

Nadprzewodnictwo

Na podstawie klasycznej teorii przewodnictwa elektrycznego w metalach autorstwa

Drueda wiemy, że

$$\sigma = \frac{ne^2}{m} \tau$$

przewodnictwo τ średni czas swobodnego ruchu nośnika między kolejnymi zderzeniami

Zatem dla metali możemy napisać

$$\rho = \frac{m}{ne^2} \left(\frac{1}{\tau_{imp}} + \frac{1}{\tau_{el-el}} + \frac{1}{\tau_{el-ph}} + \dots \right) =$$

opór właściwy τ_{imp} rozpraszanie na domkach (niezależne od T) τ_{el-el} rozpraszanie elektron-elektron $\propto T^2$ τ_{el-ph} rozpraszanie elektron-fonon $\propto T$

$$= \rho_0 + aT^2 + \dots$$

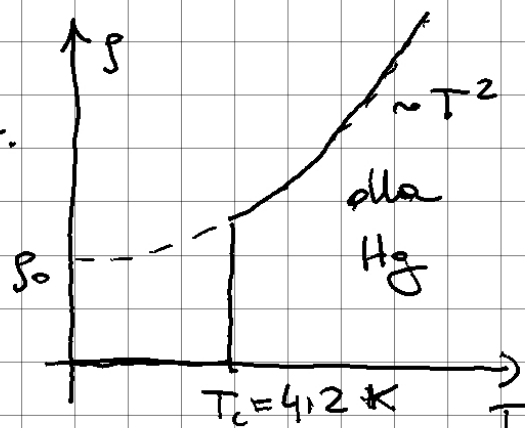
jest to tak zwana reguła Matthiessena

Eksperyment Onnesa

Kammerling Onnes w 1911 r.

zaobserwował zanik

oporności właściwej dla



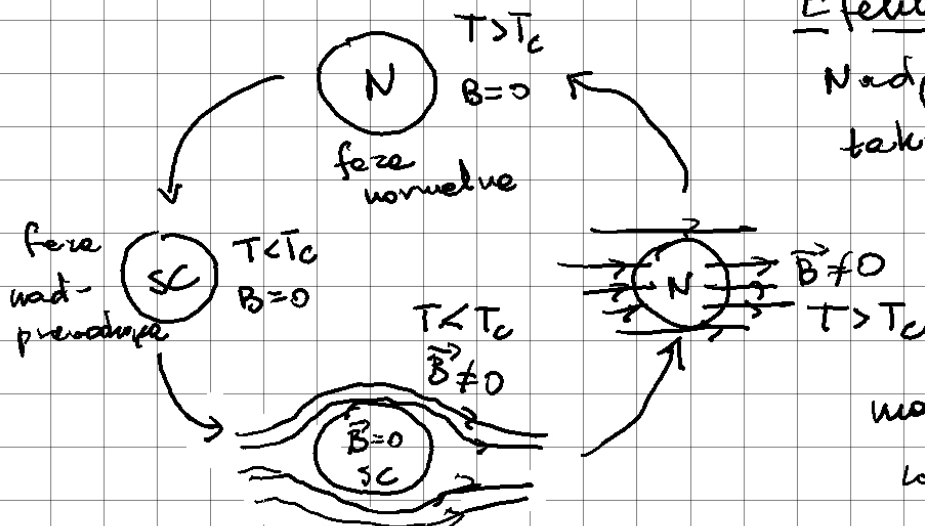
rtęci poniżej $T_c = 4,2 \text{ K}$.

Metal	temp. krytyczna T_c	
Al	1,2 K	} Nadprzewodniki I typu
Hg	4,2 K	
Nb	9,3 K	
Pb ⋮	7,2 K	
		← Bednorz i Müller (1986)
$\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$	38 K ($x=0,15$)	odkrycie nadprzewodników
YBaCu_3O_7	92 K	wysokotemperaturowych
↑ soc	↑	nadprzewodnictwo już w temp. ciekłego azotu
to		nadprzewodniki typu <u>II</u>

Właściwość ta jest nazywana idealnym przewodnictwem.

Efekt Meissnera (1933)

Nadprzewodnik jest takie idealnym diamagnetykiem, tzn. wypycha on pole magnetyczne z jego wnętrza.



Mechanizm nadprzewodnictwa I typu

Nadprzewodniki wykazują tzw. efekt izotopowy.

$$T_c \propto M^{-\alpha}, \quad \alpha = \frac{1}{2},$$

gdzie M - masa jonów w sieci krystalicznej.

Podobną zależność mamy dla częstotliwości

Debye'a :

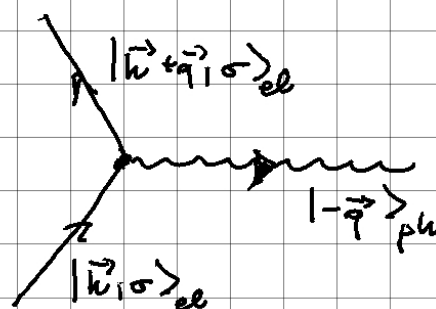
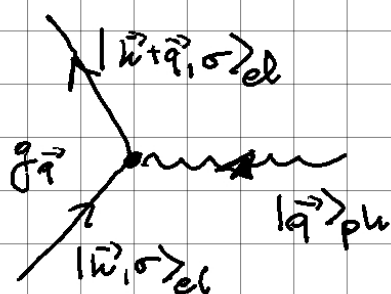
$$\omega_D \propto M^{-\alpha}, \quad \alpha = \frac{1}{2}$$

Sugeruje to istotność oddziaływań elektron - fonon w mechanizmie nadprzewodnictwa.

Punktem wyjścia w naszych rozważaniach będzie hamiltonian Fröhlicha opisujący sprzężenie się elektronów i fononów.

$$\hat{H}_{Fr} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{\vec{q}} \left(b_{\vec{q}}^{\dagger} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right) + \\ + \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}\sigma} \sum_{\vec{q}} g_{\vec{q}} c_{\vec{k}+\vec{q}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} \left(b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^{\dagger} \right),$$

gdzie $g_{\vec{q}} = i \frac{ze^2}{\epsilon_0} \frac{q}{q^2 + k^2} \sqrt{\frac{N \hbar}{2M \omega_{\vec{q}}}}$



Hamiltonian ten jest punktem wyjścia do uzyskania efektywnego hamiltonianu BCS.

Transformacja Schrieffer-Wolfa

Wychodząc z hamiltonianu:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \quad \text{gdzie } \hat{H}_0 \text{ - część swobodna (elektrony + fonony)}$$

$\hat{H}_1$ - zaburzenie
(oddziaływanie elektron-fonon)

Definiujemy transformację kanoniczną hamiltonianu przy pomocy wyrażenia:

$$\hat{H}' = e^{-\hat{S}} \hat{H} e^{+\hat{S}} = \left(1 - \hat{S} + \frac{1}{2!} \hat{S}^2 - \dots\right) \hat{H} \left(1 + \hat{S} + \frac{1}{2!} \hat{S}^2 + \dots\right) =$$

Baker-Campbell-Hausdorff

$$= \hat{H} + [\hat{H}, \hat{S}] + \frac{1}{2} [[\hat{H}, \hat{S}], \hat{S}] + \dots =$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1$$

$$= \hat{H}_0 + (\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{S}]) + \frac{1}{2} ([(\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{S}]), \hat{S}] + [\hat{H}_1, \hat{S}]) + \dots$$

przy czym $\hat{S}$ jest operatorem

antyhermitowskim ($\hat{S}^\dagger = -\hat{S}$) będący

generatorem transformacji. Celem

tej transformacji jest dostanie

efektywnego oddziaływania pomiędzy

elektronami w tym celu chcemy

pozbyć się $\hat{H}_1$ w pierwszym rzędzie.

Możemy to uzyskać korzystając z równania:

$$\hat{H}_1 + [\hat{H}_0, \hat{S}] = 0,$$

wtedy w naszym przypadku:

$$\hat{S} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} W_{\vec{q}, \vec{k}} c_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} (\alpha b_{\vec{q}} + \beta b_{-\vec{q}}^\dagger),$$

gdzie

$$\alpha = -(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \hbar \omega_{\vec{q}})^{-1}$$

$$\beta = -(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \hbar \omega_{\vec{q}})^{-1}$$

$$\omega_q = \omega_{-q}$$

$W_{\vec{k}, \vec{q}}$ - stała oddziaływania elektron-jon,

wtedy

$$\hat{H}' = \hat{H}_0 + \frac{1}{2} [\hat{H}_1, \hat{S}] + \dots$$

Licząc komutator $[\hat{H}_1, \hat{S}]$ i pomijając część swobodną hamiltonianu fononowego.

Efektowy hamiltonian ma wtedy postać

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \sum_{\vec{k}\sigma} \tilde{\epsilon}_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}'\vec{q} \\ \sigma\sigma'}} U_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}'\sigma'}^{\dagger} c_{\vec{k}+\vec{q},\sigma} c_{\vec{k}'-\vec{q},\sigma'}$$

gdzie

$$\tilde{\epsilon}_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}q\sigma} W_{\vec{k}q} W_{\vec{k}-\vec{q},-\sigma} \frac{\hbar\omega_q}{(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})^2 - (\hbar\omega_q)^2}$$

$$U_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}} = \frac{W_{\vec{k}q} W_{\vec{k}'-\vec{q}} \hbar\omega_q}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}})^2 + (\hbar\omega_q)^2}$$

Ograniczamy się do przypadku $\vec{k}' = -\vec{k}$

(parowanie Coopera) dostajemy hamiltonian BCS:

$$\hat{H}_{\text{BCS}} = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{\vec{k}\sigma} + \sum_{\substack{\vec{k}\vec{k}' \\ \sigma\sigma'}} U_{\vec{k}\vec{k}'} c_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} c_{-\vec{k}\sigma'}^{\dagger} c_{-\vec{k}\sigma'} c_{\vec{k}\sigma}$$

gdzie

$$U_{\vec{k}\vec{k}'} = \frac{|W_{\vec{k},\vec{k}-\vec{k}'}|^2 \hbar\omega_{\vec{k}-\vec{k}'}}{(\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'})^2 - (\hbar\omega_{\vec{k}-\vec{k}'})^2}$$

oddziaływanie między elektronami jest

przyciągające $U_{kk'} < 0$, gdy $|\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}| < \hbar\omega_{k-k'}$,
 wtedy w uproszczeniu możemy przyjąć, że

$$U_{kk'} = \begin{cases} -\frac{g}{\Omega}, & \varepsilon_F - \hbar\omega_D \leq \varepsilon_k, \varepsilon_{k'} \leq \varepsilon_F + \hbar\omega_D \\ 0, & \text{w.p.p.} \end{cases}$$

① Pary Coopera (L. Cooper, Phys. Rev. 104 (1954))

Rozważyc parę elektronów znajdujących się
 nieco powyżej poziomu Fermiego, której
 hamiltonian jest postaci:

$$\hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}}^2}{2\mu} + V(\vec{r}) \right],$$

gdzie $\vec{R}$ jest współrzędną środka masy

parę elektronów, $\vec{r}$ jest współrzędną

względna parę, $m^* = 2m_e$, $\mu = \frac{m_e}{2}$

oraz oddziaływanie $V(\vec{r})$ jak pokazaliśmy

wcześniej jest efektywnie przyciągające.

Znaleźć energię własną w tym zagadnieniu.

Rozwiązanie:

Dwu cząstkowa funkcja falowa parę elektronów:

$$\psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \varphi(\vec{r}) \chi_{\sigma_1 \sigma_2}^{\text{spin}}$$

↑ separacja masy środka masy

Wprowadzamy

$$\tilde{E} = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

↑ energia własna

Część spinowa funkcji falowej może być singletowa ($S=0$) lub trypletowa ($S=1$):

$$\chi_{\sigma_1 \sigma_2}^{\text{spin}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (\text{singlet})$$

$$\chi_{\sigma_1 \sigma_2}^{\text{spin}} = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases} \quad (\text{tryplet})$$

Zwykle nadprzewodniki są singletowe, ale możliwe jest też parowanie trypletowe.

Funkcja falowa elektronów musi być antysymetryczna, więc wybierając singlet część przestrzenna jest symetryczna, tj. $\varphi(\vec{r}) = \varphi(-\vec{r})$.

Funkcję faliową przepiszemy jako

$$\varphi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}, \quad (\varphi_{\vec{k}} = \varphi_{-\vec{k}})$$

ponadto $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$.

Konstantując $\varphi_{\vec{k}} = \int d^3r \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

wstawiając to do hamiltonianu mamy:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{r}}^2 \varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r})$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} k^2 \varphi_{\vec{k}} + \int V(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d^3r = E \varphi_{\vec{k}}$$

Niech $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, wtedy

$$\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} V(\vec{q}) \int d^3r \varphi(\vec{r}) e^{-i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{r}} = (E - 2\epsilon_{\vec{k}}) \varphi_{\vec{k}}$$

która $\vec{k} - \vec{q} = \vec{k}'$, wtedy

$$\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} V(\vec{k} - \vec{k}') \varphi_{\vec{k}'} = (E - 2\epsilon_{\vec{k}}) \varphi_{\vec{k}}$$

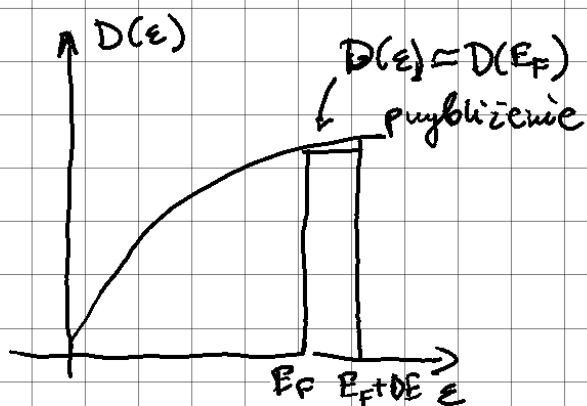
Tak jak omówiliśmy wcześniej mamy
do zrywania z efektywnym oddziaływaniem
między elektronami:

$$V(\vec{k}-\vec{k}') = \begin{cases} -g & , E_F < \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_e} < E_F + \Delta E \\ 0 & , \text{w.p.p.} \end{cases}$$

wtedy $(E - 2\varepsilon_{\vec{k}}) \varphi_{\vec{k}} = -\frac{g}{\Omega} \sum_{\vec{k}'} \varphi_{\vec{k}'}$

wprowadzamy $\sum_{\vec{k}'} \varphi_{\vec{k}'} = C$:

$$(E - 2\varepsilon_{\vec{k}}) \varphi_{\vec{k}} = -\frac{g}{\Omega} C$$



$$C = \sum_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}} = -\frac{g}{\Omega} C \sum_{\vec{k}} \frac{1}{E - 2\varepsilon_{\vec{k}}}$$

$$1 = \frac{1}{2} \int_{E_F}^{E_F + \Delta E} d\varepsilon D(\varepsilon) \frac{g}{2\varepsilon - E} =$$

↑
gęstość stanów

$$= \frac{g D(E_F)}{2} \ln \left(\frac{2E_F + 2\Delta E - E}{2E_F - E} \right) \quad \uparrow E = 2E_F + \varepsilon_b$$

$$= \frac{g D(E_F)}{2} \ln \left(\frac{2\Delta E - \varepsilon_b}{-\varepsilon_b} \right)$$

↑
energia wiązania pary

$$\frac{2\Delta E - \varepsilon_b}{-\varepsilon_b} = e^{2/g D(E_F)} \Rightarrow 2\Delta E = \varepsilon_b \left(1 - e^{2/g D(E_F)} \right)$$

$$\varepsilon_b = \frac{2\Delta E}{1 - e^{-2/g D(E_F)}} \xrightarrow{\frac{g}{E_F} \rightarrow 0} -2\Delta E e^{-2/g D(E_F)}$$

Energia wiązania pary:

$$\varepsilon_b \simeq -2\Delta E e^{-2/gD(E_F)} < 0$$

dla dowolnie małego g , gdzie $\Delta E = \hbar\omega_D$

Elektrony tworzą stan związany,

tzw. parę Coopera.

Przyciągające oddziaływanie między elektronami powyżej poziomu Fermiego w przedziale $E_F < E < E_F + \hbar\omega_D$ prowadzi do tworzenia się stanów związanych.

Prowadzi to niestabilności miana Fermiego,