

V. A. MOSKALENKO, L. Z. KON, M. E. PALISTRANT

SUPRACONDUCTIBILITATEA
METALELOR ȘI ALIAJELOR CU
STRUCTURĂ DE BANDĂ
COMPLEXĂ

București, 2008

Prefață

În cei 20 de ani scurși de la descoperirea, în oxizii de cupru, a supraconductibilității la temperaturi înalte, a fost realizat un număr enorm de investigații a proprietăților fizice ale acestor materiale, atât sub aspect teoretic, cât și experimental. În ciuda tuturor eforturilor, natura noului tip de supraconductibilitate nu a fost elucidată, ea rămânând unul dintre cele mai enigmatice mecanisme ale fizicii corpului solid.

Dificultatea soluționării acestei probleme se explică prin caracterul complicat al materialelor ce devin supraconductoare la temperaturi înalte și a structurii lor cristaline, prezenței unei anizotropii puternice, existenței efectelor neadiabactice și de asemenea prezenței unor corelații electronice puternice și a unei interacții electron-fofonice intense.

În aceste materiale atât de complicate au loc diferite tranziții de fază (structurale, magnetice, supraconductoare și altele), și sunt posibile stările mixte, ca de exemplu coexistența supraconductibilității și a antiferomagnetismului sau a stării de spin-vitroase.

După părerea noastră, un progres în determinarea mecanismului apariției supraconductibilității la temperaturi înalte poate fi obținut luând în considerație în mod sistematic și succesiv particularitățile fizice ale oxizilor metalici și în special ale spectrului energetic al electronilor sau golurilor ce participă în procesul de supraconducție.

Astfel de particularități, ce joacă un rol fundamental în aceste materiale, sunt suprapunerea benzilor energetice la suprafața Fermi, existența proprieității de nesting a spectrului energetic, ce duce la apariția fazelor undelor de densitate de sarcină (CDW-Charge Density Wave) și undelor de densitate de spin (Spin Density Wave-SDW) și în special posibilității coexistenței lor cu supraconductibilitatea. De asemenea trebuie luate în considerație existența impurităților, inclusiv a celor localizate, singularităților Van Hove și ale altor particularități.

Noi sperăm că această monografie prezintă un interes special deoarece conține un spectru larg de investigații consacrate influenței particularităților spectrului energetic asupra supraconductibilității la temperaturi înalte (în sensul folosit astăzi).

Prima parte a cărții prezintă elementele principale ale teoriei bi-bandă și multi-bandă creată de V. Moskalenko în 1959. Această teorie este prima încercare de generalizare a teoriei supraconductibilității (la temperaturi joase) BCS-Bogoliubov pentru metale reale. În capitolele 1-3 sunt expuse ideile de bază ale teoriei bi-și multi-bandă, necesare descrierii proprietăților sistemelor ce conțin două sau mai

multe grupuri de electroni ce formează perechi Cooper în cadrul fiecărei benzi și tunelarea lor dintr-o bandă în alta.

În această primă parte a cărții este formulată teoria termodinamică a supraconductorilor bi-bandă, sunt descrise metodele teoretice de investigație bazate pe teoria funcțiilor Green cuantice și sunt indicate rezultatele fundamentale pentru cazul materialelor pure și al celor cu impurități nemagnetice și magnetice.

Deoarece una din particularitățile de bază ale supraconductorilor la temperaturi înalte este suprapunerea de benzi energetice la suprafața Fermi, autorii au urmărit sistematic și au realizat programul de studiu al proprietăților termodinamice și magnetice ale acestor materiale, în cadrul teoriei bi-bandă. Un articol de sinteză cuprinzător a fost publicat în 1991 [V.A. Moskalenko, M.E. Palistrant and V.M. Valiuk, "High-temperature superconductivity and the characteristic of the electronic energy spectrum", *Sov. Phys.Usp.* **34**, 717 (1991)].

După cum am avut ocazia să ne convingem, rezultatele acestor investigații sunt deseori în conformitate cu experiența. Prezența a două benzi electronice, caracteristica pentru aceste materiale, nu poate fi, în multe cazuri, depistată experimental prin determinarea a două gap-uri energetice ce aparțin electronilor de lângă sfera Fermi. Cauza acestei dificultăți constă în prezența unor mari cantități de impurități, sau deficienței de oxigen, ce duce la medierea acestor gap-uri și restructurarea densității stărilor electronice. Într-adevăr, teoria demonstrează că, în rezența impurităților, în loc de două gap-uri electronice în starea supraconductoare apare una, iar în loc de doi parametri de ordine ale acestei stări, apare un parametru de ordine dat de medierea celor doi existenți în lipsa impurităților. Ca urmare, manifestările experimentale ale acestor materiale puternic dopate nu se disting de ceea a materialelor cu o singură bandă, însă parametrii de bază, ca de exemplu temperatura critică a supraconductibilității, densitatea stărilor electronice, și parametru Ginzburg-Landau, se determină pe baza teoriei cu două benzi.

Așadar teoria benzilor suprapuse demonstrează eficiența mecanismului inter-bandă de tunelare a electronilor și în cazul materialelor pure și a celor cu impurități, cu toate că probele experimentale și ultimul caz sunt mai puțin evidente și necesită o analiză mai amănunțită.

O investigație experimentală minuțioasă este necesară și în cazul sistemelor cu o densitate scăzută a purtătorilor de sarcină. În aceste sisteme dezordinea indusă de impurități este mai scăzută și de aceea conservarea a două gap-uri a stării supraconductoare este favorizată.

Teoria ce determină proprietățile termodinamice a materialelor supraconductoare cu două benzi în cazul unei densități arbitrare a purtătorilor de sarcină (inclusiv cazul celei scăzute) a fost expusă recent într-o lucrare de sinteză [M.E. Palistrant, *Superconductivity in Two - Band System with Low Carrier Density*, *Int. J. Mod. Phys.* **B19**, 929-970 (2005)]. Această investigație este efectuată pe baza unui model generalizat cu două benzi, în care se iau în considerație nu numai perechile electronice intra-, ci și cele inter-bandă.

Menționăm de asemenea un succes remarcabil obținut în explicarea proprietăților cinetice a sistemelor bi-bandă. Aceste materiale conțin un șir de abateri de la comportarea prezisă de teoria supraconductorilor uni-bandă. Un exemplu remarcabil îl demonstrează teoria ultrasunetului în supraconductorii bi-bandă elaborată

de L.Z. Kon et. al. [Physica C **349** p. 211 (2001)]. În această teorie s-a obținut dependența de temperatură și concentrația impurităților nemagnetice a coeficientului de absorbție și a vitezii sunetului longitudinal în sistemele bi-bandă. A fost demonstrat că starea supraconductoare schimbă esențial dependența vitezei sunetului de acești factori. Influența supraconductibilității în cazul materialelor pure este condiționată de două procese interconectate și anume de fluctuațiile densității electronilor și fluctuațiile parametrilor de ordine a supraconductibilității. Prezența impurităților schimbă radical ambele procese.

Cu mare interes a fost primită descoperirea în 2001 a supraconductibilității în borura de magneziu (MgB_2). Acest material atrage atenția specialiștilor prin faptul că este mult mai simplu decât oxizii de cupru, având cu toate acestea valori mari pentru temperatura critică a tranziției supraconductoare ($T_c \simeq 40$ K), câmpului magnetic critic de gradul doi ($H_{c2} \simeq 18$ T) și a curentului electric critic. Acest material a insuflat din nou speranța de a ajunge la înțelegerea mecanismului supraconductibilității la temperaturi înalte și în materiale mai complicate de tipul ceramicelor oxizilor de cupru.

Investigațiile experimentale ale acestui nou material au demonstrat că proprietățile lui fizice nu pot fi explicate de teoria BCS-Eliashberg, deoarece există un număr mare de devieri clare de la predicțiile acesteia [vezi F. Bouquet et. al., Physica C **385**, 192 (2003); P. C. Confield et al., Physica C **385**, 1 (2003)].

Într-o serie de lucrări (vezi de exemplu S.V. Shulga et al., cond-mat/0103154) a fost emisă ideea de a folosi modelul Moskalenko bi-bandă pentru a descrie proprietățile fizice ale acestor compuși. S-a dovedit că acest model este capabil să explice toate proprietățile acestor materiale.

Într-adevăr, teoria permite obținerea unei temperaturi critice T_c înalte, explicarea valorilor experimentale ale gap-urilor energetice (ce au proprietățile $2\Delta_l/T_c > 3,5$ și $2\Delta_c/T_c < 3,5$), valoarea scăzută a saltului relativ a căldurii specifice în punctul critic (0,8 pentru MgB_2), dependența anomală de temperatură a căldurii specifice în faza supraconductoare, curbura anomală în dependența de temperatură a câmpului magnetic critic H_{c2} și altele.

Aceste rezultate sunt enumerate în prezența monografie. Din această perspectivă, considerăm că există un interes major față de ideile și concepțiile noi conținute în lucrarea de față, ceea ce justifică traducerea ei ca fiind necesară și actuală.

Această carte împreună cu articolele menționate mai sus ce trec în revistă rezultatele din ultima vreme, conține rezultatele și metodele devenite clasice în domeniul investigațiilor proprietăților termodinamice, magnetice și cinetice ale materialelor bi-bandă și multi-bandă, ca și a celor cu alte particularități ale spectrului energetic (cum ar fi stările localizate, anizotropia puternică, existența nesting-ului sau a singularității Van-Hove și altele).

Vrem să menționăm de asemenea că unele aspecte ale investigațiilor proprietăților termodinamice a materialelor multi-bandă bazate pe mecanismele fononice și cele nefononice, admitând un spectru al valorilor densității purtătorilor de sarcină (se are în vedere scenariul supraconductibilității *BCS* și deasemenea cel al condensării Bose a perechilor localizate propus de Schffrot) au fost recent prezentate în monografia "Teoria supraconductibilității la temperaturi înalte în supraconductorii multi-bandă", Chișinău, Știința, 2007 -redactată în limba engleză de către M.E.

Palistrant și M. Calalb.

În această carte au fost efectuate unele realizări ale modelului Moskalenko bi-bandă, care permit o tratare mai adecvată a sistemelor reale.

Menționăm, ca exemplu, folosirea modelului bi-bandă pentru descrierea proprietăților supraconductoare, ale compusului MgB_2 , a sistemelor neadiabaticice și deasemenea în formularea teoriei oscilațiilor colective datorate fluctuațiilor de fază, iar în cazul densităților mici a purtătorilor de sarcină, datorate fluctuațiilor amplitudinilor parametrilor de ordine ai benzilor energetice.

Această carte este însoțită de câteva articole originale ce aparțin autorilor cărții și colegilor lor, care demonstrează posibilitățile și eficiența teoriei multi-bandă pentru a descrie multiplele proprietăți fizice ale sistemelor supraconductoare. Ele prezintă de asemenea starea actuală de înțelegere a problemelor abordate.

Menționăm obținerea unei concordanțe bune între teoria propusă și datele experimentale, ceea ce, după părerea noastră, demonstrează eficiența teoriei bi-bandă și a generalizărilor ei pentru descrierea proprietăților sistemelor reale.

Autorii

Cuprins

Prefață	i
I TEORIA SUPRACONDUCTORILOR CU BENZI MULTIPLE	1
1 PROPRIETĂȚILE SUPRACONDUCTORILOR	3
1.1 Introducere	3
1.2 Proprietățile termodinamice ale supraconductorilor puri	5
1.3 Metoda funcțiilor Green de temperatură	13
2 TEMPERATURA CRITICĂ A ALIAJELOR	25
2.1 Introducere	25
2.2 Funcțiile Green uni-particulă	25
2.3 Funcția de undă a perechii Cooper	31
2.4 Discuția rezultatelor	42
3 TERMODINAMICA ALIAJELOR BIBANDĂ	47
3.1 Ecuațiile fundamentale	47
3.2 Parametrii de ordine $\bar{\Delta}_n$ la $T = 0$	52
3.3 Densitatea de stări electronice	56
3.4 Termodinamica aliajelor bibandă în apropierea lui T_c	66
Bibliografie	73
II INFLUENȚA STĂRILOR LOCALIZATE ALE IMPURITĂȚILOR ȘI A PARTICULARITĂȚII SPECTRULUI DE BENZI ASUPRA PROPRIETĂȚILOR ALIAJELOR	77
4 STĂRI LOCALE ÎN SUPRACONDUCTORI	79
4.1 Introducere	79
4.2 Temperatura critică a supraconductorului impuri	84
4.3 Saltul căldurii specifice în modelul Anderson	88
4.4 Densitatea de stări a aliajelor cu impurități nemagnetice	93

4.5	Conducția termică a aliajelor	99
4.6	Atenuarea ultrasunetelor în supraconductori	103
4.7	Discuția rezultatelor	105
4.8	Concluzii	105
5	FENOMENE DE NEECHILIBRU	109
5.1	Noțiuni fundamentale	109
5.2	Ecuția cinetică pentru metale normale	111
5.3	Ecuția cinetică pentru supraconductori	115
5.4	Pătrunderea câmpului electric în supraconductori	118
6	TERMODINAMICA ȘI CINETICA DIELECTRICILOR	123
6.1	Forța termoelectrică diferențială	123
6.1.1	Introducere	123
6.1.2	Funcția Green a izolatorului excitonic cu impurități	125
6.1.3	Coeficientul termoelectric al izolatorului excitonic	128
6.2	Influența impurităților nemagnetice	134
6.2.1	Trecerea în revistă a literaturii și ecuațiile fundamentale	134
6.2.2	Dependența parametrilor de ordine de impurități la temperatură nulă	138
	Bibliografie	143

III PROPRIETĂȚILE TERMODINAMICE ȘI MAGNETICE ALE SISTEMELOR PUTERNIC ANIZOTROPE. SUPRACONDUCTIVITATEA ALIAJELOR BINARE 149

7	DENSITATEA DE SPIN ȘI SUPRACONDUCTIVITATEA	151
7.1	Introducere	151
7.2	Ecuțiile fundamentale	153
7.3	Temperatura critică	157
7.4	Calculul energiei libere	161
7.5	Temperaturi apropiate de T_c	162
7.6	Calculul numerice și discuția rezultatelor	164
8	SUPRACONDUCTORI ANIZOTROPI ÎN CÂMP MAGNETIC	169
8.1	Introducere	169
8.2	Cazul câmpului magnetic paralel ($H_0 \parallel M$)	171
8.2.1	Ecuțiile fundamentale	171
8.2.2	Energia liberă a sistemului	172
8.2.3	Starea fundamentală ($T = 0$)	174
8.2.4	Domeniul temperaturilor apropiate de T_c	175
8.2.5	Temperatura critică a supraconductorului	176
8.2.6	Distrușgerea supraconductivității de către magnetism	178
8.2.7	Tranziția de fază de ordinul unu pentru $T_c \ll M_c$	179
8.2.8	Saltul căldurii specifice	179

8.3	Cazul câmpului magnetic perpendicular ($\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$)	182
8.4	Calcul numerice și discuția rezultatelor	184
9	INFLUENȚA CÂMPULUI MAGNETIC	189
9.1	Răspunsul magnetic al SDW	190
9.1.1	Hamiltonianul model și ecuațiile pentru funcțiile Green	190
9.1.2	Sistemul de ecuații pentru parametrul de ordine M_Q și magnetizarea spontană M	193
9.1.3	Cazuri particulare	195
9.1.4	Temperatura critică a tranziției în starea SDW	197
9.1.5	Cazul limită al temperaturii nule	198
9.1.6	Calcul numerice și analiza rezultatelor	200
9.2	Influența impurităților asupra SDW	202
9.2.1	Hamiltonianul sistemului și ecuațiile fundamentale pentru substanța pură	203
9.2.2	Considerarea impurităților	206
9.2.3	Susceptibilitatea magnetică	211
9.2.4	Rezultatele calculului numeric	213
10	SUPRACONDUCTIBILITATEA ALIAJELOR	217
10.1	Introducere	217
10.2	Hamiltonianul model al sistemului	218
10.3	Ecuația de configurație. Funcția Green	219
10.4	Proprietățile operatorilor de masă	223
10.5	Calculul componentei funcției $\hat{F}(z)$	224
10.6	Cazul limită al stării normale	227
10.7	Parametrul de ordine și temperatura critică	232
10.8	Calcul numerice și analiza rezultatelor	232
	Bibliografie	241
	Postfață	245

Lista figurilor

4.1	Dependența temperaturii critice de raportul Γ/U	87
4.2	Dependența raportului $\Delta C/\Delta C_0$ de T_c/T_{c0} pentru $g = 0,18$ și diferite valori ale parametrilor γ și q : 1 - $\gamma = 0, q = 0$; 2 - $\gamma = 0, q = 0,025$; 3 - $\gamma = 0, q = 0,125$; 4 - $\gamma = 1, q = 0$	92
4.3	Dependența lui R_n/R_s de T_c/T pentru diferite valori ale concentrației de impurități n_c/n_{cr} : 1 - 0,02; 2 - 0,04; 3 - 0,1.	106
6.1	Dependența parametrilor de ordine d și Δ de concentrația de impurități.	141
7.1	Dependența parametrilor de ordine M/M_0 (1 și 2) și Δ/Δ_0 (1' și 2') de temperatură. Curbele 1 și 1' corespund cazului $t = 0,7, \bar{\mu} = 1,08$, iar curbele 2 și 2' cazului $t = 0,5, \bar{\mu} = 1,17$	164
7.2	Dependența parametrilor de ordine M/M_0 și Δ/Δ_0 (1 și 1' respectiv) de temperatură pentru $t = 0,9, \bar{\mu} = 1,09$	165
7.3	Dependența parametrilor de ordine M/M_0 (1 și 2) și Δ/Δ_0 (1' și 2') de temperatură. Curbele 1 și 1' corespund cazului $t = 0,3, \bar{\mu} = 1,073$, iar curbele 2 și 2' cazului $t = 0,3, \bar{\mu} = 1,079$	165
7.4	Dependența de temperatură a diferenței energiilor libere pentru diferite valori ale parametrilor t și $\bar{\mu}$. Numerotarea curbelor corespunde cazurilor analizate.	166
7.5	Dependența temperaturii de tranziție supraconductoare T_c (1-3) și a parametrului de ordine Δ (4,5) de $\bar{\mu}$	167
8.1	Diagrama de fază ($H_0/\Delta_0, N_1/N$) pentru $T = 0, t = T_{c0}/T_{s0} = 0,4$ (a) și pentru $T = 0, t = 0,6$ (b).	184
8.2	Diagrama de fază ($T/T_{s0}, N_1/N$) pentru $t = 0,5, H_0/\Delta_0 = 0,4$ (a) și pentru $t = 0,7, H_0/\Delta_0 = 0,2$ (b).	185
8.3	Dependența de câmpul magnetic a temperaturii critice pentru supraconductoare pentru N_1/N : 1) - 0; 2) - 0,2; 3) - 0,4.	186
8.4	Dependența diferenței energiilor libere δF_{\parallel} (1) și δF_{\perp} (2) de temperatură pentru cazul $t = 0,7, N_1/N = 0,1, H_0/\Delta_0 = 0,2$	187
9.1	(a) Dependența parametrului de ordine $M_Q(0)/M_Q^0$; (b) a susceptibilității magnetice longitudinale χ_{\parallel}/χ_0 de parametrul $\bar{\mu}$	200

9.2	(a) Dependența raportului $M_Q(0)/T_s$ de parametrul $\bar{\mu}$; (b) Dependența parametrului de ordine M_Q/M_Q^0 de temperatură pentru valori mici ale câmpului magnetic pentru valorile lui $\bar{\mu}$: 1) - 0; 2) - 0,838; 3) - 1,054; 4) - 1,089; 5) - 1,101; 6) - 1,202; 7) - 1,452.	201
9.3	Dependența de temperatură a susceptibilității magnetice longitudinale pentru valorile lui $\bar{\mu}$: 1) - 0; 2) - 1,054; 3) - 1,202; 4) - 1,110; 5) - 1,089.	201
9.4	Dependența unghiulară a susceptibilității magnetice $\chi(\psi)/\chi_{\parallel}^0$ pentru $\bar{\mu} = 0$ (a) și $\bar{\mu} = 1, 202$ (b) pentru valorile lui T/T_s : 1) - 0; 2) - 0,5; 3) - 0,6; 4) - 0,7; 5) - 0,8; 6) - 0,9; 7) - 1,0.	202
9.5	Dependența mărimii T_P de parametrul $\bar{\mu}$ și valoarea corespunzătoare a mărimii η_q pentru valorile lui Γ/T_{P0} : 1) - 0; 2) - 0,3; 3) - 0,5; 4) - 0,65; 5) - 0,7.	214
9.7	Dependența de concentrația de impurități a temperaturii critice a tranziției în starea CDW incomensurabilă.	214
9.6	Dependența temperaturii de tranziție T_P/T_{P0} (a) a parametrului de ordine Δ (curbele continue) și a gap-ului energetic Ω_g (curbele întrerupte) (b) de concentrația de impurități pentru valorile lui $\bar{\mu}$: 1) - 0; 2) - 0,5; 3) - 1,0; 4) - 1,2.	215
9.8	Dependența de temperatură a parametrului de ordine Δ (a) și a susceptibilității magnetice χ (b) pentru valorile: $\bar{\mu} = 0, \Gamma = 0$ (1); $\bar{\mu} = 0, 5, \Gamma/T_{p0} = 0, 2$ (2); $\bar{\mu} = 1, 0, \Gamma/T_{p0} = 0$ (3); $\bar{\mu} = 1, 08, \Gamma/T_{p0} = 0$ (4); $\bar{\mu} = 1, 09, \Gamma/T_{p0} = 0$ (5); $\bar{\mu} = 1, 0, \Gamma/T_{p0} = 0, 2$ (6).	216
9.9	(a) Dependența concentrației critice a impurităților de parametrul μ/Δ ; (b) Dependența de câmpul magnetic a temperaturii de tranziție în starea CDW incomensurabilă și a mărimii μ_{cr} de același parametru.	216
10.1	Schema dependenței discriminantului Q al ecuației cubice (10.69) de energia E pentru $x = 0, 5$	229
10.2	(a) Dependența lui $Q' = (27Q)/(1024V^2)$ de energia E pentru $x = 0$ și $V = 0,5$; (b) Schema de poziționare a benzilor pentru valorile limită ale parametrilor x și V pentru îndeplinirea condiției $E_2 = E_3$	231
10.3	(a) Diagrama de fază metal-dielectric în coordonatele (x, V) ; (b) Dependența lărgimii benzii $\Delta_1 E$ și $\Delta_2 E$ de concentrația de impurități în punctul de tranziție metal-dielectric.	233
10.4	Dependența marginilor benzilor $E_1, E_2 = E_3$ și E_4 de concentrația de impurități în punctul de tranziție metal-dielectric.	233
10.5	(a) și (b) Dependența numerelor de ocupare $n_A/n_A^0, n_B/n_B^0$ și a raportului V/V_0 de valorile parametrului U ; (c) și (d) Dependența numerelor de ocupare a stărilor n_A și n_B de concentrația de impurități pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale lui V_0	234

10.6	(a) Dependența mărimii V de concentrația de impurități pentru $U = 0, 4$ și valori diferite ale lui V_0 ; (b) Dependența mărimii V de concentrația de impurități pentru $V_0 = 0, 6$ și valori diferite ale parametrului U . Dependența energiei Fermi ε_F de concentrația de impurități pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale lui V_0 (c); și pentru $V_0 = 0, 6$ și diferite valori ale lui U (d).	235
10.7	(a) Dependența densității electronice de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități pentru $V_0 = 0, 6$ și diferiți U ; (b) Dependența densității electronice de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități pentru $U = 0, 4$ și V_0 diferiți; (c) Dependența lui $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități	236
10.8	(a) și (b) Dependența temperaturii critice de tranziție în starea supraconductoare T_c/W de concentrația de impurități pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale lui V_0 ; (c) Dependența lui T_c/W de concentrația de impurități.	237
10.9	Dependența $\varrho(E)$ pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale parametrului V_0	239
10.10	Dependența $\varrho(E)$ pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale parametrului V_0	240

Lista tabelelor

4.1	Dependența mărimilor α , σ_p , Δ_g , ω_g și ω_m de concentrația atomilor de impuritate.	98
7.1	Relația dintre mărimile μ și η_q	159
9.1	Relația dintre mărimile μ , η_q și T_P pentru $\Gamma/T_{P0}=0; 0,2; 0,3$ și $0,5$. . .	213

Partea I

TEORIA
SUPRACONDUCTORILOR
CU BENZI MULTIPLE

PROPRIETĂȚILE SUPRACONDUCTORILOR CU MAI MULTE BENZI

1.1 Introducere

Descoperirea în 1986 de către Bednorz și Müller [9]-[12] a supraconductorilor de temperatură înaltă în oxizii ceramici de cupru a dat naștere la o activitate deosebită pentru descoperirea unor noi materiale cu temperaturi critice (T_c) record ale tranziției supraconductoare și a dus la necesitatea explicării naturii acestei tranziții și a mecanismului realizării ei. În prezent nu există o explicație clară privind cauzele apariției unor supraconductorilor cu temperaturi critice T_c atât de înalte (de ordinul a 100 K și mai mari). De aceea nu există o înțelegere clară a problemei până unde este posibil să ridicăm limita superioară a parametrilor critici ai supraconductorilor și ce cale trebuie să urmăm în acest scop.

Datorită instabilităților de fază, temperaturi critice T_c care ajung la 150 K nu sunt total reproductibile. Lipsa unei cunoașteri apriorice a lui T_c face necesară o cercetare cât mai intensă a unor noi materiale. Până acum aceste încercări s-au îndreptat în principal spre compușii ceramici La-M-Cu-O și Y-M-Cu-O, unde M este un metal bivalent de tipul Ba, Ca și Sr. În acești compuși se observă în principal suprapunerea funcțiilor de undă unielectronice de tipul $3d - (x^2 - y^2)$ și $2p - (x, y)$ ale ionilor de cupru și respectiv de oxigen. În consecință apare o structură de benzi suficient de complexă a spectrului unielectronic în jurul nivelului Fermi. La suprafața Fermi a acestor substanțe se observă suprapunerea diferitelor benzi de energie, și, prin urmare, supraconductorul trebuie să se caracterizeze printr-un număr corespunzător de benzi de energie interzisă ("gap"-ul supraconductor). În experiențele efectate de B. I. Verkin și colab. [13] folosind microscopia de contact, cu supraconductorul ceramic $\text{La}_{0,18}\text{Sr}_{0,2}\text{CuO}_4$, s-au observat două gap-uri energetice, a căror valoare relativă $2\Delta/k_B T_c$ este de 3,3 și 8,0.

Toate acestea au dat naștere acum mai bine de 30 de ani la un interes deosebit pentru studiul supraconductorilor multibandă, cunoscută în forma sa cea mai simplă ca teoria bibandă.

În anii premergători descoperirii supraconductivității de temperatură înaltă, s-a studiat de asemenea teoria supraconductivității cu benzi suprapuse în scopul elucidării proprietăților fizice observate în sistemele supraconductoare cu fermioni

grei [14].

De aceea, această trecere în revistă a problemelor fundamentale legate de teoria multibandă răspunde unui interes fizic mai larg.

Teoria multibandă presupune existența mai multor grupuri de electroni din apropierea suprafeței Fermi, care interacționează între ei prin intermediul diferitelor mecanisme, cum ar fi mecanismul interacției electron-fonon, care duce la o interacție efectivă electron-electron intra- și interbandă.

În modelul cu două benzi al supraconductorului se examinează formarea de perechi electronice singlet legate din cadrul unei benzi de energie și se consideră și posibilitatea tranziției perechilor între cele două benzi. Interacția interbandă electron-electron duce la o atracție suplimentară dintre electroni, independent de semnul interacției electronilor din cadrul aceleiași benzi. Aceasta din urmă poate să fie și repulsivă, dar datorită interacției electronice interbandă, este posibilă formarea de perechi electronice legate. În acest fel, canalele de difuzie interbandă ale electronilor pot duce la creșterea energiei de legătură a perechilor electronice și deci la creșterea temperaturii critice T_c .

Tocmai din acest motiv modelul multibandă al supraconductivității se examinează pentru a aduce clarificări în fizica supraconductorilor de temperatură înaltă. În afară de interacția electron-fonon și cea coulombiană, în acest caz există de asemenea canale suplimentare interbandă, de difuzie a electronilor pe impurități, plasmoni, magnoni, excitoni și pe alte excitații elementare. În particular, în supraconductorii de temperatură înaltă există un astfel de canal multibandă de interacție al electronilor de conducție cu oscilațiile de deformare și înclinare ale octaedrului format din ionii de cupru și oxigen în oxizii ceramici de dioxid de cupru. Aceste deformări joacă un rol foarte important în apariția supraconductivității de temperatură înaltă.

O altă particularitate foarte importantă a modelului multibandă constă în aceea că, datorită diferenței în lărgimea suprapunerii benzilor și a maselor efective ale electronilor, teoria ne dă posibilitatea să elucidăm modul cum contribuie aceste grupe diferite de electroni la efectele termodinamice și cinetice. Se știe că în benzile de conducție înguste și largi, densitățile electronice de stări diferă foarte mult. Din acest motiv, proprietățile termodinamice ale metalelor cu benzi de energie suprapuse sunt determinate în principal de grupul electronilor grei, în timp ce fermionii ușori din benzile largi, datorită mobilității lor mai mari, sunt mai efectivi în fenomenele cinetice. Tocmai acest rezultat bine cunoscut este foarte util în teoria supraconductorilor cu fermioni grei.

Modelul cu două benzi a reprezentat prima încercare de a transpune ideile teoriei microscopice ale supraconductivității crată de Bardeen, Cooper și Schrieffer (BCS) [6]-[8], N. N. Bogoliubov și colab. [1]-[5], la metalele reale, care au o structură de bandă a spectrului electronic. În metalele reale, o astfel de suprapunere de benzi în apropierea nivelului Fermi este destul de răspândită.

O serie de relații universale ale teoriei microscopice, ca, de exemplu, saltul relativ al căldurii specifice $\Delta C/C_n = 1,43$ și altele, nu mai sunt valabile în acest model. Mai mult, pe măsura analizării mai amănunțite a acestui model al supraconductivității, au apărut noi particularități, cum ar fi contribuția difuziei interbandă pe impurități nemagnetice la termodinamica supraconductorilor precum și altele. Unele dintre

aceste aspecte vor fi discutate în prezenta lucrare.

Prima încercare de a studia proprietățile metalelor reale pe baza modelului cu două benzi de energie care se suprapun în apropierea nivelului Fermi a fost făcută de V. A. Moskalenko [15, 16]. Elementele de matrice ale interacției dintre electroni în acest model s-au presupus a fi izotrope și de aceea acest model poate fi numit modelul izotrop cu două benzi. Mai târziu modelul bibandă al supraconductorului (pentru $T = T_c$) a fost dezvoltat în lucrarea [17].

Ideea modelului bibandă a fost folosită într-un mare număr de cercetări teoretice. O bibliografie amănunțită, care să reflecte această problemă, se poate găsi în lucrarea [18]. Au fost făcute și experiențe care să pună în evidență apariția supraconductivității în sisteme cu două benzi suprapuse. Multe din acestea au fost neconcludente. Prima folosire a modelului multibandă pentru interpretarea proprietăților supraconductorilor a fost făcută de N. V. Zavaritki [19].

Totuși cea mai clară confirmare experimentală a modelului bibandă, în perioada până la descoperirea supraconductivității de temperatură înaltă, a fost prezentată în lucrarea [20], în care s-a studiat caracteristica de tunelare a contactului $\text{SrTiO}_3:\text{NbIn}$ și s-au observat doi parametri de ordine ai acestei substanțe. Situația pare, la o primă examinare, destul de ciudată pentru folosirea modelului bibandă în acest caz deoarece, datorită constantei dielectrice foarte mari a titanatului de stronțiu, mecanismul de tunelare interbandă este slab, și de aceea chiar o concentrație mare nu duce la apariția supraconductivității unibandă. Prin creșterea concentrației de purtători, ceea ce se realizează adăugând indiu, se umple mai întâi prima bandă de conducție apoi cea de a doua. Acest lucru are loc pentru o concentrație de purtătorilor de ordinul $10^{19} \dots 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, pentru care SrTiO_3 este supraconductor. În experiență se observă parametrii de ordine ai celor două benzi.

1.2 Proprietățile termodinamice ale supraconductorilor puri cu benzi de energie suprapuse

După cum s-a reamintit mai sus, într-o serie de supraconductori, benzile de energie din apropierea suprafeței Fermi se suprapun, și, în acest fel, la fenomenul de supraconductivitate participă electroni din două sau mai multe benzi de energie permisă ale metalului. Astfel, de exemplu, în supraconductorii puri, care aparțin grupei principale a sistemului periodic al elementelor al lui Mendeleev, au loc suprapuneri între benzile de tip s și cele de tip p , la metalele grupului de tranziție apar suprapuneri ale benzilor de tip s și d sau a benzilor de tip s și f . În compușii supraconductori și în aliaje suprapunerea benzilor de energie este și mai accentuată. În continuare se va presupune că datorită câmpului cristalin toate benzile care se suprapun nu sunt degenerate și fiecare dintre ele se caracterizează printr-o densitate de stări electronice efectivă în apropierea nivelului Fermi. De asemenea, se introduc elementele de matrice efective ale interacției directe a electronilor prin intermediul fononilor. Acești parametri efectivi ai teoriei nu se calculează în cadrul acestei lucrări și valoarea lor trebuie luată din experiență.

Mai departe vom presupune că perechile Cooper legate se formează numai în cadrul aceleiași benzi de energie și electronii perechii au impulsurile și spinii opuși.

Pe baza ipotezelor făcute mai sus privind proprietățile benzilor de energie ale electronilor și caracteristicile de formare ale perechilor Cooper, putem scrie hamiltonianul model corespunzător al teoriei multi-bandă [15]

$$H = \sum_{n, \mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_n(\mathbf{k}) a_{n\mathbf{k}, \sigma}^+ a_{n\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{V} \sum_{n, m} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') a_{n\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{n-\mathbf{k}\downarrow}^+ a_{m-\mathbf{k}'\downarrow} a_{m\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (1.1)$$

unde n, m sunt indicii de bandă; \mathbf{k} este cvazi-impulsul; $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ este energia electronului din banda n ; σ este indicele de spin al electronului, care ia valorile \uparrow sau \downarrow ; $a_{n\mathbf{k}\sigma}^+, a_{n\mathbf{k}\sigma}$ sunt operatorii de creare și anihilare a electronilor de bandă; V este volumul sistemului. Mărimile $V_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ determină interacția efectivă directă a acestor electroni.

În aproximația legăturii slabe, examinată mai departe, neglijăm efectele de retardare determinate de schimbul de cuante ale câmpului fononic de către electroni. Următoarea simplificare consistă în neglijarea dependenței de cvazi-impuls a mărimilor V_{nm} . Din acest motiv va fi necesar să limităm sumarea după \mathbf{k} în formula (1.1) mărginindu-ne numai la un strat energetic din jurul suprafeței Fermi a benzii respective. Lărgimea acestui strat este determinată de valorile $2\hbar\omega_n$ pentru fiecare dintre benzi. În cazul cel mai simplu al mecanismului fononic al supraconductivității, intervalele de frecvență se consideră identice și având ordinul de mărime al frecvenței Debye ω_D . Mărimile V_{nm} , ω_n și densitatea electronică de stări la suprafața Fermi

$$N_n = \frac{1}{\hbar^3} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{S_n} \frac{dS_n}{|\nabla \varepsilon_n|}, \quad (1.2)$$

unde S_n este aria suprafeței Fermi a benzii n – se consideră constante fenomenologice ale teoriei. Ele pot fi determinate din comparația teoriei cu experimentul.

Pentru o suprafață Fermi sferică avem

$$N_n = \frac{m_n p_n^F}{2\pi^2 \hbar^3} = \frac{3}{4} \frac{n_n}{E_F}; \quad n_n = \frac{(p_n^F)^3}{3\pi^2 \hbar^3}. \quad (1.3)$$

Aici p_n^F este raza sferei Fermi pentru banda n ; n_n este densitatea numărului de electroni din banda n ; E_F fiind energia Fermi.

În modelul anizotrop cu mai multe benzi, studiat de M.E. Palistrant și V. I. Dediu [21, 22], mărimile V_{nm} au o slabă dependență de direcția cvazi-impulsurilor:

$$V_{n,m}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = V_{nm}(1 + a_n(\hat{\Omega}))(1 + a_m(\hat{\Omega}')),$$

unde $\hat{\Omega}$ și $\hat{\Omega}'$ sunt unghiurile care determină direcțiile lui \mathbf{k} și \mathbf{k}' respectiv. Mărimile $a_n(\hat{\Omega})$ satisfac condiția $\int d\hat{\Omega} a_n(\hat{\Omega}) = 0$. Hamiltonianul (1.1) în cazul a două benzi îl scriem sub forma ($a_{1\mathbf{k}\sigma} = a_{\mathbf{k}\sigma}$; $a_{2\mathbf{k}\sigma} = b_{\mathbf{k}\sigma}$)

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_1(k) a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_2(k) b_{\mathbf{k}\sigma}^+ b_{\mathbf{k}\sigma} - \\ & - \frac{V_{11}}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow} - \frac{V_{22}}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}\uparrow}^+ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ b_{-\mathbf{k}'\downarrow} b_{\mathbf{k}'\uparrow} - \\ & - \frac{V_{12}}{V} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ b_{-\mathbf{k}'\downarrow} b_{\mathbf{k}'\uparrow} + b_{\mathbf{k}\uparrow}^+ b_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}). \end{aligned} \quad (1.4)$$

Pentru studiul proprietăților stării supraconductoare trecem în (1.4) la noi amplitudini Fermi, care constă din suprapunerea electronilor și golurilor din apropierea suprafeței Fermi. Această trecere se realizează cu ajutorul formulelor transformării unitare a lui N.N. Bogoliubov [1]

$$\begin{aligned} a_{k\uparrow} &= u_k \alpha_{k1} + v_k \alpha_{k0}^+; & b_{k\uparrow} &= x_k \beta_{k1} + y_k \beta_{k0}^+; \\ a_{k\downarrow} &= u_k \alpha_{k0} - v_k \alpha_{-k1}^+; & b_{k\downarrow} &= x_k \beta_{k0} - y_k \beta_{k1}^+; \\ & v_k^2 + u_k^2 = 1; & & x_k^2 + y_k^2 = 1. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Mai departe introducem hamiltonianul liber al noilor cvazi-particule

$$H_0 = \sum_k [E_1(k)(\alpha_{k1}^+ \alpha_{k1} + \alpha_{k0}^+ \alpha_{k0}) + E_2(k)(\beta_{k0}^+ \beta_{k0} + \beta_{k1}^+ \beta_{k1})], \quad (1.6)$$

unde $E_i(k)$ este energia renormată a cvazi-particulelor, care va fi determinată mai jos împreună cu coeficienții transformării canonice (1.5). Potențialul termodinamic al sistemului poate fi ușor obținut în ordinul doi al teoriei perturbațiilor în raport cu perturbația mică $H - H_0$:

$$\begin{aligned} \Psi &= \Psi_0 + 2 \sum_k [\varepsilon_1(k)(u_k^2 - v_k^2) - E_1(k)] f_1(k) \\ &+ 2 \sum_k [\varepsilon_2(k)(x_k^2 - y_k^2) - E_2(k)] f_2(k) \\ &- \frac{V_{11}^2}{V} \left[\sum_k u_k v_k (1 - 2f_1(k)) \right]^2 \\ &- \frac{V_{22}^2}{V} \left[\sum_k x_k y_k (1 - 2f_2(k)) \right]^2 - 2 \frac{V_{12} V_{21}}{V} \times \\ &\times \left[\sum_k u_k v_k (1 - 2f_1(k)) \right] \sum_k x_k y_k (1 - 2f_2(k)). \end{aligned} \quad (1.7)$$

Aici

$$\Psi_0 = -\frac{2}{\beta} \sum_{ik} \ln(1 + e^{-\beta E_i(k)}) \quad (1.8)$$

$$f_i(k) = (e^{\beta E_i(k)} + 1)^{-1}; \quad \beta = (k_B T)^{-1}; \quad (1.9)$$

Ψ_0 este energia liberă a cvazi-particulelor fără interacție; f_i funcția lor de distribuție Fermi. Mărimile (u, v) (x, y) și E_i se calculează din minimul energiei libere (1.7)

$$\frac{\delta \Psi}{\delta u_k} = \frac{\delta \Psi}{\delta x_k} = \frac{\delta \Psi}{\delta E_i} = 0 \quad (1.10)$$

Ca rezultat al calculului obținem

$$\begin{aligned} u_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_1(k)}{E_1(k)} \right) & v_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_1(k)}{E_1(k)} \right) \\ x_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_2(k)}{E_2(k)} \right) & y_k^2 &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_2(k)}{E_2(k)} \right) \end{aligned} \quad (1.11)$$

$$E_i(k) = \sqrt{\varepsilon_i^2(k) + \Delta_i^2}.$$

Aici Δ_i este gap-ul de energie în spectrul noilor cvaziparticule. Gap-ul de energie sau banda de energie interzisă supraconductoare, se determină din ecuațiile ($V_{12} = V_{21}$)

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \frac{V_{11}}{2V} \Delta_1 \sum_k \frac{1}{E_1(k)} \operatorname{th} \left(\frac{\beta E_1(k)}{2} \right) + \frac{V_{12}}{2V} \Delta_2 \sum_k \frac{1}{E_2(k)} \operatorname{th} \left(\frac{\beta E_2(k)}{2} \right); \\ \Delta_2 &= \frac{V_{12}}{2V} \Delta_1 \sum_k \frac{1}{E_1(k)} \operatorname{th} \left(\frac{\beta E_1(k)}{2} \right) + \frac{V_{22}}{2V} \Delta_2 \sum_k \frac{1}{E_2(k)} \operatorname{th} \left(\frac{\beta E_2(k)}{2} \right). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Cu ajutorul expresiilor deduse, potențialul termodinamic capătă forma

$$\Psi = \sum_{i=1}^2 \sum_k [\varepsilon_i(k) - E_i(k)] - \frac{2}{\beta} \sum_{i=1}^2 \sum_k \ln[1 + e^{-\beta E_i(k)}] + V(\hat{\Delta}^+ V^{-1} \hat{\Delta}) \quad (1.13)$$

unde matricea de interacție \hat{V} și inversa ei \hat{V}^{-1} au, pentru $V_{11}V_{22} \neq V_{12}V_{21}$, forma

$$\hat{V} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix}; \quad \hat{V}^{-1} = \frac{1}{(V_{11}V_{22} - V_{12}V_{21})} \begin{pmatrix} V_{22} & -V_{12} \\ -V_{21} & V_{11} \end{pmatrix}$$

$\hat{\Delta}$, $\hat{\Delta}^+$ sunt mărimi cu două componente:

$$\hat{\Delta} = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_2 \end{pmatrix}; \quad \hat{\Delta}^+ = (\Delta_1, \Delta_2).$$

Soluții nebanale pentru gap-ul Δ_i există numai pentru temperaturi sub temperatura critică ($T < T_c$). Este important să observăm că pentru o interacție interbenzi diferită de zero ($V_{12} \neq 0$) aceste benzi interzise (gap-uri) apar simultan în ambele benzi electronice.

Imediat sub T_c ($T \lesssim T_c$) valoarea lui Δ_i poate fi dezvoltată în serie după puterile parametrului mic $t = 1 - (T/T_c)$: $\Delta_i = C_i t^{1/2} + C_i^{(1)} t^{3/2} + \dots$. În acest caz ecuațiile liniarizate (1.12) capătă forma

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{V_{11}}{2V} C_1 \sum_k \frac{\operatorname{th} \left(\frac{\beta_c \varepsilon_1(k)}{2} \right)}{\varepsilon_1(k)} + \frac{V_{12}}{2V} C_2 \sum_k \frac{\operatorname{th} \left(\frac{\beta_c \varepsilon_2(k)}{2} \right)}{\varepsilon_2(k)}; \\ C_2 &= \frac{V_{12}}{2V} C_1 \sum_k \frac{\operatorname{th} \left(\frac{\beta_c \varepsilon_1(k)}{2} \right)}{\varepsilon_1(k)} + \frac{V_{22}}{2V} C_2 \sum_k \frac{\operatorname{th} \left(\frac{\beta_c \varepsilon_2(k)}{2} \right)}{\varepsilon_2(k)}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

După efectuarea integrării obținem

$$C_n = \sum_{m=1}^2 V_{nm} N_m C_m \ln \left(\frac{2V_E \beta_c \hbar \omega_m}{\pi} \right). \quad (1.15)$$

Aceste ecuații determină temperatura critică T_c și raportul C_1/C_2 . Pentru simplificarea calculului înlocuim frecvențele ω_1 și ω_2 cu frecvența Debye ω_D . Atunci, pe baza formulei (1.14) în aproximația legăturii slabe $\beta_c \hbar \omega_D \gg 1$, obținem următoarea ecuație pentru determinarea lui T_c :

$$1 - b\zeta + a\zeta^2 = 0;$$

$$\zeta = \int_0^{\hbar \omega_D} \frac{d\varepsilon}{\varepsilon} \operatorname{th} \left(\frac{\beta_c \varepsilon}{2} \right) \approx \ln \left(\frac{2\gamma_E \hbar \omega_D}{\pi} \right).$$

Aici am folosit notațiile: $\gamma_E = e^C$; $C = 0,5772\dots$ care este numărul lui Euler, și

$$a = N_1 N_2 (V_{11} V_{22} - V_{12} V_{21}); \quad b = N_1 V_{11} + N_2 V_{22}. \quad (1.16)$$

Pe baza acestor formule obținem

$$k_B T_c \simeq \frac{2\gamma_E}{\pi} \hbar \omega_D e^{-\zeta_{\pm}} \simeq 1,13 \hbar \omega_D e^{-\zeta_{\pm}}, \quad (1.17)$$

unde

$$\zeta_{\pm} = \frac{1}{2a} \left[(N_1 V_{11} + N_2 V_{22}) \pm \sqrt{(N_1 V_{11} - N_2 V_{22})^2 + 4N_1 N_2 V_{12} V_{21}} \right]. \quad (1.18)$$

Deoarece expresia de sub radical din (1.18) este pozitivă pentru orice valori ale constantelor V_{nm} , atunci singura restricție pentru aceste mărimi este condiția ca ζ_{\pm} să fie pozitivă. Acesta este criteriul de supraconductivitate în modelul considerat. Observăm că T_c este diferit de zero în lipsa interacției intrabandă ($V_{nn} = 0$)

$$k_B T_c \simeq 1,13 \exp(-1/\sqrt{N_1 N_2 V_{12} V_{21}})$$

și nu depinde de semnul interacției interbandă. Pentru $b > 0$ și $a < 0$ trebuie să luăm pentru ζ semnul inferior, în timp ce pentru $b > 0$ și $a > 0$ ambele semne la ζ sunt posibile și trebuie să luăm pe acela dintre ele care duce la valoarea cea mai mare a lui T_c . Pentru interacția interbandă egală cu zero ($V_{12} = 0$), când $N_m V_{mm} > 0$ există două temperaturi critice diferite pentru tranziția în fiecare dintre benzi:

$$k_B T_{1c} = 1,13 \exp[-1/(N_1 V_{11})]; \quad k_B T_{2c} = 1,13 \exp[-1/(N_2 V_{22})].$$

Prezența chiar a unei slabe interacții dintre benzi duce la apariția sau dispariția simultană a supraconductivității în ambele benzi. Pentru o interacție repulsivă dintre benzi ($b < 0$) criteriul de apariție a supraconductivității poate fi îndeplinit mai mult sau mai puțin, dacă $a < 0$, adică pentru $V_{12}^2 > V_{11} V_{22}$.

Să deducem de asemenea raportul mărimilor Δ_i în punctul critic:

$$z_c = \left(\frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right)_c = \frac{C_1}{C_2} = \frac{1 - N_2 V_{22} \zeta}{N_1 V_{12} \zeta} \frac{N_2 V_{21} \zeta}{1 - N_1 V_{11} \zeta}. \quad (1.19)$$

Valoarea derivatelor $d\Delta_i/d\beta$ în punctul critic are forma

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\Delta_1^2}{d\beta} \right)_c &= \frac{F}{\beta_c^3} \frac{(b - 2a\zeta)(1 - a\zeta/N_1 V_{11})}{N_1 V_{11} \left(1 - \frac{a\zeta}{N_1 V_{11}}\right)^2 + \frac{N_2 V_{22}^2}{V_{11}} \left(1 - \frac{a\zeta}{N_2 V_{22}}\right)^2}, \\ \left(\frac{d\Delta_2^2}{d\beta} \right)_c &= \frac{F}{\beta_c^3} \frac{(b - 2a\zeta)(1 - a\zeta/N_2 V_{22})}{N_2 V_{22} \left(1 - \frac{a\zeta}{N_2 V_{22}}\right)^2 + \frac{N_1 V_{11}^2}{V_{22}} \left(1 - \frac{a\zeta}{N_1 V_{11}}\right)^2}, \\ F &= \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \cong 9,39. \end{aligned} \quad (1.20)$$

Benzile de energie interzise supraconductoare Δ_i în acest domeniu de temperatură sunt egale cu

$$\Delta_i^2 \simeq \left(\frac{d\Delta_i^2}{d\beta} \right)_c (\beta - \beta_c) + \dots \quad (1.21)$$

Să trecem acum la calculul căldurii specifice electronice. În acest scop să calculăm entropia sistemului S . Pe baza relației (1.7) și a ecuațiilor (1.10) obținem expresia

$$S = - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial T} \right)_{\Delta_i} = 2k_B \sum_{i=1}^2 \ln \left(1 + e^{-\beta E_i(k)} \right) + 2\beta k_B \sum_{i=1}^2 \sum_k E_i(k) f_i(k), \quad (1.22)$$

care are forma entropiei cvaziparticulelor Fermi libere cu energiile $E_i(k)$

$$S = -2k_B \sum_{i=1}^2 \sum_k \left[f_i(k) \ln f_i(k) + (1 - f_i(k)) \ln (1 - f_i(k)) \right],$$

unde factorul 2 rezultă din sumarea după indicele de spin. Evident, în punctul critic entropia nu are salt

$$[S - S_n]_{T_c} = 0,$$

ceea ce evidențiază lipsa unei tranziții de fază de ordinul unu. Căldura specifică electronică C a supraconductorului are forma

$$VC = T \frac{dS}{dT} = \beta^2 \sum_{i=1}^2 \sum_k \left[2E_i^2(k) + \beta \frac{d\Delta_i^2}{d\beta} \right] f_i(k) (1 - f_i(k)). \quad (1.23)$$

Aceeași mărime pentru starea normală a unui metal cu două benzi este egală cu

$$C_n = \frac{2\beta^2}{V} \sum_{i=1}^2 \sum_k \varepsilon_i^2(k) \frac{e^{\beta|\varepsilon_i(k)|}}{(1 + e^{\beta|\varepsilon_i(k)|})^2} = \gamma_e T; \quad (1.24)$$

$$\gamma_e = \frac{2\pi^2}{3} k_B^2 \sum_{i=1}^2 N_i.$$

În punctul critic are loc saltul căldurii specifice

$$[C - C_n]_c = \beta_c^2 \sum_{i=1}^2 N_i \left(\frac{d\Delta_i^2}{d\beta} \right)_c =$$

$$= \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} \frac{1}{\beta_c} \frac{[N_1 V_{12}^2 + N_2 (V_{22} - a\zeta/N_2)^2]^2}{[N_1 V_{12}^4 + N_2 (V_{22} - (a/N_2)\zeta)^4]}, \quad (1.25)$$

ceea ce evidențiază existența unei tranziții de fază de speța doua în punctul critic. Pe baza ecuațiilor (1.24) și (1.25) obținem pentru saltul relativ al căldurii specifice

$$\left[\frac{C - C_n}{C_n} \right] = \frac{12}{7\zeta(3)} A_1(z_c^2) = 1,43 A_1(z_c^2), \quad (1.26)$$

unde

$$A_1(z_c^2) = \frac{(N_1 + N_2/z_c^2)^2}{(N_1 + N_2/z_c^4)} \leq 1; \quad z_c = \left(\frac{\Delta_1}{\Delta_2} \right)_c. \quad (1.27)$$

Întrucât $A_1(z_c^2)$ este mai mic decât unu, rezultă că în sistemele cu două benzi saltul relativ al căldurii specifice în punctul critic trebuie să fie mai mic decât în supraconductorii izotropi cu o singură bandă, în care acest salt este egal cu constanta specifică 1,43 a teoriei BCS.

Să deducem de asemenea valoarea câmpului magnetic critic, necesar pentru distrugerea stării supraconductoare în apropierea temperaturii critice:

$$\frac{H_c^2}{8\pi} = \frac{\Psi_n - \Psi}{V} = \frac{(C - C_n)_c}{2} k_B T_c t^2; \quad t = 1 - \frac{T}{T_c}. \quad (1.28)$$

Să examinăm acum cazul limită al temperaturii nule. În acest caz potențialul termodinamic trece în energia stării fundamentale E_0 :

$$E_0 = \sum_{i=1}^2 \sum_k [\varepsilon_i(k) - E_i(k)] +$$

$$+ V \frac{V_{11}\Delta_2^2(0) + V_{22}\Delta_1^2(0) - 2V_{12}\Delta_1(0)\Delta_2(0)}{V_{11}V_{22} - V_{12}^2}. \quad (1.29)$$

Aici $\Delta_i(0)$ sunt valorile gap-urilor la temperatură nulă. Aceste valori se determină din ecuațiile (1.12), în care se consideră că $T = 0$:

$$\begin{aligned}\Delta_1(0) &= \frac{V_{11}}{2V} \Delta_1(0) \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1^2(k) + \Delta_1^2(0)}} + \frac{V_{12}}{2V} \Delta_2(0) \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_2^2(k) + \Delta_2^2(0)}}, \\ \Delta_2(0) &= \frac{V_{22}}{2V} \Delta_2(0) \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_2^2(k) + \Delta_2^2(0)}} + \frac{V_{12}}{2V} \Delta_1(0) \sum_k \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_1^2(k) + \Delta_1^2(0)}}.\end{aligned}\tag{1.30}$$

Efectuând integrarea în spațiul k și considerând că $\Delta_i(0) \ll \hbar\omega_D$, obținem ecuațiile simplificate

$$\begin{aligned}\Delta_1(0) &= N_1 V_{11} \Delta_1(0) \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_1(0)} \right) + N_2 V_{12} \Delta_2(0) \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_2(0)} \right); \\ \Delta_2(0) &= N_1 V_{12} \Delta_1(0) \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_1(0)} \right) + N_2 V_{22} \Delta_2(0) \ln \left(\frac{2\hbar\omega_D}{\Delta_2(0)} \right).\end{aligned}\tag{1.31}$$

Notăm cu $z(0)$ raportul gap-urilor $\Delta_1(0)/\Delta_2(0)$. Atunci pe baza formulelor (1.31) avem

$$\Delta_1(0) = 2\hbar\omega_D e^{-\xi(0)}; \quad \Delta_2(0) = \Delta_1(0)/z(0),\tag{1.32}$$

unde

$$\begin{aligned}\xi(0) &= \frac{V_{22}N_2 - V_{12}N_2/z(0)}{a}; \\ a \ln z(0) &= N_1 V_{11} - N_2 V_{22} + \frac{V_{12}N_2}{z(0)} - N_1 V_{12}z(0).\end{aligned}\tag{1.33}$$

Ultima ecuație se rezolvă ușor dacă ne situăm în aproximația legăturii slabe. În acest caz aproximația de zero pentru $z(0)$ rezultă din egalitatea cu zero a membrului drept al primei ecuații (1.33). Totuși, având în vedere că $\xi(0)$ se află la exponent, $z(0)$ trebuie determinat considerând corecțiile liniare, astfel că acestea pot modifica factorul preexponențial din (1.32). Obținem fără dificultate $z(0) \simeq z_c + z'$:

$$z' \simeq -\frac{a \ln z_c}{V_{12}(N_1 + N_2/z_c^2)}.\tag{1.34}$$

Prin urmare,

$$\xi(0) = \xi_c + \frac{V_{12}N_2}{az_c^2} z',\tag{1.35}$$

de unde rezultă formulele finale pentru gap-uri:

$$\begin{aligned}\Delta_1(0) &= 2\hbar\omega_D (z_c)^{\frac{N_2}{N_2+N_1z_c^2}} e^{-\xi_c}; \\ \Delta_2(0) &= 2\hbar\omega_D (z_c)^{\frac{N_1z_c^2}{N_2+N_1z_c^2}} e^{-\xi_c}.\end{aligned}\tag{1.36}$$

Trecerea metalului în stare supraconductoare la $T = 0$ se face cu descreșterea energiei:

$$E_0 - E_n(0) = -\frac{V}{2} \sum_n N_n \Delta_n^2(0).\tag{1.37}$$

De aici obținem pentru câmpul magnetic critic la $T = 0$ următoarea expresie

$$H_c^2(0) = 4\pi \sum_n N_n \Delta_n^2(0). \quad (1.38)$$

Pe baza ecuației (1.36) avem

$$\frac{E_0 - E_n(0)}{V} = -\frac{1}{2} (2\hbar\omega_D e^{-\xi_c})^2 z_c (N_1 + N_2/z_c^2) z_c^{\frac{N_2 - N_1/z_c^2}{N_2 + N_1/z_c^2}}.$$

Studiul proprietăților sistemului care se va face în secțiunea următoare se bazează pe metoda funcțiilor Green de temperatură.

1.3 Metoda funcțiilor Green de temperatură

Ca funcții de bază în metoda celei de a doua cuantificări vom lua funcțiile Bloch $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$ și scriem operatorii electronici de câmp $\hat{\psi}(\mathbf{x})$ și $\hat{\psi}^+(\mathbf{x})$ sub forma

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_\sigma(\mathbf{x}) &= \sum_{n,\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \hat{a}_{n\mathbf{k}\sigma} = \sum_n \hat{\psi}_n(\mathbf{x}, \sigma); \\ \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.39)$$

Cu ajutorul amplitudinilor $\hat{\psi}_{n\sigma}(\mathbf{x})$, $\hat{\psi}_{n\sigma}^+(\mathbf{x})$ introducem funcțiile Green de temperatură [23]

$$\begin{aligned} G_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= -\langle T \hat{\psi}_n(x, \sigma) \hat{\psi}_m^+(x', \sigma') \rangle; \\ F_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= -\langle T \hat{\psi}_n(x, \sigma) \hat{\psi}_m(x', \sigma') \rangle; \\ \tilde{F}_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= -\langle T \hat{\psi}_n^+(x, \sigma) \hat{\psi}_m(x', \sigma') \rangle, \end{aligned} \quad (1.40)$$

unde $\hat{\psi}(x)$ și $\hat{\psi}^+(x)$ sunt operatori în reprezentarea Heisenberg:

$$\hat{\psi}(x) = e^{\tau H} \hat{\psi}(\mathbf{x}) e^{-\tau H}; \quad \hat{\psi}^+(x) = e^{\tau H} \hat{\psi}^+(\mathbf{x}) e^{-\tau H}; \quad (1.41)$$

$x = (\mathbf{x}, \tau)$; $0 \leq \tau \leq \beta$; $\tau = (k_B T)^{-1}$; H este hamiltonianul total al sistemului. Medierea statistică în (1.40), notată prin parantezele unghiulare, se face cu ajutorul distribuției macrocanonice a lui Gibbs cu hamiltonianul total; T este operatorul ordonării cronologice în raport cu variabila τ .

În lipsa interacțiilor de spin funcțiile Green au structura:

$$\begin{aligned} G_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= \delta_{\sigma,\sigma'} G_{nm}(x, x'); \\ F_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= g_{\sigma,\sigma'} F_{nm}(x, x'); \\ \tilde{F}_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= -g_{\sigma,\sigma'} \tilde{F}_{nm}(x, x'); \\ g_{\sigma,\sigma'} &= \delta_{\sigma,-\sigma'} (\delta_{\sigma\uparrow} - \delta_{\sigma\downarrow}) = i(\tau_2)_{\sigma,\sigma'} = -g_{\sigma',\sigma}, \end{aligned} \quad (1.42)$$

unde τ_2 este matricea Pauli. Dependența de spin a funcțiilor F și \tilde{F} reflectă caracterul de singlet al perechilor electronice.

Să exprimăm acum hamiltonianul total (1.1) al sistemului prin operatorii

$$\hat{\psi}_n(\mathbf{x}, \sigma), \quad \hat{\psi}_n^+(\mathbf{x}, \sigma)$$

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_{\text{int}}; \quad H_0 = \sum_{n\sigma} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_n^+(\mathbf{x}, \sigma) H_0(-i\hbar\nabla) \hat{\psi}_n(\mathbf{x}, \sigma); \\ H_{\text{int}} &= -\frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{nm} V_{nm} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}_n^+(\mathbf{x}, \sigma) \hat{\psi}_n^+(\mathbf{x}, \sigma') \hat{\psi}_m(\mathbf{x}, \sigma') \hat{\psi}_m(\mathbf{x}, \sigma). \end{aligned} \quad (1.43)$$

Aici H_0 este hamiltonianul unielectronic al electronilor de bandă, luat relativ la energia Fermi.

Să scriem ecuațiile de mișcare pentru operatorii $\hat{\psi}_n$ și $\hat{\psi}_m^+$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\psi}_n(x, \sigma)}{\partial \tau} &= [H, \hat{\psi}_n(x, \sigma)] = -(H_0(x) - \mu) \hat{\psi}_n(x, \sigma) + \\ &+ \int d\mathbf{x}_1 \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \sum_{n_1, \sigma_1} V_{nn_1} \hat{\psi}_n(x_1, \sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1, \sigma_1) \psi_{n_1}(x_1, \sigma) \\ \frac{\partial \hat{\psi}_n^+(x, \sigma)}{\partial \tau} &= [H, \hat{\psi}_n^+(x, \sigma)] = -(H_0(x) - \mu) \hat{\psi}_n^+(x, \sigma) - \\ &- \int d\mathbf{x}_1 \delta(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \sum_{n_1, \sigma_1} V_{nn_1} \hat{\psi}_n(x_1, \sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}^+(x_1, \sigma_1) \psi_{n_1}(x_1, \sigma) \end{aligned} \quad (1.44)$$

unde

$$\begin{aligned} x_1 &= (\mathbf{x}_1, \tau); \\ \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') &= \sum_{\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}') \end{aligned} \quad (1.45)$$

iar funcția $\delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ este partea funcției δ -Dirac referitoare la banda n și are proprietatea

$$\sum_n \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1); \quad \int d\mathbf{x}_1 \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \psi_{m\mathbf{k}}(\mathbf{x}_1) = \delta_{nm} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}),$$

care rezultă din ortogonalitatea și completitudinea funcțiilor Bloch $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x})$. În cele ce urmează funcția δ_n se va referi la funcția δ -Dirac care aparține benzii electronice n . Pe baza celor de mai sus obținem următoarea ecuație de mișcare pentru funcțiile

Green:

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + H_0(-i\hbar\nabla) - \mu \right] G_{nm}(x\sigma, x'\sigma') + \int d\mathbf{x}_1 \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \times \\
& \times \sum_{n_1, \sigma_1} V_{nn_1} \left\langle \mathbb{T} \hat{\psi}_n(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_m(x'\sigma') \right\rangle = \\
& = -\delta_{nm} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \delta(\tau - \tau'); \\
& \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + H_0(-i\hbar\nabla) - \mu \right] F_{nm}(x\sigma, x'\sigma') + \int d\mathbf{x}_1 \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \times \\
& \times \sum_{n_1, \sigma_1} V_{nn_1} \left\langle \mathbb{T} \hat{\psi}_n(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_m(x'\sigma') \right\rangle = 0; \\
& \left[\frac{\partial}{\partial \tau} - H_0(-i\hbar\nabla) + \mu \right] \tilde{F}_{nm}(x\sigma, x'\sigma') + \int d\mathbf{x}_1 \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) \times \\
& \times \sum_{n_1, \sigma_1} V_{nn_1} \left\langle \mathbb{T} \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_n(x_1\sigma) \hat{\psi}_m(x'\sigma') \right\rangle = 0.
\end{aligned} \tag{1.46}$$

În aproximația câmpului self-consistent funcțiile Green biparticulă se factorizează. În acești termeni, renormarea potențialului chimic se omite. Mai departe se vor folosi aproximațiile:

$$\begin{aligned}
& \left\langle \mathbb{T} \hat{\psi}_n(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_m(x'\sigma') \right\rangle \cong \\
& \cong - \left\langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \right\rangle \tilde{F}_{nm}(x_1\sigma_1, x'\sigma'); \\
& \left\langle \mathbb{T} \hat{\psi}_n(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_m(x'\sigma') \right\rangle \cong \\
& \cong \left\langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \right\rangle G_{nm}(x'\sigma', x_1\sigma_1); \\
& \left\langle \mathbb{T} \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_n(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_m(x'\sigma') \right\rangle \cong \\
& \cong - \left\langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \right\rangle G_{mn}(x_1\sigma_1, x'\sigma').
\end{aligned} \tag{1.47}$$

Funcțiile Green introduse depind de diferența variabilelor τ , și, prin urmare, după prelungirea periodică $G(\tau) = -G(\tau + \beta)$ [23] ele pot fi dezvoltate în serie Fourier:

$$\begin{aligned}
G_{nm}(x\sigma, x'\sigma') &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_l} G_{nm}(x\sigma, x'\sigma' | \omega_l) \exp[-i\omega_l(\tau - \tau')]; \\
\omega_l &= \frac{\pi}{\beta}(2l + 1).
\end{aligned} \tag{1.48}$$

Cu ajutorul celor discutate mai sus, ecuațiile (1.46) pot fi reprezentate sub forma

$$\begin{aligned}
& [-i\omega_r + H_0(-i\hbar\nabla) - \mu]G_{nm}(\mathbf{x}\sigma, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_r) - \int d\mathbf{x}_1\delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \\
& \times \sum_{n_1\sigma_1} V_{nn_1} \langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \rangle \tilde{F}_{nm}(\mathbf{x}_1\sigma_1, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_r) = \\
& = -\delta_{nm}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}'); \\
& [-i\omega_r + H_0(-i\hbar\nabla) - \mu]F_{nm}(\mathbf{x}\sigma, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_r) + \int d\mathbf{x}_1\delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \times \\
& \times \sum_{n_1\sigma_1} V_{nn_1} \langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \rangle G_{mn}(\mathbf{x}'\sigma', \mathbf{x}_1\sigma_1|-\omega_r) = 0; \\
& [-i\omega_r - H_0(-i\hbar\nabla) + \mu]\tilde{F}_{nm}(x\sigma, x'\sigma'|\omega_r) + \int d\mathbf{x}_1\delta_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) \times \\
& \times \sum_{n_1\sigma_1} V_{nn_1} \langle \hat{\psi}_{n_1}(x, \sigma) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \rangle G_{mn}(\mathbf{x}_1\sigma_1, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_r) = 0.
\end{aligned} \tag{1.49}$$

Să introducem notațiile

$$\begin{aligned}
\Delta_{n\sigma_1\sigma}(\mathbf{x}_1) &= \sum_{n_1} V_{nn_1} \langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \rangle = \\
&= \sum_{n_1} V_{nn_1} F_{n_1n_1}(x_1\sigma, x_1+0, \sigma_1) = \\
&= \sum_{n_1} \frac{V_{nn_1}}{\beta} \sum_{\omega_r} F_{n_1n_1}(\mathbf{x}_1\sigma, \mathbf{x}_1\sigma_1|\omega_r) e^{i\omega_r 0^+}; \\
\Delta_{n\sigma_1\sigma}^*(\mathbf{x}_1) &= \sum_{n_1} V_{nn_1} \langle \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma) \hat{\psi}_{n_1}(x_1\sigma_1) \rangle = \\
&= \sum_{n_1} V_{nn_1} \tilde{F}_{n_1n_1}(x_1\sigma_1, x_1+0, \sigma) = \\
&= \sum_{n_1} \frac{V_{nn_1}}{\beta} \sum_{\omega_r} \tilde{F}_{n_1n_1}(\mathbf{x}_1\sigma_1, \mathbf{x}_1\sigma|\omega_r) e^{i\omega_r 0^+}.
\end{aligned} \tag{1.50}$$

Ecuațiile (1.50) sunt ecuațiile de selfconsistență, care determină parametrii de ordine $\Delta_n(\mathbf{x})$ ai sistemului împreună cu funcțiile Green ale supraconductorului.

Datorită funcțiilor Bloch aceste mărimi au, pe lângă dependența spațială lent variabilă, determinată de câmpurile externe, care pot fi conținute în H_0 , și oscilații rapide la scară atomică dar care nu prezintă interes pentru descrierea unui fenomen cuantic macroscopic, cum este supraconductivitatea. De aceea aceste oscilații trebuie excluse din studiu, făcând o netezire a variabilelor dinamice. Deoarece în lipsa câmpului extern, examinat aici, parametrii de ordine $\Delta_n(\mathbf{x})$ au numai variații atomice, îi vom înlocui cu mărimile mediate spațial:

$$\Delta_{n\sigma\sigma'} = \int \frac{d\mathbf{x}}{V} \Delta_{n\sigma\sigma'}(\mathbf{x}). \tag{1.51}$$

În afară de aceasta, vom considera că, alături de $\delta_n(\mathbf{x}_1, \mathbf{x})$, funcția Green de forma $G_{nm}(x_1, x')$ poate fi înlocuită cu $G_{nm}(x, x')$. Luând de asemenea în considerare dependența de spin (1.42), vom putea scrie egalitățile

$$\Delta_{n\sigma_1\sigma} = \Delta_n g_{\sigma\sigma_1}; \quad \Delta_{n\sigma_1\sigma}^* = \Delta_n^* g_{\sigma\sigma_1}. \quad (1.52)$$

Ca rezultat al aproximațiilor făcute sistemul de ecuații (1.49) capătă forma mult mai simplă:

$$\begin{aligned} & [-i\omega_r + H_0(-i\hbar\nabla) - \mu] G_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|\omega_r) - \\ & - \Delta_n \tilde{F}_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|\omega_r) = -\delta_{nm} \delta_n(\mathbf{x}, \mathbf{x}'); \\ & [-i\omega_r + H_0(-i\hbar\nabla) - \mu] F_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|\omega_r) + \Delta_n G_{nm}(\mathbf{x}', \mathbf{x}|\omega_r) = 0; \\ & [-i\omega_r - H_0(-i\hbar\nabla) + \mu] \tilde{F}_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|\omega_r) - \Delta_n^* G_{nm}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'|\omega_r) = 0. \end{aligned} \quad (1.53)$$

Reamintim că dependența de coordonate a funcției Green (1.40) are forma

$$\begin{aligned} G_{nm}(\mathbf{x}\sigma, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_l) &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \psi_{m\mathbf{k}'}^*(\mathbf{x}') G_{nm}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'|\omega_l); \\ F_{nm}(\mathbf{x}\sigma, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_l) &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \psi_{m\mathbf{k}'}(\mathbf{x}') F_{nm}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'|\omega_l); \\ \tilde{F}_{nm}(\mathbf{x}\sigma, \mathbf{x}'\sigma'|\omega_l) &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \psi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{x}) \psi_{m\mathbf{k}'}(\mathbf{x}') \tilde{F}_{nm}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'|\omega_l). \end{aligned} \quad (1.54)$$

Trecând în (1.53) la reprezentarea cvazi-impulsului, obținem

$$\begin{aligned} & [-i\omega_l + \varepsilon_n(k)] G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) - \Delta_n \tilde{F}_{nm}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) = -\delta_{nm} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}; \\ & [-i\omega_l + \varepsilon_n(k)] F_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) + \Delta_n G_{nm}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}'|\omega_l) = 0; \\ & [-i\omega_l - \varepsilon_n(k)] \tilde{F}_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) - \Delta_n^* G_{nm}(-\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) = 0. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Aceste ecuații pot fi obținute direct din hamiltonianul (1.1) fără folosirea reprezentării de configurații și dezvoltarea ulterioară a funcției Green după funcțiile Bloch. Acest procedeu este necesar pentru examinarea influenței impurităților asupra proprietăților supraconductorilor. Problema respectivă va fi examinată în capitolul următor. Pe baza ecuațiilor (1.55) rezultă proprietățile

$$\begin{aligned} G_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) &= \delta_{nm} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G_n(\mathbf{k}|\omega_l); \\ F_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) &= \delta_{nm} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} F_n(\mathbf{k}|\omega_l); \\ \tilde{F}_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega_l) &= \delta_{nm} \delta_{\mathbf{k}, -\mathbf{k}'} \tilde{F}_n(\mathbf{k}|\omega_l). \end{aligned} \quad (1.56)$$

Pentru ultimele funcții scriem sistemul de ecuații pentru $\omega = \omega_l$:

$$\begin{aligned} & [-i\omega + \varepsilon_n(k)] G_n(\mathbf{k}|\omega) - \Delta_n \tilde{F}_n(\mathbf{k}|\omega) = -1; \\ & [-i\omega + \varepsilon_n(k)] F_n(\mathbf{k}|\omega) + \Delta_n G_n(-\mathbf{k}|\omega) = 0; \\ & [-i\omega - \varepsilon_n(k)] \tilde{F}_n(\mathbf{k}|\omega) - \Delta_n^* G_n(\mathbf{k}|\omega) = 0, \end{aligned} \quad (1.57)$$

a cărui soluție are forma

$$\begin{aligned} G_n(\mathbf{k}|\omega) &= -\frac{(i\omega + \varepsilon(k))}{\omega^2 + E_n^2(k)}, \\ F_n(\mathbf{k}|\omega) &= \frac{\Delta_n}{\omega^2 + E_n^2(k)}, \\ \tilde{F}_n(\mathbf{k}|\omega) &= \frac{\Delta_n^*}{\omega^2 + E_n^2(k)}. \end{aligned} \quad (1.58)$$

Aceste ecuații trebuie completate cu ecuațiile de selfconsistență. Efectuând în (1.50) simplificările indicate, obținem ecuațiile de selfconsistență

$$\Delta_n = \sum_{n_1} V_{nn_1} \frac{1}{\beta V} \sum_{\mathbf{k}\omega} \frac{\Delta_{n_1}}{\omega^2 + E_{n_1}^2(k)}. \quad (1.59)$$

Dacă în expresia (1.59) facem sumarea după ω , atunci obținem sistemul de ecuații cunoscut deja din (1.12) pentru gap-urile energetice Δ_1 și Δ_2 .

Totuși pentru calculele următoare este mai comod să facem mai întâi sumarea după \mathbf{k} . Pentru aceasta vom transforma suma după \mathbf{k} în limitele benzii n în integrală conform formulei

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} f_n(\varepsilon(k)) = N_n \int_{-\hbar\omega_n}^{\hbar\omega_n} f_n(\varepsilon) d\varepsilon_n. \quad (1.60)$$

Deoarece convergența integralei respective după energie este suficient de bună și contribuția termenilor de ordinul $\Delta/\hbar\omega_n$ este neimportantă în aproximația legăturii slabe, limitele de integrare în (1.60) pot fi extinse la infinit. În acest caz avem

$$\Delta_n = \sum_{n_1} V_{nn_1} N_{n_1} \sum_{\omega_r} \frac{\Delta_{n_1}}{\sqrt{\Delta_{n_1}^2 + \omega_r^2}}. \quad (1.61)$$

Sumarea după ω_r în (1.61) trebuie limitată la o mărime de ordinul $\omega_{n_1} \simeq \omega_D$, deoarece tocmai în acest interval s-a neglijat dependența de frecvență a interacției efective V_{nm} . În afară de aceasta pentru calculul sumei din partea dreaptă a expresiei (1.61) se folosește metoda lui A. A. Abrikosov și L. P. Gorkov [23], care constă în adăugarea și scăderea termenului $\Delta_{n_1}/|\omega_r|$:

$$\begin{aligned} \Delta_n &= \sum_m V_{nm} N_m \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_r}^{|\omega_r| \leq \omega_m} \left[\frac{\Delta_m}{|\omega_r|} \right] + \\ &+ \sum_m V_{nm} N_m \frac{\pi}{\beta} \sum_r \left[\frac{\Delta_m}{\sqrt{\Delta_m^2 + \omega_r^2}} - \frac{\Delta_m}{|\omega_r|} \right]. \end{aligned} \quad (1.62)$$

În prima sumă există limitare în sumarea după frecvențele ω_r , în timp ce în a doua, datorită convergenței rapide, nu este nevoie de o astfel de limitare. Efectuând sumarea după ω_r , găsim

$$\Delta_n = \sum_m V_{nm} N_m \Delta_m \left[\ln \left(\frac{2\hbar\omega_m}{\Delta_m} \right) - 2 \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{x^2 + \Delta_m^2}} f(\sqrt{x^2 + \Delta_m^2}) \right]. \quad (1.63)$$

Aici f este funcția de distribuție Fermi.

Pentru a studia proprietățile de temperatură joasă ale sistemului dezvoltăm funcția f în serie după parametrul mic $\exp(-\beta\sqrt{x^2 + \Delta_m^2})$ și luând în considerare definiția funcției Bessel de argument imaginar K_0 :

$$K_0(\alpha) = \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{1+x^2}} \exp[-\alpha\sqrt{1+x^2}]. \quad (1.64)$$

Scriem (1.63) sub forma

$$\Delta_n = \sum_n V_{nm} N_m \Delta_m \left[\ln \left(\frac{2\hbar\omega_m}{\Delta_m} \right) + 2 \sum_{l=1}^\infty (-1)^l K_0(\beta l \Delta_m) \right] \quad (1.65)$$

Pentru $T = 0$ al doilea termen din (1.65) este egal cu zero și expresia care rămâne pentru $\omega_m = \omega_D$ trece în formula (1.31) obținută mai sus.

Să folosim definiția matricii de interacție V^{-1} , introdusă în secțiunea precedentă. Atunci pentru diferența potențialelor termodinamice ale stării supraconductoare și a celei normale se poate obține expresia

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = \sum_r \sum_{m,p} \int_0^{\Delta_p} \Delta_n \Delta_m \frac{\delta(V^{-1})_{nm}}{\delta\Delta_r} \delta\Delta_r. \quad (1.66)$$

Pe baza lui (1.65) avem

$$\sum_{n,m} \Delta_n \Delta_m \frac{\delta(V^{-1})_{nm}}{\delta\Delta_p} = N_p \Delta_p \left[-1 + 2 \sum_{l=1}^\infty (-1)^{l+1} \beta l \Delta_p K_1(\beta l \Delta_p) \right]. \quad (1.67)$$

Substituind această expresie în (1.66), obținem

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = - \sum_p N_p \left\{ \frac{\Delta_p^2}{2} - 2 \sum_{l=1}^\infty (-1)^{l+1} (\beta l)^{-2} \left[2 - \int_{\beta l \Delta_p}^\infty K_1(x) x^2 dx \right] \right\}. \quad (1.68)$$

Ecuția (1.68) este utilă pentru studiul domeniului temperaturilor joase.

În apropierea temperaturii de zero absolut, păstrând numai termenii principali, avem

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} \simeq \frac{\pi^2}{3\beta^2} \sum_p N_p - \sum_p N_p \left\{ \frac{\Delta_p^2}{2} + \sqrt{\frac{2\pi\Delta_p^3}{\beta}} \left(1 + \frac{15}{8\beta\Delta_p} \right) e^{-\beta\Delta_p} \right\}. \quad (1.69)$$

Această expresie ne arată că diferitele benzi de energie uniparticulă contribuie aditiv la potențialul termodinamic al sistemului. În această ecuație trebuie să înlocuim ecuația pentru gap, $\Delta_p(T)$. Pentru obținerea acestei dependențe ne întoarcem la ecuațiile (1.65) și (1.31). Făcând acest lucru, obținem cu precizie suficientă

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{\Delta_m(T)}{\Delta_m(0)} \right) + \frac{1}{N_m} \sum_{n \neq m} (V^{-1})_{nm} \left[\frac{\Delta_n(0)}{\Delta_m(0)} - \frac{\Delta_n(T)}{\Delta_m(T)} \right] = \\ = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta\Delta_m}} \left(1 - \frac{1}{8\beta\Delta_m} \right) e^{-\beta\Delta_m}. \end{aligned} \quad (1.70)$$

Presupunând corecțiile de temperatură mici în apropierea lui $T \simeq 0$, scriem soluția (1.70) sub forma

$$\Delta_n(T) \simeq \Delta_n(0) + \Delta'_n(T) \quad (1.71)$$

și obținem expresia pentru una din aceste corecții

$$\Delta'_1 = -\frac{\Delta_1(0) [ag_1 + V_{12}N_1z(0)g_1 + V_{21}N_2g_2/z(0)]}{[a + N_1V_{12}z(0) + N_2V_{21}/z(0)]}, \quad (1.72)$$

$$g_i = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta\Delta_i(0)}} \left(1 - \frac{1}{8\beta\Delta_i(0)}\right) e^{-\beta\Delta_i(0)}; \quad z(0) = \frac{\Delta_1(0)}{\Delta_2(0)}.$$

Corecția referitoare la banda a doua, $\Delta'_2(T)$, se obține din cea de mai sus schimbând între ei indicii de bandă. Substituind (1.71) și (1.72) în (1.69), cu precizia până la termenii principali avem

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = -\sum_n \frac{N_n\Delta_n^2(0)}{2} + \frac{\pi^2}{3\beta^2} \sum_n N_n - 2 \sum_n \frac{N_n}{\beta\Delta_n(0)} \sqrt{\frac{2\pi\Delta_n^3(0)}{\beta}} \exp[-\beta\Delta_n(0)] \quad (1.73)$$

De aici obținem dependența de temperatură a câmpului magnetic critic $H_c(T)$ în domeniul temperaturilor mici

$$\frac{H_c^2(T)}{8\pi} \simeq \sum_n \frac{N_n\Delta_n^2(0)}{2} - \frac{\pi^2}{3\beta^2} \sum_n N_n. \quad (1.74)$$

Această expresie poate fi prezentată sub forma

$$\frac{H_c^2(T)}{8\pi} \simeq 1 - 2\chi \frac{T^2}{T_c^2}, \quad (1.75)$$

unde

$$\chi = \frac{\pi^2}{3} \frac{(k_B T_c)^2 \sum_n N_n}{\sum_n N_n \Delta_n^2(0)}. \quad (1.76)$$

Mărimea $H_c(0)$ se determină din formula (1.38). Folosind expresia (1.76) obținem pentru χ :

$$\chi = \chi_{is} A_2(z_c); \quad \chi_{is} = \frac{\gamma_E^2}{3} = 1,06; \quad (1.77)$$

$$A_2(z_c) = \frac{z_c(N_1 + N_2)}{N_1 z_c^2 + N_2} \left(\frac{1}{z_c}\right)^{\frac{N_2 - N_1 z_c^2}{N_2 + N_1 z_c^2}} \geq 1.$$

În acest fel, prezența factorului A_2 , care depinde esențial de proprietățile sistemului, strică încă odată relația universală, care este caracteristică teoriei BCS [6].

Derivând expresia (1.73) în raport cu temperatura, obținem entropia electronică a sistemului la temperaturi joase:

$$S \simeq 2k_B \sum_n N_n \sqrt{\frac{2\pi\Delta_n^3(0)}{k_B T}} \exp[-\beta\Delta_n(0)] \left(1 + \frac{3}{2} \frac{k_B T}{\Delta_n(0)}\right); \quad (1.78)$$

$$S_n \simeq \frac{2}{3} \pi^2 \sum_n N_n k_B^2 T.$$

De aici pentru căldura specifică la temperaturi joase găsim

$$C \simeq 2k_B \sum_n N_n \sqrt{\frac{2\pi\Delta_n^3(0)}{(k_B T)^3}} \exp[-\beta\Delta_n(0)]. \quad (1.79)$$

Căldura specifică este o mărime aditivă de la contribuția fiecărei benzi de energie unielectronice. Aceste contribuții sunt determinate în principal de factorii de activare $\exp[-\beta\Delta_n(0)]$. Prin urmare, în determinarea contribuției unei benzi date la căldura specifică, un rol esențial îl joacă densitatea electronică de stări N_n și mărirea gap-ului energetic $\Delta_n(0)$. Această ultimă mărime determină viteza de scădere cu temperatura a căldurii specifice.

Să trecem acum la determinarea potențialului termodinamic în apropierea temperaturii critice. În acest scop să examinăm mai întâi ecuația (1.61) pentru gap-ul energetic al supraconductorului în apropierea lui T_c . În acest domeniu de temperaturi facem dezvoltarea în serie după puterile lui $\Delta_n(T)$:

$$\begin{aligned} \Delta_n(T) = \sum_m V_{nm} V_m \Delta_M \left[\ln \left(\frac{2\beta\gamma_E \hbar\omega_D}{\pi} \right) - \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} (\beta\Delta_m(T))^2 + \right. \\ \left. + \frac{93}{128} \frac{\zeta(5)}{\pi^4} (\beta\Delta_m)^4 + \dots \right]. \end{aligned} \quad (1.80)$$

Aici s-a folosit valoarea sumelor

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_r}^{|\omega_r| \leq \omega_D} \frac{1}{|\omega_r|} &= \ln \left(\frac{2\gamma_E \beta \hbar\omega_D}{\pi} \right); \\ \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_r}^{|\omega_r| \leq \omega_D} \frac{1}{|\omega_r|^3} &= \frac{7\beta^2 \zeta(3)}{4\pi^2}; \\ \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_r}^{|\omega_r| \leq \omega_D} \frac{1}{|\omega_r|^5} &= \frac{31}{16} \frac{\beta^4 \zeta(5)}{\pi^4}, \end{aligned} \quad (1.81)$$

$\zeta(n)$ fiind funcția lui Riemann. Dezvoltăm acum mărirea $\Delta_n(T)$ în serie după parametrul mic

$$\Delta_n(T) = t^{1/2} C_n + t^{3/2} C'_n + t^{5/2} C''_n + \dots, \quad (1.82)$$

unde coeficienții C_n satisfac sistemul liniarizat de ecuații (1.15). Mărirea C'_n se determină din ecuația

$$C'_n - \sum_m V_{nm} N_m C'_m \ln \left(\frac{2\beta_c \gamma_E \hbar\omega_D}{\pi} \right) = \sum_m V_{nm} N_m C_m \left[1 - \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} (\beta_c C_m)^2 \right]. \quad (1.83)$$

Cum T_c se determină din egalitatea cu zero a determinantului sistemului (1.15), determinantul format din coeficienții membrului drept al sistemului (1.83), trebuie de asemenea să fie egal cu zero. Ca rezultat, sistemul de ecuații (1.83) determină

încă unul din coeficienți pe baza egalității

$$\frac{1 - V_{22}N_2\xi}{V_{12}N_2\xi} \sum_{m=1}^2 V_{1m}N_m C_m d_m + \sum_{m=1}^2 V_{2m}N_m C_m d_m = 0; \quad (1.84)$$

$$d_m = 1 - \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} (\beta_c C_m)^2.$$

Ecuțiile pentru coeficienții C'_n ne permit să găsim pe C'_n ș.a.m.d. Pe baza lui (1.84) obținem

$$C_1^2 = \frac{8\pi^2}{7\beta_c^2 \zeta(3)} \frac{N_2 + N_1 z_c^2}{N_2/z_c^2 + N_1 z_c^2}, \quad (1.85)$$

unde z_c este definit în formula (1.19).

Mai departe folosim formula (1.66) pentru diferența potențialelor termodinamice. Pentru vecinătatea temperaturii critice T_c , avem pe baza formulei (1.80)

$$\sum_{n,m} \frac{\delta(V^{-1})_{nm}}{\delta\Delta_r} \Delta_n \Delta_m \simeq -2N_r \Delta_r^3 \frac{7\beta_c^2 \zeta(3)}{8\pi^2} \quad (1.86)$$

și, prin urmare, pentru $T \rightarrow T_c$

$$\begin{aligned} \frac{\Psi - \Psi_n}{V} &= -\frac{H_c^2(T)}{8\pi} \simeq \frac{7\beta_c^2 \zeta(3)}{16\pi^2} \sum_n N_n \Delta_n^4 \simeq \\ &\simeq -\frac{7\zeta(3)t^2}{16\pi^2} \beta_c^2 \sum_n N_n C_n^4, \quad t = 1 - \frac{T}{T_c}, \end{aligned} \quad (1.87)$$

de aici rezultă

$$\frac{S - S_n}{V} \simeq -\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \beta_c^3 k_B t \sum_n N_n C_n^4, \quad (1.88)$$

$$\frac{C - C_n}{V} \simeq \frac{7}{8\pi^2} \zeta(3) k_B \beta_c^3 \sum_n N_n C_n^4. \quad (1.89)$$

Pe baza formulei (1.86) obținem ușor

$$\sum_{n=1}^2 N_n C_n^4 = \left(\frac{8\pi^2}{7\beta_c^2 \zeta(3)} \right)^2 \frac{(N_1 + N_2/z_c^2)^2}{(N_1 + N_2/z_c^4)}. \quad (1.90)$$

În forma finală în apropierea lui T_c , pentru căldura specifică obținem formula (1.25), care poate fi pusă sub forma

$$\frac{C - C_n}{V} \simeq \frac{8\pi^2 k_B}{7\zeta(3\beta_c)} \frac{(N_1 + N_2/z_c^2)^2}{(N_1 + N_2/z_c^4)}. \quad (1.91)$$

Să deducem de asemenea formulele pentru potențialul termodinamic și câmpul magnetic critic pentru $t = 1 - T/T_c$:

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = -\frac{H_c^2(T)}{8\pi} \simeq -\frac{4\pi^2 t^2}{7\zeta(3\beta_c^2 k_B)} \frac{(N_1 + N_2/z_c^2)^2}{(N_1 + N_2/z_c^4)}; \quad (1.92)$$

$$\begin{aligned}
\frac{H_c(T \rightarrow T_c)}{H_c(0)} &\cong \frac{\beta_c t}{2\pi} \left[\frac{7\zeta(3)}{2} \frac{\sum_n N_n C_n^4}{\sum_n N_n \Delta_n^2(0)} \right]^{1/2} \cong \\
&\cong 2\gamma_{Et} (z_c)^{-\frac{N_2}{N_2+N_1 z_c^2}} \left[\frac{2}{7\zeta(3)} \frac{(N_1 + N_2/z_c^2)}{(N_1 + N_2/z_c^4)} \right]^{1/2}.
\end{aligned} \tag{1.93}$$

Rescriem ultima expresie sub forma

$$\frac{H_c(T \rightarrow T_c)}{H_c(0)} \simeq 2\gamma_{Et} \sqrt{\frac{2}{7\zeta(3)}} A_3(z_c), \tag{1.94}$$

unde

$$A_3(z_c) = \left(\frac{N_1 + N_2/z_c^2}{N_1 + N_2/z_c^4} \right)^{1/2} z_c^{\frac{N_2}{N_2+N_1 z_c^2}} \leq 1. \tag{1.95}$$

Formula (1.94) este al treilea exemplu de distrugere a relației de universalitate a teoriei BCS [6].

Toate rezultatele deduse mai sus se bazează pe ipoteza legăturii slabe, pentru care

$$\frac{k_B T_c}{\hbar\omega_D} \ll 1; \quad \frac{\Delta(0)}{\hbar\omega_D} \ll 1; \quad N_n V_{nm} \ll 1.$$

Aceste inegalități sunt îndeplinite în supraconductori de tipul In, Al, Sn și a altora, și în mai mică măsură la Pb și Hg.

Posibilitatea descrierii supraconductoarelor de temperatură înaltă pe baza teoriei bi-bandă necesită analize mai amănunțite.

TEMPERATURA CRITICĂ A ALIAJELOR SUPRACONDUCTOARE CU DOUĂ BENZI

2.1 Introducere

Teoria aliajelor supraconductoare prezentată în lucrările lui A.A. Abrikosov și L.P. Gorkov [23]-[27], Edwards [28], Skalski și at.[29], Ambegaokar și al.[30] și Maki [31] permite aplicarea acestora la studiul aliajelor supraconductoare cu două benzi.

În lucrările lui V.A. Moskalenko, M.E. Palistrant și L.Z. Kon [32]-[40] s-a determinat temperatura critică a aliajelor cu două benzi ca temperatura de generare a perechilor legate în procesul de răcire al substanței. Această temperatură este valoarea proprie a unei ecuații integrale omogene pentru funcția de undă a perechii de electroni legați. Deoarece în acest punct lipsesc cvazimediile de tip Bogoliubov [4], și prin urmare și funcțiile Green anormale, introduse de Gorkov [42], calculul lui T_c se poate face folosind numai una din funcțiile Green și nume cea a metalului normal.

2.2 Funcțiile Green uni-particulă

Notăm cu $\hat{V}(\mathbf{x})$ energia potențială de interacție a electronilor cu atomii impurităților paramagnetice, situate în noduri

$$\hat{V}(\mathbf{x}) = \sum_j U_1(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) + \frac{1}{2}(\mathbf{s}\boldsymbol{\sigma}) \sum_j U_2(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j), \quad (2.1)$$

unde \mathbf{s} este vectorul spin al atomului de impuritate; $\boldsymbol{\sigma}$ este operatorul Pauli al spinului electronic. În acest caz hamiltonianul de interacție al electronilor de conducție cu impuritățile distribuite haotic are forma

$$H_{\text{imp}} = \sum_{\sigma\sigma'} \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}\sigma) \sum_j V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{x}) \hat{\psi}(\mathbf{x}\sigma') d\mathbf{x}, \quad (2.2)$$

unde amplitudinile electronice $\hat{\psi}^+$ și $\hat{\psi}$ sunt definite prin formulele (1.39). Deoarece în această secțiune se va discuta numai influența impurităților asupra funcției Green

uniparticulă a sistemelor normale, hamiltonianul total al sistemului va fi

$$H = H_0 + H_{\text{imp}}, \quad (2.3)$$

unde H_0 este determinat de primul termen din (1.1).

Să examinăm influența impurităților asupra proprietăților funcției Green unielectronice:

$$\begin{aligned} G(x\sigma, x'\sigma') &= - \left\langle T \hat{\psi}(x\sigma) \hat{\psi}(x'\sigma') \right\rangle = \\ &= - \frac{\left\langle T \psi_{\text{int}}(x\sigma) \hat{\psi}_{\text{int}}(x'\sigma') U(\beta) \right\rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0} = \\ &= \sum_{n,m} G_{nm}(x\sigma, x'\sigma'). \end{aligned} \quad (2.4)$$

Aici $x = (\mathbf{x}, \tau)$, $\hat{\psi}(x, \sigma)$ este operatorul în imaginea Heisenberg (1.41), iar ψ_{int} este același operator în imaginea de interacție:

$$\hat{\psi}_{\text{int}}(x\sigma) = e^{\tau H_0} \hat{\psi}(\mathbf{x}\sigma) e^{-\tau H_0}; \quad \hat{\psi}_{\text{int}}^+(x\sigma) = e^{\tau H_0} \hat{\psi}^+(\mathbf{x}\sigma) e^{-\tau H_0} \quad (2.5)$$

$U(\beta)$ fiind operatorul de evoluție al sistemului:

$$U(\beta) = T \exp \left[- \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right]. \quad (2.6)$$

Funcția G_{nm} din partea dreaptă a lui (2.4) a fost definită în (1.40). Prin $\langle \dots \rangle_0$ se înțelege media statistică cu hamiltonianul neperturbat H_0 .

Să calculăm operatorul de masă M al funcției Green uniparticulă în aproximația Born și să efectuăm medierea tuturor mărimilor pe distribuția haotică a pozițiilor atomilor de impuritate și pe orientările arbitrare ale spinilor \mathbf{s} ale acestor atomi.

Medierea produsului potențialelor U_1, U_2 pe poziția impurităților este mai comod să se facă pe transformatele lor Fourier:

$$\begin{aligned} U_i(\mathbf{x}) &= \sum_j U_i(\mathbf{x} - \mathbf{x}_j) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} U_i(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} \varrho_{\mathbf{q}}; \quad i = 1, 2; \\ \varrho_{\mathbf{q}} &= \sum_{j=1}^{N_i} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}_j}; \quad \mathbf{q} \neq 0. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Aici N_i este numărul atomilor de impuritate în volumul V al sistemului; $c = N_i/N$ este concentrația de impurități. În dezvoltarea Fourier (2.7) s-a presupus $\mathbf{q} \neq 0$, deoarece termenul cu $\mathbf{q} = 0$ poate fi inclus în hamiltonianul neperturbat. Distribuția aleatoare este conținută numai în mărimea $\varrho_{\mathbf{q}}$. Poziția impurităților este distribuită egal probabil pe întreg volumul, cu densitatea de probabilitate $1/V$. De aceea

medierea se face după regulile

$$\begin{aligned}
\langle e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}_j} \rangle_c &= \int_V \frac{d\mathbf{x}_j}{V} e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}_j} = \delta_{\mathbf{q},0}; \\
\langle \rho_{\mathbf{q}} \rangle_c &= 0, \quad q \neq 0; \quad \langle \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rangle_c = N_i \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0}; \\
\langle \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3} \rangle_c &= N_i \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, 0}; \\
\langle \rho_{\mathbf{q}_1} \rho_{\mathbf{q}_2} \rho_{\mathbf{q}_3} \rho_{\mathbf{q}_4} \rangle_c &= N_i \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4, 0} + \\
&+ N_i (N_i - 1) [\delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, 0} \delta_{\mathbf{q}_3 + \mathbf{q}_4, 0} + \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_3, 0} \delta_{\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_4, 0} + \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_4, 0} \delta_{\mathbf{q}_2 + \mathbf{q}_3, 0}].
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Medierea pe orientarea spinului \mathbf{s} al impurității se face în ipoteza distribuției egal probabile a direcțiilor sale:

$$\langle s^\alpha \rangle_0 = 0, \quad \langle s^\alpha s^\beta \rangle_c = \delta_{\alpha\beta} \langle (s^\alpha)^2 \rangle_c = \frac{1}{3} s(s+1) \delta_{\alpha\beta}. \tag{2.9}$$

De aceea pentru cele mai simple medii au loc egalitățile

$$\begin{aligned}
\langle V_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{x}) \rangle_c &= 0; \\
\langle V_{\sigma_1 \sigma_2}(\mathbf{x}_1) V_{\sigma_3 \sigma_4}(\mathbf{x}_2) \rangle_c &= \frac{c}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \times \\
&\times \left[|U_1(\mathbf{q})|^2 \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4} + \frac{1}{12} s(s+1) |U_2(\mathbf{q})|^2 \sum_{\alpha} (\sigma^\alpha)_{\sigma_1 \sigma_2} (\sigma^\alpha)_{\sigma_3 \sigma_4} \right].
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Deoarece $(\sigma^\alpha)^2 = 1$, rezultă:

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma_1} \langle V_{\sigma \sigma_1}(\mathbf{x}_1) V_{\sigma_1 \sigma'}(\mathbf{x}_2) \rangle_c &= \frac{c}{V} \delta_{\sigma \sigma'} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \times \\
&\times \left[|U_1(\mathbf{q})|^2 + \frac{1}{4} s(s+1) |U_2(\mathbf{q})|^2 \right].
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Considerând că media pe configurații a funcției Green este diagonală în indicii de spin, avem

$$\langle G(x\sigma, x'\sigma') \rangle_c = \delta_{\sigma\sigma'} \bar{G}(x, x'), \tag{2.12}$$

și obținem pentru ecuația Dyson mediată

$$\begin{aligned}
\bar{G}(x, x') &= G^0(x, x') + \int_0^\beta \int_0^\beta G^0(x, x_1) M(x_1, x_2) \bar{G}(x_2, x') dx_1 dx_2; \\
x_1 &= (\mathbf{x}_1, \tau_1); \quad x_2 = (\mathbf{x}_2, \tau_2).
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Aici și în cele ce urmează prin integrarea cvadridimensională vom înțelege integrarea pe volumul V al sistemului și integrarea după τ pe intervalul $(0, \beta)$.

Calculul operatorului de masă și toate calculele următoare vor fi făcute în aproximația concentrației mici a atomilor de impuritate în sensul îndeplinirii inegalității

$$\frac{\hbar}{l p_F} \simeq \frac{\hbar}{\tau_{\text{imp}} E_F} \ll 1; \quad l = v_F \tau, \tag{2.14}$$

adică în ipoteza că valoarea medie a drumului liber mijlociu l al electronilor este mult mai mare decât constanta rețelei. Mărimea τ_{imp} este timpul de relaxare al difuziei electronilor pe atomii de impuritate. În cazul a două benzi apar mărimile corespunzătoare pentru procesele de difuzie inter- și intra-bandă. Acestea vor fi determinate mai jos.

În ipoteza îndeplinirii inegalității (2.14), în lucrările [23]-[28] s-a arătat că putem să ne limităm la aproximația Born pentru operatorul de masă. În acest caz avem

$$M(x_1, x_2) = \frac{c}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} \left[|U_1(\mathbf{q})|^2 + \frac{1}{4}s(s+1) |U_2(\mathbf{q})|^2 \right] G^0(x_1, x_2). \quad (2.15)$$

Să trecem în ecuația Dyson la transformate Fourier după variabila τ conform formulei (1.48) și la reprezentarea n, \mathbf{k} după formula (1.54):

$$\bar{G}(x, x') = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_r} \sum_{n' \mathbf{k}'} G(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}' | \omega_r) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{x}) \psi_{n'\mathbf{k}'}(x') \exp[-i\omega_r(\tau - \tau')]. \quad (2.16)$$

O dezvoltare analoagă în serie are loc pentru operatorul de masă M , pentru aceasta $M(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}' | \omega)$ este transformata respectivă. Substituind dezvoltarea în serie de tipul (2.16) pentru G^0 , G și M în (2.13), obținem ecuația Dyson în reprezentarea $n\mathbf{k}\omega$. Considerând conservarea cvazi-impulsului (neglijând deci procesele de umklapp) avem pentru mărimile mediate

$$\begin{aligned} M(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}' | \omega) &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} M_{nn'}(\mathbf{k} | \omega); \\ G(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}' | \omega) &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G_{nn'}(\mathbf{k} | \omega). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Atunci în cazul a două benzi ($n = 1, 2$) care se suprapun obținem

$$\begin{aligned} G_{11}(\mathbf{k} | \omega) &= \frac{1}{A(\mathbf{k} | \omega)} \left[(G_2^0(\mathbf{k} | \omega))^{-1} - M_{22}(\mathbf{k} | \omega) \right]; \\ G_{12}(\mathbf{k} | \omega) &= \frac{M_{12}(\mathbf{k} | \omega)}{A(\mathbf{k} | \omega)}; \\ A(\mathbf{k} | \omega) &= \left[(G_1^0(\mathbf{k} | \omega))^{-1} - M_{11}(\mathbf{k} | \omega) \right] \left[(G_2^0(\mathbf{k} | \omega))^{-1} - M_{22}(\mathbf{k} | \omega) \right] - \\ &\quad - M_{12}(\mathbf{k} | \omega) M_{21}(\mathbf{k} | \omega). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Funcțiile G_{22} și G_{21} se obțin din expresiile de mai sus prin schimbarea indicilor de bandă; funcția $G^0(\mathbf{k} | \omega)$ din sistemul (1.57) pentru $\Delta = 0$ este

$$G_n^0(\mathbf{k} | \omega) = \frac{1}{i\omega - \varepsilon_n(\mathbf{k})}. \quad (2.19)$$

Pe baza lui (2.15) operatorii de masă $M_{nn'}(\mathbf{k} | \omega)$ devin:

$$\begin{aligned} M_{nm}(\mathbf{k} | \omega) &= \frac{c}{V} \sum_{n'} \sum_{\mathbf{k}'} \left[|U_1(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 + \frac{1}{4}s(s+1) |U_2(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|^2 \right] \times \\ &\quad \times G_{n'}^0(\mathbf{k}' | \omega) \chi(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}') \chi^*(m\mathbf{k}, n'\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (2.20)$$

unde

$$\chi(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}') = \int_{V_0} U_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) U_{n'\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.21)$$

V_0 fiind volumul celei elementare a cristalului. În cazul benzilor de energie care se suprapun, suprafața Fermi constă din pânze sau porțiuni de astfel de pânze care provin de la diferite benzi. Vom considera aproximativ că în cazul nostru a două benzi de energie aceste pânze au forma apropiată de cea sferică, cu două raze k_1^F și k_2^F , și deci legea de dispersie în ambele benzi este apropiată de cea a electronilor liberi cu mase efective diferite m_n (W_n este fundul benzii):

$$-W_n + \varepsilon_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} - E_F; \quad E_F = \frac{\hbar^2}{2m_1} (k_1^F)^2 = \frac{\hbar^2 (k_2^F)^2}{2m_2} + W_2.$$

Să facem acum sumarea după cvazi-impulsul \mathbf{k}' în formula (2.20). Această sumare se face în apropierea pânzei n' a suprafeței Fermi. Printre factorii din partea dreaptă a formulei (2.20) se află funcția $G_{n'}^0$, care scade repede cu energia pe măsură ce ne îndepărtăm de suprafața Fermi și din acest motiv putem folosi următoarea formă integrală a formulei de sumare

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} f_n \left(\varepsilon, \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} \right) &= \frac{1}{2\pi\hbar^3} \int d\varepsilon_n \int \frac{ds_n}{|\nabla\varepsilon_n|} f_n \left(\varepsilon, \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} \right) = \\ &= N_n \int \frac{d\Omega'_n}{4\pi} \int d\varepsilon_n f_n \left(\varepsilon, \frac{\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}'|} \right). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Densitatea de stări N_n este determinată de formula (1.2), s_n este aria pânzei n a suprafeței Fermi. Cu ajutorul egalității

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_n G_n^0(\mathbf{k}|\omega) = -i\pi \frac{\omega}{|\omega|},$$

pentru elementele operatorului de masă obținem

$$\begin{aligned} M_{11}(k_1^F|\omega) &= -i \frac{\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\tau_1}; & M_{22}(k_2^F|\omega) &= -i \frac{\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\tau_2}; \\ M_{12}(k_1^F|\omega) &= -i \frac{\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\theta_{12}}; & M_{21}(k_2^F|\omega) &= -i \frac{\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\theta_{21}}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Aici s-a presupus posibilitatea calcului elementelor operatorului de masă numai pentru foile suprafeței Fermi deoarece aceste elemente se află ca factori pe lângă funcția Green care scade puternic pe măsură ce ne îndepărtăm de această suprafață. Timpul de relaxare τ_n se determină în felul următor:

$$\frac{1}{\tau_1} = \frac{1}{\tau_{11}} + \frac{1}{\tau_{12}}; \quad \frac{1}{\tau_2} = \frac{1}{\tau_{21}} + \frac{1}{\tau_{22}}. \quad (2.24)$$

Aici

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{2\tau_{nm}} &= \frac{c}{8\pi^2} \int \frac{ds'_m}{|\nabla\varepsilon|} \left[|U_1(\mathbf{k}_n^F - \mathbf{k}'_m{}^F)|^2 + \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{4}s(s+1)|U_2(\mathbf{k}_n^F - \mathbf{k}'_m{}^F)|^2 \right] |\chi(n\mathbf{k}_n^F, m\mathbf{k}'_m{}^F)|^2 = \\
&= \frac{N_m}{4} \int d\Omega'_m W_+(\mathbf{k}_n^F - \mathbf{k}'_m{}^F) |\chi(n\mathbf{k}_n^F, m\mathbf{k}'_m{}^F)|^2; \\
W_+(\mathbf{q}) &= c \left[|U_1(\mathbf{q})|^2 + \frac{1}{4}s(s+1)|U_2(\mathbf{q})|^2 \right].
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Timpu de relaxare θ_{12} se calculează cu ajutorul egalității

$$\frac{\hbar}{2\theta_{12}} = \sum_n N_n \int \frac{d\Omega_n}{4} W_+(\mathbf{k}_1^F - \mathbf{k}_n^F) \chi(1\mathbf{k}_1^F, n\mathbf{k}_n^F) \chi^*(2\mathbf{k}_1^F, n\mathbf{k}_n^F). \tag{2.26}$$

În mod analog se calculează și mărimea θ_{21} . Folosind (2.23) funcția $A(\mathbf{k}|\omega)$ dată de (2.18) capătă forma

$$A(\mathbf{k}|\omega) = \left(i\omega - \varepsilon_1(k) - i \frac{\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\tau_1} \right) \left(i\omega - \varepsilon_2(k) - i \frac{\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\tau_2} \right) + \frac{\hbar}{2\theta_{12}} \frac{\hbar}{2\theta_{21}}. \tag{2.27}$$

În cazul în care masele efective și razele foilor suprafețelor Fermi diferă mult una de alta în sensul îndeplinirii inegalităților

$$\varepsilon_1(k_2^F), \varepsilon_2(k_1^F) \gg \frac{\hbar}{2\tau_n}, k_B T_c, \tag{2.28}$$

fără a pierde din precizia calculelor, putem omite componentele interbandă ale operatorului de masă, și de asemenea funcțiile Green uniparticulă interbandă. Păstrarea acestor componente interbenzi este necesară numai dacă mărimile care intră în inegalitățile (2.28) sunt de același ordin de mărime.

Mai departe vom presupune că sunt îndeplinite inegalitățile (2.28) și, prin urmare, aproximațiile

$$\bar{G}_{nm}(\mathbf{k}|\omega) \simeq \delta_{nm} \bar{G}_n(\mathbf{k}|\omega); \quad M_{nm}(\mathbf{k}|\omega) \simeq \delta_{nm} M_n(\mathbf{k}, \omega). \tag{2.29}$$

Cu ajutorul lui (2.29) avem

$$\bar{G}_n(\mathbf{k}|\omega) = [i\omega - \varepsilon(\mathbf{k}) - M_n(\mathbf{k}|\omega)]^{-1} \tag{2.30}$$

O determinare mult mai exactă a operatorului de masă se poate obține, dacă în (2.20) substituim funcția Green totală (2.30) în locul lui $G_n^0(\mathbf{k}|\omega)$. În acest caz avem

$$M_n(\mathbf{k}|\omega) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} \sum_{n_1} \frac{W_+(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) |\chi(n\mathbf{k}, n_1\mathbf{k}_1)|^2}{[i\omega - \varepsilon_{n_1}(\mathbf{k}_1) - M_{n_1}(\mathbf{k}_1|\omega)]}. \tag{2.31}$$

Partea imaginară a operatorului de masă, obținută din această ecuație mai exactă, are aceeași formă ca și (2.23). În acest fel, obținem în final

$$M_n(\mathbf{k}_n^F|\omega) = -\frac{i\omega}{|\omega|} \frac{\hbar}{2\tau_n}. \quad (2.32)$$

Prin urmare, funcția Green uniparticulă a stării normale a modelului bibandă este

$$\bar{G}_n(\mathbf{k}|\omega) = (i\omega\eta_n(\omega) - \varepsilon_n(\mathbf{k}))^{-1}; \quad \eta_n(\omega) = 1 + \frac{\hbar}{2\tau_n|\omega|}. \quad (2.33)$$

2.3 Funcția de undă a perechii Cooper

În această secțiune, spre deosebire de cap.1, vom pleca de la hamiltonianul mult mai realist a lui Fröhlich, care consideră efectele de retardare al interacției electronilor prin intermediul fononilor. Hamiltonianul total al interacției electronilor și fononilor în metalul cu mai multe benzi are forma

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\sigma} \int \hat{\psi}^+(\mathbf{x}\sigma) H_0(-i\hbar\nabla) \hat{\psi}(\mathbf{x}\sigma) d\mathbf{x} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^+ b_{\mathbf{q}} + \\ & + \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^+(\mathbf{x}\sigma) \hat{\psi}(\mathbf{x}\sigma) \varphi(\mathbf{x}) + H_{\text{imp}}, \end{aligned} \quad (2.34)$$

unde

$$\varphi(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{x}} (b_{\mathbf{q}} + b_{-\mathbf{q}}^+),$$

$\hat{\psi}(\mathbf{x}\sigma)$ este amplitudinea cuantică a electronului (1.39); $b_{\mathbf{q}}$, $b_{\mathbf{q}}^+$ sunt amplitudinile cuantice ale fononilor; $\omega_{\mathbf{q}}$ frecvența acestora.

Această metodă mai generală permite înțelegerea mai profundă a anumitor mărimi care apar în hamiltonianul model (1.1). Reamintim că în (2.34) s-a luat în considerație parțial interacția coulombiană a electronilor, care ducea la renormarea lui $\omega_{\mathbf{q}}$ și $\alpha_{\mathbf{q}}$.

Ca și în secțiunea precedentă, se presupune că în metal există o cantitate determinată de impurități, cu care interacționează electronii (H_{imp}). Să examinăm funcția Green biparticulă a sistemului

$$\begin{aligned} G(x\sigma, x'\sigma'; y\gamma, y'\gamma') &= \frac{\langle T\psi(x\sigma)\psi(x'\sigma')\bar{\psi}(y\gamma)\bar{\psi}(y'\gamma')U(\beta)\rangle_0}{\langle U(\beta)\rangle_0}; \\ x &= (\mathbf{x}, \tau), x' = (\mathbf{x}', \tau'). \end{aligned} \quad (2.35)$$

Aici se presupune că hamiltonianul aproximației de zero conține termenii electronilor și fononilor liberi, și de asemenea interacția cu impuritățile. Operatorul de evoluție include numai interacția electron-fonon H_{e-ph} (2.34):

$$U(\beta) = T \exp \left[- \int_0^{\beta} H_{e-ph}(\tau) d\tau \right]. \quad (2.36)$$

Ecuția Dyson pentru funcția Green biparticulă are forma

$$\begin{aligned} G(x\sigma, x'\sigma'; y\gamma, y'\gamma') &= G(x\sigma, y'\gamma')G(x'\sigma', y\gamma) - \\ &- G(x\sigma, y\gamma)G(x'\sigma', y'\gamma') + \int \dots \int dx_1 \dots dx_4 G(x\sigma, x_1\sigma_1) \times \\ &\times G(x'\sigma', x_2\sigma_2) \Sigma(x_1\sigma_1, x_2\sigma_2; x_3\sigma_3, x_4\sigma_4) G(x_3\sigma_3, x_4\sigma_4; y\gamma, y'\gamma'), \end{aligned} \quad (2.37)$$

unde Σ este operatorul de masă ireductibil al funcției Green biparticulă; G este funcția Green uniparticulă exactă a electronilor (2.4), care include nu numai interacția electronilor cu impuritățile, dar și interacția cu fononii.

Să facem acum medierea pe configurații a ecuației (2.37), unde vom nota prin K media din produsul a două funcții Green:

$$\langle G(x\sigma, x_1\sigma_1)G(x'\sigma', x_2\sigma_2) \rangle_c = K(x\sigma, x'\sigma'; x_1\sigma_1, x_2\sigma_2). \quad (2.38)$$

Medierea (2.37) duce la ecuația

$$\begin{aligned} \langle G(x\sigma, x'\sigma'; y\gamma, y'\gamma') \rangle_c &= K(x\sigma, x'\sigma'; y'\gamma', y\gamma) - \\ &- K(x\sigma, x'\sigma'; y\gamma, y'\gamma') + \int dx_1 \dots dx_4 K(x\sigma, x'\sigma'; x_1\sigma_1, x_2\sigma_2) \times \\ &\times M(x_1\sigma_1, x_2\sigma_2; x_3\sigma_3, x_4\sigma_4) \langle G(x_3\sigma_3, x_4\sigma_4; y\gamma, y'\gamma') \rangle_c, \end{aligned} \quad (2.39)$$

unde noul operator de masă M conține diagrame cu liniile fononice și cu impuritățile.

Pentru obținerea ecuației Bethe-Salpeter [43], care determină starea legată a perechilor electronice, ometem termenii neomogeni (2.39), care nu pot descrie această stare legată. Ecuația Bethe-Salpeter are forma

$$\begin{aligned} \Psi(x\sigma; x'\sigma') &= \int dx_1 \dots dx_4 \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_4} K(x\sigma, x'\sigma'; x_1\sigma_1, x_2\sigma_2) \times \\ &\times M(x_1\sigma_1, x_2\sigma_2; x_3\sigma_3, x_4\sigma_4) \Psi(x_3\sigma_3; x_4\sigma_4). \end{aligned} \quad (2.40)$$

Funcția de undă Ψ care descrie generarea perechii legate are proprietatea de antisimetrie

$$\Psi(x\sigma; x'\sigma') = -\Psi(x'\sigma'; x\sigma). \quad (2.41)$$

Mai departe să examinăm numai starea de singlet a acestei perechi. În acest caz funcția de undă are proprietățile

$$\Psi(x\sigma; x'\sigma') = g_{\sigma\sigma'} \Psi(x, x'); \quad \Psi(x, x') = \Psi(x', x). \quad (2.42)$$

Aici mărimea g este definită prin formula (1.42). Pentru funcția $\Psi(x_1, x_2)$ obținem ecuația mai simplă

$$\Psi(x, x') = \int dx_1 \dots dx_4 K(x, x'; x_1, x_2) M(x_1, x_2; x_3, x_4) \Psi(x_3, x_4), \quad (2.43)$$

unde s-au introdus notațiile

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} K(x\sigma, x'\sigma'; x_1\sigma_1, x_2\sigma_2)g_{\sigma_1\sigma_2} &= K(x, x'; x_1, x_2)g_{\sigma\sigma'}; \\ M(x_1, x_2; x_3, x_4) &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_4} g_{\sigma_1\sigma_2} M(x_1\sigma_1, x_2\sigma_2; x_3\sigma_3, x_4\sigma_4)g_{\sigma_3\sigma_4}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

În modelul Fröhlich o aproximație suficient de bună pentru operatorul de masă ireductibil este contribuția

$$M(x_1, x_2; x_3, x_4) = -B(x_1 - x_2)\delta(x_1 - x_3)\delta(x_2 - x_4), \quad (2.45)$$

unde $B(x)$ este funcția Green fononică:

$$B(x_1 - x_2) = -\frac{\langle T\varphi(x_1)\varphi(x_2)U(\beta) \rangle_0}{\langle U(\beta) \rangle_0}. \quad (2.46)$$

În acest fel, în această aproximație obținem

$$\Psi(x, x') = -\int_0^\beta \int_0^\beta dx_1 dx_2 K(x, x'; x_1, x_2)B(x_1 - x_2)\Psi(x_1, x_2). \quad (2.47)$$

Aici, ca și mai sus, fiecare integrală este cuadrimensională.

Să trecem în (2.47) la reprezentarea $(n\mathbf{k}\omega)$:

$$\begin{aligned} K(x, x'; x_1, x_2) &= \frac{1}{\beta^3} \sum_{\omega_1, \omega_2, \omega_3} \sum_{n_1 \mathbf{k}_1} \dots \sum_{n_4 \mathbf{k}_4} K(n_1 \mathbf{k}_1, n_2 \mathbf{k}_2; n_3 \mathbf{k}_3, n_4 \mathbf{k}_4 | \omega_1 \omega_2 \omega_3) \times \\ &\times \psi_{n_1 \mathbf{k}_1}(\mathbf{x}) \psi_{n_2 \mathbf{k}_2}(\mathbf{x}') \psi_{n_3 \mathbf{k}_3}^*(\mathbf{x}_1) \psi_{n_4 \mathbf{k}_4}^*(\mathbf{x}_2) \times \\ &\times \exp \left[-i\omega_1(\tau - \tau_1) - i\omega_2(\tau' - \tau_2) - i\omega_3(\tau_1 - \tau_2) \right]; \\ F(x, x') &= \frac{1}{\beta} \sum_{\omega} \sum_{n_1 \mathbf{k}_1} \sum_{n_2 \mathbf{k}_2} F(n_1 \mathbf{k}_1, n_2 \mathbf{k}_2 | \omega) \psi_{n_1 \mathbf{k}_1}(\mathbf{x}) \psi_{n_2 \mathbf{k}_2}(\mathbf{x}') \exp \left[-i\omega(\tau - \tau') \right]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Mai departe, în baza legii conservării cvazi-impulsului, care trebuie să aibă loc după medierea pe impurități, putem scrie

$$F(n_1 \mathbf{k}_1, n_2 \mathbf{k}_2 | \omega) = \delta_{\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2} F_{n_1 n_2}(\mathbf{k}_1 | \omega). \quad (2.49)$$

Considerăm de asemenea că funcția K de patru cvazi-impulsuri este proporțională cu $\delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4}$. Atunci pentru noua funcție $F_{n_1 n_2}(\mathbf{k} | \omega)$ obținem

$$\begin{aligned} F_{n_1 n_2}(\mathbf{k} | \omega) &= -\frac{1}{\beta^2 V} \sum_{\omega' \omega''} \sum_{n_3, \dots, n_6} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} B(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'' | \omega' - \omega'') \times \\ &K(n_1 \mathbf{k}_1, n_2 - \mathbf{k}_2; n_3, \mathbf{k}', n_4 - \mathbf{k}' | \omega_1 - \omega, \omega - \omega') \times \\ &\times \chi(n_3 \mathbf{k}', n_5 \mathbf{k}'') \chi(n_4 - \mathbf{k}', n_6 - \mathbf{k}'') F_{n_5 n_6}(\mathbf{k}'' | \omega''). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Transformarea mai departe a ecuației (2.50) este posibilă folosind proprietățile nucleului K al acestei ecuații integrale.

Se poate arăta că dacă se ia în considerație medierea pe configurații (2.38), toate părțile de energie proprie care provin de la impurități și de asemenea diagramele de tip scară (ladder diagrams) caracteristice pentru produsul a două funcții Green, atunci se poate stabili ecuația de forma [18], [34]-[36]

$$K(x, y; x', y') = \bar{G}(x, x')\bar{G}(y, y') + \int_0^\beta \int_0^\beta dx_1 dx_1' \bar{G}(x, x_1)\bar{G}(y, x_1') \times \\ \times \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \exp \left[-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_1') \right] W_-(\mathbf{q}) K(x_1, x_1'; x', y'), \quad (2.51)$$

unde

$$W_-(\mathbf{q}) = c \left[|U_1(\mathbf{q})|^2 - \frac{1}{4}s(s+1)|U_2(\mathbf{q})|^2 \right]. \quad (2.52)$$

De aici pentru reprezentarea ($n\mathbf{k}\omega$) a funcției respective obținem

$$K(n_1\mathbf{k}, n_2 - \mathbf{k}; n_3\mathbf{k}', n_4 - \mathbf{k}' | \omega_1 - \omega, \omega - \omega') = \bar{G}_{n_1}(\mathbf{k}|\omega)\bar{G}_{n_2}(-\mathbf{k}|\omega) \times \\ \times \left\{ \beta\delta_{\omega, \omega'}\delta_{n_1, n_3}\delta_{n_2, n_4}\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1} W_-(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\chi(n_1\mathbf{k}; n_5\mathbf{k}_1) \times \right. \\ \left. \times \chi(n_2 - \mathbf{k}, n_6 - \mathbf{k})K(n_5\mathbf{k}_1, n_6 - \mathbf{k}_1; n_3\mathbf{k}', n_4 - \mathbf{k}' | \omega_1 - \omega, \omega - \omega') \right\}. \quad (2.53)$$

Această formulă ne arată că putem separa în funcțiile F și K factorii $\bar{G}_n(\mathbf{k}|\omega)$, care conțin cea mai importantă dependență de energie:

$$K(n_1\mathbf{k}, n_2 - \mathbf{k}; n_3\mathbf{k}', n_4 - \mathbf{k}' | \omega_1 - \omega, \omega - \omega') = \\ = \beta\delta_{\omega, \omega'}G_{n_1}(\mathbf{k}|\omega)G_{n_2}(-\mathbf{k}|\omega)H_{n_1n_2n_3n_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega); \quad (2.54) \\ F_{n_1n_2}(\mathbf{k}|\omega) = G_{n_1}(\mathbf{k}|\omega)G_{n_2}(-\mathbf{k}|\omega)f_{n_1n_2}(\mathbf{k}|\omega).$$

Atunci pe baza formulelor (2.50) și (2.53) avem sistemul de ecuații

$$f_{n_1n_2}(\mathbf{k}|\omega) = -\frac{1}{\beta V} \sum_{\omega'} \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{k}''} \sum_{n_3, \dots, n_6} B(\mathbf{k}' - \mathbf{k}'' | \omega - \omega') \times \\ \times H_{n_1n_2n_3n_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega)\chi(n_3\mathbf{k}', n_6\mathbf{k}'')\chi(n_4 - \mathbf{k}', n_6 - \mathbf{k}'') \times \\ \times G_{n_5}(\mathbf{k}''|\omega)G_{n_6}(-\mathbf{k}''|\omega)f_{n_5n_6}(\mathbf{k}''|\omega) \quad (2.55)$$

și

$$H_{n_1n_2n_3n_4}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega) = \delta_{n_1n_3}\delta_{n_2n_4}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \\ + \frac{1}{V} \sum_{n_5n_6} \sum_{\mathbf{k}_1} W_-(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1)\chi(n_1\mathbf{k}, n_5\mathbf{k}_1)\chi(n_2 - \mathbf{k}, n_6 - \mathbf{k}_1) \times \\ \times G_{n_5}(\mathbf{k}_1|\omega)G_{n_6}(-\mathbf{k}_1|\omega)H_{n_5n_6n_3n_4}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'|\omega). \quad (2.56)$$

Soluția ecuațiilor (2.55) și (2.56) și expresiile pentru funcțiile Green uniparticulă ale electronilor G și ale fononilor B dau posibilitatea de a găsi temperatura critică T_c a aliajului. Această mărime este valoarea proprie a sistemului de ecuații liniare în raport cu $f_{nn'}$ (2.55).

Cu toate aproximațiile făcute pentru deducerea ultimelor ecuații, pentru rezolvarea lor sunt necesare noi aproximații. În acest scop observăm că produsul funcțiilor Green $G_{n_1}(\mathbf{k}|\omega)G_{n_2}(-\mathbf{k}|\omega)$ are cea mai mare valoare pentru $n_1 = n_2$, care este de $\beta E_F \gg 1$ ori mai mare decât același produs pentru $n_1 \neq n_2$, în domeniul interesant al spațiului \mathbf{k} . Această evaluare ar putea fi incorectă în anumite cazuri speciale, pe care nu le vom discuta aici. Din acest motiv vom discuta în continuare numai termenii cu $n_1 = n_2$ în produsul $G_{n_1}G_{n_2}$. Aceasta înseamnă că mai departe urmează să examinăm funcția de undă a perechii în limitele unei singure benzi $f_{nn} = f_n$, adică numai cazul în care perechea se generează în cadrul aceleiași benzi de energie, electronii perechii având impulsurile și spinii opuși cu același indice de bandă n . Funcția de undă a perechii formate din electronii aparținând la două benzi ($n_1 \neq n_2$) deși nenulă, este considerată mai puțin importantă în cadrul ipotezelor făcute mai sus. Analiza care urmează confirmă ipoteza făcută în cap.1 privind starea legată a doi electroni în cadrul unei singure benzi.

Funcția de undă a perechii care este diagonală în indicii de bandă satisface un sistem de ecuații mult mai simplificat

$$f_n(\mathbf{k}|\omega) = -\frac{1}{\beta V} \sum_{\omega'} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{k}''} \sum_{n'n''} B(\mathbf{k}' - \mathbf{k}''|\omega - \omega') H_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega) \times \quad (2.57)$$

$$\times |\chi(n'\mathbf{k}', n''\mathbf{k}'')|^2 G_{n''}(\mathbf{k}''|\omega') G_{n''}(-\mathbf{k}''|\omega') f_{n''}(\mathbf{k}''|\omega'),$$

unde funcția

$$H_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega) = H_{nnn'n'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega) \quad (2.58)$$

satisface ecuația

$$H_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega) = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{1}{V} \sum_{n_1} \sum_{\mathbf{k}_1} W_-(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) G_{n_1}(\mathbf{k}_1|\omega) G_{n_1}(-\mathbf{k}_1|\omega) H_{n_1 n'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'). \quad (2.59)$$

Mai departe să introducem funcția

$$L_{nm}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega, \omega') = - \sum_{n_1 \mathbf{k}_1} H_{nn_1}(\mathbf{k}, \mathbf{k}_1|\omega) \times \quad (2.60)$$

$$\times |\chi(n_1 \mathbf{k}_1, m \mathbf{k}')|^2 B(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}'|\omega - \omega'),$$

care satisface ecuația

$$L_{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'|\omega, \omega') = -B(\mathbf{k} - \mathbf{k}'|\omega - \omega') |\chi(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}')|^2 + \frac{1}{V} \sum_{n_1 \mathbf{k}_1} W_-(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) |\chi(n\mathbf{k}, n_1 \mathbf{k}_1)|^2 G_{n_1}(\mathbf{k}_1|\omega) G_{n_1}(-\mathbf{k}_1|\omega) \times \quad (2.61)$$

$$\times L_{n_1 n'}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'|\omega, \omega').$$

Trecând de la sumă la integrală în spațiul \mathbf{k} , vom folosi faptul că produsul de funcții Green $G_n(\mathbf{k}|\omega)G_n(-\mathbf{k}|\omega)$ scade rapid cu depărtarea de foaia suprafeței Fermi care corespunde benzii n și astfel vom putea înlocui toate mărimile care variază lent cu valorile lor la suprafața Fermi ca de exemplu $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_n^F|$, etc. Deoarece funcțiile f_n și L_{nn} conțin și ele produsul funcțiilor Green, mai departe este suficient să examinăm numai funcția

$$f_n(\omega) = f_n(k_n^F|\omega). \quad (2.62)$$

Introducem notațiile

$$\begin{aligned} \Lambda_m(\omega) &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon_m G_m(\mathbf{k}|\omega) G_m(-\mathbf{k}|\omega) = \frac{1}{|\omega|\eta_m(\omega)}; \\ V_{nm}(\omega)N_m &= -\frac{1}{(2\pi)^3} \int_{s_m} \frac{ds_m}{|\nabla\varepsilon_m} B(|\mathbf{k}_n^F| - |\mathbf{k}_m^F|\omega) |\chi(n\mathbf{k}_n^F, m\mathbf{k}_m^F)|^2; \\ L_{nm}(\omega, \omega')N_m &= \frac{1}{2\pi^2} \int_{s_m} \frac{ds_m}{|\nabla\varepsilon_m} L_{nm}(\mathbf{k}_n^F, \mathbf{k}_m^F|\omega, \omega'). \end{aligned} \quad (2.63)$$

În prima ecuație a lui (2.63) se presupune că în funcțiile Green se ia numai interacția cu impuritățile. În operatorul de masă însă este luată în considerație și interacția electron-fonon, ca și interacția electron-electron.

Definiția lui V_{nm} din (2.65) reprezintă deducerea microscopică a constantelor fenomenologice V_{nm} care sunt conținute în hamiltonianul model (1.1).

Observăm că în esență funcția Green $B(\mathbf{k}|\omega)$ trebuie înțeleasă într-un sens mult mai general decât funcția Green bosonică al câmpului bosonic efectiv, descriind atât interacția electronilor cu fononii, cât și interacția coulombiană. Într-adevăr, în lucrările lui V. A. Moskalenko [32, 33] s-a arătat că în calculele termodinamice nerelativiste interacția coulombiană a electronilor putem înlocui interacția lor cu un câmp bosonic auxiliar, a cărui amplitudine o notăm cu $\Phi_c(x)$. În acest fel, în locul interacției instantanee H_{e-e} putem examina interacția electronilor cu câmpul auxiliar $\Phi_c(x)$

$$H_{e-c} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \psi^+(x\sigma) \psi(x\sigma) \Phi_c(x), \quad (2.64)$$

care satisface condiția

$$B_c^0(x-x') = -\langle T\Phi_c(x)\Phi_c(x') \rangle = V(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(\tau-\tau'), \quad (2.65)$$

unde $V(\mathbf{x}) = e^2/|\mathbf{x}|$ este energia potențială coulombiană a electronilor. La temperatură nulă o astfel de înlocuire s-a presupus în lucrările [40, 44].

La scrierea hamiltonianului total, evident, trebuie adăugat termenul H_c^0 care corespunde câmpului bosonic auxiliar liber. Introducerea câmpului Φ_c este comodă pentru tratarea simultană a celor două interacții H_{e-ph} și H_{e-e} . În total cele două interacții pot fi reprezentate sub forma

$$H_{\text{int}} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{x} \hat{\psi}^+(x\sigma) \hat{\psi}(x\sigma) \Phi(x), \quad (2.66)$$

unde

$$\Phi(x) = \Phi_{ph}(x) + \Phi_c(x). \quad (2.67)$$

În acest fel, apare necesitatea introducerii unei funcții Green libere bosonice unice de forma

$$B^0(x - x') = -\langle T\Phi(x)\Phi(x') \rangle = B_{ph}^0(x - x') + B_c^0(x - x'). \quad (2.68)$$

Același lucru se poate spune despre funcția Green bosonică totală

$$B(x - x') = -\frac{\langle T\Phi(x)\Phi(x')U(\beta) \rangle}{\langle U(\beta) \rangle}. \quad (2.69)$$

care în lipsa impurităților și trecerea la reprezentarea impulsului duce la o formă destul de simplă a interacției simultane electron-fonon și coulombiană. Astfel, de exemplu, pe baza ecuației Dyson avem

$$B(\mathbf{k}|\omega_n) = \frac{B^0(\mathbf{k}|\omega_n)}{1 - B^0(\mathbf{k}|\omega_n)\Pi(\mathbf{k}|\omega_n)}, \quad (2.70)$$

unde

$$B^0(\mathbf{k}|\omega_n) = B_{ph}^0(\mathbf{k}|\omega_n) + B_c^0(\mathbf{k}|\omega_n); \quad (2.71)$$

$$B_{ph}^0(\mathbf{k}|\omega_n) = -\frac{\alpha_k^2}{\omega_n^2 + \omega_k^2}; \quad B_c^0(\mathbf{k}|\omega_n) = -\frac{4\pi e^2}{k^2}, \quad (2.72)$$

$\omega_n = \frac{2\pi n}{\beta}$; $\Pi(\mathbf{k}|\omega_n)$ fiind operatorul de polarizare al sistemului. În prezența impurităților apare necesitatea luării în considerare a acestora pe toate liniile electronice ale diagramelor și ca rezultat se modifică și operatorul de polarizare. După cum se știe, considerarea lui $\Pi(\mathbf{k}|\omega_n)$ duce la ecranarea potențialului coulombian, care devine cu rază scurtă de acțiune.

După cum s-a specificat mai sus, trebuie să ținem cont de faptul că renormarea mărimilor fononice nu trebuie să se facă de două ori deoarece în mărimile α_k și ω_k acest lucru deja s-a făcut. Întorcându-ne acum la definiția (2.63) a lui V_{nm} , trebuie să considerăm că această expresie reprezintă o aproximație, care ia în considerație atât interacția electron-fonon cât și cea coulombiană. În hamiltonianul model (1.1) interacția V_{nm} s-a înlocuit cu o constantă într-un interval de frecvențe de ordinul lui ω_D din jurul suprafeței Fermi. Vorbind mai precis, în acel caz, când se iau în considerație ambele interacții, trebuie introduse două intervale diferite, din care unul se referă la interacția coulombiană și nu are lărgimea ω_D , ci este de ordinul energiei Fermi E_F .

Hamiltonianul Bardeen-Pines, spre deosebire de cel a lui Feshbach, nu conține această problemă a calculului dublu.

Totuși până acum, deși s-a păstrat dependența coeficienților interacției efective interelectronice V_{nm} , nu s-a limitat domeniul de sumare după frecvențele ω_r , astfel că convergența sumelor se realizează de către funcția renormată $B(\mathbf{k}|\omega_n)$.

Aici au fost omise câteva modificări posibile ale lui V_{nm} , care ar fi putut să apară în mediile anizotrope și ar fi putut duce la dependențe suplimentare a acestor mărimi de direcție, caracteristice pentru modelul bibandă anizotrop.

Mai departe presupunem izotropia mărimilor V_{nm} . În acest caz funcțiile introduse mai sus satisfac ecuațiile

$$f_n(\omega) = \frac{1}{4\beta} \sum_{\omega'} \sum_m L_{nm}(\omega, \omega') N_m \Lambda_m(\omega') f_m(\omega'); \quad (2.73)$$

$$L_{nm}^{(\omega, \omega')} = 4\pi V_{nm}(\omega - \omega') + \sum_{n_1} \frac{\hbar}{2\kappa_{nn_1}} \Lambda_{n_1}(\Omega) L_{n,m}(\omega, \omega'), \quad (2.74)$$

unde

$$\frac{\hbar}{2\kappa_{nm}} = \frac{c}{8\pi^2 \hbar^3} \int \frac{ds_m}{|\nabla \varepsilon_m}| |\chi(n\mathbf{k}_n^F, m\mathbf{k}_m^F)|^2 W_-(\mathbf{k}_n^F - \mathbf{k}_m^F). \quad (2.75)$$

Rezolvând ecuația (2.73) în cazul a două benzi ($n = 1, 2$), obținem

$$L_{nm}(\omega, \omega') = \frac{D_{nm}(\omega, \omega')}{D(\omega)}, \quad (2.76)$$

unde

$$\begin{aligned} D_{1m}(\omega, \omega') &= 4\pi \left[V_{1m}(\omega - \omega') \left(1 - \frac{\hbar}{2\kappa_{22}|\omega|\eta_2(\omega)} \right) + V_{2m}(\omega - \omega') \frac{\hbar}{2\kappa_{12}|\omega|\eta_2(\omega)} \right]; \\ D_{2m}(\omega, \omega') &= 4\pi \left[V_{2m}(\omega - \omega') \left(1 - \frac{\hbar}{2\kappa_{11}|\omega|\eta_1(\omega)} \right) + V_{1m}(\omega - \omega') \frac{\hbar}{2\kappa_{21}|\omega|\eta_1(\omega)} \right]; \\ D(\omega) &= \left(1 - \frac{\hbar}{2\kappa_{11}|\omega|\eta_1(\omega)} \right) \left(1 - \frac{\hbar}{2\kappa_{22}|\omega|\eta_2(\omega)} \right) - \\ &\quad - \frac{\hbar}{2\kappa_{12}|\omega|\eta_1(\omega)} \frac{\hbar}{2\kappa_{21}|\omega|\eta_2(\omega)}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Substituind valorile lui Λ_m din (2.63) și ale lui L_{nm} din (2.76) în ecuația (2.73), obținem

$$f_n(\omega) = \frac{1}{4\beta} \sum_{\omega'} \sum_m \frac{D_{nm}(\omega, \omega')}{D(\omega)} \frac{N_m f_m(\omega')}{|\omega'|\eta_m(\omega')}. \quad (2.78)$$

Să introducem în locul mărimilor $f_n(\omega)$ noi funcții $\chi_n(\omega)$ conform formulei

$$\chi_n(\omega) = \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega'} \frac{1}{|\omega'|} \sum_m \frac{N_m V_{nm}(\omega - \omega') f_m(\omega')}{\eta_m(\omega')}. \quad (2.79)$$

Atunci conform cu (2.78) obținem

$$\begin{aligned} f_1(\omega) &= \frac{1}{D(\omega)} \left[\left(1 - \frac{\hbar}{2\kappa_{22}|\omega|\eta_2(\omega)} \right) \chi_1(\omega) + \frac{\hbar \chi_2(\omega)}{2\kappa_{12}|\omega|\eta_2(\omega)} \right]; \\ f_2(\omega) &= \frac{1}{D(\omega)} \left[\frac{\hbar \chi_1(\omega)}{2\kappa_{21}|\omega|\eta_1(\omega)} + \chi_2(\omega) \left(1 - \frac{\hbar}{2\kappa_{11}|\omega|\eta_1(\omega)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.80)$$

Substituind aceste expresii în (2.79), deducem

$$\begin{aligned} \chi_n(\omega) = & \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega'} \left\{ \sum_m V_{nm}(\omega - \omega') N_m \chi_m(\omega') + \right. \\ & + \frac{1}{(\omega')^2 + |\omega'| (R_1 + R_2) + R} \left[V_{n1}(\omega - \omega') N_1 \left(-\chi_1(\omega') (R + R_1 |\omega'|) + \right. \right. \\ & + |\omega'| \chi_1(\omega') \frac{\hbar}{2\kappa_{12}} \left. \right) + V_{n2}(\omega - \omega') N_2 \left(-\chi_2(\omega') (R + R_2 |\omega'|) + \right. \\ & \left. \left. + |\omega'| \chi_1(\omega') \frac{\hbar}{2\kappa_{21}} \right) \right] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (2.81)$$

unde

$$\begin{aligned} R_n = & \frac{\hbar}{2\tau_n} - \frac{\hbar}{2\kappa_{nn}}; \quad R = R_1 R_2 - \frac{\hbar^2}{2\chi_{12}\chi_{21}}; \\ D(\omega) = & \frac{|\omega|^2 + |\omega|(R_1 + R_2) + R}{\left(|\omega| + \frac{\hbar}{2\tau_1} \right) \left(|\omega| + \frac{\hbar}{2\tau_2} \right)} \end{aligned} \quad (2.82)$$

Suma după ω' în (2.81) converge suficient de repede pentru $|\omega'| \rightarrow \infty$, totuși pentru $|\omega'|$ mic, ceea ce corespunde temperaturilor mici, această sumă are o singularitate logaritmică. În acest fel pentru β_c mare, dar finit, contribuția principală la sumă se va datora termenilor cu ω' mic, adică va fi o contribuție proporțională cu $\ln \beta_c$. Pentru o soluție aproximativă a problemei de determinare a lui T_c , când constanta de cuplaj și T_c sunt mici, va fi suficient să ne limităm la singularitatea logaritmică.

Cu precizia logaritmică indicată, sistemul (2.81), în care punem

$$\chi_{11} = \chi_{11}(\omega = 0); \quad V_{nm} = V_{nm}(\omega = 0), \quad (2.83)$$

după o serie de transformări capătă forma [17, 33]

$$\begin{aligned} \chi_n = & \sum_m V_{nm} N_m \chi_m \ln \left[2\gamma_E \frac{\beta_c \hbar \omega_{nm}}{\pi} \right] + \\ & \sum_m V_{nm} N_m \chi_m \frac{\sqrt{s_1} I(\beta_c \sqrt{s_2}) - \sqrt{s_2} I(\beta_c \sqrt{s_1})}{\sqrt{s_2} - \sqrt{s_1}} + \\ & + \frac{R_1 + R_2}{s_1 - s_2} \left[V_{n1} N_1 \left(\frac{\hbar}{2\kappa_{12}} \chi_2 - R_1 \chi_1 \right) + V_{n2} N_2 \times \right. \\ & \left. \times \left(\frac{\hbar}{2\kappa_{21}} \chi_1 - R_2 \chi_2 \right) \right] \left[I(\beta_2 \sqrt{s_2}) - I(\beta_c \sqrt{s_1}) \right]. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Aici s-au introdus constantele

$$\begin{aligned} s_{1,2} = & \frac{1}{2} \left\{ \left[(R_1 + R_2)^2 - 2R \right] \mp \sqrt{\left[(R_1 + R_2)^2 - 2R \right]^2 - 4R^2} \right\} = \\ = & \frac{1}{2} (R_1 + R_2)^2 \left[1 - 2\alpha \mp \sqrt{1 - 4\alpha} \right]; \\ \alpha = & \frac{R_1 R_2}{(R_1 + R_2)^2} \left[1 - \frac{\hbar^2}{2\kappa_{12} 2\kappa_{21} R_1 R_2} \right] \end{aligned} \quad (2.85)$$

și frecvențele efective ω_{nm} . Aceste ultime mărimi sunt determinate de formula

$$\begin{aligned} & \sum_m \ln(\hbar\omega_{nm})V_{nm}N_m\chi_m = \\ & = \int_0^\infty (\ln y)d \left[\sum_m V_{nm}(-iy + 0^+) \frac{N_m}{2} (\chi_m(iy + 0^+) + \chi_m(iy - 0^+)) \right]. \end{aligned} \quad (2.86)$$

În acest fel, deducerea frecvențelor relative ω_{nm} cere cunoașterea dependenței totale de frecvență a funcțiilor $V_{nm}(\omega)$ și $\chi_{nm}(\omega)$. În sfârșit, integrala $I(x)$ se determină din formula

$$I(x) = \int_0^\infty \frac{dt}{t} \frac{\text{th} \frac{xt}{2}}{1+t^2} = \psi\left(\frac{1+x/\pi}{2}\right) - \psi(1/2), \quad (2.87)$$

unde ψ este derivata logaritmului funcției Γ .

Egalând cu zero determinantul sistemului de ecuații (2.84), obținem valoarea temperaturii critice de generare a perechii electronice legate în aliajele supraconductoare. Această ecuație are forma

$$a\zeta^2 - b\zeta + c = 0 \quad (2.88)$$

cu expresiile ceva mai complicate pentru coeficienți

$$\begin{aligned} \zeta &= \ln \left(\frac{2\gamma_E \beta_c \hbar \omega}{\pi} \right); \quad b = b_0 + b_1; \quad c = 1 + c_1 + c_2; \\ b_0 &= N_1 V_{11} + N_2 N_{22}; \quad a = N_1 N_2 (V_{11} V_{22} - V_{12} V_{21}); \\ b_1 &= -N_1 N_2 V_{11} V_{22} (\eta_{11} + \eta_{21} + \zeta_{11} + \zeta_{12}) + N_1 N_2 V_{12} V_{21} (\eta_{12} + \eta_{21} + \\ &+ \zeta_{11} + \zeta_{22}); \quad c_1 = -V_{11} N_1 (\eta_{11} + \zeta_{11}) - V_{12} N_2 \zeta_{12} - \\ &- V_{22} N_2 (\eta_{22} + \zeta_{22}) - V_{21} N_1 \zeta_{21}; \\ c_2 &= \left[N_1 V_{11} (\eta_{11} + \zeta_{11}) + V_{12} N_2 \zeta_{12} \right] \left[V_{22} N_2 (\eta_{22} + \zeta_{22}) + \right. \\ &+ V_{21} N_1 \zeta_{21} \left. \right] - \left[V_{12} N_2 (\eta_{12} + \zeta_{22}) + V_{11} N_1 \zeta_{21} \right] \times \\ &\times \left[V_{21} N_1 (\eta_{21} + \zeta_{11}) + V_{22} N_2 \zeta_{21} \right]; \\ \zeta_{11} &= \frac{1}{\sqrt{s_2} - \sqrt{s_1}} \left[\sqrt{s_1} I(\beta_c \sqrt{s_2}) - \sqrt{s_2} I(\beta_c \sqrt{s_1}) \right] - \\ &- \frac{R_1 (R_1 + R_2)}{s_2 - s_1} \left[I(\beta_c \sqrt{s_2}) - I(\beta_c \sqrt{s_1}) \right] \\ \zeta_{12} &= \frac{\hbar}{2\kappa_{21}} \frac{R_1 + R_2}{s_2 - s_1} \left[I(\beta_c \sqrt{s_2}) - I(\beta_c \sqrt{s_1}) \right]; \quad \eta_{nm} = \ln \frac{\omega_{nm}}{\omega}. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Mărimile ζ_{22} și ζ_{21} se deduc din formulele de mai sus prin schimbarea indicilor de bandă; ω este o constantă arbitrară, care poate fi luată egală cu frecvența Debye.

Soluția ecuației (2.88) are forma

$$\zeta_{\pm} = \frac{b}{2a} \left[1 \pm \sqrt{1 - \frac{4ac}{b^2}} \right]. \quad (2.90)$$

Observăm că în limita legăturii slabe, pe care o presupunem, aceste formule pot fi simplificate, dacă păstrăm numai termenii principali proporționali cu constanta de cuplaj la puterea minus unu și zero. Termenii la puterea zero al constantei de cuplaj modifică numai factorul preexponențial din expresia pentru temperatura critică a supraconductorului. Deosebirea dintre (2.90) și (1.16) este legată de doi factori. Prima deosebire apare deja la supraconductorii puri cu două benzi, tratați în cadrul modelului Fröhlich. Calculele, făcute pe baza modelului Fröhlich sau Bardeen-Pines, conțin inițial frecvențele ω_{nm} și, prin urmare, în mărimile η_{nm} , ca și în modelul BCS figurează o singură frecvență $\omega \simeq \omega_D$ și toate constantele η_{nm} se iau egale cu zero.

Diferența în determinarea lui T_{c0} , adică temperatura de tranziție a metalului bibandă pur pentru modelele BCS și Fröhlich, este următoarea:

$$\begin{aligned} k_B(T_{c0})_{\text{BCS}} &= \frac{2\gamma_E}{\pi} \hbar \omega_D e^{-\zeta_{\pm}^{(0)}}; \\ k_B(T_{c0})_{\text{Fr}} &= \frac{2\gamma_E}{\hbar} \tilde{\omega}_{\pm} e^{-\zeta_{\pm}^{(0)}}, \end{aligned} \quad (2.91)$$

unde

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{\pm} &= \omega \exp \left[-\frac{b_{10}}{b_0} \zeta_{\pm}^{(0)} \pm \frac{c_{10} - \frac{2b_{10}}{b_0}}{\sqrt{b_0^2 - 4a}} \right]; \\ b_{10} &= -N_1 N_2 V_{11} V_{21} (\eta_{11} + \eta_{22}) + N_1 N_2 V_{12} V_{21} (\eta_{12} + \eta_{21}); \\ c_{10} &= -V_{11} N_1 \eta_{11} - V_{22} N_2 \eta_{22}. \end{aligned} \quad (2.92)$$

A doua deosebire a lui (2.90) față de (1.16) este condiționată de prezența impurităților. Abaterea temperaturii critice T_c a aliajului de temperatura critică T_{c0} a metalului pur se determină din formula

$$\ln \frac{T_{c0}}{T_c} = \frac{b'_1}{b_0} \zeta_{\pm}^{(0)} \mp \frac{c'_1 - 2\frac{b'_1}{b_0}}{\sqrt{b_0^2 - 4a}}, \quad (2.93)$$

unde

$$\begin{aligned} b'_1 &= -a(\zeta_{11} + \zeta_{22}); \\ c'_1 &= -V_{11} N_1 \zeta_{11} - V_{22} N_2 \zeta_{22} - V_{12} N_2 \zeta_{12} - V_{21} N_1 \zeta_{21}. \end{aligned} \quad (2.94)$$

Folosind definiția lui ζ_{nm} din (2.89), rescriem formula (2.93) sub forma

$$\begin{aligned} \ln \left[\frac{T_{c0}}{T_c} \right] &= \kappa^{\pm} \frac{(R_1 + R_2)^2}{s_2 - s_1} \left[I(\beta_c \sqrt{s_2}) - I(\beta_c \sqrt{s_1}) \right] - \\ &\quad - \frac{\sqrt{s_1} I(\beta_c \sqrt{s_2}) - \sqrt{s_2} I(\beta_c \sqrt{s_1})}{\sqrt{s_2} - \sqrt{s_1}}, \end{aligned} \quad (2.95)$$

unde

$$\kappa^\pm = \frac{1}{(R_1 + R_2)\sqrt{b_0^2 - 4a}} \left\{ V_{11}N_1R_1 + V_{22}N_2R_2 - V_{12} \left(\frac{\hbar N_1}{2\kappa_{12}} + \frac{\hbar N_2}{2\kappa_{21}} \right) - \frac{R_1 + R_2}{2} \left[b_0 \pm \sqrt{b_0^2 - 4a} \right] \right\}. \quad (2.96)$$

Acest coeficient satisface condiția $0 \leq \kappa^\pm \leq 1$.

2.4 Discuția rezultatelor

Să analizăm cea mai simplă situație, când impuritatea nu are spin și, prin urmare, difuzia pe impurități nu duce la răsturnarea spinului electronului ($U_2 = 0$). În acest caz în modelul unibandă izotrop al supraconductorului, în conformitate cu teorema Anderson și rezultatele lui A. A. Abrikosov și L. P. Gorkov [27], impuritățile nemagnetice nu influențează în mod esențial proprietățile termodinamice ale supraconductorului, și în particular nu modifică temperatura critică T_c .

Totuși, datorită canalului interbandă de difuzie a electronilor pe impurități, impuritățile nemagnetice influențează în mod esențial temperatura critică și în general proprietățile termodinamice ale aliajelor multibandă. Să examinăm mai în detaliu această influență asupra temperaturii critice T_c . În acest caz

$$\frac{1}{\kappa_{nm}} = \frac{1}{\tau_{nm}}; \quad R_1 = \frac{\hbar}{2\tau_{12}}; \quad R_2 = \frac{\hbar}{2\tau_{21}}; \quad R = 0; \quad s_1 = 0; \quad s_2 = (R_1 + R_2)^2$$

și formula (2.95) capătă forma mult mai simplă:

$$\ln \frac{T_{c0}}{T_c} = \kappa^\pm I \left[\beta_c \left(\frac{\hbar}{2\tau_{12}} + \frac{\hbar}{2\tau_{21}} \right) \right]; \quad (2.97)$$

$$\kappa^\pm = \mp \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau_{12}}{\tau_{21}} \right) \sqrt{b_0^2 - 4a}} \left\{ V_{11}N_1 + V_{22}N_2 \frac{\tau_{12}}{\tau_{21}} - N_1 V_{12} \left(1 + \frac{N_2}{N_1} \frac{\tau_{12}}{\tau_{21}} \right) - \xi_\pm^{(0)} a \left(1 + \frac{\tau_{12}}{\tau_{21}} \right) \right\}. \quad (2.98)$$

Particularitatea caracteristică a expresiei (2.98) este prezența în ea numai a timpilor de relaxare intrabandă pe impuritățile nemagnetice. Indiferent de dependența funcției Green uniparticulă de difuzia interbandă, mărimea T_c nu depinde de timpilor de relaxare respectivi. Această proprietate a supraconductorilor bibandă a fost stabilită în lucrările lui V. A. Moskalenko și M. E. Palistrant [35, 36].

Pe baza determinării timpului de relaxare τ_{nm} (2.25) pentru foile izotrope ale suprafeței Fermi, are loc egalitatea

$$\frac{\tau_{12}}{\tau_{21}} = \frac{N_1}{N_2}, \quad (2.99)$$

care duce la o simplificare și mai mare a formulei pentru κ^\pm :

$$\kappa^\pm = \mp \frac{N_1 N_2 (V_{11} + V_{22} - 2V_{12}) - a(N_1 + N_2) \xi_\pm^{(0)}}{(N_1 + N_2) \sqrt{B_0^2 - 4a}}. \quad (2.100)$$

În legătură cu cazul concentrației mici de impurități ($lk_F \gg 1$), trebuie să deosebim două limite ale concentrațiilor "mici" și "mari" ale impurităților nemagnetice în sensul îndeplinirii inegalităților

$$\frac{\hbar\beta_c}{\tau_{nm}} \ll 1 \quad \text{și} \quad \frac{\hbar\beta_c}{\tau_{nm}} \gg 1. \quad (2.101)$$

La concentrații mici argumentul funcției $I(x)$ este mic, și această funcție poate fi aproximată prin expresia

$$I(x) \Big|_{x \rightarrow 0} \simeq \frac{\pi}{4}x. \quad (2.102)$$

În acest caz avem

$$k_B T_c \simeq k_B T_{c0} - \frac{\pi}{8} \kappa^\pm \left(\frac{\hbar}{\tau_{12}} + \frac{\hbar}{\tau_{21}} \right), \quad (2.103)$$

adică apare o scădere liniară a temperaturii critice cu creșterea concentrației de impurități, așa cum s-a spus, și asta datorită tranzițiilor interbenzi a electronilor în procesul de difuzie pe atomii de impuritate. În al doilea caz limită al concentrației "mari", argumentul funcției $I(x)$ este mare și putem folosi aproximația

$$I(x) \simeq \ln \left[\frac{2\gamma_E}{\pi} x \right] + \frac{\pi^2}{6x^2}. \quad (2.104)$$

Pentru $\kappa^\pm \neq 1$ este suficient să ne limităm la primul termen al acestei ecuații și avem

$$\frac{\beta_c}{\beta_{c0}} = \left[\frac{\beta_{c0}\gamma_E}{\pi} \left(\frac{\hbar}{\tau_{12}} + \frac{\hbar}{\tau_{21}} \right) \right]^{\frac{\kappa^\pm}{1-\kappa^\pm}}. \quad (2.105)$$

Expresia (2.105) indică scăderea după o lege de putere a temperaturii critice cu creșterea concentrației de impurități. La o concentrație suficient de mare a impurităților nemagnetice, mărginită superior de condiția $lk_F \gg 1$, mărimea lui T_c rămâne diferită de zero. Prin urmare, impuritățile nemagnetice (în limitele valabilității acestei teorii și a condiției $\kappa^\pm \neq 1$) nu poate duce la dispariția supraconductivității metalului.

Pentru $\kappa^\pm = 1$ expresia (2.97), în limita concentrațiilor mari a impurităților, capătă forma ($T_c/T_{c0} \ll 1$)

$$\frac{2}{3}\pi^2 \left[\beta_c \hbar \left(\frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_{21}} \right) \right]^{-2} \simeq -\ln \left[\frac{\hbar\beta_{c0}\gamma_E}{\pi} \left(\frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_{21}} \right) \right]. \quad (2.106)$$

Această limită presupune existența unei concentrații limită a impurităților, determinată de formula

$$\hbar \left(\frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_{21}} \right)_c = \frac{\pi}{\gamma_E} k_B T_{c0}, \quad (2.107)$$

pentru care temperatura critică T_c tinde la zero și ca urmare starea supraconductoare a metalului dispare.

Din cele două valori ale constantei κ^\pm , trebuie să luăm pe κ^- pentru a fi în concordanță cu valoarea temperaturii critice a metalului pur care a fost discutat în capitolul precedent.

În acest fel, cu excluderea cazului particular $\kappa = 1$, în aliajele supraconductoare creșterea concentrației impurităților nemagnetice, face mai întâi ca temperatura critică să scadă, apoi duce la o saturare fără a exista o concentrație critică, pentru care T_c tinde către zero.

Să trecem acum la examinarea influenței impurităților paramagnetice asupra temperaturii critice T_c a supraconductorului bibandă. Pe lângă procesele interbandă care influențează în mod esențial pe T_c , apar și procesele intrabandă care influențează această mărime datorită răsturnării spinului electronic.

În cazul limită al concentrației mici a impurităților paramagnetice când este îndeplinită condiția $\beta_c \sqrt{s_n} \ll 1$, $n = 1, 2$, obținem expresia pentru temperatura critică

$$k_B T_c \simeq k_B T_{c0} - \frac{\pi}{8} (\kappa^-) \hbar \left(\frac{1}{\tau_{12}} + \frac{1}{\tau_{21}} + \frac{1}{\tau_{11}^s} + \frac{1}{\tau_{22}^s} \right), \quad (2.108)$$

unde timpul de relaxare de schimb se determină din formula

$$\frac{1}{\tau_{nn}^s} = \frac{1}{\tau_{nn}} - \frac{1}{\kappa_{nn}}. \quad (2.109)$$

În acest fel, scăderea lui T_c este legată atât de procesele de difuzie interbandă, cât și de procesele de schimb intrabandă.

Cu creșterea concentrației este posibil al doilea caz limită când $\beta_c \sqrt{s_2} \gg 1$, $\beta_c \sqrt{s_1} \ll 1$. Ambele inegalități pot fi satisfăcute simultan, astfel că parametrul s_1 este proporțional cu partea mai slabă a interacției de schimb U_2 , în timp ce parametrul s_2 este proporțional cu partea care nu este de schimb a interacției, U_1 . În acest caz pe baza lui (2.95) avem

$$\begin{aligned} (\kappa^- - 1) \ln \frac{T_{c0}}{T_c} &\simeq \frac{\pi}{4} \beta_c (R_1 + R_2) \alpha (\kappa^- - 1) - \\ &- (\kappa^- - \alpha) \left[\ln \left(\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta_{c0} (R_1 + R_2) \right) + \frac{\pi^2}{6\beta_c (R_1 + R_2)^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.110)$$

În sfârșit, în cazul limită al concentrației mari de impurități paramagnetice când avem $\beta_c \sqrt{s_2} > \beta_c \sqrt{s_1} \gg 1$ obținem ($\kappa^- \neq 1$)

$$(k_B T_c)^2 \simeq \frac{6\alpha^2}{\pi^2} (R_1 + R_2)^2 \left[\ln \left(\frac{1}{\alpha} \right) - \frac{1}{1 - \kappa^-} \ln \left(\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta_{c0} (R_1 + R_2) \right) \right].$$

Pentru o anumită concentrație critică a impurităților, determinată de condiția

$$\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta_{c0} (R_1 + R_2) = \left(\frac{1}{\alpha} \right)^{1 - \kappa^-},$$

temperatura critică a supraconductorului tinde la zero și, prin urmare, starea supraconductoare a metalului dispare. Aceste rezultate au fost obținute de V.A. Moskalenko și L.Z. Kon în lucrările [36, 37].

În încheiere reamintim că evaluarea de către M.E. Palistrant și V.A. Moskalenko [39] a caracterului retardat al interacției $B(\mathbf{k}|\omega)$ al electronilor prin fononi, duce la apariția unor termeni suplimentari care duc la o dependență și mai complicată a lui T_c de concentrația de impurități. Totuși raportul contribuțiilor suplimentare față de cele de mai sus nu este esențial în cazul supraconductorilor cu temperaturi critice joase.

TERMODINAMICA ALIAJELOR SUPRACONDUCTOARE CU DOUĂ BENZI

3.1 Ecuațiile fundamentale

După ce s-a arătat clar care este rolul proceselor interbandă asupra temperaturii critice T_c , în teoria supraconductorilor multibandă a apărut necesitatea studiului detaliat al influenței acestora asupra proprietăților termodinamice, electromagnetice și cinetice.

Termodinamica superconductorilor bibandă cu impurități a fost dezvoltată în lucrările lui V.A. Moskalenko, L.Z. Kon, M.E. Palistrant și alții [45]-[49]. O sinteză privind proprietățile electromagnetice și cinetice ale supraconductorilor bibandă se găsește în cartea [18]. Tot acolo se găsește o bibliografie amănunțită asupra acestei probleme.

Să trecem la discuția rezultatelor fundamentale privind termodinamica supraconductorilor bibandă care conțin atât impurități nemagnetice cât și impurități magnetice. Să examinăm funcțiile Green de temperatură ale metalului supraconductor cu impurități. Hamiltonianul sistemului se compune din hamiltonianul (1.1) al supraconductorului multibandă și termenul (2.2) al interacției cu impuritățile.

Prin analogie cu (1.40), să introducem funcțiile Green de temperatură

$$\begin{aligned} G(x\sigma, x'\sigma') &= -\langle T\hat{\psi}(x\sigma)\hat{\psi}(x'\sigma') \rangle; \\ F(x\sigma, x'\sigma') &= -\langle T\hat{\psi}(x\sigma)\hat{\psi}(x'\sigma') \rangle; \\ \tilde{F}(x\sigma, x'\sigma') &= -\langle T\hat{\psi}(x\sigma)\hat{\psi}(x'\sigma') \rangle; \quad x = (\mathbf{x}, \tau), \end{aligned} \tag{3.1}$$

unde amplitudinile electronice cuantice $\hat{\psi}$ și $\hat{\psi}$ se presupune că sunt scrise în imaginea Heisenberg. Media statistică $\langle \dots \rangle$ se face cu operatorul statistic total.

După medierea pe impurități a funcțiilor respective, mediere care a fost discutată în capitolul precedent, se restabilește omogenitatea lor spațială iar dependența lor de spin capătă o formă simplă, determinată de formulele (1.42). Ca urmare putem

scrie

$$\begin{aligned}\langle G(x\sigma, x'\sigma') \rangle_c &= \delta_{\sigma\sigma'} \bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \tau - \tau'); \\ \langle F(x\sigma, x'\sigma') \rangle_c &= g_{\sigma\sigma'} \bar{F}(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \tau - \tau'); \\ \langle \tilde{F}(x\sigma, x'\sigma') \rangle_c &= -g_{\sigma\sigma'} \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \tau - \tau'),\end{aligned}\tag{3.2}$$

unde factorul spinorial $g_{\sigma\sigma'}$, se determină din formula (1.42). Bara de deasupra funcțiilor indică faptul că ele conțin dependența de impurități spre deosebire de funcțiile fără bară care se referă la metalul pur. Efectuarea medierii pe configurații se referă atât la distribuția spațială aleatoare a ionilor de impuritate cât și la orientarea aleatoare a spinilor acestora.

Pe baza tehnicii de mediere, folosită în cap.2, se obțin ușor următoarele ecuații fundamentale ale sistemului:

$$\begin{aligned}\bar{G}(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \omega_n) &= G(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \omega_n) + \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_+(\mathbf{q}) \times \\ &\times \left[G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1 | \omega) \bar{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) \bar{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) - F(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1 | \omega) \bar{F}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | -\omega) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) \right] - \\ &- \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_-(\mathbf{q}) \left[G(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1 | \omega) \bar{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) + \right. \\ &\left. + F(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1 | \omega) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) \bar{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) \right]; \\ \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \omega) &= \tilde{F}(\mathbf{x}, \mathbf{x}' | \omega) + \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_+(\mathbf{q}) \times \\ &\times \left[\tilde{F}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1 | \omega) \bar{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) \bar{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) + G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x} | -\omega) \bar{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 | -\omega) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) \right] + \\ &+ \int \int d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_-(\mathbf{q}) \left[G(\mathbf{x}_1, \mathbf{x} | -\omega) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) \bar{G}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) - \right. \\ &\left. - \tilde{F}(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1 | \omega) \bar{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}' | \omega) \right].\end{aligned}\tag{3.3}$$

O ecuație analoagă poate fi obținută pentru funcția \bar{F} .

În aceste ecuații s-a făcut trecerea la componentele Fourier după variabila τ și, prin urmare, ω_n sunt frecvențele impare $\frac{\pi}{\beta}(2n+1)$. Mărimile $W_+(\mathbf{q})$ și $W_-(\mathbf{q})$ sunt determinate de formulele (2.25) și (2.52).

Introducem trei operatori de masă care descriu interacția cu impuritățile:

$$\begin{aligned}M(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_+(\mathbf{q}) \bar{G}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega); \\ \Sigma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) &= \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_-(\mathbf{q}) \bar{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega); \\ \tilde{\Sigma}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2)} W_-(\mathbf{q}) \bar{\tilde{F}}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \omega).\end{aligned}\tag{3.4}$$

Toate funcțiile Green introduse și operatorii lor de masă pot fi dezvoltate în serie după funcțiile Bloch (vezi (2.16)). Cu luarea în considerație a conservării cvazi-impulsului în aproximația diagonalizării după indicii de bandă, ecuațiile (3.3) capătă forma

$$\begin{aligned}\bar{G}_n(k) &= G_n(k) + G_n(k) \left[M_n(k) \bar{G}_n(k) - \Sigma_n(k) \bar{F}_n(k) \right] - \\ &\quad - F_n(k) \left[M_n(-k) \bar{F}_n(k) + \tilde{\Sigma}_n(k) \bar{G}_n(k) \right]; \\ \bar{F}_n(k) &= \bar{F}_n(k) + \bar{F}_n(k) \left[M_n(k) \bar{G}_n(k) - \Sigma_n(k) \bar{F}_n(k) \right] + \\ &\quad + G_n(-k) \left[\tilde{\Sigma}_n(k) \bar{G}_n(k) + M_n(-k) \bar{F}_n(k) \right],\end{aligned}\tag{3.5}$$

unde prin k se înțelege vectorul cuadridimensional (\mathbf{k}, ω_n) .

Pentru operatorii de masă avem

$$\begin{aligned}M_n(\mathbf{k}|\omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_m W_+(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \bar{G}_m(\mathbf{k}'|\omega) |\chi(n\mathbf{k}, m\mathbf{k}')|^2; \\ \Sigma_n(\mathbf{k}|\omega) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \sum_m W_-(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \bar{F}_m(\mathbf{k}'|\omega) |\chi(n\mathbf{k}, m\mathbf{k}')|^2.\end{aligned}\tag{3.6}$$

Deoarece difuzia pe impurități este instantanee, frecvența ω_n nu se modifică în procesul de difuzie. Această particularitate se reflectă în formulele de mai sus. Expresia pentru $\tilde{\Sigma}_n$ se deosebește de Σ_n prin schimbarea lui \bar{F}_n cu \bar{F}_n . Funcțiile G_n , F_n și \bar{F}_n corespund supraconductorului pur și se determină din formulele (1.58). Trebuie să spunem că acum parametrii de ordine Δ_n nu mai corespund matalului pur ci aliajului real. De aceea mai jos vom folosi formulele (1.58) cu transformarea lui Δ_n în $\bar{\Delta}_n$, subliniind prin aceasta că parametrii de ordine $\bar{\Delta}_n$ depind de impurități.

Pe baza proprietăților fundamentale a acestor funcții avem

$$G_n(-k) = G_n^*(k); \quad F_n(-k) = \bar{F}_n(k) = F_n^*(k); \quad k = (\mathbf{k}, \omega)\tag{3.7}$$

din care rezultă că trebuie să avem

$$\begin{aligned}\tilde{\Sigma}_n(k) &= \Sigma_n(-k) = \Sigma_n^*(k); \\ M_n(-k) &= M_n^*(k); \quad \bar{F}_n(k) = \bar{F}_n(-k) = \bar{F}_n^*(k).\end{aligned}\tag{3.8}$$

Pe baza lui (3.5) rezultă

$$\begin{aligned}\bar{G}_n(k) &= -\frac{i\omega + \varepsilon_n(k) + M_n(-k)}{A(k)}; \\ \bar{F}_n(k) &= \frac{\bar{\Delta}_n^* + \tilde{\Sigma}_n(k)}{A(k)}; \quad \bar{F}_n(k) = \frac{\bar{\Delta}_n + \Sigma_n(k)}{A(k)}; \\ A(k) &= |i\omega + \varepsilon_n(k) + M_n(-k)|^2 + |\bar{\Delta}_n + \Sigma_n(k)|^2.\end{aligned}\tag{3.9}$$

Aceste expresii trebuie înlocuite în (3.6) pentru a determina operatorii de masă. Pentru efectuarea integrării după \mathbf{k}' trebuie să facem anumite aproximații și anume

scoaterea de sub semnul integrală a funcțiilor care variază lent cu energia și luarea valorilor lor la suprafața Fermi. Cu aceste aproximații făcute, operatorii de masă vor depinde numai de ω_n :

$$M_n(\omega) = M_n(\mathbf{k}_n^F|\omega); \quad \Sigma_n(\omega) = \Sigma_n(\mathbf{k}_n^F|\omega).$$

Pe baza acestor calcule obținem

$$\begin{aligned} M_n(\omega) &= -i \sum_m \frac{\hbar}{2\tau_{nm}} \frac{\omega_m^*(\omega)}{\sqrt{|\omega_m^*(\omega)|^2 + |\tilde{\Delta}_m(\omega)|^2}}; \\ \Sigma_n \omega &= \sum_m \frac{\hbar}{2\kappa_{nm}} \frac{\Delta_m(\omega)}{\sqrt{|\omega_m^*(\omega)|^2 + |\tilde{\Delta}_m(\omega)|^2}}; \\ \tilde{\omega}_m(\omega) &= \omega + iM_m(\omega); \quad \tilde{\Delta}_m(\omega) = \bar{\Delta}_m + \Sigma_m(\omega), \end{aligned} \quad (3.10)$$

unde timpii de relaxare au fost determinați în capitolul precedent. Soluția acestor ecuații o căutăm sub forma

$$M_n(\omega) = -i\omega t_n(\omega), \quad \Sigma_n(\omega) = \bar{\Delta}_n \chi_n(\omega),$$

unde mărimile $t_n(\omega)$ și $\chi_n(\omega)$ sunt reale și funcții pare de ω_n .

Pe baza lui (3.10) rezultă formulele

$$\begin{aligned} t_n(\omega_l) &= \sum_m \frac{\hbar}{2\tau_{nm}\omega_l} \frac{\bar{u}_m(\omega_l)}{\sqrt{1 + \bar{u}_m^2(\omega_l)}}; \\ \chi_n(\omega_l) &= \frac{1}{|\bar{\Delta}_n|} \sum_m \frac{\hbar}{2\kappa_{nm}} \frac{1}{\sqrt{1 + \bar{u}_m^2(\omega_l)}}; \\ \bar{u}_n(\omega_l) &= \frac{\omega}{|\bar{\Delta}_n|} \frac{1 + t_n(\omega_l)}{1 + \chi_n(\omega_l)} = \frac{\tilde{\omega}_n(\omega_l)}{|\tilde{\Delta}_n(\omega_l)|}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Funcția $\bar{u}_n(\omega)$ satisface ecuația

$$\begin{aligned} \bar{u}_n(\omega_l) &= \frac{\omega_l}{|\bar{\Delta}_n|} + \frac{1}{\bar{\Delta}_n} \sum_m \left[\frac{\hbar}{2\tau_{nm}} \bar{u}_m(\omega_l) - \frac{\hbar}{2\kappa_{nm}} \bar{u}_n(\omega_l) \right] \times \\ &\times \left(1 + \bar{u}_m^2(\omega_l) \right)^{-2/2}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

În sfârșit, este necesar să găsim parametrii de ordine ai aliajului supraconductor $\bar{\Delta}_n$. Aceste mărimi satisfac ecuațiile de self-consistență date de formulele (1.50) cu luarea în considerație a funcției de impurități \bar{F} :

$$\bar{\Delta}_n^* = \frac{1}{\beta V} \sum_{k\omega} \sum_m V_{nm} \bar{F}_m(k|\omega). \quad (3.13)$$

După integrarea în raport cu \mathbf{k} obținem

$$\bar{\Delta}_n^* = \sum_m V_{nm} N_m \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega} \frac{1}{\sqrt{1 + \bar{u}_m^2(\omega)}}. \quad (3.14)$$

Ecuțiile (3.12) și (3.14) trebuie rezolvate împreună. Ele determină complet dependența parametrilor de ordine de concentrația de impurități, constantele de interacție și caracterul tranzițiilor inter- și intrabandă. În lipsa impurităților $\bar{u}_n = \omega/|\bar{\Delta}_n|$ și în acest caz ecuația (3.14) trece în formula (1.61) pentru supraconductorul pur.

În limita unei singure benzi, pe baza lui (3.12) avem

$$\bar{u} = \frac{\omega}{|\bar{\Delta}|} + \frac{\bar{u}}{\sqrt{1 + \bar{u}^2}} \frac{\hbar}{|\bar{\Delta}|\tau_s}; \quad \frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{2\tau_{11}} - \frac{1}{2\chi_{11}}, \quad (3.15)$$

ceea ce coincide cu ecuația corespunzătoare a lui Abrikosov și Gorkov [27]. Forma cea mai simplă a ecuației (3.12) se obține în cazul difuziei pe impurități nemagnetice ($\tau_{nm} = \kappa_{nm}$). În acest caz mărimile \bar{u}_n ale sistemului cu două benzi se determină din ecuațiile

$$\begin{aligned} \bar{u}_1 + \alpha_1 \frac{\bar{u}_1 - \bar{u}_2}{\sqrt{1 + \bar{u}_2^2}} &= \frac{\omega}{\bar{\Delta}_1}; & \alpha_1 &= \frac{\hbar}{2\bar{\Delta}_1\tau_{12}}; \\ \bar{u}_2 + \alpha_2 \frac{\bar{u}_2 - \bar{u}_1}{\sqrt{1 + \bar{u}_1^2}} &= \frac{\omega}{\bar{\Delta}_2}; & \alpha_2 &= \frac{\hbar}{2\bar{\Delta}_2\tau_{21}}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Aici s-a presupus că ambii parametri de ordine $\bar{\Delta}_n$ sunt pozitivi. În cazul impurităților paramagnetice modelul bibandă este caracterizat prin ecuațiile

$$\begin{aligned} \bar{u}_1(\omega) &= \frac{\omega}{\bar{\Delta}_1} + \frac{\beta_{11}\bar{u}_1(\omega)}{\sqrt{1 + \bar{u}_1^2(\omega)}} + \frac{\beta_{12}\bar{u}_1}{\sqrt{1 + \bar{u}_2^2}} + \frac{\alpha_1(\bar{u}_2 - \bar{u}_1)}{\sqrt{1 + \bar{u}_2^2}}; \\ \bar{u}_2(\omega) &= \frac{\omega}{\bar{\Delta}_2} + \frac{\beta_{22}\bar{u}_2(\omega)}{\sqrt{1 + \bar{u}_2^2(\omega)}} + \frac{\beta_{21}\bar{u}_2}{\sqrt{1 + \bar{u}_1^2}} + \frac{\alpha_2(\bar{u}_1 - \bar{u}_2)}{\sqrt{1 + \bar{u}_1^2}}; \\ \beta_{nm} &= \frac{1}{\bar{\Delta}_n} \left(\frac{\hbar}{2\tau_{nm}} - \frac{\hbar}{2\kappa_{nm}} \right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Să scriem acum formulele aproximative care sunt necesare pentru cele ce urmează în cazul valorilor mici ale lui α_n ($\alpha_n \ll 1$):

$$\bar{u}_1 \simeq \frac{\omega}{\bar{\Delta}_1} \left[1 - \frac{\alpha_1(1 - \bar{z})}{\sqrt{1 + \frac{\omega^2}{\bar{\Delta}_2^2}}} \right], \quad \bar{z} = \frac{\bar{\Delta}_1}{\bar{\Delta}_2}. \quad (3.18)$$

Pentru valori mari ale lui α_n ($\alpha_n \gg 1$) avem

$$\bar{u}_1 \simeq \tilde{u}_1 = \frac{\omega}{\bar{\Delta}_1} \frac{\frac{|\omega|}{\bar{\Delta}_2} + \alpha_1\bar{z} + \alpha_2}{\frac{|\omega|}{\bar{\Delta}_2} + \alpha_1 + \alpha_2}; \quad (3.19)$$

\bar{u}_2 se obține din \bar{u}_1 prin schimbarea indicilor de bandă.

Să discutăm mai în detaliu proprietățile termodinamice ale aliajelor cu impurități nemagnetice. Calculele analitice sunt posibile numai la temperaturi joase și în apropierea temperaturii critice.

3.2 Parametrii de ordine $\bar{\Delta}_n$ la $T = 0$

Să examinăm la început cazul temperaturii nule. În acest caz suma după frecvențele ω_l din formula (3.14) se transformă în integrală între limitele $-\omega_m$ până la $+\omega_m$. După cum s-a menționat de mai multe ori, aceste limite sunt introduse deoarece interacția directă a electronilor V_{nm} , care nu depinde de frecvențe, este dată în vecinătatea foii m a suprafeței Fermi cu o lărgime de $2\omega_D$. Într-o serie de cazuri ale teoriei aliajelor ω_m trebuie ales sub forma [49]

$$\omega_m = \sqrt{\omega_D^2 - \bar{\Delta}_m^2}, \quad (3.20)$$

ceea ce permite să se obțină rezultate corecte în limita substanțelor pure.

La concentrații mici ale impurităților, pe baza formulei (3.18), după câteva transformări avem ($\bar{\Delta}_n(0) = \bar{\Delta}_n(T = 0)$)

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_n(0) = & \sum_m V_{nm} N_m \bar{\Delta}_m(0) \ln \left(\frac{2\hbar\omega_m}{\bar{\Delta}_m(0)} \right) + \\ & + V_{1n} N_1 \frac{\hbar}{2\tau_{12}} \left\{ \frac{2\bar{\Delta}_2(0)}{\bar{\Delta}_1(0) + \bar{\Delta}_2(0)} K \left[\frac{|\bar{\Delta}_1(0) - \bar{\Delta}_2(0)|}{\bar{\Delta}_1(0) + \bar{\Delta}_2(0)} \right] - E \left[\frac{|\bar{\Delta}_1(0) - \bar{\Delta}_2(0)|}{\bar{\Delta}_1(0) + \bar{\Delta}_2(0)} \right] \right\} + \\ & + V_{2n} N_2 \frac{\hbar}{2\tau_{21}} \left\{ \frac{2\bar{\Delta}_1(0)}{\bar{\Delta}_1(0) + \bar{\Delta}_2(0)} K \left[\frac{|\bar{\Delta}_1(0) - \bar{\Delta}_2(0)|}{\bar{\Delta}_1(0) + \bar{\Delta}_2(0)} \right] - E \left[\frac{|\bar{\Delta}_1(0) - \bar{\Delta}_2(0)|}{\bar{\Delta}_1(0) + \bar{\Delta}_2(0)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Mărimile $K(x)$ și $E(x)$ sunt integralele eliptice complete.

În cazul limită al concentrației mici de impurități, pe care o examinăm aici, alături de mărimile $\hbar/2\tau_{nm}$, parametrii de ordine $\bar{\Delta}_n$ se înlocuiesc cu valorile lor pentru substanța pură $\bar{\Delta}_n(0)$. Soluția sistemului de ecuații (3.21) o căutăm sub forma

$$\bar{\Delta}_n(0) = \Delta_n(0) + \Delta'_n. \quad (3.22)$$

Pe baza ecuațiilor (1.31) pentru $\Delta_n(0)$ și (3.21), pentru termenii de corecție obținem următoarea ecuație:

$$\begin{aligned} \Delta'_n - \sum_m V_{nm} N_m \Delta'_m \ln \left(\frac{2\hbar\omega_m}{e\Delta_m(0)} \right) = & \sum_{m \neq n} V_{nm} N_m \frac{\hbar}{2\tau_{nm}} \times \\ & \times \left\{ \frac{2\Delta_n(0)}{\Delta_n(0) + \bar{\Delta}_m(0)} K \left[\frac{|\Delta_m(0) - \Delta_n(0)|}{\Delta_m(0) + \Delta_n(0)} \right] - E \left[\frac{|\Delta_m(0) - \Delta_n(0)|}{\Delta_m(0) + \Delta_n(0)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.23)$$

e fiind baza logaritmilor naturali. Soluția acestui sistem are forma

$$\begin{aligned} \Delta'_1 &= \frac{\hbar}{2\tau_{12}} \left(1 - \frac{V_{21}N_2}{dz(0)} \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{2\Delta_2(0)}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} K \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] - E \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] \right\} + \\ &+ \frac{V_{21}N_2}{d} \frac{\hbar}{2\tau_{21}} \left\{ \frac{2\Delta_1(0)}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} K \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] - E \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] \right\}; \\ &d = a + N_1 V_{12} z(0) + \frac{N_2 V_{21}}{z(0)}; \quad z(0) = \frac{\Delta_1(0)}{\Delta_2(0)}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Mărima Δ'_2 se obține din Δ'_1 prin schimbarea indicilor de bandă. Expresiile găsite pentru Δ'_n sunt negative, ceea ce pune în evidență faptul că parametrii de ordine $\bar{\Delta}_n$ se micșorează atunci când adăugăm impurități în concentrație mică.

Să trecem acum la cazul concentrațiilor mari ale impurităților nemagnetice ($\alpha_n \gg 1$). Pe baza formulei (3.19) în această limită obținem

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\sqrt{1 + \tilde{u}_1^2(\omega)}} - \int_0^\infty \frac{d\omega}{\sqrt{1 + \frac{\omega^2}{\bar{\Delta}_1^2(0)}}} &= \bar{\Delta}_1(0) \left\{ \frac{\alpha_1(1 - \bar{z})}{\alpha_2 + \alpha_1 \bar{z}} \times \right. \\ &\times \ln \left[2 \left(\alpha_1 + \frac{\alpha_2}{\bar{z}} \right) \right] + \frac{\alpha_2 + \alpha_1}{\alpha_2 + \bar{z}\alpha_1} \ln \left(\frac{\alpha_2 + \alpha_1 \bar{z}}{\alpha_2 + \alpha_1} \right) \left. \right\}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Rescriem pentru $T = 0$ ecuația (3.14) sub forma

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_n(0) - \sum_m V_{nm} N_m \bar{\Delta}_m(0) \ln \left(\frac{2\hbar\omega_m}{\bar{\Delta}_m(0)} \right) &= \\ = \sum_m V_{nm} N_m \int_0^\infty d\omega \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \tilde{u}_m^2(\omega)}} - \frac{\bar{\Delta}_m(0)}{\sqrt{\omega^2 + \bar{\Delta}_m^2(0)}} \right] \end{aligned} \quad (3.26)$$

și substituim aici (3.25). Să transformăm acum partea stângă a acestei ecuații. În acest scop introducem mărimile $\Delta_m(0)$ cu luarea în considerație a ecuației (1.31):

$$\begin{aligned} \ln \left(\frac{2\hbar\omega_1}{\Delta_1(0)} \right) &= \frac{N_2}{a} \left(V_{22} - \frac{V_{21}}{z(0)} \right), \quad a \neq 0; \\ \ln \left(\frac{2\hbar\omega_2}{\Delta_2(0)} \right) &= \frac{N_1}{a} \left(V_{11} - V_{12}z(0) \right). \end{aligned}$$

Ca rezultat al transformărilor, pentru una din benzi avem

$$\begin{aligned}
& V_{11}N_1 \ln \left(\frac{\Delta_1(0)}{\bar{\Delta}_1(0)} \right) + \frac{V_{21}N_2}{\bar{z}(0)} \ln \left(\frac{\Delta_2(0)}{\bar{\Delta}_2(0)} \right) + \\
& + \frac{N_1N_2V_{21}}{a} \left(V_{11} - V_{12}z(0) \right) \left[\frac{1}{\bar{z}(0)} - \frac{1}{z(0)} \right] = -V_{11}N_1 \left\{ \frac{\alpha_1(1 - \bar{z}(0))}{\alpha_2 + \alpha_1\bar{z}(0)} \times \right. \\
& \times \ln \left[2 \left(\alpha_1 + \frac{\alpha_2}{\bar{z}(0)} \right) \right] + \frac{\alpha_2 + \alpha_1}{\alpha_2 + \alpha_1\bar{z}(0)} \ln \left[\frac{\alpha_2 + \alpha_1\bar{z}(0)}{\alpha_1 + \alpha_2} \right] \left. \right\} - \\
& - \frac{V_{21}N_2}{\bar{z}(0)} \left\{ \frac{\alpha_2(1 - 1/\bar{z}(0))}{\alpha_1 + \alpha_2/\bar{z}(0)} \ln \left[2 \left(\alpha_2 + \alpha_1\bar{z}(0) \right) \right] + \right. \\
& \left. \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\alpha_1 + \alpha_2/\bar{z}(0)} \ln \left[\frac{\alpha_1 + \alpha_2/\bar{z}(0)}{\alpha_1 + \alpha_2} \right] \right\}
\end{aligned}$$

Ecuatii analoge se obțin pentru a doua bandă prin schimbarea indicilor de bandă. Soluția ultimelor două ecuații în aproximația legăturii slabe duce la egalitățile

$$\begin{aligned}
& \bar{z}(0) = z(0 + o(V_{nm})); \\
& \ln \left[\frac{\Delta(0)\sqrt{z(0)}(N_1 + N_2)}{\bar{\Delta}(0)(N_2 + N_1z(0))} \right] = \frac{N_1N_2(1 - z(0))^2}{(N_2 + N_1z(0))^2} \times \\
& \times \ln \left[2\sqrt{z(0)}\bar{\alpha}_1 \left(1 + \frac{N_1}{N_2} \right) \right] - \frac{(N_1 + N_2)(N_2 - N_1z^2(0))}{2(N_2 + N_1z(0))^2} \ln z(0),
\end{aligned} \tag{3.27}$$

unde

$$\bar{\alpha}_1 = \frac{\hbar}{2\tau_{12}\Delta_1(0)}; \quad \bar{\alpha}_2 = \frac{\hbar}{2\tau_{21}\Delta_2(0)}.$$

Din (3.27) rezultă că raportul $\Delta_1(0)/\bar{\Delta}_1(0)$ crește cu creșterea concentrației de impurități după o lege de putere. Chiar în domeniul examinat al concentrației mari de impurități, parametrii de ordine $\bar{\Delta}_n(0)$, în general, nu tind la zero și, prin urmare starea supraconductoare a aliajelor cu impurități nemagnetice se păstrează. La concentrații și mai mari decât cele examinate, aproximația făcută nu mai este corectă. Este vorba de faptul că la concentrații și mai mari însăși structura de bandă a aliajului se modifică și avem de a face cu așa numitul efect de valență când mărimi fundamentale cum ar fi N_n , V_{nm} ș. a., depind de concentrația de impurități. În încheiere subliniem că datorită formulilor (3.16), dependența parametrilor u_n și a tuturor mărimilor termodinamice de concentrația impurităților nemagnetice, se produce prin intermediul timpilor de relaxare interbandă τ_{12} și τ_{21} . În lipsa tranzițiilor între benzi a electronilor sub acțiunea atomilor de impuritate nemagnetici nu se modifică în mod esențial proprietățile termodinamice ale substanței.

Pe baza expresiilor obținute pentru parametrii de ordine la temperatură nulă, este ușor de calculat câștigul de energie în starea fundamentală a supraconductorului și valoarea câmpului magnetic critic. Pe baza lucrării [29] prezentăm energia medie a sistemului cu două benzi examinat care conține și impurități, sub forma [49]

$$\frac{E}{V} = \sum_{nm} \bar{\Delta}_n \left(\hat{V}^{-1} \right)_{nm} \bar{\Delta}_m + \sum_n \frac{2\pi}{\beta} N_n \sum_{\omega_l} \frac{\omega_l \bar{u}_n(\omega_l)}{\sqrt{1 + \bar{u}_n^2(\omega_l)}} e^{i\omega_l 0^+}. \tag{3.28}$$

Aici frecvențele ω_l se află în intervalul limitat $(-\omega_n, \omega_n)$, unde ω_n este determinată din formula (3.20).

La temperatură nulă avem

$$\begin{aligned} \frac{E}{V} &= \frac{\bar{\Delta}_1^2 V_{22} - 2\bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2 V_{12} + \bar{\Delta}_2^2 V_{11}}{V_{11} V_{22} - V_{12} V_{21}} + \\ &+ \sum_n N_n \int_{-\omega_n}^{\omega_n} \frac{\omega \bar{u}_n(\omega)}{\sqrt{1 + \bar{u}_n^2(\omega)}} d\omega. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Pe baza rezultatelor de mai sus al calculelor aproximative a parametrilor $\bar{u}_n(\omega)$ la concentrații mari de impurități nemagnetice V.A. Moskalenko, A.A. Golub, V.S. Driuma [49] au obținut ($\alpha_n \gg 1$)

$$\frac{E - E_n}{V} = -\frac{H_c^2(0)}{8\pi} = -\frac{1}{2} E_g^2 (N_1 + N_2); \quad E_g = \frac{N_1 \bar{\Delta}_1 + N_2 \bar{\Delta}_2}{N_1 + N_2}. \quad (3.30)$$

Sensul mărimii E_g va deveni clar în cele ce urmează. Substituind în (3.29) expresia aproximativă pentru \bar{u}_n , în cazul concentrației mici de impurități nemagnetice ($\alpha_n \ll 1$) pentru $\bar{\Delta}_2 < \bar{\Delta}_1$, avem

$$\begin{aligned} \frac{E_n - E}{V} &= \frac{H_c^2(T=0)}{8\pi} = \frac{\hbar N_1}{\tau_{12}} \left[\bar{\Delta}_2 K(q) - \bar{\Delta}_1 E(q) \right]; \\ q &= \frac{\sqrt{\bar{\Delta}_1^2 - \bar{\Delta}_2^2}}{\bar{\Delta}_1}. \end{aligned} \quad (3.31)$$

În limita concentrației mici de impurități paramagnetice pentru care are loc dezvoltarea (3.22), găsim

$$\begin{aligned} \Delta'_1 &= \frac{1 - \frac{V_{21} N_2}{dz(0)}}{1 - \frac{1}{z(0)}} \left(\frac{\hbar}{2\tau_{12}} - \frac{\hbar}{2\kappa_{12} z(0)} \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{2\Delta_2(0)}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} K \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] - E \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] \right\} \\ &+ \frac{V_{21} N_2}{d(1 - z(0))} \left(\frac{\hbar}{2\tau_{12}} - \frac{\hbar z(0)}{2\kappa_{21}} \right) \times \\ &\times \left\{ \frac{2\Delta_1(0)}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} K \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] - E \left[\frac{|\Delta_1(0) - \Delta_2(0)|}{\Delta_1(0) + \Delta_2(0)} \right] \right\} - \\ &- \frac{\pi}{4} \frac{\hbar}{2\tau_{11}^s} + \frac{\pi}{4} \frac{N_2 V_{21}}{a} \left[\frac{\hbar}{2\tau_{11}^s z(0)} - \frac{\hbar}{2\tau_{22}^s} \right], \end{aligned}$$

unde $1/\tau_{nn}^s = 1/\tau_{nn} - 1/\chi_{nn}$; Δ'_2 se obține din formula de mai sus prin schimbarea indicilor de bandă; Δ'_n sunt mărimi negative, ceea ce înseamnă că impuritățile micșorează parametrii de ordine.

În cazul concentrației mari de impurități paramagnetice, soluția ecuației (3.14) este mult mai complicată. Dăm aici rezultatul obținut de L.Z. Kon și V.A. Moska-

lenko [48] pentru $\tau_{12}; \tau_{21} \gg \tau_{nn}^s$. Se obține formula

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_1^2(0) &= \left[\frac{N_1}{12\Delta_1(0)\Delta_2(0)(b_1^s)^2} + \frac{N_2\Delta_2(0)}{12(\Delta_1(0))^3(b_2^s)^2} \right]^{-1} \times \\ &\times \left\{ N_1 z(0) \ln \left(\frac{1}{2b_1^s} \right) + \frac{N_2}{z(0)} \ln \left(\frac{1}{2b_2^s} \right) \right\}, \end{aligned}$$

unde $b_n^s = \hbar/[1\tau_{nn}^s\Delta_n(0)]$. În acest caz se păstrează relația legăturii slabe conform căreia avem $\bar{z}(0) = z(0)$.

Să trecem la determinarea gap-ului de energie a supraconductorilor cu impurități. Indiferent de existența a doi parametri de ordine, în supraconductorii cu două benzi există doar o singură bandă interzisă (gap). Acest lucru este urmare a faptului că avem procese interbenzi. Pentru stabilirea acestei proprietăți și pentru studiul dependenței gap-ului de parametrii de difuzie trebuie să analizăm densitatea de stări electronice în aliajele bibandă.

3.3 Densitatea de stări electronice a supraconductorilor cu două benzi

Densitatea stărilor electronice pe foaia n a suprafeței Fermi în spațiul ω se determină din formula

$$\tilde{N}_n(E) = N_n \operatorname{Re} \frac{u_n(E)}{\sqrt{u_n^2(E) - 1}}. \quad (3.32)$$

Mărimea $u_n(E)$ este strâns legată de funcția introdusă mai sus $\bar{u}_n(\omega_l)$. Prima dintre ele se obține din ultima prin următoarea prelungire analitică. Să examinăm șirul de frecvențe discrete $i\omega_l$ pentru $\omega_l > 0$, adică în semiplanul superior, și să prelungim această funcție în întreg semiplanul superior, schimbând pe $i\omega$ în z . Mai departe facem să tindă variabila z către axa reală E de sus, adică punem $z = E + i0^+$. La fel înlocuim pe $i\omega_l$ cu $E + i0^+$. În acest fel, noua funcție $u(E)$ devine:

$$\begin{aligned} \bar{u}(\omega_l = -iz) &= -iu_n(z), \quad \omega_l > 0, \quad \operatorname{Im} z > 0; \\ u_n(E) &= u_n(z = E + i0^+). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Această transformare corespunde trecerii de la funcțiile Green de temperatură la funcțiile Green retardate. O transformare analoagă pentru $\omega_l < 0$, adică înlocuirea lui ω_l cu $-iE - 0^+$, corespunde trecerii la funcțiile Green avansate. Importanța acestei treceri la funcțiile Green retardate și avansate în cadrul fizicii statistice a fost relevată pentru prima dată de N.N. Bogoliubov și S.V. Tiablikov [50]. Acești autori au scos în evidență posibilitatea folosirii proprietăților analitice ale funcțiilor Green retardate și avansate pentru a fi folosite drept condiții la limită pentru rezolvarea ecuațiilor pentru funcțiile Green cuantice ale mecanicii statistice. Mai târziu această metodă a fost dezvoltată și folosită în lucrările lui S.V. Tiablikov [51] și D.N. Zubarev [52].

Funcția $u_n(z)$ are proprietățile

$$u_n(z) = -u(z); \quad u(z^*) = u^*(z). \quad (3.34)$$

Să introducem funcția

$$\begin{aligned} n_n(E) &= \frac{N_n(E)}{N_n}; \quad n_n(E) = \pm \operatorname{Re} \left[\frac{u_n(z)}{\sqrt{u_n^2(z) - 1}} \right]_{z=E \pm i0^+} = \\ &= \pm \operatorname{Im} \left[\frac{u_n(z)}{\sqrt{1 - u_n^2(z)}} \right]_{z=E \pm i0^+} \end{aligned} \quad (3.35)$$

și funcția asemănătoare

$$\bar{n}(E) = \pm \operatorname{Re} \left[\frac{1}{\sqrt{u_n^2(z) - 1}} \right]_{z=E \pm i0^+} = \pm \operatorname{Im} \left[\frac{1}{\sqrt{1 - u_n^2(z)}} \right]_{z=E \pm i0^+}. \quad (3.36)$$

Funcțiile n_n și \bar{n}_n se determină cu ajutorul funcțiilor Green uniparticulă totale retardate, respectiv avansate,

$$\begin{aligned} n_n(E) &= \mp \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_n \operatorname{Im} \left[G_n^{R,A}(k|z) \right]_{z=E \pm i0^+}; \\ \bar{n}_n(E) &= \mp \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon_n \operatorname{Im} \left[F_n^{R,A}(k|z) \right]_{z=E \pm i0^+} \end{aligned}$$

și descriu modificarea distribuției densității de stări electronice ca urmare a restruc-turării spațiului fazelor în vecinătatea energiei Fermi a supraconductorilor. Apariția gap-ului energetic la suprafața Fermi a metalelor supraconductoare duce la repulsia stărilor electronice din acest domeniu și îngrămădirea lor deasupra gap-ului energetic. Pentru un supraconductor unibandă pur, densitatea de stări electronice are o singularitate de tip rădăcină pătrată pentru $E = \Delta$:

$$n(E) = \begin{cases} \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} & , \quad E \geq \Delta, \\ 0 & , \quad E < \Delta. \end{cases}$$

A.A. Abrikosov și L.P. Gorkov [27] au arătat că impuritățile magnetice distrug această limită netă $E = \Delta$ și ca rezultat apare o altă energie caracteristică. Mărimea E_g care este noul gap energetic mai mic decât parametrul de ordine Δ , și densitatea de stări $n(\omega)$ începe de la zero, și nu cu o singularitate. În imediata vecinătate a lui E_g avem o densitate de stări $n(E)$ de tip rădăcină pătrată. Conform cu lucrarea [27], avem

$$\begin{aligned} \frac{E_g}{\Delta} &= \left(1 - \sigma^{2/3}\right)^{3/2}; \quad \sigma = \frac{\hbar}{\tau_s \Delta}; \\ n(E) &\simeq \frac{1}{\sigma^{2/3}} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{E - E_g}{\Delta}}; \quad E \gtrsim E_g. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Pentru calculul unei serii de coeficienți cinetici este necesar să cunoaștem comporta-re-a lui $n(E)$ pe întreg domeniul din jurul marginii spectrului energetic și nu numai la limita acestuia.

În lucrările lui V.A. Moskalenko și A.M. Ursu [53, 54] s-a arătat că dacă trecem de la energia E printr-o transformare de scală a acesteia la mărimea x conform formulei

$$E = \Delta \left(1 - \sigma^{2/3} x\right)^{3/2}, \quad x \leq 1, \quad (3.38)$$

atunci comportarea lui $n(E)$ și $\bar{n}(E)$ în apropierea lui E_g este următoarea

$$\begin{aligned} n(E) &= \frac{n_0(x)}{\sigma^{1/3}} + n_1(x)\sigma^{1/3} + \dots; \\ \bar{n}(E) &= \frac{\bar{n}_0(x)}{\sigma^{1/3}} + \bar{n}_1(x)\sigma^{1/3} + \dots; \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} n_0(x) &= \frac{\sqrt{3}}{4} \left(V^2(x) - u^2(x) \right), \quad x \leq 1; \\ u(x) &= \left(-1 + \sqrt{1 - x^3} \right)^{1/3}, \\ V(x) &= \left[-1 - \sqrt{1 - x^3} \right]^{1/3}. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Pentru x , apropiat de unitate, funcția $n_0(x)$ are forma $n_0(0) \simeq \sqrt{1-x}$. Înlocuind pe $(1-x)$ cu $\frac{2}{3} \frac{(E-E_g)}{\Delta\sigma^{2/3}}$, obținem formula (3.37) în imediata vecinătate a lui E_g . Totuși formula (3.39) este aplicabilă într-un interval mult mai larg de energii, decât (3.37). Deși lărgimea intervalului nu este mare și are ordinul de mărime $\Delta\sigma^{2/3}$ (pentru $\sigma \ll 1$), contribuția integrală a funcției de forma $n^2(E)$ în acest domeniu va fi de ordinul unității fiind de același ordin de mărime ca și restul intervalului. Descrierea detaliată a comportării funcțiilor $n(E)$, $\bar{n}(E)$ și a altora pe întregul interval energetic, atât pentru supraconductorii unibandă cât și cei bibandă poate fi găsită în lucrarea [55]. După aceste observații să ne întoarcem la supraconductorii bibandă.

Continuarea analitică a formulelor (3.16) și (3.17) are forma

$$u_1 + \alpha_1 \frac{u_1 - u_2}{\sqrt{1 - u_2^2}} = \frac{E}{\Delta_1}; \quad u_2 + \alpha_2 \frac{u_2 - u_1}{\sqrt{1 - u_1^2}} = \frac{E}{\Delta_2}, \quad (3.41)$$

și

$$\begin{aligned} u_1(E) &= \frac{E}{\Delta_1} + \frac{\beta_{11}u_1}{\sqrt{1 - u_1^2}} + \frac{\beta_{12}u_1}{\sqrt{1 - u_2^2}} + \frac{\alpha_1(u_1 - u_2)}{\sqrt{1 - u_2^2}}; \\ u_2(E) &= \frac{E}{\Delta_2} + \frac{\beta_{22}u_2}{\sqrt{1 - u_2^2}} + \frac{\beta_{21}u_2}{\sqrt{1 - u_1^2}} + \frac{\alpha_2(u_1 - u_2)}{\sqrt{1 - u_1^2}}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Să studiem mai întâi cazul impurităților nemagnetice. Să facem în (3.41) schimbarea de variabilă

$$u_n = \text{ch}(z_n) = \text{ch}(x_n + iy_n). \quad (3.43)$$

Atunci densitatea de stări electronice va fi

$$n_n(E) = \frac{\text{sh}(2x_n)}{\text{ch}(2x_n) - \cos(2y_n)}. \quad (3.44)$$

Mărimile x_n și y_n satisfac ecuațiile

$$\begin{aligned} \frac{E}{\Delta_1} &= \cos y_1 \operatorname{ch} x_1 + \frac{\alpha_1}{\operatorname{ch}(2x_2) - \cos(2y_2)} \left[2 \sin y_2 \cos y_1 \operatorname{ch} x_2 \operatorname{ch} x_1 - \right. \\ &\quad \left. - 2 \cos y_2 \sin y_1 \operatorname{sh} x_1 \operatorname{sh} x_2 - \sin(2y_2) \right]; \\ \sin y_1 \operatorname{sh} x_1 + \frac{\alpha_1}{\operatorname{ch}(2x_2) - \cos(2y_2)} &\left[2 \cos y_2 \cos y_1 \operatorname{sh} x_2 \operatorname{ch} x_1 + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sin y_1 \sin y_2 \operatorname{ch} x_2 \operatorname{sh} x_1 - \operatorname{sh}(2x_2) \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.45)$$

La aceste două ecuații trebuie să adăugăm încă două care se obțin din acestea prin schimbarea indicilor de bandă. Densitatea de stări este diferită de zero numai pentru $x_n \neq 0$. Se vede ușor că pentru $\alpha_n \neq 0$ tinderea la zero a lui x_1 pentru una din benzi duce la anularea lui x_2 pentru a doua bandă. În acest fel, chiar pentru o difuzie oricât de slabă interbandă, în ambele benzi apar în același timp densități de stări diferite de zero, și cu toate că banda interzisă supraconductoare este aceeași pentru ambele benzi, parametrii de ordine Δ_n sunt diferiți. După cum se va vedea în cele ce urmează, la concentrații mici ale impurităților gap-ul supraconductor E_g este apropiat de cel mai mic dintre cele două gap-uri Δ_n a celor două benzi. Densitatea de stări electronice, deși începe la aceeași energie pentru ambele benzi, ea urmează variații diferite în fiecare bandă. Definim gap-ul energetic ca energia maximă pentru care densitatea de stări $\tilde{N}_n(E)$ este încă nulă. Prin urmare, punând în (3.45) $E = E_g$ și $x_n = 0$, obținem ecuația necesară pentru determinarea lui E_g :

$$\begin{aligned} \frac{E_g}{\Delta_1} &= \cos y_1 + \frac{\alpha_1(\cos y_1 - \cos y_2)}{\sin y_2}; \\ \frac{E_g}{\Delta_2} &= \cos y_2 + \frac{\alpha_2(\cos y_2 - \cos y_1)}{\sin y_1}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

La acestea trebuie adăugată condiția de maxim a lui E_g :

$$\frac{dE_g}{dy_1} = 0. \quad (3.47)$$

Această condiție are forma

$$(\alpha_1 + \sin y_2)(\alpha_2 + \sin y_1) = \alpha_1 \alpha_2 \frac{(1 - \cos y_1 \cos y_2)^2}{\sin^2 y_1 \sin^2 y_2}. \quad (3.48)$$

Din cele trei ecuații (3.46) și (3.48) se determină trei mărimi E_g , y_1 și y_2 . Soluția analitică este posibilă numai în cazurile limită al valorilor mici și mari ale parametrilor interbandă α_n . Pentru α_n mic obținem

$$\begin{aligned} E_g &\simeq \bar{\Delta}_2 + \frac{\hbar}{2\tau_{21}} \sqrt{\frac{\bar{z} - 1}{\bar{z} + 1}}, & \bar{z} &= \frac{\bar{\Delta}_1}{\bar{\Delta}_2} > 1; \\ E_g &\simeq \bar{\Delta}_1 + \frac{\hbar}{2\tau_{12}} \sqrt{\frac{1 - \bar{z}}{1 + \bar{z}}}, & \bar{z} &> 1. \end{aligned} \quad (3.49)$$

În acest fel, la concentrații mici de impurități gap-ul energetic este ceva mai mare decât cel mai mic dintre cei doi parametri de ordine $\bar{\Delta}_1$ și $\bar{\Delta}_2$; dependența parametrilor de ordine de concentrația de impurități a fost examinată în secțiunea precedentă. Pentru valori mari ale lui α_n ($\alpha_n \gg 1$), parametrii y_n devin cantități mici de ordinul lui $\alpha_n^{-1/3}$ și se deosebesc unul de altul printr-o mărime de ordinul lui α_n^{-1} . În acest caz avem

$$E_g = E_0 \left(1 - \sigma^{2/3} - \dots\right)^{3/2}, \quad (3.50)$$

unde

$$E_0 = \bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2 \frac{\alpha_1 + \alpha_2}{\bar{\Delta}_1 \alpha_1 + \bar{\Delta}_2} = \frac{N_1 \bar{\Delta}_1 + N_2 \bar{\Delta}_2}{N_1 + N_2}; \quad (3.51)$$

$$\sigma = \frac{\alpha_1 \alpha_2 (1 - \bar{z})^2}{(\alpha_1 + \alpha_2)(\alpha_2 + \alpha_1 \bar{z})^2} \ll 1.$$

Ultima egalitate s-a obținut pe baza proprietății $\tau_{12}/\tau_{21} = N_1/N_2$. Din (3.50) rezultă că, în limita concentrației mari de impurități gap-ul energetic este egal cu valoarea medie a parametrilor de ordine. În afară de cele două cazuri discutate există și o situație intermediară când $\alpha_1 \simeq 1$, $\alpha_2 \ll 1$. Într-adevăr, dacă suprapunerea benzilor în metalele de tranziție se datorește unei acoperiri dintre o bandă s largă și una d îngustă, atunci densitatea de stări a benzii înguste ($n = 2$) N_2 este mult mai mare decât densitatea de stări a benzii largi N_1 . În acest caz parametrul de ordine $\bar{\Delta}_2$ este mult mai mare decât parametrul de ordine $\bar{\Delta}_1$, iar raportul parametrilor α_1 și α_2 poate fi mult mai mare decât unitatea:

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} = \frac{\bar{\Delta}_2 \tau_{21}}{\bar{\Delta}_1 \tau_{12}} = \frac{N_2 \bar{\Delta}_2}{N_1 \bar{\Delta}_1} \gg 1. \quad (3.52)$$

Să examinăm calculul gap-ului energetic pentru $\alpha_2 \ll 1$, $\alpha_1 \sim 1$ și $\bar{z} < 1$. În acest caz obținem [55]

$$E_g = \bar{\Delta}_1 W_0 + \mathcal{O}(\alpha_2^{2/3}), \quad (3.53)$$

unde W_0 se determină din ecuația

$$W_0 = 1 + \alpha_1 \sqrt{\frac{1 - \bar{z} W_0}{1 + \bar{z} W_0}}. \quad (3.54)$$

Să trecem acum la calculul densității electronice de stări pe baza definițiilor (3.36) și (3.41). Pentru $\alpha_n \ll 1$ și $\bar{z} < 1$ gap-ul energetic este dat de a doua din expresiile (3.49). Trecând la altă variabilă energetică x prin transformarea de scală dată de formula

$$E = \bar{\Delta}_1 \left[1 + \alpha_1 \sqrt{\frac{1 - \bar{z}}{1 + \bar{z}}} - \frac{3}{2} x (\alpha_1 \alpha_2)^{2/3} \frac{(1 - \bar{z})^{1/3}}{1 + \bar{z}} + \dots \right] \quad (3.55)$$

ne permite, după cum s-a arătat în lucrările [55]-[57], să obținem în vecinătatea lui E_g următoarele expresii:

$$\begin{aligned} n_1(E) &= \frac{n_0(x)}{\sigma^{1/3}} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{\sigma^{1/6}}\right); \\ n_2(E) &= \frac{\alpha_2 n_0(x)}{\sigma^{1/3}(1-\bar{z})^{1/2}(1+\bar{z})^{3/2}}; \\ \sigma &= \frac{\alpha_1 \alpha_2 (1-\bar{z})^{1/2}}{(1+\bar{z})^{3/2}} \ll 1. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Aici $n_0(x)$ este determinat din formula (3.40).

Aceasta înseamnă că, în scara obișnuită de energie în apropierea lui E_g avem

$$\begin{aligned} n_1(E) &\simeq \frac{1}{\sigma^{2/3}} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{(E-E_0)}{\bar{\Delta}_1}}; \\ n_2(E) &\simeq \frac{\alpha_2}{\sigma^{2/3}(1-\bar{z})^{1/2}(1+\bar{z})^{3/2}} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{(E-E_0)}{\bar{\Delta}_1}}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Ambele densități de stări încep să crească de la $E = E_g$, dar variația lor este diferită, deoarece $n_1(E)$ în apropierea lui E_g crește puternic, atingând un maxim în domeniul de margine a spectrului, după care scade spre energii mari, în timp ce $n_2(E)$ rămâne o cantitate mică ($\alpha_2 \ll 1$). În schimb, în vecinătatea lui $E \sim \bar{\Delta}_2$ cea mai mare valoare o are funcția $n_2(E)$, în timp ce $n_1(E)$ este apropiată de valoarea care s-ar obține din formula $E/\sqrt{E^2 - \bar{\Delta}_1^2}$. Calculele făcute în lucrările [55]-[57] dau următoarele valori în acest domeniu $E \sim \bar{\Delta}_2$:

$$\begin{aligned} n_1(\omega) &= \frac{1}{\sqrt{1-\bar{z}^2}} \left[1 + \mathcal{O}\left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\alpha_2}}\right) \right] \\ n_2(\omega) &= \left(\frac{1+\bar{z}}{1-\bar{z}}\right)^{1/4} \frac{1}{2\alpha_2^{1/2}} \frac{\sqrt{x+\sqrt{1+x^2}}}{\sqrt{1+x^2}} + \mathcal{O}\left(\frac{\alpha_1}{\sqrt{\alpha_2}}\right). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Pentru aceasta x se determină din relația

$$E \simeq \bar{\Delta}_2 \left[1 + \alpha_2 \sqrt{\frac{1-\bar{z}}{1+\bar{z}}} x \right] \quad (3.59)$$

În acest fel, la concentrații mici de impurități densitățile de stări deși încep de la $E = E_g$, totuși comportarea lor este diferită în întregul domeniu de energii. Fiecare densitate își atinge maximum în apropierea parametrului de ordine corespunzător. La energii mari aceste densități se apropie de valorile $E/\sqrt{E^2 - \bar{\Delta}_n^2}$.

Cu totul altfel se comportă densitățile de stări la concentrații mari de impurități când $\alpha_n \gg 1$. În acest caz calculele se bazează pe introducerea unei noi scări pentru energie x , conform formulei

$$E = E_0 \left[1 - \frac{3}{2} x \sigma^{2/3} + \dots \right],$$

unde E_0 și parametrul mic σ sunt dați de formulele (3.51). În vecinătatea examinată a lui E_g densitatea de stări are forma

$$n_n(E) = \frac{n_0(x)}{\sigma^{1/3}} + \mathcal{O}(\sigma^{1/3}). \quad (3.60)$$

În vecinătatea imediată a lui E_g această formulă dă

$$n_n(E) \simeq \frac{1}{\sigma^{2/3}} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{E - E_0}{E_0}}. \quad (3.61)$$

Deosebirea diferitelor densități $n_n(E)$ între ele se manifestă numai la termeni mici de ordinul $\sigma^{1/3}$.

În acest fel, la concentrații mari ale impurităților nemagnetice, funcțiile densitate de stări încep simultan să crească de la energia E_g și cresc rapid până la o valoare maximă, atinsă în apropierea lui E_g . Pentru valori ale energiei, suficient de depărtate de E_g , ambele funcții $n_n(E)$ se pot aproxima prin formula

$$n_n(E) \simeq \frac{E}{\sqrt{E_1^2 - E_0^2}}. \quad (3.62)$$

Detalii privind aceste calcule pot fi găsite în lucrările [55]-[57].

Particularitatea generală a comportării densităților de stări în apropierea lui E_g constă în aceea că, contribuția principală la aceste mărimi o dă funcția de forma $n_0(x)/\sigma^{1/3}$, unde $n_0(x)$ este determinat din formula (3.40). Introducerea energiei adimensionale x și a parametrului adimensional mic σ depinde de particularitatea concretă a problemei. Metoda de calcul a funcțiilor $n_n(E)$ la începutul spectrului constă, în acest fel, în separarea comportării singulare a lui $n_0(x)\sigma^{-1/3}$ pentru $\sigma \geq 0$ și apoi dezvoltarea în serie în raport cu parametrul mic σ .

Să trecem la cazul impurităților paramagnetice [48, 58]. În acest caz, gap-ul energetic E_g se obține din soluția următorului sistem de trei ecuații ($u_n = \cos y_n$):

$$\begin{aligned} \frac{E_g}{\Delta_1} &= u_1 - \frac{u_1\beta_{11}}{\sqrt{1-u_1^2}} + \frac{\alpha_1(u_1-u_2)}{\sqrt{1-u_2^2}} - \frac{\beta_{12}u_1}{\sqrt{1-u_2^2}}; \\ \frac{E_g}{\Delta_2} &= u_2 - \frac{u_2\beta_{22}}{\sqrt{1-u_2^2}} - \frac{\alpha_2(u_2-u_1)}{\sqrt{1-u_1^2}} - \frac{\beta_{21}u_2}{\sqrt{1-u_1^2}}; \\ &\left[1 - \frac{\beta_{11}}{(1-u_1^2)^{3/2}} + \frac{\alpha_1 - \beta_{12}}{\sqrt{1-u_2^2}} \right] \left[1 - \frac{\beta_{22}}{(1-u_2^2)^{3/2}} + \frac{\alpha_2 - \beta_{21}}{\sqrt{1-u_1^2}} \right]; \\ &= [\alpha_1(1-u_1u_2) + \beta_{12}u_1u_2][\alpha_2(1-u_1u_2) + \\ &+ \beta_{21}u_1u_2](1-u_1^2)^{-3/2}(1-u_2^2)(1-u_2^2)^{-3/2}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Particularitatea impurităților magnetice atât în cazul bibandă cât și unibandă constă în aceea că ele pot anula gap-ul energetic, și mai departe cu creșterea concentrației chiar starea supraconductoare, adică să anuleze chiar parametrii de ordine și temperatura critică.

Prima concentrație critică, pentru care se anulează gap-ul E_g și apare starea supraconductoare fără gap (gapless superconductivity), se determină din condiția

$$(1 - \beta_{11} - \beta_{12} + \alpha_1)(1 - \beta_{22} - \beta_{21} + \alpha_2) = \alpha_1\alpha_2, \quad (3.64)$$

care rezultă din sistemul (3.62), dacă punem în el $E_g = 0$ și $u_n = 0$. Condiția de dispariție a gap-ului energetic a fost obținută de L. Z. Kon și V.M. Moskalenko în lucrările [48, 55], iar condiția de dispariție a stării supraconductoare în lucrarea [37]. La concentrații mici ale impurităților paramagnetice în sensul îndeplinirii inegalităților $\beta_{nm} \ll 1$, $\alpha_n \ll 1$ și presupunând că $\bar{\Delta}_1 < \bar{\Delta}_2$ pentru gap-ul supraconductor obținem [48, 55]

$$E_g = \bar{\Delta}_1 \left\{ 1 - \frac{3}{2}\sigma^{2/3} + \bar{\alpha}_1 \sqrt{\frac{1-\bar{z}}{1+\bar{z}}} + \dots \right\}, \quad (3.65)$$

unde

$$\begin{aligned} \sigma &= \beta_{11} + \frac{(1-\bar{z})^{2/3}}{(1-\bar{z})^2} \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2; & \bar{\alpha}_1 &= \alpha_1 - \frac{\beta_{12}}{1-\bar{z}}; \\ \bar{\alpha}_2 &= \alpha_2 + \frac{\beta_{21}\bar{z}}{1-\bar{z}}; & \tilde{\alpha}_1 &= \alpha_1 + \frac{\beta_{12}\bar{z}}{1-\bar{z}}; & \tilde{\alpha}_2 &= \alpha_2 - \frac{\beta_{21}}{1-\bar{z}}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Pentru determinarea densității de stări electronice în vecinătatea lui E_g introducem energia adimensională x conform formulei

$$E \simeq \bar{\Delta}_1 \left[1 - \frac{3}{2}\sigma^{2/3}x + \bar{\alpha}_1 \sqrt{\frac{1-\bar{z}}{1+\bar{z}}} \right]. \quad (3.67)$$

Atunci pentru $n_1(E)$ rezultă

$$n_1(E) \simeq \frac{n_0(E)}{\sigma^{1/3}} + \mathcal{O}(\sigma^{-1/6}). \quad (3.68)$$

Mărimea $n_2(E)$ în acest domeniu de energii are forma

$$n_2(E) \simeq \frac{\bar{\alpha}_2(1-\bar{z})}{\sigma^{1/3}(1-\bar{z}^2)^{3/2}} n_0(x). \quad (3.69)$$

Să examinăm acum domeniul supraconductorului fără gap. În acest caz densitatea de stări devine

$$n_n(E) \simeq 1 + \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left(\frac{1}{u_n^{(0)}} \right)^2, \quad (3.70)$$

unde

$$u_1^{(0)}(E) = \frac{\frac{E^2}{\bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2} + i \frac{E}{\bar{\Delta}_2} \delta_1 - \delta}{\frac{E}{\bar{\Delta}^2} + i\psi_1} \quad (3.71)$$

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \alpha_1 + \alpha_2 + \beta_{22} - \beta_{12}; & \delta_1 &= \alpha_1 + \beta_{11} + \frac{\alpha_2 + \beta_{22}}{\bar{z}}; \\ \delta &= \beta_{11}\beta_{22} - \beta_{12}\beta_{21} + \alpha_1(\beta_{22} + \beta_{21}) + \alpha_2(\beta_{11} + \beta_{12}). \end{aligned}$$

Schimbarea indicilor de bandă ne permite ca din $u_1^{(0)}$ să obținem expresia lui $u_2^{(0)}$. De aici [52]

$$n_1(E) \simeq 1 + \frac{1}{2} \left[\frac{E^4}{\bar{\Delta}_1^2 \bar{\Delta}_2^2} + 4 \frac{E^2}{\bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2} + \delta^2 \right]^{-2} \times \left[\frac{E_1^6}{\bar{\Delta}_1^2 \bar{\Delta}_2^4} + \frac{E^4}{\bar{\Delta}_1^2 \bar{\Delta}_2^2} \varphi_1 + \frac{E^2}{\bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2} \chi_1 - \varphi_1^2 \delta^2 \right], \quad (3.72)$$

unde

$$\varphi = \bar{z} \delta_1^2 - 2\delta; \quad \varphi_1 = 2\bar{z}(\delta_1 \psi_1 - \delta) - (\psi_1 - \bar{z} \delta_1)^2; \\ \chi_1 = 2(\psi_1 - \bar{z} \delta_1) \delta \psi_1 + \bar{z}(\delta_1 \psi_1 - \delta)^2.$$

În particular, avem

$$n_1(0) \simeq 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{\psi_1}{\delta} \right)^2. \quad (3.73)$$

La energii mari

$$n_1(E) \simeq 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\Delta}_1}{E} \right)^2. \quad (3.74)$$

Mărimea $n_2(E)$ se obține din formulele de mai sus prin schimbarea obișnuită a indicilor de bandă.

Să trecem acum la calculul căldurii specifice electronice la temperaturi joase. În acest scop vom pleca de la reprezentarea gazului de cvaziparticule independente. Pentru aceasta vom folosi expresia entropiei electronilor din metal dată de formula (1.22)

$$S = -2k_B \sum_m \sum_{\mathbf{k}} \left\{ f_m(\mathbf{k}) \ln f_m(\mathbf{k}) + (1 - f_m(\mathbf{k})) \ln (1 - f_m(\mathbf{k})) \right\},$$

unde $f_m(\mathbf{k})$ este funcția de distribuție Fermi a electronilor din banda m cu impulsul \mathbf{k} . În locul acestei expresii putem folosi expresia dată în lucrarea [29],

$$S = -2k_B \int_{-\infty}^{\infty} dE \sum_m \tilde{N}_m(E) \left[f(E) \ln f(E) + (1 - f(E)) \ln (1 - f(E)) \right] \quad (3.75)$$

unde $f(E)$ este aceeași funcție de distribuție Fermi; $\tilde{N}_n(E)$ este densitatea stărilor electronice determinată de formula (3.32).

La temperaturi, apropiate de zero, formula (3.75) poate fi simplificată. Păstrând contribuțiile principale și considerând că densitatea de stări este diferită de zero pentru energii $E > E_g$, obținem

$$S \simeq 4k_B \sum_m \int_{E_g}^{\infty} N_m(E) e^{-\beta E} (1 + \beta E) dE. \quad (3.76)$$

Expresia (3.76) este aplicabilă la supraconductorii cu gap în domeniul temperaturilor în care $\beta E_g \gg 1$. Substituim în această expresie valoarea aproximativă a

densității electronice de stări, obținută mai sus în cazurile limită a concentrațiilor mari și mici de impurități nemagnetice. În primul caz ($\alpha_n \gg 1$) pe baza formulei (3.61) avem

$$S \simeq 2\sqrt{\frac{2\pi}{3}}k_B \frac{N_1 + N_2}{\beta^{1/2}E_g^{5/6}} e^{-\beta E_g} \left(\frac{\bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2}{\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2} \right)^{4/3} \times \\ \times \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)^2}{(\alpha_1 \alpha_2)^{2/3}} \left(1 + \frac{5}{2} \beta E_g \right) \quad (3.77)$$

de aici se obține căldura specifică electronică pentru $T \rightarrow 0$

$$C \simeq 2\sqrt{\frac{2\pi k_B}{3T}} (N_1 + N_2) E_g^{1/6} e^{-\beta E_g} \left(\frac{\bar{\Delta}_1 \bar{\Delta}_2}{\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2} \right)^{4/3} \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)^2}{\alpha_1 \alpha_2} \quad (3.78)$$

Aici E_g se determină din formula (3.50).

În cazul concentrației mici de impurități nemagnetice în expresia (3.76) este necesar să substituim (3.55) și (3.56). Pentru $\bar{\Delta}_1 < \bar{\Delta}_2$ pe baza formulei (3.57) avem ($\alpha_n \ll 1$)

$$S \simeq 2\sqrt{\frac{2\pi}{3\beta}} k_B E_g e^{-\beta E_g} \frac{N_1(1 + \bar{z})}{\sqrt{\bar{\Delta}_1} (\alpha_1 \alpha_2)^{2/3} (1 - \bar{z})^{1/3}}, \quad (3.79)$$

de unde

$$C \simeq 2\sqrt{\frac{2\pi}{3}} k_B \frac{E_g^2 \beta^{1/2} e^{-\beta E_g} N_1(1 + \bar{z})}{(\alpha_1 \alpha_2)^{2/3} \sqrt{\bar{\Delta}_1} (1 - \bar{z})^{1/3}}. \quad (3.80)$$

Expresii analoge se obțin fără dificultate pentru concentrații mici ale impurităților magnetice. Totuși aici vom da numai un exemplu de influența impurităților paramagnetice asupra căldurii specifice electronice în cazul în care se realizează supraconductivitatea fără bandă interzisă (gapless superconductivity). În acest caz nu există un mecanism de activare pentru excitarea cvaziparticulelor și, de aceea, căldura specifică este asemănătoare cu cea a unui metal normal. Într-adevăr, obținem în acest caz [48]

$$C = \frac{2\pi^2}{3} T \left\{ N_1 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{a_1 + b_1}{b_1 b_2 - a_1 a_2} \right)^2 \right] + \right. \\ \left. + N_2 \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{a_2 + b_2}{b_1 b_2 - a_1 a_2} \right)^2 \right] \right\}, \quad (3.81)$$

unde

$$a_1 = \frac{\hbar}{2\chi_{12}\bar{\Delta}_1} = \alpha_1 - \beta_{12}; \quad b_n = \alpha_n + \beta_{nn}; \\ a_2 = \frac{\hbar}{2\chi_{21}\bar{\Delta}_2} = \alpha_2 - \beta_{21}.$$

În cazul unei singure benzi, acest rezultat este în concordanță cu cel din lucrarea [27].

Să trecem la cercetarea proprietăților termodinamice ale sistemului în vecinătatea temperaturii critice T_c .

3.4 Termodinamica aliajelor bibandă în apropierea lui T_c

Pentru cercetarea proprietăților termodinamice ale supraconductorilor bibandă cu impurități nemagnetice în apropierea lui T_c folosim expresia pentru diferența potențialelor termodinamice în acest domeniu de temperaturi, obținută de V.A. Moskalenko, L.Z. Kon și M.K. Kolpajiu [59]-[61],

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n \\ m_1, n_1}} B(mm_1|nn_1) \bar{\Delta}_m \bar{\Delta}_{m_1} \bar{\Delta}_n \bar{\Delta}_{n_1}. \quad (3.82)$$

Aici, ca și mai sus, parametrii de ordine se consideră reali. Coeficienții B au proprietățile de simetrie următoare:

$$B(mm_1|nn_1) = B(n_1n|mm_1) = B(nn_1|m_1m).$$

Aceasta înseamnă că din cei 16 coeficienți B trebuie să calculăm numai șase mărimi: $B(11|11)$, $B(11|12)$, $B(11|22)$, $B(12|12)$, $B(12|22)$, $B(22|22)$. De fapt este suficient să calculăm patru coeficienți (de exemplu, primii patru) și apoi ultimii doi pot fi obținuți prin permutarea indicilor de bandă. În (3.82) trebuie să substituim valorile parametrilor de ordine $\bar{\Delta}_n$, determinați în apropierea temperaturii critice T_c .

Pentru efectuarea acestor calcule să ne întoarcem la ecuațiile (3.14) și (3.16) și să considerăm că în apropierea lui T_c mărimile $\bar{\Delta}_n$ sunt mici, iar parametrii $\bar{u}_n(\omega_l)$ sunt mari. Ca aproximație de zero pentru mărimile \bar{u}_n în cazul impurităților nemagnetice poate servi formula (3.19) pentru \bar{u}_1 și expresia analoagă pentru \bar{u}_2 . Atunci soluția ecuației (3.16) poate fi scrisă sub forma

$$\bar{u}_n(\omega_l) = \tilde{u}_n(\omega_l) + u'_n.$$

Pe baza acestor ecuații obținem pentru u'_n

$$u'_1 = \frac{\alpha_1}{2\tilde{u}_2^2} \frac{|\tilde{u}_1| + \alpha_2 \left(1 - \frac{\tilde{u}_2}{\tilde{u}_1}\right)}{|\tilde{u}_2| + \alpha_1 + \alpha_2 \frac{\tilde{u}_2}{\tilde{u}_1}} \left(1 - \frac{\tilde{u}_2}{\tilde{u}_1}\right) \quad (3.83)$$

și o expresie analoagă pentru u'_2 , care se deduce din cea de mai sus prin schimbarea indicilor de bandă.

Pe baza acestor aproximații ecuația (3.14) capătă forma

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_n = & \sum_m V_{nm} N_m \bar{\Delta}_m \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_l} \frac{1}{|\omega_l|} + \sum_m V_{nm} N_m \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_l} \left[\frac{1}{|\tilde{u}_m|} - \right. \\ & \left. - \frac{\bar{\Delta}_m}{|\omega_l|} - \frac{1}{|\tilde{u}_m|} \left(\frac{u'_m}{|\tilde{u}_m|} + \frac{1}{2\tilde{u}_m^2} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.84)$$

unde, ca și în cap.1, trebuie să folosim relația

$$\frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_l} \frac{1}{|\omega_l|} = \ln \left(\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta \hbar \omega_m \right) = \xi_m.$$

Pe baza lui (3.19) avem

$$\frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_l} \left[\frac{1}{|\tilde{u}_1(\omega_l)|} - \frac{\bar{\Delta}_1}{|\omega_l|} \right] = \frac{\hbar}{2\tau_{12}} \frac{\beta(\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1)}{\varrho\pi} \left[\psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right], \quad (3.85)$$

unde

$$\varrho = \varrho_1 + \varrho_2; \quad \varrho_1 = \frac{\hbar\beta}{2\pi\tau_{12}}; \quad \varrho_2 = \frac{\hbar\beta}{2\pi\tau_{21}}. \quad (3.86)$$

Calculul termenilor următori din partea dreaptă a lui (3.84) dă

$$\begin{aligned} & \frac{\beta}{\pi} \sum_{\omega_l} \frac{1}{2|\tilde{u}_1(\omega_l)|^3} = \frac{\beta^2}{\pi^2} \bar{\Delta}^3 \left\{ \frac{7\zeta(3)}{8} \left[1 + \frac{\varrho_1}{\varrho} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \right]^3 \right. \\ & - \frac{3\pi^2}{8} \frac{\varrho_1}{\varrho^2} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \left[1 + \frac{\varrho_1}{\varrho} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \right]^2 + \frac{3}{2} \frac{\varrho_1}{\varrho^3} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \times \\ & \times \left[1 + \frac{\varrho_1}{\varrho} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \right] \left[1 + \frac{2\varrho_1}{\varrho} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \right] \left[\psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] - \\ & - \frac{3}{2} \frac{\varrho_1^2}{\varrho^3} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right)^2 \left[1 + \frac{\varrho_1}{\varrho} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right) \right] \frac{d}{d\varrho} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) + \\ & \left. + \frac{\varrho_1^3}{4\varrho^3} \left(\frac{1}{\bar{z}} - 1 \right)^3 \frac{d^2}{d\varrho^2} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) \right\}, \quad (3.87) \end{aligned}$$

și de asemenea

$$\begin{aligned} & \frac{\pi}{\beta} \sum_{\omega_l} \frac{u'_1}{\tilde{u}_1^2} = \bar{\Delta}_2^2 (\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1) \varrho_1 \frac{\beta^2}{\pi^2} \left\{ \frac{\pi^2}{8\varrho^2} - \frac{1}{\varrho^3} \left[\psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] + \right. \\ & + \frac{1}{2\varrho^2} \frac{d}{d\varrho} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \frac{\varrho_2}{\varrho} (1-\bar{z})^2 \left[\frac{\pi^2}{8\varrho} - \frac{3}{2\varrho^2} \left(\psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right) \right] + \\ & + \frac{1}{\varrho} \frac{d}{d\varrho} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \frac{1}{4} \frac{d^2}{d\varrho^2} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) \left. \right\} + \varrho_1\varrho_2 (1-\bar{z})^2 \left[\frac{\pi^2}{8\varrho^4} - \right. \\ & - \frac{2}{\varrho^5} \left(\psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right) + \frac{3}{2\varrho^4} \frac{d}{d\varrho} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) - \frac{1}{2\varrho^3} \frac{d^2}{d\varrho^2} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) + \\ & \left. + \frac{1}{12\varrho^2} \frac{d^3}{d\varrho^3} \psi\left(\frac{1+\varrho}{2}\right) \right] \left. \right\}. \quad (3.88) \end{aligned}$$

Expresiile de mai sus sunt destul de complicate pentru ca pe baza lor să putem face calcule ulterioare. Să simplificăm aceste formule pentru cazurile limită ale concentrațiilor de impurități nemagnetice mari ($\varrho_n \gg 1$) și mici ($\varrho_n \ll 1$). Înainte de a trece la aceste simplificări, să reamintim egalitățile

$$\begin{aligned} & \frac{\varrho_1}{\varrho} = \frac{N_2}{N_1 + N_2}; \quad \frac{\varrho_2}{\varrho} = \frac{N_1}{N_1 + N_2}; \\ & \bar{\Delta}_1 \left[1 + \frac{\varrho_1}{\varrho} \left(\frac{1}{\bar{z}} \right) \right] = \frac{N_1 \bar{\Delta}_1 + N_2 \bar{\Delta}_2}{N_1 + N_2} \equiv \bar{\Delta}. \quad (3.89) \end{aligned}$$

În limita concentrațiilor mari de impurități ($\varrho_n \gg 1$) ecuația (3.84) capătă forma

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_n - \sum_m V_{nm} N_m \bar{\Delta}_m \ln \left(\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta \hbar \omega_m \right) &= \\ &= V_{n1} N_1 \left[\frac{N_2}{N_1 + N_2} (\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1) \ln(2\gamma_E \varrho) - \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta^2}{\pi^2} \bar{\Delta}_3 \right] + \\ &+ V_{n2} N_2 \left[\frac{N_1}{N_1 + N_2} (\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2) \ln(2\gamma_E \varrho) - \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta^2}{\pi^2} \bar{\Delta}_3 \right]. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Particularitatea caracteristică a ecuației (3.90) este prezența parametrului de ordine mediu $\bar{\Delta}$.

În limita concentrațiilor mici de impurități nemagnetice ($\alpha_n \ll 1$) sunt posibile de asemenea simplificări importante:

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}_n - \sum_m V_{nm} N_m \bar{\Delta}_m \ln \left(\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta \hbar \omega_m \right) &= \\ &= V_m N_1 \left[\frac{\pi^2}{4} \varrho_1 (\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1) - \frac{\pi^2}{96} \beta^2 \varrho_1 \bar{\Delta}_2^2 (\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1) - \right. \\ &- \left. \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \beta^2 \bar{\Delta}_1^3 \left(1 + \frac{\pi^4 \varrho_1 (\bar{\Delta}_2 - \bar{\Delta}_1)}{28\zeta(3) \bar{\Delta}_1} \right) \right] + \\ &+ V_{n2} N_2 \left[\frac{\pi^2}{4} \varrho_2 (\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2) - \frac{\pi^2}{96} \beta^2 \varrho_2 \bar{\Delta}_1^2 (\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2) - \right. \\ &- \left. \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \beta^2 \bar{\Delta}_2^3 \left(1 + \frac{\pi^4 \varrho_2 (\bar{\Delta}_1 - \bar{\Delta}_2)}{28\zeta(3) \bar{\Delta}_2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Pentru calculele următoare, bazate pe ecuațiile (3.90) și (3.91), facem dezvoltarea în serie a mărimii $\bar{\Delta}$ și în vecinătatea temperaturii critice T_c vom scrie

$$\bar{\Delta}_n(T) = \bar{C}_n t^{1/2} + \bar{C}'_n t^{3/2} + \dots, \quad t = 1 - \frac{T}{T_c}.$$

În limita concentrațiilor mari de impurități funcțiile \bar{C}_n și \bar{C}'_n se dtermină din aproximația de zero

$$\begin{aligned} \bar{C}_n \left[1 - V_{11} N_1 \zeta_1^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \ln(2\gamma_E \varrho_c) \right] - \\ - \bar{C}_2 \left[V_{21} N_2 \zeta_2^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \ln(2\gamma_E \varrho_c) \right] = 0 \end{aligned} \quad (3.92)$$

și aproximația de ordinul întâi

$$\begin{aligned}
& \bar{C}'_1 \left[1 - V_{11} N_1 \zeta_1^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \ln(2\gamma_E \varrho_c) \right] - \\
& - \bar{C}'_2 \left[V_{21} N_2 \zeta_2^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \ln(2\gamma_E \varrho_c) \right] = \\
& = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{21} - V_{11}) (\bar{C}_1 - \bar{C}_2) + V_{11} N_1 \bar{C}_1 + V_{21} N_2 \bar{C}_2 - \\
& - \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta_c^2}{\pi^2} (V_{11} N_1 + V_{21} N_2) \bar{C}^3,
\end{aligned} \tag{3.93}$$

unde

$$\varrho_c = \varrho(T = T_c), \quad \varrho_n^c = \varrho_n(T = T_c); \quad \zeta_n^c = \ln \left[\frac{2\gamma_E}{\pi} \beta_c \hbar \omega_n \right].$$

La aceste ecuații trebuie să adăugăm încă două cu schimbarea indicilor de bandă. Mărimea \bar{C} din (3.93) se calculează din \bar{C}_n după regula prin care s-a calculat $\bar{\Delta}$ în (3.89).

Se vede ușor că (3.92) este un caz particular al ecuației de forma

$$\begin{aligned}
& \bar{C}_1 \left[1 - V_{11} N_1 \zeta_1^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \left(\psi \left(\frac{1 + \varrho_c}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right) \right] - \\
& - \bar{C}_2 \left[V_{21} N_2 \zeta_2^c - \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \left(\psi \left(\frac{1 + \varrho_c}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right) \right] = 0,
\end{aligned} \tag{3.94}$$

în care mărimea ϱ_c se presupune mult mai mare decât unitatea ($\varrho_c \gg 1$). Ecuația pentru \bar{C}_2 se obține prin schimbarea indicilor de bandă. La rândul său ecuația (3.94) este un caz particular al ecuației (2.84), dedusă pentru cazul mai general al impurităților paramagnetice. În acest fel, ecuația pentru \bar{C}_n determină (în concordanță cu rezultatele din capitolul precedent) temperatura critică a supraconductorului cu impurități nemagnetice, și de asemenea raportul $\bar{z}_c = \bar{C}_1 / \bar{C}_2$:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\bar{z}_c} &= \left\{ 1 - V_{11} N_1 \zeta_1^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \left[\psi \left(\frac{1 + \varrho_c}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] \right\} \times \\
& \times \left\{ V_{21} N_2 \zeta_2^c + \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \left[\psi \left(\frac{1 + \varrho_c}{2} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] \right\}^{-1}.
\end{aligned} \tag{3.95}$$

În limita legăturii slabe termenii care provin de la impurități pot fi omiși, și în acest caz raportul \bar{z}_c coincide cu relația corespunzătoare (1.19) pentru metalul pur. Diferența constă numai în faptul că acum mărimea β_c depinde de concentrația de impurități.

Pentru a determina complet mărimea \bar{C}_n , trebuie să ne întoarcem la sistemul neomogen de ecuații (3.93). Din condiția de compatibilitate a sistemului găsim \bar{C}_n ($\varrho_n \gg 1$):

$$\bar{C}_n^2 = \frac{8}{7\zeta(3)} \frac{\pi^2}{\beta_c^2}, \quad \varrho \gg 1. \tag{3.96}$$

Formula (3.96) ca formă coincide cu expresia corespunzătoare pentru substanța unibandă pură. Totuși în cazul de față mărimea T_c se referă la aliajul bibandă "impur" cu impurități nemagnetice.

Rezultatul (3.96) are caracterul de teoremă de corespondență, deoarece ne arată că pentru o concentrație de impurități nemagnetice suficient de mare, când benzile încă nu se suprapun, în sistemul bibandă apar trăsături unibandă caracteristice cu o densitate de stări relativă $n_n(E) = [\tilde{N}_n(E)]/N_n$ și parametrul de ordine comun $\bar{\Delta}$, deși temperatura critică T_c este determinată pe baza modelului bibandă.

Să trecem la determinarea parametrilor \bar{C}_n în cazul concentrației mici de impurități. În acest caz sistemul de ecuații, obținut din (3.91), determină T_c și raportul $\bar{z} = \bar{C}_1/\bar{C}_2$. Ambele mărimi au fost deja studiate în capitolul precedent, iar \bar{z}_c în aproximația legăturii slabe este egal cu z_c . Din acest motiv este necesar să examinăm sistemul neomogen pentru coeficienții \bar{C}'_n în această limită de concentrații. Una din ecuațiile acestui sistem are forma

$$\begin{aligned} & \bar{C}'_1 \left[1 - V_{11}N_1\zeta_1 + \frac{\pi^2}{4} \frac{N_1N_2}{N_1 + N_2} \rho_c (V_{11} - V_{21}) \right] - \\ & - \bar{C}'_2 \left[V_{21}N_2\zeta_2 + \frac{\pi^2}{4} \frac{N_1N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) \right] = V_{11}N_1\bar{C}_1 + V_{21}N_2\bar{C}_2 - \\ & - \frac{\pi^2}{4} \rho_c \frac{N_1N_2}{N_1 + N_2} (V_{11} - V_{21}) (\bar{C}_1 - \bar{C}_2) - \\ & \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta_c^2}{\pi^2} (V_{11}N_1\bar{C}_1^3 + V_{21}N_2\bar{C}_2^3) - \\ & - \frac{\pi^2}{32} \beta_c^2 \rho_c \frac{N_1N_2}{N_1 + N_2} (\bar{C}_2 - \bar{C}_1) (V_{11}\bar{C}_1^2 - V_{21}\bar{C}_2^2) - \\ & - \frac{\pi^2}{96} \beta_c^2 \rho_c \frac{N_1N_2}{N_1 + N_2} (\bar{C}_2 - \bar{C}_1) (V_{11}\bar{C}_2^2 - V_{21}\bar{C}_1^2). \end{aligned} \quad (3.97)$$

A doua ecuație se obține în mod asemănător.

Din condiția de compatibilitate a acestui sistem linear și neomogen de ecuații pentru parametrii \bar{C}'_n rezultă

$$\begin{aligned} & \left\{ \bar{C}_1 \left[1 - \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta_c^2}{\pi^2} \bar{C}_1^2 \right] - \frac{\pi^2}{4} \frac{N_2\rho_c}{N_1 + N_2} (\bar{C}_1 - \bar{C}_2) \left[1 - \frac{\beta_c^2}{24} (3\bar{C}_1^2 + \bar{C}_2^2) \right] \right\} \times \\ & \times (V_{11}N_1 - a\rho_2) + V_{21}N_2 \left\{ \bar{C}_2 \left[1 - \frac{7\zeta(3)}{8} \frac{\beta_c^2}{\pi^2} \bar{C}_2^2 \right] - \frac{\pi^2}{4} \frac{N_2\rho_c}{N_1 + N_2} (\bar{C}_2 - \bar{C}_1) \right. \\ & \left. \times \left[1 - \frac{\beta_c^2}{24} (3\bar{C}_2^2 + \bar{C}_1^2) \right] \right\} = 0. \end{aligned} \quad (3.98)$$

A doua ecuație cu indicii de bandă schimbați pentru determinarea lui T_c este echivalentă cu cea de mai sus.

Folosind definiția lui \bar{z}_c , obținem

$$\begin{aligned} \bar{C}_1^2 = & \left(\frac{\pi}{\beta_c}\right)^2 \frac{8}{7\zeta(3)} \frac{N_1 + N_2/\bar{z}_c^2}{N_1 + N_2/\bar{z}_c^4} \left[1 - \frac{\pi^2 \rho_c}{4} \frac{N_1 N_2 (1 - 1/\bar{z}_c)^2}{(N_1 + N_2)(N_1 + N_2/\bar{z}_c^2)} + \right. \\ & \left. + \frac{8}{7\zeta(3)} \frac{\pi^4}{96} \rho_c \frac{N_1 N_2 (1 - 1/\bar{z}_c)^2 (3 + 3/\bar{z}_c^2 + 2/\bar{z}_c)}{(N_1 + N_2)(N_1 + N_2/\bar{z}_c^4)} \right]. \end{aligned} \quad (3.99)$$

Această egalitate împreună cu definiția lui \bar{z}_c rezolvă problema calculului lui \bar{C}_n în aproximația concentrației mici de impurități nemagnetice.

După aceste calcule să ne întoarcem la determinarea potențialului termodinamic al supraconductorului cu impurități nemagnetice. Substituind în (3.82) dezvoltarea în serie a lui $\bar{\Delta}_n$ după t , avem

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = -\frac{t^2}{2} \sum_{\substack{n, m \\ n_1, m_1}} B(mm_1|nn_1) \bar{C}_m \bar{C}_{m_1} \bar{C}_n \bar{C}_{n_1}. \quad (3.100)$$

Pe baza proprietăților coeficienților B putem scrie

$$\begin{aligned} \frac{\Psi - \Psi_n}{V} = & -\frac{t^2}{2} \left[B(11|11) \bar{C}_1^4 + B(22|22) \bar{C}_2^4 + \right. \\ & + 4B(11|12) \bar{C}_1^3 \bar{C}_2 + 4B(12|22) \bar{C}_1 \bar{C}_2^3 + \\ & \left. + 2(2B(12|12) + B(11|22)) \bar{C}_1^2 \bar{C}_2^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.101)$$

Calculul detaliat al coeficienților B pentru un sistem cu impurități nemagnetice au fost făcute de L.Z. Kon și M.K. Kolpajiu [60, 61].

La concentrații mari de impurități ($\varrho_n \gg 1$) acești coeficienți sunt egali cu

$$B(mm_1|nn_1) = \frac{7\zeta(3)}{16} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^2 \frac{N_m N_{m_1} N_n N_{n_1}}{(N_1 + N_2)^3}. \quad (3.102)$$

La concentrații mici sunt valabile aproximațiile ($\varrho_n \ll 1$)

$$\begin{aligned} B(11|11) &= \frac{7\zeta(3)}{8} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^2 N_1 - \frac{\pi^2}{32} \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} \beta^2 \varrho + O(\varrho^2); \\ B(11|12) &= \frac{\pi^2}{96} \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} \beta^2 \varrho + O(\varrho^2); \\ B(12|12) &\simeq -\frac{\pi}{192} \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} \beta^2 \varrho + O(\varrho^2); \\ B(11|22) &\simeq O(\varrho^2). \end{aligned} \quad (3.103)$$

Pe baza ecuațiilor (3.101) și (3.102) în cazul concentrației mari de impurități nemagnetice obținem următoarea expresie pentru diferența potențialelor termodinamice în apropierea lui T_c :

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} \simeq -\frac{7\zeta(3)}{16} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^2 t^2 (N_1 + N_2) \bar{C}_n. \quad (3.104)$$

Substituind aici valoarea găsită pentru \bar{C} , avem

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = -\frac{H_c^2(T)}{8\pi} = -\frac{4}{7\zeta(3)} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^2 (N_1 + N_2)t^2. \quad (3.105)$$

De aici găsim pentru saltul căldurii specifice în punctul critic

$$(C - C_n)_c = \frac{8\pi^2}{7\beta_c} \frac{N_1 + N_2}{\zeta(3)}. \quad (3.106)$$

Expresia obținută coincide ca formă cu formula corespunzătoare pentru substanțele pure unibandă cu diferența că mărimea β_c se determină în cadrul sistemului bibandă (vezi Cap.2), iar în locul densității de stări pentru o singură bandă intră densitatea de stări totală a ambelor benzi.

În sfârșit, să examinăm determinarea potențialului termodinamic în vecinătatea lui T_c în cazul concentrației mici de impurități. Calculele se fac în aproximația liniară în raport cu concentrația de impurități. Pentru aceasta substituim formulele (3.103) și (3.99) în (3.101). Ca rezultat obținem

$$\frac{\Psi - \Psi_n}{V} = -t^2[\Lambda_0 - \Lambda_1], \quad (3.107)$$

unde

$$\begin{aligned} \Lambda_0 &= \frac{4}{7\zeta(3)} \left(\frac{\pi}{\beta_c}\right)^2 \frac{N_1 + N_2/\bar{z}_c^2}{N_1 + N_2/\bar{z}_c^4}, \\ \Lambda_1 &= \frac{2\pi^4}{7\beta_c^2\zeta(3)} \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2} \varrho_c \left(1 - \frac{1}{\bar{z}_c}\right)^2 \left(N_1 + \frac{N_2}{\bar{z}_c^2}\right) \times \\ &\quad \times \left(N_1 + \frac{N_2}{\bar{z}_c^4}\right)^{-1} \left[\left(N_1 + \frac{N_2}{\bar{z}_c^4}\right) + \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{4}{7\zeta(3)} - 1\right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(3 + \frac{3}{\bar{z}_c^2} + \frac{2}{\bar{z}_c}\right) \left(N_1 + N_2/\bar{z}_c^2\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.108)$$

Mărimea Λ_0 a fost obținută în cap.1 (vezi (1.92)). Mărimile Λ_0 și Λ_1 determină saltul căldurii specifice în punctul critic

$$(C - C_n)_c = 2\beta_c(\Lambda_0 + \Lambda_1).$$

Observăm că pentru $\bar{z} = 1$ mărimea $\Lambda_1 = 0$, ceea ce corespunde independenței mărimilor termodinamice de concentrația de impurități nemagnetice la egalitatea parametrilor de ordine din cele două benzi.

Bibliografie

- [1] Bogoliubov N. N., Zubarev D. N., Terkovnikov Iu. A., DAN URSS, 1957, vol. 117, pag. 788-790.
- [2] Bogolibov N.N., JETF, 1958, vol. 34, pag. 58-65, 73-79.
- [3] Bogoliubov N.N., Tolmacev V.V., Şirkov D.B., *New method in the theory of superconductivity*, (in russian) Ed. AN URSS, 1958.
- [4] Bogoliubov N.N., DAN URSS, 1958, vol. 119, pag. 244-246.
- [5] Bogoliubov N.N., UFN, 1959, vol. 67, pag. 549-580.
- [6] Bardeen J., Cooper L.N., Schrieffer J.R., Phys. Rev., 1957, vol. 106, pag. 162-164; vol. 108, pag. 1175-1204.
- [7] Bardeen J., Schrieffer J.R., *Novoie v izucenie sverhprovodimosty*, GIFML, 1962.
- [8] Schrieffer J.R., *Teoria sverhprovodimosti*, Nauka, 1970.
- [9] Bednorz J.G., Müller K. A., Z. Phys., 1986, B, vol. 64, pag. 189-193.
- [10] Wu M.K., Ashburn J.R., Torng C.J. et al., Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, pag. 908-918.
- [11] Takagi H., Ychida S., Kishio K., et al., Japan J. Appl. Phys., 1987, pt. 2, vol. 26, pag. L320-325.
- [12] Cava R.J., Batlogg B., van Dover R.B. et al., Phys. Rev. Lett., 1987, vol. 58, pag. 676-680.
- [13] Verkin B.I., Bandurian B.B., Barîlnik A.C., FNT, 1987, vol. 13, Nr. 7, pag. 771-783.
- [14] Alexeevskii H.E., Homskii D.I., UFN, 1985, vol. 147, Nr. 4 pag. 767-779.
- [15] Moskalenko V.A., FMM, 1956, vol. 8, pag. 503-513.
- [16] Moskalenko V.A., Palistrant M.E., *Statisticeskaia Fizica i Kvantovaia Teoria Polia*, sub redacţia Acad. N.N. Bogoliubov, Nauka, 1973, pag. 262-279.
- [17] Suhl H., Mathias B.T., Walker L.K., Phys. Rev. Lett., 1959, vol. 3, pag. 552-554.

- [18] Moskalenko V.A., *Electromagnetic and kinetic properties of superconductin alloys with overlapping energy bands*, Chişinău, Ştiinţa, 1976 (in russian).
- [19] Zavaritkii N.V., JETP, 1963, vol. 45, pag. 1839-1849.
- [20] Binning G., Baratoff A., Hoenig H.E. et al., Phys. Rev. Lett., 1980, vol. 45, pag. 1352-1355.
- [21] Palistrant M.E., Dediu V.I., Phys. Lett, 1967, vol. 24A, pag. 537-538.
- [22] Palistrant M.E., Dediu V.I., Izv. AN MSSR, 1967, Nr. 12, pag. 52-60.
- [23] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., Dzialošinskii I.E., *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Dover Publications, Inc., New York, 1963.
- [24] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., JETP, 1958, vol. 35, pag. 1558-1571.
- [25] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., JETP, 1959, vol. 36, pag. 319-320.
- [26] Gorkov L.P., JETP, 1959, vol. 37, pag. 1407-1412.
- [27] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., JETP, 1960, vol. 39, pag. 1781-1796.
- [28] Edwards S.F., Phil. Mag., 1958, vol. 3, pag. 1020-1025.
- [29] Skalski S., Betbeder-Matibet O., Weiss P.R., Phys. Rev., 1964, vol. 136A, pag. 1500-1525.
- [30] Ambegaokar V., Griffin A., Phys. Rev., 1965, vol. 137A, pag. 1151-1167.
- [31] Maki K., *Superconductivity*, vol. II, Marcell Dekker, INC, New York, Ed. by R.D. Parks, 1968, pag. 1035.
- [32] Moskalenko V.A., FTT, 1962, vol. 4, Nr. 10, pag. 2770-2776.
- [33] Moskalenko V.A., DAN SSSR, 1963, vol. 148, Nr. 2, pag. 307-310.
- [34] Moskalenko V.A., Palistrant M.E., DAN SSSR, 1965, vol. 162, Nr. 3, pag. 539-542.
- [35] Moskalenko V.A., Palistrant M.E., JETP, 1965, vol. 49, Nr. 3, pag. 770-780.
- [36] Moskalenko V.A., DAN SSSR, 1965, vol. 165, Nr. 2, pag. 313-315.
- [37] Moskalenko V.A., Kon L.Z., JETP, 1966, vol. 50, fascicula 3, pag. 724-725.
- [38] Moskalenko V.A., Palistrant M.E., DAN SSSR, 1966, vol. 169, Nr. 4, pag. 812-815.
- [39] Palistrant M.E., Moskalenko V.A., FMM, 1966, vol. 21, Nr.2, pag. 260-281.
- [40] Moskalenko V.A., DAN SSSR, 1962, vol. 147, Nr. 6, pag. 1340-1343.
- [41] Bogoliubov N.N., Izbranâie Trudi, T.Ş. Kiev: Naukova dumka, 1971, pag.174-215.

- [42] Gorkov L.P., JETP, 1958, vol. 34, pag. 735-745.
- [43] Bogoliubov N.N., Širkov D.V., *Introduction in Quantum Field Theory*, GITTL, 1957; idem ed. II, Nauka, 1973 (in russian).
- [44] Bonci-Bruevici V.L., Tiablikov S.V., *Green function method in statistical mechanics*, GIFML, 1961 (in russian).
- [45] Moskalenko V.A., DAN SSSR, 1967, vol. 176, Nr. 2, pag. 301-304.
- [46] Moskalenko V.A., FMM, 1967, vol. 23, Nr. 4, pag. 585-596.
- [47] Moskalenko V.A., Kon L.Z., Palistrant M.E., Com. Conf. Fizica Temp. Joase, VINITI, 1967, pag. 181-186.
- [48] Kon L.Z., Moskalenko V.A., Phys. Stat. Sol., 1969, vol. 32, pag. 545-549.
- [49] Moskalenko V.A., Golub A.A., Driuma V.S., FMM, 1969, vol. 27, fascicula 3, pag. 415-418.
- [50] Bogoliubov N.N., Tiablikov S.V., DAN SSSR, 1959, vol. 126, pag. 53.
- [51] Tiablikov S.V. *Quantum theoretical models in magnetism*, ed. II, Nauka, 1975 (in russian).
- [52] Zubarev D.N., UFN, 1962, vol. 71, pag. 71-116.
- [53] Moskalenko V.A., Ursul A.M., TMF, 1971, vol. 7, Nr. 1, pag. 72-78.
- [54] Moskalenko V.A., Ursul A.M., TMF, 1973, vol. 17, Nr.1, pag. 142-149.
- [55] Moskalenko V.A., *Methods of the study of electronic density of states in superconducting alloys* Chişinău: Ştiinţa, 1974 (in russian).
- [56] Moskalenko V.A., Ursul A.M., Botoşan N.I., *Proceedings of the International Conference on Mathematical problems of Quantum Theory of Fields and Quantum Statistics*, 1973, pag. 362-369 (in russian).
- [57] Botoşan N.I., Vladimir M.I., Moskalenko V.A., TMF, 1974, vol. 19, Nr. 3, pag. 371-389.
- [58] Botoşan N.I., Vladimir M.I., Moskalenko V.A., TMF, 1975, vol. 25, Nr. 3, pag. 382-394.
- [59] Moskalenko V.A., *The problems of Solid State*, PhD Thesis, 1966.
- [60] Kon L.Z., FMM, 1967, vol. 23, Nr. 2, pag. 211-219.
- [61] Kolpajiu M.K., Kon L.Z., Izd.AN MSSR, Seria Şt. Fiz.-Mat. 1967, Nr. 12, pag. 90-93.

Partea II

INFLUENȚA STĂRILOR LOCALIZATE ALE IMPURITĂȚILOR ȘI A PARTICULARITĂȚIILOR SPECTRULUI DE BENZI ASUPRA PROPRIETĂȚILOR ALIAJELOR

TERMODINAMICA ȘI CINETICA SUPRACONDUCTORILOR CU STĂRI LOCALE

În acest capitol va fi studiată influența impurităților, descrise de modelul Anderson, asupra unor proprietăți termodinamice și cinetice ale aliajelor supraconductoare.

În sec.4.1 se trece în revistă literatura în domeniu și se introduc noțiunile fundamentale.

În sec.4.2 se calculează temperatura critică a supraconductorului. Introducerea noilor operatori de cvaziparticule a creat posibilitatea luării în considerare la calculul temperaturii critice a tuturor componentelor momentului magnetic al atomului de impuritate.

Hamiltonianul Anderson permite în același timp să examinăm stările din interiorul gap-ului energetic al supraconductorului și difuzia rezonantă a electronilor pe impurități. În sec.4.3 acest lucru s-a făcut prin calculul saltului căldurii specifice a aliajelor supraconductoare.

Pe baza metodei lui V.A. Moskalenko în sec.4.4 se cercetează densitatea electronică de stări. Se examinează limita nemagnetică a modelului Anderson. Rezultatele acestei secțiuni se folosesc și în următoarele două secțiuni. Se calculează conducția termică electronică în aliajele supraconductoare cu stări nemagnetice localizate și se studiază absorbția ultrasunetelor în astfel de aliaje.

4.1 Introducere

Chiar o cantitate nu prea mare de atomi ai metalelor de tranziție sau de elemente ale pământurilor rare, dizolvate într-un metal nemagnetic, modifică esențial proprietățile sale. Apare o corecție dependentă de temperatură a susceptibilității Pauli a electronilor de conducție, în care se observă un minim al curbei rezistivității specifice ca funcție de temperatură, iar forța termoelectrică crește cu câteva ordine de mărime. Acestor probleme îi este consacrată lucrarea lui A.A. Abrikosov [1]. Se modifică esențial și proprietățile supraconductoare ale metalelor [2, 3]. Atomul metalelor de tranziție sau a pământurilor rare are, în stare izolată, pături electronice d sau f parțial ocupate și un spin electronic diferit de zero. În atomul izolat din cauza repulsiei coulombiene a electronilor se realizează o stare în care pătura

incompletă are spinul maxim. În metale posibilitatea formării a unui spin localizat este determinată de relația între repulsia coulombiană a electronilor păturilor d sau f și interacția lor cu electronii de conducție ai metalului. Impuritățile de acest tip într-un metal sunt descrise de hamiltonianul Anderson [4]

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (4.1)$$

unde

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_d \sum_{\sigma} \varphi_{\sigma}^+ \varphi_{\sigma}; \quad (4.2)$$

$$H_1 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left(V_{\mathbf{k}d} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ \varphi_{\sigma} + V_{\mathbf{k}d}^+ \varphi_{\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \right); \quad (4.3)$$

$$H_2 = U \varphi_{\uparrow}^+ \varphi_{\uparrow} \varphi_{\downarrow}^+ \varphi_{\downarrow}. \quad (4.4)$$

Aici primul termen din (4.2) reprezintă energia electronilor de conducție, al doilea termen descrie contribuția stării de impuritate. Energia de excitare uniparticulă pentru electronii liberi $\xi_{\mathbf{k}}$ și energia atomului de impuritate izolat ε_d se măsoară de la nivelul Fermi. Nivelul de energie al atomului de impuritate se consideră nedegenerat și situat sub nivelul Fermi ($\varepsilon_d < 0$). Termenul H_1 descrie interacția electronilor de conducție (îi vom numi electroni s) cu atomii de impuritate. Ca rezultat al acestei interacții, electronul din starea localizată (o vom numi stare d) poate trece în banda de conducție și invers. Hamiltonianul H_2 corespunde repulsiei coulombiene interne a electronilor cu spini opuși din starea localizată.

Pentru analiza hamiltonianului (4.1) Anderson a folosit aproximația Hartree-Fock. Această aproximație constă în înlocuirea termenului $U \varphi_{\uparrow}^+ \varphi_{\uparrow} \varphi_{\downarrow}^+ \varphi_{\downarrow}$ cu

$$U n_{d\uparrow} \varphi_{\downarrow}^+ \varphi_{\downarrow} + U n_{d\downarrow} \varphi_{\uparrow}^+ \varphi_{\uparrow}, \quad (4.5)$$

unde

$$n_{d\uparrow} = \langle \varphi_{\uparrow}^+ \varphi_{\uparrow} \rangle; \quad n_{d\downarrow} = \langle \varphi_{\downarrow}^+ \varphi_{\downarrow} \rangle; \quad (4.6)$$

$$n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow} = 1. \quad (4.7)$$

Expresia (4.5) renormează hamiltonianul liber al atomilor de impuritate:

$$E_{d\downarrow} = \varepsilon_d + U n_{d\uparrow}; \quad E_{d\uparrow} = \varepsilon_d + U n_{d\downarrow}. \quad (4.8)$$

În aproximația de zero interacția H_1 se neglijează. Atunci dacă pe nivelul ε_d este un electron cu spinul sus, un al doilea electron cu spinul jos va avea energia $\varepsilon_d + U$. Dacă $\varepsilon_d + U > \varepsilon_F$ (ε_F fiind energia Fermi), starea nu va fi ocupată. În acest fel, repulsia coulombiană U duce la faptul că nivelul ε_d corespunde unui spin localizat.

Aplicând metoda funcției Green, Anderson a calculat densitatea de stări a impurității. Rezultatul său are forma unei lorentziene

$$N_{d\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_d - U n_{d,-\sigma})^2 + \Gamma^2}, \quad (4.9)$$

unde lărgimea maximului este dat de expresia

$$\Gamma = \pi N(\varepsilon_F) |V_{dk}|^2. \quad (4.10)$$

În funcție de relația dintre Γ , ε_d și U putem avea atât o soluție magnetică, cât și una nemagnetică. Criteriul lui Anderson de formare a unui moment magnetic local are forma

$$UN_{d\sigma}(\varepsilon_F) > 1. \quad (4.11)$$

Teoria Anderson clarifică diferitele proprietăți observate ale aliajelor diluate, care conțin elemente ale metalelor de tranziție sau ale pământurilor rare. De exemplu, prin introducerea în aluminiu a unor impurități din grupa fierului de la vanadiu până la cobalt, acestea nu se comportă ca impurități magnetice, în timp ce aceste impurități devin magnetice prin introducerea lor în cupru, argint și aur. Condiția de apariție a unui moment magnetic (4.11) în aluminiu nu este îndeplinită din cauza mării concentrații a electronilor de conducție, care duce la o lărgire mare a nivelului d și coborârea maximului lui $N_{d\sigma}$ din (4.9).

Pe baza hamiltonianului Anderson pot fi descrise proprietățile unei clase largi de materiale cu valență intermediară [5]. Pentru prelucrarea datelor experimentale pe baza modelului Anderson este necesar să luăm în considerație interacția spin-orbită, influența câmpului cristalin și degenerarea nivelului d .

Momentele magnetice locale cel mai adesea apar numai peste o anumită temperatură. Teoria Anderson nu poate explica acest lucru. Dificultatea este legată de folosirea aproximației Hartree-Fock, care nu ia în considerație efectele de corelație din apropierea temperaturii de tranziție de la starea magnetică la cea nemagnetică.

S-au făcut eforturi mari pentru a studia proprietățile hamiltonianului Anderson în afara domeniului acestei aproximații. S-a studiat separat domeniul nemagnetic (U mic) și cel magnetic (U mare). Studiul domeniului magnetic s-a făcut atât pe baza modelului Anderson (4.1) cât și pe baza interacției $s-d$:

$$H_{sd} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} I_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \psi_{\mathbf{k}'}^+ \mathbf{S} \psi_{\mathbf{k}} \varphi^+ \mathbf{S} \varphi. \quad (4.12)$$

Aici

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{\mathbf{k}\downarrow} \end{bmatrix}; \quad \varphi = \begin{bmatrix} \varphi_{\uparrow} \\ \varphi_{\downarrow} \end{bmatrix}. \quad (4.13)$$

$\mathbf{S} = i\sigma_x + j\sigma_y + k\sigma_z$, $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ fiind matricile Pauli.

Schrieffer și Wolf au arătat [6] că hamiltonianul (4.12) poate fi obținut pe baza unei transformări canonice a hamiltonianului Anderson, când $\Gamma/U \ll 1$ și $|\varepsilon_d| \gg \Gamma$.

Pentru vectorii de undă care se află pe suprafața Fermi, parametrul de interacție

$$I_{k_F k_F} = 2|V_{\mathbf{k}_F d}|^2 \frac{U}{\varepsilon_d(\varepsilon_d + U)}. \quad (4.14)$$

Aici ε_d se măsoară de la energia Fermi ($\varepsilon_d < 0$), astfel că pentru $\varepsilon_d < U$ parametrul $I_{k_F k_F}$ devine negativ și corespunde interacției antiferomagnetice a electronilor cu impuritatea.

În ordinul trei al teoriei perturbațiilor în raport cu interacția (4.12), Kondo [7] a fost primul care a calculat contribuția la rezistența electrică, legată de procesele de difuzie de schimb pe impurități, și a găsit că această contribuție diverge ca $T^3 \ln T$. Acest lucru a explicat și rezultatele experimentale obținute mai înainte de N.E.

Alexeevski și Iu.P. Gaidukov [8, 9] privind creșterea rezistenței electrice după o lege logaritmică la adăugarea unei mici cantități de fier în aur.

După lucrarea lui Kondo mulți autori au studiat interacția electronilor cu impuritățile, care au un moment magnetic localizat.

Nagaoka [10], folosind metoda funcțiilor Green retardate de timp-temperatură, introduse de N.N. Bogoliubov și S.V. Tiablikov Zubarev [11] și dezvoltate de D.N. Zubarev [13], a obținut ecuațiile de mișcare pentru funcțiile Green pe baza hamiltonianului (4.12). Pentru a tăia acest lanț de ecuații, el a înlocuit anumite produse de operatori cu valoarea lor medie, medii care descriu corelația dintre electronii de conducție și impuritate.

A.A. Abrikosov [13] a reprezentat operatorii de spin cu ajutorul operatorilor de creare și anihilare a unor fermioni fictivi (slave fermions), lucru care a dat posibilitatea să se aplice tehnica de diagrame din teoria câmpului. S-a determinat astfel amplitudinea totală de difuzie a electronilor pe impuritate. S-a arătat că în cazul unui semn antiferomagnetic al interacției de schimb, amplitudinea efectivă crește cu scăderea temperaturii și are un pol la temperatura Kondo.

Problema impurităților în metale a fost rezolvată de asemenea prin metoda integralei pe traiectorii [14, 15] și cu ajutorul grupului de renormare [16]-[18]. Wilson și colaboratorii [18], bazați pe lucrările lor de studiu al hamiltonianului (4.12) cu ajutorul grupului de renormare [17], au calculat numeric susceptibilitatea magnetică a impurității în modelul Anderson pe întreg domeniul de valori ale parametrilor modelului.

În ultimii ani problema impurităților magnetice în metale a fost rezolvată analitic. V.B. Wiegmann [19] a arătat că hamiltonianul Anderson (4.1) și hamiltonianul $s - d$ (4.12) se diagonalizează exact.

În studiul supraconductivității una dintre cele mai importante probleme este influența impurităților asupra temperaturii critice T_c . În această problemă există două cazuri limită:

- cazul impurităților magnetice; acestea distrug supraconductivitatea chiar la concentrații nu prea mari [2];
- cazul impurităților metalelor care nu sunt de tranziție; acțiunea lor asupra stării supraconductoare este condiționată de tranzițiile interbenzi [20] sau distrugerea anizotropiei gap-ului [21].

Cazul intermediar este cel al impurităților metalelor de tranziție, de exemplu grupa fierului în aluminiu. Acestea nu au un moment magnetic, dar micșorează substanțial temperatura critică T_c . Zukermann [22] pe baza hamiltonianului Anderson a explicat această scădere prin difuzia rezonantă a electronilor pe atomii de impuritate. Ratto și Blandin [23] au arătat că scăderea importantă a lui T_c se produce datorită repulsiei coulombiene a electronilor d . Efectul este deosebit de puternic atunci când energia nivelului d este apropiată de energia Fermi.

Proprietățile termodinamice ale aliajelor nemagnetice au fost studiate în lucrarea lui Kaiser [24]. El a obținut formula pentru T_c pentru orice concentrație de impurități, care în limita concentrațiilor mici dă rezultatul din lucrările [22] și [23].

În afară de aliajele magnetice și nemagnetice există și soluții ale elementelor de tranziție în metalele simple, în care atomii de impuritate nu conservă momentul

magnetic, dar proprietățile soluției se deosebesc de cele ale aliajelor cu stări nemagnetice localizate. Pentru descrierea proprietăților unor astfel de aliaje se introduc fluctuațiile locale de spin. La atomii de impuritate apare un moment magnetic localizat în timpul τ_{sf} , care după scurgerea acestui timp fluctuează atât ca direcție cât și ca mărime. Influența acestor fluctuații asupra supraconductorului a fost studiată, de exemplu, în lucrarea [35].

Supraconductivitatea în ceriu, care apare sub presiune, a fost explicată pe baza modelului Anderson în lucrarea [26]. Corelația electronilor d a fost tratată exact, iar hibridizarea aproximativ. În lucrarea [27] s-a studiat influența amestecării dinamice a stărilor electronice colective și localizate asupra temperaturii critice a supraconductorului. S-au introdus medii nenule ale operatorilor electronici și ale operatorilor Hubbard. Într-o serie de experiențe s-a realizat tranziția de la cazul impurităților magnetice la cele nemagnetice.

În lucrarea [28] s-a studiat influența presiunii asupra variației temperaturii critice a tranziției supraconductive a lantanului cu impurități de cadmiu sau ceriu. S-a arătat că panta curbei dT_c/dn_k rămâne constantă cu variația presiunii pentru aliajul La-Cd dar se modifică puternic în cazul aliajelor La-Ce. Dependența lui T_c de presiune în aliajul $\text{La}_{3-x}\text{Ce}_x\text{In}$ are un minim pentru $x \geq 0,241$ [29]. În lucrarea [30] s-a studiat aliajul ternar $(\text{La}_{1-x}\text{Th}_x)_{1-c}\text{Ce}_c$. Cu variația concentrației de toriu s-a observat tranziția de la cazul magnetic la cel nemagnetic.

La presiune nulă (sau în lipsa toriului) ceriul în lantan are un moment magnetic. Când presiunea crește, nivelul $4f$ al ceriului se apropie de suprafața Fermi și, după cum rezultă din (4.14), crește valoarea integralei I a schimbului $s-d$, ceea ce duce la micșorarea lui T_c la concentrație constantă [2]. Când, cu creșterea presiunii, ε_d devine destul de mic, formula (4.14) devine inaplicabilă, iar pentru integrala schimbului $s-d$ trebuie folosită expresia

$$I = \frac{2\Gamma\varepsilon_d}{\pi N(\varepsilon_F)(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)}. \quad (4.15)$$

Dacă plecăm de la această formulă, atunci minimul lui T_c are loc când $|\varepsilon_d| = \Gamma$. Cu creșterea mai departe a presiunii (sau a concentrației de toriu) se produce tranziția la impuritatea nemagnetică. Temperatura critică a supraconductorului în acest domeniu descrește lent cu creșterea presiunii. Pentru descrierea acestor sisteme este util să avem o teorie unică. Această teorie este posibilă pe baza hamiltonianului Anderson.

În lucrarea [31] s-a folosit metoda integralei funcționale pentru studiul influenței "tranziției magnetic-nemagnetic" asupra lui T_c . Astfel s-a determinat scăderea temperaturii critice în funcție de Γ/U . În limita $\Gamma/U \ll 1$ din rezultatele obținute rezultă formula pentru T_c [2] cu precizia până la un factor numeric.

În limita opusă se obține rezultatul lui Zuckermann [22]. Shiba [32], folosind aproximația Hartree-Fock pentru termenul coulombian al hamiltonianului Anderson, a studiat proprietățile termodinamice ale supraconductorilor cu impurități ale metalelor de tranziție.

În sec.4.2 a acestui capitol se studiază temperatura critică a supraconductorilor cu concentrație mică de impurități [33]. Hamiltonianul sistemului se exprimă prin noii operatori de cvaziparticule, care sunt reprezentați ca o combinație liniară a

operatorilor electronici cu spinul sus și cu spinul jos. Numai după ce se face această transformare se aplică aproximația Hartree-Fock pentru termenul coulombian al hamiltonianului. Ca rezultat, în limita magnetică se obține o expresie care coincide exact cu rezultatul lui A.A. Abrikosov și L.P. Gorkov [2], iar în limita nemagnetică cu rezultatul din lucrarea [23].

Când raportul Γ/U nu este mic, "aproximația Born" este insuficientă și trebuie luată în considerare exact difuzia electronului pe atomii de impuritate [34, 35]. În cazul supraconductorilor aceasta duce la apariția stărilor localizate în interiorul gap-ului energetic. Trebuie luată de asemenea în considerație difuzia rezonantă care este proporțională cu Γ/U .

În sec.4.3 se calculează dependența saltului căldurii specifice de concentrația de impurități, când, alături de difuzia de schimb a electronilor pe impurități are loc și difuzia rezonantă [36].

În sec.4.4 se studiază densitatea electronică de stări a aliajelor cu stări locale nemagnetice [37]. Pe baza acestor rezultate în următoarele două secțiuni se studiază proprietățile cinetice ale aliajelor.

4.2 Temperatura critică a supraconductorului cu impurități ale metalelor de tranziție

În această secțiune, pe baza hamiltonianului Anderson și a interacției efective Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [38] se examinează influența impurităților metalelor de tranziție de mică concentrație asupra temperaturii critice a tranziției supraconductoare fără nici o ipoteză privind raportul dintre Γ și U . Pentru aceasta termenul coulombian din hamiltonianul Anderson (formula (4.4)) va fi aproximat astfel: mai întâi întregul hamiltonian se va exprima prin operatorii de cvaziparticule [39], care diagonalizează interacția de schimb $s-d$ (4.12), iar apoi termenul coulombian se aproximează prin metoda Hartree-Fock.

Pentru simplificarea calculelor considerăm că nivelul d al impurității este degenerat numai după spin. Atunci hamiltonianul sistemului se scrie sub forma (4.1) la care se adaugă interacția BCS:

$$H_{\text{BCS}} = -\frac{|g|}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ \sigma, \sigma'}} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{-\mathbf{k}, -\sigma}^+ a_{-\mathbf{k}', -\sigma'} a_{\mathbf{k}'\sigma'}. \quad (4.16)$$

Introducem noii operatori de cvaziparticule prin formulele [39]

$$\begin{aligned} \psi_1(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{C_1 - C_2}} (a_{\mathbf{k}\uparrow} + C_1 a_{\mathbf{k}\downarrow}); & \psi_1^+(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{C_1 - C_2}} (a_{\mathbf{k}\downarrow}^+ - C_2 a_{\mathbf{k}\uparrow}^+); \\ \psi_2(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{C_2 - C_1}} (a_{\mathbf{k}\uparrow} + C_2 a_{\mathbf{k}\downarrow}); & \psi_2^+(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{C_2 - C_1}} (a_{\mathbf{k}\downarrow}^+ - C_1 a_{\mathbf{k}\uparrow}^+). \end{aligned} \quad (4.17)$$

unde

$$C_{1,2} = (-S_z \pm S)(S_x + S_y)^{-1}, \quad S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2, \quad (4.18)$$

S fiind momentul magnetic al atomului de impuritate care este considerat un vector clasic [35]. Efectul Kondo nu este luat în considerație.

Introducem de asemenea operatorii de cvaziparticule pentru electronii d , φ_1 , φ_2 , φ_1^+ și φ_2^+ , care sunt legați de vechii operatori φ_\uparrow , φ_\downarrow , φ_\uparrow^+ și φ_\downarrow^+ prin aceleași relații (4.17). Hamiltonianul exprimat prin noii operatori are forma

$$\tilde{H} = \tilde{H}_0 + \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + \tilde{H}_{\text{BCS}}, \quad (4.19)$$

unde

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}, p=1,2} \xi_{\mathbf{k}} \psi_p^+(\mathbf{k}) \psi_p(\mathbf{k}) + \varepsilon_d \sum_{p=1,2} \varphi_p^+ \varphi_p; \\ \tilde{H}_1 &= V \sum_{\mathbf{k}, p=1,2} \left(\psi^+(\mathbf{k}) \varphi_p + \varphi_p^+ \psi_p(\mathbf{k}) \right); \\ \tilde{H}_2 &\approx U \left[\varphi_1^+ \varphi_1 \varphi_2^+ \varphi_2 - \frac{C_1 C_2}{(C_1 - C_2)^2} \sum_{p=1,2} \varphi_p^+ \varphi_p \varphi_p^+ \varphi_p + \right. \\ &\quad \left. + \frac{C_1 C_2}{(C_1 - C_2)^2} \sum_{p=1,2} \varphi_p^+ \varphi_p \right]; \\ \tilde{H}_{\text{BCS}} &= -\frac{|g|}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{p, p'} \psi_p^+(\mathbf{k}) \psi_{p'}^+(-\mathbf{k}) \psi_{p'}(-\mathbf{k}') \psi_p(\mathbf{k}'), \end{aligned} \quad (4.20)$$

p este noul indice de spin, care ia valorile 1 și 2 iar $V = V_{\mathbf{k}d} = V_{\mathbf{k}d}^+$. În expresia pentru \tilde{H}_2 nu au fost incluși termeni de tipul $\varphi_1^+ \varphi_1 \varphi_1^+ \varphi_2$ și $\varphi_2^+ \varphi_1 \varphi_2^+ \varphi_1$, deoarece în aproximația Hartree-Fock, care se aplică mai departe, nu dau contribuție.

În lucrarea [23] s-a arătat că repulsia coulombiană a electronilor d este cea responsabilă de scăderea temperaturii critice a supraconductorului. Într-adevăr, funcția de undă a stării unielelectronice este o combinație liniară a funcțiilor de undă a electronilor de conducție și a stării localizate. Această hibridizare duce la micșorarea atracției efective dintre electroni în prezența repulsiei coulombiene. În aproximația câmpului mediu aceasta înseamnă că media $\langle \varphi_1 \varphi_1 \rangle$ pentru electronii d nu este zero și \tilde{H}_2 este

$$\begin{aligned} \tilde{H}_2 &= U n_1 \varphi_2^+ \varphi_2 + U n_2 \varphi_1^+ \varphi_1 - \frac{2C_1 C_2 U}{(C_1 - C_2)^2} \sum_{p=1,2} n_p \varphi_p^+ \varphi_p + \\ &\quad + \frac{U C_1 C_2}{(C_1 - C_2)^2} \sum_{p=1,2} \varphi_p^+ \varphi_p - \left(\Delta_d \varphi_2^+ \varphi_1^+ + \Delta_d^+ \varphi_1 \varphi_2 \right), \end{aligned} \quad (4.21)$$

unde

$$\Delta_d = -U \langle \varphi_1 \varphi_2 \rangle; \quad \Delta_d^+ = -U \langle \varphi_2^+ \varphi_1^+ \rangle; \quad (4.22)$$

$$n_1 = \langle \varphi_1^+ \varphi_1 \rangle; \quad n_2 = \langle \varphi_2^+ \varphi_2 \rangle. \quad (4.23)$$

Prin $\langle \dots \rangle$ în ultimele două formule se înțelege media statistică pe ansamblul macrocanonic cu hamiltonianul \tilde{H} .

Temperatura critică T_c a tranziției supraconductoare se va calcula aici pentru cazul concentrației mici de impurități distribuite haotic. În acest scop se va folosi metoda din lucrarea [2]. Ca rezultat, ecuația din care se determină T_c are forma

$$\frac{1}{|g|} = T_c \sum_{\omega} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[S_{\omega}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - n_c \frac{UT_c \sum_{\omega'} S_{\omega}(\mathbf{i}\mathbf{k}') S_{\omega'}(\mathbf{k}\mathbf{i})}{1 + UT_c \sum_{\omega, j} S_{\omega}(\mathbf{i}, \mathbf{j})} \right], \quad (4.24)$$

unde S_{ω} înseamnă media produsului a două funcții Green pe distribuția haotică a atomilor de impuritate, de exemplu

$$S_{\omega}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \overline{\tilde{G}_{\omega}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \tilde{G}_{-\omega}(-\mathbf{k}, -\mathbf{k}')},$$

$\omega = (2n+1)\pi k_B T_c$. Indicii j și i se referă la impurități, situate respectiv în nodurile \mathbf{R}_j și \mathbf{R}_i ; n_c este concentrația atomilor de impuritate.

După calculul sumelor și medierea pe impurități obținem [33]

$$\begin{aligned} \frac{1}{n_c} \ln \frac{T_c}{T_{c0}} &= \frac{\Gamma}{N(\varepsilon_F)} \sum_{p=1,2} \frac{A_p}{E_p} + \frac{\Gamma^2}{N(\varepsilon_F)} \frac{(E_2 - E_1)}{E_1 + E_2} \times \\ &\times \left(\frac{B_1 - L_1}{E_1} - \frac{B_2 - L_2}{E_2} \right) - \frac{U}{1 + UD} \frac{\Gamma^2}{N(\varepsilon_F)} \frac{4(A_1 + A_2)^2}{(E_1 + E_2)^2}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Aici $\Gamma = \pi N(\varepsilon_F) |V|^2$; $N(\varepsilon_F)$ este densitatea de stări electronice din banda de conducție la suprafața Fermi; T_{c0} este temperatura critică a supraconductorului pur:

$$A_p = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{\Gamma + iE_p} \left[\psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma + iE_p}{2\pi T_{c0} k_B} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] \right\}; \quad (4.26)$$

$$B_p = \frac{E_p}{8T_{c0} k_B (\Gamma^2 + E_p^2)}; \quad (4.27)$$

$$L_p = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left\{ \frac{1}{(\Gamma + iE_p)^2} \left[\psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma + iE_p}{2\pi T_{c0} k_B} \right) - \psi \left(\frac{1}{2} \right) \right] \right\}; \quad (4.28)$$

$$D = \frac{1}{\pi(E_1 + E_2)} \text{Im} \left\{ \sum_{p=1,2} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma + iE_p}{2\pi T_{c0} k_B} \right) \right\}; \quad (4.29)$$

$$E_1 = \varepsilon_d - \frac{U}{6} + n_2 U + \frac{U n_1}{3}; \quad E_2 = \varepsilon_d - \frac{U}{6} + n_1 U + \frac{U n_2}{3}. \quad (4.30)$$

Mai departe să examinăm cazul în care $\Gamma/(\pi T_{c0} k_B) \gg 1$, când avem

$$A_p \approx -\frac{E_p}{2\pi^2(\Gamma^2 + E_p^2)} \left(\ln \frac{2\gamma}{\pi} \frac{\sqrt{\Gamma^2 + E_p^2}}{T_{c0} k_B} - \frac{\Gamma}{E_p} \arctg \frac{E_p}{\Gamma} \right); \quad (4.31)$$

$$L_p \approx -\frac{2\Gamma E_p}{\pi(\Gamma^2 + E_p^2)^2} \ln \frac{2\gamma}{\pi} \frac{\sqrt{\Gamma^2 + E_p^2}}{T_{c0} k_B} + \frac{(\Gamma^2 - E_p^2) \arctg \frac{E_p}{\Gamma}}{2\pi(\Gamma^2 + E_p^2)^2}; \quad (4.32)$$

$$D \approx \frac{1}{\pi(E_p + E_{-p})} \left(\arctg \frac{E_p}{\Gamma} + \arctg \frac{E_{-p}}{\Gamma} \right). \quad (4.33)$$

Dacă $\Gamma \gg U$, adică impuritatea este nemagnetică, atunci $n_1 = n_2 = 1/2$ și $E_1 = E_2 = \varepsilon_d + U/2$; al doilea termen din formula (4.25) este egal cu zero, primul descriind micșorarea temperaturii critice datorită difuziei rezonante a electronilor pe atomii de impuritate [22], al treilea termen descrie micșorarea temperaturii critice datorită renormării interacției coulombiene [23].

În cazul limită opus, când $\Gamma \ll U$, cea mai mare contribuție o dă al doilea termen din formula (4.25):

$$\frac{1}{n_c} \ln \frac{T_c}{T_{c0}} = -\frac{N(\varepsilon_F)\pi^2|V|^4}{8k_B T_{c0}} \left(\frac{1}{E_1} - \frac{1}{E_2} \right)^2. \quad (4.34)$$

Pentru a stabili legătura dintre constanta efectivă a interacției de schimb din lucrarea [2] și $V^2(1/E_1 - 1/E_2)$ din formula (4.34), să examinăm diferența dintre amplitudinea de difuzie a electronului cu spinii $p = 1$ și $p = 2$ pe atomul de impuritate folosind doi hamiltonieni, \tilde{H} și interacția efectivă de schimb diagonalizată [2], scrisă sub forma [39]

$$\frac{SI}{2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(\psi_1^+(\mathbf{k})\psi_1(\mathbf{k}') - \psi_2^+(\mathbf{k})\psi_2(\mathbf{k}') \right). \quad (4.35)$$

Rezultatul este

$$I\sqrt{S(S+1)} = |V|^2 \left(\frac{1}{E_1} - \frac{1}{E_2} \right). \quad (4.36)$$

Substituind această expresie în formula (4.34), obținem rezultatul din lucrarea [2] pentru concentrație mică de impurități.

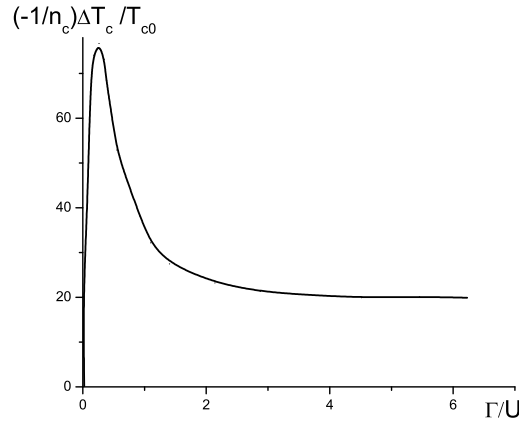


Figura 4.1: Dependența temperaturii critice de raportul Γ/U .

În acest fel, am obținut expresia pentru temperatura critică a supraconductorului pentru Γ și U arbitrari, care în cazurile limită ($\Gamma \gg U$ și $\Gamma \ll U$) trece în

formulele cunoscute [2, 22, 23]. Dacă nu trecem la noii operatori și \tilde{H}_2 se tratează în aproximația Hartree-Fock, atunci în expresia pentru T_c , care coincide ca formă cu formula (4.25), în locul lui E_1 și E_2 intră energiile E_\uparrow și E_\downarrow , legate de constanta I și care sunt relații cunoscute din lucrarea [6]. Atunci pentru $\Gamma \ll U$ formula din lucrarea [2] se obține cu precizie până la un factor numeric. Aceasta corespunde luării în considerație numai a componentei z a spinului atomului de impuritate. Introducerea operatorilor de cvaziparticule, care diagonalizează interacția efectivă de schimb a electronului cu atomul de impuritate, duce la faptul că în cazul dat se consideră toate componentele spinului atomului de impuritate.

Pentru a compara expresiile obținute de noi pentru T_c cu datele experimentale pentru aliajul La-Ce [28], luăm $\Gamma = 0,02$ eV, $N(\varepsilon_F) = 2,4$ stări/(eV.atom), $T_{c0} = 9,45$ K, $E_1 = U/3$ și $E_2 = U/3$. Rezultatul calculului numeric privind deplasarea temperaturii critice ca funcție de raportul Γ/U este prezentat în fig.4.1. Pentru $\Gamma/U \ll 1$ se observă scăderea temperaturii critice în principal datorită difuziei de schimb a electronilor pe atomii de impuritate. Pentru $\Gamma/U \gg 1$ scăderea lui T_c se produce ca urmare a difuziei rezonante a electronilor pe atomii de impuritate, cât și datorită renormării interacției coulombiene a electronilor d . Când $\Gamma/U \lesssim 1$, se observă trecerea de la cazul magnetic la cel nemagnetic. Rezultatul obținut de noi descrie calitativ datele experimentale din lucrarea [28].

4.3 Saltul căldurii specifice a aliajelor supraconductoare descrise de modelul Anderson

În elementele pământurilor rare momentul magnetic este condiționat de electronii $4f$, care se află adânc în interiorul atomului. Din acest motiv, introducerea într-un metal simplu a unor impurități din grupa pământurilor rare, interacționează slab cu electronii de conducție ai matricii de bază. Influența unor astfel de impurități asupra proprietăților supraconductoare este bine descrisă de teoria lui A.A. Abrikosov și L.P. Gorkov [2], care ia în considerație difuzia electronilor pe impurități în "aproximația Born".

Prezența spinului la atomii elementelor de tranziție este legată în principal de electronii $3d$ localizați, care interacționează puternic cu electronii de conducție ai metalului. Pentru descrierea unor astfel de impurități teoria din lucrarea [2] a fost generalizată de A.I. Rusinov [35] și Shiba [34]. Folosind hamiltonianul (4.12) ei au arătat că tratarea exactă a difuziei electronilor pe o impuritate în ipoteza că spinul impurității este un vector clasic, duce la apariția unei stări localizate în interiorul gap-ului energetic. Același tip de stare apare și în aproximația Hartree-Fock a hamiltonianului Anderson în limita magnetică [32]. Poziția nivelului local este determinată de parametrul

$$\gamma = \frac{\Gamma^2 + \varepsilon_d^2 - U^2}{\left[(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2 - U^2)^2 + 4\Gamma^2 U^2\right]^{1/2}}. \quad (4.37)$$

Dacă $U \gg \Gamma$, atunci $\gamma^2 = 1$ și nivelul local coincide cu parametrul de ordine al supraconductorului. În acest caz impuritățile magnetice sunt descrise de teoria din

lucrarea [2]. Abaterea de la această teorie este caracterizată de parametrul $1 - \gamma^2$, care este proporțional cu Γ^2/U^2 .

Dependența saltului căldurii specifice ΔC de concentrația impurităților magnetice a fost studiată în lucrarea [32] cu luarea în considerare a sărilor locale din interiorul gap-ului. S-a stabilit că, prin luarea în considerare a acestora, saltul căldurii specifice se micșorează și dependența acestuia de temperatura critică T_c este mai apropiată de datele experimentale pentru aliajele Zn-Mn, decât cea în cazul $\gamma^2 = 1$. În aceste calcule în lucrarea [32] nu s-a luat în considerare difuzia rezonantă pe impurități, care, așa cum se va vedea mai departe, în limita magnetică pentru $U \gg \Gamma$ este de ordinul Γ^2/U^2 , ca și $1 - \gamma^2$.

În această secțiune, pe baza modelului Anderson se introduce expresia pentru parametrul de ordine și saltul căldurii specifice a aliajelor supraconductoare magnetice cu luarea în considerare a stărilor localizate din interiorul gap-ului supraconductor și difuzia rezonantă a electronilor pe impurități [36]. Se examinează cazul valorilor mici ale lui Δ (când temperatura este apropiată de T_c sau concentrația de impurități este apropiată de cea critică). În cazul unei concentrații finite de impurități drept operator de masă auxiliar Σ_{aux} putem lua expresia

$$\Sigma_{\text{aux}} = n_c t(\omega).$$

Matricea t se determină din problema prezenței unei singure impurități și se exprimă prin funcția \hat{G}_0 a supraconductorului pur și a interacției electronului cu impuritățile. Mai exact, formula pentru $\hat{G}(\omega)$ se poate obține folosind în locul operatorului de masă auxiliar Σ_{au} operatorul de masă

$$\Sigma_k = n_c \tilde{t}(\omega), \quad (4.38)$$

unde $\tilde{t}(\omega)$ se deosebește de $t(\omega)$ prin faptul că în locul funcției Green \hat{G}_0 se ia funcția Green exactă $\hat{G}_{kk}(\omega)$. Funcția Green în cazul unei concentrații finite poate fi reprezentată sub forma

$$\hat{G}_{kk}(\omega) = \left[(\hat{G}_0)^{-1}(\omega) - \Sigma_k(\omega) \right]^{-1} \quad (4.39)$$

Introducând notația $u = \tilde{\omega}/\tilde{\Delta}$, pentru frecvențele renormate $\tilde{\omega}$ și parametrul de ordine $\tilde{\Delta}$, care intră în funcția Green, găsim

$$\begin{aligned} \tilde{\omega} = \omega + \frac{n_c \Gamma}{2\pi N(\varepsilon_F)} \left\{ \left[\omega + \frac{\Gamma u}{\sqrt{1-u^2}} - \tilde{U} \right] \left[- \left(\omega + \frac{\Gamma u}{\sqrt{1-u^2}} - \tilde{U} \right)^2 + E_d^2 + \left(\Delta_d + \frac{\Gamma}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 \right]^{-1} + \right. \\ \left. + \left[\omega + \frac{\Gamma u}{\sqrt{1-u^2}} + \tilde{U} \right] \left[- \left(\omega + \frac{\Gamma u}{\sqrt{1-u^2}} + \tilde{U} \right)^2 + E_d^2 + \left(\Delta_d + \frac{\Gamma}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 \right]^{-1} \right\}; \end{aligned} \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Delta} = \Delta - \frac{n_c \Gamma}{2\pi N(\varepsilon_F)} & \left\{ - \left(\Delta_d + \frac{\Gamma}{\sqrt{1-u^2}} \right) \left[- \left(\omega + \frac{\Gamma u}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 + \tilde{U}^2 + E_d^2 + \left(\Delta_d + \frac{\Gamma}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 \right]^{-1} - \right. \\
& - \left(\Delta_d + \frac{\Gamma}{\sqrt{1-u^2}} \right) \left[- \left(-\omega - \frac{\Gamma u}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 + \tilde{U}^2 + E_d^2 + \left(\Delta_d + \frac{\Gamma}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 \right]^{-1} \left. \right\}, \quad (4.41)
\end{aligned}$$

unde Δ_d este parametrul care descrie împerecherea electronilor d , indusă de condensarea electronilor de conducție. Difuzia pe impurități se consideră izotropă:

$$E_d = \varepsilon_d^0 + \frac{U}{2}(n_{d\uparrow} + n_{d\downarrow}); \quad \tilde{U} = -\frac{U}{2}(n_{d\uparrow} - n_{d\downarrow}).$$

Observăm că ecuațiile (4.40) și (4.41) sunt aplicabile și în cazul magnetic ($\Gamma \ll U$) precum și în limita nemagnetică ($\Gamma \gg U$).

Ecuațiile corespunzătoare pentru $\tilde{\omega}$ și $\tilde{\Delta}$ la temperaturi diferite de zero, se pot obține înlocuind ω , $\tilde{\omega}$, $\tilde{\Delta}$ și u cu $i\omega_n = i\pi T(2n+1)$, $i\tilde{\omega}$, $\tilde{\Delta}$ și iu_n respectiv. Să găsim expresia pentru Δ^2 la temperaturi apropiate de T_c . Pentru aceasta se folosește ecuația

$$1 = \frac{\pi}{\beta} |g| \sum_n \frac{1}{\sqrt{\Delta^2 + v_n^2}}, \quad (4.42)$$

unde $v_n = u_n \Delta$. Presupunând că mărimile Γ , U sunt mult mai mari decât mărimile caracteristice ale supraconductorului, cu precizie până la termeni de ordinul lui Δ^2 pentru v_n obținem

$$v_n = v_n^0 - \frac{1}{4\tau_s(v_n^0)^2} (2\gamma^2 - 1) \Delta^2 \left(1 - dc + \frac{d}{2\tau_s \Gamma} \right)^{-1}, \quad (4.43)$$

unde

$$v_n^0 = \frac{\omega_n \left(1 + \frac{1}{2\tau_{\text{rez}}(\omega) \Gamma} \right) + \frac{1}{2\tau_s(\omega)}}{1 - \frac{d}{2\tau_{\text{rez}}(\omega) \Gamma} + \frac{d}{2\tau_s(\omega) \Gamma}}; \quad (4.44)$$

$$\frac{1}{2\tau_s(\omega)} = \frac{2n_c \Gamma^2 \tilde{U}^2}{\pi N(\varepsilon_F) \left[(\varepsilon_d^2 + \Gamma^2 + \omega_n^2 - \tilde{U}^2 + 2\omega_n \Gamma)^2 + 4\tilde{U}^2 (\Gamma + \omega_n)^2 \right]} \quad (4.45)$$

$$\frac{1}{2\tau_{\text{rez}}(\omega)} = \frac{n_c \Gamma^2 (\omega_n^2 + \Gamma^2 + \varepsilon_d^2 + \tilde{U}^2 + 2\omega_n \Gamma)}{\pi N(\varepsilon_F) \left[(\omega_n^2 + \Gamma^2 + \varepsilon_d^2 + \tilde{U}^2 + 2\omega_n \Gamma)^2 - 4\varepsilon_d^2 \tilde{U}^2 \right]}; \quad (4.46)$$

$$c = \frac{1}{2\tau_{\text{rez}}(\omega) \Gamma}. \quad (4.47)$$

Mărima d , care caracterizează diminuarea stării supraconductoare ca urmare a repulsiei coulombiene a electronilor d , a fost determinată în lucrarea [40]:

$$d = \frac{N_d(0)U_{\text{ef}}}{|g|} \left(1 - \frac{\tau_{\text{rez}}}{\tau_s}\right). \quad (4.48)$$

Aici $N_d(0)$ este densitatea de stări localizate, iar repulsia coulombiană efectivă U_{ef} are forma [41]

$$U_{\text{ef}} = \frac{U}{1 + \frac{U}{\pi\varepsilon_d} \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon_d}{\Gamma}},$$

U fiind interacția coulombiană reziduală a electronilor localizați cu spini opuși. Substituind (4.43) în (4.42), găsim

$$\begin{aligned} \Delta_g^2 \left[\frac{2\gamma^2 - 1}{24\tau_s(1+c)} \left(\frac{1}{2\pi T_c}\right)^3 \frac{d^3\psi(y)}{dy^3} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{2\pi T_c}\right)^2 \frac{d^2\psi(y)}{dy^2} \right] = \\ = \left[\frac{1}{T_c} + \frac{d}{dT_c} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau_s(1+c)T_c} \right) \right] (T - T_c), \end{aligned} \quad (4.49)$$

unde

$$y = \frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi\tau_s(1+c)T_c}; \quad \Delta_g^2 = \Delta^2 f^2; \quad f = \frac{1 - \frac{d}{2\tau_{\text{rez}}\Gamma} + \frac{d}{2\tau_s\Gamma}}{1+c}.$$

Expresia (4.49) conține atât limita magnetică cât și cea nemagnetică. Ultima se obține dacă punem $1/\tau_s = 0$. Atunci Δ_g coincide cu rezultatul din lucrarea [24].

Pentru o concentrație de impurități apropiată de cea critică, Δ_g se reduce la expresia

$$\Delta_g^2 = \frac{4\pi^2 T_c^2}{5 - 4\gamma^2} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right). \quad (4.50)$$

Pentru $\gamma = 1$ formula (4.50) trece în formula corespunzătoare din lucrarea [2].

Pentru calculul saltului căldurii specifice vom folosi relațiile:

$$\Delta C = C_s - C_n = \frac{T_c}{4\pi} \left(\frac{dH_c}{dT}\right)^2; \quad \frac{H_c^2}{8\pi} = \Phi_n - \Phi_s; \quad (4.51)$$

$$\Phi_{s,n} = \Phi_0 + 2T \int_0^\lambda \frac{d\lambda'}{\lambda'} \sum_{\mathbf{k}, \omega_n} \Sigma_{s,n}(\mathbf{k}, \omega_n) G_s(\mathbf{k}, \omega_n). \quad (4.52)$$

Atunci, cu luarea în considerație a lui (4.49), avem

$$\Delta C = 16\pi^2 T_c N(\varepsilon_F) \frac{\left[1 + T_c \frac{d}{dT_c} \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{4\pi T_c \tau_s (1+c)}\right)\right]^2}{\psi''(y) + \frac{2\gamma^2 - 1}{6\tau_s(1+c)} \frac{\psi'''(y)}{2\pi T_c}}. \quad (4.53)$$

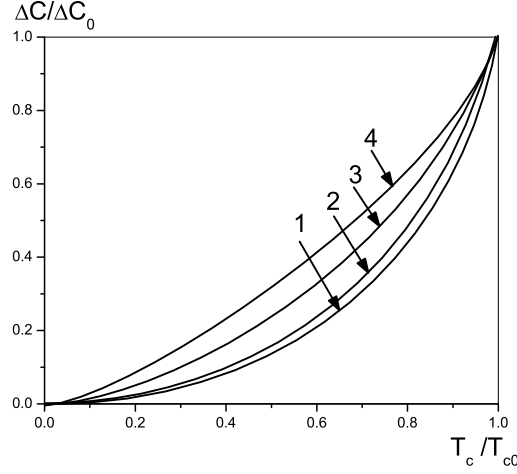


Figura 4.2: Dependența raportului $\Delta C/\Delta C_0$ de T_c/T_{c0} pentru $g = 0,18$ și diferite valori ale parametrilor γ și q : **1** - $\gamma = 0$, $q = 0$; **2** - $\gamma = 0$, $q = 0,025$; **3** - $\gamma = 0$, $q = 0,125$; **4** - $\gamma = 1$, $q = 0$.

Pentru o concentrație a impurităților apropiată de cea critică, găsim

$$\Delta C = \frac{16\pi^4 N(\varepsilon_F) T_c^3 \tau_s^2 (1+c)^2}{3(5-4\gamma^2)}. \quad (4.54)$$

Pe baza formulei (4.53) s-a calculat raportul $\Delta C/\Delta C_0$ (ΔC_0 fiind saltul căldurii specifice în lipsa impurităților) pentru aliajele Zn-Mn. Pentru aceasta s-a folosit formula 4.12 din lucrarea [40], care determină dependența lui T_c atât de timpul de relaxare al difuziei rezonante τ_{rez} , cât și de cel al difuziei de schimb τ_s . Rezultatele calculului numeric sunt prezentate în fig.4.2. Pe parcursul calculelor s-a luat $|g| = 0,18$ (pentru zinc) și s-au dat diferite valori ale celor doi parametri adimensionali γ și $q = \frac{\tau_s T_{c0}}{\tau_{rez} \Gamma}$. Din grafice se vede că luarea în considerare a difuziei rezonante duce la creșterea saltului căldurii specifice în comparație cu valorile obținute în lucrarea [32] pentru $q = 0$. Cu creșterea valorilor parametrului q valoarea raportului celor două salturi se apropie de curba corespunzătoare valorilor $q = 0$ și $\gamma = 1$. Acest lucru este legat de faptul că mărimea $\Delta C/\Delta C_0$ depinde de difuzia rezonantă numai prin raportul T_c/T_{c0} . Pentru T_c/T_{c0} fixat, considerarea difuziei rezonante duce la micșorarea lui $1/[\tau_s(1+c)]$ și, după cum rezultă din formula (4.53), la creșterea lui ΔC .

4.4 Densitatea electronică de stări a aliajelor supraconductoare cu impurități nemagnetice ale metalelor de tranziție

În această secțiune [37] se studiază influența stărilor locale nemagnetice asupra densității de stări a electronilor de conducție din aliajele supraconductoare. Se presupune că aliajul nemagnetic conține impurități ale metalelor de tranziție dizolvate în metale obișnuite (de tipul aluminiului sau zincului). Metalul de bază se consideră ca un supraconductor omogen și izotrop. Proprietățile impurităților sunt descrise de hamiltonianul Anderson [4]. Interacția electronilor de conducție cu stările localizate are un caracter rezonant cu o lărgimea nivelului de impuritate egală cu Γ . În lucrarea [24], în care se studiază influența stărilor localizate nemagnetice asupra proprietăților termodinamice ale aliajelor, se presupune că lărgimea a nivelului Γ este de ordinul a 1 eV. Aceasta depășește cu mult energiile caracteristice ale supraconductorului Δ , ω_g care sunt de ordinul a 10^{-3} eV (Δ este parametrul de ordine iar ω_g este gap-ul supraconductor). Cu această ipoteză mărimile de ordinul lui Δ/Γ și ω_g/Γ nu se iau în considerație în lucrarea [24]. Densitatea electronică de stări care se obține în această ipoteză pentru frecvențe, nu prea apropiate de ω_g , este asemănătoare cu densitatea de stări electronice a supraconductorului pur.

După cum se știe [2, 42], în apropierea gap-ului energetic, chiar o mică cantitate de impurități influențează esențial densitatea de stări electronice, de aceea scopul acestei discuții este de a obține o expresie pentru densitatea de stări electronice pe întreg intervalul de frecvențe $\omega > \omega_g$ cu luarea în considerație a termenilor de ordinul $(\Delta/\Gamma)^{2/3}$. Conform lucrării [30] pentru aliajul La-Ce lărgimea nivelului $\Gamma \approx 0,02$ eV, și deși mărimile Δ/Γ și ω_g/Γ rămân mult mai mici decât unitatea, contribuția lor duce la o creștere cu două ordine de mărime față de evaluările lucrării [24].

Studiul densității de stări a electronilor de conducție $n(\omega)$ se face pe baza metodei dezvoltate în lucrarea [42]. Folosim definiția

$$n(\omega) = \frac{N(\omega)}{N(\varepsilon_F)} = \text{Im} \frac{u(\omega)}{\sqrt{1 - u^2(\omega)}}, \quad (4.55)$$

unde funcția $u(\omega) = \tilde{\omega}/\tilde{\Delta}$ satisface ecuația

$$u = \bar{\omega} + \frac{c(\bar{\omega} + du)}{1 - \frac{\alpha(u\bar{\omega} + d)}{\sqrt{1 - u^2}} + \Delta^2 \frac{(d^2 - \bar{\omega}^2)}{\varepsilon_d^2 + \Gamma^2}}, \quad (4.56)$$

$$\bar{\omega} = \frac{\omega}{\Delta}; \quad d = -\frac{\Delta_d}{\Delta}; \quad \alpha = \frac{2\Gamma\Delta}{\varepsilon_d^2 + \Gamma^2}; \quad c = \frac{n_c\Gamma}{\pi N(\varepsilon_F)(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)}. \quad (4.57)$$

Relația (4.56) se poate obține din ecuațiile (4.40) și (4.41), dacă presupunem că $n_{d\uparrow} = n_{d\downarrow}$, $\bar{U} = 0$ și $\varepsilon_d = \varepsilon_d^0 + U/2$. Studiul acesteia trebuie făcut separat în vecinătatea lui ω_g și separat departe de această valoare.

Conform cu lucrarea [2] mărimea ω_g se determină ca cea mai mare frecvență pentru care densitatea de stări este încă zero. În punctul $\omega = \omega_g$ apare o parte imaginară diferită de zero a mărimii $u(\omega)$. Mărimea ω_g se determinată selfconsistent. Totuși noi vom determina această mărime în același timp cu funcția densitate de stări $n(\omega)$. Inițial am stabilit că ω_g este apropiată de valoarea $\Delta(1 - cd)/(1 + c)$, iar mărimea u este egală cu unitatea și facem dezvoltarea după parametrul mic α :

$$\tilde{\omega} = \frac{1 - cd}{1 + c} \left[1 - \frac{3}{2} \alpha^{2/3} x \lambda^{2/3} + \alpha^{4/3} \lambda_1(x) + \dots \right], \quad (4.58)$$

$$\begin{aligned} |x|(\alpha\lambda)^{2/3} &\ll 1; \\ u(\omega) &= 1 - \alpha^{2/3} v - \alpha^{4/3} W + \dots \end{aligned} \quad (4.59)$$

Substituind (4.58) și (4.59) în (4.56), obținem

$$\sqrt{2v} = t \left[\frac{c(1+d)^2}{(1+c)(1-cd)} \right]^{1/3}, \quad (4.60)$$

unde mărimea t satisface ecuația

$$t^3 - 3xt + 2 = 0. \quad (4.61)$$

Pentru aceasta λ se alege sub forma

$$\lambda = \frac{c(1+d)^2}{(1+c)^2(1-cd)}. \quad (4.62)$$

Pentru $x \ll 1$ ecuația (4.61) are o rădăcină reală și două complexe, în timp ce pentru $x > 1$ are numai rădăcini reale. În acest fel, densități de stări nenule avem pentru frecvențele adimensionale $x < 1$. Punctului $x = 1$, $t = 1$ îi corespunde ecuația

$$\omega_g = \Delta \frac{1 - cd}{1 + c} \left[1 - \frac{3}{2} \alpha^{2/3} \lambda^{2/3} + \alpha^{4/3} \lambda_1(1) + \dots \right]. \quad (4.63)$$

Mărimea W se determină din ecuația

$$W \left(\frac{1}{t^3} - 1 \right) = \lambda_1(x) + \frac{c^{1/3}(1+d)^{5/3}}{2t^2(1+c)^{5/3}(1-cd)^{1/3}} \left[2 - \frac{6xtc}{1+c} - \frac{3}{4} \frac{t^3 c(1+d)}{(1+c)(1-cd)} \right]. \quad (4.64)$$

Funcția care a rămas până acum nedeterminată $\lambda_1(x)$ o reprezentăm sub forma $\lambda_1(x) = \lambda_1 \varphi(x)$; $\varphi(1) = 1$. Pentru $x = t = 1$ din anularea membrului stâng al formulei (4.64) rezultă de asemenea egalitatea cu zero a membrului drept al egalității, ceea ce duce la determinarea lui λ_1 :

$$\lambda_1 = - \frac{c^{1/3}(1+d)^{5/3}}{2(1+c)^{5/3}(1-cd)^{1/3}} \left[2 - \frac{6c}{1+c} - \frac{3}{4} \frac{c(1+d)}{(1+c)(1-cd)} \right]. \quad (4.65)$$

Funcția $\varphi(x)$ poate fi aleasă din considerații de comoditate. Pentru $\varphi(x) = x^2$ obținem

$$W = \frac{c^{1/3}(1+d)^{5/3}t}{2(1+c)^{5/3}(1-cd)^{1/3}} \left[\frac{2}{3}(xt+1) - \frac{2cxt}{1+c} - \frac{c(1+d)(xt-2)}{4(1+c)(1-cd)} \right]. \quad (4.66)$$

Substituind expresiile (4.62) și (4.65) în (4.63), găsim

$$\omega_g = \Delta \frac{1-cd}{1+c} \left\{ 1 - \frac{3}{2} \alpha^{2/3} \left[\frac{c(1+d)^2}{(1+c)^2(1-cd)} \right]^{2/3} - \frac{\alpha^{4/3} c^{1/3} (1+d)^{5/3}}{2(1+c)^{5/3} (1-cd)^{1/3}} \left[2 - \frac{6c}{1+c} - \frac{3}{4} \frac{c(1+d)}{(1+c)(1-cd)} \right] + \dots \right\}. \quad (4.67)$$

Substituind (4.59) în (4.55) și folosind definițiile (4.60) și (4.66), avem

$$n(\omega) = \frac{n_0(x)}{\sigma_p^{1/3}} + \sigma_p^{1/3} n_1(x) + O(\sigma), \quad \sigma_p = \alpha\lambda, \quad (4.68)$$

unde $n_0(x)$ este funcția, definită în lucrarea [42]:

$$n_0(x) = \text{Im} \frac{1}{t} = \frac{\sqrt{3}}{4} (v^2(x) - u^2(x)). \quad (4.69)$$

Pentru t se folosește următoarea soluție a ecuației (4.61) pentru $x < 1$:

$$\begin{aligned} t &= -\frac{u+v}{2} - \frac{i\sqrt{3}}{2}(u-v); \\ u &= \left(-1 + \sqrt{1-x^3}\right)^{1/3}; \\ v &= \left(-1 - \sqrt{1-x^3}\right)^{1/3}. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Funcția $n_1(x)$ are forma

$$n_1(x) = -\text{Im} \left(\frac{3t}{8} + \frac{W}{t^3 \lambda^{4/3}} \right). \quad (4.71)$$

Pe baza lui (4.66) și (4.71) obținem

$$\begin{aligned} n_1(x) &= \frac{3\sqrt{3}}{16}(u-v) + \frac{n_0}{8}(x-4m_0) - \\ &\quad - \frac{(1+c)(1-cd)n_0}{c(1+d)} \left(\frac{x}{3} + \frac{2m_0}{3} - \frac{xc}{1+c} \right); \\ m_0 &= \text{Re} \left(\frac{1}{t} \right). \end{aligned} \quad (4.72)$$

Conform cu (4.68) funcția $n(\omega)$ în vecinătatea lui ω_g are un maxim ascuțit. Frecvența adimensională corespunzătoare acestui maxim este

$$\begin{aligned} x_m &\simeq x_0 - \frac{x_0^2}{2^{2/3}}; \\ x_0 &= -\left(\frac{\sigma_p}{2}\right)^{2/3} \left(1 + \frac{2}{3} \frac{(1-cd)(2-c)}{c(1+d)} \right). \end{aligned} \quad (4.73)$$

Frecvența la maxim ω_m cu luarea în considerare a dimensiunilor este

$$\omega_m \simeq \Delta \frac{1 - cd}{1 + c} \left(1 - \frac{3}{2} \sigma_p^{2/3} x_0 \right). \quad (4.74)$$

Mărimea x_0 determină direcția deplasării maximului frecvenței cu creșterea mărimii σ_p . Densitatea de stări la maxim este

$$n(\omega_m) = \frac{\sqrt{3}}{2^{4/3} \sigma_p^{1/3}} \left[1 + \frac{\sqrt{3} 2^{1/3}}{8} \sigma_p^{2/3} \left(1 - \frac{2}{3} 1 - \frac{2}{3} \frac{(1+c)(1-cd)}{c(1+d)} \right) + \dots \right]. \quad (4.75)$$

În apropierea frecvenței, egală cu ω_g , avem ($x \rightarrow 1$)

$$\begin{aligned} n(\omega) &\simeq \frac{\sqrt{1-x}}{\sigma_p^{1/3}} \left[1 - \frac{5}{18} (1-x) - \frac{\sigma^{2/3}(1-cd)}{c(1+d)} \right] = \\ &= \frac{1}{\sigma^{2/3}} \sqrt{\frac{2(\omega - \omega_g)}{3\omega_0}} \left\{ 1 - \frac{5}{27} \frac{(\omega - \omega_g)}{\sigma^{2/3}\omega_0} - \sigma_p^{2/3} \left(\frac{1-cd}{c(1+d)} - \frac{2}{3} \lambda_1 \lambda^{-4/3} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (4.76)$$

unde

$$\Delta_g = \Delta \frac{1 - cd}{1 + c}. \quad (4.77)$$

în acest fel, pentru frecvențe, suficient de apropiate de ω_g , când este satisfăcută inegalitatea

$$\frac{\omega - \omega_g}{\Delta_g} \ll \frac{27}{5} \sigma_p^{2/3}, \quad (4.78)$$

pentru densitatea de stări putem folosi aproximația

$$n(\omega) \simeq \frac{1}{\sigma_p^{2/3}} \sqrt{\frac{2}{3} \frac{\omega - \omega_g}{\Delta}}. \quad (4.79)$$

Pentru valori negative dar destul de mari în valoare absolută a frecvenței adimensionale x ($x < 0$)

$$\frac{1}{\sigma_p^{2/3}} \gg |x| \gg 1 \quad (4.80)$$

găsim

$$\begin{aligned} n(\omega) &\simeq \frac{1}{\sigma_p^{1/3} \sqrt{-3x}} \left\{ 1 - \frac{5}{54(-x)^3} - x \sigma_p^{2/3} \left[1 + \frac{(1+c(1-cd))}{3c(1+d)} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{1}{54(-x)^3} \left(1 - \frac{17(1+c)(1-cd)}{c(1+d)} \right) \right] + \dots \right\}. \end{aligned} \quad (4.81)$$

Departate de valoarea lui ω_g , pentru calculul lui $n(\omega)$ putem folosi metoda iterațiilor după puertile lui α . În acest interval de frecvențe soluția ecuației (4.56) are forma

$$u = u_0 + \alpha u_1 + \alpha^2 u_2, \quad (4.82)$$

unde pentru $u_0 \gg 1$

$$u_0 = \frac{\omega}{\Delta_g}; \quad u_1 = \frac{ic(\bar{\omega} + u_0d)(\bar{\omega}u_0 + d)}{(1 - cd)\sqrt{u_0^2 - 1}};$$

$$u_2 = \frac{c(\bar{\omega} + u_0d)}{1 - cd} \left\{ \frac{c(u_0\bar{\omega} + d) [\bar{\omega}^2 + d^2 + 3du_0\bar{\omega} - u_0^3\bar{\omega}d]}{(1 - cd)(u_0^2 - 1)^2} - \frac{(u_0\bar{\omega} + d)^2}{u_0^2 - 1} - \frac{\Delta(d^2 - \bar{\omega}^2)}{2\Gamma\alpha} + \dots \right\} \quad (4.83)$$

și, prin urmare, densitatea de stări în acest domeniu de frecvențe este

$$n(\omega) = \frac{1}{\sqrt{u_0^2 - 1}} \left[u_0 - \frac{\alpha^2}{u_0^2 - 1} \left(u_2 - \frac{3}{2} \frac{u_0 u_1^2}{u_0^2 - 1} \right) \dots \right]. \quad (4.84)$$

Această expresie este adevărată cu condiția ca

$$(u_0^2 - 1) \gg \alpha^{2/3}. \quad (4.85)$$

Să găsim acum condiția de continuitate a expresiilor pentru $n(\omega)$ obținute pentru cele două intervale de frecvențe. În acest scop înlocuim în expresia (4.83) pentru u_0 frecvența ω sub forma (4.58). Obținem

$$u_0 = 1 - \frac{3}{2} \alpha^{2/3} \lambda^{2/3} x + \alpha^{4/3} \lambda_1 x^2 + \dots \quad (4.86)$$

Substituind această expresie în (4.85), ne convingem de faptul că ea este îndeplinită pentru valori negative și destul de mari în valoare absolută a lui x ($x < 0$, $|x| \gg 1$). Substituind (4.86) (cu cele spuse despre mărimea x) în (4.84), găsim cu precizia expresiei (4.81) că se poate realiza această continuitate a celor două soluții. Frecvența adimensională care realizează acest lucru poate fi aleasă sub forma

$$x_c \simeq -\frac{x_1}{\sigma_p^{2/3}}; \quad x_1 \sim 1; \quad \omega_c = \omega(x_c) \approx \Delta_g \left(1 + \frac{3}{2} \sigma_p^{2/3} x \right). \quad (4.87)$$

În legătură cu faptul că pentru frecvențe mari ($\omega/\Gamma > 1$) dezvoltarea (4.82) își pierde sensul, în aceste domenii de frecvențe calculele pot fi făcute pe baza dezvoltării după puterile lui $1/u$:

$$u = \bar{u}_0 + \bar{u}_1 + \dots; \quad \frac{1}{\sqrt{u^2 - 1}} = \frac{1}{u} \left(1 + \frac{1}{2u^2} + \frac{3}{8u^4} + \dots \right). \quad (4.88)$$

Substituind aceste dezvoltări în (4.56), obținem ($\omega/\Gamma \gg 1$)

$$\bar{u}_0 = \bar{\omega}; \quad \bar{u} = -\frac{c(1 + d)(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)}{\Delta^2 \bar{\omega}}. \quad (4.89)$$

În acest caz densitatea de stări electronice va avea forma

$$n(\omega) \approx 1 + \frac{1}{2\bar{\omega}^2} + \frac{c(1 + d)(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)}{\Delta^2 \bar{\omega}^4} + \frac{3}{8\bar{\omega}^4} + \dots \quad (4.90)$$

Intervalul de frecvențe în care este valabilă dezvoltarea (4.82), este determinat de frecvența ω'_c de ordinul lui Γ ;

$$u'_c = x_2 \Gamma. \quad (4.91)$$

Pentru frecvențe, mai mari decât ω'_c , este adevărată dezvoltarea (4.88).

În acest fel, s-a stabilit că formula (4.84) pentru calculul densității de stări a electronilor de conducție în cazul difuziei rezonante pe atomii de impuritate nemagnetici este aplicabilă numai pentru domeniul de frecvențe, nu prea apropiat de frecvența ω_g și care satisfac inegalitatea (4.85). În afară de aceasta, aceste frecvențe nu trebuie să fie prea mari ($\omega \ll \Gamma$). Când aceste frecvențe sunt apropiate de ω_g , atunci pentru calculul densității electronice de stări este aplicabilă formula (4.76) din care se vede că $n(\omega)$ în acest domeniu se deosebește esențial de $n(\omega)$ pentru supraconductorul pur.

Să dăm rezultatele numerice pentru aliajul La-Ce cu $\Gamma = 0,02$ eV, $T_c = 9,4$ K, $N(\varepsilon_F) = 2,4$ stări/(eV.atom) [28], $\omega_D = 142$ K [43]. Vom examina trei concentrații de impurități: 2; 1; 0,5%, presupunând $d = 5$ și $\varepsilon_d = 0$. Valorile obținute pentru α , $\frac{3}{2}\sigma_p^{2/3}$, Δ_g , ω_g și ω_m sunt prezentate în tabelul 4.1 În paranteze sunt date

Tabelul 4.1: Dependența mărimilor α , σ_p , Δ_g , ω_g și ω_m de concentrația atomilor de impuritate.

$n_c, \%$	α	$\frac{3}{2}\sigma_p^{2/3}$	$\Delta_g \cdot 10^3$ eV	$\omega_g \cdot 10^3$ eV	$\omega_m \cdot 10^3$ eV
2,0	$0,9 \cdot 10^{-3}$ ($0,9 \cdot 10^{-4}$)	0,06 (0,013)	0,0027 -	0,0025 (0,0027)	0,0027 (0,0027)
1,0	0,04 (0,004)	0,34 (0,07)	0,262 -	0,172 (0,240)	0,30 (0,26)
0,5	0,1 (0,01)	0,39 (0,08)	0,82 -	0,50 (0,75)	1,1 (0,84)

aceleași mărimi când $\Gamma = 0,2$ eV, $N(\varepsilon_F) = 0,24$ stări/(eV.atom), $\omega_D = 142$ K, $d = 5$, $\varepsilon_d = 0$, $T_c = 9,4$ K. După cum se vede din tabel, când $\sigma_p^{2/3}$ nu este mult mai mică decât unitatea, valorile lui Δ_g , ω_g și ω_m se deosebesc una de alta, și pentru calculul coeficienților cinetici (de exemplu, coeficientul de conducție termică) trebuie să luăm în considerare domeniul frecvențelor apropiate de frecvența ω_g , ceea ce duce la o contribuție suplimentară de ordinul lui $\sigma_p^{2/3}$.

4.5 Conducția termică a aliajelor supraconductoare cu impurități ale metalelor de tranziție (cazul nemagnetic)

Transportul de căldură în metale se realizează de către electroni și fononi. Caracterul staționar al procesului este asigurat de diferite mecanisme de relaxare. Conducția termică electronică este determinată de difuzia electronilor pe impurități, fononi și a ciocnirilor dintre ei. Contribuția fononică la conducția termică se caracterizează prin interacția fononilor cu electronii, cu impuritățile și interacția fonon-fonon. În metale rolul principal îl joacă conducția termică electronică.

Toate mecanismele procesului de transport al căldurii sunt analizate în monografia [44]. Pentru prima dată transportul de căldură în supraconductori a fost studiat de V.T. Gelikman [45]. El a studiat conducția termică electronică, când procesul principal de relaxare este difuzia electronilor pe impurități. Mecanismele electronic și fononic de conducție termică pentru diferite mecanisme de relaxare sunt analizate în lucrarea [46].

În toate aceste lucrări s-a arătat că raportul K_s/K_n a coeficienților de conducție termică în stare supraconductoare și normală în cazul mecanismului de difuzie a electronilor pe impurități este o funcție universală de raportul T/T_c .

Influența impurităților paramagnetice asupra mărimii conducției termice electronice a fost studiată în lucrarea [47]. Coeficientul conducției termice electronice a aliajelor supraconductoare uni- și bibandă, când mecanismul principal de relaxare este difuzia excitațiilor pe impurități, a fost studiat în lucrările [48, 49].

Studiul experimental al conducției termice permite să determinăm parametrii caracteristici ai supraconductorului (vezi, de exemplu, [50, 44]).

În această secțiune se studiază influența stărilor localizate nemagnetice asupra conducției termice electronice în starea supraconductoare [51]-[53]. În acest scop se folosește reprezentarea spinorială Gorkov-Nambu.

Expresia pentru coeficientul de conducție termică are forma

$$K = \frac{1}{6T} \lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{P(\mathbf{q} = 0, O_m = \omega + i0^+) - P(\mathbf{q} = 0, O_m = \omega - i0^-)}{\omega} \quad (4.92)$$

unde

$$P(\mathbf{q} = 0, \vartheta_m) = \frac{i}{4m^2\beta} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2}{(2\pi)^6} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 (2z_n + \vartheta_m)^2 \times \\ \times \text{Tr} \left\{ \tau_3 G(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | z_n) \tau_3 G(\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 | z_n + \vartheta_m) \right\}; \quad (4.93)$$

$$\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \vartheta_m = \frac{2\pi m i}{\beta}; \quad z_n = \frac{i\pi}{\beta} (2n + 1); \quad \beta = \frac{1}{k_B T}.$$

Introducem notația

$$P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, z_n, z_n + \vartheta_m) = \overline{\tau_3 G(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | z_n) \tau_3 G(\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 | z_n + \vartheta_m)}. \quad (4.94)$$

Linia de deasupra ultimei expresii înseamnă medierea pe pozițiile atomilor de impuritate care sunt distribuiți haotic. Folosind metoda sumării diagramelor scară (ladder diagrams) [54], pentru P obținem ecuația

$$\begin{aligned} P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, z_n, z_n + \vartheta_m) &= \tau_3 \tilde{G}(\mathbf{k}_1 | z_n) \tau_3 \tilde{G}(\mathbf{k}_2 | z_n + \vartheta_m) \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} + \\ &+ \frac{n_c}{V} \sum_{\mathbf{k}} |V_{\mathbf{k}_1 d}|^2 |V_{\mathbf{k}_2 d}|^2 \tau_3 \tilde{G}(\mathbf{k}_1 | z_n) \tau_3 \tilde{G}_d(z_n) \times \\ &\times P(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_2, z_n, z_n + \vartheta_m) \tau_3 \tilde{G}_d(z_n + \vartheta_m) \tau_3 \tilde{G}(\mathbf{k}_2, z_n + \vartheta_m). \end{aligned} \quad (4.95)$$

Funcțiile Green uniparticulă $\tilde{G}(\mathbf{k} | z_n)$ și $\tilde{G}_d(z_n)$ sunt date de expresiile:

$$\left(\tilde{G}(\mathbf{k} | z_n) \right)^{-1} = \tilde{z}(z_n) \tau_0 - \varepsilon_c \tau_3 - \tilde{\Delta}(z_n) \tau_1; \quad (4.96)$$

$$\left(\tilde{G}_d(z_n) \right)^{-1} = \tilde{z}_d(z_n) \tau_0 - \varepsilon_d \tau_3 - \tilde{\Delta}_d(z_n) \tau_1. \quad (4.97)$$

Aici mărimile \tilde{z} și $\tilde{\Delta}$ sunt date de relațiile:

$$\tilde{z}_d(z_n) = z_n + \frac{\pi N(\varepsilon_F) |V_{\mathbf{k}d}|^2 \tilde{z}(z_n)}{\left[\tilde{\Delta}^2(z_n) - \tilde{z}(z_n) \right]^{1/2}}; \quad (4.98)$$

$$\tilde{\Delta}_d(z_n) = \Delta_d + \frac{\pi N(\varepsilon_F) |V_{\mathbf{k}d}|^2 \tilde{\Delta}(z_n)}{\left[\tilde{\Delta}^2(z_n) - \tilde{z}(z_n) \right]^{1/2}}. \quad (4.99)$$

Din ecuația (4.95) se vede că de variabila \mathbf{k}_2 depinde numai funcția P , de aceea vom introduce o nouă mărime definită prin formula

$$\sum_{\mathbf{k}_2} \mathbf{k}_2 P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, z_n, z_n + \vartheta_m) = \mathbf{k}_1 P(\mathbf{k}_1, z_n, z_n + \vartheta_m). \quad (4.100)$$

Pentru cele ce urmează este indicat să înmulțim ecuația (4.95) cu vectorul \mathbf{k}_2 și apoi să sumăm după acesta.

Introducem notația

$$n_c |V_{\mathbf{k}_1 d}|^2 \sum_{\mathbf{k}_3} |V_{\mathbf{k}_3 d}|^2 \mathbf{k}_3 P(\mathbf{k}_3, z_n, z_n + \vartheta_m) = \mathbf{k}_1 \lambda(z_n, z_n + \vartheta_m). \quad (4.101)$$

Atunci ecuația matricială integrală (4.95) se poate reduce la sistemul de ecuații algebrice

$$\begin{aligned} \lambda(z_n, z_n + \vartheta_m) &= \frac{\hbar}{2\pi\kappa_0} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \tau_3 \tilde{G}(\varepsilon, z_n) \tau_3 \tilde{G}(\varepsilon, z_n + \vartheta_m) d\varepsilon + \right. \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \tau_3 \tilde{G}(\varepsilon, z_n) \tau_3 \tilde{G}_d(z_n) \lambda(z_n, z_n + \vartheta_m) \tau_3 \times \\ &\left. \times \tilde{G}_d(z_n + \vartheta_m) \tau_3 \tilde{G}(\varepsilon, z_n + \vartheta_m) d\varepsilon \right\}, \end{aligned} \quad (4.102)$$

unde

$$\tilde{G}(\varepsilon, z_n) = \tilde{G}(|kv|, z_n);$$

timpul de relaxare κ^0 se determină în felul următor:

$$\frac{\hbar}{2\kappa^0} = \frac{n_c \pi N(\varepsilon_F)}{p_F^2} \int \frac{d\Omega_p}{4\pi} \frac{d\Omega_k}{4\pi} |V_{kd}|^2 |V_{pd}|^2(\mathbf{k}\mathbf{p}). \quad (4.103)$$

Mai departe vom considera că nivelul de energie al stării localizate se află pe suprafața Fermi, adică vom lua $\varepsilon_d = 0$, ceea ce permite căutarea mărimii $\lambda(z_n, z_n + \vartheta_m)$ sub forma unei dezvoltări numai după matricile τ_0 și τ_1 : $\lambda = c\tau_0 + M\tau_1$. Atunci pe baza relațiilor (4.92) și (4.93) obținem

$$K = \frac{1}{6T} N(\varepsilon_F) v_F^2 \left(\frac{2\kappa^0}{\hbar} \right) \text{Re} \frac{\pi}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (2z_n + \vartheta_m)^2 C(z_n, z_n + \vartheta_m). \quad (4.104)$$

Substituind dezvoltarea pentru λ în (4.102) și rezolvând sistemul de ecuații, pentru mărimile $C(z_n, z_n + \vartheta_m)$ avem [52]

$$C(z_n, z_n + O_M) = \frac{\hbar}{2\kappa^0} \frac{1 - \alpha}{(Q_1 + Q_2)} D^{-1}(z_n, z_n + \vartheta_m), \quad (4.105)$$

unde

$$D = 1 - \frac{\hbar}{\kappa^0} n\tilde{l} - \frac{\hbar}{\kappa^0} ba\tilde{a}; \quad (4.106)$$

$$\begin{aligned} Q_1 &= \sqrt{\tilde{z}^2(z_n) + \tilde{\Delta}^2(z_n)} ; \quad Q_2 = \sqrt{\tilde{z}^2(z_n + \vartheta_m) + \tilde{\Delta}^2(z_n + \vartheta_m)} ; \\ \alpha &= \frac{\tilde{z}(z_n + \vartheta_m)\tilde{z}(z_n) + \tilde{\Delta}(z_n)\tilde{\Delta}(z_n + \vartheta_m)}{Q_1 Q_2} ; \\ l &= \frac{\tilde{z}(z_n + \vartheta_m)\tilde{\Delta}(z_n) - \tilde{z}(z_n)\tilde{\Delta}(z_n + \vartheta_m)}{Q_1 Q_2} ; \\ \tilde{l} &= \tilde{\Delta}_d(z_n)\tilde{z}_d(z_n + \vartheta_m) - \tilde{\Delta}_d(z_n + \vartheta_m)\tilde{z}_d(z_n) ; \\ \tilde{\alpha} &= \tilde{z}_d(z_n)\tilde{z}_d(z_n + \vartheta_m) + \tilde{\Delta}_d(z_n)\tilde{\Delta}_d(z_n + \vartheta_m) ; \\ b &= \frac{1}{Q_1 + Q_2} \frac{1}{\tilde{z}_d^2(z_n) + \tilde{\Delta}_d^2(z_n)} \frac{1}{\tilde{z}_d^2(z_n + \vartheta_m) + \tilde{\Delta}_d^2(z_n + \vartheta_m)}. \end{aligned} \quad (4.107)$$

Sumarea după z_n se face după metoda dezvoltată în lucrarea [54]. Obținem pentru coeficientul de conducție termică K :

$$K = \frac{n\beta^2 k_B}{8m} \int_0^\infty \frac{z^2 dz}{\text{ch} \frac{2\beta z}{2}} \left(\frac{1 + (|u|^2 - 1)}{|u|^2 - 1} \right) \frac{1}{\text{Im} \left(\tilde{\Delta}(z) \sqrt{u^2 - 1} D(z) \right)}. \quad (4.108)$$

Aici

$$n = \frac{p_F^3}{3\pi^2\hbar^3}; \quad \beta = \frac{1}{k_B T}; \quad u = \frac{\tilde{z}(z)}{\tilde{\Delta}(z)};$$

$$D = 1 - \frac{\hbar}{\kappa^0} \left[(u^* - u)(\tilde{\Delta}_d(z)\tilde{z}_d(z) - \tilde{\Delta}_d(z)\tilde{z}_d^*(z)) - (1 - uu^*)(|\tilde{z}_d(z)|^2 - |\tilde{\Delta}_d(z)|^2) \right]^{-1};$$

$$A = \tilde{\Delta}_d^2(z) - \tilde{z}_d^2(z).$$

Să găsim mai întâi conductibilitatea termică electronică K_n pentru un metal normal. Pentru $\varepsilon_d = 0$ avem

$$\frac{1}{2\text{Im} \left[\tilde{\Delta}(z)\sqrt{u^2 - 1} \right]} = \frac{\Gamma^2 + z^2}{2\Gamma^2 \left(\frac{n_c}{\pi N(\varepsilon_F)} - \frac{\hbar}{2\kappa^0\Gamma^2} \right)}.$$

Să introducem un nou timp de relaxare

$$\frac{n_c}{\pi} N(\varepsilon_F) - \frac{\hbar}{2\kappa^0\Gamma^2} = \frac{\hbar}{2\tau^{tr}}.$$

Atunci obținem

$$K_n = \frac{b}{m} \frac{\tau^{tr}}{3} \pi^2 k_B^2 T \left(1 + \frac{7}{5} \frac{\pi^2}{\beta^2 \Gamma^2} \right). \quad (4.109)$$

Având în vedere că pentru $z < \omega_g$ mărimea u este reală și mai mică decât unu, pentru calculul coeficientului de conducție termică în starea supraconductoare K_s , limita inferioară în integrala (4.108) trebuie înlocuită cu ω_g . Calculul mărimilor ω_g și u a fost făcut în secțiunea precedentă.

Folosind dezvoltarea în apropierea gap-ului energetic, în cazul temperaturilor mici când este îndeplinită inegalitatea $(\beta\Delta_g)^{-1} \ll \sigma_p^{2/3} \ll 1$, găsim

$$\frac{K_s}{K_n} = \frac{4\Delta_g\beta}{\pi^2\sigma_p^{2/3}} \exp(-\beta\Delta_g) \left(1 + \frac{2\tau^{tr}}{\kappa^0\Gamma^2} \right)^{-1}. \quad (4.110)$$

Când temperatura nu este prea joasă și este îndeplinită inegalitatea următoare $\sigma_p^{2/3} \ll (\beta\Delta_p)^{-1} \ll 1$, în integrala (4.108) este important un interval de frecvențe mult mai larg și este necesar să cunoaștem integrandul pe tot intervalul de frecvențe. Efectuând dezvoltarea în serie după parametrul mic σ_p , obținem

$$K_s = \frac{nk_B}{2m\beta} \tau^{tr} \int_{\Delta_g\beta}^{\infty} \frac{x^2 dx}{\text{ch}^2 \frac{x}{2}} + \frac{\pi^2 n \tau^{tr} k_B \sigma_p^{2/3} (\beta\Delta_g)^3 \Lambda}{4m\beta \text{ch}^2(\beta\Delta_g/2)}, \quad (4.111)$$

unde

$$\Lambda = \frac{3}{2} \int_{-\infty}^1 \frac{\left[\frac{2}{3} + \frac{3}{4}x(u(x) + v(x)) \right] dx}{1 + \frac{\tau^{tr}}{\kappa^0\Gamma^2} \left[\frac{1}{2} - \frac{3}{4}x(u(x) + v(x)) \right]} - 3 \int_{-\infty}^0 dx. \quad (4.112)$$

Să evaluăm acum mărimea Λ . Pentru aceasta folosim expresiile lui $u(x)$ și $v(x)$ (formulele (4.70)). Pentru $\tau^{tr}/\kappa^0\Gamma^2 = 1$ avem $\Lambda = 9/10$. Pentru $\tau^{tr}/\kappa^0\Gamma^2 \ll 1$

$$\Lambda = \frac{9}{10} \left(1 - 2 \frac{\tau^{tr}}{\kappa^0\Gamma^2} \right).$$

Pentru temperaturi apropiate de temperatura critică T_c , când

$$\alpha \sim \frac{\Delta(T)}{\Gamma} \ll \left(\frac{T}{\Gamma} \right)^3,$$

pentru K_s/K_n găsim expresia

$$\frac{K_s}{K_n} = \frac{12}{\pi^2} \int_{\Delta_g\beta/2}^{\infty} \frac{t^2 dt}{\text{ch}^2 t} + \frac{48}{\pi^2\beta^2(\varepsilon_d^2 + \Gamma^2)} \int_{\Delta_g\beta/2}^{\infty} \frac{t^4 dt}{\text{ch}^2 t} - \frac{7\pi^2}{5\beta^2(\varepsilon_d^2 + \Gamma^2)}. \quad (4.113)$$

Pentru $\Gamma \gg \Delta$ și $\Gamma\beta \gg 1$ rămâne numai primul termen în formulele (4.111) și (4.113). Aceasta este contribuția principală la mărimea K_s/K_n , din care se vede că raportul coeficienților de conducție termică în starea supraconductoare și în cea normală în cazul difuziei rezonante a electronilor de conducție pe atomii de impuritate se exprimă prin aceeași formulă ca și în cazul difuziei nerezonante a electronilor, dar cu o valoare renormată a mărimii Δ_g datorită impurităților. Corecția la această contribuție principală pentru $\beta\Delta_g \sim 1$ este pozitivă. Pentru temperaturi apropiate de T_c , mărimea K_s/K_n în cazul difuziei rezonante este ceva mai mică decât cea din cazul difuziei nerezonante a electronilor de conducție pe atomii de impuritate.

Din rezultatele obținute, se vede de asemenea că luarea în considerare a dependenței elementelor de matrice ale interacției electronilor cu impuritățile de direcția impulsului electronului nu duce întotdeauna numai la înlocuirea timpului de relaxare cu timpul de transport, ci există și alte modificări importante. Acest lucru are loc atât pentru starea normală cât și pentru cea supraconductoare. Corecția la contribuția respectivă depinde de raportul $\tau^{tr}/\kappa^0\Gamma$.

4.6 Atenuarea ultrasunetelor în supraconductorii impurificați cu metale de tranziție

Energia absorbită Q se calculează cu ajutorul operatorului care descrie interacția electronilor de conducție cu câmpul sonor,

$$\hat{H}'(t) = \int d\mathbf{r} \left(\lambda_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{ij} \psi^+(\mathbf{r}') \tau_3 \psi(\mathbf{r}) \right) \hat{U}_{ij}(\mathbf{r}, t). \quad (4.114)$$

Aici $\lambda_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}^{ij}$ este tensorul ale cărui componente în reprezentarea impulsului sunt funcții de impulsul electronilor; \hat{U}_{ij} este tensorul deformațiilor corpului. Operatorul $\hat{H}'(t)$ este scris în reprezentarea bidimensională Gorkov-Nambu.

Folosirea matricii densității a sistemului în neechilibru [12], obținută în aproximația liniară în raport cu $\hat{H}'(t)$, ne permite să scriem mărimea Q sub forma [55, 56]

$$Q = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \left(\lambda_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{ij} \lambda_{\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1}^{i'j'} P(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1, t - t') \right) \frac{\partial U_{ij}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} U_{i'j'}(\mathbf{r}_1 t'), \quad (4.115)$$

unde

$$P(\mathbf{r}', \mathbf{r}, \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1, t - t') = -i\theta(t - t') \left\langle \left[\psi^+(\mathbf{r}'t) \tau_3 \psi(\mathbf{r}t), \psi^+(\mathbf{r}'_1 t') \tau_3 \psi(\mathbf{r}_1 t') \right] \right\rangle_H,$$

$[A, B]$ este comutatorul mărimilor A și B .

Absorbției sunetului în supraconductori îi este consacrată o literatură bogată (vezi, de exemplu, [44, 57, 58]). În această secțiune se studiază supraconductorii cu stări nemagnetice localizate [59]. Se presupune că frecvența sunetului ω_0 și timpul de relaxare sunt legate între ele prin inegalitatea $\omega_0 \tau < 1$. Hamiltonianul sistemului are forma

$$H = H_A + H_{\text{BCS}} + H'(t), \quad (4.116)$$

unde H_A este hamiltonianul Anderson (4.1) pentru $U = 0$; H_{BCS} este dat de formula (4.114).

Presupunem că perturbația externă este unda sonoră monocromatică cu vectorul de undă \mathbf{q} și frecvența ω_0 . Atunci densitatea de energie absorbită va fi funcție de \mathbf{q}, ω_0 . Dacă nu luăm în considerație dispersia undei sonore, calculul densității de energie absorbită Q este analog cu calculul coeficientului de conducție termică (vezi sec.4.4).

Să prezentăm rezultatele obținute. Mărimea Q în cazul metalului normal se determină din expresia

$$Q_n(\omega_n) = 4\omega_0^2 \langle |\varphi|^2 \rangle_{\text{ung}} N(\varepsilon_F) \tau^{tr} \left(1 + \frac{\pi^2}{3\Gamma^2 \beta^2} \right), \quad (4.117)$$

unde

$$\varphi_{\mathbf{k}} = U_{ij}(\mathbf{q}) \lambda^{ij}(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}).$$

Prin $\langle \dots \rangle_{\text{ung}}$ s-a notat medierea pe unghiurile vectorului \mathbf{k} .

În starea supraconductoare, când $\sigma_p^{2/3} \ll T/\Delta_g \ll 1$, pentru $Q_s(\omega_0)$ găsim

$$Q_s(\omega_0) = 4\omega_0^2 \langle |\varphi|^2 \rangle_{\text{ung}} N(\varepsilon_F) \tau^{tr} \left[\frac{2}{e^{\beta\Delta_g} + 1} + \frac{\beta\Delta_g \sigma_p^{2/3} \Delta}{4 \text{ch}^2 \frac{\beta\Delta_g}{2}} \right]. \quad (4.118)$$

Pentru temperaturi apropiate de T_c , când $\alpha \sim \Delta T/T \ll (T/\Gamma)^3$, obținem

$$Q_s(\omega_0) = 4\omega_0^2 \langle |\varphi|^2 \rangle_{\text{ung}} N(\varepsilon_F) \tau^{tr} \left[\frac{2}{e^{\beta\Delta_g} + 1} + \frac{T^2}{\Gamma^2} \int_{\beta\Delta_g}^{\infty} \frac{x^2 dx}{\text{ch}^2(x/2)} \right]. \quad (4.119)$$

Prin $\sigma_p, \alpha, \Gamma, \Delta_g$ și τ^{tr} s-au notat aceleași mărimi ca și în sec.4.3 și 4.4.

Din rezultatele găsite se vede că raportul coeficienților de atenuare a ultrasunetelor în starea normală și supraconductoare ($\alpha_s/\alpha_n = Q_s/Q_n$) nu este o funcție universală de raportul T/T_c .

4.7 Discuția rezultatelor

În secțiunile precedente am studiat analitic densitatea stărilor electronice în aliajele supraconductoare cu stări localizate nemagnetice ale impurităților și pe baza acestui studiu am calculat coeficienții de conducție termică electronică și atenuarea ultrasunetelor. S-a arătat că numai atunci când lărgimea nivelului impurității Γ este mult mai mare decât parametrii caracteristici ai supraconductorului, raportul coeficienților respectivi în starea supraconductoare și normală în cazul difuziei rezonante a electronilor pe atomii de impuritate se determină prin aceeași formulă ca și în cazul difuziei nerezonante, dar cu renormarea temperaturii critice T_c datorită prezenței impurităților. Corecția la acest termen pentru $\Delta/T \sim 1$ este pozitivă.

Din rezultatele obținute rezultă că densitatea electronică de stări $n(\omega)$ în apropierea gap-ului energetic are o structură complicată. În particular această structură se manifestă la calculul unor coeficienți cinetici, cum ar fi viteza de relaxare nucleară R_s , care se determină din formula

$$\frac{R_s}{R_n} = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2T \operatorname{ch}^2(\omega/2T)} \left\{ \left(\operatorname{Im} \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 + \left(\operatorname{Im} \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} \right)^2 \right\}, \quad (4.120)$$

unde $R_n = R_s(\Delta = 0)$. Mărima u pentru diferite intervale de temperaturi se găsește în sec.4.3. Substituind aceasta în (4.120), după o serie de calcule pentru $\Delta_g/T \lesssim 1$ avem

$$\frac{R_s}{R_n} = 2f(\Delta_g) \left(1 + \frac{\Delta_g}{T} \left(1 - f(\Delta_g) \right) \ln \frac{4}{3} \sigma_p^{-2/3} \right), \quad (4.121)$$

unde $f(\Delta_g) = \left(e^{\Delta_g/T} + 1 \right)^{-1}$. Restul notațiilor sunt luate din sec.4.4.

După lucrarea noastră [60], s-a calculat numeric densitatea electronică de stări și pe baza formulei (4.120) s-a dedus viteza de relaxare a spinului nuclear în aliajele supraconductoare cu stări de impuritate nemagnetice localizate. Trăsăturile fundamentale, care rezultă din aceste calcule numerice, sunt în acord cu formulele analitice pentru $n(\omega)$ (vezi sec.4.4). Cunoașterea lui $n(\omega)$ permite să găsim formula analitică (4.121) pentru raportul R_s/R_n . Dependența găsită a raportului $T_s/T_n = R_n/R_s$ de raportul T_c/T pentru diferite valori ale lui n_c/n_{cr} este prezentată în fig.4.3. Prin n_{cr} s-a notat $n_{cr} = \pi N(\varepsilon_F)(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)/\Gamma d$. Calculele sunt făcute pentru $d = 5$, $\varepsilon_d = 0$, $\Delta(0)/\Gamma = 10^{-2}$, $\Delta(0) = \Delta(T = 0)$.

Din grafic se vede că cu creșterea concentrației de impurități raportul T_s/T_n crește. Apariția unui minim pronunțat în dependența de temperatură al raportului T_s/T_n în apropierea temperaturii critice se explică prin factorii coerenți de structură, care au semnul plus și care, în acest fel, nu conțin singularități în densitatea electronică de stări. Dependența găsită pentru T_s/T_n (fig.4.3) este în acord cu datele experimentale [61] pentru aluminiiu cu impurități de mangan.

4.8 Concluzii

1. S-a dezvoltat termodinamica aliajelor supraconductoare cu stări de impuritate locale, care sunt descrise de modelul Anderson. S-a determinat dependența

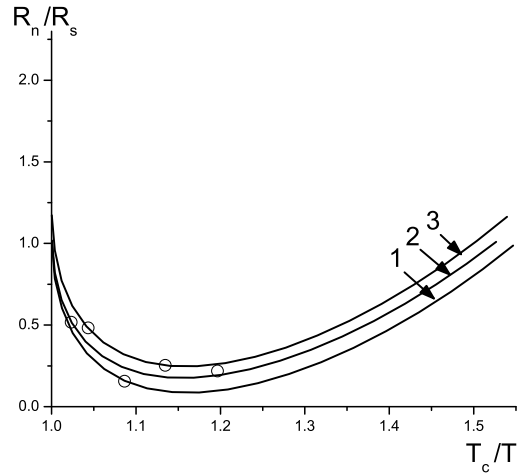


Figura 4.3: Dependența lui R_n/R_s de T_c/T pentru diferite valori ale concentrației de impurități n_c/n_{cr} : 1 - 0,02; 2 - 0,04; 3 - 0,1.

temperaturii critice a tranziției supraconductoare T_c de concentrația mică de impurități pentru un raport arbitrar dintre lărgimea nivelului de impuritate Γ și energia repulsiei coulombiene a electronilor cu spini opuși U . Efectul Kondo nu a fost luat în considerație. Termenul coulombian din hamiltonianul Anderson se exprimă prin noii operatori de cvaziparticule, care diagonalizează în limita clasică interacția de schimb $s - d$ efectivă. Dinamica noilor cvaziparticule fermionice este tratată în aproximația Hartree-Fock.

Dependența stabilită de noi a lui T_c de concentrația de impurități are un caracter complex:

- în limita nemagnetică, când $\Gamma \gg U$, trece în rezultatele lui Zuckerman și Ratto și Blandin;
- în limita magnetică $\Gamma \ll U$ aceasta trece complet în rezultatul cunoscut pentru T_c , cu o dependență de concentrația de impurități în deplin acord cu teoria aliajelor supraconductoare, cu impurități paramagnetice, a lui Abrikosov și Gorkov. Acest lucru este determinat de faptul că introducerea noilor operatori de cvaziparticule dă posibilitatea de a lua în considerație toate componentele spinului atomului de impuritate în aproximația Hartree-Fock pentru termenul coulombian din hamiltonianul Anderson;
- graficul dependenței lui T_c de Γ/U descrie calitativ datele experimentale pentru aliajele de La-Ce.

2. S-a calculat saltul căldurii specifice în aliajele supraconductoare descrise de modelul Anderson, când are loc o interacție puternică a electronilor cu atomii mag-

netici de impuritate. Se arată că luarea în considerație a difuziei rezonante pentru un raport T_c/T_{c0} dat, duce la creșterea saltului căldurii specifice în comparație cu valorile obținute pe baza teoriei lui Shiba-Rusinov.

3. S-a studiat densitatea stărilor electronice pentru aliajele supraconductoare cu stări de impuritate nemagnetice locale și pe această bază s-au calculat o serie de coeficienți cinetici. Pentru aceasta s-a folosit metoda de calcul dezvoltată de V.A. Moskalenko a densității stărilor electronice în aliaje. S-au stabilit următoarele proprietăți pentru densitatea electronică de stări $n(\omega)$:

- s-a arătat că funcția $n(\omega)$ în domeniul de frecvențe apropiat de gap-ul energetic ω_g , se deosebește esențial de $n(\omega)$ pentru supraconductorii puri. În vecinătatea lui ω_g , pentru $\omega = \omega_m$, funcția $n(\omega)$ are un maxim;
- s-a calculat frecvența maximului ω_m și mărimea gap-ului ω_g , și de asemenea diferitele caracteristici ale funcției $n(\omega)$ și a funcțiilor înrudite cu ea.

4. S-a studiat coeficientul electronic al conducției termice și atenuarea ultrasunetului în aliajele supraconductoare cu stări locale nemagnetice. S-a arătat că legea stărilor corespondente, stabilită pentru aceste aliaje în lucrarea [24], are un caracter aproximativ. Numai în acel caz, când lărgimea nivelului de impuritate este mult mai mare decât parametrii caracteristici ai supraconductorului, raportul coeficienților examinați în starea supraconductoare și în cea normală este o funcție universală de T/T_c . S-a găsit abaterea de la curbele universale pentru diferitele intervale de temperatură:

- în domeniul de temperaturi, unde $\Delta/T \lesssim 1$, s-a obținut un termen suplimentar pozitiv, proporțional cu parametrul mic $\sigma_p^{2/3}$;
- pentru temperaturi, apropiate de T_c , corecția la termenul principal este negativă.

FENOMENE DE NEECHILIBRU ÎN ALIAJELE SUPRACONDUCTOARE

În acest capitol se obțin ecuațiile cinetice pentru aliajele normale și supraconductoare, care sunt descrise de hamiltonianul Anderson.

Se calculează partea impară după energii a funcției de distribuție a excitațiilor și se studiază pătrunderea câmpului electromagnetic longitudinal în supraconductor, când mecanismul principal de relaxare este difuzia rezonantă pe impuritatea nemagnetică.

5.1 Discuția datelor din literatură și noțiuni fundamentale

În ultimii ani s-au pus bazele teoriei proceselor de neechilibru și nestaționare în supraconductori [62]-[76]. În consecință a devenit posibilă descrierea acestor procese în limbajul parametrului de ordine al supraconductorului și a funcției de distribuție a excitațiilor, care sunt legate între ele printr-un sistem de ecuații integro-diferențiale. Într-o serie de cazuri acest sistem este rezolvabil, și proprietățile sale concrete pot fi analizate în prezența câmpurilor externe.

Una din problemele principale ale cineticii supraconductorilor este interacția câmpurilor electrice longitudinale cu supraconductorul. În anii '70 ai secolului trecut se considera că câmpul electric nu poate pătrunde în supraconductor la distanțe de suprafață care să întrecă adâncimea de pătrundere a câmpului magnetic $\lambda(T)$ și lungimea de coerență $\xi(T)$. Acest lucru se datora ideii că prezența câmpului electric E ar duce la o accelerare continuă a perechilor Cooper din condensat conform cu ecuația de mișcare a acestuia

$$\frac{d\mathbf{p}_s}{dt} = e\mathbf{E} + \nabla\Phi, \quad (5.1)$$

dacă în aceasta renunțăm la termenul $\nabla\Phi$. Aici $\mathbf{p}_s = \frac{1}{2}\nabla\chi - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ este impulsul condensatului; $\Phi = \frac{1}{2}\frac{\partial\chi}{\partial t} + e\varphi$ este potențialul gradient-invariant; χ este faza

parametrului de ordine; φ este potențialul electrostatic. Într-adevăr, când există neomogenități (suprafața de separare a supraconductorului cu metalul normal, sau cu un dielectric, sau cu alt supraconductor) în direcția curgerii curentului, termenul $\nabla\Phi$ este diferit de zero. În cazul staționar aceasta duce la apariția câmpului

$$\mathbf{E} = -\nabla \frac{\Phi}{e}. \quad (5.2)$$

Problema pătrunderii câmpului electric în supraconductor și efectele legate de acest lucru sunt discutate pe larg în lucrarea de sinteză a lui S.N. Artemenko și A.F. Volkov [63]. Pentru prima dată această problemă a fost discutată de Rieger și Scalapino [74], care au generalizat fenomenologic ecuațiile Ginzburg-Landau la cazul nestaționar și de neechilibru și au arătat că în starea nestaționară, când se produce transformarea curentului de cvaziparticule în curent de perechi în supraconductor, potențialul de cvaziparticule se deosebește de potențialul chimic al perechilor Cooper. Aceasta duce la apariția câmpului electric longitudinal în supraconductor.

Încă până la apariția lucrării [74], L.P. Gorkov și G.M. Eliașberg [64], pe baza teoriei microscopice au obținut ecuațiile Ginzburg-Landau, care descriu procesele nestaționare și de neechilibru în supraconductori cu concentrație mare de impurități paramagnetice (limita fără gap-gapless superconductivity). Lungimea caracteristică de scădere a câmpului electric de la suprafață coincide în acest caz cu lungimea de coerență $\xi(T)$ a supraconductorului cu precizie de până la un factor numeric.

Totuși, după cum se arată în lucrările [62, 63, 75, 76], în supraconductorii cu gap, adâncimea de pătrundere a câmpului în supraconductor (l_E) poate fi mult mai mare decât $\xi(T)$. Într-adevăr, l_E este determinată de timpul de stabilire a echilibrului între ramura electronică și cea de goluri a spectrului de cvaziparticule (τ_Q) prin relația

$$l_E = \sqrt{D\tau_Q} = l_E \sqrt{\frac{4T}{\pi\Delta}}. \quad (5.3)$$

Aici $D = v_F^2\tau/3$ este coeficientul de difuzie; $\tau_Q = \tau_\varepsilon \frac{4T}{\pi\Delta}$; $l_\varepsilon = \sqrt{D\tau_\varepsilon}$, τ_ε fiind, respectiv, lungimea și mărimea timpului de relaxare energetică. Mărimea $1/\tau_\varepsilon \sim (k_B T)/\hbar(T/\theta_D)^2$.

Să dăm câteva valori pentru τ_ε . Pentru aluminiu $\tau_\varepsilon = 10^{-8}$ s, pentru staniu - $3 \cdot 10^{-10}$ s, pentru plumb - 10^{-11} s.

Din formula (5.3) se vede că pentru $T > \Delta$, mărimea l_E este mai mare decât l_ε . Determinarea experimentală a acestuia s-a făcut în lucrările [76, 77]. În experiențe se măsoară diferența potențialelor, care este proporțională cu l_ε , care apare între domeniul supraconductorului, unde se află starea de neechilibru, și domeniul îndepărtat. Ecuația pentru potențialul Φ pentru $l_E > \xi(t)$ are forma [63], [78]-[81]

$$l_E^2 \nabla^2 \Phi = \Phi. \quad (5.4)$$

Formula (5.3) pentru l_E s-a obținut în ipoteza că relaxarea diferenței de populații ale ramurii spectrului energetic al supraconductorului se datorează difuziei cvaziparticulelor pe fononi.

Cauza acestei relaxări poate fi de asemenea și ciocnirea inelastică a cvaziparticulelor între ele [67], ciocnirea elastică cu centrul de impuritate nemagnetice atunci când

viteza condensatului este diferită de zero [68, 69], difuzia pe impurități magnetice cu răsturnarea spinului [78]-[80], [82, 83], și de asemenea anizotropia supraconductorului [75, 79]. Apariția potențialului Φ este posibilă nu numai la trecerea curentului printr-o suprafață N-S, dar și din cauza altor efecte (acustoelectric și electroluminos), care duc la apariția unei divergențe nenule a curentului de cvaziparticule j_n , care curge în direcția de propagare a undei [84].

În lucrările [62, 63] s-a arătat pentru prima dată că gradientul de temperatură ∇T la suprafețele N-S sau S-S' produce un dezechilibru în populația ramurilor spectrului de cvaziparticule ale supraconductorului. Ca rezultat apare un potențial Φ diferit de zero și un câmp termoelectric E_T , care pătrunde în adâncimea supraconductorului pe distanța l_E . În lucrările experimentale [85, 86] s-a măsurat diferența de potențial, care apare în structura S-N-S, în prezența gradientului de temperatură. Folosind dependența de temperatură cunoscută pentru l_E , și de asemenea măsurând rezistența electrică a sistemului, s-a obținut valoarea coeficientului forței termoelectrice în starea supraconductorului în apropierea lui T_c . S-a arătat că acesta aproape coincide cu valoarea din starea normală, așa cum rezultă din considerații teoretice.

Un efect termoelectric în supraconductori, efect care este diferit de cel din metalele normale, a fost prezis de Pethick și Smith [87]. Acesta constă în aceea că în prezența curentului supraconductor cu viteza v_s și a gradientului de temperatură de-a lungul curentului, duce la popularea diferită a ramurilor spectrului electronic și la stabilirea potențialului Φ care este invariant la transformarea de gradient și care este proporțional cu $v_s \nabla T$.

5.2 Ecuația cinetică pentru metalele normale cu stări locale nemagnetice

În cele ce urmează se studiază aliajele nemagnetice [88]-[90], care conțin impurități ale metalelor de tranziție sau ale elementelor pământurilor rare. Proprietățile impurităților sunt descrise de hamiltonianul Anderson, care, în reprezentarea coordonatelor se scrie sub forma

$$H = \int d\mathbf{r} \psi_{\alpha}^{+}(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \mu \right] \psi_{\alpha}(\mathbf{r}) + \sum_i \varepsilon_d \varphi_{\alpha}^{+}(\mathbf{R}_i) \varphi_{\alpha}(\mathbf{R}_i) + \sum_i \int d\mathbf{r} \left[V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \varphi_{\alpha}^{+}(\mathbf{R}_i) \psi_{\alpha}(\mathbf{R}_i) + h.c. \right] \quad (5.5)$$

Primul și al doilea termen din (5.5) este hamiltonianul pentru electronii s și d respectiv. Al treilea termen descrie interacția electronului din punctul \mathbf{r} cu electronul impurității din punctul \mathbf{R}_i .

Pentru a studia proprietățile netaționare și de neechilibru ale sistemului, se introduc matricile lui Keldăș [91] \hat{g} și D_{11} pentru electronii de conducție și respectiv pentru cei ai impurităților:

$$\hat{g}(x, x') = \begin{pmatrix} g^R & g \\ 0 & g^A \end{pmatrix}; \quad (5.6)$$

$$\hat{D}_{11} = \begin{pmatrix} D_{11}^R & D_{11} \\ 0 & D_{11}^A \end{pmatrix}. \quad (5.7)$$

Aici funcțiile Green sunt definite în felul următor:

$$g^R(x, x') = -i\theta(t - t')\langle[\psi(x), \psi^+(x')]_+\rangle; \quad (5.8)$$

$$g^A(x, x') = i\theta(t' - t)\langle[\psi(x), \psi^+(x')]_+\rangle; \quad (5.9)$$

$$g(x, x') = -i\langle[\psi(x), \psi^+(x')]\rangle, \quad x = \mathbf{r}, t. \quad (5.10)$$

Notățiile pentru D_{11}^R , D_{11}^A și D_{11} se deosebesc de definițiile (5.8)-(5.10) prin înlocuirea lui ψ cu φ și a lui \mathbf{r} cu \mathbf{R}_i .

Folosind metoda diagramatică din lucrarea [91], pentru matricea \hat{g} putem obține ecuația integrală

$$\begin{aligned} \hat{g}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') &= \hat{g}_0(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') + \\ &+ \int \hat{g}_0(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_1t_1) \Sigma_g(\mathbf{r}_1t_1, \mathbf{r}_2t_2) \hat{g}(\mathbf{r}_2t_2, \mathbf{r}'t') d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 dt_1 dt_2. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Operatorul de masă $\hat{\Sigma}_g$ se exprimă prin funcția matricială a impurităților D_{11} :

$$\Sigma_g(\mathbf{r}_1t_1, \mathbf{r}_2t_2) = \sum_{i,j} V^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) D_{11}(\mathbf{R}_it_1, \mathbf{R}_jt_2). \quad (5.12)$$

Matricea $(\hat{g}_0)^{-1}$, inversa lui \hat{g}_0 , se definește astfel:

$$\hat{g}_0^{-1} = \tau_0 g_0^{-1}; \quad \tau_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Aici

$$g_0^{-1} = i \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\varphi + \mu. \quad (5.14)$$

Ecuația care se obține pentru funcția Green \hat{D}_{11} are forma

$$\begin{aligned} \hat{D}_{11}(\mathbf{R}_it, \mathbf{R}_jt') &= \hat{D}_{11}^0(\mathbf{R}_it, \mathbf{R}_jt') + \\ &+ \int dt_1 dt_2 \sum_{i'j'} \hat{D}_{11}^0(\mathbf{R}_it, \mathbf{R}_{i'}t_1) \hat{\Sigma}_{D_{11}}(\mathbf{R}_{i'}t_1, \mathbf{R}_{j'}t_2) \hat{D}_{11}(\mathbf{R}_{j'}t_2, \mathbf{R}_jt'), \end{aligned} \quad (5.15)$$

unde

$$\hat{\Sigma}_{D_{11}}(\mathbf{R}_it_1, \mathbf{R}_jt_2) = \int \hat{g}(\mathbf{r}_1t_1, \mathbf{r}_2t_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) V^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2; \quad (5.16)$$

$$(\hat{D}_{11}^0)^{-1} = \tau_0 (D_{11}^0)^{-1}; \quad (5.17)$$

$$(D_{11}^0)^{-1} = i \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon_d. \quad (5.18)$$

În lipsa câmpurilor externe și a interacției $s-d$ a electronilor, pentru componentele Fourier ale funcțiilor Green neperturbate avem

$$g_0^R(\mathbf{p}, \varepsilon) = (\varepsilon - \xi_p + i\delta)^{-1}; \quad g_0^A(\mathbf{p}, \varepsilon) = (\varepsilon - \xi_p - i\delta)^{-1}; \quad (5.19)$$

$$g_0(\mathbf{p}, \varepsilon) = 2\pi i(2f_p^0 - 1)\delta(\varepsilon - \varepsilon_p); \quad (5.20)$$

$$D_{11}^{0R}(\varepsilon_d, \varepsilon) = (\varepsilon - \varepsilon_d + i\delta)^{-1}; \quad D_{11}^{0A}(\varepsilon_d, \varepsilon) = (\varepsilon - \varepsilon_d - i\delta)^{-1}; \quad (5.21)$$

$$D_{11}^0(\varepsilon_d, \varepsilon) = 2\pi i(2f_d^0 - 1)\delta(\varepsilon - \varepsilon_d). \quad (5.22)$$

f_p^0 și f_d^0 sunt funcțiile de distribuție pentru electronii s , respectiv d , când nu avem câmpuri externe și nici interacție dintre electroni și impurități.

Ecuația pentru \hat{g} poate fi de asemenea scrisă sub forma

$$\begin{aligned} \hat{g}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') &= \hat{g}_0(\mathbf{r}t, \mathbf{r}'t') + \int \hat{g}(\mathbf{r}t, \mathbf{r}_1t_1) \times \\ &\times \hat{\Sigma}_g(\mathbf{r}_1t_1, \mathbf{r}_2t_2) \hat{g}_0(\mathbf{r}_2t_2, \mathbf{r}'t') d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 dt_1 dt_2. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Operatorul g_0^{-1} , care acționează asupra celui de al doilea argument al funcției \hat{g} , se deosebește de (5.14) prin schimbarea semnului derivate în raport cu variabila t .

Folosind proprietățile operatorului g_0^{-1} , rescriem diferența ecuațiilor (5.11) și (5.23) după medierea pe coordonatele atomilor de impuritate și trecând la reprezentarea impulsului după diferența coordonatelor $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, obținem:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial \hat{g}_{\mathbf{p}}(tt')}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial \hat{g}_{\mathbf{p}}(tt')}{\partial t} + \frac{\partial \hat{g}(tt')}{\partial t'} + \hat{H}(t) \hat{g}_{\mathbf{p}}(tt') - \\ - \hat{g}_{\mathbf{p}}(tt') \hat{H}(t') + in_c \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 |V_{pd}|^2 \left[\hat{D}_{11}(tt_1) \hat{g}_{\mathbf{p}}(t_1t') - \right. \\ \left. - \hat{g}_{\mathbf{p}}(tt_1) \hat{D}_{11}(t_1t') \right] = 0. \end{aligned} \quad (5.24)$$

În mod analog se poate obține ecuația pentru funcția Green a impurităților \hat{D}_{11} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{D}_{11}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{D}_{11}}{\partial t'} + \frac{N(\varepsilon_F)}{4V} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 |V_{pd}|^2 d\Omega_p d\mathbf{R} \times \\ \left[\hat{g}_{\mathbf{p}}(tt_1) \hat{D}_{11}(t_1t') - \hat{D}_{11}(tt_1) \hat{g}_{\mathbf{p}}(t_1t') \right] = 0. \end{aligned} \quad (5.25)$$

La mediere s-a folosit aproximația care constă în aceea că medierea funcțiilor Green și a operatorilor de masă se face independent. În afară de acesta, s-a ținut seama că

$$\hat{D}_{11}^0(\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j) = \hat{D}_{11}^0(\mathbf{R}_i \mathbf{R}_i) \delta_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j}; \quad \hat{D}_{11}^0(\mathbf{R}_i \mathbf{R}_i) = \hat{D}_{11}^0. \quad (5.26)$$

În (5.24) și (5.25) n_c este concentrația atomilor de impuritate, V_{pd} este transformata Fourier a interacției $V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$, (V este volumul sistemului). Funcția $\hat{g}_{\mathbf{p}}$ se integrează

după variabila $\xi = \frac{p^2}{2m} - \varepsilon_F$ (vezi, de exemplu, [92]):

$$\hat{g}_{\mathbf{p}}(t, t') = \frac{i}{\pi} \int d\xi d^3\mathbf{r} \hat{g}\left(t, t'; \frac{\mathbf{R} + \mathbf{r}}{2}; \frac{\mathbf{R} - \mathbf{r}}{2}\right) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (5.27)$$

și depinde de vectorul $\mathbf{r} + \mathbf{r}' = \mathbf{R}$. Operatorul $\hat{H}(t)$ în (5.24) se determină în felul următor:

$$\hat{H}(t) = -\frac{ie}{m}\mathbf{p}\mathbf{A}(t) + ie\varphi(t). \quad (5.28)$$

Să trecem în ecuațiile (5.24) și (5.25) la noile variabile $t = t - t'$ și $(t + t')/2 = t_R$. Pentru elementele nedigonale ale matricilor \hat{g} și \hat{D}_{11} , după trecerea la imaginea Fourier în raport cu variabila t , obținem

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial t_R} + \left(e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \mathcal{H}] \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \\ & = -i|V_{pFd}|^2 n_c \left[D_{11}(\varepsilon) \left(g_{\mathbf{p}}^A(\varepsilon) - g_{\mathbf{p}}^R(\varepsilon) \right) + g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) \left(D_{11}^R(\varepsilon) - D_{11}^A(\varepsilon) \right) \right]; \end{aligned} \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{11}(\varepsilon)}{\partial t_R} & = -\pi |V_{pFd}|^2 N(\varepsilon_F) \int \frac{d\mathbf{R}}{V} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \left[D_{11}(\varepsilon) \times \right. \\ & \left. \times \left(g_{\mathbf{p}}^R(\varepsilon) - g_{\mathbf{p}}^A(\varepsilon) \right) + g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) \left(D_{11}^A(\varepsilon) - D_{11}^R(\varepsilon) \right) \right]. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Aici $\hat{g}_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \hat{g}_{\mathbf{p}}(\varepsilon, \mathbf{R}, t_R)$; $\hat{D}(\varepsilon) = \hat{D}(\varepsilon, t_R)$ și interacția cu impuritățile se consideră că nu depinde de unghiuri.

Ecuațiile (5.29) și (5.30) s-au obținut în aproximația cvaziclastică, ceea ce înseamnă că valoarea expresiei $\nabla_{\mathbf{R}}G/p$ este mică, unde $p = (\mathbf{p}, \varepsilon)$ și prin derivarea în raport \mathbf{R} vom înțelege $\nabla_{\mathbf{R}} = (\nabla_{\mathbf{R}}, \partial/\partial t_R)$.

În cele ce urmează se folosește aproximația locală pentru g^R și g^A , adică vom considera că aceste mărimi nu depind de \mathbf{R} și t_R . În acest caz, funcția necunoscută $D_{11}(\varepsilon)$, care intră în (5.29), poate fi găsită din (5.30). După substituirea ei în (5.29) avem

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial t_R} + \left(e\mathbf{E} + \frac{e}{c}[\mathbf{v} \times \mathcal{H}] \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = \\ & = -i|V_{pFd}|^2 n_c \left[\frac{1}{\Gamma} \frac{\partial D_{11}}{\partial t_R} + \left(D_{11}^R(\varepsilon) - D_{11}^A(\varepsilon) \right) g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{R}}{V} g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) \right]. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Folosim acum reprezentarea

$$D_{11}(\varepsilon) = \left(D_{11}^R(\varepsilon) - D_{11}^A(\varepsilon) \right) f_d(\varepsilon); \quad g_{\mathbf{p}}(\varepsilon) = 2f_{\mathbf{p}}(\mathbf{R}, t_R, \varepsilon), \quad (5.32)$$

f_d și $f_{\mathbf{p}}$ fiind funcțiile de distribuție ale electronilor d și s respectiv. Substituind (5.32) în (5.30) și (5.31) și considerând că

$$D^R(\varepsilon) - D^A(\varepsilon) = -\frac{2i\Gamma}{(\varepsilon - \varepsilon_d)^2 + \Gamma^2}; \quad (5.33)$$

$$g_{\mathbf{p}}^R(\varepsilon) - g_{\mathbf{p}}^A(\varepsilon) = 2, \quad (5.34)$$

obținem sistemul de ecuații cinetice pentru funcțiile f_d și f_p :

$$f_d(\varepsilon) + \frac{1}{2\Gamma} \frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial t_R} = \frac{1}{4\pi} \int \frac{f_p(\mathbf{R}, t_R, \varepsilon) d\Omega_{\mathbf{p}} d\mathbf{R}}{V}, \quad (5.35)$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} + \frac{\partial}{\partial t_R} + \left(e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathcal{H}] \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right] f_p(\mathbf{R}, t_R, \varepsilon) = \\ & = - \frac{2\Gamma n_c |V_{pFd}|^2}{\Gamma^2 + (\varepsilon - \varepsilon_d)^2} \left[f_p - \int \frac{f_p(\mathbf{R}, t_R, \varepsilon) d\Omega_{\mathbf{p}} d\mathbf{R}}{4\pi V} + \frac{1}{2\Gamma} \frac{\partial f_d(\varepsilon)}{\partial t_R} \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Ecuațiile (5.35) și (5.36) sunt nelocale, deoarece integralele de ciocnire conțin integrarea după variabila \mathbf{R} , de care, în cazul neomogen depinde funcția f_p . Obținerea unor ecuații cinetice locale în modelul Anderson se poate face numai în cazul în care presupunem că

$$D(\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j) = D(\mathbf{R}_i \mathbf{R}_i) \delta_{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j}, \quad (5.37)$$

și de asemenea dacă are loc o interacție de contact a electronilor cu atomii de impuritate, adică

$$V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = V\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (5.38)$$

Presupunând îndeplinite egalitățile (5.37) și (5.38), obținem ecuații cinetice care se deosebesc de (5.35) și (5.36) prin faptul că în integralele de ciocnire lipsește integrarea după $d\mathbf{R}$, iar funcția f_d depinde de \mathbf{R} .

5.3 Ecuația cinetică pentru supraconductori cu stări locale nemagnetice

Ecuațiile (5.24) și (5.25) pot fi generalizate la cazul supraconductor. Urmând lucrarea lui A.I. Larkin și Y. N. Ovcinikov [71], după o serie de transformări, avem

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbf{p}}{m} \frac{\partial \hat{G}_{\mathbf{p}}}{\partial \mathbf{R}} + \hat{\tau}_z \frac{\partial \hat{G}_{\mathbf{p}}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{G}_{\mathbf{p}}}{\partial t'} \hat{\tau}_z + \hat{H}(t) \hat{G}_{\mathbf{p}} - \hat{G}_{\mathbf{p}} \hat{H}(t') + \\ & + in_c \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 |V_{pd}|^2 \left[\hat{D}(tt_1) \hat{G}_{\mathbf{p}}(t_1 t') - \hat{G}_{\mathbf{p}}(tt_1) \hat{D}(t_1 t') \right] = 0; \end{aligned} \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} & \hat{\tau}_z \frac{\partial \hat{D}}{\partial t} + \frac{\partial \hat{D}}{\partial t'} \hat{\tau}_z - i\check{\Delta}_d(t) \hat{D} + i\hat{D} \check{\Delta}_d(t') + \\ & + \frac{N(\varepsilon_F)}{4} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int \frac{d\mathbf{R} d\Omega_{\mathbf{p}}}{V} |V_{pd}|^2 \left[\hat{G}_{\mathbf{p}}(tt_1) \hat{D}(t_1 t') - \hat{D}(tt_1) \hat{G}_{\mathbf{p}}(t_1 t') \right] = 0, \end{aligned} \quad (5.40)$$

unde

$$\hat{H}(t) = -\frac{ie}{m} \mathbf{p} \mathbf{A}(t) \hat{\tau}_z - i\check{\Delta}(t) + ie\varphi(t).$$

Funcțiile matriciale Keldâș în acest caz se definesc ca

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} G^R & G \\ 0 & G^A \end{pmatrix}; \quad \hat{D} = \begin{pmatrix} D^R & D \\ 0 & D^A \end{pmatrix}. \quad (5.41)$$

Aici funcțiile G^R , G^A , G și D^R , D^A , D sunt matrici formate din funcțiile Green obișnuite g , D_{ii} și funcțiile Gorkov F , D_{ij} :

$$G = \begin{pmatrix} g_1 & F_1 \\ -F_2 & g_2 \end{pmatrix}; \quad D = \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix}. \quad (5.42)$$

Notățiile $\hat{\tau}_z$, $\check{\Delta}$ și $\hat{\Delta}$ sunt aceleași ca și cele din lucrarea [71]:

$$\hat{\tau}_z = \begin{pmatrix} \tau_z & 0 \\ 0 & \tau_z \end{pmatrix} \quad \check{\Delta} = \begin{pmatrix} \hat{\Delta} & 0 \\ 0 & \hat{\Delta} \end{pmatrix}; \quad \hat{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & \Delta_1 \\ -\Delta_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.43)$$

În ecuațiile (5.39) și (5.40) funcțiile G și D pentru fenomenele nestaționare și de neechilibru sunt cunoscute. Vom considera că are loc aproximația locală. Atunci pentru funcțiile de integrat în raport cu ξ , G^R și G^A avem

$$G^{R,A} = \left(\pm \frac{1}{\sqrt{u^2 - 1}} \begin{pmatrix} u & 1 \\ -1 & -u \end{pmatrix} \right)^{R,A}, \quad (5.44)$$

unde mărimea u este dată în expresia (4.56). Funcțiile Green D^R și D^A sunt date de expresiile

$$D^{R,A}(\omega) = \frac{1}{\tilde{\omega}_d^2 - \check{\Delta}^2 - \varepsilon_d^2} \begin{pmatrix} \tilde{\omega}_d + \varepsilon_d & \check{\Delta}_d \\ -\check{\Delta}_d & -\tilde{\omega}_d + \varepsilon_d \end{pmatrix}. \quad (5.45)$$

Aici

$$\tilde{\omega}_d = \varepsilon + \frac{i\Gamma u}{\sqrt{u^2 - 1}}; \quad \check{\Delta}_d = \Delta_d + \frac{i\Gamma}{\sqrt{u^2 - 1}}. \quad (5.46)$$

În formulele precedente se presupune că $\text{Im } u > 0$, $\text{Im } \sqrt{u^2 - 1} > 0$. Pentru funcții Green avansate (A) trebuie să schimbăm pe u , $\tilde{\omega}_d$, $\check{\Delta}_d$ în u^* , $\tilde{\omega}_d^*$, $\check{\Delta}_d^*$.

După trecerea la noi variabile $t = t - t'$ și $(t + t')/2 = t_R$ și dezvoltarea în serie după t , ecuația (5.40) pentru D se scrie sub forma

$$\begin{aligned} & \hat{\tau}_z \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \hat{D}(\varepsilon)}{\partial t_R} - i\varepsilon \hat{D}(\varepsilon) \right] + \left[\frac{1}{2} \frac{\partial \hat{D}(\varepsilon)}{\partial t_R} + i\varepsilon \hat{D}(\varepsilon) \right] \hat{\tau}_z - \\ & - i \left[\check{\Delta}_d \hat{D}(\varepsilon) - \hat{D}(\varepsilon) \check{\Delta}_d \right] = \\ & = -\frac{N(\varepsilon_F)}{4} \int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{R}}{V} |V_{\mathbf{p}d}|^2 \left[\hat{G}_{\mathbf{p}}(\varepsilon) \hat{D}(\varepsilon) - \hat{D}(\varepsilon) \hat{G}_{\mathbf{p}}(\varepsilon) \right]. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Funcțiile necunoscute G și D le reprezentăm sub forma

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{p}}(\varepsilon \mathbf{R} t_R) &= 2f_{\mathbf{p}}(\varepsilon \mathbf{R} t_R) \delta_{\mathbf{p}} + 2f_{1\mathbf{p}}(\varepsilon \mathbf{R} t_R) \alpha_{\mathbf{p}} - \\ & - i \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \gamma_{\mathbf{p}}}{\partial t} + i \frac{\partial f_{\mathbf{p}}}{\partial t} \frac{\partial \gamma_{\mathbf{p}}}{\partial \varepsilon}, \end{aligned} \quad (5.48)$$

unde

$$\begin{aligned} 2\delta_{\mathbf{p}} &= G^R - G^A; \quad 2\alpha_{\mathbf{p}} = G^R \tau_z - \tau_z G^A; \quad 2\gamma_{\mathbf{p}} = G^R + G^A; \\ D(\varepsilon t_R) &= 2f_d(\varepsilon t_R) \delta_d + 2f_{1d}(\varepsilon t_R) \alpha_d. \end{aligned} \quad (5.49)$$

Aici

$$2\delta_d = D^R - D^A; \quad 2\alpha_d = D^R\tau_z - \tau_z D^A; \quad 2\gamma_d = D^R + D^A.$$

Funcția G în (5.48) este integrată după ξ .

Substituind (5.48) și (5.49) în ecuația (5.47), după câteva transformări pentru funcțiile f_d și f_{1d} , care descriu impuritățile, obținem

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \text{Sp} \left\{ \alpha_d \frac{\partial f_d}{\partial t} - i \frac{\partial f_d}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial t} \delta_d + \frac{1}{2} \frac{\partial \gamma_d}{\partial \varepsilon} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial f_d}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial t} \right) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial \gamma_d}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{\partial f_d}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial t} \right) - i \frac{\partial \hat{H}_d}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} (\alpha_d f_{1d}) \right\} = \\ & = -\frac{N(\varepsilon_F)}{4} \int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{R}}{V} |V_{\mathbf{p}d}|^2 \text{Sp} \left[f_d \delta_d \delta_p + f_{1d} \alpha_d \delta_p - f_{\mathbf{p}} \delta_p \delta_d - f_{1\mathbf{p}} \alpha_p \delta_d \right], \end{aligned} \quad (5.50)$$

unde

$$\hat{H}_d(t) = -i\check{\Delta}_d(t); \quad (5.51)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \text{Sp} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_d f_{1d}) + \frac{\partial f_{1d}}{\partial t} \hat{\Delta}_d \frac{\partial \delta_d}{\partial \varepsilon} + (-2i) \hat{\Delta}_d \gamma_d f_{1d} - \right. \\ & \left. - \frac{\partial f_d}{\partial \varepsilon} \frac{\partial \hat{\Delta}_d}{\partial t} \tau_z \gamma_d - \frac{i}{2} \frac{\partial f_d}{\partial \varepsilon} \frac{\partial^2 \hat{\Delta}_d}{\partial t^2} \tau_z \frac{\partial \delta_d}{\partial \varepsilon} \right\} = \\ & = \frac{N(\varepsilon_F)}{4} \int d\Omega_{\mathbf{p}} \frac{d\mathbf{R}}{V} |V_{\mathbf{p}d}|^2 \text{Sp} \left[f_{1d} \tau_z \alpha_d \delta_p + \right. \\ & \left. + f_d \tau_z \delta_d \delta_p - f_{1\mathbf{p}} \tau_z \alpha_p \delta_d - f_{\mathbf{p}} \tau_z \delta_p \delta_d \right]. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Partea stângă a ecuațiilor pentru funcțiile de distribuție ale electronilor $f_{\mathbf{p}}$ și $f_{1\mathbf{p}}$ coincid cu expresiile corespunzătoare din lucrarea [71]. Părțile drepte ale acestor ecuații se deosebesc de partea dreaptă a expresiilor (5.50) și (5.52) prin lipsa integralelor după \mathbf{R} , unghiurile vectorului \mathbf{p} , și de asemenea prin înlocuirea factorului $N(\varepsilon_F)/4$ cu $-in_c$.

Mai departe vom studia cazul staționar. Vom pleca de la ecuația (5.47) pentru \hat{D} . Considerăm de asemenea că de unghiurile și coordonatele vectorului \mathbf{R} depinde numai funcția $G_{\mathbf{p}}$. În acest caz pentru o difuzie izotropă pe impurități, din (5.47) găsim

$$\text{Sp} \left[G_{\mathbf{p}}^R D - D G_{\mathbf{p}}^A \right] = \text{Sp} \int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \frac{d\mathbf{R}}{V} \left[D^R G_{\mathbf{p}}(\varepsilon) - G_{\mathbf{p}}(\varepsilon) D^A \right]; \quad (5.53)$$

$$\begin{aligned} & \text{Sp} \left[\tau_z \left(G_{\mathbf{p}}^R D - D G_{\mathbf{p}}^A \right) \right] = \text{Sp} \left\{ \tau_z \int \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \frac{d\mathbf{R}}{V} \times \right. \\ & \left. \times \left[D^R G_{\mathbf{p}}(\varepsilon) - G_{\mathbf{p}}(\varepsilon) D^A \right] \right\} - \frac{2i}{\Gamma} \Delta_d (D_{12} + D_{21}). \end{aligned} \quad (5.54)$$

Rezolvând ecuația matricială (5.47) pentru $\partial \hat{D} / \partial t_R = 0$, putem exprima funcția necunoscută D prin G , G^R , G^A și D^R , D^A . În particular, suma funcțiilor nediafonale care intră în (5.54) este determinată de formula

$$D_{12} + D_{21} = \frac{4i\Gamma}{\Gamma^2 + \varepsilon_d^2} \int f_{1\mathbf{p}} \frac{d\Omega_{\mathbf{p}}}{4\pi} \frac{d\mathbf{R}}{V} \left[\gamma_{p12} + 2i \frac{\Gamma \delta_{p11}}{\Gamma^2 + \varepsilon_d^2} (\varepsilon \delta_{p12} - \Delta_d \delta_{p11}) \right]. \quad (5.55)$$

Substituția formulelor (5.53), (5.54) în partea dreaptă a ecuației pentru G duce la o ecuație pentru funcția \hat{G} . Folosind relația (5.48), se poate arăta că funcțiile de distribuție $f_{\mathbf{p}}$ și $f_{1\mathbf{p}}$ în cazul staționar satisfac sistemul de ecuații [90]

$$\frac{1}{2} \text{Sp} \left(\mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \alpha_p f_{1\mathbf{p}} \right) + iI_1 + iI_2 = 0; \quad (5.56)$$

$$\frac{1}{2} \left(\alpha_p \mathbf{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} f_{\mathbf{p}} \right) + 2i\Delta\gamma_{p12} f_{1\mathbf{p}} + iA \int \frac{f_{1\mathbf{p}} d\Omega_{\mathbf{p}} d\mathbf{R}}{4\pi V} + iI_3 + iI_4 = 0, \quad (5.57)$$

unde

$$A = -2\Delta cd\gamma_{p12} + \frac{4ic\Gamma\Delta_d\delta_{p11}}{\Gamma^2 + \varepsilon_d^2} (\varepsilon\delta_{p12} - \Delta_d\delta_{p11}); \quad (5.58)$$

I_2 și I_4 sunt integralele de ciocnire cu fononii; I_1 și I_3 sunt integralele de ciocnire cu impuritățile:

$$\begin{aligned} I_1 = n_c |V_{pFd}|^2 \left\{ \text{Sp} (\delta_p \delta_d) \left(f_{\mathbf{p}}(\varepsilon) - \int \frac{f_{\mathbf{p}_1} d\Omega_{\mathbf{p}_1} d\mathbf{R}}{4\pi V} \right) + \right. \\ \left. + \text{Sp} (\alpha_p \delta_d) \left(f_{1\mathbf{p}}(\varepsilon) - \int \frac{f_{1\mathbf{p}_1} d\Omega_{\mathbf{p}_1} d\mathbf{R}}{4\pi V} \right) \right\}; \end{aligned} \quad (5.59)$$

$$\begin{aligned} I_3 = n_c |V_{pFd}|^2 \left\{ \text{Sp} (\delta_p \tau_z \alpha_d \tau_z) \left(f_{\mathbf{p}}(\varepsilon) - \int \frac{f_{\mathbf{p}_1} d\Omega_{\mathbf{p}_1} d\mathbf{R}}{4\pi V} \right) + \right. \\ \left. + \text{Sp} (\alpha_p \tau_z \alpha_d \tau_z) \left(f_{1\mathbf{p}}(\varepsilon) - \int \frac{f_{1\mathbf{p}_1} d\Omega_{\mathbf{p}_1} d\mathbf{R}}{4\pi V} \right) \right\} \end{aligned} \quad (5.60)$$

Ecuațiile (5.56) și (5.57) sunt nelocale. Presupunând că au loc egalitățile (5.37) și (5.38), obținem ecuațiile cinetice, care se deosebesc de (5.56), (5.57) prin faptul că în integralele de ciocnire lipsește integrarea după \mathbf{R} .

5.4 Pătrunderea câmpului electric în supraconductori cu stări locale nemagnetice

Una din cele mai interesante particularități ale cineticii supraconductorilor, legată de dublul semn al excitațiilor cvaziparticulelor în aceștia, este apariția diferenței de populație dintre ramura spectrului electronic și de goluri ale excitațiilor elementare în condiții de neechilibru [74]-[77]. Ca rezultat în prezența unui curent prin suprafața N-S câmpul electric longitudinal din interiorul supraconductorului este diferit de zero la distanțe care întrec cu mult lungimile caracteristice ale supraconductorului. Adâncimea de pătrundere a câmpului electric depinde de timpul de relaxare a populațiilor din cele două ramuri ale spectrului. Cauza acestei relaxări poate fi datorată diferitelor procese de difuzie (v. sec.5.1).

În această secțiune vom arăta că difuzia rezonantă a excitațiilor pe impuritățile nemagnetice duce de asemenea la suprapunerea ramurilor electronice și de goluri ale spectrului. Se calculează mărimea câmpului electric și se determină pătrunderea sa în supraconductor [90].

Presupunem existența interfeței N-S: pentru $x < 0$ avem metalul normal, iar pentru $x > 0$ supraconductorul. Câmpul electric se aplică de-a lungul axei x . Pentru $x \rightarrow -\infty$ acest câmp este egal cu E_0 . Potențialul electrostatic φ poate fi reprezentat sub forma [79]

$$\varphi = -E_0 x \theta(-x) + \tilde{\varphi}, \quad (5.61)$$

unde $\tilde{\varphi}$ este diferența potențialelor chimice ale electronilor normali și supraconductori, determinată de relația

$$e\tilde{\varphi} = -\frac{1}{4} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \tilde{f}_1(\varepsilon) (G_{11}^R - G_{11}^A). \quad (5.62)$$

Aici $\tilde{f}_1(\varepsilon)$ este partea care nu depinde de unghiuri a funcției $\tilde{f}_{1\mathbf{p}}$. Aceasta din urmă este legată de funcția $f_{1\mathbf{p}}$ prin formula

$$f_{1\mathbf{p}} = exE_0\theta(-x) \frac{\partial \text{th}(\varepsilon/2T)}{\partial \varepsilon} + \tilde{f}_{1\mathbf{p}}. \quad (5.63)$$

Pentru deducerea ecuației pe care o satisface $\tilde{f}_{1\mathbf{p}}$ vom folosi ecuațiile cinetice locale. Vom considera că timpul de relaxare a electronilor pe impurități τ este mult mai mic decât cel corespunzător relaxării pe fononi τ_ε . Atunci, neglijând în (5.56) integrala de ciocnire cu fononii, funcția $f_{\mathbf{p}}$ poate fi exprimată prin derivata funcției $f_{1\mathbf{p}}$. După substituția lui $f_{\mathbf{p}}$ în ecuația (5.57) și medierea pe unghiurile vectorului \mathbf{p} , pentru \tilde{f}_1 , când $\varepsilon \gg \Delta$ și $\Gamma \gg \varepsilon$, obținem ecuația

$$D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{f}_1 - 2i\gamma_{p12} \Delta \tilde{f}_1 - i\langle A \rangle \tilde{f}_1 = DeE_0 \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\text{th} \frac{\varepsilon}{2T} \right) \delta(x) + iI_4, \quad (5.64)$$

unde $\langle \dots \rangle$ înseamnă medierea pe unghiurile vectorului \mathbf{p} ; D este coeficientul de difuzie, ($D = v_F^2 \tau_p / 3$, $\tau_p = [\pi N(\varepsilon)(\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)] / (2n_c \Gamma^2)$).

La distanțe mari de interfață, când $x \gg \xi(T)$, efectele de suprafață pot fi neglijate. Atunci ecuația (5.64) capătă forma

$$D \frac{d^2}{dx^2} \tilde{f}_1 - 2\sigma_p \Delta_g (1+c) \tilde{f}_1 - iI_4 = 0, \quad (5.65)$$

unde $\sigma_p = \lambda \alpha$. Mărimile α și c , λ , Δ_g sunt determinate de formulele (4.57), (4.62), (4.77) respectiv.

Când $\hbar/\tau_\varepsilon \gg 2\Delta_g \sigma_p (1+c)$, rezultatul pentru adâncimea de pătrundere a câmpului electric în supraconductor are aceeași formă ca și în lucrările [63, 79], cu singura diferență că Δ se înlocuiește cu parametrul renormat Δ_g :

$$l_E = \left(\frac{4DT\tau_\varepsilon}{\pi\Delta_g} \right)^{1/2}. \quad (5.66)$$

Pentru valori nu prea mari ale lui Γ este posibilă inegalitatea inversă

$$\hbar\tau_\varepsilon^{-1} \ll 2\sigma_p \Delta_g (1+c) = \frac{4n_c \Gamma^2 \Delta^2 (1+d)^2}{\pi N(\varepsilon_F) (\Gamma^2 + \varepsilon_d^2)^2} \quad (5.67)$$

care, de exemplu, pentru $\Gamma \sim 10^{-1}$ eV, $N(\varepsilon_F) \sim 5$ stări/(eV.atom), $\Delta = 10^{-3}$ eV și $d = 5$ se reduce la următoarea limitare pentru concentrația de impurități:

$$n_c > (\tau_\varepsilon)^{-1} \cdot 10^{-12} c.$$

Când are loc inegalitatea (5.67), integrala de ciocnire cu fononii poate fi neglijată și soluția ecuației (5.65) se caută sub forma

$$\tilde{f}_1(x > 0) = C_+ \exp\left(-\frac{x}{\sqrt{D\tau_Q}}\right) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\text{th} \frac{\varepsilon}{2T}\right) + Z(x, \varepsilon); \quad (5.68)$$

$$\tilde{f}_1(x < 0) = C_- \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\text{th} \frac{\varepsilon}{2T}\right). \quad (5.69)$$

Funcția $z(x, \varepsilon)$ în cazul de față este legată numai de variația gap-ului în apropierea interfeței S-N.

Pentru $x \gg \xi(T)$, $Z(x, \varepsilon) = 0$ și din ecuația (5.65), când $I_4 = 0$, obținem

$$\hbar\tau_Q^{-1} = 2\sigma_p\Delta_g(1+c). \quad (5.70)$$

Constantele C_+ , C_- se determină din condițiile la limită, care conțin termeni ce depind de variația lui Δ în apropierea graniței S-N.

Ecuațiile pentru funcțiile F_1^R și F_1^A , care determină pe γ_{p12} se scriu sub următoarea formă:

$$\begin{aligned} \frac{\mathbf{p}}{m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - 2ie\mathbf{A} \right) F_1^R - 2i\varepsilon F_1^R + 2i\Delta g_1^R &= -2i|V|^2 n_c \left[D_{11}^R F_1^R - D_{12}^R g_1^R \right]; \\ \frac{\mathbf{p}}{m} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - 2ie\mathbf{A} \right) F_1^A - 2i\varepsilon F_1^A + 2i\Delta g_1^A &= -2i|V|^2 n_c \left[D_{11}^A F_1^A - D_{12}^A g_1^A \right]. \end{aligned} \quad (5.71)$$

Integrala de ciocnire cu fononii în (5.71) s-a neglijat.

Pentru $\varepsilon \gg \Delta$ medierea pe unghiurile vectorului \mathbf{p} a soluției ecuației (5.71) are forma [79]

$$\langle F_1^R + F_1^A \rangle = \frac{Dd^2\Delta/dx^2}{\varepsilon^2(1+4\tau_p^2\varepsilon^2)} + \frac{i\Delta_0\alpha v_F}{4\varepsilon^2} \int_{-1}^1 |u| e^{\frac{2ix\varepsilon}{vu}} du. \quad (5.72)$$

Aici

$$\Delta(x) = \Delta_0 \text{th} \frac{x}{\sqrt{2}\xi(T)}; \quad \alpha = (\sqrt{2}\xi(T))^{-1}. \quad (5.73)$$

Expresia (5.72) este scrisă pentru o mărime arbitrară a lungimii drumului liber mijlociu al electronilor. În limita supraconductorului pur primul termen din partea dreaptă a ecuației (5.72) tinde către zero și rămâne numai al doilea, care este legat de reflexia Andreev pe suprafața N-S [78, 93].

Pentru a determina constanta C_+ , trebuie să înmulțim expresia (5.72) cu $-i\Delta(x)$ și să o substituim în (5.64). Integrând (5.64) de la $-L$ la L , unde $\xi(T) < L < l$, obținem pentru $|\varepsilon| \gg \Delta$

$$C_+ = C_- = -\frac{eE_0}{(D\tau_Q)^{-1/2} + \frac{I_0}{\varepsilon^2(1+4\tau_p^2\varepsilon^2)} + \frac{\Delta_0^2\alpha^2 v_F^3}{32\varepsilon^4 D}}, \quad (5.74)$$

unde

$$I_0 = \int_0^\infty \left(\frac{d\Delta(x)}{dx} \right)^2 dx.$$

Pentru determinarea lui C_- și C_+ mărime $z(x, \varepsilon)$ se neglijează, deoarece corecția care o aduce pentru energii mai mari decât Δ este mică.

Pentru a determina câmpul $E(x)$ pentru orice x , trebuie cunoscută derivata în raport cu x a lui $Z(x, \varepsilon)$. Substituind (5.68) în (5.64), după câteva transformări avem

$$\begin{aligned} \frac{E(x)}{E_0} &= \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\text{th} \frac{\varepsilon}{2T} \right) \frac{1}{1 + \frac{\alpha v_F^2}{8\varepsilon^2} + bI_0} \times \\ &\times \left[e^{-\frac{x}{\sqrt{D\tau_Q}}} - a \int_x^\infty y dy \int_{-1}^1 |z| dz e^{\frac{2i\varepsilon y}{vz}} - bI \right], \end{aligned} \quad (5.75)$$

unde

$$\begin{aligned} a &= \frac{\Delta_0^2 v_F \sqrt{\frac{\tau_Q}{D}}}{8\varepsilon^2 \xi^2(T)}; & b &= \frac{D\tau_Q}{\varepsilon^2(1 + 4\tau_p^2 \varepsilon^2)}; \\ I &= \int_x^\infty \Delta(x) \frac{d^2 \Delta}{dx^2} dx \end{aligned}$$

Pentru $x \gg \xi(T)$

$$\frac{E(x)}{E_0} = e^{-\frac{x}{\sqrt{D\tau_Q}}} \int_0^\infty d\varepsilon \left(\text{th} \frac{\varepsilon}{2T} \right) \left[1 + \frac{\alpha v_F^2}{8\varepsilon^2} + bI_0 \right]^{-1}. \quad (5.76)$$

Numitorul în (5.76) caracterizează ecranarea câmpului electric în supraconductor. Adâncimea de pătrundere a acestuia este $l_E = \sqrt{D\tau_Q}$, unde τ_Q este timpul de relaxare a diferenței de populații, condiționată de difuzia rezonantă pe impurități. Aceasta este proporțională cu Δ^2 și depinde esențial de lărgimea nivelului de impuritate Γ .

Concluzii

1. S-a prezentat teoria proceselor de neechilibru și nestaționare în aliajele supraconductoare cu stări de impuritate locale nemagnetice. Pentru acesta s-a folosit tehnica de diagrame a lui Keldăș. Pe baza acestei tehnici s-a obținut sistemul de ecuații integro-diferențiale pentru funcțiile Green matriciale ale electronilor de conducție \hat{g} și a impurităților localizate nemagnetice \hat{D} , descrise de modelul Anderson.

S-a introdus funcția de distribuție pentru electroni f_p și pentru impurități f_d . În aproximația cvazi-clasică și în cazul metalului normal s-a obținut pentru funcțiile f_p și f_d sistemul de ecuații cinetice cu integralele de ciocnire, care iau în considerație

difuzia rezonantă a electronilor pe atomii impurităților nemagnetice. S-a arătat că numai în cazul staționar sistemul de ecuații pentru f_p și f_d se reduce la o singură ecuație pentru f_p . Aceste ecuații cinetice sunt nelocale: integralele de ciocnire conțin o integrare după variabila \mathbf{R} , de care depinde funcția f_p în cazul neomogen. Ecuațiile locale pentru modelul Anderson se pot obține numai în acel caz, când se presupune că interacția electronilor cu atomii de impuritate este de contact și pentru funcția Green a atomilor de impuritate $\hat{D}(R_i R_j)$ satisface relația

$$\hat{D}(R_i R_j) = \hat{D}(R_i R_i) \delta_{R_i R_j}.$$

S-a stabilit că pentru difuzia rezonantă a electronilor pe impurități, timpul de relaxare a electronilor depinde de energia lor.

2. Ecuațiile respective pentru funcțiile Green matriciale \hat{g} și \hat{D} , și de asemenea și ecuațiile cinetice s-au generalizat pentru cazul stării supraconductoare.

PROPRIETĂȚILE TERMODINAMICE ȘI CINETICE ALE MATERIALELOR CU POLARIZARE ELECTRICĂ TOTALĂ SAU PARȚIALĂ A SPECTRULUI ELECTRONIC

Pe baza analogiei aparatului matematic care descrie starea de supraconductor și cea de izolator excitonic, se calculează coeficientul forței termoelectrice a izolatorului excitonic. Calculul se face pe baza modelului semimetalului a lui Keldâș și Kopaev. După tranziția la starea dielectrică în acest model pe întreaga suprafață Fermi se stabilește gap-ul dielectric, care împiedică formarea perechilor Cooper.

În același timp există o serie de date experimentale, care pot fi explicate presupunând că după tranziția structurală gap-ul energetic apare numai pe porțiuni ale suprafeței Fermi. Temperatura de tranziție în starea supraconductoare în acest caz depinde esențial de raportul densității de stări electronice de pe acea parte a suprafeței Fermi, unde se formează gap-ul dielectric, și de restul acestei suprafețe, unde nu avem gap dielectric. Vom examina unele proprietăți termodinamice ale supraconductorului, când are loc o tranziție dielectrică parțială.

6.1 Forța termoelectrică diferențială a izolatorului excitonic

6.1.1 Introducere

În lucrarea lui Keldâș și Kopaev [94] se arată că semimetalesle cu forme care coincid ale suprafeței Fermi pentru electroni și goluri sunt instabile în raport cu formarea de perechi electron-gol pentru o interacție atractivă oricât de slabă. Aceasta duce la faptul că pentru o anumită temperatură critică T_g se realizează tranziția la starea de izolator excitonic cu un gap în spectrul energetic [95]. Considerarea tranzițiilor interbandă [96] fixează faza parametrului de ordine a izolatorului excitonic și face imposibilă starea cu flux omogen de particule. Se produce reconstrucția stării dar nu există suprafluiditate. Când atracția electron-gol este mult mai mare decât termenii interacției care corespund tranziției interbenzi, considerarea ultimilor

duce la o mică corecție la T_g și la alte mărimi, care descriu această reconstrucție a stării [95].

Între proprietățile supraconductorului și ale izolatorului excitonic există o analogie bine determinată. Prezența unei impurități încărcate, care interacționează puternic cu excitațiile, duce, ca și în cazul supraconductorului cu impurități magnetice, la un nivel energetic local în interiorul gap-ului izolatorului excitonic [97]. La o concentrație finită a impurităților aceste nivele se lărgesc formând o bandă de impurități. Analog cazului supraconductorului unde impuritățile magnetice produc distrugerea stării supraconductive [2], o cantitate determinată de impurități încărcate distrug starea de izolator excitonic [98, 99].

Impuritățile neutre cu masele egale ale electronilor m_e și a golurilor m_h nu influențează proprietățile termodinamice ale izolatorului excitonic. Dar când aceste mase sunt diferite, impuritățile neutre influențează esențial mărimea gap-ului energetic Δ , temperatura de tranziție T_g și alte mărimi [98]. În acest caz amplitudinea de difuzie a cvaziparticulelor pe atomii de impuritate pentru $m_e \neq m_h$ sunt diferite deja în aproximația Born, iar în aproximații superioare există un termen impar în energie.

Deși între spectrul excitațiilor supraconductorului și izolatorului excitonic există analogii, proprietățile lor cinetice într-o serie de cazuri sunt diferite. Astfel, absorbția ultrasunetului cu frecvențe $\omega < 2\Delta$ are, spre deosebire de supraconductor, un maxim sub T_g [100]. Acest lucru este condiționat de faptul că perturbația strică simetria electron-gol, și factorii de coerență intră cu semnul plus, forma lor fiind aceeași ca și pentru viteza de relaxare a spinului nuclear în supraconductor. Conducția electrică și cea termică în izolatorul excitonic scade monoton cu scăderea temperaturii [101], astfel că factorii de coerență intră cu semnul minus. În acest caz expresia pentru conducția termică este analoagă cu expresia corespunzătoare pentru supraconductor [46, 47].

Din lucrarea [101] rezultă că factorii de coerență la calculul coeficientului forței termoelectrice au aceeași formă ca și pentru conducția termică și cea electrică. De aceea se poate spune că coeficientul termoelectric η în faza excitonică scade de asemenea monoton sub T_g . În această secțiune se arată că există două cauze care duc la creșterea lui η în izolatorul excitonic [102]-[104].

Când timpul de relaxare este par în raport cu energia, coeficientul termoelectric al izolatorului excitonic η este de ordinul lui T/ε_F . Același ordin de mărime îl are η și în metalele normale și în supraconductori cu impurități nemagnetice [105]. Ieșirea din cadrul aproximației Born pentru calculul amplitudinii de difuzie a electronilor pe impurități magnetice în metalul normal, duce la o forță termoelectrică diferențială diferită de zero deja în ordinul zero în T/ε_F . Acest lucru este condiționat de faptul că în timpul de relaxare apar termeni impari în energie. Prezența acestor termeni în amplitudinea de difuzie a excitațiilor normale ale supraconductorului duce la creșterea coeficientului forței termoelectrice față de starea normală [106]-[108]. Acest lucru se explică prin creșterea densității de stări din apropierea gap-ului și nu este legat de prezența curenților supraconductor omogen. De aceea un fenomen analog este posibil și în izolatorul excitonic și este una din cauzele care duc la creșterea lui η sub T_g .

În această secțiune se arată că termenul impar în energie din amplitudinea de

difuzie duce la faptul că forța termoelectrică a izolatorului excitonic devine de ordinul zero în raport cu T/ε_F și crește pentru $T < T_g$, când numărul excitațiilor normale nu este exponențial mic. Un astfel de termen impar în energie apare în amplitudinea de difuzie a excitațiilor normale pe impurități la luarea în considerație a ordinilor superioare la interacția cu impuritățile în comparație cu difuzia Born.

A doua cauză a creșterii mărimii η sub temperatura tranziției structurale este legată de faptul că în expresia pentru η apar termeni suplimentari, a căror factori de coerență au semnul plus, atunci când amplitudinile de difuzie ale electronilor și golorilor pe impurități sunt diferite. Aceasta corespunde creșterii lui η , chiar dacă ne limităm la aproximația Born.

6.1.2 Funcția Green a izolatorului excitonic cu impurități

Pentru izolatorul excitonic pur, hamiltonianul sistemului în reprezentarea electron și gol are forma [95, 97]

$$H^0 = \sum_{\mathbf{k}, \alpha=e,h} \varepsilon_\alpha(\mathbf{k}) a_{\alpha,\mathbf{k}}^+ a_{\alpha,\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} (\Delta a_{h,\mathbf{k}}^+ a_{e,-\mathbf{k}}^+ + h.c.), \quad (6.1)$$

unde

$$\varepsilon_\alpha(\mathbf{k}) = (k^2 - k_{\alpha F}^2)/2m_\alpha, \quad \alpha = e, h.$$

Starea, descrisă de hamiltonianul (6.1), este degenerată în raport cu structura de singlet sau de triplet a perechii electron-gol, de aceea indicii de spin în (6.1) au fost omiși. Numărul electronilor și a golorilor este egal, atunci $k_{eF} = k_{hF}$. Termenul cu Δ în (6.1) descrie formarea condensatului de perechi electron-gol. Introducem vectorul linie ψ_k^+ și vectorul coloană ψ_k , indicați pentru determinarea funcțiilor Green ale izolatorului excitonic

$$\psi_k^+ = (a_{e,k}^+, a_{h,-k}); \quad \psi_k = \begin{pmatrix} a_{e,k} \\ a_{h,-k}^+ \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Introducem funcția Green retardată

$$\hat{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(t, t') = -i\theta(t - t') \langle [\{\psi_{\mathbf{k}}(t), \psi_{\mathbf{k}'}^+(t')\}] \rangle. \quad (6.3)$$

Zittarz [98] a găsit funcțiile Green ale izolatorului excitonic cu impurități, limitându-se la aproximația Born. Spre deosebire de el, noi vom găsi funcțiile Green cu ajutorul matricii t . În această metodă se iau în considerație automat aproximațiile superioare.

Începem cu funcția Green $\hat{G}_{kk'}(\omega)$ a izolatorului excitonic pur. După transformarea Fourier găsim

$$\hat{G}_{kk'}(\omega) = \frac{\delta_{kk'}}{\omega\tau_0 - \hat{\varepsilon}_k\tau_3 + \Delta\tau_1} = G_k^0(\omega)\delta_{kk'}, \quad (6.4)$$

unde

$$\hat{\varepsilon}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_e(k) & 0 \\ 0 & \varepsilon_h(k) \end{pmatrix} \quad (6.5)$$

Să examinăm cazul în care izolatorul electronic are o singură impuritate. Hamiltonianul de interacție a impurității cu electronii și golurile este

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{I} \tau_3 \psi_{\mathbf{k}}, \quad (6.6)$$

unde

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} I_e & 0 \\ 0 & I_h \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

$I_{e,h}$ este elementul de matrice al difuziei pe impuritate, pe care o vom presupune mai departe izotropă.

După efectuarea transformării Fourier, ecuația de mișcare pentru funcția Green are forma

$$\left(\omega - \hat{\varepsilon}_k \tau_3 + \Delta \tau_1 \right) \hat{G}_{kk'}(\omega) = \delta_{kk'} \tau_0 + \sum_p \hat{I} \tau_3 \hat{G}_{pk'}(\omega). \quad (6.8)$$

Suma după \mathbf{p} din partea dreaptă a ecuației (6.8) se poate calcula după înmulțirea ambilor membri ai acestei ecuații cu $\hat{I} \tau_3 \hat{G}_k^0$ și efectuarea sumei după k :

$$\sum_p \hat{I} \tau_3 \hat{G}_{pk'}(\omega) = \left[1 - \sum_k \hat{I} \tau_3 \hat{G}_k^0 \right]^{-1} \hat{I} \tau_3 \hat{G}_{k'}^0(\omega) \quad (6.9)$$

Substituind (6.9) în (6.8) și înmulțind ambii membri ai ecuației (6.8) cu $\hat{G}_k^0(\omega)$, găsim

$$\hat{G}_{kk'}(\omega) = \hat{G}_k^0(\omega) \delta_{kk'} + \hat{G}_k^0(\omega) t(\omega) \hat{G}_{k'}^0(\omega) \quad (6.10)$$

unde matricea t este dată de relația

$$t(\omega) = \left[1 - \sum_k \hat{I} \tau_3 \hat{G}_k^0(\omega) \right]^{-1} \hat{I} \tau_3 \quad (6.11)$$

Calculul acestei mărimi cu ajutorul relației (6.5) ne dă

$$t(\omega) = \frac{\hat{R}}{\alpha^2(\omega^2 - \gamma^2)}; \quad \gamma^2 = \bar{\Delta}^2 \frac{1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h}{\alpha}; \quad (6.12)$$

$$\alpha = (1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h)^2 + \pi^2 (N_e I_e - N_h I_h)^2, \quad (6.13)$$

N_e , N_h sunt densitățile de stări ale electronilor și golurilor din semimetal la suprafața Fermi pentru o direcție a spinului electronului:

$$\bar{\Delta} = 2 \frac{\sqrt{m_e m_h}}{m_e + m_h} \Delta.$$

Elementele matricii \hat{R} sunt:

$$\begin{aligned} R_{11} &= \sqrt{\bar{\Delta}^2 - \omega^2} \pi \omega N_e I_e^2 (1 + \pi^2 N_h^2 I_h^2) + \\ &\quad + I_e (\omega^2 - \bar{\Delta}^2) (1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h) - \pi^2 \omega^2 N_h I_h (N_e I_e - N_h I_h); \\ R_{12} &= R_{21} = \pi N_e I_e \bar{\Delta} \sqrt{\frac{m_h}{m_e}} \left\{ \pi \omega (N_e I_e - N_h I_h) - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\bar{\Delta}^2 - \omega^2} (1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h) \right\}; \\ R_{22} &= \pi \omega N_h I_h^2 \sqrt{\bar{\Delta}^2 - \omega^2} (1 + \pi^2 N_e^2 I_e^2) - I_h (\omega^2 - \bar{\Delta}^2) \times \\ &\quad \times (1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h) - \pi^2 \omega^2 N_e I_e (N_e I_e - N_h I_h). \end{aligned}$$

Din expresia pentru matricea t se vede că în prezența unei impurități în izolatorul excitonic apare un nivel local cu energia $\omega = \gamma$.

În cazul a mai multor impurități există mai multe nivele locale. Când concentrația de impurități este finită, aceste nivele se lărgesc, formând o bandă de impurități.

Funcția Green a izolatorului excitonic cu concentrație mică de impurități se determină din relația

$$\hat{G}_k(\omega) = \frac{1}{(\hat{G}_k^0(\omega))^{-1} - \Sigma_k(\omega)} \quad (6.14)$$

Bara înseamnă medierea pe poziția impurităților. În cazul concentrației mici de impurități, calculul operatorului de masă $\Sigma_k(\omega)$ se poate reduce la calculul matricii t a sistemului, care conține numai o singură impuritate. Calculul arată că soluția selfconsistentă a ecuației (6.14) are forma

$$\hat{G}_{kk}(\omega) = \frac{1}{\hat{\omega} - \hat{\varepsilon}\tau_3 + \bar{\Delta}\tau_1} \quad (6.15)$$

unde

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} \tilde{\omega}_e & 0 \\ 0 & \tilde{\omega}_h \end{pmatrix}; \quad \hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_e & 0 \\ 0 & \tilde{\varepsilon}_h \end{pmatrix}. \quad (6.16)$$

Pe baza ecuațiilor (6.14)-(6.16) pentru funcția Green obținem în final

$$\bar{G}_{kk'}(\omega) = \begin{pmatrix} \tilde{\omega}_h(\omega) + \tilde{\varepsilon}_h(\omega) & -\bar{\Delta}(\omega) \\ -\bar{\Delta}^*(\omega) & \tilde{\omega}_e(\omega) - \tilde{\varepsilon}_e(\omega) \end{pmatrix} P_1 \delta_{kk'}; \quad (6.17)$$

$$\bar{\varepsilon}_{e,h} = \varepsilon_{e,h}(k) - \chi_{e,h}(\omega), \quad (6.18)$$

unde

$$P_1 = \frac{1}{(\tilde{\omega}_e - \tilde{\varepsilon}_e)(\tilde{\omega}_h + \tilde{\varepsilon}_h) - |\bar{\Delta}|^2}; \quad (6.19)$$

$$\tilde{\omega}_{e,h} = \omega + in_c \frac{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\bar{\Delta}_m|^2} \pi \tilde{\omega} N_{e,h} I_{e,h}^2 (1 + \pi^2 N_{h,e}^2 I_{h,e}^2)}{a(\tilde{\omega}^2 - \gamma^2)}; \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} \bar{\Delta}^*(\omega) &= \Delta^* + \frac{2n_c N_e I_e I_h m_h \pi \bar{\Delta}^*}{(m_e + m_h)(\tilde{\omega}^2 - \gamma^2) a} [\pi \tilde{\omega} (I_e N_e - I_h N_h) + \\ &\quad + i(1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h) \sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\bar{\Delta}_m|^2}]; \end{aligned} \quad (6.21)$$

$$\chi_{e,h}(\omega) = \pm \frac{n_c \pi^2 \tilde{\omega}^2 I_e I_h N_{h,e} (I_e N_e - I_h N_h)}{(\tilde{\omega}^2 - \gamma^2) a} - n_c I_{e,h} (\tilde{\omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2) \frac{1 + \pi^2 N_e N_h I_e I_h}{a(\tilde{\omega}^2 - \gamma^2)}; \quad (6.22)$$

$$\tilde{\omega} = \frac{(\tilde{\omega}_e + \chi_e) m_e + (\tilde{\omega}_h - \chi_h) m_h}{(m_e + m_h)}; \quad (6.23)$$

$$\tilde{\Delta}_m = \frac{2\tilde{\Delta} (m_e m_h)^{1/2}}{(m_e + m_h)}; \quad \Delta_m \equiv \bar{\Delta}.$$

Pentru a obține funcțiile Green de temperatură, trebuie ca în (6.17) să facem transformarea $\omega \rightarrow i\omega$, $\Delta \rightarrow i\Delta_n$, $\tilde{\omega} \rightarrow i\tilde{\omega}_n$, $\tilde{\Delta} \rightarrow i\tilde{\Delta}_n$.

6.1.3 Coeficientul termoelectric al izolatorului excitonic

În izolatorul excitonic sub influența unui gradient de temperatură și a unui câmp electric apare un curent al excitațiilor normale:

$$j = \sigma^e E - \eta_e \nabla T. \quad (6.24)$$

La întreruperea circuitului $j = 0$, atunci câmpul termoelectric se determină din formula

$$E = \eta_e \nabla T / \sigma^e. \quad (6.25)$$

Conductivitatea σ^e a izolatorului excitonic este mai mică decât cea a semimetalului σ^n .

Să calculăm coeficientul termoelectric η_e . După cum s-a arătat în [106]-[109], coeficientul termoelectric se exprimă prin transformata Fourier $R(q, \omega)$ a funcției Green retardate, formată din operatorul densității de curent $\mathbf{j}(\mathbf{x})$ și densitatea fluxului de energie $\mathbf{j}^H(\mathbf{x})$. În cazul semimetalului, când avem două tipuri de purtători (electroni și goluri),

$$\begin{aligned} \mathbf{j}(x) &= -\frac{e}{2i} \left\{ \psi_e^+(x) \frac{\nabla}{m_e} \psi_e(x) - \left(\frac{\nabla}{m_e} \psi_e^+(x) \right) \psi_e(x) - \right. \\ &\quad \left. - \psi_h^+(x) \frac{\nabla}{m_h} \psi_h(x) + \left(\frac{\nabla}{m_h} \psi_h^+(x) \right) \psi_h(x) \right\}; \\ \mathbf{j}^H(x) &= -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=e,h} \frac{1}{m_\alpha} \left[\left(\frac{d}{dt} \psi_\alpha^+(x) \right) \nabla \psi_\alpha(x) + \right. \\ &\quad \left. + \left(\nabla \psi_\alpha^+(x) \right) \frac{d}{dt} (\psi_\alpha(x)) \right]. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Să introducem funcția Green de temperatură

$$\mathcal{R}(x, x') = -\langle T(\mathbf{j}(\mathbf{x}, t), \mathbf{j}^H(\mathbf{x}', t')) \rangle. \quad (6.27)$$

Notăm prin $\mathcal{R}(\mathbf{q}, \omega_n)$ transformata Fourier a funcției $\mathcal{R}(x, x')$, ω_n ia valorile $2\pi nT$. Funcțiile $\mathcal{R}(\mathbf{q}, \omega_n)$ și $\mathcal{R}(q, \omega + i\delta)$ sunt legate una de alta prin relația

$$\mathcal{R}(q, \omega + i\delta) = \mathcal{R}(q, -i\omega + \delta) \quad (6.28)$$

Folosind notația

$$\psi^+(x) = (\psi_e^+(x), \psi_h(x)); \quad \psi(x) = (\psi_e(x), \psi_h^+(x))$$

$\mathcal{R}(x, x')$ poate fi reprezentat sub forma

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(1, 2) &= \frac{e}{4}(\nabla_1 - \nabla'_1) \left(\frac{d}{d\tau'_2} \nabla_2 + \frac{d}{d\tau_2} \nabla'_2 \right) \times \\ &\times \langle \mathbf{T}(\psi_i(1)\psi_k(2)\psi_e^+(2')\psi_j^+(1')) \Big|_{\substack{1'=1^+ \\ 2'=2^+}}^{\hat{m}\tau_3}_{j_i}(\hat{m}\tau_3)_{kl}; \end{aligned}$$

$$\hat{m} = \begin{pmatrix} m_e & 0 \\ 0 & m_h \end{pmatrix}; \quad \mathbf{1} = (\mathbf{r}_1, t_1)$$

În aproximația Hartree-Fock obținem

$$\mathcal{R}(1, 2) = \frac{e}{4}(\nabla_1 - \nabla'_1) \left(\frac{d}{d\tau'_2} \nabla_2 + \frac{d}{d\tau_2} \nabla'_2 \right) \text{Sp} \mathcal{R}(1, 2', 2, 1') \Big|_{\substack{1'=1^+ \\ 2'=2^+}}$$

$$\mathcal{R}(1, 2', 2, 1') = \hat{m}\tau_3 g(1, 2') \hat{m}\tau_3 g(2, 1'),$$

$g(1, 2)$ este funcția Green uniparticulă termodinamică. După medierea pe pozițiile impurităților în ipoteza că difuzia pe impurități este izotropă, funcția

$$\mathcal{R}(q=0, \nu_m) = \frac{e}{4\beta} \sum_{\omega_n, \mathbf{k}} (2i\omega_n - i\nu_m) k^2 \text{Sp} \overline{\mathcal{R}(\mathbf{k}, \omega_n, \omega_n - \nu_m)},$$

unde

$$\overline{\mathcal{R}(\mathbf{k}, \omega_n, \omega_n - \nu_m)} = \hat{m}\tau_3 \overline{g(\mathbf{k}, \omega_n)} \hat{m}\tau_3 \overline{g(\mathbf{k}, \omega_n - \nu_m)}. \quad (6.29)$$

Folosind reprezentarea spectrală pentru $g(\mathbf{q}, \omega_n)$ [54]

$$g(\mathbf{q}, \omega_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\text{Im} \hat{a}(\mathbf{q}, \omega)}{\omega - i\omega_n}, \quad \hat{a}(\mathbf{q}, \omega) = \text{Im} g(\mathbf{q}, \omega + i\delta)$$

și formula de sumare a lui Poisson pentru frecvențele fermionice $\omega_n = (2n+1)\pi T$, putem efectua sumarea după ω_n în expresia (6.29):

$$\begin{aligned} \mathcal{R}(q=0, \nu_m) &= \frac{e}{4} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \int \frac{d\omega'}{2\pi} \left\{ \frac{2\omega' - i\nu_m}{\omega' - i\nu_m - \omega} \times \right. \\ &\times \left. \frac{1}{e^{\beta\omega'} + 1} + \frac{2\omega + i\nu_m}{(\omega + i\nu_m - \omega')(e^{\beta\omega} + 1)} \right\} k^2 \times \\ &\times \text{Sp} \left\{ \hat{m}\tau_3 \hat{a}(\mathbf{k}, \omega) \hat{m}\tau_3 \hat{a}(\mathbf{k}, \omega') \right\}. \end{aligned} \quad (6.30)$$

Pe baza relațiilor (6.28) și (6.30), după integrarea pe impulsuri găsim

$$\begin{aligned}
\eta_e = & -\frac{e}{12T^2\pi} \left\{ \frac{2m_e}{m_e + m_h} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega v_e^2(\mu_e + \omega) N_e(\mu_e + \omega) d\omega}{\text{ch}^2 \frac{\beta\omega}{2} \text{Im} \varepsilon_{e_1}(\omega) \text{Im} \varepsilon_{e_2}(\omega)} \times \right. \\
& \times \left[\text{Im} \sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\tilde{\Delta}|^2} \left(1 + \frac{\tilde{\omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}{|\tilde{\omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2} \right) - 2 \text{Im} d_1(\omega) \text{Re} \frac{\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}} \right] - \\
& - \frac{2m_h}{m_e + m_h} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega v_h^2(\mu_h + \omega) N_h(\mu_h + \omega) d\omega}{\text{ch}^2 \frac{\beta\omega}{2} \text{Im} \varepsilon_{h_1}(\omega) \text{Im} \varepsilon_{h_2}(\omega)} \times \\
& \times \left[\text{Im} \sqrt{\tilde{\Omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2} \left(1 + \frac{|\tilde{\Omega}|^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}{|\tilde{\Omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2} \right) - \right. \\
& \left. - 2 \text{Im} d_2(\omega) \text{Re} \frac{\tilde{\Omega}}{\sqrt{\tilde{\Omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}} \right] \left. \right\}, \tag{6.31}
\end{aligned}$$

unde

$$\begin{aligned}
\mu_{e,h} &= \frac{k_F^2}{2m_{e,h}}; \\
\tilde{\Omega} &= \frac{m_e(\tilde{\omega}_e - \chi_e) + m_h(\tilde{\omega}_h + \chi_h)}{m_e + m_h}; \\
d_1 &= \frac{m_e(\tilde{\omega}_e + \chi_e) - m_h(\tilde{\omega}_h - \chi_h)}{m_e + m_h}; \\
d_2 &= \frac{m_h(\tilde{\omega}_h + \chi_h) - m_e(\tilde{\omega}_e - \chi_e)}{m_e + m_h}; \\
\varepsilon_{e_{1,2}} &= d_1 \pm \sqrt{\tilde{\Omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}; \\
\varepsilon_{h_{1,2}} &= d_2 \pm \sqrt{\tilde{\Omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}.
\end{aligned}$$

În cazul semimetalului, când $\Delta = 0$ și $\text{Im} \chi_{e,h} = 0$, în modelul electronilor liberi și a gurilor libere obținem expresia cunoscută

$$\begin{aligned}
\eta_n = & \frac{2}{9} eT\pi^2 \left[\frac{\partial}{\partial \omega} (N_e(\mu_e + \omega) v_e^2(\mu_e + \omega) \tau_e(\mu_e + \omega)) \Big|_{\omega=0} - \right. \\
& \left. - \frac{\partial}{\partial \omega} (N_h(\mu_h + \omega) v_h^2(\mu_h + \omega) \tau_h(\mu_h + \omega)) \Big|_{\omega=0} \right],
\end{aligned}$$

unde

$$\text{Im} \tilde{\omega}_{e,h} = \frac{1}{2\tau_{e,h}} = \pi n_e I_{e,h}^2 N_{e,h}.$$

Expresia (6.31) se deosebește ca formă de formula obținută în lucrarea [101], prin prezența termenilor proporționali cu $\text{Im} d_1$ și $\text{Im} d_2$. Tocmai de acești termeni

este legată creșterea forței termoelectrice în aproximația Born când

$$\chi_{e,h} = 0, \quad \gamma = \Delta_m, \quad \tilde{\Omega} = \tilde{\omega} = \tilde{z} = \frac{\tilde{\omega}_e m_e + \tilde{\omega}_h m_h}{m_e + m_h},$$

$$\text{Im } d_{1,2} = \frac{m_{e,h} \tilde{\omega}_{e,h} - m_{h,e} \tilde{\omega}_{h,e}}{m_e + m_h}.$$

Ultima mărime nu este nulă când

$$I_{e,h} N_{e,h} m_{e,h} \neq I_{h,e} N_{h,e} m_{h,e}.$$

Din formula (6.31) se vede că prin egalitatea tuturor parametrilor e și h , mărimea η_e se anulează. De aceea când η_e este nenulă există întotdeauna perechi de parametri care nu sunt egali, ceea ce duce la faptul că $\text{Im } d_{1,2} \neq 0$. Pentru exemplificare luăm $m_1 \neq m_2$.

Calculul integralei după omega în (6.31) se face prin metoda dezvoltată în lucrarea [42]. Presupunem că

$$\frac{N_e m_e - N_h m_h}{2N_{e,h} m_{e,h}} (n(\omega) - 1) \ll 1, \quad (6.32)$$

unde

$$n(\omega) = \text{Re} \frac{u(\omega)}{\sqrt{u^2(\omega) - 1}}.$$

Ecuția pentru $u(\omega)$ este analoagă cu expresia obținută în lucrarea [2], pentru supraconductorul cu impurități magnetice

$$u = \frac{\omega}{\Delta_m} + \frac{i\sigma_n u}{\sqrt{u^2 - 1}}; \quad u = \frac{\tilde{z}(\omega)}{\Delta_m(\omega)}.$$

Parametrul distrugerii perechilor σ_n pentru impurități neutre ($J = I_e = I_h$) are forma

$$\sigma_n = \frac{n_c \pi J^2 (m_e - m_h) (N_e - N_h)}{\Delta_m (m_e + m_h)}.$$

Pentru impurități încărcate ($J = I_e = -I_h$), care pentru numere egale de electroni și goluri poate fi examinată numai în cazul impurităților compensate, mărimea σ_n este dată de

$$\tilde{\sigma}_n = \frac{n_c \pi J^2 (N_e + N_h)}{\Delta_m}.$$

Cu luarea în considerație a inegalității (6.32), din (6.31) găsim

$$\eta_{eb} \simeq \eta_m + \frac{e}{3T^2} A \int_0^\infty \frac{\omega^2}{\text{ch } \frac{\beta\omega}{2}} (n^2(\omega) - 1) d\omega, \quad (6.33)$$

unde

$$\begin{aligned}
A = & \frac{N_h m_h - N_e m_e}{2m_h N_h} \frac{\partial}{\partial \omega} \left[N_e (\mu_e + \omega) v_e^2 (\mu_e + \omega) \times \right. \\
& \times \tau_e (\mu_e + \omega) \left. \right] \Big|_{\omega=0^+} + \frac{N_h m_h - N_e m_e}{2m_e N_e} \frac{\partial}{\partial \omega} \left[N_h (\mu_h + \omega) \times \right. \\
& \times v_h^2 (\mu_h + \omega) \tau_h (\mu_h + \omega) \left. \right] \Big|_{\omega=0^+}. \quad (6.34)
\end{aligned}$$

Domeniul de integrare în (6.33) îl separăm în două intervale și în fiecare din ele substituim valorile corespunzătoare pentru $n(\omega)$ [42]. Ca rezultat pentru $\Delta_m \beta \sigma_n^{2/3} \ll 1$ și $\sigma_n \ll 1$ obținem

$$\eta_{eb} \simeq \eta_n + \frac{e}{6} T k_B^2 A (\Delta_m \beta)^3 \ln \frac{4\sigma_n^{-2/3}}{3 \operatorname{ch}^2 \frac{\beta \Delta_m}{2}}. \quad (6.35)$$

Mărimea η_{eb} nu depinde de semnul interacției J . În modelul electronilor liberi semnul lui η_n este determinat de factorul $(1/m_e - 1/m_h)$ și coincide cu semnul coeficientului A .

În acest fel, într-un interval determinat de temperatură coeficientul termoelectric în izolatorul excitonic este mai mare decât în semimetal. Să evaluăm al doilea termen din formula (6.35). Pentru $m_e - m_h \sim m_e/100$ și $\Delta_m \beta \sim 1$, $\sigma_n \sim 10^{-5}$ obținem că este cam de ordinul de mărime a lui η_n și crește, cu micșorarea concentrației de impurități, față de mărimea η . Pentru $n_c = 0$ formulele (6.33) și (6.35) nu sunt aplicabile. Calculul mărimii $\eta_{eb} - \eta_n$ în acest caz dă un termen de ordinul $\sigma^{2/3} \ll 1$, ceea ce este natural.

Expresia (6.35) nu are analog în cazul supraconductorului, deoarece, spre deosebire de izolatorul excitonic, în supraconductor amplitudinea de difuzie a cvaziparticulelor cu spini și impulsuri opuse pe impurități magnetice, datorită medierii pe spinii atomilor de impuritate, este aceeași. În izolatorul excitonic amplitudinile de difuzie a cvaziparticulelor pe atomii de impuritate pentru $m_e \neq m_h$ sunt diferite chiar în aproximația Born [97]. Acest lucru, împreună cu creșterea densității de stări electronice din apropierea gap-ului duce la creșterea coeficientului forței termoelectrice.

Considerarea termenilor de ordin superior în raport cu interacția cu impuritățile dau o contribuție suplimentară la coeficientul η_e . Această contribuție η_{eg} , ca și în cazul supraconductorului [107], este diferită de zero în ordinul zero în T/μ și este legată de faptul că $\operatorname{Im} \chi_{e,h}(\omega) = -\operatorname{Im} \chi_{e,h}(\omega)$ nu este zero când $m_e \neq m_h$.

Aproximând în formula (6.31) toate funcțiile cu variație lentă (N_e, N_h, v_e, v_h), cu valoarea lor la suprafața Fermi și folosind proprietățile $\tilde{\omega}(\omega) = -\tilde{\Omega}^*(-\omega)$; $d_1(\omega) =$

$d_2^*(-\omega)$; $\tilde{\Delta}_m(\omega) = \tilde{\Delta}_m^*(-\omega)$, și presupunând că $N_e v_e^2 m = N_h v_h^2 m$, obținem

$$\begin{aligned} \eta_{eg} = & -\frac{eN_e v_e^2 m_e}{6T^2(m_e + m_h)} \int_0^\infty \frac{\omega \operatorname{Im} \sqrt{\tilde{\omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2} d\omega}{\operatorname{ch}^2 \frac{\beta\omega}{2} \operatorname{Im} \varepsilon_{e_1}(\omega) \operatorname{Im} \varepsilon_{e_2}(\omega)} \times \\ & \times \left(1 + \frac{|\tilde{\omega}(\omega)|^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}{|\tilde{\omega}^2(\omega) - |\tilde{\Delta}_m|^2|} \right) + \frac{eN_h v_h^2 m_h}{6T^2(m_e + m_h)} \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{\omega \operatorname{Im} \sqrt{\tilde{\Omega}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}}{\operatorname{ch}^2 \frac{\beta\omega}{2} \operatorname{Im} \varepsilon_{h_1}(\omega) \operatorname{Im} \varepsilon_{h_2}(\omega)} \times \\ & \times \left(1 + \frac{|\tilde{\Omega}(\omega)|^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}{|\tilde{\Omega}^2(\omega) - |\tilde{\Delta}_m|^2|} \right). \end{aligned} \quad (6.36)$$

Din formula (6.36) se vede că pentru $\chi_{e,h} = 0$ avem $\eta_{eg} = 0$. Pentru a evalua integrala după ω în (6.36), presupunem că abaterea de la aproximația Born este mică. Atunci formula pentru $\chi_{e,h}$ capătă forma

$$\chi_{e,h} = \frac{\pm n_c \pi^2 \tilde{z}^2 J^3 N_{h,e} (N_e - N_h) - n_c J (\tilde{z}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2)}{\tilde{z}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}.$$

Dezvoltând toate mărimile din (6.36) după $\chi_{e,h}$ și folosind inegalitatea (6.32), găsim

$$\begin{aligned} \eta_{eg} = & -\frac{4}{3} \frac{eN_e v_e^2 m_e}{T^2(m_e + m_h)^2} \int_0^\infty \frac{\omega d\omega}{\operatorname{ch}^2 \frac{\beta\omega}{2} \operatorname{Im} \sqrt{\tilde{z}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}} \times \\ & \times \frac{|\tilde{\Delta}_m|^2 \operatorname{Im} \tilde{z}}{|\tilde{z}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2|} \operatorname{Im} \frac{\chi_e m_e - \chi_h m_h}{\tilde{z}^2 - |\tilde{\Delta}_m|^2}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Calculul integralei după ω în (6.37) se face prin metoda dezvoltată în [42]. Rezultatul este

$$\eta_e = \eta_{eb} + \eta_{eg}, \quad (6.38)$$

unde

$$\eta_{eg} = \frac{eN_e^2 v_e^2 m_e m_h \pi^2 n_c J^3 (N_h - N_e) \tau^3 (\Delta_m \beta)^2}{(m_e + m_h)^2 \sigma_n \operatorname{ch}^2 \left(\frac{\beta \Delta_m}{2} \right)}; \quad (6.39)$$

$$\frac{1}{2\tau} = \pi n_c J^2 \frac{N_e m_e + N_h m_h}{m_e + m_h}.$$

Semnului lui η_{eg} pentru $J = I_e = I_h > 0$ coincide cu semnul lui η_{eb} . Prin urmare, în prezența impurităților neutre în expresia pentru coeficientul forței termoelectrice η_e apare un termen suplimentar și acest coeficient crește. Raportul lui η_{eg} la η_n este de ordinul

$$\frac{\mu_{e,h}}{k_B T} (\Delta_m \beta)^2 \frac{N_{e,h} I_{e,h}}{\sigma_n}$$

și poate fi mult mai mare decât unitatea. În cazul impurităților încărcate semnul lui η_{eg} se determină prin semnul lui J , de aceea în cazul examinat de noi, când există compensare, $\eta_{eg} = 0$. Cazul opus ($k_{eF} \neq k_{hF}$) este descris în lucrarea [110].

În acest fel am arătat că există două cauze, care duc la creșterea coeficientului forței termoelectrice în comparație cu valoarea acestuia la temperatura de tranziție dielectrică. La temperaturi joase coeficientul termoelectric scade exponențial. Ca rezultat dependența de temperatură a acestei mărimi pentru $T < T_g$ prezintă un maxim.

În afară de aceasta, într-un interval determinat, descreșterea concentrației de impurități duce la creșterea coeficientului forței termoelectrice. Acest lucru se vede din formulele (6.35) și (6.39).

În lucrarea [111] s-au făcut măsurători ale acestui coeficient pentru aliajele de crom cu vanadiu sau mangan, a căror concentrații se afla în intervalul 0,1...0,5%. S-a găsit că dependența de temperatură a coeficientului respectiv în aceste aliaje, sub temperatura Néel trece printr-un maxim.

În acest fel, rezultatele din această secțiune sunt în concordanță calitativă cu datele experimentale din lucrarea [111].

6.2 Influența impurităților nemagnetice asupra tranzițiilor supraconductoare și dielectrice

6.2.1 Trecerea în revistă a literaturii și ecuațiile fundamentale

Dintr-o serie de date experimentale rezultă că în compușii cu structura A15, C15 [112]-[114], în sistemele în straturi [115], și de asemenea în diferiți compuși are loc o tranziție structurală, rezultatul căreia este apariția unui spectru dielectric parțial. Aceasta are loc dacă pe o porțiune a suprafeței Fermi pe ramurile electronică și de goluri a spectrului este îndeplinită condiția $\varepsilon(\mathbf{p}) = -\varepsilon(\mathbf{p} + \mathbf{q})$ [94], pentru orice valori ale lui \mathbf{p} și pentru anumite valori ale vectorului \mathbf{q} . Mulți dintre compușii citați mai sus sunt supraconductori de temperatură înaltă.

Teoretic influența transformărilor structurale asupra temperaturii critice a tranziției supraconductoare a fost studiată pentru diferite modele în lucrările [116]-[119].

În lucrarea lui Yu. B. Kopaev și R.H. Timerov [116], pe baza modelului metalului cu benzi permise înguste s-a cercetat tranziția în starea dielectrică datorită modificării structurii cristaline ca urmare a interacției electron-fonon. S-a obținut relația pentru parametrii spectrului electronic, pentru care se realizează tranziția structurală cu formarea simultană la suprafața Fermi a gap-ului dielectric și supraconductor.

Influența reciprocă a perechilor Cooper și dielectrice în modelul semimetalului impurificat cu benzi de energie care se suprapun s-a studiat în lucrarea [117]. Astfel s-a arătat că există posibilitatea existenței simultane a perechilor Cooper și a celor electron-gol pe un domeniu larg de valori ale constantei de cuplaj electron-fonon.

Ideea lui L.P. Gorkov [120] despre cvaziunidimensionalitatea spectrului electronic în compuşii A15 a fost folosită în lucrarea [119] pentru studiul influenței tranziției structurale privind supraconductibilitatea acestor compuşii. În modelul examinat, ca rezultat al tranziției structurale pe o anumită parte a suprafeței Fermi se formează gap-ul dielectric. Pe restul suprafeței acest gap este nul.

Densitatea de stări electronice pentru părțile I și II ale suprafeței Fermi se notează cu $N_1(0)$ și $N_2(0)$ respectiv. Densitatea totală de stări va fi $N(0) = N_1(0) + N_2(0)$.

În limita legăturii slabe s-a arătat că numai dacă are loc inegalitatea

$$\frac{1}{N_1(0)V_P} < \frac{1}{N(0)V_{BCS}} + \ln \frac{E_B}{\hbar\omega_D},$$

în sistem au loc două tranziții, una structurală, iar apoi cea supraconductoare (V_{BCS} și V_P sunt constantele interacției efective care duc la împerecherea Cooper și cea dielectrică: E_B și ω_D sunt energiile de tăiere (cutoff) pentru aceste interacții). Temperatura de tranziție supraconductoare este mai mică decât valoarea corespunzătoare în lipsa tranziției structurale.

Dielectrizarea influențează în mod esențial densitatea de stări electronice [121] și proprietățile cinetice ale supraconductorilor [122, 123]. Studiul absorbției ultrasunetului de către supraconductori cu o dielectrizare parțială a spectrului electronic [122] au clarificat apariția maximului de absorbție la temperatura de tranziție supraconductoare în compuşii supraconductori cu structura β -W [112].

Proprietățile optice ale supraconductorilor de tip Pippard cu formare de perechi de tip electron-gol se deosebesc prin multe particularități și depind de relațiile dintre parametrii teoriei [123].

Conform teoremei lui Anderson [124], impuritățile nemagnetice nu influențează proprietățile supraconductorilor izotropi cu o singură bandă. În supraconductorii cu mai multe benzi [20] sau în cei anizotropi [21] difuzia electronilor pe impuritățile nemagnetice duce la micșorarea temperaturii de tranziție supraconductoare. Cu totul altfel stau lucrurile când avem și perechi Cooper și perechi electron-gol. Impuritățile nemagnetice slăbesc, iar la o anumită concentrație critică împiedică formarea de perechi legate electron-gol. Micșorarea dielectrizării duce la creșterea temperaturii critice a supraconductorului cu creșterea concentrației de impurități nemagnetice [125].

În această secțiune se examinează influența impurităților nemagnetice asupra parametrului Δ și a conductivității termice electronice a supraconductorului cu dielectrizare parțială a spectrului electronic [126].

Se arată că Δ la temperatură nulă crește cu creșterea concentrației de impurități. Totuși o creștere continuă a lui Δ nu are loc: la concentrația critică de impurități, care distruge împerecherea dielectrică, impuritățile nemagnetice nu influențează proprietățile supraconductorului în concordanță totală cu teorema Anderson.

S-a obținut că raportul coeficienților de conductibilitate termică în stare supraconductoare și normală nu este o funcție universală și nu este descris de cunoscuta formulă a lui Bardeen-Rickayzen-Twordt[46].

Hamiltonianul sistemului îl scriem sub forma

$$H = H_0 + H_{e-e} + H_{\text{BCS}} + H_{e-\text{imp}},$$

unde

$$H_0 = \sum_{n, \mathbf{p}, \sigma} \xi_n(\mathbf{p}) a_{n\sigma}^+(\mathbf{p}) a_{n\sigma}(\mathbf{p}) \quad (6.40)$$

este hamiltonianul electronilor liberi; $\xi_n(\mathbf{p})$ este energia electronilor din ramura n , referitoare la suprafața Fermi; $a_{n\sigma}(\mathbf{p})$, $a_{n\sigma}^+(\mathbf{p})$ sunt operatorii de anihilare și creare electronici în ramura n cu impulsul \mathbf{p} și cu proiecția spinului $\sigma = \pm 1/2$;

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1} \sum_{n, m} \sum_{\sigma, \sigma_1} V(\mathbf{q}) a_{n\sigma}^+(\mathbf{p} + \mathbf{q}) a_{m\sigma_1}^+(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) a_{m\sigma_1}(\mathbf{p}_1) a_{n\sigma}(\mathbf{p}), \quad (6.41)$$

este interacția electron-electron, care duce la instabilitatea stării metalice și la apariția gap-ului dielectric[94]; $V(\mathbf{q})$ este interacția coulombiană ecranată;

$$H_{\text{BCS}} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{p}_1} \sum_{n, m} \sum_{\sigma, \sigma_1} g_{nm} a_{n\sigma}^+(\mathbf{p} + \mathbf{q}) a_{n\sigma_1}^+(\mathbf{p}_1 - \mathbf{q}) a_{m\sigma_1}(\mathbf{p}_1) a_{m\sigma}(\mathbf{p}) \quad (6.42)$$

este hamiltonianul care descrie tranziția supraconductoare;

$$H_{e-\text{imp}} = \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} \sum_{n, m} \sum_{\sigma, i} \sigma_{\sigma, i} U_{nm}(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \exp[-i\mathbf{R}_i(\mathbf{p} - \mathbf{p}')] a_{n\sigma}^+(\mathbf{p}) a_{m\sigma}(\mathbf{p}') \quad (6.43)$$

este energia de interacție a electronilor cu impuritățile nemagnetice.

Definim funcțiile Green de temperatură:

$$\begin{aligned} G_{nm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\tau\mathbf{p}'\tau') &= -\langle T \tilde{a}_{n\sigma}(\mathbf{p}\tau) \tilde{a}_{m\sigma'}^+(\mathbf{p}'\tau') \rangle; \\ F_{nm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\tau\mathbf{p}'\tau') &= -\langle T \tilde{a}_{n\sigma}(\mathbf{p}\tau) \tilde{a}_{m\sigma'}(\mathbf{p}'\tau') \rangle; \\ \bar{F}_{nm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\tau\mathbf{p}'\tau') &= -\langle T \tilde{a}_{n\sigma}^+(\mathbf{p}\tau) \tilde{a}_{m\sigma'}^+(\mathbf{p}'\tau') \rangle. \end{aligned} \quad (6.44)$$

În acord cu hamiltonianul (6.40)-(6.43), ecuațiile de mișcare pentru funcțiile (6.44) vor avea forma

$$\begin{aligned} (i\omega_n - \xi_n(\mathbf{p})) G_{nm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\mathbf{p}'\omega_n) - \sum_{n_1, \sigma_1} d_{nn_1}^{\sigma\sigma_1}(\mathbf{p}) \times \\ G_{n_1 m}^{\sigma_1 \sigma'}(\mathbf{p}\mathbf{p}'\omega_n) - \sum_{\sigma_1} \Delta_n^{\sigma\sigma_1}(\mathbf{p}) F_{nm}^{\sigma_1 \sigma'}(-\mathbf{p}\mathbf{p}'\omega_n) - \\ - \sum_{\mathbf{p}_1, n_1} \sum_i U_{nn_1}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \exp[-i\mathbf{R}_i(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)] \times \\ \times G_{n_1 m}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}' \omega_n) = \delta_{nm} \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\sigma\sigma'}; \end{aligned} \quad (6.45)$$

$$\begin{aligned}
& (i\omega_n + \xi_n(\mathbf{p}))\bar{F}_{nm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\mathbf{p}'\omega_n) + \sum_{n_1, \sigma_1} d_{nn_1}^{*\sigma\sigma_1}(\mathbf{p}) \times \\
& \times \bar{F}_{n_1 m}^{\sigma_1 \sigma'}(\mathbf{p}\mathbf{p}'\omega_n) + \sum_{\sigma_1} \Delta^{*\sigma\sigma_1}(\mathbf{p}) G_{nm}^{\sigma_1 \sigma'}(-\mathbf{p}\mathbf{p}'\omega_n) + \\
& + \sum_{\mathbf{p}_1, n_1} \sum_i U_{nn_1}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1) \exp[-i\mathbf{R}_i(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1)] \bar{F}_{n_1 m}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}_1 \mathbf{p}'\omega_n) = 0; \\
& \omega_n = (2n + 1) \frac{\pi}{\beta}; \quad \beta = (k_B T)^{-1},
\end{aligned} \tag{6.46}$$

unde

$$\begin{aligned}
\Delta_n^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}) &= \sum_m g_{nm} \langle a_{m\sigma}(\mathbf{p}) a_{m\sigma'}(-\mathbf{p}) \rangle = - \sum_m g_{nm} F_{mm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\tau, -\mathbf{p}\tau') \Big|_{\tau'=\tau-0}; \\
\Delta_n^{+\sigma\sigma'}(\mathbf{p}) &= \sum_m g_{nm} \langle a_{m\sigma}^+(\mathbf{p}) a_{m\sigma'}^+(-\mathbf{p}) \rangle = - \sum_m g_{nm} \bar{F}_{mm}^{\sigma\sigma'}(\mathbf{p}\tau, -\mathbf{p}\tau') \Big|_{\tau'=\tau-0}
\end{aligned} \tag{6.47}$$

sunt parametrii de ordine ai stării supraconductoare.

Parametrii de ordine $d_{nm}(\mathbf{p})$ corespunzătorii formării de perechi electron-gol, se definesc cu ajutorul funcțiilor Green interbenzi prin relațiile

$$\begin{aligned}
d_{mn}^{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}) &= - \sum_{\mathbf{p}_1} V(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) \langle a_{n\sigma}^+(\mathbf{p}_1) a_{m\sigma'}(\mathbf{p}_1) \rangle = \\
&= - \sum_{\mathbf{p}_1} V(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}) G_{mn}^{\sigma'\sigma}(\mathbf{p}_1 \tau \mathbf{p}_1 \tau') \Big|_{\tau'=\tau+0}.
\end{aligned} \tag{6.48}$$

Mărimea $d_{mn}(\mathbf{p})$ până acum a fost legată de formarea de perechi electron-gol [94]. Mai departe nu ne va interesa natura acestei mărimi. Considerăm că pe o parte a suprafeței Fermi (o vom nota cu I) există două ramuri ale spectrului, pentru care este satisfăcută condiția de simetrie electron-gol

$$\varepsilon_1(\mathbf{p}) = -\varepsilon_2(\mathbf{p}) = \xi(\mathbf{p}) \tag{6.49}$$

și apare gap-ul dielectric d_{12} diferit de zero. Pe celaltă parte a suprafeței Fermi (o vom nota cu II) egalitatea (6.49) nu are loc și $d_{12} = 0$. Un astfel de model a fost examinat în lucrările [119, 125]. Vom considera că mărimile g_{nm} nu depind de numărul ramurii și sunt egale cu constanta $|g|$. În acest caz, după cum rezultă din (6.47), pe întreaga suprafață Fermi se stabilește un parametru de ordine unic egal cu Δ . Să examinăm cazul în care mărimile Δ și d sunt reale și descriu împerecherea singlet a perechilor Cooper și celor electron-gol. Atunci în cazul omogen spațial, când nu avem impurități, sistemul de ecuații (6.45) și (6.46) este rezolvabil și pentru domeniul I obținem

$$G_{11}^0(\mathbf{p}, \omega_n) = -(\omega_n \pm \xi(\mathbf{p}))/P; \tag{6.50}$$

$$F_{11}^0(\mathbf{p}\omega_n) = F_{22}^0(\mathbf{p}\omega_n) = \bar{F}_{11}^0(\mathbf{p}, \omega_n) = \bar{F}_{22}^0(\mathbf{p}, \omega_n) = -\Delta/P; \tag{6.51}$$

$$G_{12}^0(\mathbf{p}\omega_n) = G_{21}^0(\mathbf{p}\omega_n) = -d/P. \tag{6.52}$$

Aici

$$d = d_{12} = d_{21}; \quad P = \omega_n^2 + \xi^2(\mathbf{p}) + \Delta^2 + d^2.$$

Pentru porțiunea suprafeței Fermi II, $G_{12}^0 = G_{21}^0 = d = 0$, iar funcțiile G_{33}^0 și F_{33}^0 se obțin din (6.50) și (6.51) înlocuind $\xi(\mathbf{p})$ cu $\xi_3(\mathbf{p})$ și P cu $\omega_n^2 + \xi_3^2(\mathbf{p}) + \Delta^2$.

6.2.2 Dependența parametrilor de ordine de impurități la temperatură nulă

Introducem operatorul de masă $\Sigma(\mathbf{p}, \omega_n)$ mediat pe poziția impurităților prin relația obișnuită

$$\hat{g}^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) = \hat{g}_0^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) - \hat{\Sigma}(\mathbf{p}, \omega_n), \quad (6.53)$$

unde

$$\hat{g}_0^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n) = \begin{pmatrix} i\omega_n - \xi & -d & -\Delta & 0 & 0 & 0 \\ -d & i\omega_n + \xi & 0 & -\Delta & 0 & 0 \\ -\Delta & 0 & i\omega_n + \xi & d & 0 & 0 \\ 0 & -\Delta & d & i\omega_n - \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i\omega_n - \xi_3 & -\Delta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\Delta & i\omega_n + \xi_3 \end{pmatrix} \quad (6.54)$$

Limitându-ne la aproximația Born, după medierea pe poziția atomilor de impuritate pentru $\Sigma(\mathbf{p}, \omega_n)$ obținem [2, 49]

$$\Sigma(\mathbf{p}, \omega_n) = n_c \int \frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^3} \sum_{l_1} \hat{U}(\mathbf{p}) \hat{g}_{l_1}(\mathbf{p} - \mathbf{p}_1, \omega_n) \hat{U}(\mathbf{p}_1). \quad (6.55)$$

Pentru a găsi matricea $\hat{g}^{-1}(\mathbf{p}, \omega_n)$, o scriem sub forma (6.54), dar cu înlocuirea mărimilor ω_n , d , Δ cu mărimile necunoscute $\tilde{\omega}_j(\omega_n)$, $\tilde{\Delta}_j(\omega_n)$ și $\tilde{d}_j(\omega_n)$ respectiv.

Mai departe vom neglija difuzia electronului pe impuritate de la o ramură a spectrului electronic la alta, considerând că această difuzie este mult mai puțin probabilă decât difuzia electronilor în cadrul aceleiași ramuri [127]. Presupunând de asemenea că elementele de matrice ale difuziei intrabandă a excitațiilor pe impurități sunt egale între ele ($U_{11} = U_{22} = U_{55} = U$; $U_{33} = U_{44} = U_{66} = -U$), rezultă

$$\tilde{\omega}_1(\omega_n) = \omega_n + \frac{1}{2\tau_1} \frac{\tilde{\omega}_1(\omega_n)}{R_1(\omega_n)}; \quad (6.56)$$

$$\tilde{d}(\omega_n) = d - \frac{1}{2\tau_1} \frac{\tilde{d}(\omega_n)}{R_1(\omega_n)}; \quad (6.57)$$

$$\tilde{\Delta}_1(\omega_n) = \Delta + \frac{1}{2\tau_1} \frac{\tilde{\Delta}_1(\omega_n)}{R_1(\omega_n)}, \quad (6.58)$$

unde $1/2\tau_1 = n_c \pi N_1(0) |U|^2$; $N_1(0)$ este densitatea de stări electronice pe partea I a suprafeței Fermi;

$$R_1(\omega_n) = \sqrt{\tilde{\Delta}_1^2(\omega_n) + \tilde{d}_1^2(\omega_n) + \tilde{\omega}_n^2(\omega_n)}. \quad (6.59)$$

Pentru porțiunea nedegenerată II a suprafeței Fermi $\tilde{d} = d = 0$,

$$\tilde{\omega}_2(\omega_n) = \omega_n + \frac{1}{2\tau_2} \frac{\tilde{\omega}_2(\omega_n)}{R_2(\omega_n)}; \quad (6.60)$$

$$\tilde{\Delta}_2(\omega_n) = \Delta + \frac{1}{2\tau_2} \frac{\tilde{\Delta}_2(\omega_n)}{R_2(\omega_n)}, \quad (6.61)$$

unde

$$R_2(\omega_n) = \sqrt{\tilde{\Delta}_2^2(\omega_n) + \tilde{\omega}_2^2(\omega_n)}; \quad \frac{1}{2\tau_2} = n_c \pi N_2(0) |U|^2, \quad (6.62)$$

$N_2(0)$ este densitatea de stări electronice pe partea II a suprafeței Fermi. Din ecuațiile (6.56)-(6.61) rezultă că

$$u(\omega_n) = \frac{\tilde{\omega}_1(\omega_n)}{\tilde{\Delta}_1(\omega_n)} = \frac{\tilde{\omega}_2(\omega_n)}{\tilde{\Delta}_2(\omega_n)} = \frac{\omega_n}{\Delta}. \quad (6.63)$$

Notând cu $v_n(\omega_n) = d(\tilde{\omega}_n)/\Delta_1(\tilde{\omega})$, obținem pentru $v(\omega_n)$ relația

$$v = \frac{d}{\Delta} - \sigma \frac{d}{\Delta} \frac{v}{\sqrt{1+u^2+v^2}}; \quad \sigma = \frac{1}{\tau_1 d}. \quad (6.64)$$

Parametrii de ordine Δ și d se găsesc din ecuațiile

$$\Delta = \frac{\pi}{\beta} |g| \sum_{\omega_n} \left[N_1(0) \frac{\tilde{\Delta}_1(\omega_n)}{R_1(\omega_n)} + N_2(0) \frac{\tilde{\Delta}_2(\omega_n)}{R_2(\omega_n)} \right]; \quad (6.65)$$

$$d = \frac{\pi}{\beta} |V| \sum_{\omega_n} N_1(0) \frac{d(\omega_n)}{R_1(\omega_n)}. \quad (6.66)$$

Rezolvând aceste ecuații, la temperatură nulă și $\sigma = 0$ avem

$$\frac{1}{N_1 |V|} = \ln \frac{2E_B}{\sqrt{d_0^2 + \Delta_0^2}}; \quad (6.67)$$

$$\frac{1}{N_1 |g|} = \ln \frac{2\omega_D}{\sqrt{d_0^2 + \Delta_0^2}} + \frac{N_2}{N_1} \ln \frac{2\omega_D}{\Delta_0}, \quad (6.68)$$

unde E_B , ω_D sunt energiile de tăiere pentru potențialele $|V|$ și $|g|$ respectiv; $d_0 = d(\sigma = 0)$; $\Delta_0 = \Delta(\sigma = 0)$.

Din comparația ecuației (6.67) și expresia pentru temperatura tranziției structurale T_{m0} [119] găsim

$$T_{m0} = \frac{\gamma}{\pi k_B} \sqrt{d_0^2 + \Delta_0^2}. \quad (6.69)$$

Mărimea $\sqrt{d_0^2 + \Delta_0^2}$ joacă rolul gap-ului în spectrul energetic pentru partea I a suprafeței Fermi.

Ecuatiile (6.63) și (6.64) pentru $T = 0$ și concentrație mică a impurităților, când are loc inegalitatea $\sigma \ll 1$, se rezolvă ușor. Rezultatul este

$$\ln \frac{\sqrt{d^2 + \Delta^2}}{\sqrt{d_0^2 + \Delta_0^2}} = -\frac{\sigma}{2} \pi d_0 \frac{(\Delta_0^2 + d_0^2/2)}{(d_0^2 + \Delta_0^2)^{3/2}}; \quad (6.70)$$

$$\frac{N_2(0)}{N_1(0)} \ln \frac{\Delta}{\Delta_0} = \frac{\sigma}{2} \frac{\pi d_0}{(d_0^2 + \Delta_0^2)^{1/2}}. \quad (6.71)$$

Din ultimele formule se vede că pentru concentrații mici, parametrul de ordine supraconductor Δ crește liniar cu creșterea concentrației de impurități, ceea ce este în concordanță cu creșterea lui T_c discutată în lucrarea [125].

La concentrații mai mari de impurități sistemul de ecuații pentru d și Δ poate fi rezolvat analitic în două cazuri:

- când valoarea inițială d_0 este mult mai mare decât Δ , și este posibilă satisfacerea simultană a inegalităților $\tau d \ll 1$ și $\tau \Delta \ll 1$;
- când mărimile d_0 și Δ_0 nu se deosebesc mult una de alta, și avem $\tau d \ll 1$, dar $\tau \Delta \gg 1$.

Aici și mai departe $\tau = \tau_1$.

În primul caz, rezolvând sistemul de ecuații, găsim, că Δ crește cu concentrației de impurități:

$$\Delta = \Delta_0^{1/(1+\nu)} \left(\frac{2/\tau}{(2/\tau \Delta)^{d^2 \tau^2/12}} \right)^{\nu/(1+\nu)}. \quad (6.72)$$

Aici $\nu = N_1(0)/N_2(0)$; $d^2 \tau^2/12 = \ln \tau/\tau_{cr}$.

În al doilea caz creșterea lui Δ cu concentrația de impurități se determină din formula

$$\ln \frac{\Delta}{\Delta_0} = \pi \nu \frac{1}{2\tau \Delta} \left(1 - \frac{d^2}{\Delta^2} \right); \quad \frac{d^2}{\Delta} = \pi \left(\frac{1}{\tau_{cr}} - \frac{1}{\tau} \right). \quad (6.73)$$

Totuși o creștere continuă a lui Δ nu are loc deoarece există o concentrație critică a impurităților pentru care dielectrizarea spectrului electronic este distrusă. În primul caz, când $\tau d \ll 1$ și $\tau \Delta \ll 1$ această mărime se determină din relația

$$(\Delta^{BCS})^2 = \frac{2}{(\tau_{cr})^2} \frac{\ln \left(\frac{\pi T_{m0} \tau_{cr}}{2\gamma} \right)}{\ln(2/\Delta^{BCS} \tau_{cr})}. \quad (6.74)$$

În al doilea caz concentrația critică se găsește din relația

$$\ln \frac{\sqrt{d_0^2 + \Delta_0^2}}{\Delta} = \frac{\pi}{\tau_{cr} \Delta}. \quad (6.75)$$

La concentrația critică dispăre influența impurităților magnetice asupra proprietăților termodinamice ale aliajelor supraconductoare, ceea ce este în deplin acord

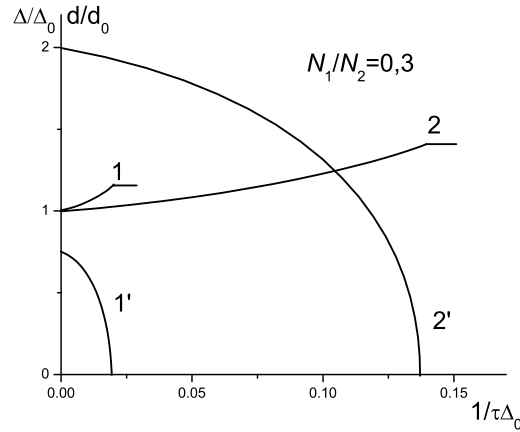


Figura 6.1: Dependenta parametrilor de ordine d și Δ de concentrația de impurități.

cu teorema Anderson [124] privind rolul acestor impurități asupra stării supraconductoare. De acest lucru ne convingem ușor, dacă în formulele (6.72) și (6.73) substituim valoarea concentrației critice. În acest caz pentru Δ se obține expresia obișnuită din teoria microscopică în lipsa dielectrizarii și a lipsei impurităților.

Sistemul de ecuații pentru Δ și d a fost rezolvat numeric pentru diferite concentrații de impurități. Rezultatele calculului sunt prezentate în fig.6.1. Curbele 1 și 1' reprezintă variația lui d/d_0 și Δ/Δ_0 cu concentrația de impurități pentru $d_0/\Delta_0 = 0,75$, iar curbele 2 și 2' pentru $d_0/\Delta_0 = 2$.

Din datele obținute rezultă că în supraconductorii foarte impurificați ($1/\tau \gg 1/\tau_{cr}$) dielectrizarea spectrului electronic nu influențează parametrul de ordine Δ la temperatură nulă, ceea ce face ca temperatura critică a supraconductorului să nu se modifice. Acest lucru a fost confirmat experimental, de exemplu, la studiul sistemului $Nb_3Sn_{1-x}Al_x$ [112]. S-a găsit că înlocuirea staniului cu aluminiu coboară temperatura critică a tranziției structurale [112]. Temperatura maximă a tranziției supraconductoare s-a observat la compoziția critică care corespunde tranziției structurale.

Concluzii

1. S-a prezentat teoria privind efectul termoelectric în izolatorul excitonic în cazul difuziei multiple a excitațiilor pe impurități.
S-a obținut formula pentru coeficientul termoelectric η_e a izolatorului excitonic pentru o difuzie arbitrară a excitațiilor pe impurități.
2. S-a arătat că dependența de temperatură a acestei mărimi în starea de izolator excitonic trece printr-un maxim. Condiția suficientă pentru aceasta este ca

amplitudinile de difuzie ale electronilor și golurilor pe impurități neutre să fie diferite.

3. S-a studiat influența impurităților nemagnetice asupra proprietăților supraconductorului la dielectrizarea parțială a spectrului electronic. S-a arătat că impuritățile nemagnetice duc la o creștere substanțială a parametrului de ordine supraconductor.
4. S-a calculat concentrația critică de impurități pentru care se restabilește starea supraconductoare în cazul unei dielectrizări parțial distruse a spectrului electronic.

Bibliografie

- [1] Abrikosov A.A., UFN, 1969, nr.3, pag. 403-437.
- [2] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., JETP, 1960, vol.39, nr.6, pag.1781-1796.
- [3] Bennemann K.H., Garland J.W., Intern. J. Magnetism, 1971, vol.1, pag.97-122.
- [4] Anderson P.W., Phys. rev., 1961, vol.124, nr.1, pag.41-53.
- [5] Homskii D.N., UFN, 1979, vol.129, nr.3, pag.443-485.
- [6] Schrieffer J.R., Wolf P.A., Phys. Rev., 1966, vol.149, nr.2, pag.491-492.
- [7] Kondo J., Progr. Theor. Phys., vol.32, nr.1, pag.37-49.
- [8] Alexeevskii, N.E., Gaidukov Yu.P., JETP, 1957, vol.32, nr.6, pag.1589-1595.
- [9] Alexeevskii, N.E., Gaidukov Yu.P., JETP, 1956, vol.31, nr.6(12), pag.947-954.
- [10] Nagaoka I., Phys. Rev., 1965, vol.138, nr.4A, pag.1112-1120.
- [11] Bogoliubov N.N., Tiablikov S.V., Doklady AN USSR, 1959, vol.126, nr.2, pag.53.
- [12] Zubarev D.N., UFN, 1960, vol.71, nr.1, pag.71-116.
- [13] Abrikosov A.A., Phisica, 1965, vol.2, nr.1, pag.21-37.
- [14] Yuval G., Anderson P.W., Phys. Rev.B, 1970, vol.1, nr.4, pag.1522-1528.
- [15] Hamann D.R., Phys. Rev.B, vol.2, nr.5, pag.1373-1392.
- [16] Abrikosov A.A., Migdal A.A., J. Low Temp. Phys., 1970, vol.3, nr.5, pag.519-536.
- [17] Wilson K.G., Rev. of Modern Phys., 1983, vol.55, nr.3, pag.583-600.
- [18] Krishna-Murthy H.R., Wilson K.G., Wilkins J.R., Phys. Rev. Lett., 1975, vol.35, nr.16, pag.1101-1104.

- [19] Wiegman P.B., Pisma v JETP, 1980, vol.31, nr.7, pag.392-398; Wiegman P.B., Phys. Lett., 1980, vol.80A, nr.2/3, pag.163-168.
- [20] Moskalenko V.A., Palistrat M.E., JETP, 1965, vol.49, nr.3(9), pag.770-780.
- [21] Markowitz D., Kadanoff L.P., Phys. Rev., 1963, vol.131, nr.2, pag.563-575.
- [22] Zuckermann M.Y., Phys. Rev., 1965, vol. 140, nr. 3A, pag.899-905.
- [23] Ratto C.F., Blandin A., Phys. Rev., 1967, vol.156, nr.2, pag.513-521.
- [24] Kaiser A.B., J. Phys.C, 1970, vol.3, nr.2, pag.410-422.
- [25] Bennemann K.H., Phys. Rev., 1969, vol.183, nr.2, pag.492-499.
- [26] Barabanov A.F., Kikoin K.A., Maksimov L.A., JETP, 1975, vol.69, nr.2(8), pag.688-694.
- [27] Kuzmin E.B., Ovcinikov S.G., JETP, 1975, vol.69, nr.5(11), pag.1688-1695.
- [28] Coqblin B., Ratto C.F., Phys. Rev. Lett., 1968, vol.21, nr. 15, pag.1065-1067.
- [29] Maple M.B., Kang-Soo Kim, Phys. Rev. Lett., 1969, vol.23, nr.3, pag.118-120.
- [30] Meunier F., Ortega S., Penă O. et al., Sol. State Comm., 1974, vol.14, nr.11, pag.1091-1095.
- [31] Theumann A., Phys. Rev., 1972, vol. B5, nr.11, pag.4382-4389.
- [32] Shiba H., Progr. of Theor. Phys., 1973, vol. 50, nr.1, pag.50-73.
- [33] Kon L.Z., FTT, 1974, vol.16, nr.4, pag.1006-1009.
- [34] Shiba H., Progr. of Theor. Phys., 1974, vol.40, nr.3, pag.435-451.
- [35] Rusonov A.I., Pisma v JETP, 1969, vol.9, nr.2, pag.146-149.
- [36] Digor D.F., Kon L.Z., *Theory of superconducting alloys in external fields*, (in russian), Chişinău, Ştiinţa, 1980, pag.62-70.
- [37] Kon L.Z., Moskalenko V.A., FMM, 1975, vol.39, nr.5, pag.926-931.
- [38] Bardeen J, Cooper L.N., Schrieffer J.R., Phys. Rev., 1957, vol.108, nr.5, pag.1175-1204.
- [39] Kümmel R., Phys. Rev.B, 1972, vol.6, nr.7, pag.2617-26-31.
- [40] Arnold G.V., Phys. Rev.B, 1974, vol.10, nr.1, pag.105-119.
- [41] Schrieffer J.R., Mattis D.C., Phys. Rev., 1965, vol.140, nr.4A, pag.1412-1419.
- [42] Moskalenko V.A., *Methods of the study of electronic density of states in superconducting alloys* Chişinău: Ştiinţa, 1974 (in russian), 1974.
- [43] Appel J., Phys. Rev.B, 1973, vol.8, nr.3, pag.1079-1087.

- [44] Geilikman B.T., Kresin V.Z., *Non-stationary effects in superconductors* (in russian), Moskva, Fizmatgiz, 1972, pag.176.
- [45] Geilikman B.T., JETF, 1958, vol.34, nr.4 pag.1042-1044.
- [46] Bardeen J., Rickayzen G., Tewordt L., Phys. Rev. 1959, vol.113, nr.4, pag.982-994.
- [47] Ambegaokar V.A., Griffin A., Phys. Rev., 1965, vol.137, nr.4A, pag.1151-1167.
- [48] Vladimir M.I., Moskalenko V.A., Nica Yu.N., TMF, 1975, vol.24, nr.1, pag.115-128.
- [49] Moskalenko V.A., *Proprietățile electromagnetice și cinetice ale aliajelor supraconductoare cu benzi energetice suprapuse*, Chișinău, Știința, 1976, 264 pag.
- [50] Anders E.E., Suharevskii B.Ia., Volciok I.V., JETF, 1973, vol.64, nr.5, pag.1688-1698.
- [51] Kon L.Z., Ciumakov Yu.M., *The properties of the superconducting alloys* (in russian), Chișinău, Știința, 1977, pag.37-42.
- [52] Kon L.Z., Moskalenko, V.A., FTT, 1974, vol.16, nr.10, pag.2900-2902.
- [53] Kon L.Z., Moskalenko, V.A., *The 18-th Conference of low temperature physics*, Kiev, pag.24-25.
- [54] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., Dzialojinskii I.E., *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*, Dover Public., Inc. New York, 1963.
- [55] Uruşadze G.I., JETF, 1966, vol.50, nr.2, pag.404-410.
- [56] Moskalenko V.A., Golub A.A., Kon L.Z., FMM, 1970, vol.30, nr.2, pag.289-294.
- [57] Tsuneto T., Phys. Rev., 1961, vol.121, nr.2, pag.402-415.
- [58] Pokrovskii V.L., JETF, 1961, vol.40, nr.1, pag.143-151.
- [59] Kon L.Z., *Influence of external fields on the superconducting properties of metals* (in russian), Chișinău, Știința, 1975, pag.46-53.
- [60] Machida K., Nakanishi A., Progr. of Theor. Phys., 1976, vol.55, nr.1, pag.1-9.
- [61] Daugherty M., Parvin K., MacLaughlin D.E., Phys. Rev. Lett., 1975, vol.31, nr. 25, pag.1485-1487.
- [62] Artemenko S.N., Volkov A.F., JETF, 1976, vol.70, nr.3, pag.1051-1060.
- [63] Artemenko S.N., Volkov A.F., UFN, 1979, vol.128, nr.1, pag.3-30.
- [64] Gorkov L.P., Eliashberg G.M., JETF, 1969, vol.56, nr.4, pag.1297-1308.

- [65] Gorkov L.P., Eliášberg G.M., JETP, 1968, vol.54, nr.2, pag.612-626.
- [66] Eliášberg G.M., JETP, 1971, vol.60, nr.3(9), pag. 1254-1271.
- [67] Galaiko V.P., JETP, 1975, vol.68, nr.1, pag.223-237.
- [68] Galaiko V.P., JETP, 1971, vol.61, nr.1(7), pag.382-397.
- [69] Galaiko V.P., Şumeiko V.S., JETP, 1976, vol.71, nr.2(8), pag.671-678.
- [70] Larkin A.I., Ovcinnikov Yu.N., JETP, 1975, vol.70, nr.5, pag.1915-1927.
- [71] Larkin A.I., Ovcinnikov Yu.N., JETP, 1977, vol.73, nr.1(1), pag.299-310.
- [72] Usadel K.D., Phys. Rev. Lett., 1970, vol.25, nr.8, pag.507-509.
- [73] Aronov A.G., Gurevich V.L., FTT, 1974, vol.16, nr. 9, pag. 2656-2665.
- [74] Rieger T.J., Scalapino D.J., Phys. Rev. Lett., 1971, vol.27, nr.26, pag.1784-1790.
- [75] Tinkham M., Phys. Rev.B, 1972, vol.6, nr.5, pag.1747-1756.
- [76] Tinkham M., Clarke J., Phys. Rev. Lett., 1972, vol. 28, nr.21, pag.1366-1370.
- [77] Yu M.L., Mercereau J.E., Phys. Rev. Lett., 1972, vol.28, nr.17, pag.1117-1120.
- [78] Artemenko S.N., Volkov A.F., Zaitsev A.V., J. of Low Temp. Phys., 1978, vol.30, nr.3, pag.487-502.
- [79] Ovchinnikov Yu. M., J. of Low Temp. Phys., 1978, vol.31, nr.5/6, pag.785-802.
- [80] Schmid A., Schon G., J. of Low Temp. Phys., 1975, vol.20, nr.1/2, pag.207-226.
- [81] Volkov A.F., Zaitsev A.V., JETP, 1975, vol.69, nr.6(12), pag.2222-2230.
- [82] Galaiko V.P., Gluşciuk N.I., JETP, 1971, vol.61, nr.1(7), pag.382-397.
- [83] Şelankov A.L., FIT, 1978, vol.20, nr.1, pag.286-289.
- [84] Aronov A.G., JETP, 1976, vol.20, nr.4, pag.1477-1489.
- [85] Van Harlingen D.J., J. of Low Temp. Phys., 1981, vol.44, nr.1/2, pag.163-176.
- [86] Batteraby S.J., Waldram J.R., J.Phys.F: Mat. Phys., 1984, vol.14, nr.7 pag.L109-L114.
- [87] Pethick C.J., Smith H., Phys. Rev. Lett., 1979, vol.43, nr.9, pag.640-642.
- [88] Kon L.Z., Tabakar V.P., Com. celei de a XXII-a Conf. Unională de Fizica Temperaturilor Joase, Chişinău, 1982, pag.69-70.
- [89] Kon L.Z., Tabakar V.P., *Dynamical phenomena in disordered systems*, Chişinău, Ştiinţa, 1984, pag.49-62.

- [90] Kon L.Z., Tabakar V.P., FNT, 1983, vol.9, nr.2, pag.156-160.
- [91] Keldâş L.V., JETP, 1964, vol.47, nr.4(10), pag.1515-1526.
- [92] Svidzinski A.V., *Non-homogeneous problems of the theory of superconductivity*, Moskva, Nauka, 1982, 309 pag.
- [93] Andreev A.F., JETP, 1964, vol. 46, nr.5, pag. 1823-1828.
- [94] Keldâş L.V., Kopaev Yu.V., FTT, 1964, vol.6, nr.9, pag.2791-2798.
- [95] Kopaev Yu.v., *Some problems of the superconductivity*, vol.86, Moskva, Nauka, 1975, pag.3-91.
- [96] Guseinov R.R., Keldâş L.V., JETP, 1972, vol.63, nr.6, pag.2256-2263.
- [97] Kopaev Yu. V., Rusinov A. I., FTT, 1969, vol.11, nr.5, pag.1306-1313.
- [98] Zittartz J., Phys. Rev., 1967, vol.164, nr.2, pag.575-582.
- [99] Do Chan Kat, Kopaev Yu.V., Timerov R.H., FTT, 1973, vol.15, nr.2, pag.537-541.
- [100] Maki K., Nakanishi K., J. of Low Temp. Phys., 1971, vol.5, nr.1, pag.55-70.
- [101] Zittartz J., Phys. Rev., 1968, vol.165, nr.2, pag.612-617.
- [102] Kon L.Z., Digor D.F., JETP, 1978, vol. 74, nr.6, pag.2131-2137.
- [103] Digor D.F., Kon L.Z., *The IX-th Conference on the physics of superconductors* Tbilisi, Izd-vo Tbilisskgo Univ. 1978, pag.155-156.
- [104] Kon L.Z., Digor D.F., *Theory of superconducting alloys* (in russian), Chişinău, Ştiinţa, 1979, pag.44-52.
- [105] Galperin Yu.M., Gurevich V.L., Kozub V.I., JETP, 1974, vol.66, nr.4, pag.1387-1397.
- [106] Golub A.A., Kon L.Z., *Kinetic properties of superconducting alloys*, Chişinău, Ştiinţa, 1981.
- [107] Kon L.Z., JETP, 1976, vol.70, nr.1, pag.286-291.
- [108] Kon L.Z., Nica Yu. N., FTT, 1976, vol.18, nr.11, pag.3474-3480.
- [109] Kon L.Z., FTT, 1975, vol.17, nr.6, pag.1711-1714.
- [110] Kurihara I., J. of Phys. of Japan, 1972, vol.33, nr.2, pag.380-388.
- [111] Trego A.L., Mackintosh A.R., Phys. Rev., 1968, vol.166, nr.2, pag.495-506.
- [112] Testardi L., Veger M., Goldberg I., *Superconducting compounds with β -wolfram structure*, Moskva, Mir, 1977.

- [113] Iziunov Yu. A., Kurmaev Z.Z., UFN, 1974, vol.113, nr.2, pag.193-238.
- [114] Vonsovskii S.V., Iziunov Yu. A., Kurmaev Z.Z., *Superconductivity of transition metals, of compounds and alloys*, Moskva, Nauka, 1977.
- [115] Bulaevskii L.N., YFN, 1976, vol.120, nr.2, pag.259-278.
- [116] Kopaev Yu. V., Timerov R.H., JETF, 1972, vol.63, nr.1, pag.290-307.
- [117] Rusinov A.I., Do Chan Kat, Kopaev Yu.V., JETF, 1973, vol. 65, nr.5, pag.1984-1998.
- [118] Mattis D.C., Langer W.D., Phys. Rev. Lett.,1970, vol.25, nr.5, pag.376-380.
- [119] Billbro G., McMillan W.L., Phys. Rev.B, 1976, vol.14, nr.5, pag.1887-1892.
- [120] Gorkov L.P., Progr. of Low Temp. Phys., 1978, vol.7B, pag.517-589.
- [121] Grest G.S., Levin K., Nass M.J., Phys. Rev.B, 1982, vol.25, nr.7, pag.4562-4569.
- [122] Kopaev Yu.D., Meniailenko V.V., Molotkov S.N., JETF, 1979, vol.77, nr.1(7), pag.352-364.
- [123] Gorbatëvich A.A., Kopaev Yu.D., MolotkovS.N., FTT, 1979, vol.21, nr.8, pag.2351-2359.
- [124] Anderson P.W., Phys and Chem. of Solids, 1959, vol.11,nr.1/2, pag.26-30.
- [125] Gabovich A.M., Špigheli A.S., JETF, 1983, vol.84, nr.2, pag.694-706.
- [126] Kon L.Z., Moskalenko V.A., Tabakar V.P., FTT., 1985, vol. 27, nr.7, pag.2006-2012; FTT,1987, vol.29, nr.6, pag.1887-1889.
- [127] Psaltakis G.C., J. Phys.C, Sol. Stat. Phys., 1984, vol.17, nr.12, pag.2145-2150.

Partea III

PROPRIETĂȚILE
TERMODINAMICE ȘI
MAGNETICE ALE
SISTEMELOR PUTERNIC
ANIZOTROPE.
SUPRACONDUCTIVITATEA
ALIAJELOR BINARE

UNDE DE DENSITATE DE SPIN ȘI SUPRACONDUCTIVITATEA ÎN SISTEMELE CVAZIUNIDIMENSIONALE CU OCUPAREA NESIMETRICĂ A BENZII DE ENERGIE

7.1 Introducere

În ultimele decade un interes special a fost acordat problemei coexistenței de fază dintre supraconductibilitate (SC) și feromagnetism. Acest interes a apărut, în particular, datorită observațiilor experimentale privind supraconductivitatea sub presiune în compușii organici puternic anizotropi (vezi articolul de sinteză [1]), și de asemenea apariția structurilor magnetice unidimensionale în calcogenide [2], în care s-a observat coexistența supraconductibilității cu undele de densitate de spin (SDW). Interesul privind această problemă a crescut odată cu descoperirea supraconductivității de temperatură înaltă în oxizii metalici ceramici [3, 4], unde cu variația temperaturii s-a observat tranziția în starea SDW și tranziția supraconductoare [5].

Pe plan teoretic prezintă interes cunoașterea mecanismelor care duc la starea supraconductoare în astfel de sisteme. În lucrările [6, 7] s-a cercetat posibilitatea coexistenței SC și a SDW pe baza unui model electronic tridimensional simplificat în aproximația Hartree-Fock. În această teorie spațiul impulsurilor se separă în două domenii și se presupune că într-unul din ele este îndeplinită relația

$$\varepsilon(k) = -\varepsilon(k + Q_0), \quad (7.1)$$

unde ε este energia electronului; $2Q_0 = G$, G fiind un vector al rețelei reciproce. Se arată că datorită prezenței domeniului care nu permite reconstrucția pentru tranziția la undele de densitate de spin (nu toată suprafața Fermi este acoperită de gap-ul dielectric), devine posibilă existența a două tipuri de ordine la distanță - supraconductivitatea și undele de densitate de spin.

Observăm că această deducere este în acord cu rezultatele lui Bilboro și McMillan [8] privind posibilitatea coexistenței de fază supraconductibilitate și unde de densitate de sarcină în supraconductorii de tip A15.

În afară de aceasta, există o deosebire esențială între stările cu unde de densitate de sarcină și cele cu densitate de spin, deoarece starea cu unde de densitate de spin rupe simetria la inversarea timpului, iar starea cu unde de densitate de sarcină conservă această simetrie. Această particularitate duce la rezultate diferite. În particular, studiul densității de stări electronice în modelul tridimensional [9] a arătat că există o deosebire esențială a densității de stări electronice în faza de coexistență a undelor de densitate de sarcină și supraconductibilitate față de cazul undelor de densitate de spin și supraconductibilitate. S-a observat de asemenea o mare deosebire a dependenței de temperatură a parametrilor de ordine a coexistențelor de fază specificate.

Particularitatea caracteristică a sistemelor în care există coexistență de fază a undelor de densitate de spin și supraconductibilitate, este prezența unei puternice anizotropii. Acest lucru permite examinarea acestor sisteme ca sisteme cu dimensionalitate joasă.

Astfel, de exemplu, în lucrările [10, 11] cercetarea proprietăților compușilor organici $(\text{TMTSSF})_2$ ($X=\text{PF}_6, \text{AsF}_6, \text{ClO}_4$) a fost făcută pe baza modelului Hubbard bidimensional. În această teorie apariția supraconductibilității este condiționată de prezența energiei transversale, a cărei mărime se modifică de la un sistem la altul, și de asemenea de mărimea presiunii, aplicată sistemului respectiv. Se presupune că, banda de energie este umplută numai o pătrime.

Evident, proprietățile sistemelor cvaziunidimensionale în starea de unde de densitate de spin și supraconductibilitate vor fi diferite de proprietățile sistemelor în starea de unde de densitate de sarcină și supraconductibilitate. Avem în vedere studiul sistemelor cvaziunidimensionale cu repulsie slabă cu ocupare pe jumătate a benzii de energie ($\mu \neq 0$). După cum se arată în [12], un rol esențial în problema coexistenței de fază supraconductibilitate și unde de densitate de sarcină în sistemele cvaziunidimensionale îl joacă prezența unei abateri de la umplerea pe jumătate a ocupării benzii de energie. Mai târziu s-a arătat [13, 14] că, pe lângă condiția $\mu \neq 0$ un rol esențial în problema coexistenței supraconductibilității cu undele de densitate de sarcină îl joacă suprapunerea benzilor de energie și prezența benzilor tridimensionale, care nu au fost supuse restructurării datorită efectului Peirls.

În sistemele cvaziunidimensionale cu ocuparea pe jumătate a benzii de energie și o interacție coulombiană suficient de puternică dintre electroni, cu coborârea temperaturii apare o undă de densitate de spin cu vectorul de undă $Q_0 = 2k_F$. Această particularitate duce la apariția unui gap dielectric la suprafața Fermi și la lipsa purtătorilor de sarcină liberi în acest domeniu. Prin urmare, într-un astfel de sistem nu este posibilă apariția supraconductibilității.

Vom examina sistemul cvaziunidimensional cu repulsie la umplerea pe jumătate a benzii de energie electronice ($\mu \neq 0$). Dacă într-un astfel de sistem luăm în considerare procesele de umklapp, atunci pentru $\mu > \mu_{cr}$ apare unda de densitate de spin cu vectorul de undă $Q \neq 2k_F$ ($Q = Q_0 + q$, $q \ll k_F$). Aceasta duce la apariția gap-ului dielectric nu exact la nivelul Fermi, și prin urmare, la apariția purtătorilor liberi la suprafața Fermi, capabili să formeze perechi Cooper.

În acest fel, în modelul nostru nu există un domeniu în spațiul p care să nu fie supus reconstrucției pentru tranziția la starea de unde de densitate de spin, ca în cazul modelului din lucrarea [6], care descrie apariția supraconductibilității și se

examinează tranziția sistemului în starea de conducție din cauza modificării mărimii μ .

Cauza abaterii ocupării de la jumătatea benzii poate fi prezența unei alte benzi, care servește ca un rezervor de particule, și de asemenea variația mărimii μ sub influența presiunii sau a impurităților.

În sistemele reale complexe cu anizotropie puternică, pot acționa diferite mecanisme, care să ducă la apariția supraconductibilității în sistemele magnetice, și anume dielectrizarea parțială a suprafeței Fermi [6, 7], prezența abaterii umplerii benzii de la jumătate [15]-[17], prezența unei energii transversale de transport [10, 11].

După cum se știe, în cazul sistemelor riguros unidimensionale teoria câmpului mediu nu este aplicabilă. Trebuie totuși să subliniem că avem de a face cu un sistem model, în care electronii se mișcă într-o singură direcție, rețeaua fiind tridimensională, astfel că teoria câmpului mediu poate fi aplicată pentru studiul stării de unde de densitate de spin și supraconductibilitate.

În acest capitol, pe baza hamiltonianului Hubbard, cu adăugarea unui termen responsabil de supraconductivitate, se studiază proprietățile termodinamice ale sistemelor cvaziunidimensionale cu abatere de la ocuparea pe jumătate a benzii de energie. Se iau în considerație și procesele de umklapp.

Pentru faza mixtă SC+SDW se obține un sistem de ecuații pentru parametrul de ordine Δ al stării supraconductoare și cel al ordonării magnetice M . Se examinează o serie de cazuri limită, care permit să tragem o serie de concluzii despre coexistența acestor două faze cu ordine la distanță în sistemul cvaziunidimensional studiat. Pe baza metodelor numerice de calcul se face o analiză detaliată a proprietăților sistemelor examinate pentru diferite valori ale parametrului μ și a raportului $t = T_{c0}/T_{s0}$. Aici T_{c0} și T_{s0} sunt temperaturile critice respectiv supraconductoare (în lipsa magnetismului) și a tranziției magnetice (în lipsa supraconductivității pentru $\mu = 0$). Această analiză ne permite să afirmăm că comportarea sistemului depinde esențial de valorile mărimilor t și μ . Sunt posibile următoarele situații: SC și SDW coexistă într-un interval larg de temperaturi $0 < T < T_c$; SC și SDW coexistă pe un interval nu prea mare de temperaturi în apropierea lui $T = 0$; se observă apariția supraconductivității în punctul $T = T_{c2}$ și dispariția în punctul T_{c1} , adică revenirea sistemului la starea normală cu scăderea temperaturii.

7.2 Ecuațiile fundamentale

În aproximația câmpului mediu hamiltonianul sistemului examinat are forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{SDW}} + \mathcal{H}_{\text{BCS}}, \quad (7.2)$$

unde

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k\sigma} (\varepsilon(k) - \mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}; \quad (7.3)$$

$$\mathcal{H}_{\text{SDW}} = - \sum_{k\sigma} \left[\sigma M a_{k\sigma}^+ a_{k-Q,\sigma} + h.c. \right]; \quad (7.4)$$

$$\mathcal{H}_{\text{BCS}} = - \sum_k \left[\Delta a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ + h.c. \right]. \quad (7.5)$$

Aici $a_{k\sigma}^+$, $a_{k\sigma}$ sunt operatorii de creare și anihilare respectiv ai electronilor cu impulsul \mathbf{k} și spinul σ ; μ este abaterea față de umplerea pe jumătate a benzii de energie; Δ și M sunt parametrii de ordine supraconductor și al ordonării magnetice. Al doilea termen din formula (7.2) se referă la repulsia coulombiană a electronilor cu spini opuși, iar al treilea este interacția efectivă dintre electroni, responsabilă de supraconductivitate. Parametrii de ordine ai fazelor supraconductoare Δ și a celei magnetice M , care intră în (7.4) și (7.5), au forma

$$\Delta = VT \sum_k \sum_{\omega_n} F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n); \quad (7.6)$$

$$M = \frac{I}{2} T \sum_k \sum_{\omega_n} \sum_{\sigma} G_{k-Q,k}^{\sigma\sigma}(\omega_n), \quad (7.7)$$

unde V și I sunt constanta BCS și respectiv a interacției de schimb; F și $G^{\sigma\sigma}$ sunt transformatele Fourier ale funcției Green de temperatură, definite prin relațiile

$$F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} a_{-k\downarrow}^+(\tau) a_{k\uparrow}^+(\tau') \rangle; \quad (7.8)$$

$$G_{k-Q,k}^{\sigma\sigma}(\tau - \tau') = -\langle T_{\tau} a_{k-Q,\sigma}(\tau) a_{k,\sigma}^+(\tau') \rangle. \quad (7.9)$$

După transformarea Fourier, ecuațiile de mișcare pentru componentele funcției Green electronice pot fi prezentate sub forma

$$\begin{pmatrix} i\omega_n - \varepsilon_1 & \Delta & M & 0 \\ \Delta & i\omega_n + \varepsilon_1 & 0 & M \\ M & 0 & i\omega_n - \varepsilon_2 & \Delta \\ 0 & M\Delta & i\omega_n + \varepsilon_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{k,k}^{\uparrow\uparrow} \\ F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow} \\ G_{k-Q,k}^{\uparrow\uparrow} \\ F_{-k+Q,k}^{\downarrow\uparrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7.10)$$

unde

$$\varepsilon_1 = \varepsilon(k) - \mu; \quad \varepsilon_2 = \varepsilon(k - Q) - \mu; \quad \omega_n = (2n + 1)\pi T. \quad (7.11)$$

Soluția sistemului de ecuații (7.10) are forma:

$$\begin{aligned}
G_{k,k}^{\uparrow\uparrow}(\omega_n) &= -\frac{(i\omega_n + \varepsilon_1)(\omega_n^2 + \varepsilon_2^2 + \Delta^2) + M^2(i\omega_n - \varepsilon_2)}{D(\omega_n)}; \\
F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n) &= \frac{\Delta(\omega_n^2 + \varepsilon_2^2 + \Delta^2 - M^2)}{D(\omega_n)}; \\
G_{k-Q,k}^{\sigma\sigma}(\omega_n) &= \sigma \frac{M[M^2 - \Delta^2 - (i\omega_n + \varepsilon_1)(i\omega_n + \varepsilon_2)]}{D(\omega_n)}; \\
D(\omega_n) &= \omega_n^4 + \omega_n^2(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + 2M^2 + 2\Delta^2) + \varepsilon_1^2\varepsilon_2^2 - \\
&\quad - 2M^2\varepsilon_1\varepsilon_2 + \Delta^2(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2) + (M - \Delta)^2.
\end{aligned} \tag{7.12}$$

Substituind expresiile pentru funcția Green (7.12) în (7.6) și (7.7), obținem

$$\begin{aligned}
\Delta &= V \sum_k T \sum_{\omega_n} \frac{\Delta(\omega_n^2 + \varepsilon_2^2 + \Delta^2 - M^2)}{D(\omega_n)}; \\
M &= I \sum_k T \sum_{\omega_n} \frac{M[M^2 - \Delta^2 - (i\omega_n + \varepsilon_1)(i\omega_n + \varepsilon_2)]}{D(\omega_n)}.
\end{aligned} \tag{7.13}$$

Fără considerarea proceselor de umklapp trebuie îndeplinite condițiile $|k| < Q_0$ și $|k - Q_0| < Q_0$, ceea ce implică condiția $q < k < Q_0$ ($Q = Q_0 + q$, $Q_0 = 2k_F$). Considerarea proceselor de umklapp duce la faptul că trebuie ca acțiunea operatorului \mathcal{H}_{SDW} să se extindă pe întreaga celulă elementară și sumarea trebuie făcută între limitele $-Q_0 < k < Q_0$ [12].

Luăm legea de dispersie de forma

$$\varepsilon(k) = -w \cos kd, \tag{7.14}$$

unde W este semilărgimea benzii; d este constanta rețelei.

În formula (7.13) trecem de la sumare la integrare conform rețelei:

$$\sum_k \dots \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-Q_0}^{Q_0} \dots dk; \quad Q_0 = \frac{\pi}{d}.$$

Este indicat să despărțim domeniul de integrare $-Q_0 < k < Q_0$ în patru intervale: $-Q_0 < k < -Q_0 + q/2$; $-Q_0 + q/2 < k < q/2$; $q/2 < k < q$ și $q < k < Q_0$. Ultimul interval este legat de procesele normale, iar intervalul $-Q_0 < k < q$ de considerarea proceselor de umklapp. Reprezentăm energiile ε_1 și ε_2 sub forma

$$\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= \varepsilon_{k \pm q/2} \cos \frac{qd}{2} - \mu_{\pm}; & \varepsilon_2 &= -\left(\varepsilon_{k \pm q/2} \cos \frac{qd}{2} + \mu_{\pm} \right); \\
\mu_{\pm} &= \mu_{\pm} \eta_q; & \eta_q &= w \sin \frac{qd}{2}.
\end{aligned}$$

Semnul "plus" se referă la al doilea interval de integrare, iar semnul "minus" la celelalte trei intervale.

Să trecem la integrarea după mărimea $\varepsilon = \varepsilon_{k\pm q/2}$. Vom examina abaterile mici ale vectorului de undă al undei de densitate de spin de la $2k_F$ ($q/2k_F \ll 1$), și de aceea mai departe vom pune $\sin(qd/2) \approx (qd/2)$; $\cos(qd/2) \approx 1$. Ca urmare a acestor transformări sistemul de ecuații (7.13) se scrie sub forma

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{V}{2\pi wd} T \sum_{\omega_n} \Delta \left\{ \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon \frac{\omega_n^2 + (\varepsilon + \mu_-)^2 + \Delta^2 - M^2}{D(\varepsilon, \mu_-)} + \right. \\ &\quad \left. + \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\varepsilon \frac{\omega_n^2 + (\varepsilon_+)^2 + \Delta^2 - M^2}{D(\varepsilon, \mu_+)} \right\}; \\ M &= \frac{I}{2\pi wd} T \sum_{\omega_n} M \left\{ \int_{-w}^w d\varepsilon \frac{M^2 - \Delta^2 + \omega_n^2 + \varepsilon^2 - \mu_-^2}{D(\varepsilon, \mu_-)} + \right. \\ &\quad \left. + \int_{-w}^w d\varepsilon \frac{M^2 - \Delta^2 + \omega_n^2 + \varepsilon^2 - \mu_+^2}{D(\varepsilon, \mu_+)} \right\} \end{aligned} \quad (7.15)$$

unde

$$\begin{aligned} D(\varepsilon, \mu_{\pm}) &= \left[-\varepsilon_{\pm}^2 + M^2 \Delta^2 - \mu_{\pm}^2 \Delta^2 \right] \times \\ &\quad \times \left[\varepsilon^2 - \mu_{\pm}^2 + M^2 + \Delta^2 + \omega_n^2 + 2\sqrt{\mu_{\pm}^2 \omega_n^2 + M^2 \Delta^2 - \mu_{\pm}^2 \Delta^2} \right]. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Efectuând în formulele (7.15) integrarea după energie, obținem sistemul de ecuații pentru determinarea parametrilor de ordine Δ și M :

$$\ln \frac{T}{T_{c0}} = 2\pi T \sum_{\omega_n > 0} \left[\Phi_1(\mu, \Delta, M, \omega_n) - \frac{1}{\omega_n} \right]; \quad (7.17)$$

$$\ln \frac{T}{T_{s0}} = 2\pi T \sum_{\omega_n} \left[\Phi_2(\mu, \Delta, M, \omega_n) - \frac{1}{\omega_n} \right]; \quad (7.18)$$

$$\begin{aligned} \Phi_1(\mu, \Delta, M, \omega_n) &= \frac{1}{2} \left[I_1(\mu, \Delta, M, \omega_n) \theta(f_{1-}) + \right. \\ &\quad \left. + I_1(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) \theta(f_{1+}) + I_2(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) \theta(-f_{1-}) \right. \\ &\quad \left. + I_2(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) \theta(-f_{1+}) \right]; \end{aligned} \quad (7.19)$$

$$\begin{aligned} \Phi_2(\mu, \Delta, M, \omega_n) &= \frac{1}{2} \left[I_1(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) \theta(f_{1-}) + \right. \\ &\quad \left. + I_1(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) \theta(f_{1+}) + I_2(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) \theta(-f_{1-}) + \right. \\ &\quad \left. + I_2(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) \theta(-f_{1+}) \right]; \end{aligned} \quad (7.20)$$

$$\begin{aligned} J_1(\mu, \Delta, M, \omega_n) &= \frac{\mu^2 - M^2 + \sqrt{f_1}}{2[f_1(f_2 - 2\sqrt{f_1})]^{1/2}} \theta(f_2 - 2\sqrt{f_1}) - \\ &\quad - \frac{\mu^2 - M^2 - \sqrt{f_1}}{2[f_1(f_2 + 2\sqrt{f_1})]^{1/2}} \theta(f_2 + 2\sqrt{f_1}); \end{aligned} \quad (7.21)$$

$$J_2(\mu, \Delta, M, \omega_n) = \frac{-M^2 + \mu^2}{\sqrt{-f_1}} \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{-f_2 + 2i\sqrt{-f_1}}} - \operatorname{Im} \frac{1}{\sqrt{-f_2 + 2i\sqrt{-f_1}}}; \quad (7.22)$$

$$I_1(\mu, \Delta, M, \omega_n) = \frac{-\Delta^2 + \sqrt{f_1}}{2[f_1(f_2 - 2\sqrt{f_1})]^{1/2}} \theta(f_2 - 2\sqrt{f_1}) + \frac{\Delta^2 + \sqrt{f_1}}{2[f_1(f_2 + 2\sqrt{f_1})]^{1/2}}; \quad (7.23)$$

$$I_2(\mu, \Delta, M, \omega_n) = -\frac{\Delta^2}{\sqrt{-f_1}} \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{-f_2 + 2i\sqrt{-f_1}}} - \operatorname{Im} \frac{1}{\sqrt{-f_2 + 2i\sqrt{-f_1}}}; \quad (7.24)$$

$$f_{1\pm} = M^2 \Delta^2 - \mu_{\pm}^2 (\Delta^2 + \omega_n^2) \quad f_{2\pm} = \omega_n^2 + \Delta^2 + M^2 - \mu_{\pm}^2; \quad (7.25)$$

$$\mu_{\pm} = \mu \pm \eta_q; \quad \eta_q = w \sin \frac{qd}{2}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ 0, & x < 0 \end{cases}$$

Pentru determinarea semnului rădăcinii pătrate în aceste expresii s-a ales ramura cu partea imaginară pozitivă.

7.3 Valoarea temperaturii critice a ordonării magnetice și supraconductoare

Soluția sistemului de ecuații (7.17), (7.18) determină parametrii de ordine ai stării supraconductoare Δ și ai stării de unde de densitate de spin M pentru $T < T_c$, T_s (unde T_c este temperatura tranziției supraconductoare, iar T_s cea a ordonării magnetice). Acest sistem de ecuații pentru valori arbitrare ale parametrilor teoriei poate fi rezolvat numai numeric. Totuși, în anumite cazuri limită este posibil să obținem expresii analitice pentru cei doi parametri de ordine. Să examinăm aceste cazuri limită.

1. Pentru $\Delta = 0$ și $M \rightarrow 0$ ($T = T_s$), pe baza ecuației (7.18) se poate obține ecuația pentru determinarea temperaturii de tranziție a sistemului în starea de unde de densitate de spin în absența supraconductivității. Această ecuație are forma

$$\ln \frac{T_s}{T_{s0}} = -F(\mu, \eta_q, T_s); \quad (7.26)$$

$$F(\mu, \eta_q, T_s) = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left\{ \psi \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu_-}{2\pi T_s} \right) + \psi \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu_+}{2\pi T_s} \right) \right\} - \psi \left(\frac{1}{2} \right),$$

unde ψ este derivata logaritmului funcției Γ . Ecuația (7.26) coincide cu ecuația corespunzătoare pentru determinarea temperaturii critice a tranziției Peierls în sisteme cvaziunidimensionale pentru $\mu = 0$ din lucrarea [18]. Se vede ușor că $F = 0$

pentru $\mu_{\pm} = 0$ și $F > 0$ pentru $\mu_{\pm} \neq 0$. Prin urmare, minimumul lui F corespunde maximumului lui T_s . Din acest motiv ecuația (7.26) împreună cu condiția

$$\frac{\partial F}{\partial \eta_q} = 0 \quad (7.27)$$

ne dă sistemul de ecuații pentru determinarea lui T_s și η_q pentru un μ dat. Rezultatele sunt prezentate în tabelul 7.1. Din acest tabel se vede imediat că pentru $\bar{\mu} = \mu/T_{s0} = 1,073$ apare o undă de densitate de spin cu vectorul de undă $Q \neq 2k_F$. În acest caz valoarea $\eta_q > 0$ stabilizează starea magnetică în sistem.

Observăm că deoarece partea dreaptă a ecuației (7.26) este funcție pară de μ , unui μ negativ îi vor corespunde aceleași valori ale lui T_s și η_q , ca și în cazul unui $\mu > 0$.

2. Să studiem acum apariția supraconductivității pe fondul stării dielectrice, adică în sistemul de ecuații (7.17), (7.18) punem $T = T_c$, $\Delta = 0$, $M \neq 0$. În această limită sistemul respectiv de ecuații poate fi adus la forma

$$\begin{aligned} \ln \frac{T_{s0}}{T_{c0}} = \pi T \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} & \left[\frac{-M^2 + \mu_-^2}{\mu - \omega_n} \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{f_2^0 + 2i\mu_- \omega_n}} + \right. \\ & \left. + \frac{-M^2 + \mu_+^2}{\mu - \omega_n} \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{f_2^0 - 2i\mu_+ \omega_n}} \right], \end{aligned} \quad (7.28)$$

unde

$$f_{2\pm}^0 = f_{2\pm} \Big|_{\Delta=0} = \omega_n^2 + M^2 - \mu_{\pm}^2. \quad (7.29)$$

Ecuația (7.28) determină temperatura critică de tranziție a sistemului magnetic ($M \neq 0$) în starea supraconductoare. Să studiem această posibilitate în două cazuri limită: $T_c \approx T_s$ și $T_c \ll T_s$.

În cazul $T_c \approx T_s$ în partea dreaptă a lui (7.28) putem pune $M = 0$ și să aducem ecuația la forma

$$\ln \frac{T_{s0}}{T_{c0}} = \pi T_c \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \frac{1}{\omega_n} \left\{ \frac{\mu_+^2}{\omega_n^2 + \mu_+^2} + \frac{\mu_-^2}{\omega_n^2 + \mu_-^2} \right\}. \quad (7.30)$$

Din această ecuație rezultă că, pentru $\mu_+ = \mu_- = 0$ apariția supraconductivității este posibilă numai în cazul exotic $T_{s0} = T_{c0}$, iar pentru $\mu_{\pm} \neq 0$ trebuie îndeplinită condiția $T_{s0} > T_{c0}$.

Într-adevăr, pentru valori mici ale lui M , putem obține o ecuație simplă pentru determinarea lui T_c , punând în (7.17) $T = T_c$, $\Delta = 0$ și efectuând dezvoltarea în serie în raport cu mărimea $(M/T_c)^2$. Cu precizia până la termeni de ordinul unu în această mărime, găsim

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = \pi T_c \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \frac{M^2}{2\omega_n} \left[\frac{3\omega_n^2 + \mu_+^2}{(\omega_n^2 + \mu_+^2)^2} + \frac{3\omega_n^2 + \mu_-^2}{(\omega_n^2 + \mu_-^2)^2} \right]$$

htb

Tabelul 7.1: Relația dintre mărimile μ și η_q .

μ/T_{s0}	η_q/T_{s0}	T_s/T_{s0}	μ/T_{s0}	η_q/T_s	T_s/T_{s0}
1,072	0	0,564	1,13	0,77	0,465
1,073	0,059	0,561	1,14	0,81	0,456
1,08	0,35	0,541	1,15	0,844	0,447
1,09	0,51	0,52	1,16	0,875	0,438
1,1	0,601	0,5	1,17	0,904	0,431
1,12	0,724	0,476	1,18	0,93	0,42

sau

$$\begin{aligned} \frac{T_c}{T_{c0}} = 1 - \frac{M^2}{(2\pi T_c)^2} \sum_{n \geq 0} \left\{ \frac{3\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{\mu_+}{2\pi T_c}\right)^2}{\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + (\mu_+/2\pi T_c)^2} + \right. \\ \left. + \frac{3\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + (\mu_-/2\pi T_c)^2}{\left[\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 + (\mu_-/2\pi T_c)^2\right]^2} \right\} \frac{1}{4(n + 1/2)}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Coeficientul dezvoltării raportului T_c/T_{c0} în raport cu cantitatea mică $M^2/(2\pi T_c)^2$ depinde de parametrul μ_{\pm} și scade cu creșterea acestui parametru.

În cazul $T_c \ll T_s$ comportarea membrului drept al ecuației (7.28) depinde de raportul dintre parametrul de ordine M și μ_{\pm} . Să studiem comportarea funcției

$$A(\mu, M) = 2\pi T_c \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \frac{-M^2 + \mu^2}{\mu \omega_n} \operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{-f_2^0 + 2i\mu\omega_n}} \quad (7.32)$$

pentru diferite valori ale raportului dintre M și μ .

Pentru $M > \mu$ această expresie nu are singularități logaritmice în raport cu temperatura și în limita examinată ($T_c \ll T_s$) și putem trece în ea de la sumarea după ω_n la integrare după ω ($T_c \rightarrow 0$). Obținem astfel

$$A(\mu, M) = -\frac{\sqrt{M^2 - \mu^2}}{\mu} \operatorname{arctg} \frac{\mu}{\sqrt{M^2 - \mu^2}}. \quad (7.33)$$

Pe baza ecuațiilor (7.28) și (7.33) avem pentru $\mu_- < \mu_+ < M$

$$\ln \frac{T_{s0}}{T_{c0}} = - \left\{ \frac{\sqrt{M^2 - \mu_-^2}}{\mu_-} \operatorname{arctg} \frac{\mu_-}{\sqrt{M^2 - \mu_-^2}} + \frac{\sqrt{M^2 - \mu_+^2}}{\mu_+} \operatorname{arctg} \frac{\mu_+}{\sqrt{M^2 - \mu_+^2}} \right\}. \quad (7.34)$$

Astfel că $T_{s0} > T_{c0}$, nu poate fi satisfăcută pentru nici un M . Prin urmare, pentru $\mu_- < \mu_+ < M$ supraconductivitatea nu poate apărea pe fondul stării de unde de densitate de spin. Acest rezultat este contrar cazului tranziției Peierls [12], când pentru o relație analoagă dintre gap-ul dielectric și mărimile μ_{\pm} este posibilă formarea de perechi Cooper.

Pentru $M < \mu$ expresia (7.32) are o divergență logaritmică în raport cu temperatura. Separăm această divergență și scriem expresia (7.32) sub forma

$$A(\mu, M) = \frac{\sqrt{\mu^2 - M^2}}{\mu} \ln \frac{2\omega_D \gamma}{\pi T_c} + \frac{\mu^2 - M^2}{\mu} 2\pi T_c \times \\ \times \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \left[\operatorname{Re} \frac{1}{\sqrt{-f_2^0 + 2i\mu\omega_n}} - \frac{1}{\sqrt{\mu^2 - M^2}} \frac{1}{\omega_n} \right]. \quad (7.35)$$

Mai departe, trecând în al doilea termen al acestei expresii de la sumare la integrare ($T_c \rightarrow 0$) și efectuând integrarea după ω , găsim

$$A(\mu, M) = \frac{\sqrt{\mu^2 - M^2}}{\mu} \ln \frac{4(\mu^2 - M^2)\gamma}{[\mu + \sqrt{\mu^2 - M^2}]\pi T_c}. \quad (7.36)$$

Pe baza ecuațiilor (7.28), (7.33) și (7.35), pentru temperatura critică T_c în cazul $\mu_- < M < \mu_+$, obținem

$$T_c = \frac{4(\mu_+^2 - M^2)\gamma}{\pi[\mu_+ + \sqrt{\mu_+^2 - M^2}]} \exp \left\{ -\frac{2\mu_+}{\sqrt{\mu_+^2 - M^2}} \left[\ln \frac{T_{s0}}{T_{c0}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\sqrt{M^2 - \mu_-^2}}{2\mu_-} \operatorname{arctg} \frac{\mu_-}{\sqrt{M^2 - \mu_-^2}} \right] \right\}. \quad (7.37)$$

Valoarea mică a temperaturii critice T_c este condiționată de factorul exponențial.

În cazul $M < \mu_- < \mu_+$, pe baza ecuațiilor (7.28) și (7.36) avem

$$T_c = \frac{4\gamma}{\pi} \left(\frac{T_{c0}}{T_{s0}} \right)^d \left(\frac{\mu_+^2 - M^2}{\mu_- + \sqrt{\mu_-^2 + M^2}} \right)^k \left(\frac{\mu_+^2 - M^2}{\mu_+ + \sqrt{\mu_+^2 - M^2}} \right)^l, \quad (7.38)$$

unde

$$d = \left(\frac{\sqrt{\mu_-^2 - M^2}}{2\mu_-} + \frac{\sqrt{\mu_+^2 - M^2}}{2\mu_+} \right)^{-1}; \\ k = \left(\frac{\sqrt{\mu_+^2 - M^2}}{\sqrt{\mu_-^2 - M^2}} \frac{\mu_-}{\mu_+} + 1 \right)^{-1}; \\ l = \left(\frac{\sqrt{\mu_-^2 - M^2}}{\sqrt{\mu_+^2 - M^2}} \frac{\mu_+}{\mu_-} + 1 \right)^{-1}. \quad (7.39)$$

Expresiile obținute (7.37) și (7.38) pentru temperatura de tranziție a sistemului magnetic în starea supraconductoare se deosebesc de formulele corespunzătoare pentru dielectricul Peierls. Pentru aceleași valori ale parametrilor care intră în aceste formule, temperatura critică de tranziție a sistemului magnetic în starea supraconductoare este mai mică decât temperatura critică a tranziției supraconductoare a dielectricului Peierls. Prin urmare, condiția de apariție a supraconductivității în sistemele magnetice pentru $M < \mu_- < \mu_+$ este mult mai restrictivă decât în cazul dielectricului Peierls.

3. Să examinăm cazul limită invers, și anume $T_c > T_s$. Studiul ecuației (7.18) pentru $T = T_s$ ($M = 0$, $\Delta \neq 0$) arată că membrul drept pentru $\Delta \neq 0$ nu are singularitate logaritmică în raport cu temperatura, caracteristică pentru tranziția în starea SDW. Prin urmare, lipsește tranziția în starea magnetică și sistemul poate trece numai în starea SC.

Mai departe ne vom baza pe aceste rezultate și vom examina cazul $T_s > T_c$.

7.4 Calculul energiei libere

Vom pleca de la identitatea matematică

$$F(\Delta, M) - F(0, 0) = \int_0^\Delta \Delta'^2 d\Delta' \frac{d}{d\Delta'} \left(\frac{1}{V} \right) + \int_0^M M'^2 dM' \frac{d}{dM'} \left(\frac{1}{I} \right)_{V=0}. \quad (7.40)$$

Este indicat ca sistemul de ecuații (7.17), (7.18) să fie pus sub forma

$$\frac{1}{V} = 2\pi T N_0 \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \Phi_1(\mu, \Delta, M, \omega_n); \quad (7.41)$$

$$\frac{1}{I} = 2\pi T N_0 \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \Phi_2(\mu, \Delta, M, \omega_n). \quad (7.42)$$

Integrând prin părți formula (7.40), obținem

$$F(\Delta, M) - F(0, 0) = \frac{\Delta^2}{2} - 4\pi T N_0 \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \int_0^\Delta \Delta' d\Delta' \Phi_1(\mu, \Delta', M, \omega_n) + \frac{M^2}{I} - 4\pi T N_0 \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \int_0^M M' dM' \Phi_2(\mu, 0, M', \omega_n). \quad (7.43)$$

Substituind (7.41) și (7.42) în expresia (7.43) și efectuând integrările după Δ' și M' , obținem

$$F(\Delta, M) - F(0, 0) = \frac{\Delta^2}{V} + \frac{M^2}{I} - 2\pi T \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \left[\phi(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) + \phi(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) \right] - 2\pi T N_0 \sum_{0 < \omega_n < \omega_D} \left[\phi(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) + \psi(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) \right] \quad (7.44)$$

unde

$$\begin{aligned} \phi(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) &= \theta(f_1) \frac{1}{2} (\sqrt{f_2 - 2\sqrt{f_1}} + \sqrt{f_2 + 2\sqrt{f_1}}) + \\ &+ \theta(-f_1) \operatorname{Im} \sqrt{-f_2 + 2i\sqrt{-f_1}} - \operatorname{Im} \sqrt{(i\omega_n + \mu)^2 - M^2}; \end{aligned} \quad (7.45)$$

$$\psi(\mu, M, \omega_n) = \operatorname{Im} \sqrt{(i\omega_n + \mu)^2 - M^2} - \omega_n \operatorname{sign} \omega_n, \quad (7.46)$$

f_1 și f_2 se determină din formulele (7.25). Având expresia energiei libere (7.44), putem deduce sistemul de ecuații pentru determinarea parametrilor de ordine Δ și M folosind condiția de minim a acestei mărimi:

$$\frac{\partial F(\Delta, M)}{\partial \Delta^2} = 0; \quad \frac{\partial F(\Delta, M)}{\partial M^2} = 0. \quad (7.47)$$

Se verifică ușor că ecuațiile (7.47) duc la sistemul de ecuații (7.41), (7.42). Deoarece vrem să studiem apariția supraconductibilității într-un sistem magnetic, mai departe vom studia diferența energiilor libere

$$\begin{aligned} \delta F &= F(\Delta, M) - F(0, M) = \Delta^2 N_0 \ln \frac{T}{T_{c0}} - 2\pi T N_0 \times \\ &\times \sum_{\omega_n > 0} [\phi(\mu_-, \Delta, M, \omega_n) + \phi(\mu_+, \Delta, M, \omega_n) - \Delta^2 / \omega_n], \end{aligned} \quad (7.48)$$

unde

$$\begin{aligned} F(0, M) &= F(0, 0) + N_0 M^2 \ln \frac{T}{T_{s0}} - 2\pi T N_0 \times \\ &\times \sum_{\omega_n > 0} \left\{ \operatorname{Im} (\sqrt{(i\omega_n + \mu_+)^2 - M^2} + \sqrt{(i\omega_n + \mu_-)^2 - M^2}) - 2\omega_n - \frac{M^2}{\omega_n} \right\} \end{aligned} \quad (7.49)$$

7.5 Domeniul de temperaturi apropiate de temperatura de tranziție supraconductoare

Pentru temperaturi $T \approx T_c$ în ecuația (7.17) facem dezvoltarea în raport cu Δ^2 și scriem rezultatul sub forma

$$\ln \frac{T}{T_{c0}} = f_0 - \frac{1}{2} f_1 \Delta^2 + \frac{3}{8} \Delta^4 f_2 + \dots, \quad (7.50)$$

unde

$$f_0 = 2\pi T \sum_{\omega_n \geq 0} \left\{ \frac{1}{2} [\phi(\mu_-, \omega_n, M) + \psi_0(\mu_+, \omega_n, M)] - \frac{1}{\omega_n} \right\}; \quad (7.51)$$

$$f_1 = 2\pi T \sum_{\omega_n \geq 0} [\psi_1(\mu_-, \omega_n, M) + \psi_1(\mu_+, \omega_n, M)]; \quad (7.52)$$

$$f_2 = \pi T \sum_{\omega_n \geq 0} [\psi_2(\mu_-, \omega_n, M) + \psi_2(\mu_+, \omega_n, M)]; \quad (7.53)$$

$$\psi_0(\mu, \omega_n, M) = -\text{Im} \left[\left(\frac{ib}{\mu\omega_n} + 1 \right) \frac{1}{\sqrt{-M^2 + (i\omega_n + \mu^2)}} \right] \quad (7.54)$$

$$\begin{aligned} \psi_1(\mu, \omega_n, M) = \text{Im} \left\{ \frac{ib^2}{(\mu\omega_n)^3} \frac{1}{\sqrt{-M^2 + (i\omega_n + \mu)^2}} + \right. \\ \left. + \left(1 + \frac{ib}{\mu\omega_n} \right)^2 \frac{1}{\sqrt{[-M^2 + (i\omega_n + \mu)^2]^{3/2}}} \right\} \end{aligned} \quad (7.55)$$

$$\begin{aligned} \psi_2(\mu, \omega_n, M) = \text{Im} \left\{ \frac{ib}{(\mu\omega_n)^5} \frac{1}{\sqrt{-M^2 + (i\omega_n + \mu)^2}} + \right. \\ \left. + \frac{ib^2(1 + ib/\mu\omega_n)}{(\mu\omega_n)^3[-M^2 + (i\omega_n + \mu)^2]^{3/2}} + \frac{(1 + ib/\mu\omega_n)^3}{[-M^2 + (i\omega_n + \mu)^2]^{5/2}} \right\} \end{aligned} \quad (7.56)$$

Aici $b = M^2 - \mu^2$. Dezvoltând acum diferența energiilor libere (7.48) în raport cu Δ^2 și folosind ecuația (7.50), obținem

$$\delta F = \frac{N_0 \Delta^4}{4} [-f_1 + \Delta^2 f_2 + \dots]. \quad (7.57)$$

Pentru $f_1 > 0$ avem o tranziție de fază de ordinul doi, iar pentru $f_1 < 0$ tranziția este de ordinul unu. Ecuația $f_1 = 0$ determină valoarea parametrului μ pentru care se modifică tipul tranziției de fază. Dezvoltând mai departe relația (7.50) în raport cu mărimea $1 - T/T_c$ și limitându-ne la termenii pătratici în raport cu Δ , găsim ușor expresia pentru parametrul de ordine

$$\Delta^2 = \frac{2}{f_1} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \left(1 - T_c \frac{\partial f_0}{\partial T} \Big|_{T=T_c} \right). \quad (7.58)$$

Substituind (7.58) în (7.57), găsim pentru energia liberă

$$\frac{\partial F}{N_0} = -\frac{1}{f_1} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^2 \left(1 - T \frac{\partial f_0}{\partial T} \Big|_{T=T_c} \right)^2. \quad (7.59)$$

Ca urmare, pentru diferența entropiilor sistemului în starea supraconductoare și în cea normală, în apropierea lui T_c și saltul căldurii specifice în punctul $T = T_c$ obținem respectiv relațiile:

$$\frac{S_S - S_N}{N_0} = -\frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\partial F}{N_0} \right) = -\frac{2}{T_c} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \left(1 - T \frac{\partial f_0}{\partial T} \Big|_{T=T_c} \right)^2; \quad (7.60)$$

$$\frac{C_S - C_N}{N_0} = T \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{S_S - S_N}{N} \right) \Big|_{T=T_c} = \frac{2}{T_c} \frac{1}{f_1} \left(1 - T \frac{\partial f_0}{\partial T} \Big|_{T=T_c} \right). \quad (7.61)$$

Formula pentru saltul căldurii specifice se deosebește de expresia cunoscută pentru acest salt din cadrul teoriei BCS:

$$\left(\frac{C_S - C_N}{N_0} \right)_{\text{BCS}} = \frac{8\pi^2 T_c}{7\zeta(3)}. \quad (7.62)$$

7.6 Calcule numerice și discuția rezultatelor

Coexistența supraconductibilității și a stării de unde de densitate de spin se determină din condiția $\Delta \neq 0$ și $M \neq 0$, ceea ce corespunde soluției nebanale a sistemului de ecuații (7.17), (7.18). Împreună cu acestea este necesar ca diferența energiilor libere $\delta F = F(\Delta, M) - F(0, M)$, calculată conform formulei (7.48), să fie o mărime negativă, ceea ce corespunde generării fazei supraconductoare pe fondul stării de unde de densitate de spin. În teoria prezentată avem de a face cu parametrii $t = T_{c0}/T_{s0}$, $\bar{\mu} = \mu/T_{s0}$, η_q și T . Măreimea T_{c0} (T_{s0}) se determină prin constanta de interacție BCS (de schimb) și frecvența Debye ω_D (lărgimea benzii w). Abaterea de la umplerea pe jumătate a benzii $\bar{\mu}$ și mărimea η_q nu sunt independente. Relația dintre ele, obținută prin rezolvarea numerică a sistemului de ecuații (7.26) și (7.27), este prezentată în fig. 7.1.

Particularitatea caracteristică a sistemului examinat este dependența esențială de parametrii t și $\bar{\mu}$.

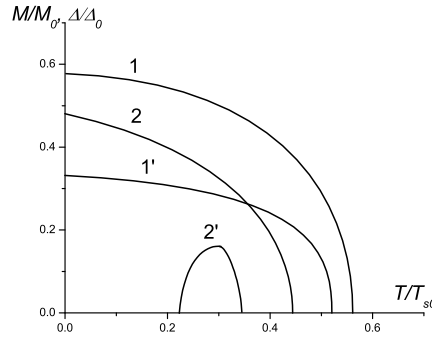


Figura 7.1: Dependenta parametrilor de ordine M/M_0 (1 și 2) și Δ/Δ_0 (1' și 2') de temperatură. Curbele 1 și 1' corespund cazului $t = 0,7$, $\bar{\mu} = 1,08$, iar curbele 2 și 2' cazului $t = 0,5$, $\bar{\mu} = 1,17$.

Pe fig.7.1 sunt prezentate rezultatele rezolvării numerice a sistemului de ecuații (7.17), (7.18) pentru două cazuri: 1a) $t = 0,7$, $\bar{\mu} = 1,08$ și 1b) $t = 0,5$, $\bar{\mu} = 1,17$ pe tot intervalul de temperaturi. Aici curbele 1 și 1' (2 și 2') corespund dependenței lui M/M_0 și Δ/Δ_0 pentru cazul 1a (1b). În cazul 1a există un domeniu larg de coexistență a SC și SDW și valori foarte apropiate a mărimilor T_s și T_c . În cazul 1b supraconductibilitatea apare pe fondul stării magnetice în punctul $T_{c1} = 0,31T_{s0}$ și distruge magnetismul în punctul $T_{c2} = 0,2T_{s0}$. Apare apoi efectul trecerii în starea normală.

Pe fig.7.2 se prezintă dependența parametrilor de ordine M/M_0 și Δ/Δ_0 (curbele 1 și 1' respectiv) ca funcții de temperatură pentru $t = 0,9$ și $\bar{\mu} = 1,09$ (numim aceste valori cazul 2). Aici de asemenea, ca și în cazul 1b, magnetismul distruge supraconductivitatea la temperaturi joase. Astfel în punctul $T = T_{c2} = 0,2T_{s0}$ parametrul M crește brusc. Curba întreruptă de pe această figură corespunde

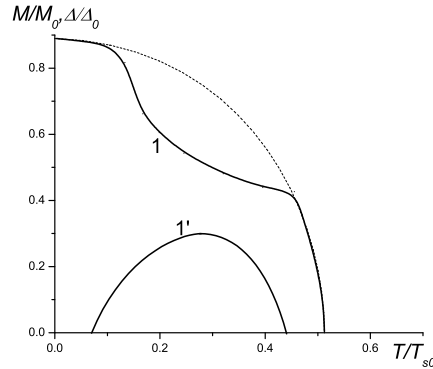


Figura 7.2: Dependenta parametrilor de ordine M/M_0 și Δ/Δ_0 (1 și 1' respectiv) de temperatură pentru $t = 0,9$, $\bar{\mu} = 1,09$.

valorilor mărimii M/M_0 în lipsa supraconductibilității ($\Delta = 0$).

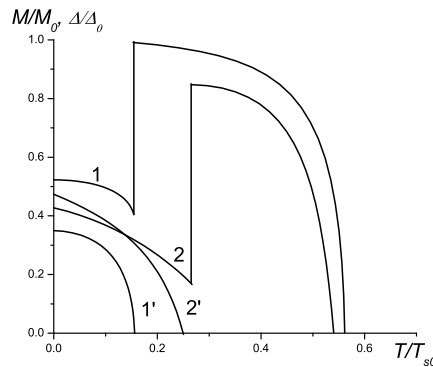


Figura 7.3: Dependenta parametrilor de ordine M/M_0 (1 și 2) și Δ/Δ_0 (1' și 2') de temperatură. Curbele 1 și 1' corespund cazului $t = 0,3$, $\bar{\mu} = 1,073$, iar curbele 2 și 2' cazului $t = 0,3$, $\bar{\mu} = 1,079$.

Pe fig.7.3 este dată dependența mărimilor M/M_0 și Δ/Δ_0 de temperatură pentru două cazuri: 3a) $t = 0,3$, $\bar{\mu} = 1,073$ (curbele 1 și 1' respectiv) și 3b) $t = 0,3$, $\bar{\mu} = 1,079$ (curbele 2 și 2'). În ambele cazuri există un domeniu redus de coexistență SC și SDW la temperaturi joase. În punctele $T = T_c = 0,158T_{s0}$ (cazul 3a) și $T = 0,28T_{s0}$ (cazul 3b) momentul magnetic al sistemului crește brusc tocmai acolo unde supraconductivitatea dispăre.

Observăm că, pentru alegerea soluției pentru parametrul de ordine M în domeniul de valori $T > T_c$, am folosit condiția de energie minimă a stării SDW

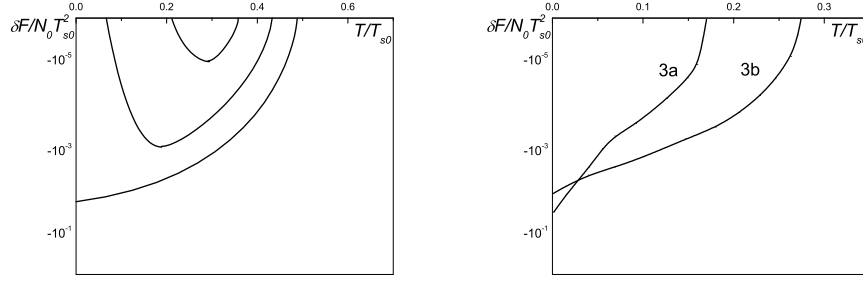


Figura 7.4: Dependența de temperatură a diferenței energiilor libere pentru diferite valori ale parametrilor t și $\bar{\mu}$. Numerotarea curbelor corespunde cazurilor analizate.

$F(0, M) - F(0, 0) < 0$ (vezi formula (7.49)).

Dependența corespunzătoare de temperatură a diferenței energiilor libere $\delta F = F(\Delta, M) - F(0, M)$, calculată pe baza relației (7.48) și a sistemului de ecuații (7.17) și (7.18), pentru toate valorile parametrilor $\bar{\mu}$ și t examinate mai sus, este redată în fig.7.4. Aceste rezultate sunt în acord cu posibilitatea coexistenței de fază SC și SDW în domeniul respectiv de temperaturi.

Domeniul de coexistență SC și SDW depinde esențial de parametrii teoriei t și $\bar{\mu}$. Astfel, SC și SDW coexistă într-un domeniu larg de temperaturi în apropierea lui $T = 0$, și de asemenea, în domeniul temperaturilor joase. Pentru o anumită temperatură $T = T_{c1}$ apare SC, iar pentru $T = T_{c2}$ magnetismul distruge starea SC, adică are loc un fenomen de trecere a sistemului în stare normală.

După cum s-a menționat mai sus, apariția supraconductivității în sistemul examinat este posibilă datorită faptului că gap-ul dielectric este deplasat față de suprafața Fermi, care la rândul său, duce la apariția purtătorilor liberi, care formează perechi Cooper.

Mai departe, prezintă interes să examinăm cum depinde de parametrul $\bar{\mu}$ temperatura critică a tranziției supraconductoare T_c pentru diferite valori ale lui t . Punând în ecuațiile (7.17) și (7.18) $\Delta = 0$, găsim sistemul de ecuații pentru determinarea mărimilor T_c și $M(T_c)$. Soluția numerică a acestui sistem ne permite să reprezentăm dependența temperaturii critice T_c de parametrul $\bar{\mu}$ pentru valori date ale lui t .

Pe fig.7.5 este reprezentată dependența lui T_c de $\bar{\mu}$ (curba 1 corespunde lui $t = 0,9$, curba 2 lui $t = 0,7$ și curba 3 lui $t = 0,5$), și de asemenea dependența mărimii Δ/Δ_0 pentru $T = 0$ ca funcție de $\bar{\mu}$ (curba 4 corespunde lui $t = 0,9$ și curba 5 lui $t = 0,7$). De aici se vede că nu mai este îndeplinită condiția care există pentru supraconductorii izotropi și anume că $\Delta(0)\Delta_0 = T_c/T_{c0}$. Pentru toate aceste valori ale lui $\bar{\mu}$ are loc inegalitatea $\Delta(0)/\Delta_0 < T_c/T_{c0}$, și de asemenea inegalitatea $M(0)/M_0 \neq T_s/T_{s0}$. Conform cu soluțiile ecuației pentru T_c , reprezentate pe fig.7.5, există un domeniu de valori ale lui $\bar{\mu}$, pentru care se observă o corespondență neunivocă dintre mărimile T_c și $\bar{\mu}$, ceea ce corespunde trecerii sistemului în stare normală, despre care a fost vorba mai sus în legătură cu dependența parametrilor

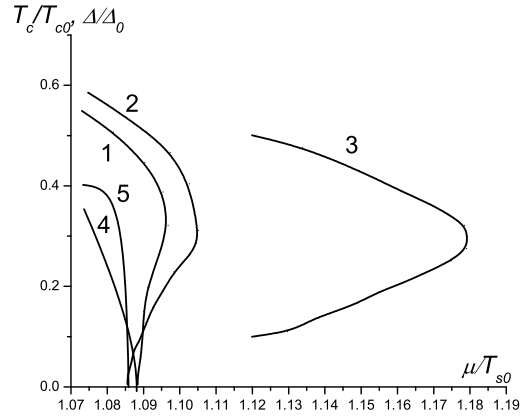


Figura 7.5: Dependența temperaturii de tranziție supraconductoare T_c (1-3) și a parametrului de ordine Δ (4,5) de $\bar{\mu}$.

de ordine de temperatură.

Observăm că, tranziția de fază în starea supraconductoare pentru toate valorile examinate ale lui $\bar{\mu}$ și t este o tranziție de fază de ordinul doi. Această concluzie o facem pe baza calculului coeficientului f_1 din dezvoltarea energiei libere (7.44). Substituind în formula (7.52) valorile lui T_c și $M(T_c)$ pentru diferite valori date ale lui t și $\bar{\mu}$ și efectuând sumarea după n , obținem că f_1 nu își schimbă semnul și rămâne pozitiv pentru toate valorile lui μ și t .

PROPRIETĂȚILE TERMODINAMICE ALE SUPRACONDUCTORILOR PUTERNIC ANIZOTROP ÎN CÂMP MAGNETIC

8.1 Introducere

După cum s-a specificat în cap.7, un interes deosebit îl prezintă problema coexistenței de fază supraconductivitate și unde de densitate de spin în sistemele puternic anizotrope. Pe plan teoretic, foarte fecundă a fost ideea de suprafață Fermi parțial dielectrică [8]. Conform acestei idei spațiul impulsurilor se separă în două domenii. În primul domeniu cu densitatea de stări la suprafața Fermi egală cu N_1 are loc degenerarea energiei electronului (este îndeplinită relația (7.1)). Această degenerare duce la instabilitatea stării metalice a sistemului în raport cu apariția SDW și formarea gap-ului dielectric pe porțiunea respectivă a suprafeței Fermi.

Al doilea domeniu cu densitatea stărilor electronice egală cu N_2 nu este supus restructurării pentru tranziția la starea cu unde de densitate de spin. Prezența celui de al doilea domeniu, în care lipsește gap-ul dielectric la suprafața Fermi, dă posibilitatea apariției supraconductibilității în substanțele puternic anizotrope. Într-un astfel de sistem devine posibilă coexistența SC și SDW, dacă temperatura de tranziție în starea SDW, (T_s), este mai mare decât temperatura de tranziție în starea supraconductoare, (T_c) [6, 7]. În particular, rezultatul interesant al acestui model este posibilitatea de apariție a supraconductibilității magnetice, dacă aceasta are loc la temperaturi suficient de înalte.

După cum s-a arătat în [6, 7], [15]-[17] (vezi cap.7), ordonarea magnetică coboară temperatura de tranziție supraconductoare. De asemenea, câmpul magnetic extern distruge supraconductivitatea datorită proceselor de răsturnare ale spinului (spin flip) electronilor, care formează perechile Cooper [20, 21].

În lucrările [22, 23] se introduce câmpul intern H_Q , care nu depinde de câmpul magnetic extern H_0 și de temperatură și se studiază proprietățile supraconductoare ale modelului unidimensional cu banda umplută pe jumătate. S-a obținut rezultatul important conform căruia, când câmpul intern este mare și ca valoare este aproape de câmpul extern $H_0 \sim H_Q$, este favorizată starea supraconductoare. În acest capitol se va studia influența câmpului magnetic extern H_0 asupra proprie-

tăților termodinamice ale sistemelor magnetice puternic anizotrope, în care poate coexista SC și SDW. Pentru aceasta se folosește modelul descris mai sus cu suprafață Fermi parțial dielectrică și se aplică aproximația câmpului mediu, care descrie bine sistemele tridimensionale.

Se obține un sistem de ecuații pentru cei doi parametri de ordine, supraconductor Δ și magnetic \mathbf{M} în câmp magnetic extern \mathbf{H}_0 (se examinează cazurile $\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{M}$ și $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$). Se calculează diferența energiilor libere ale fazei supraconductoare și a celei normale și se analizează comportarea sistemului într-o serie de cazuri limită. Se calculează de asemenea saltul căldurii specifice în punctul $T = T_c$ și se studiază dependența de câmpul magnetic \mathbf{H}_0 . Se arată că valorile mărimilor termodinamice ale sistemului examinat depind de raportul dintre densitățile de stări N_1 și N_2 , care corespund diferitelor domenii ale suprafeței Fermi anizotrope, și se deosebesc esențial de rezultatele modelului BCS.

Mai mult, metodele numerice permit o analiză detaliată a stării sistemului studiat și determină soluțiile care corespund stărilor favorabile energetic. Pe baza acestor soluții se construiesc diagramele de fază. S-a stabilit că, din punct de vedere energetic mai favorabilă este starea sistemului cu $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$.

Deoarece supraconductivitatea este foarte sensibilă la câmpul magnetic extern, acest capitol permite o înțelegere mai profundă a fenomenului care are loc în sistemele examinate în câmp magnetic, dar dă și o justificare a acestui model. Acest lucru se face pe baza lucrărilor [24, 25].

Hamiltonianul sistemului are forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{BCS}} + \mathcal{H}_{\text{SDW}} + \mathcal{H}_{H_0}, \quad (8.1)$$

unde

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_{k,\alpha} \varepsilon_k a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha}; \\ \mathcal{H}_{\text{BCS}} &= -\Delta \sum_k (a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ + h.c.); \\ \mathcal{H}_{\text{SDW}} &= -M_Q \sum_{k \in I, \alpha, \beta} (\sigma^i)_{\alpha\beta} (a_{k\alpha}^+ a_{k+Q\beta} + h.c.); \\ \mathcal{H}_{H_0} &= - \sum_{k,\alpha,\beta} H_0 (\sigma^z)_{\alpha\beta} a_{k\alpha}^+ a_{k\beta}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Aici \mathcal{H}_0 este energia cinetică a electronilor de conducție; \mathcal{H}_{BCS} și \mathcal{H}_{SDW} sunt operatorii corespunzători supraconductibilității și respectiv magnetismului; \mathcal{H}_{H_0} este interacția electronilor cu câmpul magnetic extern; $a_{k\alpha}^+$, $a_{k\alpha}$ sunt operatorii de creare și anihilare a electronilor; $\hat{\sigma}$ este matricea Pauli.

Aici s-a ales reprezentarea în care câmpul magnetic coincide cu axa z . În această reprezentare indicii $i = z$ corespund cazului câmpului paralel ($\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{M}$) și $i = x$ cazului câmpului perpendicular ($\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$). Fiecare din aceste două cazuri trebuie analizat separat. Conform cu (8.1) și (8.2) există două domenii diferite în spațiul impulsurilor. În domeniul I, unde are loc degenerarea energiei (7.1), pe lângă operatorii \mathcal{H}_{BCS} și \mathcal{H}_{H_0} acționează și operatorul \mathcal{H}_{SDW} , care duce la apariția

SDW. În domeniul II acționează operatorul care descrie supraconductorul în câmp magnetic.

Introducem funcțiile Green

$$\begin{aligned} G_{kk'}^{\sigma\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle T a_{k\sigma}(\tau) a_{k'\sigma'}^{\dagger}(\tau') \rangle; \\ F_{-k,k'}^{\downarrow\uparrow}(\tau - \tau') &= -\langle T a_{-k\downarrow}^{\dagger}(\tau) a_{k'\uparrow}(\tau') \rangle. \end{aligned} \quad (8.3)$$

8.2 Cazul câmpului magnetic paralel ($H_0 \parallel M$)

8.2.1 Ecuațiile fundamentale

În cazul $H_0 \parallel M$ în domeniul I este necesar să examinăm sistemul de ecuații pentru funcțiile Green $G_{kk}^{\sigma\sigma}(\omega_n)$, $F_{-k,k}^{-\sigma\sigma}(\omega_n)$, $G_{k+Q,k}^{\sigma\sigma}(\omega_n)$ și $F_{-k-Q,k}^{-\sigma\sigma}(\omega_n)$.

Pe baza hamiltonianului (8.1) în reprezentarea (\mathbf{k}, ω_n) pentru aceste funcții obținem sistemul de ecuații

$$\begin{pmatrix} \Omega_- & \Delta & M & 0 \\ \Delta & \Omega_+ & 0 & M \\ M & 0 & \Omega_+ & \Delta \\ 0 & M & \Delta & \Omega_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{k,k}^{\uparrow\uparrow}(\omega_n) \\ F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n) \\ G_{k+Q,k}^{\uparrow\uparrow}(\omega_n) \\ F_{-k-Q,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.4)$$

unde $\Omega_{\pm} = i\omega_n + H_0 \pm \varepsilon_k$. Parametrii de ordine Δ și $M = M_Q$ se determină din relațiile

$$\begin{aligned} \Delta &= g \sum_k T \sum_{\omega_n} F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n); \\ M &= \frac{1}{2} T \sum_{k \in I} \sum_{\omega_n} (\sigma^z)_{\alpha\alpha} G_{k+Q,k}^{\alpha\alpha}(\omega_n), \end{aligned} \quad (8.5)$$

unde g și I sunt constantele de interacție electron-electron supraconductoare și magnetice respectiv.

Soluția sistemului de ecuații (8.4) are forma

$$\begin{aligned} F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n) &= \frac{\Delta \left[-(i\omega_n + H_0)^2 + \varepsilon_k^2 + \Delta^2 - M^2 \right]}{D(\omega_n)}; \\ G_{k+Q,k}^{\alpha\alpha}(\omega_n) &= (\sigma_z)_{\alpha\alpha} \frac{M \left[-(i\omega_n + H_0)^2 + \varepsilon_k^2 + M^2 - \Delta^2 \right]}{D(\omega_n)}; \\ D(\omega_n) &= \left[(i\omega_n + H_0)^2 - \varepsilon_k^2 - (\Delta + M)^2 \right] \times \\ &\quad \times \left[(i\omega_n + H_0)^2 - \varepsilon_k^2 - (\Delta - M)^2 \right]. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Substituind aceste soluții în ecuația (8.5) și efectuând integrarea după energii, ob-

ținem

$$\begin{aligned} \ln \frac{T}{T_{c0}} = 2\pi \frac{TN_1}{N} \sum_{\omega_n > 0} \left\{ -\frac{1}{2\Delta} \operatorname{Im} \left[\frac{\Delta + M}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta + M)^2}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{\Delta - M}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2}} \right] - \frac{1}{\omega_n} \right\} - 2\pi \frac{TN_2}{N} \sum_{\omega_n > 0} \left\{ \frac{1}{\omega_n} + \right. \\ \left. + \operatorname{Im} \frac{1}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - \Delta^2}} \right\} \end{aligned} \quad (8.7)$$

$$\begin{aligned} \ln \frac{T}{T_{s0}} = 2\pi T \sum_{\omega_n > 0} \left\{ -\frac{1}{2M} \operatorname{Im} \left[\frac{\Delta + M}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta + M)^2}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{M - \Delta}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2}} \right] - \frac{1}{\omega_n} \right\} \end{aligned} \quad (8.8)$$

Aici T_{c0} (T_{s0}) sunt temperaturile critice ale tranziției în starea supraconductoare (magnetică) fără magnetism (supraconductivitate); N_1 și N_2 sunt densitățile electronice de stări în domeniile I respectiv II; $N = N_1 + N_2$. Pentru $H_0 = 0$ sistemul de ecuații (8.7), (8.8) trece în sistemul de ecuații din lucrarea [6], iar pentru $M = 0$, $H_0 \neq 0$ obținem ecuația pentru parametrul de ordine supraconductor în câmp magnetic [21].

Sistemul de ecuații (8.7), (8.8) are trei soluții banale: în starea normală și în lipsa magnetismului ($M = 0$ și $\Delta = 0$); în prezența supraconductibilității și a lipsei magnetismului ($\Delta \neq 0$ și $M = 0$) și în prezența magnetismului și lipsei supraconductibilității ($\Delta = 0$ și $M \neq 0$). Prezența unei soluții nebanale $\Delta \neq 0$ și $M \neq 0$ corespunde coexistenței supraconductibilității și magnetismului. Pentru ca această soluție să fie stabilă, este necesar să fie îndeplinită condiția $F_S - F_N < 0$.

8.2.2 Energia liberă a sistemului

Pentru calculul diferenței energiilor libere ale fazelor supraconductoare și normală folosim formula

$$\begin{aligned} \delta F' = F(\Delta, M, H_0) - F(0, M, H_0) = \int_0^\Delta \Delta'^2 \frac{d}{d\Delta'} \left(\frac{1}{g} \right) d\Delta' = \\ = \frac{\Delta^2}{g} - 2 \int_0^\Delta \Delta' d\Delta' \frac{1}{g(\Delta')}. \end{aligned} \quad (8.9)$$

Rescriem ecuația (8.7) sub forma

$$\begin{aligned} \frac{\Delta}{g} = -N_1 \pi T \operatorname{Im} \sum_{\omega_n < \omega_D} \left[\frac{\Delta + M}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta + M)^2}} + \right. \\ \left. + \frac{\Delta - M}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2}} \right] - \\ - N_2 2\pi T \operatorname{Im} \sum_{\omega_n < \omega_D} \frac{\Delta}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - \Delta^2}}. \end{aligned} \quad (8.10)$$

Substituind (8.10) în (8.9) și efectuând integrarea după Δ' , obținem

$$\begin{aligned}
\frac{\delta F'}{N} = & -\frac{N_1}{N} 2\pi T \text{Im} \left\{ \frac{\Delta^2}{2} \sum_{\omega_n < \omega_D} \left[\frac{1 + M/\Delta}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta + M)^2}} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{1 - M/\Delta}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2}} \right] + \sum_{\omega_n < \omega_D} \left(\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta + M)^2} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2} - 2\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - M^2} \right) \right\} - \\
& -\frac{N_2}{N} 4\pi T \text{Im} \left\{ \frac{\Delta^2}{2} \sum_{\omega_n < \omega_D} \frac{1}{\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - \Delta^2}} + \right. \\
& \left. + \sum_{\omega_n < \omega_D} \left[\sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - \Delta^2} - (i\omega_n + H_0) \right] \right\}. \tag{8.11}
\end{aligned}$$

Diferența energiilor libere $\delta F = F(\Delta, M, H_0) - F(0, 0, H_0)$ se poate calcula folosind identitatea matematică

$$\begin{aligned}
\Delta F = F(\Delta, M, H_0) - F(0, 0, H_0) = & \int_0^\Delta d\Delta' \Delta'^2 \frac{d}{d\Delta'} \frac{1}{g} - \\
& - \int_0^M dM' M'^2 \frac{d}{dM'} \left(\frac{1}{I} \right)_{g=0} \tag{8.12}
\end{aligned}$$

și ecuațiile (8.7) și (8.8). Avem

$$\begin{aligned}
\delta F = F(\Delta, M, H_0) - F(0, 0, H_0) = & N\Delta^2 \ln \frac{T}{T_{c0}} + \\
& + N_1 M^2 \ln \frac{T}{T_{s0}} - 2\pi T N_1 \sum_{n>0} \left\{ \text{Im} \sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2} + \right. \\
& \left. + \sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - (\Delta - M)^2} - 2\omega_n - \frac{\Delta^2 + M^2}{\omega_n} \right\} - \\
& - 4\pi T N_2 \sum_{n>0} \left(\text{Im} \sqrt{(i\omega_n + H_0)^2 - \Delta^2} - \omega_n - \frac{\Delta^2}{2\omega_n} \right) \tag{8.13}
\end{aligned}$$

Pentru determinarea rădăcinilor în (8.7)-(8.13) s-a ales ramura cu parte imaginară pozitivă, adică rădăcinile s-au determinat conform formulei

$$\sqrt{A + iB} = \frac{\text{sign } B}{\sqrt{2}} \left[A + \sqrt{A^2 + B^2} \right]^{1/2} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\sqrt{A^2 + B^2} - A \right]^{1/2}. \tag{8.14}$$

8.2.3 Starea fundamentală ($T = 0$)

Pentru $T = 0$ în expresiile (8.7), (8.8) și (8.13) putem înlocui sumarea cu integrarea conform formulei

$$T \sum_{n>0} F(i\omega_n) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^\infty d\omega F(\omega + i\delta). \quad (8.15)$$

Efectuând această schimbare și integrând după frecvențe, obținem sistemul de ecuații algebrice pentru parametrii Δ și M , și de asemenea o expresie simplificată pentru diferența energiilor libere. Aceste rezultate au forma

$$\begin{aligned} 2 \ln \frac{\Delta}{\Delta_0} &= -\frac{N_1}{N} \left\{ \left(1 + \frac{M}{\Delta}\right) \ln \frac{\phi(H_0, \Delta + M)}{\Delta} + \left(1 - \frac{M}{\Delta}\right) \times \right. \\ &\quad \left. \times \ln \frac{\phi(H_0, \Delta - M)}{\Delta} \right\} - \frac{N_2}{N} \ln \frac{\phi(H_0, \Delta)}{\Delta}; \\ 2 \ln \frac{M}{M_0} &= -\left\{ \left(1 + \frac{\Delta}{M}\right) \ln \frac{\phi(H_0, \Delta + M)}{M} + \left(1 - \frac{\Delta}{M}\right) \ln \frac{\phi(H_0, \Delta - M)}{M} \right\}; \end{aligned} \quad (8.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta F'}{N} &= -\frac{\Delta^2}{2} + \frac{N_1}{N} \left\{ H_0 \sqrt{H_0^2 - M^2} \theta(H_0 - M) - \frac{H_0}{2} \sqrt{H_0^2 - (\Delta + M)^2} + \right. \\ &\quad \left. + \theta[H_0 - (\Delta + M)] - \frac{H_0}{2} \sqrt{H_0^2 - (\Delta - M)^2} \theta(H_0 - |\Delta - M|) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta M}{2} \ln \frac{\phi(H_0, \Delta + M)}{\phi(H_0, \Delta - M)} + \frac{M^2}{2} \ln \frac{\phi(H_0, \Delta + M) \phi(H_0, |\Delta - M|)}{\phi^2(H_0, M)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{N_2}{2} \left\{ H_0^2 - H_0 \sqrt{H_0^2 - \Delta^2} \theta(H_0 - \Delta) \right\} \right\} \end{aligned} \quad (8.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{N} &= -\frac{\Delta^2}{2} - \frac{M^2}{2} \frac{N_1}{N} + \frac{N_1}{N} \left\{ H_0^2 - \frac{H_2}{2} \sqrt{H_0^2 - (\Delta - M)^2} \times \right. \\ &\quad \left. \times \theta[H_0 - (\Delta + M)] - \frac{H_0}{2} \sqrt{H_0^2 - (\Delta - M)^2} \theta[H_0 - |\Delta - M|] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta M}{2} \ln \frac{\phi(H_0, \Delta + M)}{\phi(H_0, |\Delta - M|)} + \frac{M^2}{2} \ln \frac{\phi(H_0, \Delta + M) \phi(H_0, |\Delta - M|)}{\phi^2(H_0, M)} \right\} \\ &\quad + \frac{N_2}{N} \left\{ H_0^2 - H_0 \sqrt{H_0^2 - M^2} \theta(H_0 - \Delta) \right\}, \end{aligned} \quad (8.18)$$

unde

$$\phi(x, y) = \begin{cases} |y|, & x < |y|, \\ x + \sqrt{x^2 - y^2}, & x > |y|. \end{cases}$$

Soluția sistemului de ecuații (8.16) și calculul energiei libere (8.17), (8.18) pentru valori arbitrare ale parametrilor poate fi obținută numai pe cale numerică.

Să analizăm cazul supraconductivității slabe, când este îndeplinită condiția $\Delta \ll M$. În acest caz putem pune $M = M_0$ și să analizăm prima dintre ecuațiile (8.16).

Efectuând acolo dezvoltarea după parametrul mic $\Delta/M \ll 1$ (considerând $H_0/\Delta < 1$), obținem ușor soluția sub forma

$$\Delta \approx \Delta_0 \left(\frac{\Delta_0}{eM_0} \right)^{N_1/N_2}. \quad (8.19)$$

Pentru acest caz diferența energiilor libere (8.17) se simplifică considerabil:

$$\delta F' = -N_2 \frac{\Delta^2}{2} \left(1 - \frac{1}{6} \frac{\Delta^2}{M^2} \frac{N_1}{N_2} \right) + N_2 H_0^2. \quad (8.20)$$

Pe baza acestei formule pentru câmpul critic paramagnetic obținem expresia $H_p = \Delta/\sqrt{2}$. Valoarea mărimii H_p se deosebește de cea pentru supraconductorii puri (8.19). În acest caz, deoarece $N_1 \neq 0$ și $\Delta_0/M_0 < 1$, limita paramagnetică este mai mică decât în cazul supraconductorilor izotropi. Micșorarea limitei paramagnetice pentru $\Delta \ll M$ este legată de prezența gap-ului dielectric mare pe o parte a suprafeței Fermi.

8.2.4 Domeniul de temperaturi apropiate de temperatura critică supraconductoare

Pentru $T \approx T_c$ în ecuația (8.7) efectuăm dezvoltarea după mărimea Δ^2 . Cu precizia până la termeni de ordinul Δ^4 găsim

$$\ln \frac{T}{T_{c0}} = f_0(H_0, M, T) - f_1(H_0, M, T) \frac{\Delta^2}{2} + \frac{3}{8} \Delta^4 f_2(H_0, M, T), \quad (8.21)$$

unde

$$f_0(H_0, M, T) = -2\pi T \frac{N_1}{N} \sum_{\omega_n > 0} \left\{ \operatorname{Im} \frac{(i\omega_n + H_0)^2}{[(i\omega_n + H_0)^2 - M^2]^{3/2}} + \frac{1}{\omega_n} + 2\pi T \frac{N_2}{N} \sum_{\omega_n > 0} \operatorname{Re} \left(\frac{1}{\omega_n - iH_0} - \frac{1}{\omega_n} \right) \right\}; \quad (8.22)$$

$$f_1(H_0, M, T) = 2\pi T \frac{N_1}{N} \sum_{\omega_n > 0} \operatorname{Im} \frac{(i\omega_n + H_0)^2 [(i\omega_n + H_0)^2 + 4M^2]}{[(i\omega_n + H_0)^2 - M^2]^{7/2}} + 2\pi T \frac{N_2}{N} \operatorname{Re} \sum_{\omega_n > 0} \frac{1}{(\omega_n - iH_0)^3}; \quad (8.23)$$

$$f_2(H_0, M, T) = -2\pi T \frac{N_1}{N} \times \operatorname{Im} \sum_{\omega_n \geq 0} \frac{(i\omega_n + H_0)^6 + 12(i\omega_n + H_0)^4 M^2 + 12(i\omega_n + H_0)^2 M^4}{[(i\omega_n + H_0)^2 - M^2]^{1/2}} + 2\pi T \frac{N_2}{N} \operatorname{Re} \sum_{\omega_n \geq 0} \frac{1}{(\omega_n - iH_0)^5}. \quad (8.24)$$

O dezvoltare analogă face și în cazul expresiei pentru diferența energiilor libere (8.13). Pentru $T \approx T_c$ obținem

$$\begin{aligned} \frac{\delta F'}{N} = \Delta^2 \left[\ln \frac{T}{T_{c0}} - f_0(H_0, M, T) + \frac{1}{4} f_1(H_0, M, T) \Delta^2 + \right. \\ \left. + \frac{\Delta^4}{8} f_2(H_0, M, T) \right]. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Substituind în (8.25) ecuația (8.21), aducem diferența energiilor libere la forma

$$\frac{\delta F'}{N} = \frac{\Delta^4}{4} \left[-f_1(H_0, M) + f_2(H_0, M) \Delta^2 \right]. \quad (8.26)$$

După cum s-a observat în capitolul precedent, semnul coeficientului f_1 determină tipul tranziției de fază.

Condiția

$$f_1(H'_0, M_0, T_c) = 0 \quad (8.27)$$

este expresia exactă pentru determinarea temperaturii critice supraconductoare, pentru o valoare a câmpului magnetic pentru care tranziția de fază devine o tranziție de ordinul doi. Pentru determinarea acestui punct este necesar să examinăm sistemul de trei ecuații, și anume (8.27) și

$$\ln \frac{T_c}{T_{c0}} = f_0(H'_0, T_c, T_c); \quad (8.28)$$

$$\ln \frac{T}{T_{s0}} = -2\pi T_c \sum_{\omega_n > 0} \left[-\text{Im} \frac{1}{\sqrt{(i\omega_n + H'_0)^2}} + \frac{1}{\omega_n} \right]. \quad (8.29)$$

Aceste două ecuații se obțin din (8.21) și (8.8) pentru $T = T_c$ și $\Delta = 0$. Observăm că pentru studiul supraconductorului obișnuit în câmp magnetic [21], pentru obținerea punctului H'_c s-a folosit sistemul format din cele două ecuații (8.27) și (8.28) pentru $M_c = 0$.

8.2.5 Temperatura critică a supraconductorului

Să examinăm acum valorile câmpului magnetic extern $H_0 < H'_0$, adică domeniul unde are loc tranziția de fază de speța a doua. Să analizăm câteva cazuri limită.

Pentru $T_c \ll M_c$ în ecuația (8.29), care determină valoarea lui T_c , trecem de la sumarea după n la integrare după ω conform formulei (8.15). Efectuând această integrare, găsim

$$\begin{aligned} \ln \frac{T_c}{T_{c0}} = -\frac{N_1}{N} \left\{ \frac{(H_0 + \sqrt{H_0^2 - M_c^2})e\gamma}{\pi T_c} \theta(H_0 - M_c) + \right. \\ \left. + \ln \frac{eM_c\gamma}{\pi T_c} \theta(M_c - H_0) - \frac{H_0}{\sqrt{H_0^2 - M_c^2}} \theta(H_0 - M_c) \right\} + \\ + \frac{N_2}{N} \left[\psi\left(\frac{1}{2}\right) - \text{Re} \psi\left(\frac{1}{2} - i\rho_c\right) \right], \end{aligned} \quad (8.30)$$

unde $\varrho_c = H_0/(2\pi T_c)$; ψ este derivata logaritmului funcției Γ ; γ este constanta lui Euler; e este baza logaritmilor naturali. Această ecuație se poate simplifica foarte mult pentru valori limită ale mărimii ϱ . Pentru $\varrho_c \ll 1$ ($H_0 \lesssim T_c$) și $H_0 < M_c$ pentru mărirea T_c obținem

$$\frac{T_c}{T_{c0}} = \left(\frac{T_{c0}}{eT_{s0}} \right)^{N_1/N_2} \left(1 - 7\zeta(3)\varrho_c^2 \right), \quad (8.31)$$

unde $\zeta(3)$ este funcția Riemann.

Valoarea lui T_c scade cu creșterea câmpului magnetic. În limita inversă $\varrho_c \gg 1$ ecuația pentru T_c are forma

$$\begin{aligned} \frac{N_1}{N_2} \left\{ \ln \frac{(H_0 + \sqrt{H_0^2 - M_c^2})e\gamma}{\pi T_{c0}} \theta(H_0 - M_c) + \ln \frac{eM_c\gamma}{\pi T_{c0}} \theta(M_c - H_0) - \right. \\ \left. - \frac{H_0\theta(H_0 - M_c)}{\sqrt{H_0^2 - M_c^2}} \right\} + \ln \frac{2\gamma H_0}{\pi T_{c0}} = \frac{1}{24\varrho_c^2}. \end{aligned} \quad (8.32)$$

Pe baza ecuației (8.32) putem determina valoarea câmpului paramagnetic H_p^0 , care corespunde dispariției supraconductibilității. Pentru $H_p^0 < M_c$ această formulă ne dă

$$H_p^0 = \frac{\Delta_0}{2} \left(\frac{\Delta_0}{eM_c} \right)^{N_1/N_2}. \quad (8.33)$$

În cazul $H_p^0 > M_c$ avem

$$H_p^0 = \frac{\Delta_0}{2} \left[\frac{\Delta_0}{e \left[H_p^0 + \sqrt{H_p^{02} - M_c^2} \right]} \right]^{N_1/N_2} \exp \left\{ \frac{N_1}{N_2} \frac{H_p^0}{\sqrt{H_p^{02} - M_c^2}} \right\}. \quad (8.34)$$

Se vede ușor că valoarea mărimii H_p^0 depinde de raportul dintre parametrii teoriei. Dacă în (8.33) punem $N_1 = 0$ și $N_2 = N$, obținem $H_{p0}^0 \Delta_0/2$, care corespunde valorilor câmpului paramagnetic ale supraconductorului obișnuit (în ipoteza că tranziția de fază este de speța a doua [20]). Pe baza lui (8.27) pentru celalt caz limită ($N_1 = N$, $N_2 = 0$ $H_p^0 = H_{p1}^0$) avem

$$e \left(H_{p1}^0 + \sqrt{H_{p1}^{02} - M_{c1}^2} \right) = \Delta_0 \exp \left\{ \frac{H_0}{\sqrt{H_{p1}^{02} - M_{c1}^2}} \right\}. \quad (8.35)$$

Acest caz limită este echivalent cu cazul unidimensional examinat. Rădăcinile ecuației (8.35) determină punctele de intersecție ale curbelor punctate pe diagrama de fază (T, H_0) cu axa abscizelor de pe fig.6 din lucrarea [22].

Notăm că soluția (8.33) există numai pentru $N_2 \neq 0$ și lipsește în cazul unidimensional.

Pentru $T_{c0} \approx T_{M0}$ pe baza ecuației (8.28), neglijând termenii de ordinul lui M^2 , obținem

$$\ln \frac{T}{T_{c0}} \left(\frac{T_{s0}}{T_{c0}} \right)^{N_1/N_2} = \psi \left(\frac{1}{2} \right) - \operatorname{Re} \psi \left(\frac{1}{2} - i\varrho_c \right). \quad (8.36)$$

Expresia (8.36) se poate simplifica pentru valori limită ale mărimii ϱ_c . Pentru $\varrho_c \ll 1$ aceasta poate fi pusă sub forma

$$\frac{T_c}{T_{c0}} = \left(1 - \zeta(3)\varrho_c^2\right) \left(\frac{T_{c0}}{T_{s0}}\right)^{N_1/N_2}. \quad (8.37)$$

Pentru $\varrho_c \gg 1$ temperatura critică a supraconductorului magnetic se determină din expresia

$$T_c^2 = \frac{6H_0^2}{\pi^2} \ln \left[\frac{2H_0}{\Delta_0} \left(\frac{T_{s0}}{T_{c0}}\right)^{N_1/N_2} \right]. \quad (8.38)$$

Valoarea ei în cazurile examinate se deosebește de cazul supraconductorilor obișnuiți ($N_1 = 0$, $N_2 = N$). Deoarece $T_{s0}/T_{c0} > 1$, cu creșterea raportului N_1/N_2 mărimea T_c crește. Câmpul magnetic favorizează supraconductivitatea în domeniul câmpurilor magnetice suficient de înalte.

8.2.6 Distrugerea supraconductivității de către magnetism

După cum s-a specificat, pentru apariția supraconductivității în sistemul magnetic descris este necesar ca să fie îndeplinită inegalitatea $T_{s0} > T_{c0}$. În faza de coexistență a supraconductivității și magnetismului parametri de ordine Δ și M se determină din sistemul de ecuații (8.7), (8.8). Să găsim acum ecuația pentru temperatura critică, pentru care dispare magnetismul. Punând în sistemul de ecuații (8.7), (8.8) $T = T_{s1}$, $M = 0$, $\Delta \neq 0$ și substituind (8.8) în (8.7), putem aduce această ecuație la forma

$$\ln \frac{T_{s0}}{T_{c0}} = \left(\frac{\Delta}{2\pi T_{s1}}\right)^2 \sum_{n \geq 0} \operatorname{Im} \frac{1}{\left\{ \left[i(n+1/2) + \varrho_{s1} \right]^2 - \left(\frac{\Delta}{2\pi T_{s1}}\right)^2 \right\}^{3/2}}; \quad (8.39)$$

$$\varrho_{s1} = H_0/2\pi T_{s1}.$$

Pentru valori apropiate ale lui T_{s0} și T_{s1} ecuația (8.39) va avea soluții în domeniul valorilor mici ale mărimii ($\Delta/(2\pi T_{s1})$). În acest caz aceasta poate fi simplificată:

$$\begin{aligned} \ln \frac{T_{s0}}{T_{c0}} &= \left(\frac{\Delta}{2\pi T_{s1}}\right)^2 \operatorname{Re} \sum_{n \geq 0} \frac{1}{\left(n + \frac{1}{2} - i\varrho_{s1}\right)^3} = \\ &= \left(\frac{\Delta}{2\pi T_{s1}}\right)^2 \operatorname{Re} \psi''\left(\frac{1}{2} - i\varrho_{s1}\right), \end{aligned} \quad (8.40)$$

unde

$$\psi''\left(\frac{1}{2} - i\varrho_{s1}\right) = \frac{d^2}{d\varrho_{s1}^2} \left[\psi\left(\frac{1}{2} - i\varrho_{s1}\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right) \right], \quad (8.41)$$

de unde rezultă

$$T_{s1} \cong \frac{\Delta}{2\pi} \left[\operatorname{Re} \frac{\psi''\left(\frac{1}{2} - i\varrho_{s1}\right)}{\ln\left(\frac{T_{s0}}{T_{c0}}\right)} \right]. \quad (8.42)$$

Deoarece Δ și $\text{Re } \psi''(1/2 - i\rho_{s1})$ descresc cu creșterea câmpului magnetic, temperatura critică T_{s1} descresce cu creșterea câmpului magnetic, adică în câmp magnetic magnetismul suprimă supraconductivitatea la temperaturi mult mai joase, decât în lipsa câmpului magnetic.

8.2.7 Tranziția de fază de ordinul unu pentru $T_c \ll M_c$

După cum s-a subliniat mai sus, tipul tranziției de fază este determinat de semnul coeficientului $f_1(H_0, M_c, T_c)$ (8.23): pentru $f_1 > 0$ are loc tranziția de fază de ordinul doi, iar pentru $f_1 < 0$ de ordinul unu. În domeniul temperaturilor joase ($T_c \ll M_c$) în primul termen al expresiei (8.23) putem face integrarea după ω conform formulei (8.15), după care obținem

$$f_1(H_0, M_c, T_c) = \frac{N_1}{N} \frac{1}{3M_c^2} \left[-1 + \frac{H_0^3(H_0^2 - 4M_c^2)}{(H_0^2 - M_c^2)^{5/2}} \theta(H_0 - M_c) \right] + \frac{1}{2} \frac{1}{2\pi T_c^2} \text{Re } \psi'' \left(\frac{1}{2} - i\rho_c \right) \frac{N_2}{N}. \quad (8.43)$$

Dacă câmpul magnetic este mic ($\rho_c \ll 1$ ($H_0 \lesssim T_c$)), formula (8.43) se poate aduce la forma

$$f_1(H_0, M_c, T_c) = \frac{N_2}{N} \frac{7\zeta(3)}{(2\pi T_c)^2} \left[1 - \frac{N_1}{N_2} \left(\frac{T_c}{T_{s0}} \right)^2 \frac{4\gamma^2}{21\zeta(3)} - \frac{186\zeta(5)}{7\zeta(3)} \rho_c^2 \right]. \quad (8.44)$$

În funcție de semnul parantezei pătrate tranziția de fază poate fi atât de ordinul doi, cât și de ordinul unu.

Pentru $\rho_c \gg 1$, ceea ce corespunde valorilor mici ale lui T_c , avem

$$f_1(H_0, M_c, T_c) = -\frac{N_1}{N} \frac{1}{3M_c^2} \left[1 + \frac{H_0^3(4M_c^2 - H_0^2)}{(H_0^2 - M_c^2)^{5/2}} \theta(H_0 - M_c) \right] - \frac{N_2}{N} \frac{1}{2H_0^2} \quad (8.45)$$

Analiza acestei formule arată că, pentru orice relații rezonabile între parametrii teoriei $f_1(H_0, M_c, T_c) < 0$, adică în domeniul temperaturilor mici, avem o tranziție de fază de ordinul doi.

8.2.8 Saltul căldurii specifice

Să examinăm proprietățile termodinamice ale sistemului în domeniul câmpurilor magnetice $H_0 < H'_0$, unde are loc tranziția de fază de ordinul doi din stare supraconductoare în stare normală. Să determinăm valoarea lui Δ^2 din apropierea temperaturii critice ($T \approx T_c$). Pe baza ecuațiilor (8.21) și (8.28) obținem ușor

$$\Delta^2 = \frac{2}{f_1(H_0, M_c, T_c)} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \left[1 - \frac{\partial f_0}{\partial \tilde{M}} T \frac{\partial \tilde{M}}{\partial T} \Big|_{T=T_0} + \rho \frac{\partial f_0}{\partial \rho} \Big|_{T=T_0} \right], \quad (8.46)$$

unde

$$\tilde{M}(T) = \frac{M(T)}{2\pi T}; \quad \varrho = \frac{H_0}{2\pi T}.$$

Substituind (8.46) în (8.26), pentru diferența energiilor libere din apropierea lui T_c obținem expresia

$$\delta F = -\frac{N\left(1 - \frac{T}{T_0}\right)^2}{f_1(H_0, M_c)} \left[1 - \frac{\partial f_0(\tilde{M}, \varrho)}{\partial \tilde{M}} T \frac{\partial \tilde{M}}{\partial T} \Big|_{T=T_0} + \varrho \frac{\partial f_0}{\partial \varrho} \Big|_{T=T_c} \right]^2 \quad (8.47)$$

Folosind această formulă, obținem pentru entropia sistemului și saltul căldurii specifice relațiile:

$$S_S = S_N + \frac{2N}{T_c} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \frac{1}{f_1(H_0, M_c)} \times \left[1 - \frac{\partial f_0}{\partial \tilde{M}} T \frac{\partial \tilde{M}}{\partial T} \Big|_{T=T_c} + \varrho \frac{\partial f_0}{\partial \varrho} \Big|_{T=T_c} \right]^2; \quad (8.48)$$

$$\Delta C = \frac{8\pi^2 T_c N}{f_1(\varrho, \tilde{M}_c)} \left[1 - T \frac{\partial f_0(\varrho, \tilde{M})}{\partial \tilde{M}} \frac{\partial \tilde{M}}{\partial T} \Big|_{T=T_c} - \varrho \frac{\partial f_0(\varrho, \tilde{M})}{\partial \varrho} \Big|_{T=T_c} \right]^2, \quad (8.49)$$

unde $f_0(\varrho, \tilde{M}_c)$ și $f_1(\varrho, \tilde{M}_c)$ sunt coeficienții corespunzători din (8.22) și (8.23), scriși cu ajutorul mărimilor fără dimensiuni, iar ultimul termen din formula (8.49) are forma

$$\varrho \frac{\partial f_0}{\partial \varrho} = -H_0 \left\{ \frac{N_1}{N} 2\pi T_c \sum_{n>0} \operatorname{Im} \left[\frac{i\omega_n + H_0}{[(i\omega_n + H_0)^2 - M_c^2]^{3/2}} + \frac{3M^2(i\omega_n + H_0)}{[(i\omega_n + H_0)^2 - M_c^2]^{5/2}} \right] - \frac{N_2}{N} 2\pi T_c \sum_{n>0} \operatorname{Im} \frac{1}{(\omega_n - iH_0)^2} \right\}. \quad (8.50)$$

În acest fel, formula (8.49) determină saltul căldurii specifice la $T = T_c$ pentru apariția supraconductivității în sistemele magnetice puternic anizotrope, situate într-un câmp magnetic.

În cazul limită $T_c \ll M_c$ în primul termen al formulei (8.50) putem trece de la sumarea în raport cu n la integrarea în raport cu ω conform formulei (8.15), după care obținem

$$\varrho \frac{\partial f_0}{\partial \varrho} \Big|_{T=T_c} = \frac{N_1}{N} \frac{H_0^3 \theta(H_0 - M_c)}{(H_0^2 - M_c^2)^{3/2}} + \varrho_c \frac{N_2}{N} \operatorname{Re} \psi' \left(\frac{1}{2} - i\varrho_c \right). \quad (8.51)$$

În domeniul temperaturilor joase ($T_c \ll M_c$), derivate $\partial M / \partial T \ll 1$, de aceea saltul căldurii specifice în punctul $T = T_c$ se poate prezenta sub forma

$$\Delta C = \frac{8\pi^2 T_c N}{f_1(\varrho, \tilde{M}_c)} \left[1 - \varrho \frac{\partial f_0(\varrho, M)}{\partial \varrho} \Big|_{T=T_c} \right]^2, \quad (8.52)$$

unde

$$f_1(\varrho, \tilde{M}_c) = (2\pi T_c)^2 f_1(H_0, M_c, T_c),$$

$f_1(H_0, M_c, T_c)$ se determină din formula (8.43), iar al doilea termen din paranteza pătrată din (8.51). Mărima (8.52) se poate simplifica mult dacă examinăm cazul câmpurilor magnetice mici ($H_0 \lesssim T_c$). În acest caz putem face dezvoltarea după mărimea $\varrho \ll 1$ în expresiile pentru f_1 și $\partial f_0 / \partial \varrho$ și să aducem pe ΔC la forma

$$\Delta C = \frac{8\pi^2 T_c N}{f_1^0(0, \tilde{M}_c)} \left[1 - \frac{N_2}{N} \varrho^2 \left(28\zeta(3) - \frac{186\zeta(5)}{f_1^0(0, \tilde{M}_c)} \right) \right], \quad (8.53)$$

unde

$$f_1^0(0, \tilde{M}_c) = \frac{N_2}{N} 7\zeta(3) \left[1 - \frac{N_1}{N_2} \left(\frac{2\pi T_c}{M_c} \right)^2 \frac{1}{21\zeta(3)} \right]. \quad (8.54)$$

Deoarece studiem limita $T_c/M_c \ll 1$, în coeficientul pentru ϱ^2 din formula (8.53) putem pune $f_1^0(0, \tilde{M}_c \approx N_2/N) 7\zeta(3)$. Ca rezultat expresia pentru ΔC se simplifică:

$$\Delta C = \frac{8\pi^2 T_c N}{f_1^0(0, \tilde{M}_c)} \left[1 - \frac{N_2}{N} A \varrho^2 + \frac{N_1}{N} \frac{186\zeta(5)}{7\zeta(3)} \varrho^2 \right]. \quad (8.55)$$

Aici

$$A = 28\zeta(3) - \frac{186\zeta(5)}{7\zeta(3)}.$$

Comportarea mărimii ΔC în câmp magnetic depinde de raportul între parametrii N_1 și N_2 , și anume pentru $A - (N_1/N_2) \frac{186\zeta(5)}{7\zeta(3)} > 0$ ($N_1/N_2 < 0,468$) saltul căldurii specifice scade cu creșterea câmpului magnetic, iar pentru inegalitatea inversă, crește.

Punând în (8.55) $N_1 = 0$, $N_2 = N$ obținem expresia pentru supraconductorul izotrop

$$\Delta C_{\text{BCS}} = \frac{8\pi^2 T_c N}{7\zeta(3)} (1 - A \varrho^2). \quad (8.56)$$

Saltul căldurii specifice scade cu creșterea mărimii ϱ . Pe baza lui (8.55) și (8.56) avem

$$\alpha(\varrho) = \frac{\frac{\Delta C}{NT_c}}{\left(\frac{\Delta C}{NT_c} \right)_{\text{BCS}}} = \frac{N}{N_2} \frac{1 + \frac{N_1}{N_2} 28\zeta(3) \varrho^2}{1 - \frac{N_1}{N_2} \left(\frac{2\pi T_c}{M_{c0}} \right)^2 \frac{1}{21\zeta(3)}} \quad (8.57)$$

Mărimea $\alpha(\varrho) > 1$ și crește cu creșterea câmpului magnetic.

8.3 Cazul câmpului magnetic perpendicular ($\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$)

Pentru $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$ este necesar să calculăm următoarele funcții Green:

$$\begin{aligned}
G_{kk'}^{\sigma\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle \text{Ta}_{k\sigma}(\tau) a_{k'\sigma}^+(\tau') \rangle; \\
F_{-k,k'}^{\sigma'\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle \text{Ta}_{-k\sigma'}^+(\tau) a_{k'\sigma}^+(\tau') \rangle; \\
G_{k+Q,k'}^{\sigma'\sigma}(\tau - \tau') &= -\langle \text{Ta}_{k+Q,\sigma'}(\tau) a_{k'\sigma'}^+(\tau') \rangle; \\
F_{-k-Q,k'}^{\sigma\sigma'}(\tau - \tau') &= -\langle \text{Ta}_{-k-Q,\sigma}^+(\tau) a_{k'\sigma'}^+(\tau') \rangle.
\end{aligned} \tag{8.58}$$

Pe baza hamiltonianului (8.1), punând $i = x$ (cazul $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$), obținem ușor sistemul de ecuații pentru funcțiile Green (8.58) în reprezentarea \mathbf{k}, ω . Acest sistem are forma

$$\begin{pmatrix} \gamma_{\sigma}^- & \sigma\Delta & M & 0 \\ \sigma\Delta & \gamma_{\sigma}^- & 0 & -M \\ M & 0 & \gamma_{-\sigma}^+ & -\sigma\Delta \\ 0 & -M & -\sigma\Delta & \gamma_{-\sigma}^- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{kk'}^{\sigma'\sigma}(\omega_n) \\ F_{-k,k'}^{\sigma'\sigma}(\omega_n) \\ G_{k+Q,k'}^{\sigma'\sigma}(\omega_n) \\ F_{-k-Q,k'}^{\sigma\sigma'}(\omega_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{8.59}$$

unde

$$\gamma_{\sigma}^{\pm} = i\omega_n - \sigma H_0 \pm \varepsilon_k.$$

Pentru deducerea sistemului (8.59) s-a folosit condiția de degenerare (7.1). Parametrii de ordine Δ și M se determină din relațiile:

$$\begin{aligned}
\Delta &= gT \sum_k \sum_{\omega_n} F_{-k,k}^{\downarrow\uparrow}(\omega_n); \\
M &= \frac{1}{2}T \sum_{k \in I} \sum_{\omega_n} (\sigma^x)_{\alpha\beta} G_{k+Q,k}^{\alpha\beta}.
\end{aligned} \tag{8.60}$$

Substituind soluția sistemului de ecuații (8.59) în (8.60), găsim

$$\begin{aligned}
\Delta &= gT \sum_k \sum_{\omega_n} \frac{\Delta \left[\varepsilon_k^2 + \Delta^2 + (\omega_n - iH_0)^2 - M^2 \right]}{D(\varepsilon_k, H_0)}; \\
M &= \frac{T}{2}I \sum_{k \in I} \sum_{\omega_n} \frac{M \left[M^2 - \Delta^2 + \omega_n^2 + (\varepsilon_k + \sigma H_0)^2 \right]}{D(\varepsilon_k, H_0)},
\end{aligned} \tag{8.61}$$

unde

$$\begin{aligned}
D(\varepsilon, H_0) &= \left[\varepsilon_k^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2 + 2i\sqrt{\omega_n^2 \Delta^2 - \xi_1^2 \xi_2^2} \right] \times \\
&\quad \times \left[\varepsilon_k^2 + \xi_1^2 + \xi_2^2 - 2i\sqrt{\omega_n^2 \Delta^2 - \xi_1^2 \xi_2^2} \right]; \\
\xi_1^2 &= \omega_n^2 + M^2; \quad \xi_2^2 = \Delta^2 - M^2.
\end{aligned} \tag{8.62}$$

Efectuând în (8.61) integrarea după energii, prezentăm sistemul de ecuații pentru Δ și M sub forma

$$\begin{aligned} \ln \frac{T}{T_{c0}} &= 2\pi T \frac{N_1}{N_0} \sum_{n>0} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\xi_1^2 + \xi_2^2 - 2M^2}{f_1(\omega_n)} \right) f_2(\omega_n) - \frac{1}{\omega_n} \right] + \\ &+ 2\pi T \frac{N_2}{N_0} \sum_{n \geq 0} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\omega_n^2 + \xi_2^2}{f_1^0(\omega_n)} \right) f_2^0(\omega_n) - \frac{1}{\omega_n} \right]; \quad (8.63) \\ \ln \frac{T}{T_{s0}} &= 2\pi T \sum_{n \geq 0} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\xi_1^2 - \xi_2^2}{f_1(\omega_n)} \right) f_2(\omega_n) - \frac{1}{\omega_n} \right], \end{aligned}$$

unde

$$\begin{aligned} f_1(\omega_n) &= \sqrt{(\xi_1^2 - \xi_2^2)^2 + 4\omega_n^2 \Delta^2}; & f_1^0(\omega_n) &= f_1(\omega_n) \Big|_{M=0}; \\ f_2(\omega_n) &= \left(\xi_1^2 + \xi_2^2 + f_1(\omega_n) \right)^{-1/2}; & f_2^0(\omega_n) &= f_2(\omega_n) \Big|_{M=0}. \end{aligned} \quad (8.64)$$

Diferența energiilor libere $\delta F = F(\Delta, M, H_0) - F(0, 0, H_0)$ o determinăm la fel cum am făcut în cazul câmpului paralel ($H \parallel M$) pe baza identității matematice (8.12) și a sistemului de ecuații (8.63). Rezultatul este

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{N} &= \Delta^2 \ln \frac{T}{T_{c0}} + M^2 N_1 \ln \frac{T}{T_{s0}} - 2\pi T \frac{N_1}{N} \sum_{n>0} \left[\sqrt{2}(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \right. \\ &+ \left. \sqrt{(\xi_1^2 - \xi_2^2)^2 + 4\omega_n^2 M^2})^{1/2} - 2\omega_n - \frac{\Delta^2 + M^2}{\omega_n} \right] - 2\pi T \times \\ &\times \frac{N_2}{N} \sum_{n>0} \left[\sqrt{2}(\omega_n^2 + \xi_2^2 + \sqrt{(\omega_n^2 - \xi_2^2)^2 + 4\omega_n^2 \Delta^2})^{1/2} - 2\omega_n - \frac{\Delta^2}{\omega_n} \right]. \end{aligned} \quad (8.65)$$

În starea fundamentală ($T = 0$) expresiile (8.63) și (8.65) pot fi aduse la forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} &= \frac{1}{2} N_1 \int_0^\infty d\varepsilon \left[\frac{1}{E_+} + \frac{1}{E_-} - \frac{4(H_0^2 + M^2)}{E_+ E_- (E_+ + E_-)} \right] + \\ &+ \frac{1}{2} N_2 \int_0^\infty d\varepsilon \left[\frac{1}{E'_+} + \frac{1}{E'_-} - \frac{4H_0^2}{E'_+ E'_- (E'_+ + E'_-)} \right]; \quad (8.66) \\ \frac{1}{I} &= \frac{N_1}{2} \int_0^\infty d\varepsilon \left[\frac{1}{E_+} + \frac{1}{E_-} - \frac{4\Delta^2}{E_+ E_- (E_+ + E_-)} \right] \end{aligned}$$

unde

$$E_\pm^2 = \varepsilon^2 + \Delta^2 + H_0^2 + M^2 \pm \sqrt{\varepsilon^2 H_0^2 + \Delta^2 (H_0^2 + M^2)}; \quad E' = E \Big|_{M=0} \quad (8.67)$$

$$\begin{aligned} \frac{\delta F}{N} &= \Delta^2 \left(\ln \frac{\Delta}{\Delta_0} - \frac{1}{2} \right) + \frac{N_1}{N} M^2 \left(\ln \frac{M}{M_0} - \frac{1}{2} \right) - \\ &- \frac{N_1}{M} \int_0^\infty d\varepsilon \left[E_+ + E_- + 2\varepsilon - 2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} - 2\sqrt{\varepsilon^2 + M^2} \right] - \\ &- \frac{N_2}{N} \int_0^\infty d\varepsilon \left[E'_+ + E'_- - 2\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} \right]. \end{aligned} \quad (8.68)$$

8.4 Calcule numerice și discuția rezultatelor

În această secțiune atenția principală va fi îndreptată asupra studiului diagramei de fază, care determină starea sistemului în prezența câmpului magnetic. Comportarea sistemului studiat în câmp magnetic depinde esențial de valorile parametrilor N_1 , N_2 și $t = T_{c0}/T_{s0}$.

Pentru valori date ale acestor parametri și temperatură T dată, sistemul de ecuații pentru parametrii de ordine Δ și M (vezi (8.7) și (8.8) pentru cazul $\mathbf{H} \parallel \mathbf{M}$ și (8.63) pentru cazul $\mathbf{H} \perp \mathbf{M}$) a fost rezolvat numeric. Apoi a fost determinată diferența energiilor libere (cu formulele (8.11) și (8.65) pentru $\mathbf{H} \parallel \mathbf{M}$ și respectiv pentru $\mathbf{H} \perp \mathbf{M}$). Sunt posibile soluții ale sistemului de ecuații pentru Δ și M ($\Delta \neq 0$ și $M \neq 0$), care determină coexistența SC și SDW, și de asemenea trei soluții nebanale: starea SDW $M \neq 0$, $\Delta = 0$; SC $\Delta \neq 0$, $M = 0$ și starea metalică normală $M = \Delta = 0$. Starea care există în realitate este cea care corespunde minimumului energiei libere. În continuare se prezintă diagramele de fază construite pe baza acestui principiu din comparația energiilor libere, care corespund diferitelor soluții ale sistemului de ecuații pentru parametrii de ordine Δ și M .

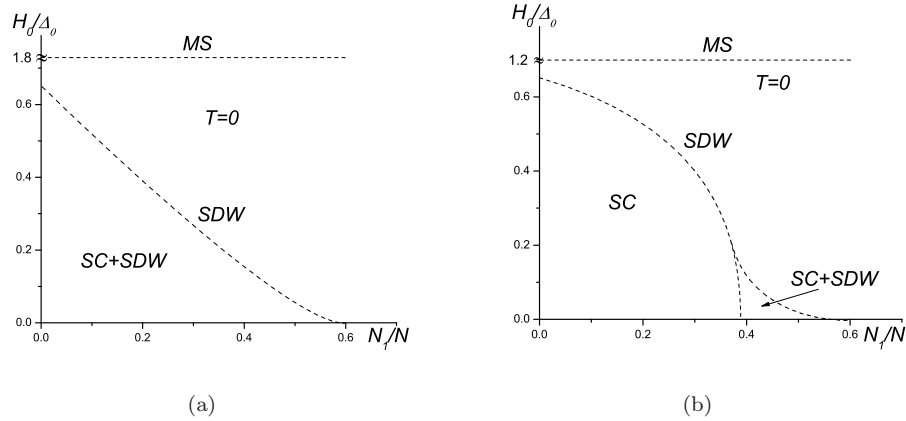


Figura 8.1: Diagrama de fază (H_0/Δ_0 , N_1/N) pentru $T = 0$, $t = T_{c0}/T_{s0} = 0,4$ (a) și pentru $T = 0$, $t = 0,6$ (b).

Să prezentăm rezultatele calculelor numerice. Pe fig.8.1 se prezintă diagramele de fază (H_0/Δ_0 , N_1/N) la temperatură nulă pentru cazurile $t = 0,4$ și $t = 0,6$. Pentru $t = 0,4$ și $H_0/\Delta_0 = 0$ SC și SDW coexistă pe tot intervalul $0 \leq N_1/N \leq 1$. Cu creșterea câmpului magnetic domeniul de coexistență a acestor faze se micșorează. Pentru $t = 0,6$ și $H_0/\Delta_0 = 0$ există domeniul de valori $N_1/N < 0,36$, în care există numai starea supraconductoare. Pentru $N_1/N \geq 0,36$ în sistem apare o stare mixtă. Cu creșterea câmpului magnetic atât domeniul supraconductor cât și domeniul de coexistență a celor două faze se micșorează. Tranzițiile de fază pentru $T = 0$ în câmp magnetic sunt tranziții de fază de ordinul unu (aici și în cele ce urmează tranzițiile de ordinul unu vor fi reprezentate prin curbe întreprupte).

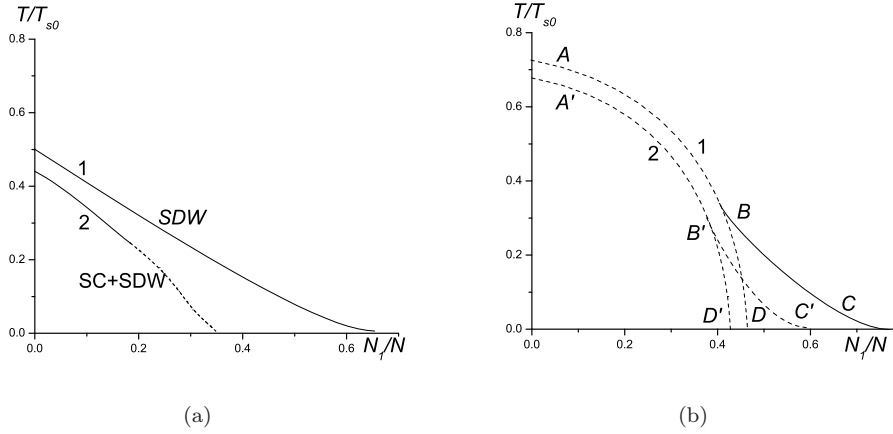


Figura 8.2: Diagrama de fază $(T/T_{s0}, N_1/N)$ pentru $t = 0, 5$, $H_0/\Delta_0 = 0, 4$ (a) și pentru $t = 0, 7$, $H_0/\Delta_0 = 0, 2$ (b).

Pe fig.8.2 sunt reprezentate diagramele de fază $(T/T_{s0}, N_1/N)$ pentru cazurile $t = 0, 5$, ($H_0/\Delta_0 = 0, 4$) și $t = 0, 7$, ($H_0/\Delta_0 = 0, 2$). Pentru $t = 0, 5$ și $H_0/\Delta_0 = 0$ are loc tranziția de fază de speța a doua din starea mixtă (SC+SDW) în starea SDW în întreg domeniul de valori ale lui T/T_{s0} și N_1/N . Pe fig.8.2(a) aceste stări sunt separate de curba 1. Câmpul magnetic micșorează domeniul de coexistență SC și SDW (pentru $H_0/\Delta_0 = 0, 4$, $t = 0, 5$ aceasta este separată de starea SDW prin curba 2). În afară de aceasta, în domeniul temperaturilor joase pentru o valoare determinată a lui N_1/N (în cazul $H_0/\Delta_0 = 0, 4$ aceasta corespunde lui $N_1/N \geq 0, 2$) se produce schimbarea tipului de tranziție de fază (pe fig.8.2(a) porțiunea continuă a curbei 2 este o tranziție de fază de ordinul doi, iar cea întreruptă este o tranziție de ordinul unu). În cazul $t = 0, 7$ și $H_0/\Delta_0 = 0$ (fig.8.2(b)) în domeniul valorilor $N_1/N \leq 0, 4$ există o tranziție de fază de ordinul unu din starea supraconductoare în starea SDW (porțiune AB pe curba 1). Există de asemenea un domeniu de coexistență SC și SDW (pe figură acesta este cuprins între curbele BD și BC). Tranziția din starea mixtă în starea SDW este o tranziție de fază de ordinul doi.

În prezența câmpului magnetic ($H_0/\Delta_0 = 0, 2$) tranziția de ordinul unu din SC în starea SDW este determinată de segmentul A'B' de pe curba 2. Coexistența SC și SDW este determinată de domeniul cuprins între curbele B'D' și B'C'. În afară de micșorarea atât a domeniului supraconductor cât și a domeniului de coexistență de fază, câmpul magnetic duce la o tranziție de fază de ordinul unu în domeniul valorilor $0, 2 < N_1/N \leq 0, 4$ (porțiunea B'C' a curbei respective).

Pe fig.8.3 se reprezintă diagrama de fază $(T/T_{s0}, H_0/\Delta_0)$. Pentru $N_1/N = 0$ avem dependența obișnuită a temperaturii critice supraconductoare de câmpul magnetic [20]. Cu creșterea parametrului N_1/N temperatura critică se micșorează.

Studiul făcut mai sus pentru cazul $T = 0$ ne permite să tragem următoarele concluzii: forma diagramei de fază $(H_0/\Delta_0, N_1/N)$ este determinată de parame-

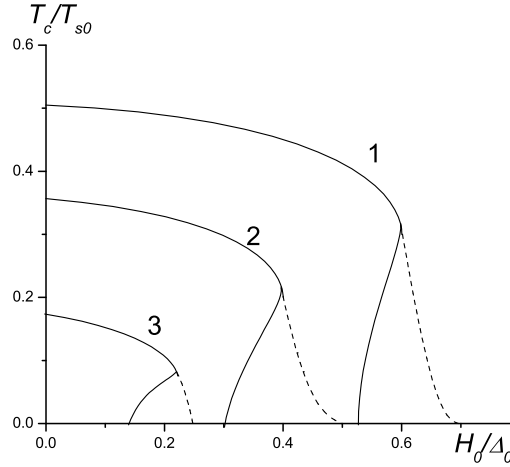


Figura 8.3: Dependenta de câmp magnetic a temperaturii critice pentru supraconductoare pentru N_1/N : 1) - 0; 2) - 0,2; 3) - 0,4.

trul $t = T_{c0}/T_{s0}$, care, la rândul său, ne arată cu cât scade temperatura critică a tranziției supraconductoare (în lipsa magnetismului) față de temperatura de tranziție în starea magnetică (în lipsa supraconductivității). Dacă acest parametru este mic, atunci în domeniul valorilor nu prea mari ale lui N_1/N și H_0/Δ_0 este posibilă coexistența SC și SDW (fig.8.1(a)). Cu creșterea parametrului t tabloul se schimbă, și anume: pentru valori mici ale lui N_1 apare faza supraconductoare, care, cu creșterea acestui parametru trece în starea "mixtă" (SC+SDW) în domeniul valorilor nu prea mari ale lui H_0 (fig.8.1(b)). Micșorarea parametrului t și creșterea raportului N_1/N duce la apariția fazei "mixte" (SDW+SC) și a stării SDW (fără supraconductivitate).

Influențe similare are parametrul t asupra tranziției de fază (T/T_{s0} , N_1/N), adică pentru t mici în domeniul temperaturilor joase și valori nu prea mari ale lui N_1/N se realizează starea "mixtă" (SC+SDW), iar cu creșterea lui t pentru N_1/N mic în domeniul temperaturilor joase apare starea supraconductoare, care, cu creșterea lui N_1/N , trece în starea "mixtă", iar apoi în starea SDW (fig.8.2).

În acest fel, în domeniul valorilor nu prea mari ale lui N_1/N și valori nu prea mici ale lui t supraconductivitatea distruge magnetismul, ceea ce este legat de porțiunea dielectrică mică a suprafeți Fermi și interacția importantă electron-fonon, răspunzătoare pentru supraconductivitate.

Pe figurile prezentate mai sus sunt reprezentate diagramele de fază obținute pe baza ecuațiilor (8.7) - (8.18). Acestea descriu starea sistemului în câmp magnetic paralel $H_0 \parallel M$. În acest caz există un câmp paramagnetic critic $H_p = M_0/\sqrt{2}$ (vezi fig.8.1) pentru care starea SDW este distrusă și apare starea metalică (SM).

Calculule, făcute pe baza formulelor (8.66) - (8.68) pentru câmp magnetic per-

pendicular ($\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$), duc la rezultate numerice, care se deosebesc puțin de cazul $\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{M}$, cu excepția părții superioare a diagramelor de fază (vezi fig.8.1). În acest caz câmpul magnetic nu distruge starea SDW, iar în domeniul câmpurilor magnetice intense pentru toate valorile mărimii N_1/N avem o stare SDW.

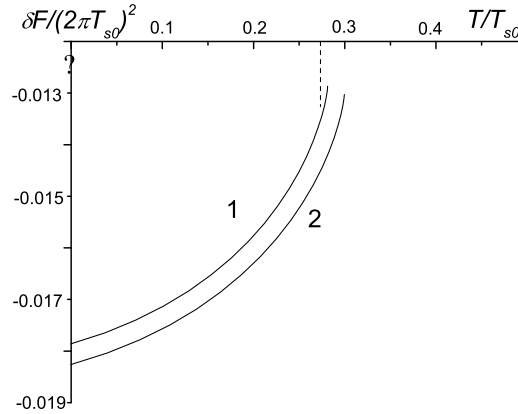


Figura 8.4: Dependenta diferentiei energiilor libere δF_{\parallel} (1) și δF_{\perp} (2) de temperatură pentru cazul $t = 0, 7$, $N_1/N = 0, 1$, $H_0/\Delta_0 = 0, 2$.

Există de asemenea o deosebire între valorile diferenței energiilor libere $\delta F = F(\Delta, M, H_0) - F(0, 0, H_0)$ pentru $\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{M}$ și $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$. S-a obținut rezultatul că mai favorabil energetic este cazul câmpului magnetic perpendicular ($\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$): $(F_N - F_S)_{\perp} > (F_N - F_S)_{\parallel}$. Ca exemplu în fig.8.4 se prezintă dependența de temperatură a lui δF_{\parallel} și δF_{\perp} pentru cazul $t = 0, 7$, $N_1/N = 0, 1$ și $H_0/\Delta_0 = 0, 2$. Se vede imediat că pe întreg intervalul de temperaturi $(F_N - F_S)_{\perp} > (F_N - F_S)_{\parallel}$.

În acest fel, rezultatele de mai sus descriu practic atât cazul câmpului magnetic paralel cât și a celui perpendicular în starea supraconductoare și în starea mixtă. Asemănarea celor două cazuri cu $\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{M}$ și $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$ se explică prin aceea că, în domeniul temperaturilor joase, pentru care se realizează coexistența de fază SC și a fazei mixte, câmpul magnetic acționează în principal asupra perechilor supraconductoare, ducând la ruperea lor.

În starea SDW apare o altă situație, și anume: în cazul $\mathbf{H}_0 \parallel \mathbf{M}$ câmpul magnetic tinde să răstoarne spinul atomului în direcția câmpului, ducând astfel la distrugerea stării antiferomagnetice a sistemului și apariția fazei metalice. Starea sistemului pentru $\mathbf{H}_0 \perp \mathbf{M}$ este, din punct de vedere energetic, mult mai favorabilă (vezi fig.8.4), de aceea câmpul magnetic nu este în stare să modifice orientarea spinilor atomilor și, prin urmare, nu influențează asupra stării SDW.

Trebuie să reamintim că, aplicarea câmpului magnetic duce la tranziția de fază de ordinul unu în domeniul temperaturilor joase din starea mixtă în starea SDW (curbele întrerupte din fig.8.2 și 8.3). Acest fenomen este legat de neunicitatea soluțiilor ecuațiilor pentru temperatura critică în starea supraconductoare și din

care rezultă instabilitatea acestei stări, dacă presupunem că, tranziția de fază este o tranziție de ordinul doi (curbele continui pe fig.8.3).

Dacă în formulele (8.7) și în (8.13) punem $N_2 = 0$ ($N_1 = N$), găsim o expresie care coincide cu rezultatele lui Suzumura ș. a. [22], obținute de acești autori pe baza modelului unidimensional. Acești autori au introdus un anumit câmp magnetic intern H_Q , presupunând că acesta nu depinde de temperatură. Rezolvând numai una din ecuațiile pentru parametrul de ordine supraconductor Δ , ei au arătat că în domeniul valorilor mari ale câmpului magnetic extern $H_0 \sim H_Q$, este posibilă apariția supraconductivității fără gap (gapless superconductivity). Această situație este posibilă în cazul prezenței în sistem a două grupuri de electroni: electronii atomilor magnetici dau câmpul magnetic care acționează asupra electronilor de conductivitate, adică cei ce pot forma perechi Cooper.

În această lucrare se descrie sistemul în care există numai un grup de electroni și anume cei de conducție, care sunt magnetici. Prin urmare, noi examinăm două tipuri de ordine la distanță concurențiale (SC și SDW). Aici condiția pentru apariția supraconductivității este mult mai restrictivă. În particular, se vede imediat că pe baza analizei sistemului de ecuații pentru parametrii de ordine Δ și M pentru $T = 0$ (8.16), că pentru valori ale câmpului extern $H_0 \approx M$ acest sistem de ecuații nu are soluții. Prin urmare, pentru $H_0 \approx M$ în sistem nu poate să apară supraconductivitate.

Conform cu [6, 7] rezultatele obținute de noi pot fi aplicate pentru descrierea proprietăților sistemelor puternic anizotrope la temperaturi joase, sisteme cum ar fi $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ sub presiune în câmp magnetic.

INFLUENȚA CÂMPULUI MAGNETIC ASUPRA STĂRII DENSITĂȚII UNDEI DE SPIN ȘI A IMPURITĂȚILOR ASUPRA STĂRII UNDEI DE DENSITATE DE SARCINĂ

Tranziția, atât în starea de SDW, cât și în cea de unde de densitate de sarcină (CDW), are loc când se realizează condiția de "nesting", adică atunci când pe suprafața Fermi sunt domenii congruente, care pot fi făcute să coincidă într-o deplasare paralelă cu vectorul \mathbf{Q} . Pentru $Q = 2k_F$ în sistemele unidimensionale există întotdeauna astfel de domenii. De aceea în sistemele puternic anizotrope, apropiate de cele unidimensionale, este posibilă tranziția în starea CDW și SDW. Dacă interacția electron-fonon este mai puternică, atunci apare CDW, adică apare o deplasare periodică staționară a electronilor cu vectorul de undă \mathbf{Q} . În acest caz pe porțiunile congruente ale suprafeței Fermi se formează gap-ul dielectric. Dacă însă este mai puternică interacția repulsivă electron-electron, atunci sistemul trece în stare de ordonare magnetică SDW. În acest caz asupra electronilor acționează un câmp magnetic periodic efectiv și pe porțiunile congruente ale suprafeței Fermi apare de asemenea un gap dielectric.

În acest fel, tipul tranziției care va avea loc în sistemele puternic anizotrope este dictat de relația dintre parametrii interacției electron-fonon λ_Q și mărimea repulsiei coulombiene g_Q . Pentru $\lambda_Q > g_Q$ are loc tranziția în starea CDW, iar pentru inegalitatea inversă, tranziția în starea SDW [26, 27].

În acest capitol vom analiza în detaliu influența câmpului magnetic extern asupra proprietăților termodinamice și magnetice ale stării de unde de densitate de spin în sistemele cvaziunidimensionale (sec.9.1) și influența impurităților nemagnetice asupra aceluiași proprietăți ale undelor de densitate de sarcină (sec.9.2). Studiul se bazează pe modelul cvaziunidimensional cu repulsie și cu banda de energie pe jumătate ocupată $\mu \neq 0$ și cu luarea în considerație a proceselor de Umklapp (o descriere mai detaliată a modelului este dată în cap.7).

9.1 Răspunsul magnetic al SDW în modelul cvaziunidimensional cu abatere slabă de la umplerea pe jumătate a benzii de energie

În lucrările [28, 29] s-a studiat răspunsul magnetic al stării SDW în modelul unidimensional Hubbard în ipoteza că banda de energie este pe jumătate plină, respectiv pe un sfert. Ambele modele duc la aceleași rezultate pentru susceptibilitatea magnetică, și anume: în câmp magnetic longitudinal susceptibilitatea magnetică crește rapid cu creșterea temperaturii, iar în câmp transversal nu depinde de temperatură. Aceste rezultate concordă calitativ cu datele experimentale existente [30].

După cum s-a specificat în cap.7, în sistemele reale sunt posibile abateri mici de la umplerea pe jumătate a benzii de energie ($\mu \neq 0$). În astfel de sisteme este posibilă apariția SDW cu vectorul de undă \mathbf{Q} , incomensurabil cu vectorul rețelei reciproce ($\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0 + \mathbf{q}$, $\mathbf{Q}_0 = 2k_F$, $q \ll k_F$). În acest caz, deși se produce ordonarea de tip dielectric, totuși gap-ul dielectric este deplasat în raport cu suprafața Fermi, ceea ce duce la apariția purtătorilor liberi la această suprafață. Datorită acestui mecanism este posibil, în particular, coexistența supraconductivitate SDW în sistemele cvaziunidimensionale (vezi cap.7).

Câmpul magnetic interacționează cu SDW prin spinii electronilor de conducție și mișcarea lor orbitală. Aici vom examina numai efectul de spin. Pentru aceasta se presupune că, câmpul magnetic poate fi în orice direcție față de parametrul de magnetizare \mathbf{M}_Q , și se cercetează dependența unghiulară a susceptibilității magnetice. Se obține sistemul de ecuații pentru parametrul de magnetizare \mathbf{M}_Q și magnetizarea spontană \mathbf{M} . Se obține sistemul de ecuații care permite determinarea temperaturii critice a tranziției magnetice T_s , și de asemenea relația între parametrii μ și q . Se examinează limita temperaturii nule ($T = 0$).

Se arată că anizotropia unghiulară apare cel mai clar la temperaturi joase, iar prezența parametrului $\mu \neq 0$ duce la micșorarea acesteia. Se obține de asemenea faptul că susceptibilitatea magnetică χ în câmp magnetic transversal nu depinde de temperatură, iar în câmp magnetic longitudinal comportarea acestei mărimi este condiționată de valorile parametrului μ . În particular, este posibilă apariția stării SDW fără gap energetic, când pentru temperatură nulă apare o valoare nenulă a mărimii χ . În apropierea tranziției comensurabil-incomensurabil în dependența de temperatură a lui χ apare un maxim local.

Rezultatele acestei secțiuni au fost publicate în lucrările [31]-[34].

9.1.1 Hamiltonianul model și ecuațiile pentru funcțiile Green

Hamiltonianul model al sistemului cvaziunidimensional în câmp magnetic are forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{k,\alpha} (\varepsilon_k - \mu) a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha} - \sum_{k,\alpha,\beta} \mathbf{H} \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} a_{k\alpha}^+ a_{k\beta} + \\ & + \frac{U}{N} \sum_{k,k',q} a_{k\uparrow}^+ a_{k+q\uparrow} a_{k'\downarrow}^+ a_{k'-q\downarrow}. \end{aligned} \quad (9.1)$$

Primul și al doilea termen descriu energia cinetică a electronilor și respectiv interacția lor cu câmpul magnetic; $a_{k\alpha}^+$, $a_{k\alpha}$ sunt operatorii de creare și anihilare a electronilor (de impuls k și spin α); σ_x , σ_y , σ_z sunt matricile Pauli. Ultimul termen din această expresie descrie interacția coulombiană a electronilor cu spini opuși.

Luând în sumă după q numai termenii cu $q = 0; \pm Q$ și folosind aproximația câmpului mediu, rescriem hamiltonianul (9.1) sub forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{k,\sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} - \sum_{k,\sigma} \left[\sigma M_Q^z a_{k,\sigma}^+ a_{k+Q\sigma} + h.c. \right] - \\ & - \sum_{k,\sigma} \left[M_Q^\sigma a_{k,-\sigma}^+ a_{k+Q\sigma} + h.c. \right] - \sum_{k,\sigma} \tilde{H}^\sigma a_{k,-\sigma}^+ a_{k\sigma}, \end{aligned} \quad (9.2)$$

unde

$$\begin{aligned} \sigma = \pm 1(\uparrow, \downarrow); \quad \varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - \mu - \sigma \tilde{H}_z; \quad \tilde{H}_z = H_z + M_z; \\ \tilde{H}^\sigma = H^\sigma + M^\sigma; \quad M^\sigma = M_x + i\sigma M_y; \\ M_Q^\sigma = M_Q^x + i\sigma M_Q^y; \quad H^\sigma = H_x + i\sigma H_y, \end{aligned} \quad (9.3)$$

μ este abaterea de la umplerea pe jumătate a benzii energetice; H_x , H_y , H_z sunt componentele câmpului magnetic extern.

Aici s-a presupus că direcția câmpului magnetic este arbitrară în raport cu parametrul de magnetizare M_Q .

Componentele parametrului de ordine M_Q și ale magnetizării spontane M se determină din relațiile:

$$M_Q^z = \frac{1}{2}g \sum \sigma \langle a_{k\sigma}^+ a_{k+Q\sigma} \rangle = \frac{1}{2}gT \sum_{k,n,\sigma} \sigma G_{\sigma\sigma}(k+Q, k, \omega_n); \quad (9.4)$$

$$M_Q^\sigma = gT \sum_k \langle a_{k\sigma}^+ a_{k+Q,-\sigma} \rangle = gT \sum_{k,n} G_{-\sigma\sigma}(k+Q, k, \omega_n); \quad (9.5)$$

$$M_z = M_{Q=0}^z = \frac{1}{2}gT \sum_{k,n,\sigma} \sigma G_{\sigma\sigma}(k, k, \omega_n); \quad (9.6)$$

$$M^\sigma = M_{Q=0}^\sigma = gT \sum_{k,n} G_{-\sigma\sigma}(k, k, \omega_n), \quad (9.7)$$

unde $g = U/N$; N este numărul total de noduri ale rețelei; $G_{\sigma\sigma'}(k', k, \omega_n)$ este funcția Green uniparticulă în reprezentarea (k, ω) .

Pe baza hamiltonianului (9.2) și a relațiilor (9.4)-(9.7) obținem sistemul de ecuații pentru determinarea funcțiilor Green:

$$\begin{aligned} (i\omega_n - \varepsilon_{k\sigma})G_{\sigma\sigma'}(k, k', \omega_n) + \sigma M_Q^z G_{\sigma\sigma'}(k+Q, k', \omega_n) + \\ + \sigma M_Q^z G_{\sigma\sigma'}(k-Q, k', \omega_n) + M_Q^{-\sigma} G_{-\sigma\sigma'}(k+Q, k', \omega_n) + \\ + M_Q^{-\sigma} G_{-\sigma\sigma'}(k-Q, k', \omega_n) + \tilde{H}^{-\sigma} G_{-\sigma\sigma'}(k, k', \omega_n) = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'}. \end{aligned} \quad (9.8)$$

Din expresiile (9.8) putem deduce ușor lanțul infinit de ecuații care pot fi tăiate. Dacă nu luăm în considerare procesele Umklapp, electronii și golurile împerecheate

trebuie să se afe în interiorul unei celule elementare, adică trebuie să îndeplinească condițiile:

$$|k| < Q_0, \quad |k + Q| < Q_0, \quad (9.9)$$

unde $Q_0 = \pi/d$; d fiind constanta rețelei. Cu ajutorul acestor condiții, pentru funcțiile Green $G_{\sigma\sigma}(k, k, \omega_n)$, $G_{-\sigma\sigma}(k, k, \omega_n)$, $G_{\sigma\sigma}(k + Q, k, \omega_n)$ și $G_{-\sigma\sigma}(k + Q, k, \omega_n)$ obținem sistemul de ecuații:

$$\begin{pmatrix} i\omega_n - \varepsilon_{k,\sigma} & \sigma M_Q^z & \tilde{H}^{-\sigma} & M_Q^{-\sigma} \\ \sigma M_Q^z & i\omega_n - \varepsilon_{k+Q,\sigma} & M_Q^{-\sigma} & \tilde{H}^{-\sigma} \\ \tilde{H}^\sigma & M_Q^\sigma & i\omega_n - \varepsilon_{k,-\sigma} & -\sigma M_Q^z \\ M_Q^\sigma & \tilde{H}^\sigma & -\sigma M_Q^z & i\omega_n - \varepsilon_{k+Q,-\sigma} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} G_{\sigma\sigma}(k, k, \omega_n) \\ G_{\sigma\sigma}(k + Q, k, \omega_n) \\ G_{-\sigma\sigma}(k, k, \omega_n) \\ G_{-\sigma\sigma}(k + Q, k, \omega_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (9.10)$$

Soluția acestui sistem se poate prezenta sub forma

$$\begin{aligned} G_{\sigma\sigma}(k, k, \omega_n) &= \frac{D_1(\omega_n)}{D(\omega_n)}; & G_{\sigma\sigma}(k + Q, k, \omega_n) &= \frac{D_2(\omega_n)}{D(\omega_n)}; \\ G_{-\sigma\sigma}(k, k, \omega_n) &= \frac{D_3(\omega_n)}{D(\omega_n)}; & G_{-\sigma\sigma}(k + Q, k, \omega_n) &= \frac{D_4(\omega_n)}{D(\omega_n)}, \end{aligned} \quad (9.11)$$

unde

$$\begin{aligned} D_1(\omega_n) &= (i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q}) \left[(i\omega_n - \varepsilon'_k)(i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q}) - M_Q^2 - \right. \\ &\quad \left. - \sigma \tilde{H}_z(i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q}) \right] - (i\omega_n - \varepsilon'_n) \tilde{H}^2 + \sigma \tilde{H}_z(\tilde{H}_z^2 - M_Q^z) + \\ &\quad + \sigma \tilde{H}_z(|M_Q^\sigma|^2 + |\tilde{H}^\sigma|^2) - \sigma M_Q^z \sum_{\sigma'=\sigma,-\sigma} M_Q^{\sigma'} \tilde{H}^{-\sigma'}; \end{aligned} \quad (9.12)$$

$$\begin{aligned} D_2(\omega_n) &= -\sigma M_Q^z \left\{ (i\omega_n - \varepsilon'_k)(i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q}) - M_Q^2 + \tilde{H}_z^2 - \right. \\ &\quad \left. - |\tilde{H}^\sigma| - \sigma H_z \left[2i\omega_n - (\varepsilon'_k + \varepsilon'_{k+Q}) \right] \right\} + M_Q^{-\sigma} \tilde{H}^\sigma (i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q}) + \\ &\quad + M_Q^\sigma \tilde{H}^{-\sigma} (i\omega_n - \varepsilon'_k) - \sigma M_Q^{-\sigma} \tilde{H}^\sigma \tilde{H}_z - \sigma M_Q^\sigma \tilde{H}^{-\sigma} \tilde{H}_z; \end{aligned} \quad (9.13)$$

$$\begin{aligned} D_3(\omega_n) &= \tilde{H}^\sigma \left[-(i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q})^2 + \tilde{H}^2 + (M_Q^z)^2 \right] - \\ &\quad - M_Q^\sigma \left[2M_Q^z \tilde{H}_z + \tilde{H}^{-\sigma} M_Q^\sigma \right]; \end{aligned} \quad (9.14)$$

$$\begin{aligned} D_4(\omega_n) &= M_Q^\sigma \left[M_Q^2 - (i\omega_n - \varepsilon'_k)(i\omega_n - \varepsilon'_{k+Q}) + \sigma \tilde{H}_z(\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q}) + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{H}_z^2 \right] - \left[2\tilde{H}_z \tilde{H}^\sigma M_Q^z + \sigma M_Q^z \tilde{H}^\sigma (\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q}) + (\tilde{H}^\sigma)^2 M_Q^{-\sigma} \right]; \end{aligned} \quad (9.15)$$

$$\begin{aligned} D(\omega_n) &= [(i\omega_n - \varepsilon'_k)(i\omega_n - \varepsilon'_{k-Q}) - (\tilde{H}^2 + M_Q^2)]^2 - \\ &\quad - 4\tilde{H}^2 M_Q^2 \cos^2 \psi - \tilde{H}^2 (\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q})^2. \end{aligned} \quad (9.16)$$

Aici

$$\begin{aligned} \varepsilon'_k &= \varepsilon_k - \mu; & \varepsilon'_{k+Q} &= \varepsilon_{k+Q} - \mu; & \tilde{H}^2 &= |\tilde{\mathbf{H}}|^2 = (\tilde{H}_z)^2 + |\tilde{H}^\sigma|^2; \\ M_Q^z &= |\mathbf{M}_Q|^2 = (M_Q^z)^2 + |M_Q^\sigma|^2, \end{aligned} \quad (9.17)$$

ψ este unghiul dintre $\tilde{\mathbf{H}}$ și \mathbf{M}_Q .

9.1.2 Sistemul de ecuații pentru parametrul de ordine M_Q și magnetizarea spontană M

Substituind soluția sistemului (9.11) în definițiile (9.4)-(9.7) și efectuând suma-rea după frecvențe, reprezentăm sistemul de ecuații, care determină componentele parametrilor de ordine M_Q și M sub forma

$$\begin{aligned} M_Q^z &= g \sum_k M_Q^z J_2(k, M_Q, \tilde{H}) + g \sum_{k,\sigma} M_Q^\sigma \tilde{H}_z \tilde{H}^{-\sigma} J_1(k, M_Q, \tilde{H}); \\ M_z &= g \sum_k \tilde{H}_z J_3(k, M_Q, \tilde{H}) + g \sum_{k,\sigma} M_Q^z M_Q^\sigma \tilde{H}^{-\sigma} J_1(k, M_Q, \tilde{H}); \\ M^\sigma &= g \sum_k \tilde{H}^\sigma J_4(k, M_Q, \tilde{H}) + g \sum_k M_Q^\sigma \left[2M_Q^z \tilde{H}_z + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{H}^{-\sigma} M_Q^\sigma \right] J_1(k, M_Q, \tilde{H}); \\ M_Q^\sigma &= g \sum_k M_Q^\sigma J_5(k, M_Q, \tilde{H}) + g \sum_k \tilde{H}^\sigma \left[2\tilde{H}_z M_Q^z + \right. \\ &\quad \left. + \sigma M_Q^z (\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q}) + M_Q^{-\sigma} H^\sigma \right] J_1(k, M_Q, \tilde{H}), \end{aligned} \quad (9.18)$$

unde pentru prescurtare am introdus notațiile

$$\begin{aligned} J_1(k, M_Q, \tilde{H}) &= \frac{1}{4\tilde{H}A_k} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{1}{\varepsilon_{k\sigma''}} \text{th} \frac{\varepsilon_{k\sigma' \sigma''}}{2T}; \\ J_2(k, M_Q, \tilde{H}) &= \frac{1}{4\tilde{H}A_k} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{2\tilde{H}_z^2 - \sigma'' A_k \tilde{H}}{\delta_{k\sigma''}} \text{th} \frac{E_{k\sigma' \sigma''}}{2T}; \\ J_3(k, M_Q, \tilde{H}) &= \frac{1}{4\tilde{H}A_k} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\phi_{\sigma' \sigma''}}{\delta_{k\sigma}} \text{th} \frac{E_{k\sigma' \sigma''}}{2T}; \\ J_4(k, M_Q, \tilde{H}) &= \frac{1}{4\tilde{H}A_k} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\psi_{\sigma' \sigma''}}{\varepsilon_{k\sigma''}} \text{th} \frac{E_{k\sigma' \sigma''}}{2T}; \\ J_5(k, M_Q, \tilde{H}) &= \frac{1}{4\tilde{H}A_k} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\eta_{\sigma' \sigma''}}{\varepsilon_{k\sigma''}} \text{th} \frac{E_{k\sigma' \sigma''}}{2T}. \end{aligned} \quad (9.19)$$

Aici

$$\begin{aligned}
A_k &= [(\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q})^2 + 4M_Q^2 \cos^2 \Psi]^{1/2}; \\
E_{k\sigma'\sigma''} &= \frac{1}{2}[\varepsilon'_k + \varepsilon'_{k+Q} - \sigma' \delta_{k\sigma''}]; \\
\mathcal{E}_{k\sigma''} &= [(A_k - 2\sigma'' \tilde{H})^2 + 4M_Q^2 \sin^2 \psi]^{1/2}; \\
\varphi_{\sigma'\sigma''} &= \frac{1}{4}(\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q} - \sigma' \delta_{k\sigma''})^2 - \tilde{H} + (M_Q^z)^2 - |M_Q^\sigma|^2; \\
\varphi_{\sigma'\sigma''} &= \frac{1}{4}(\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q} - \sigma' \delta_{k\sigma''})^2 - \tilde{H}^2 - (M_Q^z)^2; \\
\eta_{\sigma'\sigma} &= \frac{1}{4}[\varepsilon_{k\sigma''}^2 - (\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q})^2 - \sigma \tilde{H}_z (\varepsilon'_k - \varepsilon'_{k+Q}) - \\
&\quad - \tilde{H}_z^2 - M_Q^2]; \quad \sigma', \sigma'' = \pm 1
\end{aligned} \tag{9.20}$$

Mai departe vom lua pentru legea de dispersie forma cosinusoidală (7.14) și vom trece de la sumarea după k la integrare după energie, analog cu modul în care am procedat în cap.7. Ca rezultat al acestei operații sistemul de ecuații (9.18) poate fi adus la forma

$$\begin{aligned}
M_Q^z &= gN_0 \sum_{\alpha} \int_{-W}^W d\varepsilon \left[M_Q^z I_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\sigma} M_Q^{\sigma} \tilde{H}_z \tilde{H}^{-\sigma} J_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) \right];
\end{aligned} \tag{9.21}$$

$$\begin{aligned}
M_Q^{\sigma} &= g \sum_{\alpha} \int_{-W}^W d\varepsilon \left[M_Q I_2(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) + \right. \\
&\quad \left. + \tilde{H}^{\sigma} \left[2\tilde{H}_z M_Q^z + M_Q^{-\sigma} \tilde{H}^{\sigma} \right] J_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) \right];
\end{aligned} \tag{9.22}$$

$$\begin{aligned}
M_z &= gN_0 \sum_{\alpha} \int_{-W}^W d\varepsilon \left[\tilde{H}_z I_3(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) + \right. \\
&\quad \left. + \sum_{\sigma} M_Q^z M_Q^{\sigma} \tilde{H}^{-\sigma} J_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) \right];
\end{aligned} \tag{9.23}$$

$$\begin{aligned}
M^{\sigma} &= gN_0 \sum_{\alpha} \int_{-W}^W d\varepsilon \left[\tilde{H}^{\sigma} I_4(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) + \right. \\
&\quad \left. + M_Q^{\sigma} \left[2M_Q^z \tilde{H}_z + \tilde{H}^{\sigma} M_Q^{\sigma} \right] J_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_{\alpha}) \right]
\end{aligned} \tag{9.24}$$

unde $N_0 = (\pi dw)^{-1}$ este densitatea electronică de stări la suprafața Fermi;

$$\begin{aligned}
I_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_\alpha) &= \frac{1}{8\tilde{H}A(\varepsilon)} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{2\tilde{H}_z^2 - \sigma'' \tilde{H}A(\varepsilon)}{\varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon)} \text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T}; \\
J_1(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_\alpha) &= \frac{1}{8\tilde{H}A(\varepsilon)} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{1}{\varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon)} \text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T}; \\
I_2(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_\alpha) &= \frac{1}{8\tilde{H}A(\varepsilon)} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\eta_{\sigma'\sigma''}(\varepsilon)}{\text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T}}; \\
I_3(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_\alpha) &= \frac{1}{8\tilde{H}, A(\varepsilon)} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\phi_{\sigma'\sigma''}(\varepsilon)}{\varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon)} \text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T}; \\
I_4(\varepsilon, M_Q, \tilde{H}, \mu_\alpha) &= \frac{1}{8\tilde{H}A(\varepsilon)} \sum_{\sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \frac{\psi_{\sigma'\sigma''}(\varepsilon)}{\varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon)} \text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T};
\end{aligned} \tag{9.25}$$

$$\eta_{\sigma'\sigma''}(\varepsilon) = \frac{1}{4}[(\varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon))^2 - 4\varepsilon^2] - M_Q^2 - \tilde{H}_z^2;$$

$$\phi_{\sigma'\sigma''}(\varepsilon) = \frac{1}{4}[2\varepsilon - \sigma' \varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon)]^2 - \tilde{H}^2 + (M_Q^z)^2 - |M_Q^\sigma|^2; \tag{9.26}$$

$$\psi_{\sigma'\sigma''}(\varepsilon) = \frac{1}{4}[2\varepsilon - \sigma' \varepsilon_{\sigma''}(\varepsilon)]^2 - \tilde{H}^2 - (M_Q^z)^2;$$

$$A(\varepsilon) = 2[M_Q^2 \cos^2 \psi + \varepsilon^2]^{1/2};$$

$$\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) = [A(\varepsilon) - 2\sigma'' \tilde{H}]^2 + 4M_Q^2 \sin^2 \psi^2; \tag{9.27}$$

$$E_{\alpha\sigma'\sigma''} = -\mu_\alpha - \frac{1}{2}\sigma' \mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon);$$

$$\mu_\alpha = \mu + \alpha \sqrt{W^2 - \varepsilon^2} \text{sh}(dq/2); \quad \alpha = \pm 1.$$

Sumarea după $\alpha = \pm 1$ condiționează procesele normale și procesele Umklapp.

Am obținut un sistem destul de complicat de ecuații (9.21)-(9.24), care determină componentele M_Q^z , M_Q^σ , M_z , M^σ pentru sistemul cvaziunidimensional cu abatere de la umplerea pe jumătate a benzii de energie și pentru o direcție arbitrară a câmpului magnetic. Să examinăm cazurile particulare, când câmpul magnetic de mărime arbitrară este perpendicular sau paralel cu magnetizarea \mathbf{M}_Q , adică este satisfăcută relația $\tilde{H}_z \tilde{H}^\sigma = 0$. În acest caz ecuația (9.22) poate avea soluția banală $M_Q^\sigma = 0$.

9.1.3 Cazuri particulare

A. În cazul câmpului magnetic transversal ($\tilde{H}_z = M_z = M_Q^\sigma = 0$, $\psi = \pi/2$) parametrul de ordine M_Q^z și magnetizarea spontană M^σ se determină din ecuațiile:

$$\begin{aligned}
1 &= -\frac{1}{4}gN_0 \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \sigma' \int_{-W}^W \frac{d\varepsilon}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon)} \text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T}; \\
M^\sigma &= \frac{1}{4}gN_0 \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \int_{-W}^W \frac{\varepsilon - \sigma'' \tilde{H}^\sigma}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon)} \text{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T} d\varepsilon.
\end{aligned} \tag{9.28}$$

Ca urmare, susceptibilitatea magnetică transversală χ^σ poate fi scrisă sub forma

$$\chi^\sigma = \frac{1}{4}gN_0 \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \int_{-W}^W \frac{\varepsilon - \sigma'' \tilde{H}^\sigma}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) H^\sigma} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T} d\varepsilon. \quad (9.29)$$

Aici

$$\begin{aligned} E_{\alpha\sigma'\sigma''} &= -\mu_\alpha - \frac{1}{2}\sigma' \mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon); \\ \mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) &= 2 \left[(\varepsilon - \sigma'' \tilde{H}^\sigma)^2 + (M_Q^z)^2 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (9.30)$$

B. În cazul limită al câmpului magnetic longitudinal ($H^\sigma = M^\sigma = M_Q^\sigma = 0$; $\psi = 0$) avem

$$\begin{aligned} A(\varepsilon) &= 2 \left[\varepsilon^2 + (M_Q^z)^2 \right]^{1/2}; \quad \mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) = |A(\varepsilon) - 2\sigma'' \tilde{H}_z|; \\ E_{\alpha\sigma'\sigma''} &= -\mu_\alpha - \frac{1}{2}\sigma' \mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon). \end{aligned} \quad (9.31)$$

Sistemul de ecuații (9.21)-(9.24) se aduce la forma

$$\begin{aligned} M_z &= \frac{1}{2}gN_0 \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \sigma' \sigma'' \int_{-W}^W \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T} d\varepsilon; \\ 1 &= -\frac{1}{4}gN_0 \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \sigma' \int_{-W}^W \frac{d\varepsilon}{A(\varepsilon)} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T}. \end{aligned} \quad (9.32)$$

Pe lângă cazurile A și B referitoare la direcția câmpului magnetic, este posibil de asemenea să examinăm cazul câmpului magnetic slab pentru o direcție arbitrară.

Luând soluția banală a ecuației (9.22) $M_Q^\sigma = 0$ și efectuând dezvoltarea cu precizie până la termenii liniari în \tilde{H} , putem prezenta sistemul de ecuații (9.21)-(9.24) sub forma

$$\begin{aligned} M_z &= \frac{1}{2}gN_0 \sum_{\alpha\sigma'\sigma''} \int_0^W \frac{\tilde{H}_z d\varepsilon}{T \operatorname{ch}^2 \frac{E_{\alpha\sigma'}^0}{2T}}; \\ 1 &= -\frac{1}{2}gN_0 \sum_{\alpha\sigma'} \int_0^W \frac{d\varepsilon}{\mathcal{E}_0} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'}^0}{2T}; \\ M^\sigma &= gN_0 \sum (-\sigma') \tilde{H}^\sigma \int_{-W}^W d\varepsilon \left\{ \left[\frac{M_Q^z}{\mathcal{R}_0} \right]^2 \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'}^0}{2T} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8} \left[1 - \frac{4(M_Q^z)^2}{\mathcal{E}_0^2} \right] \frac{1}{T \operatorname{ch}^2(E_{\alpha\sigma'}^0/2T)} \right\}, \end{aligned} \quad (9.33)$$

unde

$$\mathcal{E}_0 = 2[\varepsilon^2 + (M_Q^z)^2]^{1/2}; \quad E_{\alpha\sigma'}^0 = -\mu_\alpha - \frac{1}{2}\sigma' \mathcal{E}_0. \quad (9.34)$$

Pe baza lui (9.33) pentru susceptibilitatea χ_z longitudinală și cea transversală obținem expresiile

$$\chi_z = \left\{ 1 - \frac{1}{4} g N_0 \sum_{\alpha\sigma'} \int_0^W \frac{d\varepsilon}{T \operatorname{ch}^2 \frac{E_{\alpha\sigma'}^0}{2T}} \right\}^{-1} - 1; \quad (9.35)$$

$$\begin{aligned} \chi^\sigma = & \left\{ 1 + g N_0 \sum_{\alpha,\sigma'} \sigma' \int_0^W d\varepsilon \left\{ \frac{(M_Q^z)^2}{\mathcal{E}_0^2} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'}^0}{2T} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left[\frac{1}{8} - \frac{(M_Q^z)^2}{2\mathcal{E}_0} \right] \frac{1}{T \operatorname{ch}(E_{\alpha\sigma'}^0/2T)} \right\} \right\}^{-1} - 1. \end{aligned} \quad (9.36)$$

9.1.4 Temperatura critică a tranziției în starea SDW

Sistemul de ecuații (9.21)-(9.24) pentru determinarea componentelor magnetizărilor \vec{M}_Q și \vec{M} poate fi adus la o formă mai comodă. În acest scop substituim expresia (9.26) în (9.21)-(9.24) și folosim definiția (9.3). După câteva operații algebrice nu prea complicate avem

$$\begin{aligned} \vec{M}_Q &= \frac{1}{4} g N_0 \sum_{\alpha,\sigma',\sigma''} \sigma' \sigma'' \int_0^W \frac{2\vec{H} (\vec{M}_Q \vec{H}) - \sigma'' A(\varepsilon) \tilde{H} \vec{M}_Q}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) A(\varepsilon) \tilde{H}} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T} d\varepsilon; \\ \vec{M} &= \frac{1}{4} g N_0 \sum_{\alpha,\sigma',\sigma''} \sigma' \sigma'' \int_0^W \frac{2\vec{M}_Q (\vec{M}_Q \vec{H}) + (2\varepsilon^2 - \sigma'' A(\varepsilon) \tilde{H}) \vec{H}}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) A(\varepsilon) \tilde{H}} \times \\ & \times \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T} d\varepsilon. \end{aligned} \quad (9.37)$$

Înmulțind prima din aceste ecuații cu \vec{M}_Q , iar pe a doua cu \tilde{H} și considerând că $\vec{M} \parallel \tilde{H}$, obținem

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{1}{4} g N_0 \sum_{\alpha,\sigma',\sigma''} \sigma' \sigma'' \int_0^W \frac{2\tilde{H} \operatorname{ch}^2 \psi - \sigma'' A(\varepsilon)}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon) A(\varepsilon)} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{d} \varepsilon; \\ M &= \frac{1}{8} g N_0 \sum_{\alpha,\sigma',\sigma''} \sigma' \sigma'' \int_0^W \frac{A(\varepsilon) - 2\sigma'' \tilde{H}}{\mathcal{E}_{\sigma''}(\varepsilon)} \operatorname{th} \frac{E_{\alpha\sigma'\sigma''}}{2T} d\varepsilon. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Pentru valori ale câmpurilor magnetice, pentru care tranziția în starea SDW este o tranziție de fază de ordinul doi, punând în (9.38) $M_Q = 0$, obținem sistemul de ecuații pentru determinarea temperaturii critice a tranziției în starea magnetică T_s și magnetizarea M^0 în punctul critic ($T = T_s$):

$$1 = \frac{1}{8} g N_0 \sum_{\alpha,\sigma',\sigma''} \sigma' \int_0^W \frac{\varepsilon - \sigma'' \tilde{H} \cos^2 \psi}{|\varepsilon - \sigma'' \tilde{H}| \varepsilon} \operatorname{th} \frac{E}{2T_s} d\varepsilon; \quad (9.39)$$

$$M^0 = \frac{1}{8} g N_0 \sum_{\alpha,\sigma',\sigma''} \sigma' \sigma'' \int_0^W \operatorname{sign}(\sigma'' \tilde{H} - \varepsilon) \operatorname{th} \frac{\varepsilon}{2T_s} d\varepsilon = g N_0 \tilde{H}, \quad (9.40)$$

unde

$$E = \mu + \alpha\eta_q + \sigma'|\varepsilon - \sigma''\tilde{H}|. \quad (9.41)$$

Pentru un \tilde{H} și μ date, definim parametrul η_q din condiția de maxim a temperaturii de tranziție magnetice T_s . În acest scop scriem ecuația (9.39) sub forma

$$\ln \frac{T_s}{T_{s0}} = \frac{1}{8} \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \sigma' \int_0^W d\varepsilon \left[\frac{\varepsilon - \sigma''\tilde{H} \cos^2 \psi}{|\varepsilon - \sigma''\tilde{H}| \varepsilon} - \frac{\sigma'}{\varepsilon} \right] \text{th} \frac{E}{2T_s}. \quad (9.42)$$

Aici

$$T_{s0} = 1,134w \exp[-1/gN_0]. \quad (9.43)$$

Atunci condiția extremală pentru T_s se poate scrie sub forma

$$\sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \alpha \sigma' \int_0^W \frac{\varepsilon - \sigma''\tilde{H} \cos^2 \psi}{|\varepsilon - \sigma''\tilde{H}| \varepsilon} \text{th}^2 \frac{E}{2T_s} = 0. \quad (9.44)$$

Rezolvând sistemul de ecuații (9.42) și (9.43) la valori date ale lui μ , găsim valorile lui T_s și η_q . În lipsa câmpului magnetic ($\tilde{H} = 0$) aceste soluții sunt date în tabelul 7.1, din care rezultă că pentru $\mu > \mu_{cr} \simeq 1,073T_{s0}$ apare o soluție cu $\eta_q \neq 0$, ceea ce corespunde tranziției de fază din starea izomerizată SDW ($Q = 2k_F$) în starea neizomerizată ($Q = 2k_F + q$).

În cazul câmpului magnetic longitudinal ($\psi = 0$) și a celui transversal ($\psi = \pi/2$), ecuațiile pentru temperatura critică T_s pot fi aduse la forma

$$\ln \frac{T_s}{T_{s0}} = -\frac{1}{8} \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \int_0^\infty \left[\frac{\ln y}{\text{ch}^2 \left(y + \sigma' \frac{\mu_\alpha + \sigma''\tilde{H}}{2T_s} \right)} - \frac{\ln y}{\text{ch}^2 y} \right] dy; \quad (9.45)$$

$$\ln \frac{T_s}{T_{s0}} = -\frac{1}{8} \sum_{\alpha, \sigma', \sigma''} \int_0^\infty \left[\frac{\ln |y - \sigma''\tilde{H}/2T_s|}{\text{ch}^2 \left(y + \sigma' \frac{\mu_\alpha + \sigma''\tilde{H}}{2T_s} \right)} - \frac{\ln y}{\text{ch}^2 y} \right] dy. \quad (9.46)$$

Deoarece integrandul expresiei din (9.45) și (9.46) converge rapid, este indicat a se folosi expresiile de mai sus pentru calcule numerice.

Din soluția ecuațiilor (9.45) și (9.46) rezultă că, câmpul magnetic longitudinal coboară drastic temperatura critică a tranziției magnetice, iar cel transversal influențează slab valoarea lui T_s .

9.1.5 Cazul limită al temperaturii nule

Pentru $T = 0$ ecuația (9.21) în cazul câmpului magnetic longitudinal poate fi adusă la forma

$$(M_Q^0)^4 = F(\tilde{\mu}_+^+) F(\tilde{\mu}_+^-) F(\tilde{\mu}_-^+) F(\tilde{\mu}_-^-), \quad (9.47)$$

unde

$$\begin{aligned}\tilde{\mu}_\alpha^\sigma &= \tilde{\mu} + \alpha\eta_q + \sigma\tilde{H} \quad \alpha, \sigma = \pm 1; \\ F(\tilde{\mu}_\alpha^\sigma) &= M_Q\theta(M_Q - \tilde{\mu}_\alpha^\sigma) + (\tilde{\mu}_\alpha^\sigma + \sqrt{(\tilde{\mu}_\alpha^\sigma)^2 - M_Q^2})\theta(\tilde{\mu}_\alpha^\sigma - M_Q); \\ M_Q^0 &\simeq 1,761T_{s0} = M_Q(\mu = \eta_q = \tilde{H} = 0);\end{aligned}\tag{9.48}$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1, & \text{dacă } x \geq 0, \\ 0, & \text{dacă } x < 0. \end{cases}$$

Pe baza ecuației (9.23) pentru magnetizarea spontană în câmp magnetic longitudinal pentru $\tilde{H} < M_Q$ avem

$$\begin{aligned}M &= B\tilde{H}; \\ B &= \frac{1}{2}gN_0 \sum_\alpha \frac{\mu_\alpha}{[\mu_\alpha^2 - M_Q^2]^{1/2}} \theta(\mu_\alpha - M_Q).\end{aligned}\tag{9.49}$$

Prin urmare, susceptibilitatea magnetică în câmp magnetic longitudinal poate fi pusă sub forma

$$\chi_{\parallel} = \frac{B}{1 - B}.\tag{9.50}$$

Pentru $M_Q = 0$ obținem formula bine cunoscută

$$\chi_{\parallel}^0 = \frac{gN_0}{1 - gN_0}.\tag{9.51}$$

Se vede ușor pe baza formulei (9.50) că, pentru $\mu = 0$, adică atunci când banda de energie este ocupată pe jumătate, susceptibilitatea magnetică este egală cu zero. Soluția ecuației pentru parametrul de ordine M_Q (9.47) arată că, în sistemul examinat poate fi îndeplinită condiția $\mu_- < M_q < \mu_+$. Ca urmare, pentru $T = 0$ există valori ale parametrului μ , pentru care $\chi_{\parallel} \neq 0$. Existența unui $\chi_{\parallel} \neq 0$ corespunde unei stări SDW fără gap.

În cazul câmpului magnetic transversal pentru $T = 0$, pe baza ecuației (9.22) pentru parametrul de ordine obținem

$$(M_Q^0)^4 = M_Q^4 F_+^+(\mu, \tilde{H}) F_+^-(\mu, \tilde{H}) F_-^+(\mu, \tilde{H}) F_-^-(\mu, \tilde{H}),\tag{9.52}$$

$$\begin{aligned}F_\alpha^\sigma(\mu, \tilde{H}) &= \left[\theta(M_Q - \mu_\alpha) + \frac{\mu_\alpha + \sqrt{\mu_\alpha^2 - M_Q^2}}{\sqrt{\tilde{H}^2 + M_Q^2} + \sigma\tilde{H}} \times \right. \\ &\quad \left. \times \theta(\mu_\alpha - M_Q) \theta(\sqrt{\mu_\alpha^2 - M_Q^2} - \sigma\tilde{H}) \right].\end{aligned}\tag{9.53}$$

Pentru $\mu = 0$ expresia (9.52) dă $M_Q = M_Q^0$, adică câmpul magnetic transversal nu influențează parametrul ordonării magnetice în cazul umplerii pe jumătate a benzii de energie. Pentru $\mu \neq 0$ există o dependență complicată a parametrului M_Q de mărimile μ și \tilde{H} , determinată de formulele (9.52) și (9.53). Plecând de la ecuația

(9.24) în limita $\psi = \pi/2$, putem efectua ușor integrarea după energie și sumarea după α , σ' , σ'' pentru valori arbitrare ale temperaturii T . Ca rezultat al integrării obținem expresia pentru χ_{\perp} , care coincide cu formula (9.51). Prin urmare, în cazul câmpului magnetic transversal χ_{\perp} este o mărime constantă, care nu depinde de temperatura T , câmpul magnetic \tilde{H} , parametrul μ și se determină prin valorile lui χ_{\parallel}^0 în metale din formula (9.51).

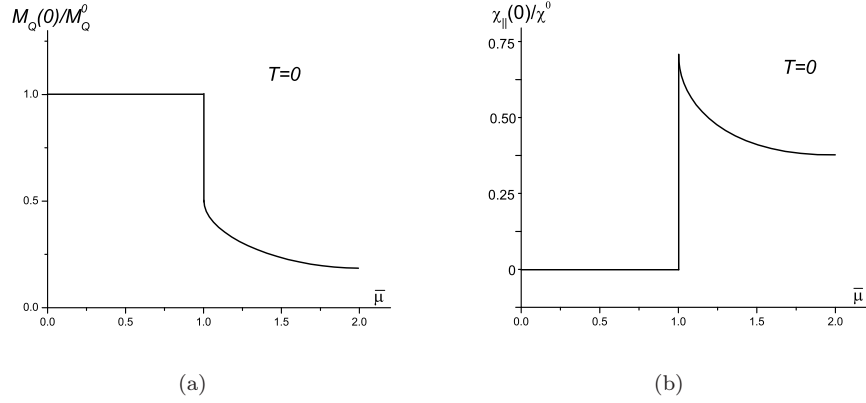


Figura 9.1: (a) Dependența parametrului de ordine $M_Q(0)/M_Q^0$; (b) a susceptibilității magnetice longitudinale χ_{\parallel}/χ_0 de parametrul $\bar{\mu}$.

9.1.6 Calcule numerice și analiza rezultatelor

După cum s-a specificat, parametrii μ și η_q nu sunt independenți, relația dintre ei se determină din condiția de maxim a temperaturii critice de tranziție în starea SDW. Dându-se mărimile μ și \tilde{H} , am folosit metodele numerice pentru rezolvarea sistemului de ecuații (9.42) și (9.44). S-a obținut că, câmpurile magnetice mici ($\tilde{H} \lesssim 0,2T_{s0}$) practic nu influențează asupra relației dintre mărimile μ , T_s și η_q . Acest lucru ne permite să folosim relația dintre μ și η_q , din tabelul 7.1 pentru $\tilde{H} = 0$, pentru determinarea parametrului de ordine M_Q și mărimea susceptibilității χ (pentru câmpuri magnetice mici). Pentru calcule s-au ales valorile $gN_0 = 0, 16$ și $2w = 1$ eV, ceea ce corespunde lui $T_{s0} \simeq 12$ K.

Pe fig.9.1 se prezintă dependența parametrului de ordine $M_Q(0)$ și a susceptibilității magnetice longitudinale $\chi_{\parallel}(0)$ pentru $T = 0$ de parametrul $\bar{\mu} = \mu/T_{s0}$. Pentru $\mu_+ > M_Q$ parametrul $M_Q(0)$ descrește abrupt, ceea ce duce la o creștere bruscă a susceptibilității magnetice. În acest caz sistemul trece în starea fără gap. Aceste calcule au fost făcute pe baza ecuației (9.38) pentru $T = 0$.

În fig.9.2(a) se arată dependența raportului $M_Q(0)/T_s$ de parametrul $\bar{\mu}$. Se vede ușor că valoarea acestui raport depinde de parametrul $\bar{\mu}$ și poate să se deosebească esențial de valoarea 1,76, caracteristică pentru banda umplută pe jumătate.

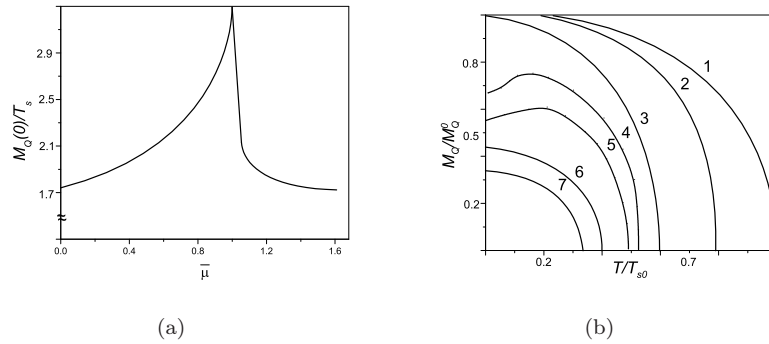


Figura 9.2: (a) Dependența raportului $M_Q(0)/T_s$ de parametrul $\bar{\mu}$; (b) Dependența parametrului de ordine M_Q/M_Q^0 de temperatură pentru valori mici ale câmpului magnetic pentru valorile lui $\bar{\mu}$: 1) - 0; 2) - 0,838; 3) - 1,054; 4) - 1,089; 5) - 1,101; 6) - 1,202; 7) - 1,452.

Pe fig.9.2(b) este prezentată dependența parametrului de ordine magnetic M_Q de temperatură pentru valori mici ale câmpului magnetic, obținută ca rezultat al rezolvării ecuației (9.38) pentru diferite valori ale parametrului $\bar{\mu}$. Pentru un domeniu îngust de valori ale lui $\bar{\mu}$ în apropierea valorii critice $\mu_{cr} \simeq 1,073T_{s0}$, pentru care are loc tranziția de fază în starea incommensurabilă SDW, în domeniul temperaturilor joase parametrul de ordine M_Q crește cu creșterea temperaturii (curba 4). Are loc reconstrucția rețelei magnetice, care stabilizează starea SDW. Această comportare neobișnuită a parametrului de ordine M_Q , și de asemenea prezența parametrului $\eta_q \neq 0$ apare și în comportarea anomală a susceptibilității magnetice (cea longitudinală) ca funcție de temperatură.

Dependența de temperatură a susceptibilității magnetice longitudinale χ_{\parallel} este reprezentată în fig.9.3. Susceptibilitatea magnetică transversală pentru toate valorile lui $\bar{\mu}$ coincide cu χ_{\perp}^0 și, ca și în cazul $\mu = 0$, nu depinde de temperatură.

Mărimea χ_{\parallel} depinde foarte puternic de valorile parametrului μ . Cu creșterea acestui parametru (cu excepția curbei 5) se observă o dependență analogă cu cea din cazul prezenței impurităților [35] în sistemele cvaziunidimensionale pentru $\mu = 0$. Curbele 1 și 2 corespund stării SDW cu un gap la suprafața Fermi, curbele 3-5 corespund stării fără gap. În ultimul caz pentru $T = 0$ mărimea $\chi_{\parallel}(0) \neq 0$ se determină din relația (9.50). După cum s-a mai menționat, prezența unui maxim local pe curba 5 este legată de faptul că apare o soluție cu $\eta_q \neq 0$ a sistemului de ecuații (9.42), (9.44) și creșterii parametrului M_Q cu creșterea temperaturii în apropierea

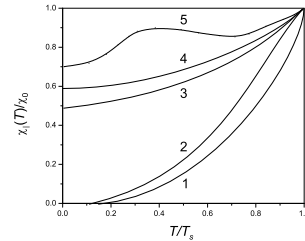


Figura 9.3: Dependența de temperatură a susceptibilității magnetice longitudinale pentru valorile lui $\bar{\mu}$: 1) - 0; 2) - 1,054; 3) - 1,202; 4) - 1,110; 5) - 1,089.

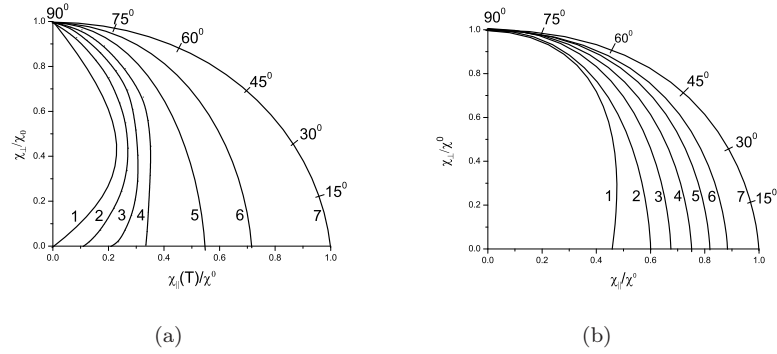


Figura 9.4: Dependența unghiulară a susceptibilității magnetice $\chi(\psi)/\chi_{||}^0$ pentru $\bar{\mu} = 0$ (a) și $\bar{\mu} = 1,202$ (b) pentru valorile lui T/T_s : 1) - 0; 2) - 0,5; 3) - 0,6; 4) - 0,7; 5) - 0,8; 6) - 0,9; 7) - 1,0.

tranziției comensurabil-incomensurabil. În acest fel, dacă valoarea parametrului μ al sistemului este apropiată de valoarea lui critică μ_{cr} , pentru care are loc tranziția comensurabil-incomensurabil, atunci în dependența de temperatură a lui $\chi_{||}(T)$ se observă un maxim local. Această trăsătură a susceptibilității magnetice este legată de faptul că se află în starea fără gap și în același timp se stabilizează SDW datorită apariției soluției $\eta_q \neq 0$.

Pe fig.9.4 se redă dependența unghiulară a susceptibilității magnetice $\chi(\psi)/\chi_{||}^0$ pentru diferite valori ale temperaturii T/T_s pentru $\mu = 0$ și 1,202. Din comparația figurilor 9.4(a) și 9.4(b) rezultă că anizotropia unghiulară a mărimii $\chi(\psi)$ apare cel mai clar pentru temperaturi mici și dispăre la $T = T_s$. Analiza curbelor arată că abaterea de la umplerea pe jumătate a benzii micșorează esențial anizotropia unghiulară a susceptibilității magnetice în comparație cu cazul $\mu = 0$.

9.2 Influența impurităților asupra proprietăților termodinamice ale stării CDW

După cum se știe, compușii anorganici liniari, la coborârea temperaturii suferă o tranziție de fază în starea de densitate de sarcină. Ca exemple de astfel de compuși putem cita $NbSe_3$, TaS_3 , $K_{0,3}MoO_3$ și $(TaSn)_2I$. Studiul influenței tranziției Peierls asupra proprietăților termodinamice și cinetice a acestor conductori este foarte important, deoarece sub temperatura tranziției respective T_P în spectrul electronic apare un gap dielectric.

În lucrările [35]-[38] s-a arătat că impurificarea produce un efect de slăbire a fenomenului de condensare de tip CDW, deoarece potențialul impurității acționează cu semne contrare asupra celor doi termeni (electron și gol) ai perechii.

Analiza detaliată a influenței impurităților asupra proprietăților termodinamice ale sistemului cu CDW îi este consacrată lucrarea [35], în care se examinează mode-

lul cvaziunidimensional cu banda de energie umplută pe jumătate, ceea ce coincide cu condiția cerută de tranziția Peierls. Se arată că impuritățile nemagnetice influențează asupra parametrului de ordine Δ și a gap-ului energetic Ω_g a stării CDW la fel ca impuritățile magnetice asupra mărimilor corespunzătoare în supraconductor [39]. S-a găsit o deosebire dintre parametrul deformării rețelei Δ și gap-ul energetic Ω_g , și s-a observat starea fără gap CDW într-un domeniu determinat de concentrație a impurităților. În același timp s-a arătat că, în cazul CDW introducerea impurităților duce la creșterea susceptibilității magnetice. Totuși susceptibilitatea la temperatură nulă rămâne zero pentru toate concentrațiile de impurități cu excepția domeniului fără gap. Acest rezultat este în contradicție cu teoria [40], unde pentru orice concentrație finită a impurităților magnetice în supraconductor se obține o valoare nenulă a susceptibilității magnetice la $T = 0$.

În această secțiune se studiază influența impurităților asupra sistemului cvaziunidimensional, în care există o abatere de la umplerea pe jumătate a benzii energetice ($\mu \neq 0$). Într-un astfel de sistem în lipsa impurităților pentru un anumit $\mu > \mu_{cr}$ este posibilă apariția stării fără gap, dacă luăm în considerare structura de rețea (procesele Umklapp) [12, 18]. Prin urmare, pentru $\mu \neq 0$ influența impurităților asupra proprietăților termodinamice a stării condensate CDW se va deosebi de cazul teoriei Anderson-Gorkov [39] pentru supraconductor, și de asemenea de rezultatele lucrării [35] pentru CDW. Deoarece abaterea de la umplerea pe jumătate a benzii în sistemele reale este foarte probabilă, prezintă interes să se construiască o teorie a tranziției Peierls în lanțurile cvaziunidimensionale ale compușilor cu $\mu \neq 0$ în prezența în sistem a unor impurități nemagnetice.

Calcululele vor fi făcute în aproximația câmpului mediu, corectă în domeniul temperaturilor joase ($T < T_P$), unde fluctuațiile nu joacă un rol esențial [35]. Se obțin ecuațiile care determină caracteristicile termodinamice ale stării condensate CDW - parametrul de ordine, gap-ul energetic, temperatura critică a tranziției în starea CDW, și de asemenea expresia pentru susceptibilitatea magnetică. Aceste ecuații se deosebesc de cazul umplerii pe jumătate a benzii, și de asemenea de rezultatele teoriei aliajelor supraconductoare cu impurități paramagnetice. Se arată că, cu creșterea concentrației de impurități se produce o micșorare a temperaturii tranziției Peierls, care depinde puternic de valoarea parametrului μ , care determină abaterea de la umplerea pe jumătate a benzii.

Pentru $T = 0$ susceptibilitatea paramagnetică χ tinde către zero în domeniul concentrației mici de impurități și crește cu creșterea temperaturii. Dependența de temperatură a mărimii χ pentru $\mu \neq 0$ se deosebește esențial de cazul umplerii pe jumătate a benzii, când $\mu = 0$. Această secțiune se bazează pe lucrările [41, 42].

9.2.1 Hamiltonianul sistemului și ecuațiile fundamentale pentru substanța pură

Hamiltonianul sistemului examinat are forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{imp}} \quad (9.54)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \sum_q \omega_q (b_q^+ b_q + 1/2) + \\ & + \sum_q g(q) \sum_{k\sigma} a_{k+q,\sigma}^+ a_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^+); \end{aligned} \quad (9.55)$$

$$\mathcal{H}_{\text{imp}} = \frac{1}{L} \sum_{l,q} V(q) \exp^{-iqR_l} \sum_{k,\sigma} \left[a_{k\sigma}^+ a_{k-q\sigma} + a_{k+q\sigma}^+ a_{k+Q-q\sigma} \right], \quad (9.56)$$

unde \mathcal{H}_0 este hamiltonianul de tip Fröhlich, care descrie electronii în interacție cu fononii. Acesta include în el și interacția cu un câmp magnetic extern (H_0); \mathcal{H}_{imp} este hamiltonianul de interacție a electronilor cu impuritățile; $\varepsilon_{k\sigma} = \varepsilon_k - \sigma H_0$; $a_{k\sigma}^+$ operatorul de creare al electronului cu energia ε_k și spinul σ ; b_q^+ operatorul de creare a fononului cu energia ω_q ; energia electronului în acest hamiltonian se măsoară de la jumătatea benzii; μ este abaterea față de umplerea pe jumătate a benzii; $V(q)$ este transformata Fourier a potențialului impurităților; R_l este poziția atomului de impuritate în rețea. În aproximația câmpului mediu considerăm numai interacția electronilor cu fononii, cu vectorul de undă Q , pe care îl vom lua diferit de $2k_F$.

Introducem parametrul de distorsiune al rețelei

$$\Delta(Q) = g(Q) \langle b_{-q} + b_Q^+ \rangle = -\frac{\lambda}{2} \sum_{k,\sigma} \langle a_{k-Q\sigma}^+ a_{k\sigma} \rangle; \quad \lambda = \frac{4g^2(Q)}{\omega(Q)} \quad (9.57)$$

și scriem hamiltonianul (9.55) sub forma

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k,\sigma} (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma} + \Delta(Q) \sum_{k,\sigma} \left[a_{k-Q\sigma}^+ a_{k\sigma} + h.c. \right]. \quad (9.58)$$

Introducem funcția Green electronică prin formula

$$G_\sigma^0(k, k', \tau - \tau') = -\langle \text{Tr} a_{k\sigma}^+(\tau) a_{k'\sigma}(\tau') \rangle \quad (9.59)$$

pentru electronii descriși de hamiltonianul (9.58), fără luarea în considerare a impurităților. Pe baza lui (9.58) pentru aceste funcții Green obținem sistemul infint de ecuații decuplate

$$\begin{aligned} \left[i\omega_n - (\varepsilon_{k\sigma} - \mu) \right] G_\sigma^0(k, k', i\omega_n) - \Delta G_\sigma^0(k - Q, k', i\omega_n) \\ - \Delta G_\sigma^0(k + Q, k', i\omega_n) = \delta_{kk'}. \end{aligned} \quad (9.60)$$

Dacă nu luăm în considerare procesele Umklapp, atunci trebuie îndeplinite condițiile $|k| < Q_0$ și $|k-Q| < Q_0$ (pentru $k > 0$), $Q_0 = 2k_F$, care ne permit să rupem lanțul de ecuații și să obținem expresiile pentru funcțiile Green [12] fără a considera procesele de Umklapp. În prezența câmpului magnetic expresiile respective au forma

$$\begin{aligned} G_\sigma^0(k, k - Q, i\omega_n) &\equiv G_\sigma^{011}(k, i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \varepsilon_{k-Q} + \mu + \sigma H_0}{D(i\omega_n)}; \\ G_\sigma^0(k, k - Q, i\omega_n) &\equiv G_\sigma^{012}(k, i\omega_n) = G_\sigma^{021}(k, i\omega_n) = \frac{\Delta}{D(i\omega_n)}; \\ G_\sigma^0(k - Q, k - Q, i\omega_n) &\equiv G_\sigma^{022}(k, i\omega_n) = \frac{i\omega_n - \varepsilon_k + \mu + \sigma H_0}{D(i\omega_n)}; \end{aligned} \quad (9.61)$$

$$D(i\omega_n) = (i\omega_n - \varepsilon_k + \mu + \sigma H_0)(i\omega_n - \varepsilon_{k-Q} + \mu + \sigma H_0) - \Delta^2.$$

Pe baza relației (9.57) pentru parametrul de ordine obținem

$$\Delta = -\frac{1}{2}\lambda T \sum_{k,\sigma} \sum_n G_\sigma^{012}(k, i\omega_n). \quad (9.62)$$

Legea de dispersie o luăm sub forma

$$\varepsilon_k = -W \cos kd, \quad (9.63)$$

$2W$ fiind lărgimea benzii; d este constanta rețelei. Substituim în (9.62) expresia pentru funcția Green (9.61) și efectuăm integrarea după k conform formulei (vezi cap.7)

$$\begin{aligned} \sum_k \Phi(i\omega_n, \varepsilon_k, \varepsilon_{k-Q}, \mu) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-Q_0}^{Q_0} \Phi(i\omega_n, \varepsilon_k, \varepsilon_{k-Q}, \mu) dk = \\ &= N_0 \sum_j \int_0^W \Phi(i\omega_n, \varepsilon, -\varepsilon, \mu_j) d\varepsilon, \end{aligned} \quad (9.64)$$

unde $\mu_j = \mu + j\eta_q$; $\eta_q \simeq wqd/2$; $j = \pm 1$. Sumarea (9.64) ține seama de procesele Umklapp, deoarece ia în considerație întreaga primă zonă Brillouin [12, 18].

După integrarea după k obținem pentru parametrul de ordine ecuația

$$\ln \frac{T}{T_{P0}} = -2\pi T \sum_{n>0} \left\{ \frac{1}{4} \sum_{\sigma,j} \operatorname{Im} \frac{1}{[(i\omega_n + i\mu_j)^2 - \Delta^2]^{1/2}} + \frac{1}{\omega_n} \right\}, \quad (9.65)$$

unde T_{P0} este temperatura tranziției Peierls pentru $\mu = 0$. Aici pentru determinarea rădăcinii s-a luat ramura cu partea reală pozitivă. Pentru $T = 0$ trecem în formula (9.65) de la sumarea după n la integrarea după ω și aducem ecuația (9.65) la forma

$$\ln \frac{\Delta}{\Delta_0} = \frac{1}{4} \sum_{\sigma,j} \ln \frac{\Delta}{\sqrt{\mu_j^2 - \Delta^2} + |\mu_j^\sigma|} \theta(|\mu_j^\sigma| - \Delta), \quad (9.66)$$

unde $\sigma = \pm 1$, $\mu_j^\sigma = \mu_j + \sigma H_0$; $\Delta_0 \simeq 1,76T_{P0}$. În apropierea temperaturii de tranziție Peierls $T \approx T_P$ avem

$$\ln \frac{T}{T_{P0}} = f_0 - \left[\frac{\Delta}{2\pi T} \right]^2 f_1 + \frac{3}{8} \left[\frac{\Delta}{2\pi T} \right]^4 f_2 + \dots \quad (9.67)$$

unde

$$\begin{aligned} f_0 &= \frac{1}{4} \sum_{n>0} \sum_{j,\sigma} \left\{ \operatorname{Re} \left[n + \frac{1}{2} - \frac{i\mu_j^\sigma}{2\pi T} \right]^{-1} - \frac{1}{n + 1/2} \right\}; \\ f_1 &= \frac{1}{4} \sum_{n>0} \sum_{j,\sigma} \operatorname{Re} \left[n + \frac{1}{2} - \frac{i\mu_j^\sigma}{2\pi T} \right]^{-3}; \\ f_2 &= \frac{1}{4} \sum_{n>0} \sum_{j,\sigma} \operatorname{Re} \left[n + \frac{1}{2} - \frac{i\mu_j^\sigma}{2\pi T} \right]^{-5}. \end{aligned} \quad (9.68)$$

Semnul coeficientului f_1 determină tipul tranziției de fază. Pentru $f_1 < 0$ are loc tranziția de fază de ordinul unu, iar pentru $f_1 > 0$ această tranziție este de ordinul doi. Condiția $f_1 = 0$ determină punctul de ramificație a ecuației (9.67) și corespunde schimbării tipului de tranziție de fază.

Pentru tranziția de fază de ordinul doi ($\Delta \rightarrow 0$) ecuația pentru temperatura critică a tranziției Peierls are forma

$$\ln \frac{T_p}{T_{p0}} = \psi(1/2) - \frac{1}{4} \operatorname{Re} \sum_{\sigma, j} \psi \left(\frac{1}{2} - \frac{i\mu_j^\sigma}{2\pi T_p} \right), \quad (9.69)$$

$\psi(z)$ este derivata logaritmului funcției $\Gamma(z)$.

Câmpul magnetic extern modifică vizibil ecuația pentru temperatura de tranziție în starea CDW. Trebuie să stabilim cum influențează acesta asupra vectorului de undă al undei de densitate de sarcină $Q = 2k_F + q$. Pentru a determina legătura dintre (μ, H_0) și q , putem folosi condiția de maxim a lui T_P analog cu modul cum am procedat în secțiunea precedentă.

Momentul magnetic de spin al sistemului îl găsim cu ajutorul funcției Green uniparticulă a sistemului în câmp magnetic

$$M = T \sum_{k, \sigma} \sum_n \sigma G_\sigma^{011}(k, i\omega_n). \quad (9.70)$$

În domeniul câmpurilor magnetice mici este indicat să scriem această expresie sub forma

$$M = 2N_0 H_0 + T \sum_n \sum_{k, \sigma} \sigma G_\sigma^{011}(k, i\omega_n). \quad (9.71)$$

Substituind în (9.41) funcția Green corespunzătoare (9.61) și efectuând sumarea după k , expresia pentru susceptibilitatea magnetică $\chi = M/H_0$ poate fi pusă sub forma

$$\frac{\chi}{\chi_0} = 1 + i\pi T \frac{1}{2} \sum_{n, j} \frac{\Delta^2}{[(i\omega_n + \mu_j)^2 - \Delta^2]^{3/2}}. \quad (9.72)$$

Pentru $T = 0$ această expresie ne dă

$$\frac{\chi}{\chi_0} = \frac{1}{2} \sum_j \frac{\mu_j}{\sqrt{\mu_j^2 - \Delta^2}} \theta(\mu_j - \Delta), \quad (9.73)$$

unde Δ este parametrul de ordine, determinat de ecuația (9.66) pentru $H_0 = 0$. Analiza ecuației (9.66) arată că Δ ca funcție de μ tinde către zero abrupt, fără a atinge valorile $\Delta > \mu_+$. Prin urmare, pentru $T = 0$ și $\Delta < \mu_+$, $\chi/\chi_0 \neq 0$. În același timp formula (9.73) ne dă trecerea corectă la starea metalică ($\Delta = 0$; $\chi/\chi_0 = 1$).

9.2.2 Considerarea impurităților

Mai departe vom folosi pe \mathcal{H}_0 ca hamiltonianul neperturbat, care determină funcțiile Green (9.61) ca aproximația de zero a sistemului cu impurități. Aplicând

teoria perturbațiilor în raport cu potențialul impurităților, pentru operatorul de masă în aproximația Born obținem expresia

$$\hat{\Sigma}_\sigma(k, i\omega_n) = n_i \sum_p |V(k-p)|^2 \hat{G}_\sigma(p, i\omega_n), \quad (9.74)$$

unde n_i este concentrația de impurități; \hat{G}_σ este funcția Green matricială totală, care ia în considerație difuzia electronilor pe impurități.

Pentru simplitate, mai departe vom considera că potențialul V depinde slab de impuls, astfel că vom lua $V(k-p) \simeq V$. Scriem ecuația Dyson pentru funcția Green electronică

$$\left[\hat{G}_\sigma(k, i\omega_n) \right]^{-1} = \left[\hat{G}_\sigma^0(k, i\omega_n) \right]^{-1} - \hat{\Sigma}_\sigma(k, i\omega_n). \quad (9.75)$$

Din (9.74) și (9.75) putem reprezenta funcția Green a sistemului cu impurități sub forma

$$\hat{G}_\sigma(k, i\omega_n) = D^{-1}(i\tilde{\omega}_{n\sigma}) \begin{pmatrix} i\omega_{n\sigma}^{22} - \varepsilon'_2 & \tilde{\Delta}_{12}^\sigma \\ \tilde{\Delta}_{21}^\sigma & i\tilde{\omega}_{n\sigma}^{11} - \varepsilon'_1 \end{pmatrix}, \quad (9.76)$$

unde

$$\begin{aligned} \varepsilon'_1 &= \varepsilon_k - \mu; & \varepsilon'_2 &= \varepsilon_{k+Q} - \mu; & \tilde{\Delta}_{12}^\sigma &= \Delta + \Sigma_\sigma^{12}; & \tilde{\Delta}_{21}^\sigma &= \Delta + \Sigma_\sigma^{21}; \\ i\tilde{\omega}_{n\sigma}^{11} &= i\omega_n - \Sigma_\sigma^{11} + \sigma H_0; & i\tilde{\omega}_{n\sigma}^{22} &= i\omega_n - \Sigma_\sigma^{22} + \sigma H_0; \end{aligned} \quad (9.77)$$

$$D(i\tilde{\omega}_{n\sigma}) = \left[i\tilde{\omega}_{n\sigma}^{11} - \varepsilon'_1 \right] \left[i\tilde{\omega}_{n\sigma}^{22} - \varepsilon'_2 \right] - \tilde{\Delta}_{12}^\sigma \tilde{\Delta}_{21}^\sigma.$$

Să trecem la calculul operatorilor de masă. Substituim în formula (9.74) expresia (9.76) și efectuăm sumarea după p conform formulei (9.64). Ca rezultat pentru mărimile $\tilde{\omega}_{n\sigma}$ și $\tilde{\Delta}$ obținem sistemul de ecuații

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_{n\sigma} &= \omega_n - i\sigma H_0 + \frac{\Gamma}{4} \sum_j \left[\tilde{\omega}_{n\sigma} - i\mu_j \right] \left[(\tilde{\omega}_{n\sigma} - i\mu_j)^2 + \tilde{\Delta}_\sigma^2 \right]^{-1/2}; \\ \tilde{\Delta}_\sigma &= \Delta - \frac{1}{4} \Gamma \sum_j \tilde{\Delta}_\sigma \left[(\tilde{\omega}_{n\sigma} - i\mu_j)^2 + \tilde{\Delta}_\sigma^2 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (9.78)$$

Parametrul Δ se va determina din ecuația

$$\Delta = \frac{1}{4} \lambda N_0 \pi T \sum_{\sigma, n, j} \tilde{\Delta}_\sigma \left[\tilde{\Delta}_\sigma^2 + (\omega_{n\sigma} - i\mu_j)^2 \right]^{-1/2}, \quad (9.79)$$

λ fiind constanta de interacție electron-fonon; N_0 - densitatea electronică de stări la suprafața Fermi; $\text{Re} \left[\left[\tilde{\Delta}_\sigma^2 + (\omega_{n\sigma} - i\mu_j)^2 \right]^{1/2} \right] > 0$; Γ este atenuarea datorită difuziei electronilor pe atomii de impuritate. Este indicat să introducem mărimea $u_{n\sigma} = \tilde{\omega}_{n\sigma} / \tilde{\Delta}_\sigma$ și să aducem sistemul (9.78), (9.79) la forma

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{4} \lambda N_0 \pi T \sum_{\sigma, n, j} \left[(u_{n\sigma} - i\mu_j / \tilde{\Delta}_\sigma)^2 + 1 \right]^{-1/2}; \\ \Delta u_{n\sigma} &= \omega_n - i\sigma H_0 + \frac{1}{4} \Gamma \sum_j \left[2u_{n\sigma} - i\mu_j / \tilde{\Delta}_\sigma \right] \left[(u_{n\sigma} - i\mu_j / \tilde{\Delta}_\sigma)^2 + 1 \right]^{-1/2}; \end{aligned} \quad (9.80)$$

$$\tilde{\Delta}_\sigma/\Delta = 1 - \frac{1}{4}\Gamma/\Delta \sum_j \left[(u_{n\sigma} - i\mu_j/\tilde{\Delta}_\sigma)^2 + 1 \right]^{-1/2}. \quad (9.81)$$

Sistemul de ecuații (9.80), (9.81) nu coincide cu rezultatele lucrării [35], și de asemenea cu expresiile corespunzătoare pentru supraconductor cu impurități paramagnetice. Pentru $\mu_j = 0$ împreună cu ecuațiile pentru u_n în discuție este inclusă și ecuația pentru $\tilde{\Delta}$. Prin urmare, proprietățile termodinamice ale sistemului descris se deosebesc de cazul benzii umplute pe jumătate [35].

Să trecem acum la studiul caracteristicilor termodinamice pentru $H_0 = 0$. În acest caz ecuațiile (9.80) și (9.81) pot fi puse sub forma

$$\ln \frac{T}{T_{P0}} = \frac{\pi T}{2\Delta} \sum_{n,j} \left\{ \left[(u_n - i\mu_j/\tilde{\Delta})^2 + 1 \right]^{-1/2} - \frac{1}{|\omega_n|} \right\}; \quad (9.82)$$

$$\begin{aligned} \Delta u_n &= \omega_n + \frac{1}{4}\Gamma \sum_j \left[2u_n - i\mu_j/\tilde{\Delta} \right] \left[(u_n - i\mu_j/\tilde{\Delta})^2 + 1 \right]^{-1/2}; \\ \frac{\tilde{\Delta}}{\Delta} &= 1 - \frac{1}{4} \frac{\Gamma}{\Delta} \sum_j \left[(u_n - i\mu_j/\tilde{\Delta})^2 + 1 \right]^{-1/2}; \end{aligned} \quad (9.83)$$

În apropierea temperaturii de tranziție a condensării CDW în ecuațiile (9.82) și (9.83) putem efectua dezvoltarea în serie în raport cu mărimea $|(u_n - i\mu_j/\tilde{\Delta})^2| \ll 1$. Obținem astfel pentru temperatura Peierls T_P :

$$\ln \frac{T_P}{T_{P0}} = \frac{1}{2}\pi T_P \sum_{nj} \left\{ \left[A_{nj} \operatorname{sign} \operatorname{Re} A_{nj} \right]^{-1} - \frac{1}{|\omega_n|} \right\}; \quad (9.84)$$

$$A_{nj} = \Delta u_n - i\mu_j \Delta/\tilde{\Delta};$$

$$\begin{aligned} \Delta u_n &= \omega_n + \frac{1}{4}\Gamma \sum_j (\Delta u_n + A_{nj}) \left[A_{nj} \operatorname{sign} \operatorname{Re} A_{nj} \right]^{-1}; \\ \frac{\tilde{\Delta}}{\Delta} &= 1 - \frac{1}{4}\Gamma \sum_j \left[A_{nj} \operatorname{sign} \operatorname{Re} A_{nj} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (9.85)$$

Sistemul de ecuații (9.84), (9.85) trebuie rezolvat selfconsistent [$\omega_n = 2\pi T_P(n + 1/2)$]. Pentru valori arbitrare ale parametrilor teoriei această soluție poate fi obținută numai pe cale numerică.

Să examinăm cazul concentrației mici de impurități și să ne limităm în (9.85) numai la termenii liniari în raport cu Γ . În această aproximație pentru T_P putem scrie ecuația

$$\begin{aligned} \ln \frac{T_P}{T_{P0}} &= \pi T_P \operatorname{Re} \sum_{n \geq 0} \left\{ \left[\omega_n + \tilde{\Gamma}_+(\omega_n) - i\tilde{\mu} - (\omega_n) \right]^{-1} + \right. \\ &\quad \left. + \left[\omega_n + \tilde{\Gamma}_-(\omega_n) - i\mu_+(\omega_n) \right]^{-1} - \frac{2}{\omega_n} \right\}, \end{aligned} \quad (9.86)$$

unde

$$\begin{aligned}
\tilde{\Gamma}_+ &= \Gamma \left[1 - \frac{\mu_+(\mu_+ - \mu_-)}{\omega_n^2 + \mu_+^2} \right]; \\
\tilde{\Gamma}_-(\omega_n) &= \Gamma \left[1 - \frac{\mu_-(\mu_- - \mu_+)}{\omega_n^2 + \mu_-^2} \right]; \\
\tilde{\mu}_+(\omega_n) &= \mu_+ + \frac{1}{4} \Gamma |\omega_n| \frac{\mu_+ - \mu_-}{\omega_n^2 + \mu_-^2}; \\
\mu_-(\omega_n) &= \mu_- + \frac{1}{4} \Gamma |\omega_n| \frac{\mu_- - \mu_+}{\omega_n^2 + \mu_-^2}.
\end{aligned} \tag{9.87}$$

Dacă este îndeplinită condiția $2\Gamma\eta_q \ll \mu_{\pm}$, atunci ecuația (9.86) se simplifică:

$$\ln \frac{T_P}{T_{P0}} = \psi(1/2) - \frac{1}{2} \operatorname{Re} \sum_j \psi \left(\frac{1}{2} + \frac{\Gamma - i, \mu_j}{2\pi T_P} \right). \tag{9.88}$$

Pentru $\mu = 0$ aceasta trece în ecuația corespunzătoare din lucrarea [35].

Să obținem de asemenea expresia pentru parametrul de ordine Δ pentru $T = 0$ în domeniul concentrației mici de impurități. În acest scop scriem ecuația pentru parametrul de ordine Δ sub forma

$$\frac{1}{\lambda N_0} = \frac{\pi T}{2\Delta} \sum_{n,j} \left[(u_n - i\mu_j/\tilde{\Delta})^2 + 1 \right]^{-1/2}. \tag{9.89}$$

Folosind ecuația (9.83) putem determina pe u_n și $\tilde{\Delta}$ cu precizie până la termeni liniari în Γ . Substituim aceste valori în formula (9.89). Mai departe trecem în formula (9.89) de la sumarea după n la integrare după ω . Ca rezultat al acestor operații pentru parametrul de ordine la $T = 0$ obținem expresia

$$\begin{aligned}
&\sum_j \left[\ln \frac{\Delta}{\Delta_0} \theta(\Delta - \mu_j) + \ln \frac{\mu_j + \sqrt{\mu_j^2 - \Delta^2}}{\Delta_0} \theta(\mu_j - \Delta) \right] = \\
&= -\Gamma \sum_j \operatorname{Re} \int_0^\infty d\omega \frac{(\omega - i\mu_j) [\phi(\omega) - i\mu_j \psi(\omega)]}{[\Delta^2 + (\omega - i\mu_j)^2]^{3/2}}
\end{aligned} \tag{9.90}$$

unde

$$\begin{aligned}
\phi(\omega) &= \frac{1}{4} \sum_{j'} (2\omega - i\mu_{j'}) \left[\Delta^2 + (\omega - i\mu_{j'})^2 \right]^{-1/2}; \\
\psi(\omega) &= \frac{1}{4} \sum_{j'} \left[\Delta^2 + (\omega - i\mu_{j'})^2 \right]^{-1/2}.
\end{aligned} \tag{9.91}$$

În cazul tranziției în starea comensurabilă CDW ($\mu_j = \mu$, $q = 0$), expresia (9.90) se simplifică considerabil și pentru parametrul de ordine la $T = 0$ avem

$$\theta(\Delta - \mu) \ln \frac{\Delta}{\Delta_0} + \theta(\mu - \Delta) \ln \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 - \Delta^2}}{\Delta_0} = -\frac{\pi}{4} \frac{\Gamma}{\Delta} \theta(\Delta - \mu). \tag{9.92}$$

Pe baza acestei ecuații obținem două soluții

$$\Delta > \mu; \quad \ln \frac{\Delta}{\Delta_0} = -\frac{\pi}{4} \frac{\Gamma}{\Delta}, \quad (9.93)$$

$$\Delta < \mu; \quad \Delta^2 = 2\Delta_0\mu - \Delta_0^2. \quad (9.94)$$

Prima soluție coincide cu ce obținută în lucrarea [35], a doua nu depinde de concentrația de impurități și, ca urmare, nu corespunde unei stări stabile CDW.

Determinăm densitatea electronică de stări conform formulei

$$N(\omega) = -\frac{1}{4} \int^{Q_0} -Q_0 \frac{dk}{2\pi} \text{Im} G^{11}(k, i\omega_n) \Big|_{i\omega_n = \omega + i0^+}. \quad (9.95)$$

Să trecem în această formulă la integrarea după energiei conform formulei (9.64) și să prezentăm $N(\omega)$ sub forma

$$N(\omega) = \frac{1}{2} N_0 \text{Re} \sum_j (u + \mu_j / \tilde{\Delta} [(u + \mu_j / \tilde{\Delta})^2 - 1]^{-1/2}), \quad (9.96)$$

unde

$$\begin{aligned} \Delta u &= \omega + \frac{1}{4} \Gamma \sum_j (2u + \mu_j / \tilde{\Delta} [1 - (u + \mu_j / \tilde{\Delta})^2]^{-1/2}); \\ \tilde{\Delta} &= \Delta - \frac{1}{4} \Gamma \sum_j [1 - (u + \mu_j / \tilde{\Delta})^2]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (9.97)$$

Este indicat să introducem notațiile:

$$u_j = u + \mu_j / \tilde{\Delta}; \quad j = \pm 1. \quad (9.98)$$

Atunci expresia (9.96) și sistemul de ecuații (9.97) poate fi adus la forma

$$N(\omega) = \frac{1}{2} N_0 \text{Re} \sum_j u_j [u_j^2 - 1]^{-1/2}; \quad (9.99)$$

$$\begin{aligned} u_- &= \bar{\omega} + \bar{\mu}_- + \frac{1}{2} \bar{\Gamma} \left\{ u_- (1 - u_-^2)^{-1/2} + u_+ (1 - u_+^2)^{-1/2} \right\} - \\ &\quad - \frac{1}{4} \bar{\Gamma} (\mu_+ - \mu_-) \left[(1 - u_+^2)^{1/2} - \frac{1}{4} \bar{\Gamma} \left(\sqrt{\frac{1 - u_+^2}{1 - u_-^2}} + 1 \right) \right]^{-1}; \\ u_+ &= \bar{\omega} + \bar{\mu}_+ + \frac{1}{2} \bar{\Gamma} \left\{ u_- (1 - u_-^2)^{1/2} + u_+ (1 - u_+^2)^{-1/2} \right\} - \\ &\quad - \frac{1}{4} \bar{\Gamma} (\bar{\mu}_- - \bar{\mu}_+) \left[(1 - u_-^2)^{1/2} - \frac{\Gamma}{4} \left(\sqrt{\frac{1 - u_-^2}{1 - u_+^2}} + 1 \right) + 1 \right]^{-1}, \end{aligned} \quad (9.100)$$

unde $\bar{\omega} = \omega / \Delta$; $\bar{\Gamma} = \Gamma / \Delta$; $\bar{\mu}_j = \mu_j / \Delta$.

Se vede ușor că dacă pentru $\bar{\omega}$ sistemul de ecuații (9.100) are soluții reale $|u_-|, |u_+| < 1$, atunci $N(\omega) = 0$. Aceasta înseamnă că la suprafața Fermi se formează un gap dielectric. Valoarea maximă a lui ω , pentru care este îndeplinită condiția $N(\omega) = 0$, determină gap-ul energetic Ω_g . Să examinăm cazul mai simplu $\mu_+ = \mu_-$, $q = 0$, atunci avem ($u_+ = u_- = u$)

$$u = \bar{\omega} + \bar{\mu} + \frac{\bar{\Gamma}u}{[1 - u^2]^{1/2}}. \quad (9.101)$$

Pe baza acestei ecuații pentru gap-ul dielectric obținem

$$\Omega_g = \left[1 - \bar{\Gamma}^{2/3}\right]^{3/2} - \bar{\mu}. \quad (9.102)$$

Pentru $\Omega_g = 0$ expresia (9.102) ne dă

$$[\Delta(\bar{\Gamma}'_{cr})]^{2/3} = [\Gamma'_{cr}]^{2/3} + \mu^{2/3}. \quad (9.103)$$

Substituind (9.103) în (9.93), obținem expresia pentru concentrația critică Γ'_{cr} pentru care apare starea fără gap,

$$\ln \frac{[\Gamma'^{2/3} + \mu^{2/3}]^{3/2}}{\Delta_0} = -\frac{\pi}{4} \frac{\Gamma'_{cr}}{[\Gamma'^{2/3} + \mu^{2/3}]^{3/2}} \quad (9.104)$$

Mai departe determinăm concentrația critică de impurități pentru care dispare starea CDW. În acest scop în ecuația (9.88) facem limita $T_P \rightarrow 0$:

$$\Gamma_{cr} = \sqrt{(\Delta_0/2)^2 - \mu^2}. \quad (9.105)$$

Punând în formulele (9.104), (9.105) $\mu = 0$, obținem $\Gamma'_{cr} = e^{-\pi/4}\Delta_0$ și $\Gamma_{cr} = \Delta/2$ care este rezultatul lucrării [35]. În cazul nostru concentrațiile critice Γ'_{cr} și Γ_{cr} depind de parametrul μ .

9.2.3 Susceptibilitatea magnetică

Susceptibilitatea magnetică a sistemului cu impurități examinată o definim în mod analog cum a fost făcut mai sus pentru sistemul pur

$$M = 2N_0H_0 + T \sum_{n,k,\sigma} \sigma G_\sigma^{11}(k, i\omega_n). \quad (9.106)$$

Aici G_σ^{11} este funcția Green totală cu luarea în considerație a difuziei pe impurități (9.76). Substituind (9.76) în (9.106) și efectuând sumarea după k conform formulei (9.64), aducem (9.106) la forma

$$M = 2N_0H_0 - \frac{1}{2}i\pi TN_0 \sum_{n,j,\sigma} \sigma \frac{i u_n^\sigma + \mu_j / \tilde{\Delta}_\sigma}{[(i u_n^\sigma + \mu_j / \tilde{\Delta}_\sigma)^2 - 1]^{1/2}}. \quad (9.107)$$

Mărimile u_n^σ și $\tilde{\Delta}_\sigma$ se determină din ecuațiile (9.81). Dezvoltăm aceste mărimi după puterile lui H_0 conform formulelor

$$iu_n^\sigma = iu_n + \sigma H_0 u_n^1 + \dots; \quad \tilde{\Delta}_\sigma = \Delta + \sigma H_0 v_n^1 + \dots \quad (9.108)$$

Substituind (9.108) în (9.107), efectuând dezvoltarea după H_0 și limitându-ne la termenii liniari în H_0 , avem

$$\frac{\chi}{\chi_0} = 1 + \pi i T \frac{1}{2} \sum_{n,j} \frac{u_n^1 - v_n^1 \mu_j / \tilde{\Delta}}{[(iu_n + \mu_j / \tilde{\Delta})^2 - 1]^{3/2}}. \quad (9.109)$$

Mărimile u_n^1 și v_n^1 le determinăm cu ajutorul ecuațiilor (9.108) și (9.81):

$$u_n^1 = [A - BD/C]^{-1}; \quad v_n^1 = D[AC - BD]^{-1}. \quad (9.110)$$

Aici

$$\begin{aligned} A &= \Delta - \frac{i}{4} \Gamma \sum_j \left[\frac{\mu_j}{\tilde{\Delta}} Q_{nj} - 2 \right] [Q_{nj}^2 - 1]^{-3/2}; \\ B &= \frac{i}{4} \Gamma \sum_j \frac{\mu_j}{\tilde{\Delta}^2} [1 + iu_n Q_{nj}] [Q_{nj}^2 - 1]^{-3/2}; \\ C &= 1 + \frac{i}{4} \Gamma \sum_j \frac{\mu_j}{\tilde{\Delta}} Q_{nj} [Q_{nj}^2 - 1]^{-3/2}; \\ D &= \frac{i}{4} \Gamma \sum_j Q_{nj} [Q_{nj}^2 - 1]^{-3/2}; \\ Q_{nj} &= iu_n + \mu_j / \tilde{\Delta} \end{aligned} \quad (9.111)$$

Mărimile $\text{Im} [(iu_n + i\mu_j / \tilde{\Delta})^2 - 1]^{1/2} > 0$, $\text{Re} [(u_n - i\mu_j / \tilde{\Delta})^2]^{1/2} > 0$, u_n și $\tilde{\Delta}$ se determină din ecuațiile (9.83). Pentru $\Gamma = 0$ formula (9.109) trece în (9.72) pentru substanța pură.

Un alt caz limită $\mu_j = 0$ ne dă

$$\frac{\chi}{\chi_0} = 1 - \frac{\pi T}{\Delta} \sum \frac{1}{(u_n^2 + 1)^{3/2} - \frac{\Gamma}{\Delta}}. \quad (9.112)$$

Impuritățile duc la creșterea susceptibilității magnetice, care pentru temperatură nulă rămâne egală cu zero pentru orice concentrație cu excepția domeniului fără gap. Acest rezultat se deosebește de rezultatul teoriei BCS, unde prezența impurităților magnetice dă o susceptibilitate de spin nenulă, și este în concordanță cu datele experimentale pentru $\text{K}_{0,3}\text{MoO}_3$ [43].

În domeniul concentrației mici de impurități pentru $\mu_+ = \mu_- = \mu$ pe baza formulelor (9.109)-(9.111) pentru susceptibilitatea magnetică avem

$$\begin{aligned} \frac{\chi}{\chi_0} &= 1 - \pi T \sum_n [(\bar{\omega}_n - i\bar{\mu})^2 + 1]^{-3/2} - 3\pi T \bar{\Gamma} \times \\ &\times \sum_n [(\bar{\omega}_n - i\bar{\mu})^2 + 1]^{-2} + 4\pi T \bar{\gamma} \sum_n [(\omega_n^2 - i\bar{\mu})^2 + 1]^{-3}, \end{aligned} \quad (9.113)$$

Tabelul 9.1: Relația dintre mărimile μ , η_q și T_P pentru $\Gamma/T_{P0}=0; 0,2; 0,3$ și $0,5$.

μ/T_{P0}	T_P/T_{P0}	η_q/T_{P0}	μ/T_{P0}	T_P/T_{P0}	η_q/T_{P0}
$\Gamma/T_{P0} = 0$			$\Gamma/T_{P0} = 0,3$		
0	1,0	0	1,2	0,23	1,10
0,5	0,94	0	0	0,74	0
1,0	0,68	0	0,5	0,68	0
1,073	0,56	0,01	0,88	0,34	0,04
1,2	0,41	0,98	0,9	0,28	0,51
$\Gamma/T_{P0} = 0,2$			$\Gamma/T_{P0} = 0,5$		
0	0,84	0	0	0,66	0
0,5	0,77	0	0,5	0,48	0
0,95	0,43	0,08	0,67	0,24	0,06
1,0	0,35	0,69	0,75	0,12	0,40

unde

$$\tilde{T} = T/\Delta_0; \tilde{\Gamma} = \Gamma/\Delta_0; \quad \tilde{\mu} = \mu/\Delta_0; \quad \tilde{\omega}_n = \omega_n/\Delta_0.$$

Efectuând integrarea după ω pentru $T = 0$ în (9.12), obținem expresia (9.73). Prin urmare, pentru concentrații mici de impurități și la temperatură nulă în această limită, raportul χ/χ_0 nu depinde de concentrația de impurități și, ca și în cazul substanței pure, este egal cu zero.

9.2.4 Rezultatele calculelor numerice

Analiza detaliată a sistemului de ecuații (9.80), (9.81) pentru parametrul de ordine, și de asemenea expresia (9.109) pentru susceptibilitatea magnetică este posibilă numai pe baza calculelor numerice. În teorie intră parametrul $\eta_q = w_q d/2$, care pentru valori determinate ale lui μ și Γ trebuie să fie obținut din condiția de maxim a temperaturii de tranziție Peierls T_P (în același fel determinăm valoarea vectorului de undă Q). Rezultatele obținute pe baza ecuației (9.88), sunt date în tabelul 9.1.

În acest fel, pentru $\mu < \mu_{cr}$ în sistem are loc o tranziție într-o stare comensurabilă CDW ($Q = 2k_F$, $\eta_q = 0$), iar pentru $\mu > \mu_{cr}$ mărimea η_q este diferită de zero, ceea ce corespunde unei faze CDW incomensurabilă. Valoarea mărimii μ_{cr} depinde puternic de concentrația de impurități (parametrul Γ). Analiza numerică detaliată arată că pentru $\Gamma > \Gamma_0 \approx 0,63T_{P0}$ este posibilă numai tranziția în starea comensurabilă ($\eta_q = 0$). Ca urmare, pentru $\Gamma < \Gamma_0$ modificând parametrul Γ sau μ , în sistem poate avea loc o tranziție de fază comensurabil-incomensurabil.

Dependența grafică a mărimii T_P de parametrul $\tilde{\mu} = \mu/T_{P0}$ și valorile corespunzătoare ale mărimii η_q sunt prezentate în fig.9.5. Curbele 4 și 5 corespund cazului $\eta_q = 0$, și, prin urmare, sistemul se află în stare CDW comensurabilă. Din figură rezultă că, valoarea lui μ_{cr} , pentru care are loc tranziția de fază în starea CDW incomensurabilă ($\eta_q \neq 0$), și însăși mărimea η_q depind de concentrația de impurități.

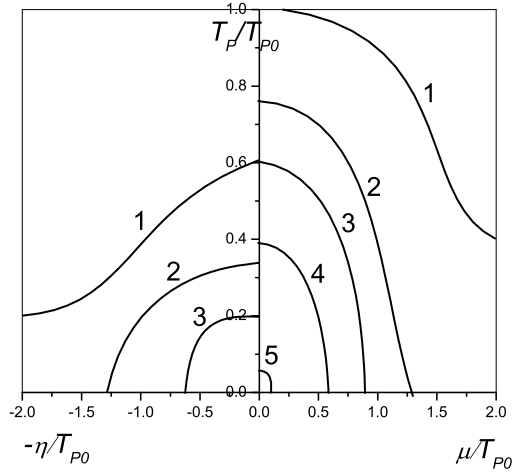


Figura 9.5: Dependenta mării T_P de parametrul $\bar{\mu}$ și valoarea corespunzătoare a mării η_q pentru valorile lui Γ/T_{P0} : 1) - 0; 2) - 0,3; 3) - 0,5; 4) - 0,65; 5) - 0,7.

Pe fig.9.6(a) se arată dependența temperaturii de tranziție T_P , iar pe fig.9.6(b) a parametrului de ordine Δ și a gap-ului energetic Ω_g de concentrația de impurități.

Se vede ușor că comportarea mărimilor respective nu coincide cu cea din cazul supraconductorului cu impurități paramagnetice (curba 1), și depind esențial de parametrul μ . În particular, pentru $\bar{\mu} = 1, 2$ există numai starea CDW fără gap ($\Omega_g = 0$).

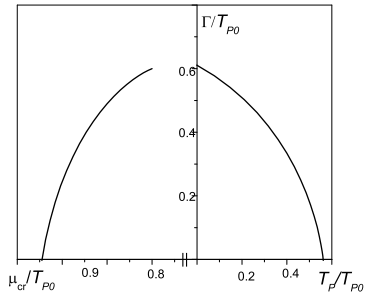


Figura 9.7: Dependenta de concentrația de impurități a temperaturii critice a tranziției în starea CDW incomensurabilă.

În fig.9.7 se dă dependența temperaturii critice a tranziției în starea CDW incomensurabilă T_P' și μ_{cr} de concentrația de impurități. Pentru $\Gamma \gtrsim 0,63T_{P0}$ mărimea $T_P = 0$ și în sistem este posibilă numai tranziția în starea comensurabilă ($\eta_q = 0$).

Pe fig.9.8 se prezintă dependența de temperatură a parametrului de ordine Δ și a susceptibilității magnetice χ pentru valori date ale parametrilor $\bar{\mu}$ și Γ .

Observăm că, spre deosebire de mărimile T_P și Ω_g , care depind esențial de mărimea $\bar{\mu}$, parametrul de ordine Δ pentru $T = 0$ și $\Gamma = 0$ în faza CDW comensurabilă și pentru valori mici ale lui η_q nu depind de μ . Totuși, cu creșterea lui η_q parametrul Δ ca funcție de μ are un mers mai special și valorile lui se micșorează destul de mult. Acest lucru se vede bine pe fig.9.8(a)

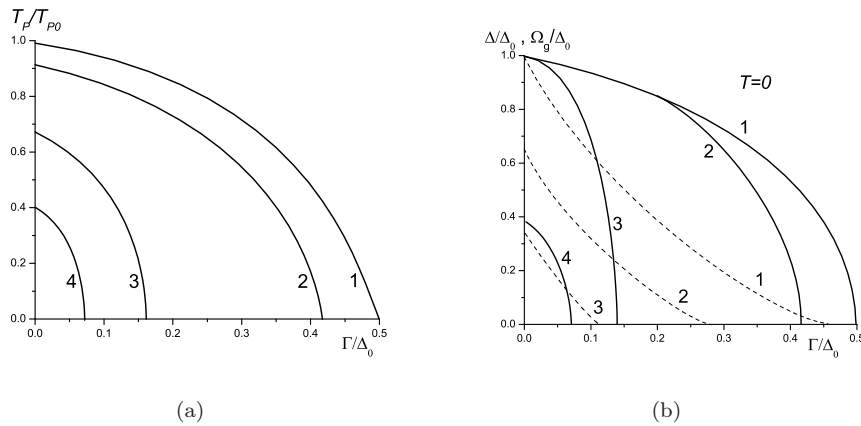


Figura 9.6: Dependența temperaturii de tranziție T_P/T_{P0} (a) a parametrului de ordine Δ (curbele continue) și a gap-ului energetic Ω_g (curbele întrerupte) (b) de concentrația de impurități pentru valorile lui $\bar{\mu}$: 1) - 0; 2) - 0,5; 3) - 1,0; 4) - 1,2.

(vezi valorile lui Δ pentru $T = 0$ și $\Gamma = 0$ - curbele 1, 3, 4, 5).

Observăm de asemenea că, într-un domeniu îngust de valori ale lui μ (aproape de cea critică, pentru care are loc tranziția în starea CDW incommensurabilă) parametrul de ordine Δ crește cu creșterea temperaturii (curba 5 pe fig.9.8(a)). Are loc reconstrucția rețelei și stabilizarea CDW. Această anomalie în comportarea lui Δ , și de asemenea prezența parametrului $\eta_q \neq 0$ duce la apariția maximumului local în dependența de temperatură a lui χ (curba 5 pe fig.9.8(b)).

Atât impuritățile, cât și abaterea de la umplerea pe jumătate a benzii contribuie la apariția stării fără gap și apariția valorilor lui χ diferite de zero pentru $T = 0$. Acest rezultat se deosebește de cazul supraconductorului cu impurități magnetice, când pentru orice concentrație de impurități apar valori $\chi \neq 0$ la temperatură nulă.

Pe fig.9.9(a) este redată dependența concentrației critice de impurități ($\bar{\Gamma}_{cr} = \Gamma_{cr}/\Delta_0$ este concentrația pentru care dispare supraconductivitatea; $\bar{\Gamma}'_{cr} = \Gamma'/\Delta_0$ este concentrația pentru care apare supraconductivitatea fără gap) de parametrul μ/Δ_0 , obținută pe baza expresiilor (9.104), (9.105), adevărate pentru $\mu < \mu_{cr}$ ($\eta_q = 0$).

Este interesantă și problema privind influența câmpului magnetic asupra tranziției comensurabil-incommensurabil. Soluția numerică a ecuației (9.69) arată că, cu creșterea câmpului magnetic μ_{cr} crește, iar T'_P scade. Legătura reciprocă a mărimilor T'_P și a lui μ_{cr} pentru diferite valori ale câmpului magnetic H_0 este prezentată în fig.9.9(b).

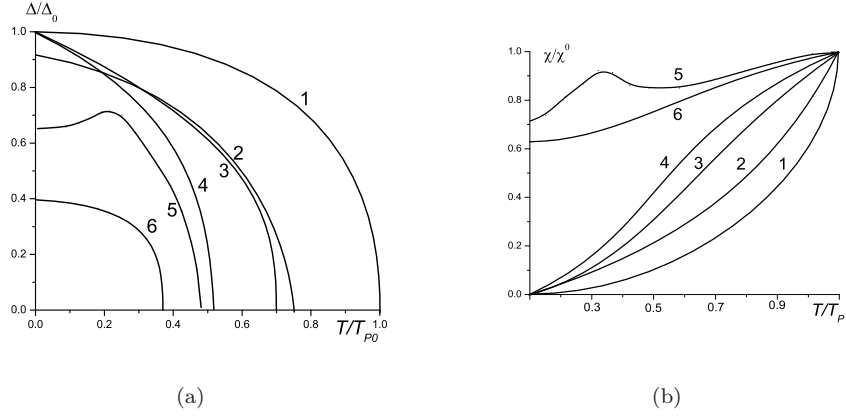


Figura 9.8: Dependența de temperatură a parametrului de ordine Δ (a) și a susceptibilității magnetice χ (b) pentru valorile: $\bar{\mu} = 0, \Gamma = 0$ (1); $\bar{\mu} = 0,5, \Gamma/T_{p0} = 0,2$ (2); $\bar{\mu} = 1,0, \Gamma/T_{p0} = 0$ (3); $\bar{\mu} = 1,08, \Gamma/T_{p0} = 0$ (4); $\bar{\mu} = 1,09, \Gamma/T_{p0} = 0$ (5); $\bar{\mu} = 1,0, \Gamma/T_{p0} = 0,2$ (6).

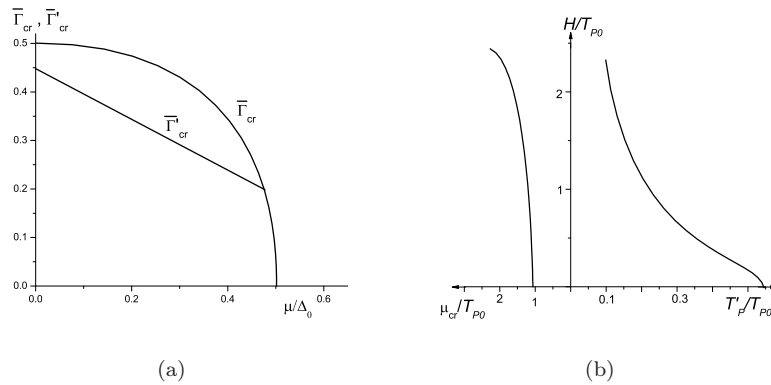


Figura 9.9: (a) Dependența concentrației critice a impurităților de parametrul μ/Δ ; (b) Dependența de câmpul magnetic a temperaturii de tranziție în starea CDW incommensurabilă și a mărimii μ_{cr} de același parametru.

SUPRACONDUCTIBILITATEA ALIAJELOR DE SUBSTITUȚIE ÎN APROXIMAȚIA POTENȚIALULUI COERENT

10.1 Introducere

În prezent un interes deosebit îl prezintă studiul proprietăților sistemelor semiconductoră, care prin introducerea unor impurități pot trece în stare supraconductoare cu parametri critici foarte ridicați. În legătură cu aceasta, în acest capitol se pune problema obținerii ecuațiilor fundamentale ale supraconductibilității aliajelor binare dezordonate de tipul $B_{1-x}A_x$, când atât substanța de bază (B), cât și impuritățile (A) sunt semiconductori. Pentru aceasta presupunem că banda de conducție a lui B este goală, iar a lui A este complet plină, iar concentrația de impurități poate fi orice valoare ($0 < x < 1$). Se presupune de asemenea că atomii de tip A și B sunt distribuiți haotic în nodurile rețelei cu energii diferite ε_A și ε_B pentru electronii de conducție care interacționează puternic atractiv în același nod când au spinii opuși [44]. Un astfel de model a fost folosit în lucrarea [45] pentru explicarea proprietăților ceramicilor metalice $BaPb_{1-x}Bi_xO_3$. Aplicarea teoriei aliajelor binare dezordonate la astfel de compuși complexi se bazează pe structura de bandă a compușilor $BaPbO_3$ și $BaBiO_3$, considerați de Matess și Hamann [46]. Conform cu acești autori, putem considera că B este PbO_3 iar A este BiO_3 .

În lucrarea [45] s-a studiat densitatea de stări electronice ale aliajelor binare de tipul $B_{1-x}A_x$ în stare normală și s-a arătat (pentru o alegere determinată a parametrilor teoriei, referitoare la compușii respectivi), că în funcție de valoarea concentrației de impurități ($0 < x < 1$) aliajul respectiv se poate găsi fie în stare semiconductoră, fie în stare metalică. În afară de aceasta, în lucrarea [45] din studiul propagatorului biparticulă cu spin total zero în aproximația potențialului coerent (CPA), s-a obținut ecuația pentru temperatura de tranziție în stare supraconductoare T_c și s-a determinat dependența acestei mărimi de concentrația de impurități. Dependența obținută este în concordanță cu datele experimentale.

Observăm că trecerea în starea normală ($T \rightarrow T_c$) permite să determinăm numai un parametru al fazei supraconductoare și anume mărimea T_c .

Mai jos va fi dezvoltată varianta diagramistică a CPA pentru aliajele de substi-

tuție de tip $B_{1-x}A_x$ în starea supraconductoare ($T < T_c$), se obțin ecuațiile teoriei supraconductibilității, care sunt fundamentale pentru determinarea parametrului de ordine Δ , saltul căldurii specifice și alte mărimi. În afară de acestea, în limita $\Delta \rightarrow 0$ se obțin expresiile pentru densitatea electronică de stări și selfconsistența sistemului de ecuații pentru determinarea temperaturii critice T_c .

S-au făcut calcule numerice pentru o serie de mărimi, care caracterizează sistemul în stare normală, și de asemenea s-a calculat dependența temperaturii critice de concentrația de impurități. În acest ne-am îndreptat atenția spre găsirea condiției de creștere a mărimii T_c în comparație cu cea obținută în lucrarea [45]. Se arată că valoarea și caracterul comportării lui T_c ca funcție de concentrația de impurități depinde foarte puternic de relația dintre energiile ε_A și ε_B .

Observăm că aplicarea CPA permite să luăm în considerație orice concentrație de impurități $0 < x < 1$.

Acest capitol a fost scris pe baza lucrării [47].

10.2 Hamiltonianul model al sistemului

Hamiltonianul sistemului examinat are forma

$$\mathcal{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} \varepsilon_i a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} - U \sum_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ a_{i\downarrow} a_{i\uparrow}, \quad (10.1)$$

unde j, i sunt indici de rețea; σ este spinul electronului; t_{ij} este energia de salt; ε_i energia electronului de conducție, care corespunde fie lui ε_A fie lui ε_B în funcție de faptul că nodul respectiv din rețea este ocupat de atomul A sau B; U este energia de interacție atractivă efectivă.

În aproximația câmpului efectiv, presupunând că cele două stări de spin (\uparrow, \downarrow) sunt echivalente, putem aduce (10.1) la forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0^B + \sum_{i \in A} (\varepsilon_A - \varepsilon_B - U n_A + U n_B) a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} - \sum_i \left[\Delta_i a_{i\uparrow}^+ a_{i\downarrow}^+ + \Delta_i^* a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} \right], \quad (10.2)$$

unde

$$\mathcal{H}_0^B = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_i (\varepsilon_i - U n_i) a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}; \quad (10.3)$$

$$\Delta_i = U \langle a_{i\downarrow} a_{i\uparrow} \rangle; \quad (10.4)$$

$$\langle a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} \rangle = n_i = \begin{cases} n_A \\ n_B \end{cases}, \quad (10.5)$$

unde $i = A, B$.

În (10.3) se poate considera că toate nodurile rețelei sunt ocupate cu atomi B, deoarece presupunem că integrala de hopping t_{ij} nu depinde de configurația compoziției (adică de faptul că valoarea ei nu depinde de ce tip de atomi ocupă nodurile i și j).

În reprezentarea impulsului hamiltonianul (10.2) se prezintă sub forma

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2, \quad (10.6)$$

unde

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \left[\Delta a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ + h.c. \right]; \quad (10.7)$$

$$\mathcal{H}_2 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma \sigma'} V \varrho(\mathbf{k} - \mathbf{k}') a_{\mathbf{k}\sigma}^+ a_{\mathbf{k}'\sigma'}. \quad (10.8)$$

Aici

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = E_{\mathbf{k}\sigma} + \varepsilon_B - U n_B; \quad \Delta = U \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle; \quad (10.9)$$

$$V = \varepsilon_A - \varepsilon_B - U(n_A - n_B); \quad (10.10)$$

$$\rho(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \frac{1}{N} \sum_{t \in A} \exp \left[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{R}_t \right]. \quad (10.11)$$

În acest fel, hamiltonianul (10.1), care descrie sistemul binar dezordonat, se reduce formal la (10.6), în care \mathcal{H}_1 descrie starea supraconductoare a sistemului electronic cu energiile renormate $\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}$ (vezi formula (10.9)), iar \mathcal{H}_2 este hamiltonianul difuziei electronilor pe impurități cu energia potențială renormată V .

Numerele de ocupare al stărilor n_A și n_B în domeniul temperaturilor joase pot fi approximate prin expresia

$$n_{A,B} = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \varrho_{A,B}(E) dE, \quad (10.12)$$

unde $\varrho_{A,B}$ este densitatea parțială de stări electronice.

Vom presupune că avem de a face cu un sistem cu o singură bandă de energie și că banda componentei B este absolut goală (electronii de conducție lipsesc din ea), iar în substanța pură A pe fiecare atom se află z electroni. Într-un astfel de model pentru mărimile n_A și n_B putem scrie expresia

$$(1-x)n_B + xn_A = \frac{1}{2}zx, \quad (10.13)$$

unde x este concentrația atomilor A.

10.3 Ecuația de configurație. Funcția Green

Pentru descrierea stării supraconductoare a acestui sistem introducem operatorii

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \end{bmatrix}; \quad \psi_{\mathbf{k}}^+ = \begin{bmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ & a_{-\mathbf{k}\downarrow} \end{bmatrix} \quad (10.14)$$

și funcția Green matricială

$$\hat{g}_{\mathbf{k}}(\tau - \tau') = -\langle T\psi_{\mathbf{k}}(\tau)\psi_{\mathbf{k}}^{\dagger}(\tau') \rangle = \begin{bmatrix} G_{\mathbf{k}}^{\uparrow\uparrow}(\tau - \tau') & F_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{\uparrow\downarrow}(\tau - \tau') \\ F_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{*\uparrow\downarrow}(\tau - \tau') & -G_{-\mathbf{k}}^{\downarrow\downarrow}(\tau - \tau') \end{bmatrix}. \quad (10.15)$$

Mai departe aplicăm metoda teoriei perturbațiilor, alegând în calitate de aproximație de zero starea hamiltonianului \mathfrak{H}_1 , și considerând pe \mathfrak{H}_2 ca perturbație. Atunci în aproximația zero pentru componentele funcției Green $\hat{g}_{\mathbf{k}}^0(\omega)$ în reprezentarea \mathbf{k}, ω obținem

$$\begin{bmatrix} z - \varepsilon_{\mathbf{k}} & \Delta \\ \Delta^* & -(z + \varepsilon_{\mathbf{k}}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G_{\mathbf{k}}^{0\uparrow\uparrow}(z) & F_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{0\uparrow\downarrow}(z) \\ F_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{0*\uparrow\downarrow}(z) & -G_{-\mathbf{k}}^{0\downarrow\downarrow}(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (10.16)$$

Soluția sistemului (10.16) este

$$\begin{aligned} g_{11}^0(z) &\equiv G_{\mathbf{k}}^{0\uparrow\uparrow}(z) = \frac{z + \varepsilon_{\mathbf{k}}}{z^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta|^2}; \\ g_{12}^0(z) &\equiv F_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{0\uparrow\downarrow}(z) = -\frac{\Delta}{z^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta|^2}; \\ g_{21}^0(z) &\equiv F_{\mathbf{k},-\mathbf{k}}^{0*\uparrow\downarrow}(z) = -\frac{\Delta^*}{z^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta|^2}; \\ f_{22}^0(z) &\equiv -G_{-\mathbf{k}}^{0\downarrow\downarrow}(z) = \frac{z - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{z^2 - \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 - |\Delta|^2}. \end{aligned} \quad (10.17)$$

Folosind definițiile (10.14), aducem expresia (10.8) la forma

$$\mathfrak{H}_2 = V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \varrho(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi_{\mathbf{k}}^{\dagger} \tau_3 \psi_{\mathbf{k}'}; \quad \tau_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (10.18)$$

τ_3 fiind matricea Pauli.

Pentru determinarea funcției Green totale $\hat{g}_{\mathbf{k}}$ se aplică varianta diagramatică a CPA[48], care ne permite să considerăm orice concentrație x a atomilor de impuritate A ($0 < x < 1$). În acest fel putem privi pe \mathfrak{H}_2 ca o perturbație.

Media pe configurații pentru funcția Green se poate reprezenta sub forma

$$\begin{aligned} \langle \hat{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \rangle &= \hat{g}_{\mathbf{k}}^0 \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \hat{g}_{\mathbf{k}}^0 \langle \varrho(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \rangle V \tau_3 \hat{g}_{\mathbf{k}'}^0 + \\ &+ \hat{g}_{\mathbf{k}}^0 \sum_{\mathbf{k}_1} \langle \varrho(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1) \varrho(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}') \rangle V^2 \tau_3 \hat{g}_{\mathbf{k}_1}^0 \tau_3 \hat{g}_{\mathbf{k}'}^0 + \dots \end{aligned} \quad (10.19)$$

Media pe configurații $\langle \dots \rangle$ în (10.19) se face conform formulei

$$\left\langle \sum_{\{l_1, \dots, l_j\}}^l F(\mathbf{R}_{l_1}, \mathbf{R}_{l_2}, \dots, \mathbf{R}_{l_j}) \right\rangle = x^j \sum_{\{n_1, \dots, n_j\}}^l F(\mathbf{R}_{n_1}, \mathbf{R}_{n_2}, \dots, \mathbf{R}_{n_j}), \quad (10.20)$$

unde $F(\mathbf{R}_{l_1}, \mathbf{R}_{l_2}, \dots, \mathbf{R}_{l_j})$ este o funcție arbitrară de j atomi de impuritate cu coordonatele $\mathbf{R}_{l_1}, \mathbf{R}_{l_2}, \dots, \mathbf{R}_{l_j}$. În stânga în formula (10.20) sumarea se face pe

Fiecare semn \times în (10.26) este pus în corespondență cu un cumulănt $C^{(n)}(x)$, punctului de intersecție al unei linii continui cu una întreruptă i se asociază mărimea $V\tau_3$, iar liniei continui funcția Green $\hat{g}_k(z)$. Seria (10.26) poate fi adusă la suma diagramelor care nu se intersectează

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma}(z) = & \begin{array}{c} \times \\ | \\ + \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ \text{---} \\ \text{---} \\ | \\ \times \end{array} \\ & + \begin{array}{c} \times \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots \end{aligned} \quad (10.27)$$

Pentru aceasta în (10.26) semnul \times se pune în corespondență cu cumulăntul renormat $Q_n(x)$.

Mai departe, făcând renormarea lui V (analog cu cea efectuată în lucrarea [48]), aducem expresia pentru operatorul de masă la forma

$$\hat{\Sigma}(z) = V\tau_3 \left(x\hat{1} + \hat{F}\tau_3 V\hat{f} \right), \quad (10.28)$$

unde $\hat{f} = \hat{f}(\hat{F}\tau_3 V)$ satisface ecuația matricială

$$\hat{f} = \frac{x(1-x)}{\hat{1} - (1-2x)\hat{F}\tau_3 V + \hat{F}\tau_3 V\hat{F}\tau_3 \hat{f}}. \quad (10.29)$$

Folosind definiția (10.29), obținem fără dificultate

$$\hat{\Sigma}(z) = xV\tau_3 + \frac{x(1+x)V^2\tau_3\hat{F}\tau_3}{\hat{1} - (1-x)\hat{F}\tau_3 V + \hat{F}\hat{\Sigma}}. \quad (10.30)$$

Introducem notația

$$\hat{I} = x\hat{1} + \hat{F}\tau_3 V\hat{f}. \quad (10.31)$$

Folosind acum (10.29), obținem pentru \hat{I} ecuația

$$\hat{I} = x \left\{ \hat{1} - V\hat{F}\tau_3 + V\hat{F}\tau_3 \hat{I} \right\}^{-1}. \quad (10.32)$$

Prin urmare, pentru operatorul de masă avem

$$\hat{\Sigma}(z) = xV\tau_3 \left\{ \hat{1} - \hat{F} \left[V\tau_3 - \hat{\Sigma}(z) \right] \right\}^{-1}. \quad (10.33)$$

Formulele (10.30) și (10.33) sunt expresii echivalente pentru $\hat{\Sigma}(z)$ în aproximația potențialului coerent. În cazul stării normale aceasta capătă forma

$$\Sigma^N = xV + \frac{x(1-x)V^2 F^N}{1 - (1-x)F^N V + F^N \Sigma^N} \quad (10.34)$$

sau

$$\Sigma^N = \frac{xV}{1 - [V - \Sigma^N]F^N}, \quad (10.35)$$

cea ce coincide cu expresia corespunzătoare din lucrarea [49], dacă punem $\varepsilon_B = 0$ și $\varepsilon = x\varepsilon_A = xV$.

Cu ajutorul ecuației matriciale (10.33) putem obține sistemul de ecuații pentru determinarea componentelor operatorului de masă:

$$\begin{aligned} D\Sigma_{11}(z) &= xV \left[1 + VF_{22}(z) + F_{21}(z)\Sigma_{12}(z) + F_{22}(z)\Sigma_{22}(z) \right]; \\ D\Sigma_{22}(z) &= -xV \left[1 - VF_{11}(z) + F_{12}(z)\Sigma_{21}(z) + F_{11}(z)\Sigma_{11}(z) \right]; \\ D\Sigma_{12}(z) &= -xV \left[1 + VF_{12}(z) + F_{11}(z)\Sigma_{12}(z) + F_{12}(z)\Sigma_{22}(z) \right]; \\ D\Sigma_{21}(z) &= xV \left[-VF_{21}(z) + F_{21}(z)\Sigma_{11}(z) + F_{22}(z)\Sigma_{21}(z) \right]; \end{aligned} \quad (10.36)$$

$$\begin{aligned} D &= (1 - VF_{11} + F_{11}\Sigma_{11} + F_{12}\Sigma_{21})(1 + VF_{22} + F_{22}\Sigma_{22} + F_{21}\Sigma_{12}) - \\ &\quad - (VF_{12} + F_{11}\Sigma_{12} + F_{12}\Sigma_{21})(-VF_{21} + F_{22}\Sigma_{21} + F_{21}\Sigma_{11}) \end{aligned} \quad (10.37)$$

Pentru determinarea funcției Green a aliajului scriem ecuația Dyson (10.16) sub forma

$$\left[\tilde{g}_k(z) \right]^{-1} = \left[\tilde{g}_k^0 \right]^{-1} - \hat{\Sigma}(z). \quad (10.38)$$

Pe baza acestei ecuații, și de asemenea a ecuației (10.16) pentru componentele funcției Green, obținem expresiile:

$$\begin{aligned} \tilde{g}_k^{(11)}(z) &= \frac{\tilde{z}_{22} + \varepsilon_k}{D(z)}; & \tilde{g}_k^{(12)}(z) &= -\frac{\tilde{\Delta}_{12}}{D(z)}; \\ \tilde{g}_k^{(21)}(z) &= -\frac{\tilde{\Delta}_{21}^*}{D(z)}; & \tilde{g}_k^{(22)}(z) &= \frac{\tilde{z}_{11} - \varepsilon_k}{D(z)}; \\ D(z) &= \left[\tilde{z}_{11} - \varepsilon_k \right] \left[\tilde{z}_{22} - \varepsilon_k \right] - \tilde{\Delta}_{21}^* \tilde{\Delta}_{12}. \end{aligned} \quad (10.39)$$

Frecvențele renormate \tilde{z}_{11} , \tilde{z}_{22} și parametrii de ordine $\tilde{\Delta}_{12}$, $\tilde{\Delta}_{21}^*$ se determină din relațiile:

$$\begin{aligned} \tilde{z}_{11} &= z + \Sigma_{11}(z); & \tilde{z}_{22} &= z - \Sigma_{22}(z); \\ \tilde{\Delta}_{12} &= \Delta - \Sigma_{12}(z); & \tilde{\Delta}_{21}^* &= \Delta^* - \Sigma_{21}(z). \end{aligned} \quad (10.40)$$

Formulele (10.23), (10.39), (10.40) și sistemul de ecuații (10.36) determină în mod selfconsistent componentele funcției Green \hat{g} și a operatorului de masă $\hat{\Sigma}$.

10.4 Proprietățile operatorilor de masă

Substituind (10.39) în definiția (10.23), obținem expresia pentru componentele operatorului \hat{F} :

$$\begin{aligned} F_{11}(z) &= \tilde{z}_{22}A_2(z) + A_1(z); & F_{12}(z) &= -\tilde{\Delta}_{12}A_2(z); \\ F_{22}(z) &= -\tilde{z}_{11}A_2(z) + A_1(z); & F_{21}(z) &= -\tilde{\Delta}_{21}^*A_2(z), \end{aligned} \quad (10.41)$$

unde

$$\begin{aligned} A_1(z) &= \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \left\{ \left[\tilde{z}_{11} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \right] \left[\tilde{z}_{22} + \varepsilon_{\mathbf{k}} \right] - \tilde{\Delta}_{12} \tilde{\Delta}_{21}^* \right\}^{-1}; \\ A_2(z) &= \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \left[\tilde{z}_{11} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \right] \left[\tilde{z}_{22} + \varepsilon_{\mathbf{k}} \right] - \tilde{\Delta}_{12} \tilde{\Delta}_{21}^* \right\}^{-1}; \end{aligned} \quad (10.42)$$

Din proprietățile de simetrie ale hamiltonianului sistemului rezultă egalitățile

$$g_{\mathbf{k}}^{12}(z) = g_{\mathbf{k}}^{12}(-z); \quad g_{\mathbf{k}}^{12}(z^*) = \left[g_{\mathbf{k}}^{12}(z) \right]^*. \quad (10.43)$$

Condițiile (10.43) duc la următoarele relații pentru componentele operatorilor $\hat{\Sigma}$ și \hat{F} :

$$\begin{aligned} \Sigma_{12}(z) &= \Sigma_{21}(z) = \Sigma_{12}(-z) = \left[\Sigma_{12}(z) \right]^*; \\ \Sigma_{11}(-z) &= -\Sigma_{22}(z) = \left[\Sigma_{11}(z) \right]^*; \\ F_{12}(-z) &= F_{21}(z) = F_{12}(-z) = \left[F_{12}(z) \right]^*; \\ F_{11}(-z) &= -F_{22}(z) = \left[F_{11}(z) \right]^*. \end{aligned} \quad (10.44)$$

Folosind relația (10.44), se vede ușor că expresia (10.37) se poate scrie sub forma

$$D = \left| 1 - VF_{11} + F_{11}\Sigma_{11} + F_{12}\Sigma_{12} \right|^2 + \left| VF_{12} + F_{11}\Sigma_{12} - F_{12}\Sigma_{11} \right|^2, \quad (10.45)$$

adică D este o mărime reală și este funcție pară de z . Aceleași proprietăți le au și mărimile A_1 și A_2 .

Din (10.44) rezultă egalitatea

$$\text{Im } \Sigma_{12}(z) = \text{Im } \Sigma_{21}(z) = 0; \quad \text{Im } \Sigma_{11}(z) = \text{Im } \Sigma_{22}(z). \quad (10.46)$$

Pe baza ecuațiilor (10.36) și (10.41), cu luarea în considerație a lui (10.45), și de asemenea a proprietăților funcțiilor $A_1(z)$ și $A_2(z)$ obținem relațiile:

$$\Sigma_{12}(z)/F_{12}(z) = -\text{Im } \Sigma_{22}(z)/\text{Im } F_{11}(z) = \frac{\text{Im } \Sigma_{22}(z)}{iz + \text{Im } \Sigma_{22}(z)A_2(z)}; \quad (10.47)$$

$$\Sigma_{12}(z)/\Delta = i\text{Im } \Sigma_{22}(z)/z; \quad (10.48)$$

$$F_{12}(z)/\Delta = -i\text{Im } F_{11}(z)/z. \quad (10.49)$$

10.5 Calculul componentei funcției $\hat{F}(z)$

Să trecem în expresia (10.23) de la sumarea după \mathbf{k} la integrarea după energii:

$$\hat{F}(z) = \int_{-W}^W \varrho_0(E) \hat{g}_{\mathbf{k}}(E) dE. \quad (10.50)$$

Aici $\varrho_0(E)$ este densitatea electronică de stări a substanței pure B, pe care o alegem de forma

$$\varrho_0(E) = \begin{cases} \frac{2}{\pi W^2} [W^2 - E^2]^{1/2}; & |E| \leq W, \\ 0; & |E| > W. \end{cases} \quad (10.51)$$

Substituind (10.39) și (10.51) în (10.50), obținem

$$\begin{aligned} F_{11}(Z) &= \frac{2}{\pi W} \int_{-1}^1 \frac{(\tilde{z}_{22} + x)\sqrt{1-x^2} dx}{(\tilde{Z}_{11} - x)(\tilde{Z}_{22} + x) - |\tilde{\Delta}|^2}; \\ F_{22}(Z) &= \frac{2}{\pi W} \int_{-1}^1 \frac{\tilde{z}_{11} - x)\sqrt{1-x^2} dx}{(\tilde{Z}_{11} - x)(\tilde{Z}_{22} + x) - |\tilde{\Delta}|^2}; \\ F_{12}(z) &= -\frac{2\tilde{\Delta}_{12}}{\pi W} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} [(\tilde{Z}_{11} - x)(\tilde{Z}_{22} + x) - |\tilde{\Delta}|^2]^{-1} dx; \\ F_{21}(z) &= -\frac{2\tilde{\Delta}_{21}^*}{\pi W} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} [(\tilde{Z}_{11} - x)(\tilde{Z}_{22} + x) - |\tilde{\Delta}|^2]^{-1} dx, \end{aligned} \quad (10.52)$$

unde

$$\tilde{Z}_{11} = \frac{\tilde{z}_{11} - a}{W}; \quad \tilde{Z}_{22} = \frac{\tilde{z}_{22} + a}{W}; \quad |\tilde{\Delta}|^2 = \frac{\tilde{\Delta}_{12}\tilde{\Delta}_{21}^*}{W^2}; \quad (10.53)$$

$$\alpha = \varepsilon_B - Un_B. \quad (10.54)$$

Scriem numitorul integranzilor din expresiile (10.52) sub forma

$$(\tilde{Z}_{11} - x)(\tilde{Z}_{22} + x) - |\tilde{\Delta}|^2 = -(x - \tilde{X}_1)(x - \tilde{X}_2); \quad (10.55)$$

$$\tilde{X}_{1,2} = \frac{1}{2} \left[\tilde{Z}_{11} - \tilde{Z}_{22} \pm i\sqrt{4|\tilde{\Delta}|^2 - (\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22})^2} \right]. \quad (10.56)$$

Ca rezultat formulele (10.52) pot fi aduse la forma următoare:

$$\begin{aligned}
 F_{12}(z) &= \frac{2}{\pi W} \frac{\tilde{\Delta}_{12}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \left\{ \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_1} dx - \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_2} dx \right\}; \\
 F_{21}(z) &= \frac{2}{\pi W} \frac{\tilde{\Delta}_{21}^*}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \left\{ \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_1} dx - \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_2} dx \right\}; \\
 F_{11}(z) &= -\frac{1}{\pi W} \left\{ \left[1 + \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \right] \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_1} dx + \right. \\
 &\quad \left. + \left[1 - \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_2} dx \right] \right\}; \\
 F_{22}(z) &= -\frac{1}{\pi W} \left\{ \left[1 + \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \right] \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_2} dx + \right. \\
 &\quad \left. + \left[1 - \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{x - \tilde{X}_1} dx \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{10.57}$$

În (10.57) intră un singur tip de integrală:

$$F_0(z) = \frac{2}{\pi W} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{z-x} dx. \tag{10.58}$$

Aici z este o mărime complexă. Folosind metoda transformării Laplace [50], obținem

$$F_0(z) = \frac{2[z - (z^2 - 1)^{1/2}]}{W}. \tag{10.59}$$

Substituind (10.59) în (10.57), aducem expresiile pentru F_{11} , F_{12} , F_{22} și F_{21} la

forma

$$\begin{aligned}
F_{11}(z) &= \frac{1}{W} \left\{ \left[1 + \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \right] [\tilde{X}_1 - (\tilde{X}_1^2 - 1)^{1/2}] + \right. \\
&\quad \left. + \left[1 - \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \right] [\tilde{X}_2 - (\tilde{X}_2^2 - 1)^{1/2}] \right\}; \\
F_{12}(z) &= -\frac{1}{W} \frac{2\tilde{\Delta}_{12}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \left\{ \left[\tilde{X}_1 - (\tilde{X}_1^2 - 1)^{1/2} \right] - \left[\tilde{X}_2 - (\tilde{X}_2^2 - 1)^{1/2} \right] \right\}; \\
F_{22}(z) &= -\frac{1}{W} \left\{ \left[1 + \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \right] [\tilde{X}_2 - (\tilde{X}_2^2 - 1)^{1/2}] + \right. \\
&\quad \left. + \left[1 - \frac{\tilde{Z}_{11} + \tilde{Z}_{22}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \right] [\tilde{X}_1 - (\tilde{X}_1^2 - 1)^{1/2}] \right\}; \\
F_{21}(z) &= -\frac{1}{W} \frac{2\tilde{\Delta}_{21}^*}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \left\{ \left[\tilde{X}_1 - (\tilde{X}_1^2 - 1)^{1/2} \right] - \left[\tilde{X}_2 - (\tilde{X}_2^2 - 1)^{1/2} \right] \right\}.
\end{aligned} \tag{10.60}$$

10.6 Cazul limită al stării normale

Punând în (10.36) $\Delta = 0$, obținem ecuația de selfconsistență pentru determinarea operatorului de masă $\Sigma^N(z) = \Sigma_{11}(z) \Big|_{\Delta=0}$ în starea normală

$$\Sigma^N(z) = \frac{xV}{1 - (V - \Sigma^N(z))F^N(z)}, \tag{10.61}$$

unde

$$F^N(z) = \frac{2}{W} \left[\tilde{Z}_{11}^0 - (\tilde{Z}_{11}^{02} - 1)^{1/2} \right]; \tag{10.62}$$

$$\tilde{Z}_{11}^0 = z - \Sigma^N(z) - (\varepsilon_B - Un_B) = z_1 - \Sigma^N(z); \quad z_1 = z - (\varepsilon_B - Un_B). \tag{10.63}$$

În (10.61)-(10.63) toate mărimile sunt normate la semilărgimea benzii W . Din expresiile (10.62) și (10.63) obținem ușor

$$\Sigma^N(z_1) = z_1 - \left[F^N(z_1) \right]^{-1} - \frac{1}{4} F^N(z_1). \tag{10.64}$$

Alegem originea energiilor astfel încât să fie îndeplinite relațiile

$$\varepsilon'_A = \varepsilon_A - Un_A = \frac{1}{2}V; \quad \varepsilon'_B = \varepsilon_B - Un_B = -\frac{1}{2}V. \tag{10.65}$$

Mai departe, substituind (10.64) în (10.61), obținem ecuația pentru determinarea funcției F^N , și prin urmare, și operatorul de masă Σ^N :

$$\begin{aligned}
\left[F^N(z_1) \right]^3 - 8 \left[F^N(z_1) \right]^2 + 16 \left[z_1^2 - \frac{1}{4}(V^2 - 1) \right] F^N(z_1) - \\
- 16 \left[z_1 + \left(x - \frac{1}{2} \right) V \right] = 0.
\end{aligned} \tag{10.66}$$

Densitatea de stări electronice în aliajul binar $B_{1-x}A_x$ se poate reprezenta sub forma

$$\begin{aligned} \varrho(E) &= -\frac{1}{\pi} \sum_k \operatorname{Im} G_k^N(z) \Big|_{z=E+i0^+} = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} F^N(z) \Big|_{z=E+i0} = \\ &= (1-x)\rho_B(E) + x\rho_A(E). \end{aligned} \quad (10.67)$$

Pentru densitățile de stări parțiale avem în acest caz

$$\varrho_{A,B} = -\frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{F^N(z)}{1 - [\varepsilon'_{A,B} - \Sigma^N(z)] F^N(z)} \Big|_{z=E+i0}. \quad (10.68)$$

În expresia (10.68) intră valoarea renormată a energiilor ε'_A și ε'_B datorită interacției atractive din hamiltonianul (10.1). Aceste densități electronice de stări renormate se deosebesc de expresiile corespunzătoare CPA [49, 51], în care $U = 0$. Corectitudinea acestei afirmații este demonstrată de formulele corespunzătoare ale lucrării [52], în care se studiază proprietățile magnetice ale sistemului pe baza hamiltonianului Hubbard.

Prezintă interes să examinăm analitic o serie de cazuri limită, care ne vor permite pe baza ecuației cubice (10.66) și definițiile densităților electronice de stări (10.67) să tragem o serie de concluzii privind faptul dacă sistemul se află în stare metalică sau dielectrică.

Fixăm parametrii V și x și studiem comportarea funcției $F^N(E)$. Ecuația (10.66) poate avea două rădăcini complexe și o rădăcină reală sau trei rădăcini reale. Soluția reală corespunde lui $\varrho(E) = 0$. Din cele două complexe alegem soluția cu partea imaginară negativă pentru a obține $\varrho(E) > 0$. Pentru aceasta discriminantul Q al ecuației cubice (10.66) satisface inegalitatea

$$\begin{aligned} Q &= -\frac{1024}{27} V^2 E^4 - \frac{1024}{27} \left(x - \frac{1}{2}\right) V E^3 + \frac{64}{27} [8V^4 + 20V^2 - 1] E^2 + \\ &+ \frac{256}{3} \left(V^2 + \frac{1}{2}\right) \left(x - \frac{1}{2}\right) V E + 64V^2 \left(x - \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{64}{27} (V^2 - 1)^3 \geq 0. \end{aligned} \quad (10.69)$$

Pentru $V = 0$ condiția (10.69) este îndeplinită, dacă $|E| \leq 1$, adică $\varrho \neq 0$ în întreaga bandă, ca și pentru substanța B pură.

În punctul simetric $x = 0,5$ obținem

$$Q = -\frac{1024}{27} \left[V^2 E^4 - \frac{8V^4 + 20V^2 - 1}{16} E^2 + \frac{(V^2 - 1)^3}{16} \right] \text{geq} 0. \quad (10.70)$$

Deoarece coeficientul lui E^4 din expresia (10.70) este negativ, iar valoarea maximă a lui Q se determină din formula

$$Q_{\max} = \frac{(8V^2 + 1)^3}{27V^2} > 0, \quad (10.71)$$

atunci pentru orice valoare a lui $|V|$ expresia bipătrată din (10.70) are cel puțin două rădăcini reale. Aceasta înseamnă că întotdeauna există unul sau două domenii, unde densitatea electronică de stări este diferită de zero.

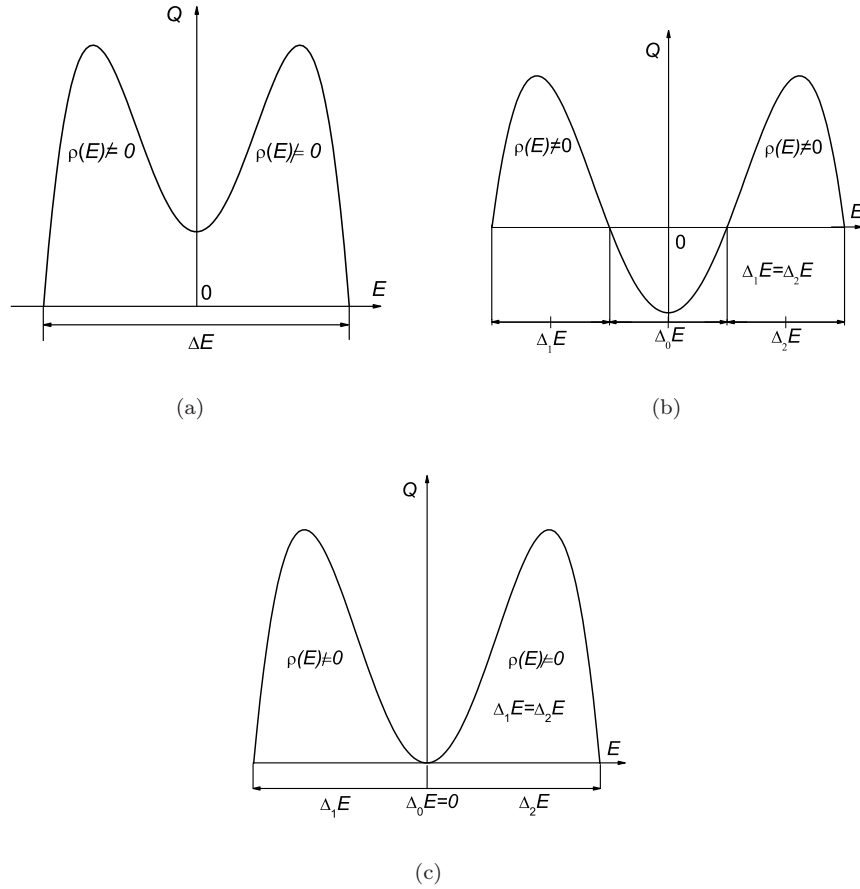


Figura 10.1: Schema dependenței discriminantului Q al ecuației cubice (10.69) de energia E pentru $x = 0, 5$.

Dependența discriminantului Q de energie pentru $x = 0, 5$ este redată schematic pe fig.10.1. Figura 10.1(a) corespunde cazului $|V| < 1$, când sistemul se află în stare metalică și există o bandă de energie cu $\rho(E) \neq 0$, iar fig.10.1(b) cazului $|V| > 1$. În acest caz se produce desplicarea benzii și există un domeniu de valori ale energiei, unde $Q < 0$ și, prin urmare, $\rho(E) = 0$. Figura 10.1(c) corespunde cazului în care în sistem are loc desplicarea benzii de energie.

Domeniul unde $\rho(E) \neq 0$ se determină pentru $x = 0, 5$ din relațiile:

$$|E| < \left[\frac{8V^4 + 20V^2 - 1 + b}{32V^2} \right]; \quad b = [(8V^2 + 1)]^{3/2}; \quad |V| \leq 1; \quad (10.72)$$

$$\frac{1}{4|V|} [8V^4 + 20V^2 - 1 - b]^{1/2} < |E| < \frac{1}{4|V|} [8V^4 + 20V^2 - 1 + b]^{1/2}; \quad |V| > 1. \quad (10.73)$$

Pe baza lui (10.73) pentru lărgimea benzii permise avem

$$\Delta E = \left[\frac{8V^4 + 20V^2 - 1 + b}{8V^2} \right]^{1/2}. \quad (10.74)$$

Dacă $|V| \ll 1$, atunci din (10.74) obținem ușor cu precizie până la termeni $\sim V^2$

$$\Delta E \simeq 2 + V^2. \quad (10.75)$$

Din această formulă rezultă că pentru $|V| \ll 1$ cu creșterea lui $|V|$ se produce lărgirea benzii.

Dacă $|V| > 1$, atunci pe baza relației (10.73) avem două domenii simetrice în raport cu $E = 0$, unde $\varrho(E) \neq 0$, fiecare din ele având lărgimea

$$\Delta E = \frac{V^2}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{5}{2} \frac{1}{V^2} - \frac{1}{8} \frac{1}{V^4} - \left(1 - \frac{1}{V^2} \right)^{3/2} \right]^{1/2}. \quad (10.76)$$

Pentru $|V| \gg 1$ expresia (10.76) se reduce la forma

$$\Delta E \simeq \sqrt{2} \left[1 - \frac{1}{(2V)^4} \right]. \quad (10.77)$$

Lărgimea gap-ului dielectric $\Delta_0 E$ pentru $|V| > 1$

$$\Delta_0 E = \left[\frac{8V^4 + 20V^2 - 1 - (8V^2 + 1)^{3/2}}{8V^2} \right]^{1/2}. \quad (10.78)$$

În cazul valorilor mari ale lui $|V|$ din (10.78) obținem

$$\Delta_0 E \simeq |V| - \sqrt{2} + \frac{5}{|V|} - \frac{3\sqrt{2}}{32} \frac{1}{V^2}. \quad (10.79)$$

Din expresiile (10.77) și (10.79) rezultă că pentru valori $|V| \gg 1$ lărgimea benzii, unde $\varrho \neq 0$, depinde slab de $|V|$, iar lărgimea gap-ului dielectric $\Delta_0 E$ crește liniar cu creșterea lui $|V|$.

Să examinăm un alt caz limită: $x = 0$ și $V = 0,5$. Din formula (10.69) obținem

$$Q' = \frac{27Q}{1024V^2} = - \left(E^4 - E^3 - \frac{9}{8} E^2 - \frac{135}{258} \right) = - \left(E + \frac{5}{4} \right) \left(E - \frac{3}{4} \right)^3. \quad (10.80)$$

Dependența lui Q' de E este prezentată în fig.10.2(a). Există trei rădăcini identice ale ecuației $Q' = 0$ ($E_1 = -1,25$; $E_2 = E_3 = E_4 = 0,75$). Lărgimea benzii $\Delta_1 E = E_2 - E_1 = 2$, $\Delta_2 E = E_4 - E_3 = 0$, în acest caz lărgimea benzii interzise $\Delta_0 E = E_3 - E_2 = 0$. Prin urmare, punctul $x = 0$ și $V = 0,5$ se află la limita tranziției metal-dielectric.

Proprietăți analoge are și punctul $x = 1,0$ și $V = 0,5$ (în acest caz $E_1 = E_2 = E_3 = -0,75$; $E_4 = 1,25$; $\Delta_1 E = \Delta_0 E = 0$; $\Delta_2 E = 2$).

Să scriem (10.69) sub forma

$$E^4 + \frac{x - 1/2}{V}E^3 - \frac{8V^4 + 20V^2 - 1}{16V^2}E^2 - \frac{(9V^2 + 1/2)(x - 1/2)}{4V}E - \frac{27}{16}(x - 1/2)^2 - \frac{(V^2 - 1)^3}{16V^2} = (E - E_1)(E - E_2)(E - E_3)(E - E_4). \quad (10.81)$$

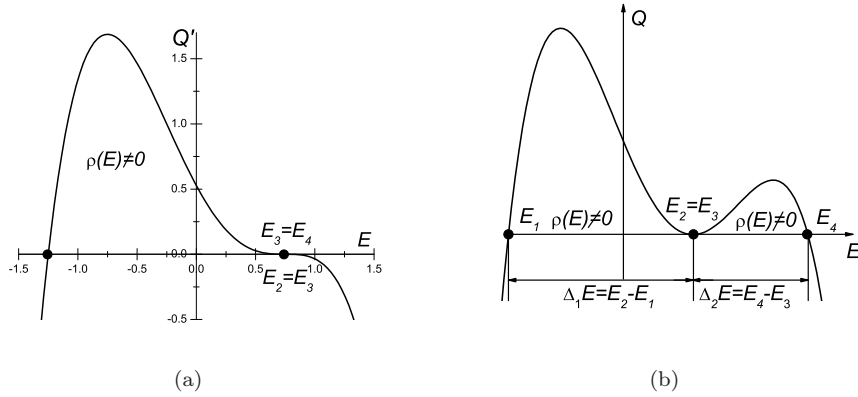


Figura 10.2: (a) Dependența lui $Q' = (27Q)/(1024V^2)$ de energia E pentru $x = 0$ și $V = 0.5$; (b) Schema de poziționare a benzilor pentru valorile limită ale parametrilor x și V pentru îndeplinirea condiției $E_2 = E_3$.

Expresia (10.81) și de asemenea cazurile limită deduse mai sus vor fi folosite mai departe pentru construirea diagramelor de fază.

Dacă sistemul se află în stare dielectrică, atunci toate rădăcinile polinomului (10.81) sunt mărimi reale. Pentru discuție vom presupune că $E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq E_4$. Este clar că tranziția din starea dielectrică în starea metalică corespunde condiției $E_2 = E_3$. În acest caz, egalând în (10.81) coeficienții acelorași puteri ale lui E , obținem sistemul de ecuații pentru determinarea parametrului V și de asemenea lărgimea domeniilor $\Delta_1 E = E_2 - E_1$ și $\Delta_2 E = E_4 - E_3$ pentru o concentrație x dată:

$$\begin{aligned} (x - 1/2)/V &= -E_1 - E_4 - 2E_2; \\ -(8V^4 + 20V^2 - 1)/16V^2 &= E_1E_4 + 2E_2(E_1 + E_4) + E_2^2; \\ 9(V^2 + 1/2)(x - 1/2)4V &= 2E_1E_2E_4 + E_2^2(E_1 + E_4); \\ 27(x - 1/2)^2/16V - (V^2 - 1)^3/16V^2 &= E_1E_2^2E_4. \end{aligned} \quad (10.82)$$

Pe fig.10.2(b) este reprezentată schematic dependența lui Q de E pentru valoarea limită a parametrilor x (sau V), pentru care se realizează condiția $E_2 = E_3$. Pe figură ne putem da seama de poziția benzilor.

10.7 Parametrul de ordine și temperatura critică a tranziției supraconductoare

Pe baza definiției (10.4) pentru parametrul de ordine Δ obținem

$$\Delta_i = \Delta = UT \sum_{k, \omega_n} g_k^{12}(i\omega_n) = UT \sum_{\omega_n} F_{12}(i\omega_n). \quad (10.83)$$

Substituind expresia pentru $F_{12}(\omega_n)$ (10.60) în (10.83), avem

$$\Delta = -\frac{2UT}{W} \sum_{\omega_n} \frac{\tilde{\Delta}_{12}}{\tilde{X}_1 - \tilde{X}_2} \left\{ \left[\tilde{X}_1 - (\tilde{X}_1^2 - 1)^{1/2} \right] - \left[\tilde{X}_2 - (\tilde{X}_2^2 - 1)^{1/2} \right] \right\}. \quad (10.84)$$

Folosind relațiile (10.47)-(10.49), putem stabili ușor ecuația pentru parametrul de ordine Δ sub forma

$$1 = -UT \sum_{\omega_n} \frac{\text{Im} F_{11}(i\omega_n)}{\omega_n}. \quad (10.85)$$

Punând în (10.85) $\Delta = 0$, obținem ecuația pentru determinarea temperaturii critice a tranziției supraconductoare

$$1 = -UT_c \sum_{\omega_n} \frac{\text{Im} F^N(i\omega_n)}{\omega_n} = -\frac{1}{2} U \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \varrho(E) \frac{\text{th} \frac{E - \varepsilon_F}{2T_c} dE}{E - \varepsilon_F}, \quad (10.86)$$

unde $\varrho(E)$ se determină din formula (10.67), iar $F^N(z)$ din ecuația (10.66).

10.8 Calcule numerice și analiza rezultatelor

Analiza numerică a rezultatelor o începem cu construirea diagramei de fază metal în stare normală-dielectric, adică cu examinarea sistemului descris de ecuațiile (10.82).

Pe fig.10.3(a) este reprezentată diagrama de fază metal-dielectric pentru diferite valori ale lui V și a concentrației x , obținută ca rezultat al rezolvării sistemului de ecuații (10.82). Domeniul I de pe această figură corespunde fazei dielectrice, care începe de la valori negative ale parametrului V . În domeniul II sistemul se află în stare metalică. În domeniul III densitatea electronică de stări la nivelul Fermi, ca și în domeniul II, este diferită de zero, totuși în acest domeniu banda de energie se desparte în două benzi.

Pe fig.10.3(b) se arată dependența lărgimilor de bandă $\Delta_1 E$ și $\Delta_2 E$, unde $\varrho(E) \neq 0$, de concentrația de impurități în punctul de tranziție metal-dielectric, în care relația dintre V și x se determină din curba de pe fig.10.3(a) ($V < 0$). Pe figură se vede că, pentru $x < 0,5$ lărgimea celei de a doua benzi $\Delta_2 E = 1,30$ descrește aproape liniar de la $\Delta_2 E = 2,0$ pentru $x = 0$ până la $\Delta_2 E \simeq 1,30$ pentru $x = 0,5$, în același timp lărgimea primei benzi $\Delta_1 E$ crește neliniar de la $\Delta_1 E = 0$ pentru $x = 0$ până la $\Delta_1 E = \Delta_2 E = 1,30$ pentru $x = 0,5$.

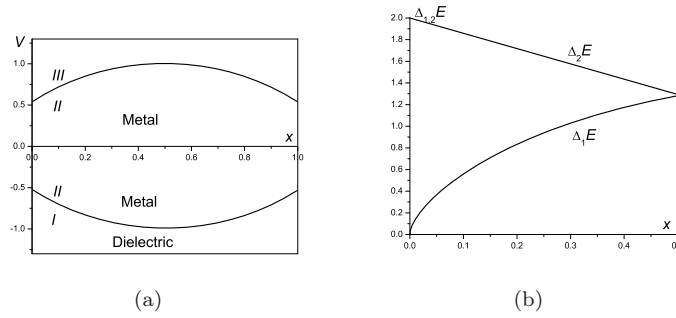


Figura 10.3: (a) Diagrama de fază metal-dielectric în coordonatele (x, V) ; (b) Dependența lărgimii benzii $\Delta_1 E$ și $\Delta_2 E$ de concentrația de impurități în punctul de tranziție metal-dielectric.

Pe fig.10.4 sunt prezentate marginile benzilor E_1 , $E_2 = E_3$ și E_4 în punctul de tranziție metal-dielectric ca funcție de concentrația de impurități. Observăm că E_1 are un minim puțin pronunțat în apropierea lui $x = 0,85$, iar E_4 un maxim de asemenea puțin pronunțat în apropierea lui $x = 0,15$.

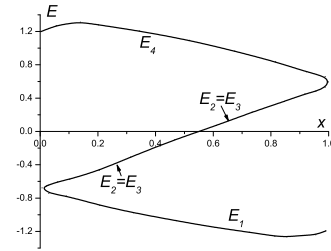


Figura 10.4: Dependența marginilor benzilor E_1 , $E_2 = E_3$ și E_4 de concentrația de impurități în punctul de tranziție metal-dielectric.

Pe fig.10.5(a) și 10.5(b) se arată dependența numerelor de ocupare n_A/n_A^0 , n_B/n_B^0 și a raportului V/V_0 de valorile parametrului U pentru $V_0 = 0,75$, $x = 0,25$ (a) și $x = 0,5$ (b) (n_A^0 și n_B^0 corespund valorilor lui n_A și n_B pentru $U = 0$). După cum se vede din grafice, cu descreșterea lui U raportul n_A/n_A^0 crește, iar n_B/n_B^0 și V/V_0 descresc. De aici rezultă concluzia că pentru concentrații ale impurităților $x < 0,5$ numărul de ocupare n_B depinde slab de U și variația mărimii V este determinată în principal de variația numărului de ocupare pentru impurități n_A .

Pe fig.10.5(c) și 10.5(d) este reprezentată dependența numerelor de ocupare a stărilor n_A și n_B de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și diferite valori ale lui V_0 (curbele 1-5 corespund la $V_0 = 0; -0,2; -0,4; -0,6; -0,8$ pe fig.10.5(c) și $V_0 = 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8$ pe fig.10.5(d)). Se vede că numerele de ocupare n_A și n_B depind esențial de parametrul V_0 . Pentru $V_0 < 0$ în faza dielectrică (curbele 4 și 5 pe fig.10.5(c)) numerele de ocupare depind liniar de x , iar diferența $n_A - n_B$, și deci și parametrul V , nu depind de concentrația de impurități. Observăm de asemenea că dacă $V_0 > 0$, atunci pentru $x = 0$ ($x = 1,0$) n_A (n_B) poate fi diferit de zero. În cazul $V_0 > 0$ diferența $n_B - n_A$ este maximă pentru $x = 0,5$, iar pentru $x = 0$ și $x = 1,0$ $n_A - n_B = 0$. În domeniul concentrațiilor mici ($x \lesssim 0,1$) pentru $V_0 > 0$ mărimea n_B nu depinde practic de U și V_0 , și putem considera cu mare precizie că $n_B \simeq x$, iar $n_A = K(U, V_0)x$, unde $K(U, V_0)$ este un coeficient de proporționalitate,

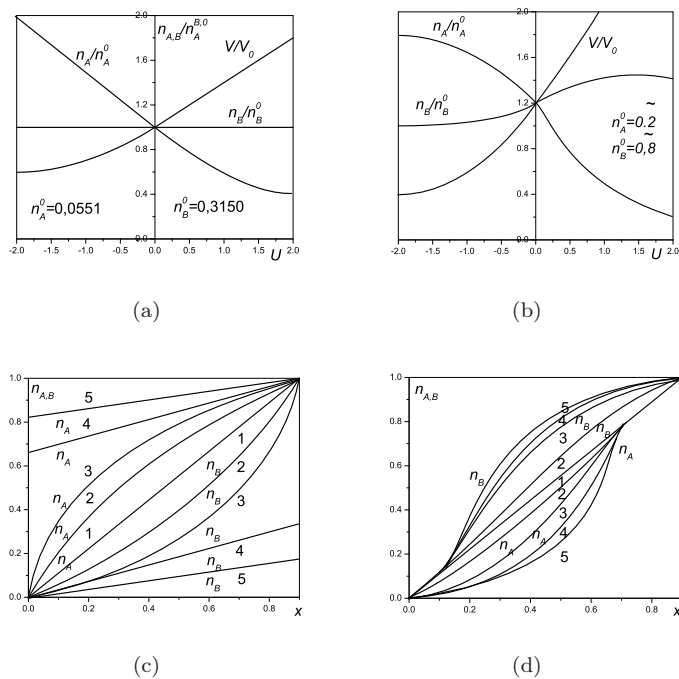


Figura 10.5: (a) și (b) Dependența numerelor de ocupare n_A/n_A^0 , n_B/n_B^0 și a raportului V/V_0 de valorile parametrului U ; (c) și (d) Dependența numerelor de ocupare a stărilor n_A și n_B de concentrația de impurități pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale lui V_0 .

care este determinat de parametrii U și V_0 .

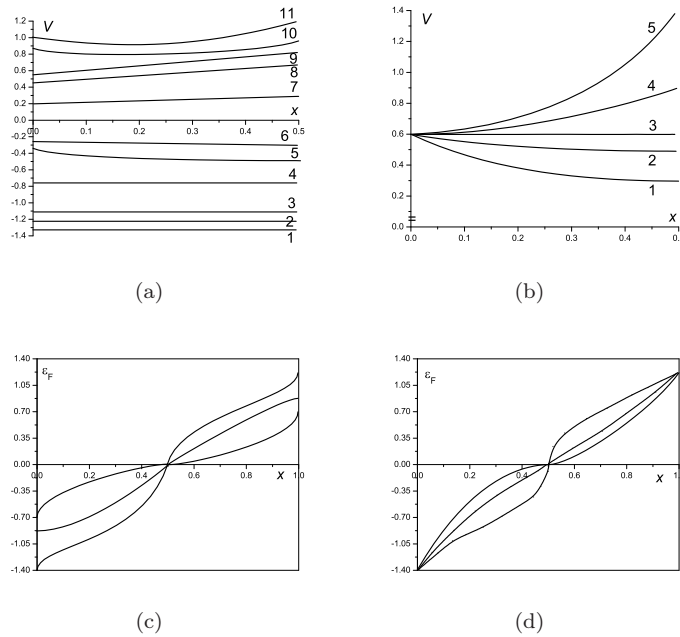


Figura 10.6: (a) Dependența mărimii V de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și valori diferite ale lui V_0 ; (b) Dependența mărimii V de concentrația de impurități pentru $V_0 = 0,6$ și valori diferite ale parametrului U . Dependența energiei Fermi ε_F de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și diferite valori ale lui V_0 (c); și pentru $V_0 = 0,6$ și diferite valori ale lui U (d).

Pe fig.10.6(a) este prezentată dependența mărimii V de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și diferite valori ale lui V_0 (curbele 1-11 corespund valorilor $V_0 = -1,0; -0,8; -0,6; -0,4; -0,2; 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1,0$). Se vede că pentru $V_0 > 0$ mărimea V crește cu creșterea concentrației de impurități. Totodată crește și diferența $V - V_0$ cu creșterea concentrației de impurități și a parametrului V_0 . Se observă de asemenea că pentru $V_0 < 0$ cu apariția fazei dielectrice, V nu depinde de concentrația de impurități. Aceste figuri pot fi folosite pentru construirea diagramelor de fază pentru valori date ale lui V_0 .

Pe fig.10.6(b) se arată dependența mărimii V de concentrația de impurități pentru $V_0 = 0,6$ și diferite valori ale lui U (curbele 1-5 corespund lui $U = -1,0; -0,6; 0; 0,4; 0,9$). Se vede că pentru $U > 0$ mărimea V crește, iar pentru $U < 0$ ea scade cu creșterea concentrației de impurități $0 < x < 0,5$. În acest caz dependența diferenței $V - V_0$ de concentrația de impurități pentru $U > 0$ este mai importantă decât pentru $U < 0$.

Pe fig.10.6(c) și fig.10.6(d) este redată dependența energiei Fermi ε_F de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și $V_0 = 0,6$ și pentru diferite valori ale parametrilor V_0 și U . Curbele 1-3 corespund lui $V_0 = 0; 0,6; -0,6$ pe fig.10.6(c), și

$U = 0; 0,9; -1,0$ pe fig.10.6(d). Se vede că poziția nivelului Fermi depinde puternic de valoarea parametrului V_0 și mai puțin esențial de valoarea lui U . În afară de aceasta pentru o valoare dată a lui $V_0 = 0,6$ mărimea ε_F depinde slab de parametrul U pentru $U < 0$, decât pentru $U > 0$.

După cum era de așteptat, pentru $x = 0,5$ și orice valoare a lui V_0 și U poziția nivelului Fermi coincide cu jumătatea benzii ($\varepsilon_F = 0$).

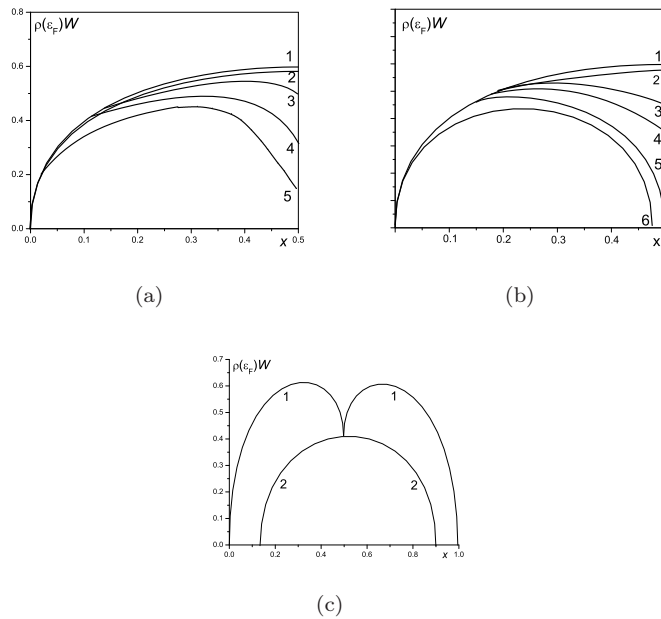


Figura 10.7: (a) Dependența densității electronice de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități pentru $V_0 = 0,6$ și diferiți U ; (b) Dependența densității electronice de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și V_0 diferiți; (c) Dependența lui $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități

Pe fig.10.7(a) se vede dependența densității electronice de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități pentru $V_0 = 0,6$ și diferite valori ale parametrului U (curbele 1-5 corespund lui $U = -1,0; -0,6; 0; 0,4; 0,9$). Se vede ușor că pentru $U \gtrsim 0,2$ densitatea de stări $\varrho(\varepsilon_F)$ începe să depindă puternic de valoarea lui U (în special pentru $U > 0$). Pentru $U > 0$ în dependența lui $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități în domeniul $0 < x < 0,5$ există un maxim pentru $x \simeq 0,3$.

Pe fig.10.7(b) este dată dependența densității electronice de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_f)$ pentru $U = 0,4$ și diferite valori ale lui V_0 (curbele 1-6 corespund lui $V_0 = 0; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1,0$). Din fig.10.7(b) rezultă că, caracterul dependenței lui $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități este determinată de valorile lui V_0 . Pentru V_0 mic dar pozitiv ($V_0 \lesssim 0,25$) se observă un singur maxim al lui $\varrho(\varepsilon_F)$ în punctul $x = 0,5$. Cu creșterea lui V_0 poziția acestui maxim se deplasează la stânga ($x \approx 0,3$). Datorită simetriei teoriei CPA mai apare un maxim și în punctul $x = 0,7$. În cazul $V_0 < 0$

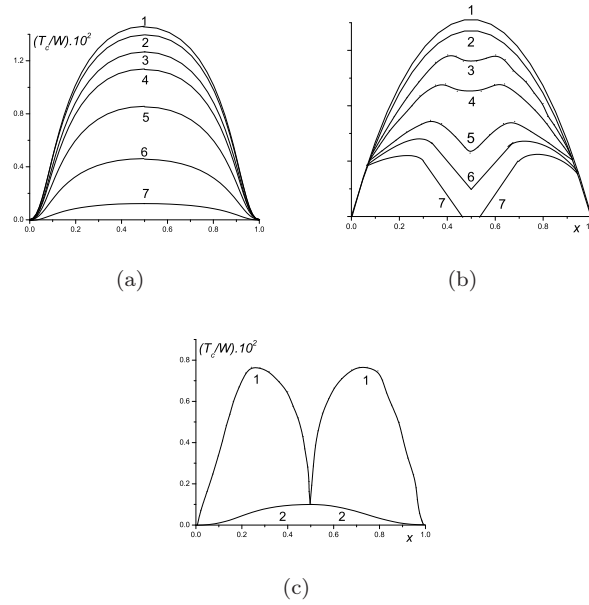


Figura 10.8: (a) și (b) Dependența temperaturii critice de tranziție în starea supraconductoare T_c/W de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$ și diferite valori ale lui V_0 ; (c) Dependența lui T_c/W de concentrația de impurități.

maximul din dependența lui $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități are loc numai în punctul $x = 0,5$.

Acest lucru se vede bine pe fig.10.7(c), unde se arată dependența lui $\varrho(\varepsilon_F)$ de concentrația de impurități pentru $U = 0,4$, $V_0 = 0,6$ (curba 1) și $U = 0,4$, $V_0 = -0,6$ (curba 2).

Aceste particularități ale densității electronice de stări la nivelul Fermi apar și în dependența temperaturii critice a tranziției supraconductoare de concentrația de impurități.

Pentru rezolvarea numerică a ecuației care determină temperatura tranziției supraconductoare, este indicat ca această ecuație să fie pusă sub forma

$$\int_{-\omega_D}^{\omega_D} \varrho(E) \left[T_c - \frac{U}{4} \frac{\text{th } y}{y} \right] dE = 0; \quad y = \frac{E - \varepsilon_F}{2T_c}. \quad (10.87)$$

Urmând lucrarea [45], presupunem că $\omega_D \gtrsim w$. Calculul se face pentru valorile parametrilor teoriei care determină faza metalică pe fig.10.3(a).

Pe fig.10.8 este prezentată dependența temperaturii critice de tranziție în starea supraconductoare pentru valorile parametrului $U = 0,4$ și diferite valori ale lui V_0 (curbele 1-7 corespund lui $V_0 = 0; -0,1; -0,2; -0,3; -0,4; -0,5; -0,6$; pe fig.10.8(a) și $V_0 = 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7$ pe fig.10.8(b)). Observăm că curba 7 de pe fig.10.8(a) coincide cu rezultatele lucrării [45] și corespund dependenței mărimii T_c de concentrația de impurități în $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$. Aceste calcule sunt în concordanță

cu datele experimentale pentru compusul respectiv (vezi [45]). Din comparația acestor curbe rezultă că valoarea mărimii T_c depinde puternic de $V_0 = \varepsilon_A - \varepsilon_B$ și conține în ea posibilitatea creșterii puternice a lui T_c pe calea măririi lui V_0 în comparație cu valorile acestui parametru în $\text{BaPb}_{1-x}\text{Bi}_x\text{O}_3$ ($V_0 = -0,6$).

Pe fig.10.8(b) se vede că pentru $V_0 \geq 0,25$ în dependența lui T_c de concentrația de impurități se pot observa două maxime, poziția cărora depinde esențial de parametrul V_0 . Pentru $V_0 \gtrsim 0,65$ în apropierea lui $x = 0,5$ apare un domeniu, unde $T_c = 0$. Pentru $V_0 < 0$ temperatura critică a tranziției supraconductoare este maximă pentru $x = 0,5$. Ne reamintim de asemenea că pentru concentrații mici ($x \lesssim 0,1$) și mari ($x \gtrsim 0,9$) temperatura critică depinde slab de V_0 dacă $V_0 > 0$. Este important să observăm că, dacă $V_0 < 0$, supraconductibilitatea poate fi observată numai într-un interval determinat de concentrații ale impurităților $x_{1c} < x < x_{2c}$. Concentrațiile critice de impurități x_{1c} și x_{2c} sunt simetrice în raport cu $x = 0,5$, și depind puternic de valorile parametrului V_0 pentru valori fixate ale lui U .

Ca o ilustrare a dependenței lui T_c de semnul mărimii V_0 ne putem referi la fig.10.8(c), care corespunde cazurilor $U = 0,4$, $V_0 = 0,6$ (curba 1) și $U = 0,4$, $V_0 = -0,6$ (curba 2). Se vede ușor că pentru $w \simeq 1$ eV putem obține temperaturi critice înalte ($w > 100$ K). În acest caz cea mai mare valoare a lui T_c se obține pentru $V_0 = 0$. Dacă presupunem că frecvența Debye ω_D este mai mică decât lărgimea benzii W , atunci, natural, T_c se micșorează, totuși caracterul calitativ al dependenței sale de concentrația de impurități se conservă.

În sfârșit, pentru studiul proprietăților stării normale s-a rezolvat selfconsistent sistemele de ecuații (10.12), (10.13) și (10.66). Ca rezultat s-au determinat numerele de ocupare ale stărilor n_A , n_B și poziția nivelului Fermi ε_F pentru valori date ale concentrației x , diferenței $V_0 = \varepsilon_A - \varepsilon_B$ și a parametrului U . Presupunem că U poate lua atât valori pozitive cât și negative. Determinăm mai departe valorile densităților electronice de stări $\varrho(E)$, $\varrho_A(E)$ și $\varrho_B(E)$ ca funcție de energie, și de asemenea valorile densităților de stări la nivelul Fermi $\varrho(\varepsilon_F)$.

În fig.10.9 și fig.10.10 sunt prezentate dependențele lui $\varrho = \varrho(E)$ pentru $U = 0,4$, concentrația de impurități $0 \leq x \leq 0,5$ și diferite valori ale parametrului V_0 : -0,6 (a); 0,6 (b); -0,7 (c); 0,7 (d). Punctele pe aceste figuri specifică poziția nivelului Fermi. Dacă $V_0 = -0,6$, atunci pentru concentrații mici de impurități, și de asemenea mari ($x \lesssim 0,15$ și $x \gtrsim 0,85$) sistemul se află în stare dielectrică, iar în domeniul $0,15 < x < 0,85$ în stare metalică. Dacă $V_0 = 0,6$ sau $V_0 = 0,7$, atunci pentru orice $0 < x < 1$ sistemul se află în stare metalică. După cum se vede din fig.10.10(a)-10.10(k) pentru $V_0 = -0,7$ sistemul se poate afla numai în starea dielectrică. În acest fel, în cazul unui U pozitiv există un domeniu destul de larg de concentrații ale impurităților și a valorilor parametrului V_0 , pentru care sistemul se găsește în stare metalică. Prin urmare, este posibilă tranziția în starea supraconductoare. Densitatea de stări electronice la nivelul Fermi poate fi suficient de mare pentru ca să avem o temperatură critică înaltă.

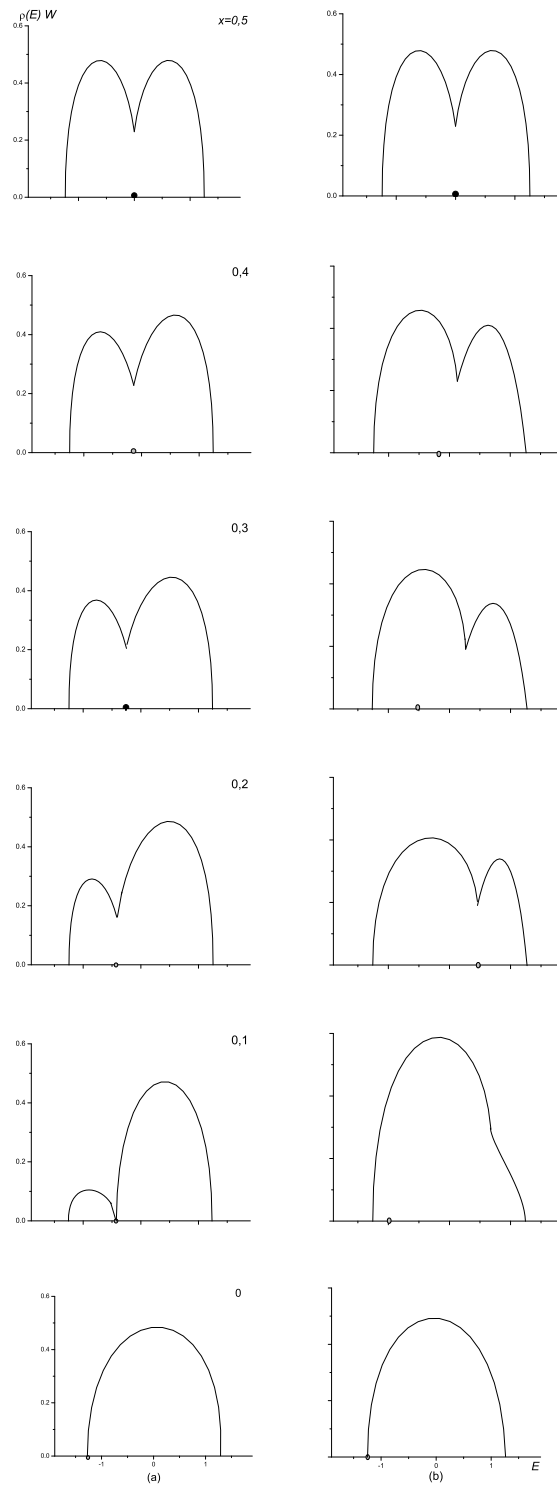


Figura 10.9: Dependența $\rho(E)$ pentru $U = 0,4$ și diferite valori ale parametrului V_0 .

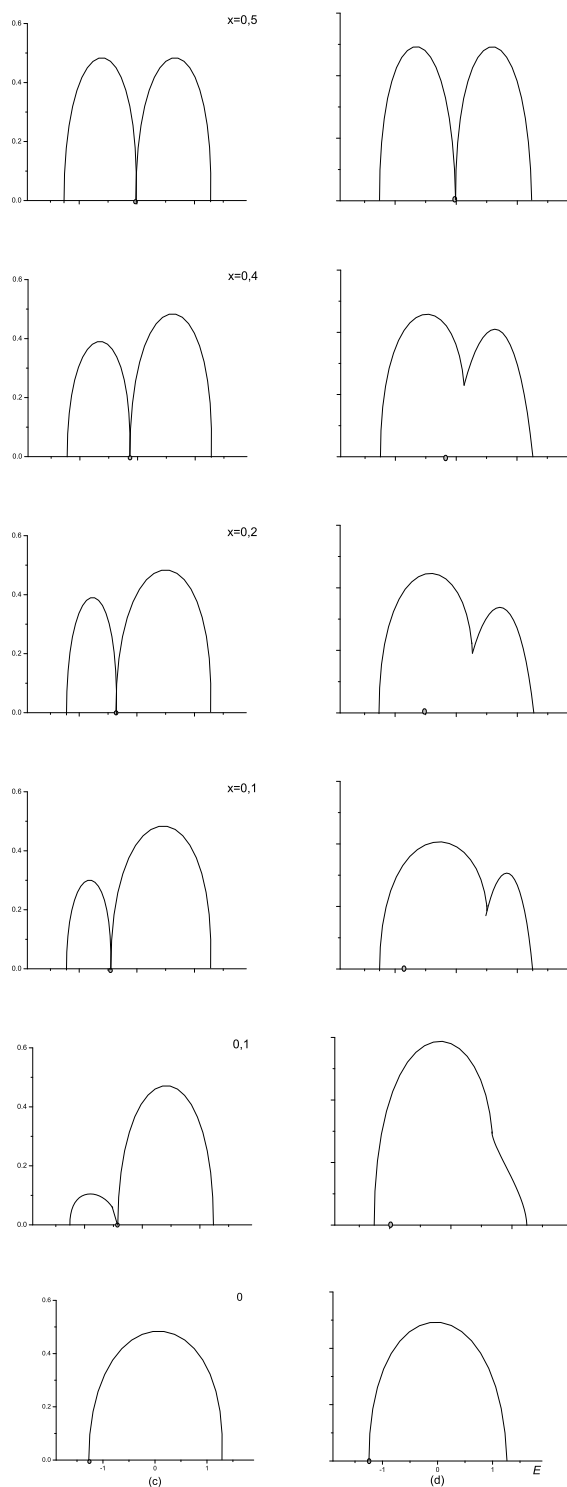


Figura 10.10: Dependența $\rho(E)$ pentru $U = 0, 4$ și diferite valori ale parametrului V_0 .

Bibliografie

- [1] Jerome D., Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1982, vol.79, pag.155-182.
- [2] Ishikawa M., Fisher O., Sol.Stat. Comm., 1977, vol.24, nr.11, pag.747-751.
- [3] Bednorz J.G., Müller K.A., Z. Phys., 1986, vol.B64, pag.189-193.
- [4] Chu C.W., Har P.H., Mehg R.L. et al., Phys. Rev.Lett., 1987, vol.58, nr.4, pag.405-407.
- [5] Furo I., Janossy A., Japan J. of Appl. Phys., 1987, vol.26, nr.8, pag.L1307-L1310.
- [6] Machida K., J. Phys. Soc. Japan, 1981, vol.50, nr.7, pag.21-95-2202.
- [7] Machida K., Matsubara T., J. Phys. Soc. Japan, 1981, vol.50, nr.50, nr.10, pag. 3231-3239.
- [8] Bilbro G., McMillan W.L., Phys. Rev. B, 1976, vol.14, nr.5, pag.1887-1892.
- [9] Machida K., J. Phys. Soc. Japan, 1982, vol.51, nr.5, pag.1420-1427.
- [10] Yamaji K., J. Phys. Soc. Japan, 1982, vol.51, nr.9, pag.2787-2797.
- [11] Yamaji K., J. Phys. Soc. Japan, 1983, vol.52, nr.4, pag.1361-1372.
- [12] Timerov R.H., JETP, 1977, vol.72, nr.6, pag.2309-2323.
- [13] Palistrant M.E., TMF, 1979, vol.39, nr.1, pag.118-129.
- [14] Palistrant M.E., Bezzub O.P., *Theory of Superconducting Alloys* (in russian), Chişinău, Ştiinţa, 1979, pag.53-63.
- [15] Palistrant M.E., Pădure I.V., Phys. Lett., 1985, vol.IIIA, nr.8-9, pag.445-447.
- [16] Palistrant M.E., Pădure I.V., TMF, 1985, vol.62, nr.1, pag.117-126.
- [17] Palistrant M.E., Pădure I.V., TMF, 1987, vol.70, nr.3, pag.443-453.
- [18] Leung M.C., Phys. Rev., 1975, vol.11B, nr.11, pag.4272-4277.
- [19] Palistrant M.E., Phys. Lett., 1978, vol.67A, nr.4, pag.303-304.

- [20] Sarma G., J. Phys. Chem. Sol., 1963. vol.24, pag.1029-1032.
- [21] Maki K., Tsuneto T., Progr. Theor. Phys, 1964, vol.31, nr.6, pag.945-956.
- [22] Suzumura Y., Nagi A.D.S., Phys. Rev.B, 1981, vol.24, nr.9, pag.5103-5109.
- [23] Ishino K., Suzumura Y., Progr. Theor. Phys., 1982, vol.68, nr.4,pag.1009-1017.
- [24] Palistrant M.E., Pădure I.V., TMF, 1985, vol.65, nr.3, pag.435-447.
- [25] Palistrant M.E., Pădure I.V., FNT, 1987, vol.12, nr.5, pag.460-467.
- [26] Buzdin A.M., Bulaevskii L.N., UFN, 1984, vol.144, nr.3, pag.412-437.
- [27] Chan S.K., Heine V., J.Phys.F, 1973, vol.3, nr.3, pag.795-800.
- [28] Lyo S.K., Phys. Rev., 1983, vol.29B, pag.5210-5212.
- [29] Lyo S.K., Phys. Rev., 1984, vol.29B, pag.2685-2688.
- [30] Mortensen K., Temkiewicz Y, Schultz T.D. et al., Phys. Rev. Lett., 1981, vol.46, pag.1234-1236.
- [31] Palistrant M.E., Cernei M.D., *Kinetics and themodynamics properties of normal and superconducting systems*, Chişinău, Ştiinţa, 1987, pag.38-50.
- [32] Palistrant M.E., Cernei M.D., FNT, 1987, vol.13, nr.10, pag.1054-1060.
- [33] Palistrant M.E., Cernei M.D., Proc. of Unional Conf. on the self-organization in physical and biological systems, Chişinău, Ştiinţa, 1986, pag.65-66.
- [34] Palistrant M.E., Cernei M.D., Proc of 4-th Intern. Conf. on Statistical Mechanics, Dubna, 1987, pag.64.
- [35] Roshen W.A., Phys.Rev., 1985, vol.31B, nr.11, pag.7296-7305.
- [36] Lee P.A., Rice T.M., Anderson P.W., Sol. Stat. Comm., 1974, vol.14, nr.8, pag.703-709.
- [37] Patton B.R., Sham L.J., Phys. Rev. Lett., 1974, vol.33, nr.11, pag.638-641.
- [38] Schuster H.G., Sol. Stat. Comm., 1974, vol.14, nr.2, pag.127-129.
- [39] Abrikosov A.A., Gorkov L.P., JETP, 1960, vol.39, nr.6, pag.1781-1796.
- [40] Gorkov L.P., Rusinov A.I., JETP, 1964, vol.46, nr.4, pag.1363-1378.
- [41] Palistrant M.E., Cernei M.D., Comm. of Unional Conf. "Modern Problems in Statistical Physics", p.I, Kiev, 1987, pag.160-161.
- [42] Palistrant M.E., Cernei M.D., TMF, 1988, vol.74, nr.2, pag.296-308.
- [43] Johnston D.C., Phys. Rev. Lett., 1984, vol.52, nr.23, pag.2049-2052.
- [44] Anderson P.W., Phys. Rev. Lett., 1975, vol.34, nr.15, pag.853-955.

-
- [45] Yoshioke D., Fukujama H., J. Phys. Soc. Japan, 1985, vol.54, nr.8, pag.1996-3003.
- [46] Mathess L.F., Hamann D.R., Phys. Rev., 1983, vol. B28, pag.4227-4241.
- [47] Palistrant M.E., Cernei M.D., Preprint nr. IPF-88-511, Chişinău, Ştiinţa, 1987.
- [48] Ionesava F., Progr. Theor. Phys., 1968, vol.40, pag.734-757.
- [49] Erenreich H., Schwartz L., Electronic Structure of Alloys, Moskva, Mir, 1979.
- [50] Korn G., Korn T., Spravochnik po matematike, Moskva, Nauka, 1970.
- [51] Velicky B., Kirkpatrik S., Erenreich H., Phys. Rec. 1968, vol.175, nr.3, pag.747-766.
- [52] Hasegawa H., Kanamori J., J. pHys. Soc. Japan, 1971, vol.31, pag.382-393.

Postfață

Modelul supraconductorului bi-bandă a fost propus de Moskalenko acum aproape 50 de ani [1]. Ceva mai târziu o teorie similară a fost publicată de Suhl, Mathias și Walker [2]. Din păcate prioritatea lui Moskalenko în domeniu a fost, în foarte multe cazuri, trecută cu vederea.

Modelul bi-bandă a fost dezvoltat de Moskalenko și colaboratorii săi din Institutul de Fizică Aplicată al Academiei de Științe al Moldovei (înainte de 1991, al Academiei de Științe a RSS Moldovenești), obținându-se o descriere detaliată a proprietăților termodinamice și electromagnetice ale supraconductorilor multi-bandă. Rezultatele au fost comunicate în mai multe monografii și într-un număr foarte mare de articole, indicate în bibliografia prezentei lucrări.

După descoperirea supraconductibilității la temperaturi înalte, Moskalenko și colaboratorii au folosit teoria supraconductorilor bi-bandă pentru explicarea comportării noilor materiale. Un articol de sinteză [3] prezintă o expunere completă a aplicațiilor teoriei Moskalenko la materialele care prezintă supraconductibilitate la temperaturi înalte, la nivelul anului 1991. În acest context, merită menționate rezultatele obținute de Moskalenko și colaboratorii în studiul modelului Hubbard [4].

Modelul Moskalenko a fost adoptat și generalizat pentru investigarea proprietăților termodinamice și oscilațiilor colective în sisteme multi-bandă cu densitate mică a purtătorilor de sarcină [5].

Descoperirea și investigarea experimentală a supraconductivității la temperatură relativ ridicată ($T_c = 39$ K) într-un compus binar simplu, MgB_2 [6], a însemnat "un cadou neașteptat" pentru fizica temperaturilor joase. Spre deosebire de cuprați, unde supraconductivitatea este - probabil - un efect bidimensional, în MgB_2 aceasta apare ca un efect tridimensional. În plus, materialul este, în mod clar, un supraconductor bi-bandă, raportul gap-urilor pentru cele două benzi fiind 2,6 [7]. Proprietățile sale sunt foarte bine explicate în modelul Moskalenko [8], [9], care este citat, în acest context, cu o frecvență remarcabilă [10], [15]. Putem spune, astfel, că modernitatea și actualitatea modelului sunt confirmate de interesul deosebit față de noul produs supraconductor MgB_2 .

Autorii

Bibliografie

- [1] V. A. Moskalenko, Fiz. Met. Metteloved. **8**, 503 (1959) [Phys. Met. Metalogr. **8**, 25 (1959)].
- [2] H Suhl, B. T. Matthias, L. R. Wallker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
- [3] V. A. Moskalenko, M. E. Pallistrant, V. M. Vakalyuk, Usp. Fiz. Nauk **161**, 155 (1991) [Sov. Phys. Uspekhi **161**, 155 (1991)].
- [4] V.A. Moskalenko, M. I. Vladimir, L. A. Dogotar, in: "5-th International Symposium on Selected Topics in Statistical Mechanics", ed. A. A. Logunov et al., World Scientific Singapore, 1990, p. 192; M. I. Vladimir, V. A. Moskalenko, Teor. Mat. Fiz. **82**, 428 (1990); S. I. Vacaru, M. I. Vladimir, V. A. Moskalenko, ibid **92**, 182 (1992), V. A. Moskalenko, S. P. Cojocaru, M. I. Vladimir, Preprint ICTP Trieste IC/94/182 V. A. Moskalenko et. al. Roum J. Phys. **40**, 877 (1995), **44**, 569 (1999).
- [5] M. E. Palistrant, Teor. Mat. Fiz. **105**, 491 (1995); **109**, 137 (1996) [Theor. Math. Phys. **105**, 1593(1995), **109**, 1352(1996)]; Superconductivity **10**, 19 (1997); M. E. Palistrant, F. G. Kochorbe, Physica **C194**, 351-356 (1992); J. Low Temp Phys. **26**, 299 (2000), F. G. Kochorbe, M. E. Palistrant, JETP **104**, 3084 (1993); **114**, 1047 (1998) [JETP **77**, 442 (1993); **87**, 570 (1998)]; Theor. Mat. Fiz. **96**, 459 (1993) [Theor. Math. Phys. **96**, 459 (1993)]; Physica **C298**, 217 (1997).
- [6] J. Nagamatsu, et. al., Nature (London) **63**, 401 (2001).
- [7] R. S. Gonnelli et al., Supercond. Sci. Tech. **16**, 171 (2003).
- [8] R. S. Gonnelli et. al., Supercond. Sci. Tech. **16**, 171 (2003).
- [9] L.Z. Kon, arXiv:cond-mat/0309707v3 (2003).
- [10] P.Udomsamuthirun et.al., Physica Status Solidi(b) **230**, 591 (2003).
- [11] J.N.Askerade et.al., J. Phys. Soc. Jap. **71**, 1637(2002); Physica Scripta **69**, 234 (2004)
- [12] T. M. Mishonov, V. L. Pokrovski, H. Wei, Phys. Rev. **B71** 012514 (2005).

- [13] J. Kortus, O. V. Dolgov, R.K. Kremer, A. A. Golubov, Phys. Rev. Lett. **94**, 027002 (2005); Phys. Rev. **B72**, 024504 (2005).
- [14] N. Karchev, J. Phys., Condens, Matters **18**, 1553 (2006).
- [15] J. Kortus, Physica **C456**, 54 (2007).