht ainult kuloni-lise tõukeinteraktsiooni jaoks, kus pilu on tähistatud $\tilde{\Delta}$ -ga [20]:

$$\Delta_{\alpha\mathbf{k}} = \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) + \tilde{\Delta}_{\alpha\mathbf{k}} [\Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) - \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|)]. \tag{1.19}$$

Analoogselt piludele eraldame ka operaatorite keskväärtuse avaldises (1.15) energetilised piirkonnad, tähistades kitsama energetilise kihi keskväärtuse sümboliga ζ ja laiema oma $\tilde{\zeta}$ -ga

$$\begin{aligned}
 \zeta_{\alpha\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} \Delta_{\alpha\mathbf{k}} \xi_{\alpha\mathbf{k}} \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|), \\
 \tilde{\zeta}_{\alpha\mathbf{k}} &= \frac{1}{2} \tilde{\Delta}_{\alpha\mathbf{k}} \tilde{\xi}_{\alpha\mathbf{k}} [\Theta(\hbar\omega_C - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|) - \Theta(\hbar\omega_D - |\tilde{\epsilon}_\alpha(\mathbf{k})|)].
 \end{aligned} \tag{1.20}$$

Pilu võrrandites (1.4) lähme summeerimiselt üle lainevektori integreerimisele üle ergastusenergia, kasutades valemit

$$\sum_{\mathbf{x}} f(y(\mathbf{x})) = \int f(y) \rho(y) dy, \quad (1.21)$$

kus ρ on olekute tihedus.

Valemitest (1.20) saame vastavalt

$$\begin{aligned} \zeta_{\alpha}(T, \Delta_{\alpha}) &= \rho_{\alpha} \underbrace{\int_0^{\hbar\omega_D} E^{-1}(\Delta_{\alpha}) \tanh\left(\frac{E(\Delta_{\alpha})}{2k_B T}\right) d\tilde{\epsilon}_{\alpha}}_{\equiv \eta_{\alpha}(T, \Delta_{\alpha})}, \\ \tilde{\zeta}_{\alpha}(T, \tilde{\Delta}_{\alpha}) &= \rho_{\alpha} \underbrace{\int_{\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_C} E^{-1}(\tilde{\Delta}_{\alpha}) \tanh\left(\frac{E(\tilde{\Delta}_{\alpha})}{2k_B T}\right) d\tilde{\epsilon}_{\alpha}}_{\equiv \tilde{\eta}_{\alpha}(T, \tilde{\Delta}_{\alpha})} \equiv \tilde{\eta}_{\alpha}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

kus oleme tähistanud ergastusenergiad järgmiselt:

$$E(\Delta_{\alpha}) \equiv \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\alpha}^2 + |\Delta_{\alpha}|^2}, \quad E(\tilde{\Delta}_{\alpha}) \equiv \sqrt{\tilde{\epsilon}_{\alpha}^2 + |\tilde{\Delta}_{\alpha}|^2}. \quad (1.23)$$

Integraalides (1.22) muutsime integreerimisrajasid vastavalt $\int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \rightarrow 2 \int_0^{\hbar\omega_D}$ ja $\int_{-\hbar\omega_C}^{-\hbar\omega_D} + \int_{\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_C} \rightarrow 2 \int_{\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_C}$, millest tulenevalt kadus keskväärtuse avaldisest ära kordaja 1/2. Lisaks on eeldatud, et olekute tihedus on integreerimisvahemikus konstantne:

1. Debye kiht on piisavalt kitsas, et olekute tihedus ei jõua selles piirkonnas palju muutuda;
2. kulonilises kihis on olekute tihedus lähendatud mingile teatud keskväärtusele.

1.5 Võrrandisüsteemi teisendamine

Arvestades interaktsioonikonstantide (1.18) ja pilude (1.19) lähendustega ning definitsioonidega (1.22) saame ülijuhtivuspilude (1.4) jaoks kirja panna võrrandisüsteemi

$$\begin{cases} \Delta_\alpha = -V_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\eta_\alpha\Delta_\alpha - U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\eta_\alpha\Delta_\alpha - U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\tilde{\eta}_\alpha\tilde{\Delta}_\alpha - \\ -V_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'}\Delta_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'}\Delta_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\tilde{\eta}_{\alpha'}\tilde{\Delta}_{\alpha'} \\ \tilde{\Delta}_\alpha = -U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\tilde{\eta}_\alpha\tilde{\Delta}_\alpha - U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\eta_\alpha\Delta_\alpha - U_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\tilde{\eta}_{\alpha'}\tilde{\Delta}_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'}\Delta_{\alpha'}, \end{cases} \quad (1.24)$$

$$\alpha = 1, 2, \alpha \neq \alpha'.$$

Integraali $\tilde{\eta}_\alpha$ definitsioonis (1.22) on võimalik ligikaudu integreerida, kui arvestada, et $k_B T_c, |\Delta_\alpha| \ll \hbar\omega_D$

$$\tilde{\eta}_\alpha(T, \tilde{\Delta}_\alpha) = \int_{\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_C} E^{-1}(\tilde{\Delta}_\alpha) \tanh\left(\frac{E(\tilde{\Delta}_\alpha)}{2k_B T}\right) d\tilde{\epsilon}_\alpha \stackrel{k_B T_c, |\Delta_\alpha| \ll \hbar\omega_D}{\approx} \ln\left(\frac{\hbar\omega_C}{\hbar\omega_D}\right) \equiv \tilde{\eta}. \quad (1.25)$$

Peale $\tilde{\eta}$ ligikaudset integreerimist ei sisalda see enam $\tilde{\Delta}$ -t, seega on võimalik nüüd võrrandisüsteemist (1.24) eemaldada $\tilde{\Delta}_\alpha$, saades valemi

$$\begin{aligned} \Delta_\alpha &= \Delta_\alpha \left(\begin{array}{c} -V_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\eta_\alpha - U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\eta_\alpha - U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\tilde{\eta} - \\ -U_{\alpha\alpha}V_{\alpha\alpha}\rho_\alpha\tilde{\eta}\rho_\alpha\eta_\alpha - U_{\alpha\alpha'}V_{\alpha'\alpha}\rho_{\alpha'}\tilde{\eta}\rho_\alpha\eta_\alpha \end{array} \right) + \\ &+ \Delta_{\alpha'} \left(\begin{array}{c} -V_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha'}\rho_{\alpha'}\tilde{\eta} - \\ -U_{\alpha\alpha}V_{\alpha\alpha'}\rho_\alpha\tilde{\eta}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'} - U_{\alpha\alpha'}V_{\alpha'\alpha'}\rho_{\alpha'}\tilde{\eta}\rho_{\alpha'}\eta_{\alpha'} \end{array} \right), \end{aligned} \quad (1.26)$$

$$\alpha = 1, 2, \alpha \neq \alpha'.$$

2 Efektiivsed interaktsioonikonstandid

2.1 Pilude võrrandisüsteemi kanooniline kuju ja efektiivsed interaktsioonikonstandid

Võttes kasutusele dimensionoonitud interaktsioonikonstandid saame võrrandisüsteemi (1.26) teisendada kujule

$$\begin{aligned}\Delta_\alpha = \Delta_\alpha(-v_{\alpha\alpha}\eta_\alpha - \mu_{\alpha\alpha}\eta_\alpha - \mu_{\alpha\alpha}\tilde{\eta} - \mu_{\alpha\alpha}v_{\alpha\alpha}\tilde{\eta}\eta_\alpha - \mu_{\alpha\alpha'}v_{\alpha'\alpha}\tilde{\eta}\eta_\alpha) + \\ + \Delta_{\alpha'}\left(\begin{aligned} -\mu_{\alpha\alpha}v_{\alpha\alpha'}\tilde{\eta}P_\alpha\eta_{\alpha'} - v_{\alpha\alpha'}P_\alpha\eta_{\alpha'} - \mu_{\alpha\alpha'}P_\alpha\eta_{\alpha'} - \\ -\mu_{\alpha\alpha'}P_\alpha\tilde{\eta} - \mu_{\alpha\alpha'}v_{\alpha'\alpha'}\tilde{\eta}P_\alpha\eta_{\alpha'} \end{aligned}\right), \quad (2.1) \\ \alpha = 1, 2, \alpha \neq \alpha'\end{aligned}$$

kus

$$\begin{aligned}P_\alpha &\equiv \sqrt{\frac{\rho_{\alpha'}}{\rho_\alpha}}, P \equiv \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}, \\ v_{\alpha\alpha} &\equiv V_{\alpha\alpha}\rho_\alpha, \\ \mu_{\alpha\alpha} &\equiv U_{\alpha\alpha}\rho_\alpha, \\ v_{\alpha\alpha'} &\equiv V_{\alpha\alpha'}\sqrt{\rho_\alpha\rho_{\alpha'}}, \\ \mu_{\alpha\alpha'} &\equiv U_{\alpha\alpha'}\sqrt{\rho_\alpha\rho_{\alpha'}}.\end{aligned} \quad (2.2)$$

Arvestades, et $\mu_{\alpha\alpha'} = \mu_{\alpha'\alpha} = \mu_{12}$ ja $v_{\alpha\alpha'} = v_{\alpha'\alpha} = v_{12}$ teisendub võrrandisüsteemi (2.1) kujule

$$\begin{aligned}\Delta_\alpha = \Delta_\alpha[(-v_{\alpha\alpha} - \mu_{\alpha\alpha} - \mu_{\alpha\alpha}v_{\alpha\alpha}\tilde{\eta} - \mu_{12}v_{12}\tilde{\eta})\eta_\alpha - \mu_{\alpha\alpha}\tilde{\eta}] + \\ + \Delta_{\alpha'}[(-v_{12} - \mu_{12} - \mu_{\alpha\alpha}v_{12}\tilde{\eta} - \mu_{12}v_{\alpha'\alpha'}\tilde{\eta})\eta_{\alpha'} - \mu_{12}\tilde{\eta}]P_\alpha, \quad (2.3) \\ \alpha = 1, 2, \alpha \neq \alpha'.$$

Kirjutades valemi (2.3) indeksid lahti, saame võrrandisüsteemi

$$\begin{cases} \Delta_1 = \Delta_1\Xi_{11}\eta_1 + \Delta_2\Xi_{12}\eta_2P + \Delta_2\chi_{11}P \\ \Delta_2 = \Delta_2\Xi_{22}\eta_2 + \Delta_1\Xi_{21}\eta_1P^{-1} + \Delta_1\chi_{22}P^{-1}, \end{cases} \quad (2.4)$$

kus oleme tähistanud

$$\begin{aligned}\Xi_{\alpha\alpha} &\equiv \frac{-v_{\alpha\alpha} - \mu_{\alpha\alpha} - \mu_{\alpha\alpha} v_{\alpha\alpha} \tilde{\eta} - \mu_{12} v_{12} \tilde{\eta}}{1 + \mu_{\alpha\alpha} \tilde{\eta}}, \\ \Xi_{\alpha\alpha'} &\equiv \frac{-v_{12} - \mu_{12} - \mu_{\alpha\alpha} v_{12} \tilde{\eta} - \mu_{12} v_{\alpha'\alpha'} \tilde{\eta}}{1 + \mu_{\alpha\alpha} \tilde{\eta}}, \\ \chi_{\alpha\alpha} &\equiv \frac{-\mu_{12} \tilde{\eta}}{1 + \mu_{\alpha\alpha} \tilde{\eta}}.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Kontsentreerime tähelepanu nüüd selle, kuidas panustavad hamiltoniaanis (1.1) sissetoodud interaktsioonikanalid (st algsed interaktsioonikanalid) ülijuhtivuspilude formeerimisse Fermi pinnal. Leiab aset spetsiifiline interaktsioonikonstantide segunemine, mille selgemaks eksponeerimiseks teisendame võrrandisüsteemi (2.4) veel edasi. Nimelt viime võrrandisüsteemi (2.4) niisugusele kujule, mis vastab lihtsamale Shul, Mathias, Walker-i [6] mudelile, kus mõlemad interaktsioonid asuvad samas energetilises kihis, tõmbe- ja tõukeinteraktsioon on kohe algselt kokku võetud ning ei toimu interaktsioonide segunemist. Me nimetame seda kuju kanooniliseks.

Peale vajalike teisendusi saab võrrandisüsteem (2.4) kuju

$$\begin{cases} \Delta_1 = \Delta_1 \Gamma_{11} \eta_1 + \Delta_2 \Gamma_{12} \eta_2 \\ \Delta_2 = \Delta_1 \Gamma_{21} \eta_1 + \Delta_2 \Gamma_{22} \eta_2, \end{cases}\tag{2.6}$$

kus oleme defineerinud efektiivsed tsooniseesmis- ja tsoonidevahelised interaktsioonikonstandid

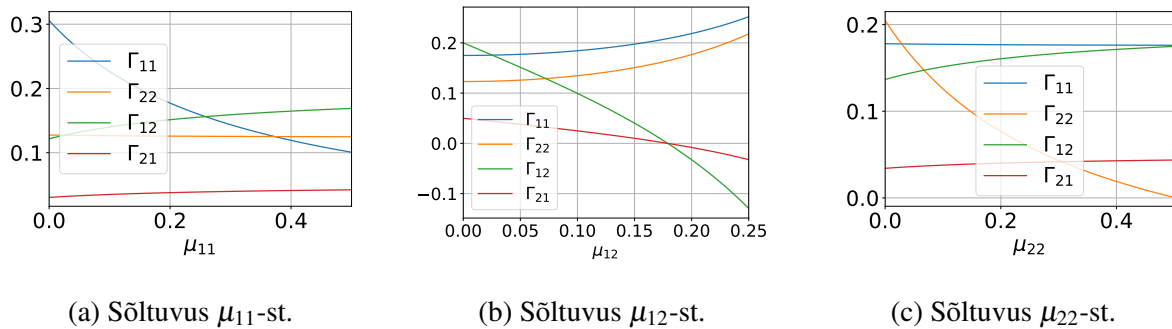
$$\begin{aligned}\Gamma_{11} &\equiv \frac{\Xi_{11} + \Xi_{21} \chi_{11}}{1 - \chi_{22} \chi_{11}} \equiv \frac{\Theta_{11}}{\Phi} = \\ &= -v_{11} - \frac{\mu_{11}}{\tilde{\eta} \mu_{11} + 1} + \frac{\tilde{\eta} \mu_{12}^2}{[(\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2](\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)}, \\ \Gamma_{22} &\equiv \frac{\Xi_{22} + \Xi_{12} \chi_{22}}{1 - \chi_{11} \chi_{22}} \equiv \frac{\Theta_{22}}{\Phi} = \\ &= -v_{22} - \frac{\mu_{22}}{\tilde{\eta} \mu_{22} + 1} + \frac{\tilde{\eta} \mu_{12}^2}{[(\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2](\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)}, \\ \Gamma_{12} &\equiv \frac{\Xi_{12} + \Xi_{22} \chi_{11}}{1 - \chi_{22} \chi_{11}} P \equiv \frac{\Theta_{12} P}{\Phi} = -v_{12} P - \frac{\mu_{12}}{(\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2} P, \\ \Gamma_{21} &\equiv \frac{\Xi_{21} + \Xi_{11} \chi_{22}}{1 - \chi_{11} \chi_{22}} P^{-1} \equiv \frac{\Theta_{21}}{\Phi P} = -v_{12} P^{-1} - \frac{\mu_{12}}{(\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2} P^{-1}.\end{aligned}\tag{2.7}$$

Siit on selgelt jälgitav interaktsioonikanalite segunemine. Definitsioonidest (2.7) on näha, et peale valemite lihtsustamist eralduvad valemitest algsed tõmbe- ja tõukeinteraktsioonid, kusjuures algne tõmbeinteraktsioon ei segune teiste efektiivsete interaktsioonikonstantidega, st. v_{11}

on ainult Γ_{11} -s jne. Küll aga iga efektiivne interaktsioonikonstant sisaldab alati kõiki kolme algset tõukeinteraktsioonikonstanti.

Lisaks on näha, et interaktsioonikonstantide energeetiliste ulatuste suhte logaritmi (1.25) mõju tab saadud definitsioone, võttes $\tilde{\eta}$ nulliks jääb alles ainult summa algsetest interaktsioonikonstantidest ning kaob ära algsete interaktsioonikanalite segunemine. Mida suurem on $\tilde{\eta}$ väärtus, seda suuremat mõju avaldab segunemise efekt.

Efektiivsete tsooniseesmist interaktsioonikonstantide Γ_{11} -e ja Γ_{22} -e üldkuju on sarnane, selleks et saada esimesest teine on vaja algsete tsooniseesmist indeksid lihtsalt ära vahetada. Efektiivsed tsoonidevahelised interaktsioonikonstandid Γ_{12} ja Γ_{21} erinevad üksteisest ainult P asetendaja poolest.



Joonis 2.1: Efektiivsete interaktsioonikonstantide (2.7) sõltuvus tõukeinteraktsioonikonstantidest. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonisel 2.1 on arvutatud efektiivsete interaktsioonikonstantide sõltuvust algsetest tõukeinteraktsioonikonstantidest, kuna tõmbeinteraktsioonidest sõltuvus on lineaarne, siis ei ole neid eraldi välja toodud. Ühel konkreetsel joonisel on muudetud ühte algset interaktsioonikonstanti ning arvutatud kõigi nelja efektiivse interaktsioonikonstandi sõltuvust sellest ühest interaktsioonikonstandist, jättes ülejäänud interaktsioonikonstandid konstantseks väärtustega, mis on näidatud joonise selgituses.

Kõigil kolmel pildil on näha, et kõige suuremat mõju avaldab efektiivsele interaktsioonikonstandile selle sama interaktsiooni kanali algne interaktsioonikonstant ehk Γ_{11} -l on kõige suurema tõusuga kõver (absoluutväärtuse poolest) μ_{11} muutmisega. Mõneti on see ka loomulik.

Keskmisel joonisel 2.1b on näha, et efektiivne tsoonidevaheline interaktsioon muudab märki, punktis kus efektiivne tsoonidevaheline interaktsioon on null toimub süsteemis kaks autonoomset faasisiiret, seda juhtu on täpsemalt vaadeldud peatükis 3. Mõlemad nii positiivse kui ka negatiivse märgiga efektiivne tsoonidevaheline interaktsioon tagab ülijuhtiva seisundi [21], kuid need kaks olukorda omavad erineva struktuuriga korrastust [22].

Interaktsioonikonstantide väärtus on võimalik muuta varieerides ülijuhtivale materjalise lisatud dopingi kontsentratsiooni [23, 24, 25] või kristallvõre võrekonstandi suurust [26].

Kokkuvõtteks, efektiivne tsooniseesmine interaktsioon sõltub interaktsioonikanalite segunemise tulemusena ka algsest teise tsooni seesmisest tõukeinteraktsioonist ja algsest tsoonidevahelisest tõukeinteraktsioonist. Efektiivne tsoonidevaheline interaktsioon sõltub aga ka tsooniseesmistest tõukeinteraktsioonidest.

2.2 Efektiivsete interaktsioonikonstantide analüüs

2.2.1 Tuletised

Tabelis 2.1 on ridadeks efektiivsed interaktsioonikonstandid ning veergudeks on algsed interaktsioonikonstandid, mille järgi on antud efektiivsest interaktsioonikonstandist tuletis võetud. Kui tabeli lahtris on ”-”, siis see tähendab, et antud efektiivne interaktsioonikonstant ei sõltu sellest algsest interaktsioonikonstandist.

Tuletise märk näitab, et kuidas sõltub efektiivne interaktsioonikonstant, kui hakata suurendama algse interaktsioonikonstandi väärtust. Kuna tõmbeinteraktsioon $v_{\alpha\alpha'}$ on väiksem nullist, siis selle absoluutväärtuse suhtes suurendamine vastab efektiivne interaktsioonikonstandi väärtuse kasvamisele. Paneme tähele, et tõukeinteraktsioonide korral on tsoonidevaheline interaktsioon alati vastupidise märgiga võrreldes tsooniseesmist interaktsioonidega. Tabelis olevad tuletiste märgid on kooskõlas joonisel 2.1 saadud tulemustega.

Efektiivsete interaktsioonikonstantide tuletiste avaldised on toodud lisa 1.

	μ_{11}	μ_{22}	μ_{12}	v_{11}	v_{22}	v_{12}
Γ_{11}	< 0	< 0	> 0	< 0	-	-
Γ_{22}	< 0	< 0	> 0	-	< 0	-
Γ_{12}	> 0	> 0	< 0	-	-	< 0
Γ_{21}	> 0	> 0	< 0	-	-	< 0

Tabel 2.1: Efektiivsete interaktsioonikonstantide tuletised algsetest interaktsioonikonstantidest.

2.2.2 Erijuhud

Tabelites 2.2 ja 2.3 on toodud definitsioonide (2.7) erijuhud, saadud seostest on näha, et nii-öelda ”uuest” teooriast on võimalik teatud lähendustega saada ”vana” teooria tulemused. Tabeli lahtris olev ”-” tähistab asjaolu, et antud efektiivne konstant ei sõltu nulliks võetud konstandist.

	$\tilde{\eta} = 0$	$\mu_{12} = 0$	$v_{12} = 0$	$\mu_{\alpha\alpha} = 0$
Γ_{11}	$-v_{11} - \mu_{11}$	$-v_{11} - \frac{\mu_{11}}{\tilde{\eta}\mu_{11}+1}$	-	$-v_{11} + \frac{\tilde{\eta}\mu_{12}^2}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}$
Γ_{22}	$-v_{22} - \mu_{22}$	$-v_{22} - \frac{\mu_{22}}{\tilde{\eta}\mu_{22}+1}$	-	$-v_{22} + \frac{\tilde{\eta}\mu_{12}^2}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}$
Γ_{12}	$-(v_{12} - \mu_{12})P$	$-v_{12}P$	$\frac{\mu_{12}}{\Phi}P$	$-v_{12}P + \frac{\mu_{12}}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}P$
Γ_{21}	$-(v_{12} - \mu_{12})P^{-1}$	$-v_{12}P^{-1}$	$\frac{\mu_{12}}{\Phi}P^{-1}$	$-v_{12}P^{-1} + \frac{\mu_{12}}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}P^{-1}$

Tabel 2.2: Efektiivsete interaktsioonikonstantide erijuhud.

Tabeli 2.2 juht, kus $\tilde{\eta} = 0$ on tuntud SMW mudel [6]. Erijuhtu $\mu_{12} = 0$ analüüsiti eelnealt mainitud bakalaureuse töös [17].

	$v_{\alpha\alpha} = 0$	$v_{\alpha\alpha}, \mu_{\alpha\alpha} = 0$	$v_{\alpha\alpha}, \mu_{\alpha\alpha} = 0, \mu_{12} = 0$	$v_{\alpha\alpha}, \mu_{\alpha\alpha}, v_{12} = 0$
Γ_{11}	$-\frac{\mu_{11}}{\tilde{\eta}\mu_{11}+1} + \varphi_{11}$	$\frac{\tilde{\eta}\mu_{12}^2}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}$	0	$\frac{\tilde{\eta}\mu_{12}^2}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}$
Γ_{22}	$-\frac{\mu_{22}}{\tilde{\eta}\mu_{22}+1} + \varphi_{22}$	$\frac{\tilde{\eta}\mu_{12}^2}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}$	0	$\frac{\tilde{\eta}\mu_{12}^2}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}$
Γ_{12}	—	$-v_{12}P + \frac{\mu_{12}}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}P$	$-v_{12}P$	$\frac{\mu_{12}}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}P$
Γ_{21}	—	$-v_{12}P^{-1} + \frac{\mu_{12}}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}P^{-1}$	$-v_{12}P^{-1}$	$\frac{\mu_{12}}{-\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2+1}P^{-1}$

Tabel 2.3: Efektiivsete interaktsioonikonstantide erijuhud.

Tabelis 2.3 viimases veerus on punasega märgitud Γ_{11} ja Γ_{22} otsese lähenduse tulemus, sellel erijuhul on lisaks tarvis võtta arvesse asjaolu, et Debye kihis olevate algsete tõmbeinteraktsioonide puudumisel ei ole ka antud energia kiht kindlalt defineeritud ehk võime võtta selle laiuse võrdseks kulonilise kihi laiusega, mille tulenevalt saame, et $\tilde{\eta} = 0$, mis kokkuvõttes tagab ka korrektse tulemuse. Kui teha antud algsete interaktsioonikonstantide lähendus juba võrrandisüsteemis (1.24), saame kohe korrektse tulemuse.

2.2.3 Efektiivse interaktsioonikonstandi lõpmatuse läbimise tingimus

Definitsioonides (2.7) on näha, et igas valemis on lugeja Φ , mis võib läbida teatud tingimustel nulli ja tekitada sellega olukorra, kus efektiivse interaktsioonikonstandi väärtus läbib lõpmatust

$$\Phi = (\tilde{\eta}\mu_{11} + 1)(\tilde{\eta}\mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2\mu_{12}^2 = 0. \quad (2.8)$$

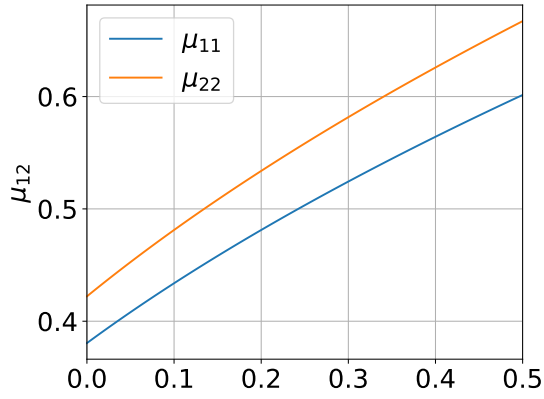
Tingimus (2.8) sõltub ainult algsetes tõukeinteraktsioonikonstantidest ja interaktsioonide energeetiliste ulatuste suhte logaritmist $\tilde{\eta}$. Saadud tingimuses on võimalik avaldada ühe algse tõukeinteraktsioonikonstandi jaoks sõltuvused teistest tõukeinteraktsioonikonstantidest, mille korral on lõpmatuse tingimus täidetud, saades järgnevad seosed:

$$\mu_{12} = \frac{\sqrt{(\tilde{\eta}\mu_{11} + 1)(\tilde{\eta}\mu_{22} + 1)}}{\tilde{\eta}}, \quad (2.9)$$

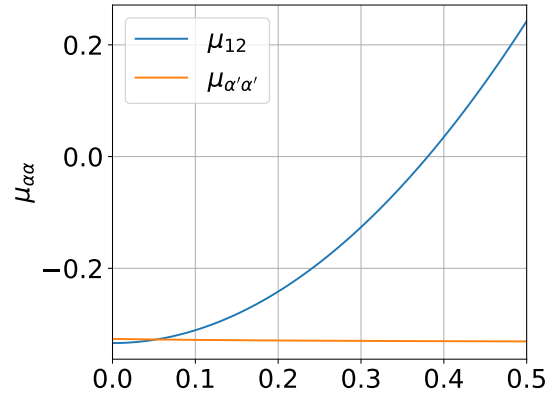
$$\mu_{\alpha\alpha} = \frac{\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2 - \tilde{\eta}\mu_{\alpha'\alpha'} - 1}{\tilde{\eta}(\tilde{\eta}\mu_{\alpha'\alpha'} + 1)}. \quad (2.10)$$

Antud punkt on valemite iseärasus ning ei realiseeru mingi reaalse süsteemi korral, lisaks ei kehti antud efektiivsete interaktsioonikonstantide juures saadud termodünaamilised suurused, kuna võrrandisüsteemi (2.7) saamiseks on tehtud eeldus, et $k_B T_c, |\Delta_\alpha| \ll \hbar\omega_D$.

Joonisel 2.2 on arvutatud määratud algsete tõukeinteraktsioonide korral vastava algse tsoonidevahelise- ja tsooniseesmisetõukeinteraktsiooni väärtus, mille korral kehtib tingimus



(a) μ_{12} väärtuse sõltuvus μ_{11} ja μ_{22} juures.



(b) $\mu_{\alpha\alpha}$ väärtuse sõltuvus μ_{12} ja $\mu_{\alpha'\alpha'}$ juures.

Joonis 2.2: Tõukeinteraktsioonikonstantide väärtused, mille korral saab efektiivne interaktsioonikonstandi väärtus lõpmata suureks. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

(2.8). Arvutustes peab arvestama, et tõukeinteraktsiooni konstandid saavad olla ainult positiivsete väärtustega, seega parempoolsel joonisel 2.2b saadud negatiivseid väärtuseid ei ole korrektne kasutada.

2.3 Faasisiirde temperatuur

Faasisiirde temperatuuri lähedal saame ligikaudu arvutada valemis (1.22) oleva integraali arvestades, et $\hbar\omega_D \gg 2k_B T_c$ ja $\Delta_\alpha(T = T_c) = 0$, saades tulemuseks

$$\eta(T_c, 0) = \int_0^{\hbar\omega_D} \tilde{\epsilon}_\alpha^{-1} \tanh\left(\frac{\tilde{\epsilon}_\alpha}{2k_B T_c}\right) d\tilde{\epsilon}_\alpha = \ln\left(\frac{4\hbar\omega_D e^\gamma}{k_B T_c}\right) \equiv \theta, \quad \gamma = 0.577 \dots \quad (2.11)$$

Võrrandist (2.11) saab avaldada dimensioonitu faasisiirde temperatuuri

$$\frac{k_B T_c^\pm}{\hbar\omega_D} = \frac{2e^\gamma}{\pi} \exp(-\theta^\pm). \quad (2.12)$$

Valemis (2.11) defineeritud θ arvutamiseks asendame θ võrrandisüsteemi (2.6)

$$\begin{cases} \Delta_1(\theta\Gamma_{11} - 1) + \Delta_2\theta\Gamma_{12} = 0 \\ \Delta_1\theta\Gamma_{21} + \Delta_2(\theta\Gamma_{22} - 1) = 0 \end{cases} \quad (2.13)$$

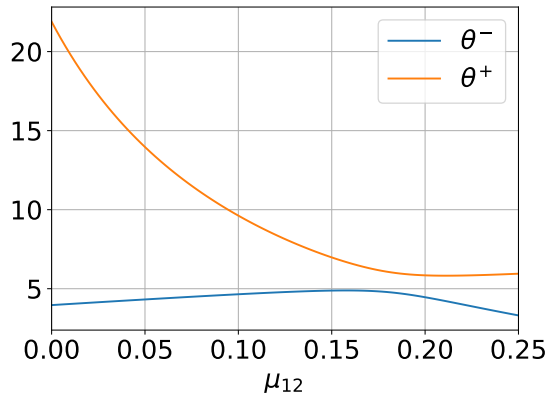
Võrrandisüsteemi mittetriviaalsete lahendite tingimusest on võimalik avaldada θ , mis sõltub efektiivsetest interaktsioonikonstantidest

$$\begin{aligned} \theta^\pm &= \frac{\Gamma_{11} + \Gamma_{22} \pm \sqrt{(\Gamma_{11} - \Gamma_{22})^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma_{21}}}{2(\Gamma_{11}\Gamma_{22} - \Gamma_{12}\Gamma_{21})} = \\ &= \frac{2}{\Gamma_{11} + \Gamma_{22} \mp \sqrt{(\Gamma_{11} - \Gamma_{22})^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma_{21}}}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

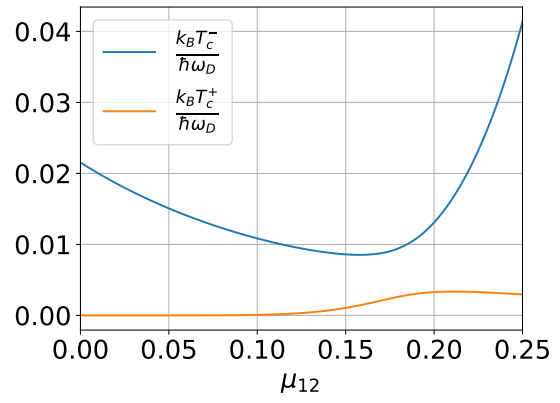
Võrrandisüsteem (2.13) omab kahte lahendit, mis vastavad kahele kriitilisele temperatuurile. Tähistame need vastavalt ruutvõrrandi lahendi märgile $\pm$ -ga. Süsteemis toimub faasisiire ülijuhitvasse seisundisse alati kahe lahendi kõrgema temperatuuriga tulemuse juures ehk madalama $\theta^\pm$ väärtusega.

Joonistel 2.3a ja 2.3b on arvutatud vastavalt võrrandisüsteemi lahendit (2.14) ja dimensioonitu faasisiirde temperatuuri (2.12) sõltuvust μ_{12} -st. On näha, et faasisiirde temperatuuri kõver esmalt kahaneb, omab teatud punktis miinimum väärtus, mida läbides hakkab uuesti kasvama. Miinimumi punkt vastab olukorrale, kus algne tõukeinteraktsioon muutub efektiivselt suuremaks algsest tõmbeinteraktsioonist, punkti asukoht sõltub algse tõmbeinteraktsioonikonstandi väärtusest ning suurusest $\tilde{\eta}$. Tsoonidevaheliste interaktsioonide konkurents analüüsiti bakalau-reuse töös [17], tsoonidevahelise interaktsiooni konkureerimist on näha ka kõigil järgnevatel vastava interaktsioonikanali triivimise joonistel 2.6a, 4.1a.

Joonisel 2.4 on arvutatud valitud parameetrite juures $\theta^\pm$ väärtusi. Kuna integraal (2.11) on alati positiivne suurus, peab seda olema ka θ , mis seab lahenditele teatud piiragu, mida peame arves-

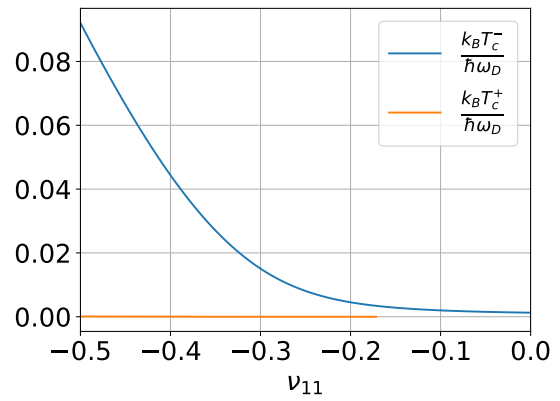
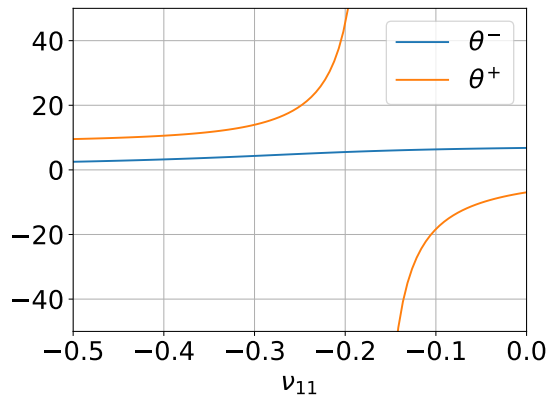


(a)



(b)

Joonis 2.3: $\theta^\pm$ ja dimensionoitu faasisiirde temperatuuri sõltuvus μ_{12} -st. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.



Joonis 2.4: $\theta^\pm$ ja dimensionoitu faasisiirde temperatuuri sõltuvus v_{11} -st. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

tama faasisiirde temperatuuri leidmisel. Tsooniseesmise tõukeinteraktsiooni kasvamisel langeb T_c väärtus stabiilselt, kuna see interaktsioon lõhub ülijuhtivat seisundit.

2.4 Faaside vahe

Teisendame võrrandisüsteemi (2.6) kujule

$$\begin{cases} \Delta_1 \Gamma_{22} = \Delta_1 (\Gamma_{11} \Gamma_{22} - \Gamma_{12} \Gamma_{21}) \eta_1 + \Delta_2 \Gamma_{12} \\ \Delta_2 \Gamma_{11} = \Delta_2 (\Gamma_{11} \Gamma_{22} - \Gamma_{12} \Gamma_{21}) \eta_2 + \Delta_1 \Gamma_{21}. \end{cases} \quad (2.15)$$

Võrrandisüsteemi (2.15) esimesest võrrandist saame avaldada seose

$$\Gamma_{22} - (\Gamma_{11} \Gamma_{22} - \Gamma_{12} \Gamma_{21}) \eta_1 = \frac{\Delta_2}{\Delta_1} \Gamma_{12}. \quad (2.16)$$

Faasisiirde temperatuuri arvutades saime kaks lahendit, mis vastavad võrrandisüsteemi lahendite klassidele Δ_α^+ ja Δ_α^- . Liikudes võrrandis (2.16) temperatuuriga faasisiirde temperatuuri lähedale, saame asendada η_1 -e seosega (2.14), millega on võimalik teisendada võrrand kujule

$$\frac{1}{2} \left(\Gamma_{11} - \Gamma_{22} \pm \sqrt{(\Gamma_{11} - \Gamma_{22})^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma_{21}} \right) = -\Gamma_{12} \frac{|\Delta_2^\pm|}{|\Delta_1^\pm|} e^{i(\phi_2 - \phi_1)}, \quad (2.17)$$

kus oleme asendatud kompleksed ülijuhtivuspilud neile vastavate moodulite ja faasidega. Kokku oleme saanud tingimuse, millega on võimalik määrata pilude faaside vahe.

Võrrandi vasak pool on alati positiivne, kui ruutjuure ees on "+" märk ning negatiivne "-" märgiga. Selleks, et võrdus (2.17) kehtiks peab vastavalt sama märgiga olema võrrandi parem pool. Võrrandi parema poole märki mõjutavad aga kaks suurust: efektiivne tsoonidevahelise interaktsioonikonstant Γ_{12} ja pilude faaside vahe $e^{i(\phi_2 - \phi_1)}$. Kokku saame kaks piirkonda, mis peavad rahuldama järgmisi tingimusi:

$$\begin{aligned} \Gamma_{12} > 0 : & \begin{cases} \operatorname{sgn}(e^{i(\Delta\phi^+)}) = -1 \Rightarrow \Delta\phi^+ = (2n+1)\pi \\ \operatorname{sgn}(e^{i(\Delta\phi^-)}) = 1 \Rightarrow \Delta\phi^- = 2n\pi \end{cases}, \\ \Gamma_{12} < 0 : & \begin{cases} \operatorname{sgn}(e^{i(\Delta\phi^+)}) = 1 \Rightarrow \Delta\phi^+ = 2n\pi \\ \operatorname{sgn}(e^{i(\Delta\phi^-)}) = -1 \Rightarrow \Delta\phi^- = (2n+1)\pi, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.18)$$

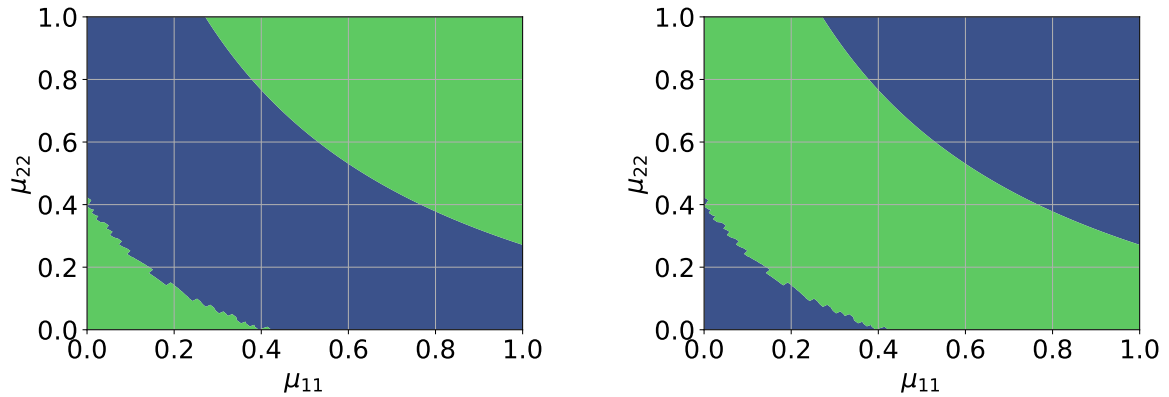
kus, $n = 0, 1, 2, \dots$ ja oleme täistanud $\Delta\phi^\pm \equiv \phi_2^\pm - \phi_1^\pm$.

Tingimused (2.18) saame lühidalt kirja panna seosega

$$e^{i(\phi_2^\pm - \phi_1^\pm)} = \operatorname{sgn}(\mp \Gamma_{12}), \quad (2.19)$$

mida on võimalik lihtsasti asendada pilude võrrandisüsteemi. Kuna pilude faaside vahe on otseselt sõltuvuses ainult Γ_{12} -e märgist, siis vastavalt definitsioonidele (2.7) ei mõjuta faaside

vahet algsed tsooniseesmisest tõmbeinteraktsiooni konstandid. Küll aga, kuna Γ_{12} sõltub kõiki-dest algsetest tõukeinteraktsioonikonstantidest ja tsoonidevahelisest tõmbeinteraktsioonikonstantist, mõjutab nende interaktsioonikonstantide segunemine pilude faaside vahet.



Joonis 2.5: Pilude faaside vahe sõltuvus μ_{11} -st ja μ_{22} -st, rohelisega on märgitud tingimuse (2.19) negatiivne ning sinisega positiivne piirkond. Parameetrid: $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonisel 2.5 on arvatud tingimuse (2.19) sõltuvust algsetest tsooniseesmisest tõukeinteraktsioonikonstantidest nagu on ka valemist näha, on pluss ja miinus tüüpi pilude faaside vahe on alati vastupidine. Piirpindadel, kus sinine muutub rohelises ja vastupidi muudavad mõlemat tüüpi pilu faaside vahe π võrra.

Artiklis [27] uuriti dopeeritud LaAsFeO ühendit ning väidetakse, et materjali Fermi pinna struktuurist tingitult omab antud materjal tugevaid antiferromagnetilise korrastuse fluktuatsioone. Fluktuatsioonid on liiga laiad, et tekitada magnetilist ebastabiilsust, kuid tekitavad ülijuhtivas seisundis elektronide ja aukude jaoks vastasmärgiga korrastusparameetrid.

Artiklis [28] demonstreeriti meetodit, kuidas määrata raua põhistes ülijuhtides erinevate elektronitsoonide korrastusparameetrite märkide erinevust. Meetodi sisuks Josephsoni ühenduses tekkiv interferents kahe eraldatud ülijuhtiva süsteemi vahel. Mõõtes tunnelleerumisvoolu skaneeriva tunnelmikroskoopiaga kahetsoonilisest materjalist ühetsoonilisse materjali. Skaneerides mikroskoobiga üle kahetsoonilise materjali elektronitsoonide toimub tsoonide kohal olekute tiheduse nõrgenemine või tugevnemine, mille saab määrata kas vastavate tsoonide korrastusparameetrid on samas faasis ühetsoonilise omaga või vastasfaasis.

2.5 Nulltemperatuurne ülijuhtivus

Juhul, kui temperatuur on 0 K, saame lihtsustada valemi (1.22) integrandis olevat hüperboolset tangensit

$$\lim_{T \rightarrow 0} \tanh \frac{E(\Delta_\alpha)}{2k_B T} = 1. \quad (2.20)$$

Arvestades lihtsustust (2.20) ning eeldust, et $(\hbar\omega_D)^2 \gg |\Delta_\alpha|^2$, saame tulemuseks

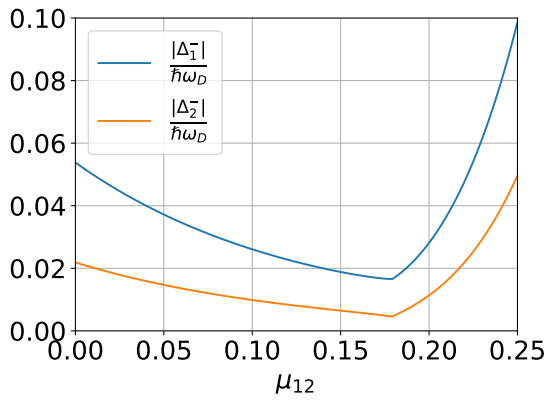
$$\eta_\alpha(0, \Delta_\alpha) = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\tilde{\epsilon}_\alpha}{\sqrt{\tilde{\epsilon}_\alpha^2 + |\Delta_\alpha|^2}} \approx \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{|\Delta_\alpha|} \right). \quad (2.21)$$

Asendades seose (2.21) võrrandisüsteemi (2.6), saame võrrandisüsteemi dimensionoonitu nulltemperatuurse pilu mooduli arvutamiseks:

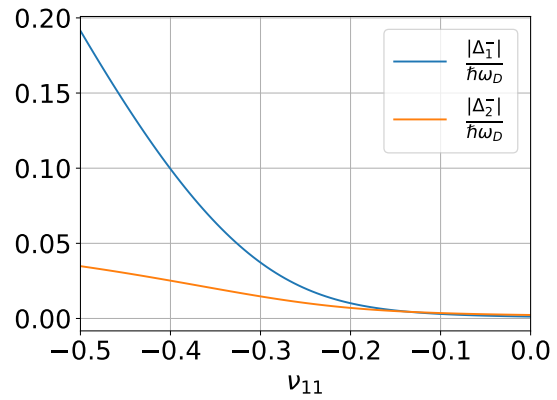
$$\begin{cases} \frac{|\Delta_1|}{\hbar\omega_D} = 2 \exp \left(-\frac{\Gamma_{22} - \kappa^{-1} \Gamma_{12} \Gamma_{21}}{\Gamma_{11} \Gamma_{22} - \Gamma_{12} \Gamma_{21}} \right) \\ \frac{|\Delta_2|}{\hbar\omega_D} = 2 \exp \left(-\frac{\Gamma_{11} - \kappa \Gamma_{21} \Gamma_{12}}{\Gamma_{11} \Gamma_{22} - \Gamma_{12} \Gamma_{21}} \right), \end{cases} \quad (2.22)$$

kus

$$\kappa \equiv \frac{|\Delta_1|}{|\Delta_2|} e^{i(\phi_1 - \phi_2)}. \quad (2.23)$$



(a)



(b)

Joonis 2.6: Dimensionoonitu nulltemperatuurse pilu sõltuvus μ_{12} -st ja ν_{11} -st. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $\nu_{11} = -0.3$, $\nu_{22} = -0.2$, $\nu_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonisel 2.6 on arvutatud võrrandisüsteemi (2.22) lahendeid, μ_{12} -e varieerides omab kõver analoogselt joonisega 2.3 miinimumi, ν_{11} -e sõltuvus omab aga punkti, kus esimese ja teise tsooni moodulid saavad võrdseks ning seejärel muutub domineerivaks teise elektrontsooni pilu moodul. Piude kōdumist on täpsemalt analüüsitud peatükis 4.2. Analoogse tulemuseni jõuti ka artik-

lis [25], kus muudeti interaktsioonikonstantide tugevust dopingu kontsentratsiooniga punktini, kus pilude moodulid kattuvad.

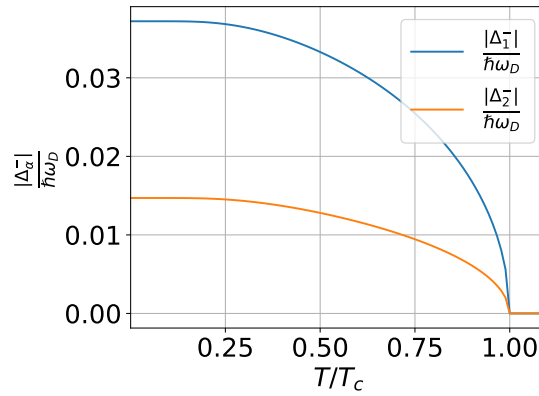
2.6 Ülijuhtivuspilude sõltuvus temperatuurist

Kuna üldiselt on ülijuhtivuspilud kompleksed suurused tuleb nende temperatuurisõltuvuse numbriliseks arvutamiseks teisendada võrrandisüsteemi (2.6) kujule, kus on eraldi välja kirjutatud ülijuhtivuspilu moodul ning antu pilu faas

$$\begin{cases} |\Delta_1^\pm| = |\Delta_1^\pm| \Gamma_{11} \eta_1 + |\Delta_2^\pm| e^{i(\phi_2^\pm - \phi_1^\pm)} \Gamma_{12} \eta_2 \\ |\Delta_2^\pm| = |\Delta_1^\pm| e^{i(\phi_1^\pm - \phi_2^\pm)} \Gamma_{21} \eta_1 + |\Delta_2^\pm| \Gamma_{22} \eta_2 \end{cases} . \quad (2.24)$$

Kasutades faaside vahe seosest (2.19), saame võrrandisüsteemi teisendada meile sobivamale kujule

$$\begin{cases} |\Delta_1^\pm| = |\Delta_1^\pm| \Gamma_{11} \eta_1 + \text{sgn}(\mp \Gamma_{12}) |\Delta_2^\pm| \Gamma_{12} \eta_2 \\ |\Delta_2^\pm| = \text{sgn}(\mp \Gamma_{12}) |\Delta_1^\pm| \Gamma_{21} \eta_1 + |\Delta_2^\pm| \Gamma_{22} \eta_2 \end{cases} . \quad (2.25)$$



Joonis 2.7: Ülijuhtivuspilude sõltuvused temperatuurist. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $\nu_{11} = -0.3$, $\nu_{22} = -0.2$, $\nu_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonisel 2.7 on arvatud nii-öelda tavaliste parameetritega (süsteemis ei esine erilisi efekte, mida on vaadatud järgnevate peatükkides) pilude moodulite sõltuvust temperatuurist, kasutades võrrandisüsteemi (2.25). Mõlemad pilu jaoks toimub faasisiire T_c juures ning pilud kasvavad temperatuuri langedes, jõudes null temperatuuril väärtusteni, mis on kooskõlas joonisel 2.6 saaduga.

Ülijuhtivuspilude temperatuurse sõltuvuse mõõtmise meetodite kohta saab lugeda järgnevatest artiklitest: Raman spktroskoopia [29], Josephsoni ühendus [30], punkt-kontakt spektroskoopia [31], kristallvõre resonants sagedus [32], erisoojus [33].

3 Piludevahelise seose nõrgenemine

Enne nõrga tsoonide vahelise interaktsiooni uurimist on mõistlikum alustada olukorrast, kus puudub täielikult efektiivne tsoonidevahelin interaktsioon, kusjuures selles punktis toimuvad kaks autonoomset faasisiiret – ülijuhtivuspiludes toimub faasisiire erinevate temperatuuride juures ning justkui ühe pilu olemasolu ei sõltu üldse teise pilu olemasolust. Nõuame, et valemis (2.7) defineeritud Γ_{12} oleks null:

$$v_{12} [(\tilde{\eta}\mu_{11} + 1)(\tilde{\eta}\mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2\mu_{12}^2] + \mu_{12} = 0. \quad (3.1)$$

Saadud tingimusest on näha, et efektiivse tsoonidevahelise interaktsiooni nulliks muutmiseks on mitmeid võimalusi, lisaks algsetele tsoonidevahelistele interaktsioonidele mõjutavad ka nulliga võrdumise punkti algsete tsooniseesmistele interaktsioonikonstantide väärtused ning lisaks mõjutab tulemust $\tilde{\eta}$. See, et võrduse (3.1) vasak pool sisaldab ka algseid tsoonideseesmisi interaktsioonikonstante, on tingitud interaktsioonikanalite segunemisest.

Tingimusest (3.1) on võimalik avaldada mingi algse interaktsioonikonstanti väärtuse sõltuvana teistest algsetes interaktsioonikonstantidest, mille korral puudub efektiivne tsoonidevaheline interaktsioon

$$v_{12} = -\frac{\mu_{12}}{(\tilde{\eta}\mu_{11} + 1)(\tilde{\eta}\mu_{22} + 1) - \tilde{\eta}^2\mu_{12}^2}, \quad (3.2)$$

$$\mu_{12} = \frac{1 \pm \sqrt{4\tilde{\eta}^2 v_{12}^2 (\tilde{\eta}^2\mu_{11}\mu_{22} + \tilde{\eta}\mu_{11} + \tilde{\eta}\mu_{22} + 1) + 1}}{2\tilde{\eta}^2 v_{12}}, \quad (3.3)$$

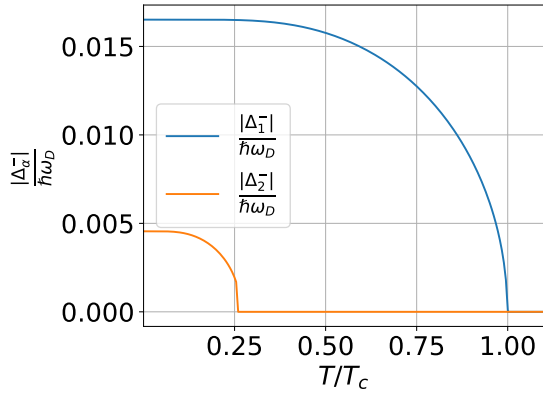
$$\mu_{\alpha\alpha} = \frac{\tilde{\eta}^2\mu_{12}^2 v_{12} - \tilde{\eta}\mu_{\alpha'\alpha'} v_{12} - \mu_{12} - v_{12}}{\tilde{\eta} v_{12} (\tilde{\eta}\mu_{\alpha'\alpha'} + 1)}, \quad \alpha \neq \alpha'. \quad (3.4)$$

Valemis (3.2) tuleb arvestada, et tõmbeinteraktsioon peab olema negatiivne ning valemis (3.3) ja (3.4), et tõukeinteraktsioon peab olema positiivne.

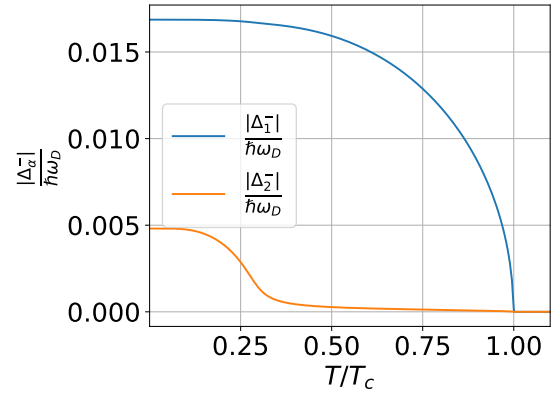
Joonisel 3.1a on arvutatud pilude moodulite sõltuvust temperatuurist kasutades valemist (3.2) saadud algset tsoonidevahelist tõukeinteraktsioonikonstanti. Kusjuurest saadud interaktsioonikonstanti väärtus vastab eelnevalt joonise 2.1 juurest mainitud punktiga, kus efektiivse tsoonidevahelise interaktsioonikonstanti väärtus läbis nulli.

Teades punkti, kus puudub efektiivne tsoonidevaheline interaktsioon, saab vastavat interaktsioonikonstanti natukene muutes selle punkti ümber olukorra, kus realiseerub nõrk tsoonidevaheline seos, nii on ka saadud joonisel 3.1b kasutatud algse tsoonidevahelise tõmbeinteraktsioonikonstanti väärtus.

Lihtsam võimalus joonisel 3.1 näidatud efektide saavutamiseks on võtta kohe algsed tsoonidevahelised interaktsioonikonstandid nulliks: $\mu_{12} = v_{12} = 0$, kuna $\tilde{\eta} \neq 0$ (1.25). Kui $\tilde{\eta} = 0$, siis on ainukeseks võimaluseks antud efekti saavutamiseks võtta algsed tsoonidevahelised interaktsioo-



(a) $\mu_{12} = 0.17905$.

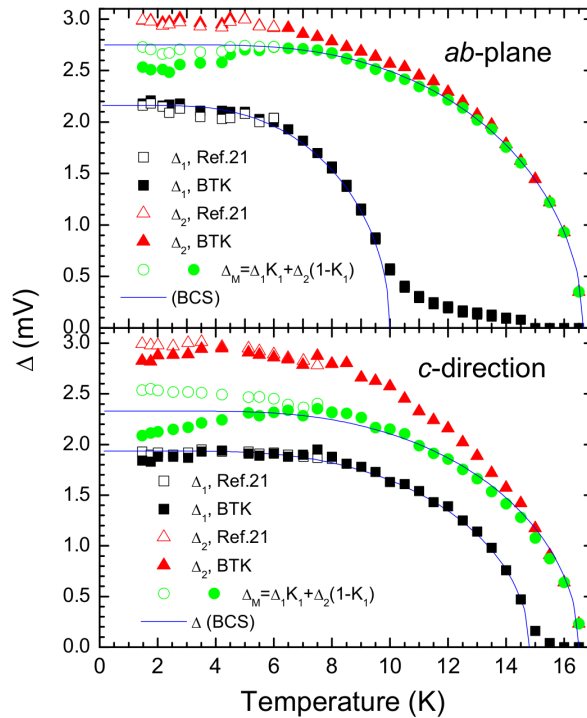


(b) $\mu_{12} = 0.18$.

Joonis 3.1: Pilude moodulite sõltuvus temperatuurist efektiivse tsoonidevahelise interaktsiooni puudumisel ja nõrga interaktsiooni korral. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

nid võrdseks nulliga. Rõhutagem aga, et tänu interaktsioonikanalite segunemisele saab Γ_{12} -e märgi muutust tüürida ka puhtalt algsete tsoonideseesmist interaktsioonikonstantide muutmisega.

Seega tuleb nõrgalt seotud ülijuhtivuspilude kohta käivate katseandmete interpreteerimisel pida silmas nelja interaktsioonikanalit vastavate konstantidega v_{12} , μ_{12} , μ_{11} , μ_{22} .



Joonis 3.2: Pilude moodulite sõltuvus temperatuurist süsteemis $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C-Ag}$ [34].

Parempoolse joonisega 3.1b analoogselt nõrga tsoonidevahelise interaktsiooniga pilude temperatuursõltuvust on mõõdetud mitmetes artiklites. Kuzmichev *et al* mõõtsid SnS-Andreev spektroskoopiaga artiklis [35] defektidega MgB_2 ja kihilise struktuuriga $\text{Mg}_{1-x}\text{Al}_x\text{B}_2$ ja artiklis [36] valitud oksüpnktiid (*oxypnictide*) ühendite jaoks Andreev-i hajumise intensiivsuse sõltuvust pingest erinevatel temperatuuridel. Mõõtmistulemused näitasid, et pilude temperatuursõltuvused vastavad nõrgale tsoonidevahelisele interaktsioonile. Bobrov *et al* [34] mõõtsid punkt-kontakt spektroskoopiaga ühendi $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C-Ag}$ jaoks õhukese kristalli *ab*-tasandil ja *c* suunal ning saadi, et mõlemal juhul käitub pilude temperatuursõltuvus vastavalt nõrgale tsoonidevahelisele interaktsioonile, kui *c*-suunal omab materjali väiksem pilu kõrgemat faasisiirde temperatuuri, mis viitab tugevamale tsooniseesmisele interaktsioonile, vaata lisaks joonist 3.2. Dogolov *et al* [37] uurisid $\text{V}_{3+x}\text{Si}_{1-x}$ pinnavoolude komplekse juhtivuse sõltuvust temperatuurist erinevate Si kontsentratsioonide juures, mille muutmine mõjutab tsoonidevahelise interaktsiooni tugevust, Si kontsentratsiooni suurendamisel 20 %-lt 25 %-ni ilmnes üha paremini nõrga tsoonidevahelise interaktsiooni efekt. Khasanov *et al* [38] mõõtsid ülivoolavus tiheduse sõltuvust välisest rõhust ja temperatuurist, mis on otseselt seotud tsoonidevahelise interaktsiooni tugevusega. Tulemused näitavad, et uuritava materjali FeSe_{1-x} tsoonidevahelise interaktsiooni tugevus ei sõltu välisest rõhust, küll aga muutusid rohkesti tsooniseesmist interaktsioonide tugevused, mis valdavalt kasvasid võrdeliselt rõhuga.

4 Varjatud kahepilulisus

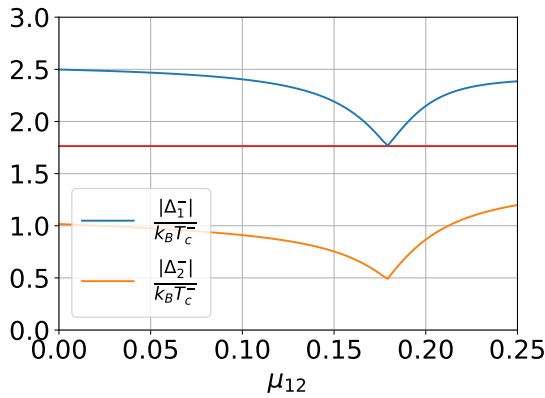
4.1 Nulltemperatuurse ülijuhtivuspilu ja faasisiirde temperatuuri suhe

Ühetsoonilises teoorias on null temperatuurse pilu mooduli ja kriitilise temperatuuri suhe universaalne suurus [4], mis on ligikaudu väärtusega

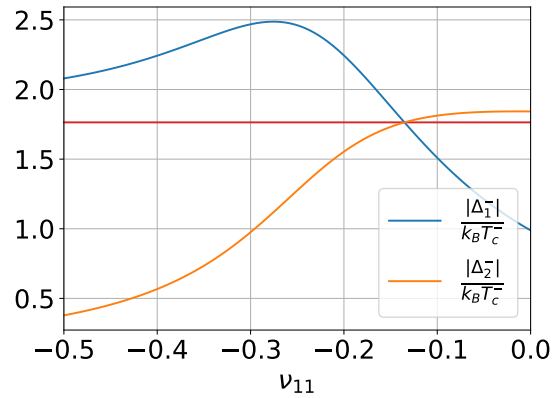
$$\frac{|\Delta|}{k_B T_c} \approx 1.764. \quad (4.1)$$

Arvutame antud suurust kahetsoonilise mudeli jaoks, selleks kombineerime võrrandid (2.22) ja (2.12), saades võrrandisüsteemi

$$\begin{cases} \frac{|\Delta_1^\pm|}{k_B T_c^\pm} = \frac{\pi}{e\gamma} \exp \left(\frac{2\kappa^{-1}\Gamma_{12} + \Gamma_{11} - \Gamma_{22} \pm \sqrt{(\Gamma_{11} - \Gamma_{22})^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma_{21}}}{2(\Gamma_{11}\Gamma_{22} - \Gamma_{12}\Gamma_{21})} \right) \\ \frac{|\Delta_2^\pm|}{k_B T_c^\pm} = \frac{\pi}{e\gamma} \exp \left(\frac{2\kappa\Gamma_{21} - \Gamma_{11} + \Gamma_{22} \pm \sqrt{(\Gamma_{11} - \Gamma_{22})^2 + 4\Gamma_{12}\Gamma_{21}}}{2(\Gamma_{11}\Gamma_{22} - \Gamma_{12}\Gamma_{21})} \right). \end{cases} \quad (4.2)$$



(a)



(b)

Joonis 4.1: Võrrandisüsteemi (4.2) sõltuvused μ_{12} -st ja ν_{11} -st. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $\nu_{11} = -0.3$, $\nu_{22} = -0.2$, $\nu_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonisel 4.1 on arvutatud nulltemperatuurse ülijuhtivuspilu ja faasisiirde temperatuuri sõltuvust kahest algsest tõukeinteraktsiooni konstandist, mis tekitavad kahte tüüpi olukordi punkti lähedal, kus kahetsoonilise mudeli suhe saab võrdseks ühetsoonilise mudeli omaga. Vasakpoolisel joonisel 4.1a puudutab esimese pilu jaoks antud suhe punast joont, millega on märgitud ühetsoonilise teooria kordaja väärtus (4.1), selles punktis käitub süsteem justkui kahest eraldiseisvast ülijuhust koosnev süsteem, kus toimuvad mõlema ülijuhi jaoks eraldi faasisiire erinevatel temperatuuridel. Antud punkti lähedal esineb nõrga tsoonidevahelise interaktsiooni juht. Parempoolisel joonisel 4.1b on aga olukord, kus mõlema pilu jaoks suhe läbib punast joonst, selles punktis

toimub punktis 4.2 täpsemalt kirjeldatud ülijuhtivuspilude kõdumine.

4.2 Ülijuhtivuspilude kõdumine

Ülijuhtivuspilude kõdumiseks nimetatakse olukorda, kus kahepilulises süsteemis mõlema pilu moodulid on võrdsed.

Lähtudes võrrandisüsteemist (2.25), võttes $|\Delta_1^-| = |\Delta_2^-| \equiv |\Delta^-|$ ning arvestades definitsiooni-
dega (2.7), saame võrrandi

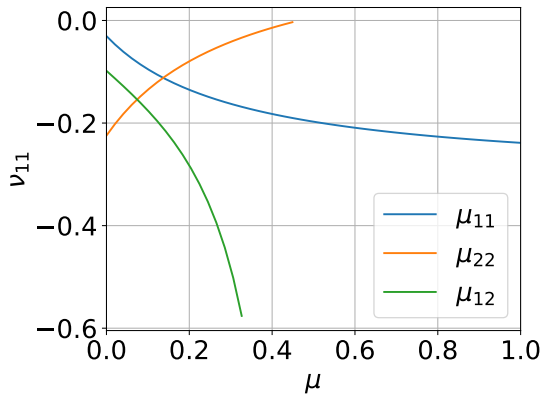
$$\Theta_{11} - \Theta_{22} = \frac{|\Theta_{12}|}{\text{sgn}(\Phi)} \frac{1 - P^2}{P}. \quad (4.3)$$

Võrrandist (4.3) paistab kohe välja tõsiasi, et efektiivse tsoonidevahelise interaktsiooni puudumisel saab toimuda pilude kõdumine ainult juhul, kui mõlema pilu efektiivsed tsooniseesmisel interaktsioonid on võrdsed. Juhul, kui eksisteerib tsoonidevaheline interaktsioon on ikkagi võimalik tekitada valemiga (4.3) arvutatud parameetritega olukord, kus toimub pilude kõdumine. Võrrandis (4.3) esineb kolm piirkonda olekute tiheduse suhte P jaoks:

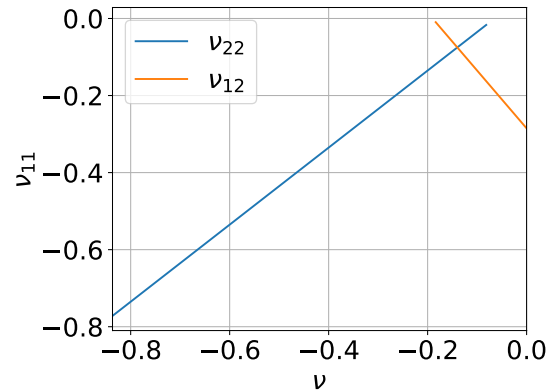
$$P = 1 \Rightarrow \Theta_{11} - \Theta_{22} = 0 \Rightarrow \Theta_{11} = \Theta_{22}, \quad (4.4)$$

$$P > 1 \Rightarrow 1 - P^2 < 0 \Rightarrow \text{sgn}(\Theta_{11} - \Theta_{22}) = -\text{sgn}(\Phi), \quad (4.5)$$

$$P < 1 \Rightarrow 1 - P^2 < 0 \Rightarrow \text{sgn}(\Theta_{11} - \Theta_{22}) = \text{sgn}(\Phi). \quad (4.6)$$



(a) v_{11} väärtuse sõltuvus μ_{11} , μ_{22} ja μ_{12} -st.

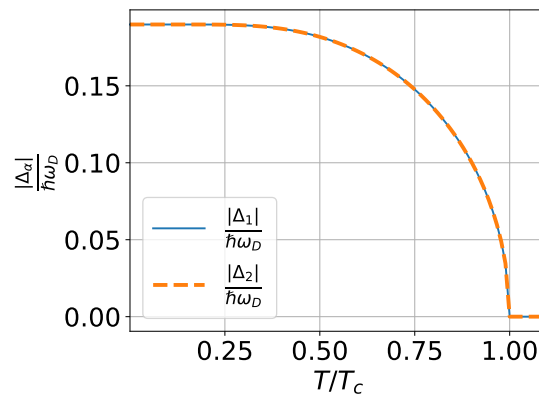


(b) v_{11} väärtuse sõltuvus v_{12} ja v_{22} -st.

Joonis 4.2: Esimese tsooni tõmbeinteraktsiooni väärtused, mille korral on pilud kõdunud. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.3$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonisel 4.2 on arvutatud v_{11} -e jaoks väärtusi, sõltuvana teistest algsetest tõuke- ja tõmbeinteraktsiooni konstantidest, mille korral toimub pilude kõdumine. Vasakpoolsel joonisel 4.2a on arvutatud v_{11} väärtusi muutes eraldi kõikide tõukeinteraktsiooni konstante, jättes ülejäänud konstandid võrdseks joonise all kirjeldatud väärtustega, parempoolsel joonisel 4.2b on tehtu sa-

ma tõmbeinteraktsiooni konstantide jaoks. Tõmbeinteraktsioonidest sõltuvused on sirged, kuna definitsioonides (2.7) esinevad need ainult lineaarselt. Jooniselt 4.2 näha, et süsteemi on võimalik viia mainitud olukorda ükskõik millist teist algset interaktsioonikonstanti muutes, kusjuures on näha, et mõlemal joonisel on võimalik tõmmata horisontaalne sirge, mida läbivad kõik interaktsioonikonstantide sõltuvused, mis tähendab, et sama efekti (sama v_{11} -e väärtust) on võimalik tekitada, muutes ükskõik millist interaktsioonikonstanti eraldi.



Joonis 4.3: Kõdunud pilude temperatuurisõltuvus. Parameetrid: $\mu_{11} = 0.2$, $\mu_{22} = 0.1$, $\mu_{12} = 0.05$, $v_{11} = -0.5532$, $v_{22} = -0.2$, $v_{12} = -0.1$, $\tilde{\eta} = \ln 20$, $P = 2$.

Joonsel 4.3 on arvutatud võrrandist (4.3) saadud v_{11} väärtusega pilude temperatuuset sõltuvust võrrandisüsteemist (2.25). On saadud oodatud tulemus, kus mõlema pilu moodulid on võrdsed ning lisaks on näha, et kõdumine ei sõltu süsteemi temperatuurist. Antud olukord näeks eksperimentis välja, et tegu oleks justkui ühetsoonilise materjaliga, seega puhtalt pilude moodulit mõõtes ei ole alati võimalik kindlaks teha, kas tegu on kahetsoonilise materjaliga.

Kõdunud pilude süsteemi tuvastamiseks saab hinnata kriitilise välja tugevuse sõltuvust temperatuurist, mis on erinev ühtesoonilise ja kõdunud kahetsoonilise süsteemil. Khasanov *et al* [39] analüüsisid mainitud efekti SrPt_3P ühendi jaoks, antud ühend küll ei allu nõrga seose teooriale, kuid ikkagi realiseerub selles pilude kõdumine.

Teine võimalus on varieerida dopingu kontsentratsiooni punktini, kus pilude moodulid kattuvad. Daghero *et al* [40] mõõtsid $\text{Mg}(\text{B}_{1-x}\text{C}_x)_2$ ühendi juhtivuse kõveraaid punkt-kontakt spektroskoopiaga, millest arvutati pilude moodulid, kõrgema süsiniku kontsentratsiooni juures tuvastati ülijuhtivuspilude kõdumist, kusjuures pilu mooduli ja Debye' energia suhe oli lähedane BCS väärtusele (4.1).

Kokkuvõte

Magistritöös uuriti, kuidas algsed tsooniseesmiselised ja tsoonidevahelised elektron-elektron interaktsioonid segunevad, moodustades summaarse efektiivse tsoonidevahelise ja tsooniseesmise interaktsiooni. Efektiivsed interaktsioonikonstandid leiti lähtudes elektron alamsüsteemi Hamiltoni operaatorist, mida teisendati keskmise välja lähendusele ning diagonaliseeriti, nende tegevuste käigus defineeriti ülijuhtivuspilud. Ülijuhtivuspilude võrrandid teisendati kanoonilisele kujule, mis vastab tavalisele ühes energiaalises kihis olevale süsteemile [6], kus on alati tsooniseesmiselised ja tsoonidevahelised interaktsioonid eraldi, võrrandisüsteemis olevate kordajate analoogseid suurusi nimetataksegi efektiivseteks interaktsioonikonstantideks. Esmalt uuriti, kuidas sõltuvad saadud parameetrid algsetest interaktsioonikonstantidest, leiti üldised seosed ja erijuhud. Edasi arvutati ülijuhtivus mudelite jaoks standardseid suurusi, nagu faasisiirde temperatuur ja nulltemperatuurse pilu moodul. Seejärel analüüsiti ülijuhtivus pilude võrrandeid, kui tervikult: määrati pilude faaside vahe tingimus, arvutati üldist temperatuuri sõltuvust. Peale üldiste seoste analüüsi järgnes võrrandisüsteemi erijuhtude vaatlemine: nõrk tsoonidevaheline interaktsioon ja ülijuhtivuspilude kordamine.

Magistritöös on saadud järgmised tulemused:

1. Tsoonidevaheliste ja tsoonideseesmiseliste interaktsioonikanalite segunemise efekti jälgimiseks viidi Fermi pinnal paiknevate ülijuhtivuspilude võrrandid nn kanoonilisele kujule ning tuletati avaldised seal sisalduvate efektiivsete interaktsioonikonstantide jaoks.
2. Leiti, et interaktsioonikanalite segunemise tulemusena sõltuvad efektiivsed tsoonideseesmiselised interaktsioonikonstandid ka algsetest tsoonidevahelistest tõukeinteraktsioonikonstantidest ning efektiivsed tsoonidevahelised interaktsioonikonstandid ka algsetest tsoonideseesmiseliste tõukeinteraktsioonidest. Need sõltuvused on seda tugevamad mida suurem on tõmbe- ja tõukeinteraktsioonide toimismispiirkondade erinevus energiaalises.
3. Tuletati algsete tsooniseesmiseliste ja tsoonidevaheliste interaktsioonikonstantide vahelised seosed, mille korral muutuvad Fermi pinnal avanevad tsoonide ülijuhtivuspilud sõltumatuks, mis realiseerub siis, kui efektiivne tsoonidevaheline interaktsioonikonstant saab võrdseks nulliga.
4. Näidati, et efektiivse tsoonidevahelise interaktsioonikonstandi märk sõltub lisaks algsele tsoonidevahelise tõmbe- ja tõukeinteraktsiooni konkurentsile ka tsoonideseesmiseliste tõukeinteraktsioonidest. Nimetatud märk määrab omakorda ülijuhtivuspilude faaside vahe, millele vastavad erineva struktuuriga ülijuhtivad korrastused.
5. Näidati, et Fermi pinnal formeervate ülijuhtivuspilude vahelise seose nõrgenemine võib olla algsete tsoonidevaheliste interaktsioonide kõrval oluliselt määratud ka algsete tsoo-

nideseesmistest tõuke interaktsioonide poolt. Seda asjaolu tuleks arvestada vastavate katseandmete analüüsimisel.

6. Tehti kindlaks, milliste tingimuste täidetuse korral leiab antud mudeli raames aset tsoonide ülijuhtivuspilude kõdumine. Sellist efekti on jälgitud mitmes kahetsoonilises ülijuhtivas ühendis.

Ehk antud teooriaga on võimalik kirjeldada varem saadud nähtuste üldist tendentsi, millest võib järeldada, et teada oleva käitumised võivad olla genereeritud läbi hoopis keerulisema mehhanismi.

Edasine uurimine peaks sisaldama analüüsi veel tegemata jäänud termodünaamilistest suurusdest. Leida parameetrite komplekt, mis kirjeldaks mingit tuntud kahetsoonilist materjali. Kuna ühele efektiivse interaktsioonikonstandile vastavad mitmed tsooniseesmistest ja tsoonidevahelistest interaktsioonide komplektid, peaks üldisemalt analüüsima vastavat olukorda tekitavaid tingimusi. Oleks tarvis täpsemalt vaadelda punkti ümbrust, kus efektiivse interaktsioonikonstandi väärtus läheneb lõpmatusele.

Viited

- [1] W. L. McMillan, “Transition temperature of strong-coupled superconductors,” *Phys. Rev.*, vol. 167, pp. 331–344, 1968.
- [2] H. K. Onnes, “The superconductivity of mercury,” *Phy. Lab. Univ. Leiden.*, pp. 122–124, 1911.
- [3] J. Kondo, “Theory of multiband superconductivity,” *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 71, no. 5, pp. 1353–1359, 2002.
- [4] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, “Theory of superconductivity,” *Phys. Rev.*, vol. 108, pp. 1175–1204, 1957.
- [5] L. N. Cooper, “Bound electron pairs in a degenerate fermi gas,” *Phys. Rev.*, vol. 104, pp. 1189–1190, 1956.
- [6] H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, “Bardeen-cooper-schrieffer theory of superconductivity in the case of overlapping bands,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 3, pp. 552–554, 1959.
- [7] S. Tsuda, T. Yokoya, Y. Takano, H. Kito, A. Matsushita, F. Yin, J. Itoh, H. Harima, and S. Shin, “Definitive experimental evidence for two-band superconductivity in MgB_2 ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 91, p. 127001, 2003.
- [8] R. Khasanov, A. Shengelaya, A. Maisuradze, F. L. Mattina, A. Bussmann-Holder, H. Keller, and K. A. Müller, “Experimental evidence for two gaps in the high-temperature $\text{La}_{1.83}\text{Sr}_{0.17}\text{CuO}_4$ superconductor,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 98, p. 057007, 2007.
- [9] Yu. A. Nefyodov, A. M. Shuvaev, and M. R. Trunin, “Microwave response of V_3Si single crystals: Evidence for two-gap superconductivity,” *Europhys. Lett.*, vol. 72, no. 4, pp. 638–644, 2005.
- [10] H. Ding, P. Richard, K. Nakayama, K. Sugawara, T. Arakane, Y. Sekiba, A. Takayama, S. Souma, T. Sato, T. Takahashi, Z. Wang, X. Dai, Z. Fang, G. F. Chen, J. L. Luo, and N. L. Wang, “Observation of fermi-surface-dependent nodeless superconducting gaps in $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$,” *EPL*, vol. 83, no. 4, p. 47001, 2008.
- [11] T. Örd and N. Kristoffel, “Modeling MgB_2 two-gap superconductivity,” *Physica C*, vol. 370, no. 1, pp. 17–20, 2002.
- [12] T. Örd, N. Kristoffel, and K. Rägo, “ MgB_2 superconductivity properties in a two-gap model,” *Modern Physics Letters B*, vol. 17, no. 10-12, pp. 667–673, 2003.

- [13] P. Konsin and B. Sorkin, “A generalized two-band model for the superconductivity in MgB_2 ,” *Supercond. Sci. Technol.*, vol. 17, no. 12, pp. 1472–1476, 2004.
- [14] N. Kristoffel, T. Örd, and K. Rägo, “A description of MgB_2 superconductivity including σ - π bands coupling,” *Journal of Superconductivity: Incorporating Novel Magnetism*, vol. 16, no. 3, pp. 517–519, 2003.
- [15] N. Kristoffel, T. Örd, and K. Rägo, “ MgB_2 two-gap superconductivity with intra- and interband couplings,” *Europhys. Lett.*, vol. 61, no. 1, pp. 109–115, 2003.
- [16] G. Litak, T. Örd, K. Rägo, and A. Vargunin, “Band filling effects on coherence lengths and penetration depth in the two-orbital negative-U Hubbard model of superconductivity,” *Physica C: Superconductivity*, vol. 483, pp. 30–33, 2012.
- [17] T. Priinits, “Konkureerivad tsoonidevahelised interaktsioonid kahepilulises ülijuhis,” bachelor’s thesis, Taru Ülikool, Tartu, Ülikooli 18-304, 2019.
- [18] J. F. Annett, *Superconductivity, superfluids and condensates*. Oxford master series in condensed matter physics, Oxford: Oxford Univ. Press, 2004.
- [19] N. N. Bogolyubov, “On a New method in the theory of superconductivity,” *Nuovo Cim.*, vol. 7, pp. 794–805, 1958.
- [20] P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*. New York: Benjamin, 1966.
- [21] J. Kondo, “Superconductivity in Transition Metals,” *Progress of Theoretical Physics*, vol. 29, no. 1, pp. 1–9, 1963.
- [22] T. Örd, “On interpretation of superconducting orders induced by interband repulsion and attraction,” *Proc. Estonian Acad. Sci. Phys. Math.*, vol. 41, no. 4, pp. 283–287, 1992.
- [23] D. Daghero and R. S. Gonnelli, “Probing multiband superconductivity by point-contact spectroscopy,” *Superconductor Science and Technology*, vol. 23, no. 4, p. 043001, 2010.
- [24] I. Kokanović, B. Leontić, and J. Lukatela, “The influence of localization and electron-electron interaction on the superconducting transition temperature in hydrogen-doped Zr-(3d,4d) metallic glasses,” *Journal of Non-Crystalline Solids*, vol. 156, no. 1, pp. 352–355, 1993.
- [25] R. Gonnelli, D. Daghero, A. Calzolari, G. Ummarino, V. Dellarocca, V. Stepanov, S. Kazakov, N. Zhigadlo, and J. Karpinski, “Evidence for single-gap superconductivity in $\text{Mg}(\text{B}_{1-x}\text{C}_x)_2$ single crystals with $x=0.132$ from point-contact spectroscopy,” *Physical Review B*, vol. 71, 2005.

- [26] J. Yan and C. Zhu, “Interaction and superconducting transition in alkali-doped C_{60} ,” *Chinese Journal of Chemistry*, vol. 17, no. 1, pp. 16–23, 1999.
- [27] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes, and M. H. Du, “Unconventional superconductivity with a sign reversal in the order parameter of $LaFeAsO_{1-x}F_x$,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 101, p. 057003, Jul 2008.
- [28] A. E. Koshelev and V. Stanev, “Proximity fingerprint of $s_{\pm}$ -superconductivity,” *EPL*, vol. 96, no. 2, p. 27014, 2011.
- [29] J. W. Quilty, “The MgB_2 superconducting energy gaps measured by Raman spectroscopy,” *Physica C: Superconductivity*, vol. 385, no. 1, pp. 264–272, 2003.
- [30] S. Carabello, J. G. Lambert, J. Mlack, W. Dai, Q. Li, K. Chen, D. Cunnane, C. G. Zhuang, X. X. Xi, and R. C. Ramos, “Energy gap substructures in conductance measurements of MgB_2 -based Josephson junctions: beyond the two-gap model,” *Supercond. Sci. Technol.*, vol. 28, no. 5, 2015.
- [31] N. Hass, G. Deutcher, A. Revcolevschi, and G. Dhalenne, “Point contact spectroscopy in oriented $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ superconductors; energy gap and fermi velocity,” *Journal of Superconductivity*, vol. 7, no. 4, pp. 763–766, 1994.
- [32] B. Jin, N. Klein, A. Pimenov, A. Loidl, S. Krasnosvobodtsev, W. Kang, H. Kim, E. Choi, and S. Lee, “Microwave measurement of energy gap and penetration depth of MgB_2 thin film,” *Physica C*, vol. 372, no. 2, pp. 1283–1286, 2002.
- [33] J. Kacmarcik, Z. Pribulova, C. Marcenat, T. Klein, P. Rodiere, L. Cario, and P. Samuely, “Specific heat measurements of a superconducting NbS_2 single crystal in an external magnetic field: Energy gap structure,” *Physical Review B*, vol. 82, no. 1, 2010.
- [34] N. L. Bobrov, S. I. Beloborod’ko, L. V. Tyutrina, V. N. Chernobay, I. K. Yanson, D. G. Naugle, and K. D. D. Rathnayaka, “Investigation of the superconducting energy gap in the compound $LuNi_2B_2C$ by the method of point contact spectroscopy: two-gap approximation,” *Low Temperature Physics*, vol. 32, no. 4, pp. 489–496, 2006.
- [35] S. Kuzmichev, T. Shanygina, S. Tchesnokov, and S. Krasnosvobodtsev, “Temperature dependence of superconducting gaps in $Mg_{1-x}Al_xB_2$ system investigated by SnS-Andreev spectroscopy,” *Solid State Communications*, vol. 152, no. 2, pp. 119–122, 2012.
- [36] S. A. Kuzmichev, T. E. Kuzmicheva, S. N. Tchesnokov, V. M. Pudalov, and A. N. Vasiliev, “Estimation of intraband and interband relative coupling constants from temperature dependences of the order parameter for two-gap superconductors,” *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 29, no. 4, pp. 1111–1116, 2016.

- [37] O. V. Dolgov, A. A. Golubov, Y. A. Nefyodov, A. M. Shuvaev, and M. R. Trunin, “Microwave conductivity in two-band superconductors $V_{3+x}Si_{1-x}$,” *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, vol. 28, pp. 331–337, 2014.
- [38] R. Khasanov, M. Bendele, A. Amato, K. Conder, H. Keller, H.-H. Klauss, H. Luetkens, and E. Pomjakushina, “Evolution of two-gap behavior of the superconductor $FeSe_{1-x}$,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 104, p. 087004, 2010.
- [39] R. Khasanov, A. Amato, P. Biswas, H. Luetkens, N. Zhigadlo, and B. Batlogg, “ $SrPt_3P$: A two-band single-gap superconductor,” *Physical Review B*, vol. 90, p. 140507, 2014.
- [40] D. Daghero, R. Gonnelli, A. Calzolari, G. Ummarino, V. Dellarocca, V. Stepanov, N. Zhigadlo, S. Kazakov, and J. Karpinski, “The superconducting gaps of C-substituted and Al-substituted MgB_2 single crystals by point-contact spectroscopy,” *physica status solidi (c)*, vol. 2, pp. 1656 – 1661, 2005.

Lisa 1. Efektiivsete interaktsioonikonstantide tuletiste avaldised

Tuletised Γ_{11} -st

$$\frac{\partial \Gamma_{11}}{\partial \mu_{11}} = - \frac{\left[\tilde{\eta}^4 \mu_{11}^2 \mu_{22}^2 + 2\tilde{\eta}^3 \mu_{11}^2 \mu_{22} + 2\tilde{\eta}^3 \mu_{11} \mu_{22}^2 + \tilde{\eta}^2 \mu_{11}^2 + 4\tilde{\eta}^2 \mu_{11} \mu_{22} + \tilde{\eta}^2 \mu_{22}^2 + 2\tilde{\eta} \mu_{11} + 2\tilde{\eta} \mu_{22} + 1 \right]}{(\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)^2 (-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} < 0 \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{11}}{\partial \mu_{22}} = - \frac{\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} < 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{11}}{\partial \mu_{12}} = \frac{2\tilde{\eta}^3 \mu_{11} \mu_{12} \mu_{22} + 2\tilde{\eta}^2 \mu_{11} \mu_{12} + 2\tilde{\eta}^2 \mu_{12} \mu_{22} + 2\tilde{\eta} \mu_{12}}{(\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} > 0 \quad (5.3)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{11}}{\partial v_{11}} = -1 \quad (5.4)$$

Tuletised Γ_{22} -st

$$\frac{\partial \Gamma_{22}}{\partial \mu_{11}} = - \frac{\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} < 0 \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{22}}{\partial \mu_{22}} = - \frac{\left[\tilde{\eta}^4 \mu_{11}^2 \mu_{22}^2 + 2\tilde{\eta}^3 \mu_{11}^2 \mu_{22} + 2\tilde{\eta}^3 \mu_{11} \mu_{22}^2 + \tilde{\eta}^2 \mu_{11}^2 + 4\tilde{\eta}^2 \mu_{11} \mu_{22} + \tilde{\eta}^2 \mu_{22}^2 + 2\tilde{\eta} \mu_{11} + 2\tilde{\eta} \mu_{22} + 1 \right]}{(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)^2 (-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} < 0 \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{22}}{\partial \mu_{12}} = \frac{2\tilde{\eta}^4 \mu_{12}^3 \mu_{22} + 2\tilde{\eta}^3 \mu_{11} \mu_{12} \mu_{22} + 2\tilde{\eta}^2 \mu_{11} \mu_{12} + 2\tilde{\eta}^2 \mu_{12} \mu_{22} + 2\tilde{\eta} \mu_{12}}{(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)^2 (-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} > 0 \quad (5.7)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{22}}{\partial v_{22}} = -1 \quad (5.8)$$

Tuletised Γ_{12} -st

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial \mu_{11}} = - \frac{\tilde{\eta} \mu_{12} (\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} P < 0 \quad (5.9)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial \mu_{22}} = - \frac{\tilde{\eta} \mu_{12} (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} P < 0 \quad (5.10)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial \mu_{12}} = \frac{\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} P > 0 \quad (5.11)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial v_{12}} = -P \quad (5.12)$$

Tuletised Γ_{21} -st

$$\frac{\partial \Gamma_{21}}{\partial \mu_{11}} = -\frac{\tilde{\eta} \mu_{12} (\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} P^{-1} < 0 \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{21}}{\partial \mu_{22}} = -\frac{\tilde{\eta} \mu_{12} (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} P^{-1} < 0 \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{21}}{\partial \mu_{12}} = \frac{\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1)}{(-\tilde{\eta}^2 \mu_{12}^2 + (\tilde{\eta} \mu_{11} + 1)(\tilde{\eta} \mu_{22} + 1))^2} P^{-1} > 0 \quad (5.15)$$

$$\frac{\partial \Gamma_{21}}{\partial v_{12}} = -P^{-1} \quad (5.16)$$

Lihtlitsents lõputöö reprodutseerimiseks ja üldsusele kättesaadavaks tegemiseks

Mina, Taimo Priinits,

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

Interaktsioonikanalite segunemine kahetsoonilises ülijuhis,

mille juhendajad on Teet Örd, PhD ja Küllike Rägo, PhD, reprodutseerimiseks eesmärgiga seda säilitada, sealhulgas lisada digitaalarhiivi DSpace kuni autoriõiguse kehtivuse lõppemiseni.

2. Annan Tartu Ülikoolile loa teha punktis 1 nimetatud teos üldsusele kättesaadavaks Tartu Ülikooli veebikeskkonna, sealhulgas digitaalarhiivi DSpace kaudu Creative Commons'i litsentsiga CC BY NC ND 4.0, mis lubab autorile viidates teost reprodutseerida, levitada ja üldsusele suunata ning keelab luua tuletatud teost ja kasutada teost ärieesmärgil, kuni autoriõiguse kehtivuse lõppemiseni.
3. Olen teadlik, et punktides 1 ja 2 nimetatud õigused jäävad alles ka autorile.
4. Kinnitan, et lihtlitsentsi andmisega ei riku ma teiste isikute intellektuaalomandi ega isikuandmete kaitse õigusaktidest tulenevaid õigusi.

Taimo Priinits

30.05.2022