Міністерство освіти та науки України

Національний університет "Києво-Могилянська академія"

Факультет природничих наук

Кафедра фізико-математичних наук

Магістерська робота

освітній ступень - магістр

на тему: "ЕНЕРГЕТИЧНИЙ СПЕКТР ТА ХВИЛЬОВА ФУНКЦІЯ ЕЛЕКТРОНІВ У ГІБРИДНИХ НАДПРОВІДНИХ НАНОДРОТАХ"

Виконав студент 2 року навчання спеціальності 104 Фізика (Теоретична фізика) Драчинський Роман Вікторович Керівник Кручинін Сергій Павлович професор, провідний науковий співробітник Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України Рецензент: д.ф.-м.н. С.П.Репецький, проф. кафедри фізико-математичних наук ФПрН НаУКМА Магістерська робота захищена з оцінкою «відмінно» (97 балів) Секретар ЕК Г.В.Оводенко «07» червня 2023 р.

Зміст

1.	Встуг	1
2.	Огля	д літератури 5
	2.1.	Перші дослідження надпровідності 5
	2.2.	Надпровідність матеріалів при надвисокому тиску 7
	2.3.	Нанорозмірні надпровідники 11
	2.4.	Кластерна надпровідність 16
3.	Осно	вна частина
	3.1.	Рівняння Лондонів
	3.2.	Ефект Мейснера 21
	3.3.	Надпровідник першого та другого роду 22
	3.4.	Теорія об'ємного фазового переходу Гінзбурга-Ландау 25
	3.5.	Електрон-фонона взаємодія 28
	3.6.	Куперівські пари 31
	3.7.	Хвильова функція БКШ 34
	3.8.	Гамільтоніан середнього поля 37
4.	Моде	елювання та розрахунки 39
	4.1.	Методологія 39
	4.2.	Розрахунок спектра 41
5.	Обго	ворення
6.	Висн	овки
7.	Спис	ок джерел 49

Вступ

Магнетизм і надпровідність - це два конкуруючі колективні впорядковані стани, що спостерігаються в металах. Феромагнетизм виникає внаслідок паралельного вирівнювання електронних спінів за рахунок обмінних взаємодій, тоді як БКШ-надпровідність є результатом спінового синглетного спарювання електронів, опосередкованого електрон-фононною взаємодією. Ці дві форми впорядкованості, як правило, не можуть гармонійно співіснувати. В об'ємних системах конфлікт між синглетним спарюванням електронів і спіновим впорядкуванням вирішується станом Фульде-Феррелла-Ларкіна-Овчинникова (FFLO), який складно спостерігати експериментально і який зустрічається рідко. Стан FFLO особливо чутливий до безладу, що ще більше ускладнює його виявлення.

Останні досягнення нанонауки відкрили нові фізичні явища, коли матеріали зменшуються до розмірів, порівнянних з фундаментальними мікроскопічними масштабами довжини. Дослідження надпровідності в нанометрових зразках є особливо інтригуючим, оскільки надпровідність є макроскопічним квантовим явищем. У таких системах можна створювати нові стани речовини, які не зустрічаються в об'ємних матеріалах, як, наприклад, у наноструктурах з надпровідних і феромагнітних металів. Ефект близькості в цих системах дозволяє співіснувати магнетизму і конденсатам куперівських пар. Хоча можливість такого співіснування була досліджена в об'ємних матеріалах, LOFF-стан, який описує це співіснування, складно спостерігати в об'ємних матеріалах через їхню високу чутливість до невпорядкованості.

Тема магістерської роботи актуальна як ніколи. Нові відкриття в надпровідності приводять нас до більшого розуміння природи виникнення цього ефекту. Як тільки ми зрозуміємо чому надпровідність виникає на фундаментальному рівні, то зможемо імплементувати надпровідники в наше життя, що спростить його ще більше. Наприклад, швидкі потяги, квантові комп'ютери і т. д.

Ця робота присвячена аналізу нанодротів, що складаються як з надпровідних, так і з феромагнітних металів, з використанням циліндричної геометрії, як показано на рисунку 1.1. Ця геометрія була раніше вивчена в подібних мезоскопічних дротах Мота та ін.

Додатково, ми розглянемо перспективи створення нанодротів з використанням спеціального матеріалу - MgB_2 . Цей матеріал відомий своїми надпровідними властивостями при високих температурах, що робить його цікавим для використання у наноструктурах. Детально про властивості матеріалу написав Кручині С. П. [1]



Рис. 1.1. Нанодріт. 1 – надпровідник, 2 – феромагнетик.

Огляд літератури

2.1. Перші дослідження надпровідності

В В. Л. Гінзбурга запитували, що на його думку вважається одним із найважливіших та найцікавіших проблем у фізиці. В свою чергу В. Л. Гінзбург виклав список із тридцяти пунктів [2], де на другому та на третьому місці були: високотемпературні надпровідники і надпровідники за кімнатною температури та металічний водень, відповідно. Перші зрушення почалися, ще в тридцятих роках минулого сторіччя. Ю. П. Вігнер та Г. Б. Гутінгтон [3], можливу металізація гідрогену, однак нещодавно було вказали на запропоновано способи, які здатні це зробити, як зазначено у роботі І. Ф. Сілвера [4]. Також наприкінці 1960-х років, Н. У. Ашкрофт та В. Л. Гінзбург [5, 6] в своїх роботах обговорювали можливість існування надпровідності при кімнатній температурі. Що цікаво, Гінзбург в своїй статті [6] обговорював теоретичні можливості надпровідності поза межами землі, і прийшов до висновку, що це можливо при високому тиску. Наприклад, на таких планетах як Юпітер або Сатурн, існує металевий гідроген [7] і, можливо, у надпровідному стані. Він вважав, що ці умови можливо відтворити і на землі але при тиску в 10⁶ атм (1000 ГПа), що в свою чергу в 4 рази більше, ніж було теоретично і експериментально доведено. В 2017 році вперше було повідомлено про металевий стан гідрогену [8].

Надпровідність проявляється при $T < T_c$. В основному при низьких температурах але з огляду на феномологічну теорію Ґінзбурґа-Ландау [9], мікроскопічну теорію Бардіна-Купера-Шріфера (БКШ) [10] та інші фундаментальні теорії, при певному поєднані матеріалу, надпровідність може існувати при кімнатній температурі. Відсутність верхньої межі критичної температури надпровідності випливає із формули Аллена-Дайнса [11]:

$$T_c = 0.182\omega_{In}\sqrt{\lambda} \ (2.1.1)$$

де ω_{In} – середня частота фононів, λ – константа електрон-фононної взаємодії. Дану формулу можна використовувати при $\lambda > 5$, а також для більш складніших виразів при малих λ однаково будуть показувати, що T_c може бути більшою за 300 К, головне, щоб був відповідний матеріал одночасно мав високу дебаївську частоту та велику константу електрон-фононної взаємодії λ .

Першими, хто довів можливість високотемпературної надпровідності, були Беднорц та Мюллер [12]. В своїй роботі вони розглядали металічно киснево-дефіцитне з'єднання в *Ba – La – Cu – O* системі. Зразки були відпалені при температурі менше за 900 °C з подальшим охолодженням. Дані зразки показали надпровідність при рекордній температурі в 30 К.

Через чотири роки після відкриття Беднорца та Мюллера виходить огляд, де Пауль М. Г. із захопленням описує наслідки цього наукового прориву [13]. В статі розповідається про те, як вчені розпочали досліджувати дане явище, оскільки це було перспективно. За думкою автора дане дослідження мало б нарешті підштовхнути людство до подальшого прориву в високотемпературній надпровідності. І дасть майбутнім молодим вченим фундамент для подальших досліджень. Після відкриття Беднорца та Мюллера протягом декількох років критична температура була підвищена від 30 К аж до 164 К. Проте остання робота в напрямку купрат-оксигенових сполуках була представлена в 1995 році [14]. В цій роботі було отримано надпровідність при температурі в 95 К при 30 ГПа.

Слід зазначити, що за останні 27 років вченим так і не вдалось збільшити критичну температуру надпровідного переходу для даного класу матеріалів, не дивлячись на великі зусилля експериментаторів. Також, загальної теорії, яка описує високотемпературну надпровідність в купратах, не існує, тому перспективи збільшення Т_с залишаються дискусійними.

Надпровідність - одна із найбільш захоплюючих властивостей матеріалів. Мабуть, одним із найцікавіших сюрпризів фізики/хімії матеріалів високого тиску було відкриття того що, надпровідність природнє явище при високому тиску і те, що відбувається при вищих критичних температурах.

2.2. Напровідність матеріалів при надвисокому тиску

Варто зазначити, що Беднорц та Мюллер були першими, хто успішно використав високий тиск для отримання надпровідності. Проте високотискову фізику вперше було представлено, в її сучасному вигляді, в новаторській роботі Каілетета, Амаґата та Брідґмана на початку двадцятого століття [15]. Ця робота дала неймовірний поштовх для подальшого дослідження надпровідності.

До 1959 року широко використовували металічні і грубі ковадла, аж поки вперше не було використано алмазні ковадла Вієрою, Ван Ванкенбургом, Бунтінґом та Ліппінктоном [16]. Даний експеримент можна відзначати початком нової ери яка змінила дослідження надпровідності. Подальше удосконалення алмазних ковадл призвело до того, що Мао-Белл в 1978 році зміг подолати поділку в 100 ГПа [17]. Максимального використання алмазні ковадла досягли в середні 1990-х рр., коли було представлено комерційну версії ковадл. З цього моменту алмазні ковадла перестали бути екзотикою, та стали більш доступні для вчених. На початку двохтисячних легко долалась поділка в 200 ГПа і велика кількість робіт була опублікована, що дозволило вдосконалити наше розуміння властивостей речовин за високих тисків [18,19].

Перші експерименти проводились над простими двохатомними молекулами: *О*₂, *N*₂, *H*₂, що в свою чергу показало, що правила хімії під високим тиском можуть змінюватись непередбачуваними шляхами.

Особливий інтерес вчені приділили O_2 , тому що кисень проявляє магнітні ефекти при низьких температурах. При тиску 95 ГПа молекули кисню металізуються [20], і показують надпровідність при $T_c = 0.6$ К [21].

Зазначимо, що 29 елементарних надпровідників, які не є лужними металами, стан надпровідності існує при атмосферному тиску (табл. 2.2.1) [22].

	Periodic table of superconductivity																
Н						1											He
Li 0.0004	Be 0.026	$T_{c}(K)$ Ambient pressure superconductor											С	N	0	F	Ne
Na	Mg	Mg $T_c(K)$ High pressure superconductor Al 1.18											Si 8.2	P 13	S 17.3	CI	Ar
К	Ca 29	Sc 19.6	Ti 0.5	V 5.4	Cr	Mn	Fe 2.1	Co	Ni	Cu	Zn 0.87	Ga 1.1	Ge 5.35	As 2.4	Se 8	Br 1.4	Kr
Rb	Sr 7	Y 19.5	Zr 0.85	Nb 9.25	Mo 0.92	Tc 8.2	Ru 0.5	Rh 0.0003	Pd	Ag	Cd 0.5	In 3.4	Sn 3.7	Sb 3.9	Te 7.5	I 1.2	Xe
Cs 1.3	Ba 5		Hf 0.38	Ta 4.5	W 0.01	Re 1.7	Os 0.7	Ir 0.1	Pt	Au	Hg 4.15	T1 2.4	Pb 7.2	Bi 8.5	Ро	At	Rn
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
Lan	thanide	es I	.a (6 1	се .7	Pr N	id P	m S	Sm 1	Eu 2.7	Gd	ть	Dy H	ło	Er	ſm Ŋ	б	Lu).1
Α	Actinide	es A	Ac 7	h 1 .4 1	Pa U 1.4 1	J N .3	¹ p	Pu A	.0 C	Cm 3	Bk	Cf	Es 1	Fm	/Id N	io 1	Lr

Periodic table of superconductivity

Табл. 2.2.1. Періодична таблиця елементарних твердих надпровідників та їх експериментальна T_c . [23] (Creative Commons license CC BY 4.0)

Завдяки розвитку числових методів для обрахунку надпровідності, а також фононних частот і електрон-фононної взаємодії було визначено матеріали, які мають надпровідні властивості, як зазначено на табл. 2.2.1. Жовтим кольором відмічені елементи, у яких надпровідність виникає при атмосферному тиску, а блакитним кольором позначені ті з них, у яких надпровідність виникає при високому тиску. Велика кількість літератури показує, що, якщо для оцінки величини T_c для даних 53 надпровідників

використовувати обчислювально-теоретичні методи, то відхилення по відношенню до експериментальних даних малі, зазвичай 20% від *T_c*.

Цезій (Cs) є першим лужним металом, який при підвищеному тиску має надпровідні властивості ($T_c = 1,3$ K) [24]. Через декілька років було підтверджено, що літій при атмосферному тиску має надпровідність за дуже низької температури ($T_c = 0.4$ мK) [25].

При високому тиску лужні метали, на здивування, відхиляються від моделі вільних електронів та їхні властивості перетворюються на напівметалічні або ізолюючі. Лужні метали перспективні матеріали для дослідження. Особливо вони набули популярності в дев'яностих і до двохтисячних, серед вчених, які вивчали екзотичну хімію під високими тисками.

Відносно нещодавно, в 2015 році, був відкритий новий надпровідник з $T_c = 203$ К в сполуці H_3S [26]. Дане відкриття стало початком нової ери надпровідності. Гідрати вернули цікавість до БКШ, оскільки високі частоти в фононному спектрі сприяють досягненню високої критичної температури, і тому можна сказати, що гідрати є перспективним матеріалом, оскільки він являється найлегшим матеріалом (табл.2.2.2).

Спочатку розглядали чистий водень, який має високу температуру надпровідності [5], оскільки він має високу фононну частоту та велику константну електрон-фононної взаємодії. Подальші розрахунки T_c показали, що надпровідність у водні можлива при 200 – 400 К, проте експерименти не можуть досягнути таких результатів, оскільки потрібно досить високий тиск для його металізації. Не дивлячись на це, вчені досягли великого прогресу в теоретичних та експериментальних дослідженнях.

Н					·····	*											He
LiH ₆ 82	BeH ₂ 44				T _c (K)	Exper	imentally	y confiri	ned			BH 21	C	N	0	F	Ne
Na	MgH4 30				T _c (K)	Theore	etically p	redicted	í			AlH ₅ 140	SiH _x ~20	PH ₂ 90	SH3 200	Cl	Ar
KH ₁₀ 140	CaH ₆ 235	ScH ₉ 233	TiH ₁₄ 54	VH ₈ 72	CrH ₃ 81	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	GaH ₃ 123	GeH ₄ 220	AsH ₄ 90	SeH ₃ 120	BrH ₂ 12	Kr
Rb	SrH ₁₀ 259	YH ₁₀ 240	ZrH14 88	NbH ₄ 47	Mo	TcH ₂ 11	RuH ₃ 1.3	RhH 2.5	PdH 5	Ag	Cd	InH ₃ 41	SnH ₁₄ 90	SbH ₄ 95	TeH ₄ 100	IH ₂ 30	XeH 29
Cs	BaH ₆ 38		HfH ₂ 76	TaH ₆ 136	WH5 60	Re	OsH 2	IrH 7	PtH 25	AuH 21	Hg	TI	РbH ₈ 107	BiH ₅ 110	PoH ₄ 50	At	Rn
FrH ₇ 63	RaH ₁₂ 116		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og
Lar	nthanide	es La	H ₁₀ Ce 50 1	H ₈ Pr	H ₈ Nd	H ₈ P	m S	m	Su C	id 1	ГЬ	Dy H	oH ₄ Er 37 3	H ₁₃ Tr 0 2	nH ₈ Y	b Lu	1H ₁₂ 7
1	Actinide	es Ac	H ₁₀ Th 50 1	H ₁₀ Pa 70 6	H ₉ U 2 3	H ₈ Np 5 1	0H7 P	u Ar	nH ₈ Cn 1.3 0	nH ₈	Bk	Cf 1	Es F	m N	1d N	lo 1	Lr

Periodic table of binary hydride superconductors

Табл. 2.2.2. Періодична таблиця бінарних гідратів. Блакитним кольором позначені теоретичні прогнози, червоним експериментальні результати. [23] (Creative Commons license CC BY 4.0)

Н. В. Ашкрофт в своїй роботі за 2004 рік [27] запропонував розглядати матеріали з великим вмістом водню: CH_4 , SiH_4 , GeH_4 — вони можуть металізуватися при менших тисках, які експериментально доступні. Дані сполуки можуть металізуватись по тій самій причині, що і чистий водень: висока дебаївська частота та сильна електрон-фононної взаємодія. Наявність важких атомів в кристалічній ґратці може впливати на збільшення критичної температури, оскільки важкі атоми вносять добавку в низькочастотний фононний спектр і збільшують електрон-фононну взаємодію. Дана оцінка була проведена тільки якісно, хоч з'явилась вчасно, так як вона була перевірена точними теоретичними та експериментальними розрахунками. Як було зазначено раніше, тиск в 200 ГПа був нормою, тому роботу Ашкрофта можна вважати початком «гонки» за гідратами.

На рисунку 2.2.1 показано, як з часом, розробкою і вдосконаленням теоретичних та експериментальних методів збільшувалась кількість публікацій в гідратних надпровідниках.



Рис. 2.2.1. Приблизна кількість публікацій в сфері гідратних надпровідників. [23] (Creative Commons license CC BY 4.0)

Також із рисунку 2.2.1 видно, як ключові події, а саме - припущення Ашкрофта в 1968, Ґільман 1971, Ашкрофт 2004 та H_xS в 2015 — розділяли вивчення гідратних надпровідників на етапи, та звані «гонки». З часом, кількість публікацій тільки зростатиме, адже доступність експериментальних установок тільки пришвидшуватиме дослідження, хоча на даний момент установки які можуть створювати величезні тиски, поки не доступні для широкого використання, вони знаходьться в невеликої кількості інститутів.

2.3. Нанорозмірні надпровідники

Останні досягнення в нанонауці показали, що було відкрито фундаментально нові фізичні явища, коли систему зменшують до розмірів фундаментальних частинок. Надпровідність, це макроскопічні квантові явища, і тому особливо цікаво спостерігати як на квантовий стан впливає зменшення зразка до нанометрових розмірів. Останні досягнення в нанотехнологіях та методах вимірювання сьогодні дозволяють експериментально досліджувати властивості мезоскопічних надпровідників: магнітні та термодинамічні властивості.

В об'ємних зразках, стандартна теорія БКШ гарно описує феноменологію надпровідності. Проте в 1959 році Андерсон помітив, що чим менше стає розмір надпровідника і квантова енергія відстані рівнів у електронах наближається до надпровідної щілини, то теорія БКШ перестає діяти [28]. Точний розв'язок гамільтоніана БКШ для кінцеворозмірних систем було давно розроблене Річардсоном для ядерної фізики [29]. Воно показує, що, хоч велика канонічна хвильова функція БКШ дає точний розв'язок гамільтоніана в обмежені, де число електронів дуже велике $N \gg 1$, для малих значень N необхідно використовувати точні аналітичні методи для отримання надійних результатів.

Останні експериментальні досягнення у виготовлені і вимірі надпровідності в над малих мезоскопічних і нанорозмірних гранулах поновили теоретичну зацікавленість вчених до рішення Річардсона [30, 31, 32]. Рисунок 2.3.1 показує найменший надпровідник розміром в 5 А. Такі системи є цікавими для наноелекроніки та квантових обрахунків.



Рис. 2.3.1. Найменший надпровідник у світі [33]

Розв'язки Річардсона залежать від відстані між рівнями енергій електронів біля рівня Фермі і тому різні геометричні форми призводять до залежності від різних розмірів термодинамічних та електронних властивостей. Властивості малих надпровідних гранул залежать від парності числа електронів N. Завдяки участі в паруванні Купера феномен назвали, як «феномен паритету», схожий феномен був давно відомий в атомній фізиці. Феномен паритету був помічений у малих гранулах алюмінію в 1992 році.

Експерименти показали, що надпровідність виникає у одновимірних свинцевих та вуглецевих нанотрубках [34, 35]. Парний-непарний ефект паритету в спектрі тунелювання, вже спостерігався у нанометровій гранулі алюмінію, також даний ефект можна спостерігати і в надпровідних нанотрубках.

На рисунках 2.3.2 та 2.3.3 можна побачити ансамбль дрібних металевих гранул, які можуть перебувати в нормальному або надпровідному стані. Для таких систем важливими параметрами будуть: розмір гранули, довжина

когерентності електрона та глибина проникнення [33].



Рис. 2.3.2. Ілюстрація структури надпровідника



Рис. 2.3.3. Розмірний ефект у надпровідниках

На рисунку 2.3.3 видно як розмірний ефект впливає на гранули. Варто примітити, що відстань між рівнями залежить від багатьох параметрів, таких як довжина когерентності електронів та глибина проникнення.

В даній теорії перше надпровідність було відкрито в сполуці MgB_2 з критичною температурою в 39 К, це була найвища температура для надпровідності серед двокомпонентних систем [36]. Діборід магнію - це анізотропний надпровідник із звичайною електрон-фононною взаємодією в

теорії БКШ [37]. Зонна структура MgB_2 , розрахована в кількох роботах з моменту відкриття надпровідності, подібна до структури графіту і утворена σ та π – зонами, і завдяки цим зонам MgB_2 має дві надпровідні щілини при енергії 4 меВ та 7.5 меВ.

Було прикладено багато зусиль до створення наностроктури MgB_2 , щоб використовувати його в сфері прикладної надпровідності [38]. Ідеальним кандидатом можна вважати одновимірні наноструктури включаючи нанотрубки, нанодроти та наночастинки. Для MgB_2 доступні наночастинки розміром 20 – 100 нм (рис. 2.3.4).



Рис. 2.3.4. ПЕМ мікрофотографія наночастинок *MgB*₂ розміром 20 – 100 нм. [38]

Для малих надпровідних гранул експерименти Блека та інших викликали неабиякий інтерес до розмірної залежності надпровідності [39, 40]. Також ультра малі надпровідні гранули досліджувались і теоретично багатьма групами. Але знову ж таки стандартна теорія БКШ не давала потрібних результатів. Для ультра малих гранул алюмінію об'ємна щілина обговорювалась стосовно фізичних властивостей ультра дрібних гранул, таких як щілина паритету [41], енергія конденсації [42], електронна кореляція [43], та інші, а також залежність від розміру міжрівневого інтервалу [44].

2.4. Кластерна надпровідність

Металічні нанокластери утворюють нове сімейство високотемпературних надпровідників. Високе значення критичної температури обумовлено оболонковою структурою їхніх електронних спектрів і також, високою степеню виродження 2(2L+1).

Кластери являють собою сукупність атомів або молекул, котрі мають структуру виду A_k , де k – число атомів елемента А. Число k може змінюватись від 2 до будь-якої величини. Таким чином, можна вивчати кластери розміром системи починаючи від одного ізольованого атома до твердого тіла. Металічні кластери, як і будь-яка металічна система, електронами, делокадізованими характеризується підсистема яких утворюється валентними електронами атомів. Основний параметр кластера, це N – число валентних електронів. Наприклад, N = 135 для кластера Al_{45} , оскільки кожен атом алюмінію містить три валентних електрона. Використовуючи мас-спектрометрії можна відбирати конкретні кластери.

Зазвичай кластери виготовлюється метод випаровування металів, тому їхня початкова температура досить висока. Проте існують різні методи охолодження кластерів, що дозволяє отримувати пучки кластерів із різними температурами.

Основне відкриття відбулось в 1984 році, Найтом та його колегами [45], вони помітили, що електроні спектри багатьох металічних кластерів відповідають наявності в них електричних оболонок, подібних до оболонок атомів або атомних ядер. Як відомо, атоми з повністю заповненими оболонками (s, d, ..., f) найбільш стабільні, це справедливо також для

нуклонів в атомному ядрі.

Аналогічно оболонкам інертних атомів енергетична оболонка таких кластерів повністю заповнена – такі кластери називають «магічними». Наприклад кластери з «магічними» числами $N_m = 8, 20, 40, 58, 92, 138, ...$ (рис. 2.4.1).



Рис. 2.4.1. Оболонкова структура, числами позначені заповнені оболонки, так звані «магічні» числа.

Важливо, що магічні кластери мають сферичну симетрію. Таким чином, їхній електричний стан визначається значенням орбітального моменту L та радіальним квантовим числом п. Якщо енергетична оболонка заповнена не повністю, то кластер відчуває «ян-телірівське» спотворення і

його форма починає відрізнятись від сферичної, рис. 2.4.2. В результаті енергетичний рівень з даним значенням L розщеплюється, таким чином, що електронний стан деформованого кластера буде визначатись не L, а

проєкцією кутового моменту m. Масштаб розщеплення оболонки різний для різних металів та залежить від числа делокалізованих електронів.



Рис. 2.4.2. Форми кластерів для різних значень N.

Куперівські пари в об'ємному надпровіднику утворюються електронами із протилежними імпульсами та спінами. Для нанокластерів імпульс не є квантовим числом і пари утворюються проекцією кутового моменту (m; -m). Сила парної кореляції відрізняється для різних кластерів, тому критична температура та енергетична щілина сильно залежать від параметрів кластера: його форми, сили спарювання і т. д.

Коли верхня заповнена оболонка сильно вироджена, це аналогічно появи піка в густині стану на поверхні Фермі. Ситуація схожа до тої, яка вивчалась в [46] для об'ємних матеріалів: наявність піка в густині станів призводить до значного збільшення T_c .

Раніше думали, що енергетичні рівні в кластерах енергетичні рівні приблизно еквідестантні. Проте, виявилось, що для багатьох реальних кластерів картина електронних станів зовсім не відповідає еквідестантному розподілу. В реальності електроні стани мають сильно вироджені рівні або групи дуже близьких рівнів, таким чином що відстань між рівнями близька до відстані Фермі, виявляються малими, рисунок 2.4.3.



Рис. 2.4.3. Енергетичні спектри (а) для магічного кластера і (б) для кластера із майже заповненою оболонкою.

Відповідно до [47], якщо кластери мають сферично симетричні наполовину заповнені оболонки, то вони повинні мати високу критичну температуру. Але при такому заповнені шанс оболонки на деформацію кластера за ефектом Яна-Теллера дуже велика, і тому автор цієї статті пропонує використовувати кластерну сітку, в якій би відбувався сумарний перенос заряду. І як зазначає автор, що ідея надпровідника кластерного кристала дуже цікава.

В огляді літератури ознайомився із ідеєю надпровідності, як з точки зору практичної так і історичного аспекту даного явища. Із опрацьованої інформації можна зробити висновок, що надпровідність знаходиться на доволі ранньому етапі розвитку, хоч вчені і досягнули значних результатів, проте головної цілі так і не було досягнуто, а саме практичний надпровідник.

Основна частина

В основній частині розглядаються основні поняття та ефекти надпровідності які були в магістерській роботі.

3.1 Рівняння Лондонів

Фрітц та Ґаінс Лондони представили свої рівняння у 1935 році. Вони розглядали надпровідник у зовнішньому магнітному полі. Брати припускали, що існують електрони в металі розбиті на дві групи: НП (надпровідні) електрони із густиною n_s та нормальні електрони із густиною n_N . Тобто, повна густина n_f цих ферміонів (неважливо чи це електрони f = e, чи це дірки f = h) дорівнює сумі всіх густин.

$$n_f = n_S + n_N (3.1.1)$$

В своїй роботі вони припускали, що зовнішні поля не генерують нові носіїв системи, тобто зовнішні поля малі. Так вони отримали перше рівняння.

$$\boldsymbol{E} = \frac{d}{dt} \Lambda \boldsymbol{j}_{S} (3.1.2)$$

Де $\Lambda = \frac{m_f}{n_S * e^2}$. Дане рівняння говорить нам, що в стаціонарному стані, тобто коли $\frac{d}{dt} \mathbf{j}_S = 0$, електричне поле у НП дорівнює нулеві або відсутнє.

Друге рівняння Лондонів показує зв'язок між надструмом і магнітним полем. Оскільки поля всередині надпровідника немає, але говорити про повну відсутність поля можна лише у певному наближені, нехтуючи поверхнею яка має скінчену товщину. Оскільки іншого току в НП немає, то рівняння Максвела будуть записуватись таким чином:

$$\operatorname{rot}\boldsymbol{H} = \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j}_{S} (3.1.3)$$

20

Лондони використали саме рівняння Максвела, бо як видно з першого рівняння, у стаціонарних умовах в НП нема електричного поля, тому нормальні електрони не рухаються і не створюють вихрові магнітні поля. Саме в цьому була простота і геніальність Лондонівських рівнянь.

3.2 Ефект Мейснера

Даний ефект був відкритий у 1933 році в дослідах Мейснера та Оксенфільда. Це явище показує, що у магнітному полі в надпровіднику індукуються макроскопічні струми, які створюють власне магнітне поле, що повністю витісняє зовнішнє. Ефект можна описати за допомогою рівнянь Лондонів, що і стало першою феноменологічною теорією.

Візьмемо зразок в якому поверхня співпадає із площинами ху, область z < 0 являється пустою (рис. 3.2.1), в такому випадку поле h і струм j_S залежить від z.



Рис. 3.2.1 Проникнення слабкого магнітного поля в надпровіднику (λ – глибина проникнення)

Поле h тангенціальне і направлене вздовж осі х. В такому випадку друге рівняння Лондонів набуває вигляду:

$$\frac{dh}{dz} = \frac{4\pi}{c} \boldsymbol{j}_{S} (3.2.1)$$

Далі отримаємо:

$$\frac{dj_s}{dz} = \frac{n_s * e^2}{m_f * c} * h (3.2.2)$$
$$\lambda_L^2 = \frac{m_f * c^2}{4\pi * n_s * e^2} (3.2.3)$$

Кінцеве рішення для надпровідника є експоненційно спадаючим:

$$h(z) = h(0)e^{-z/\lambda_L}$$
 (3.2.4)

тобто в середину зразка поле проникає лише на глибину λ_L . Глибина проникнення мала при слабих полях, а при сильних полях ефект Мейснера, залежно від типу надпровідника, руйнується або ж розбивається на нормальні та надпровідні області.

3.3 Надпровідник першого та другого роду

Як було зазначено вище, що надпровідники можна розбити на типи. Всього існує два типи: перший та другий тип.

Надпровідник першого роду можна охарактеризувати ефектом Мейснера, тобто, якщо огорнути надпровідник циліндричної форми, з радіусом r_0 , соленоїдом, радіусом $r_1 > r_0$, і пустити слабкий струм по соленоїду, то можна побачити, що поле поза надпровідником буде однорідним, а всередині воно швидко спадає до нуля (рис. 3.3.1).

Таке витиснення потоку спостерігається в слабкому полі **H**, але як тільки поле досягає певної критичної величини H_c , то в такому випадку відбувається наступне: по-перше, поле стає однорідним по всьому об'ємі зразка, а по-друге, зразок перестає бути надпровідником.



Рис. 3.3.1 Поле в центрі циліндричного надпровідника

Надпровідники другого роду можна охарактеризувати наступними макроскопічними властивостями:

- Циліндр, який розташований в повзводному полю H, не має властивості повного витіснення магнітних потоків, тобто, на відміну від надпровідників першого роду, другий рід надпровідників дозволяє проникати магнітному полю до певної критичної межі H_c.
- 2. При $H > H_{c1}$ (рис. 3.3.2), де H_{c1} позначення поля початку проникнення, яке було рекомендоване учасниками конференцію по надпровідності в 1963 році, силові лінії проникають в циліндр, проте, навіть, при встановленні теплового балансу дане проникнення не буде повним. Потік, який проходить через циліндр, має меншу величину, чим у випадку коли зразок знаходиться в Така властивість нормальному стані. вказує на існування незатухаючих токів в циліндрі, який, все ще знаходиться в надпровідному стані.
- 3. При $H > H_{c2}$ (рис. 3.3.2), де H_{c2} позначення поля повного руйнування надпровідності в сплавах, макроскопічний зразок взагалі не витісняє магнітний потік ($B \equiv H$). Але, навіть в такому випадку, надпровідність повністю не руйнується. В області полів

 $H_{c2} < H < H_{c3}$ (рис. 3.3.2) на поверхні циліндра утворюються надпровідний прошарок товщиною ~10³Å. Фізична причина, що стоїть за створенням надпровідного прошарку, полягає в наступному: невеликій надпровідній області легше утворитись ближче до поверхні зразка, так само як бульбашка повітря утворюється на дні газованої води.



Рис. 3.3.2 Фазова діаграма для надпровідника другого роду у вигляді циліндра

На рисунку зображено зміну полів H_{c1} , H_{c2} , H_{c3} відносно температури. Нижче H_{c1} в зразку буде зберігатись повний ефект Мейснера, при збільшені зовнішнього поля до H_{c2} , виникає так звана фаза Шубнікова, тобто надпровідність залишається, проте магнітне поле поступово проникає в зразок. При $H > H_{c3}$, як було зазначено вище, надпровідність починає виникати в надпровідних прошарках близьких до поверхні циліндра.

3.4 Теорія об'ємного фазового переходу Гінзбурга-Ландау

Дана теорія побудована на загальному підході теорії фазового переходу другого роду, яку Ландау розробив в 1930-их роках. Ландау помітив, що зазвичай фазові переходи другого роду, такі як температура Кюрі у феромагнетику, пов'язані з деякою зміною симетрії системи. Наприклад магніт вище за температуру Кюрі, Т_с, не має магнітного моменту, проте за температури нижче за Т_с утворюється спонтанний магнітний момент. Загально можна сказати, що система має безліч різних напрямків, проте вона вибирає один конкретний напрямок. Такі переходи, в теорії Ландау, характеризуються параметром порядку, який дорівнює нулеві В невпорядкованому стані вище за T_c , але стає нулем в станах нижче за T_c .

Для надпровідності Гінзбура та Ландау постулювали існування параметра порядку, позначеного як ψ . Це позначення характеризує надпровідний стан, так само як намагніченість у феромагнетику. В нормальному стані, коли температура більша за критичну температуру, T > T_c , параметр порядку надпровідності дорівнює нулеві і навпаки, коли $T_c > T$, то надпровідність не нульова.

$$\psi = \begin{cases} 0, & T > T_c \\ \psi(T) \neq 0, & T < T_c \end{cases} (3.4.1)$$

Гінзбург і Ландау запропонували, щоб параметр порядку, позначений як ψ, був комплексним числом. Вони розглядали його як великомасштабну хвильову функцію надпровідника, проводячи аналогію з поведінкою надплинного 4He. Коли вони вперше представили цю ідею, точне фізичне значення комплексу ψ у надпровідниках не було добре зрозуміле.

Параметр у повинен мати плавний вплив на вільну енергію надпровідника. Оскільки у є комплексною величиною, а вільна енергія має бути дійсною величиною, то з цього випливає, що енергія може залежати

лише від величини ψ , позначеної як $|\psi|$. Крім того, враховуючи, що ψ наближається до нуля при критичній температурі Тс, ми можемо виконати розкладання за Тейлором вільної енергії за степенями $|\psi|$. Якщо температура досить близька до Тс, то в розкладі потрібні лише перші два доданки. Отже, густина вільної енергії (f = F/V) має бути виражена таким чином:

$$f_s(T) = f_n(T) + a(T)|\psi|^2 + \frac{1}{2}b(T)|\psi|^4 + \cdots (3.4.2)$$

 $f_s(T)$ – надпровідний стан та $f_n(T)$ нормальний стан густини вільної енергії. Рівняння (3.4.2) є єдиною можливою функцією, яка є дійсною для будь-якого комплексного значення ψ і яка є диференційованою функцією ψ і ψ *, поблизу $\psi = 0$. Залежні від температури феноменологічні параметри a(T) і b(T), як правило, вважаються гладкими функціями температури, в свою чергу b(T) має бути додатним, щоб густина вільної енергії мала мінімум, що є фізично обґрунтованим.

Виявляється, що, оскільки ψ є комплексною, насправді існує нескінченна множина мінімумів, які відповідають усім можливим значенням комплексної фази θ,

$$\psi = |\psi|e^{i\theta}.(3.4.3)$$

Значення фази θ , можна вибрати довільно, оскільки всі значення дають однакову загальну вільну енергію. Однак, як і у випадку з напрямком намагніченості **M** у феромагнетику, система спонтанно обирає певне значення. А магніт, нагрітий до температури вище Tc, а потім знову охолоджений, майже напевно прийме інший випадковий напрямок намагніченості, і те саме буде справедливим і для кута θ у надпровіднику. [49]

Мінімальне значення вільної енергії на рисунку 3.4.1 можна легко визначити як $\frac{-a(T)^2}{2b(T)}$. Це значення являє собою різницю вільної енергії (на

одиницю об'єму) між надпровідною і нормальною фазами системи при температурі Т, яка еквівалентна енергії конденсації надпровідника. Отже, ми можемо виразити це як:



Рис. 3.4.1 Різниця вільної енергії між нормальним і надпровідним станами як функція параметра порядку ψ . Для T < Tc вільна енергія має мінімум при ψ_0 , тоді як для T > Tc єдиний мінімум є при $\psi = 0$.

Із 3.4.4 отримаємо рівняння для термодинамічного критичного поля, поблизу *T_c*:

$$H_c = \frac{\dot{a}(T_c - T)}{\sqrt{\mu_0 b}} \quad (3.4.5)$$

З вільної енергії ми також можемо отримати інші відповідні фізичні величини, такі як ентропія та теплоємність. При критичній температурі T_c не спостерігається стрибкоподібної зміни ентропії або прихованої теплоти, що підтверджує, що модель Гінзбурга-Ландау описує термодинамічний фазовий перехід другого порядку. Однак при T_c спостерігається стрибкоподібна зміна питомої теплоємності. Щоб отримати теплоємність C_V на одиницю об'єму, ми можемо диференціювати ентропію по відношенню до температури за формулою $C_V = T \frac{ds}{dT}$.

$$C_{Vs} - C_{Vn} = \begin{cases} T \frac{\dot{a}^2}{b}, \ T < T_c \\ 0, \ T > T_c \end{cases}$$
(3.4.6)

і тому теплоємність має розрив біля Т_с

$$\Delta C_V = T_c \frac{\dot{a}^2}{b} \tag{3.4.7}$$

Теплоємність металу в нормальному стані лінійна по Т, $C_V n = \gamma T$, де γ – стала Зоммерфельда, і тому повна крива теплоємності має вигляд як на рис. 3.4.2



Рис. 3.4.2 Питома теплота надпровідника поблизу T_c у моделі Гінзбурга-Ландау. Вище Тс питома теплота визначається теорією металів Зоммерфельда, $C_V n = \gamma T$. При Тс відбувається розрив і зміна нахилу.

3.5 Електрон-фононна взаємодія

Перша ключова ідея теорії Бардіна-Купера-Шріфера (БКШ) була запропонована Фрьоліхом в 1950. Він запропонував, що електрони притягуються поблизу поверхні Фермі. На перший погляд це було дивно, адже електрони повинні відштовхуватись через Кулонівське відштовхування.

$$V(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|}$$
(3.5.1)

У металі доцільніше розглядати квазічастинки, а не голі електрони.

Квазічастинка - це збудження твердого тіла, яке складається з електрона, що рухається, і оточуючої його обмінної кореляційної дірки. Коли електрон рухається, інші електрони повинні зійти з його шляху через принцип виключення та відштовхувальну кулонівську енергію. Ландау розвинув ідею квазічастинки, яка являє собою систему сильно взаємодіючих ферміонів, відому як рідина Ландау-Фермі.

Якщо взяти до уваги електрон і дірку в металі, то ефективна кулонівська сила між квазічастинками значно зменшується внаслідок екранування. Виходячи з моделі Томаса Фермі, можна передбачити ефективну взаємодію, яка має вигляд:

$$V_{TF}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} e^{\frac{-|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{r_{TF}}}$$
(3.5.2)

 r_{TF} — довжина екранування Томаса Фермі. В результаті екранування кулонівське відштовхування значно зменшується, і ефективна сила відштовхування тепер обмежена в діапазоні, зникаючи на відстанях, $|r - r'| > r_{TF}$. Це робить загальну відштовхувальну взаємодію значно слабшою, ніж початковий потенціал $\frac{1}{r}$.

Щоб зрозуміти походження електрон-фононної взаємодії, у твердому тілі, потрібно розглядати фонон з хвильовим вектором q. У твердому тілі ефективний гамільтоніан для фононів складається з серії квантових гармонічних осциляторів, по одному для кожної фононної моди і хвильового вектора q,

$$\widehat{H} = \sum_{q,\lambda} \hbar \omega_{q\lambda} (a_{q\lambda}^{+} a_{q\lambda} + \frac{1}{2}) \qquad (3.5.3)$$

Де оператори $a_{q\lambda}^+$ та $a_{q\lambda}$, оператори породження та знищення фонона відповідно. У кристалі з атомами Na в елементарній комірці існує 3 фононні

моди або гілки. Однак для елементарної комірки з одним атомом існує лише три фононні моди, включаючи одну поздовжню і дві поперечні моди. Використовуючи вирази для сходових операторів, ми можемо визначити зміщення атомів. Таке зміщення викликає зміну густини заряду електронів, в результаті чого виникає ефективний потенціал для електронів у твердому тілі, який позначається $V_1(\mathbf{r})$. Цей потенціал можна виміряти за допомогою потенціалу деформації.

$$\delta V_1(r) = \sum_i \frac{\partial V_1(r)}{\partial \boldsymbol{R}_i} \delta \boldsymbol{R}_i \qquad (3.5.4)$$

Де **R**_i — розташування атомів в кристалі.

Передача імпульсу між двома електронами відбувається через випромінювання та поглинання фонона, що призводить до ефективної взаємодії між ними. Ефективна взаємодія не залежить від того, який електрон створив або знищив фонон. І така взаємодія має вигляд:

$$V_{eff}(\boldsymbol{q},\omega) = \left|g_{\boldsymbol{q}}\right|^2 \frac{1}{\omega^2 - \omega_{\boldsymbol{q}}^2} \qquad (3.5.5)$$

Така взаємодія між електронами є надто складною для аналітичних розрахунків, тому БКШ запровадили спрощену форму. Вони знехтували залежністю взаємодії від хвильового вектора q і замінили залежну від q вершину електрон-фононної взаємодії на константу g_{eff} , яка ефективно усереднюється по всіх значеннях q. Вони також замінили частоту ω_q на фононну частоту ω_D , яку зазвичай приймають за частоту Дебая. [48]

$$V_{eff}(\boldsymbol{q},\omega) = \left|g_{eff}\right|^2 \frac{1}{\omega^2 - \omega_D^2} \qquad (3.5.6)$$

Електрон-фононна взаємодія є притягальною для частот фононів, нижчих за частоту Дебая, і відштовхувальною для вищих частот, але в БКШ розглядається лише притягальна частина. Оскільки інтерес становлять лише електрони в межах $\pm k_B T$ від енергії Фермі, а при температурах, релевантних для надпровідності, $\hbar \omega_D \gg k_B T$, то модель БКШ набуває ще простішої форми:

$$V_{eff}(\boldsymbol{q},\omega) = -\left|g_{eff}\right|^2 \quad |\omega| < \omega_D \qquad (3.5.7)$$

Відповідно для електрон-фононної взаємодії гамільтоніан набуває вигляду:

$$\widehat{H}_{1} = -\left|g_{eff}\right|^{2} \sum c_{k_{1}+q\sigma_{1}}^{+} c_{k_{2}-q\sigma_{1}}^{+} c_{k_{1},\sigma_{1}} c_{k_{2},\sigma_{2}} \qquad (3.5.8)$$

де сума по $k_1, \sigma_1, k_2, \sigma_2$ і **q** відбувається тільки в обмеженні де всі електрони, які приймаються участь в процесі, знаходяться в межі $\pm \hbar \omega_D$ поверхні Фермі. Таким чином, електрони поблизу поверхні Фермі взаємодіють один з одним, тоді як стани Блоха, що знаходяться далеко від поверхні Фермі, не взаємодіють.

3.6 Куперівські пари

Після відкриття притягальної взаємодії між електронами поблизу рівня Фермі теорія надпровідності все ще залишалася неповною. Купер зробив припущення і помітив, що ефективна взаємодія була притягальною лише поблизу поверхні Фермі, і йому стало цікаво, що станеться, якщо на пару електронів за межами зайнятого моря Фермі вплине це притягання. Він виявив, що електрони утворюють зв'язаний стан, що було дивовижним результатом, оскільки два електрони у вакуумі не могли б утворювати зв'язаний стан через таку слабку притягальну взаємодію. "Проблема Купера" демонструє, що рідкий стан Фермі, в якому електрони Блоха є незалежними, не є стабільним при слабких притягальних взаємодіях між частинками. Ця концепція проклала шлях до повного БКШ стану, в якому кожен електрон на поверхні Фермі утворює пару.

Теоретична модель Купера передбачає нульову температуру сферичної

поверхні Фермі, де всі стани з імпульсом $k < k_F$ зайняті й тому додаткові два електрони розміщені за межами цієї поверхні.

Хвильова функція двох додаткових електронів має вигляд:

$$\Psi(\boldsymbol{r}_1, \sigma_1, \boldsymbol{r}_2, \sigma_2) = e^{i\boldsymbol{k}_{cm}\boldsymbol{R}_{cm}}\varphi(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)\Phi^{spin}_{\sigma_1, \sigma_2} \qquad (3.6.1)$$

де \mathbf{R}_{cm} – це центр мас та $i\mathbf{k}_{cm}$ – це сумарний імпульс пари. Основний стан куперівської пари відповідає нульовому руху центру мас. Тому припускається, що $\mathbf{k}_{cm} = 0$ у стані з мінімальною енергією.

Хвильова функція може перебувати або в синглетному стані із загальним спіном S = 0, або в триплетному S = 1. Майже всі відомі надпровідники мають, окрім пари цікавих винятків, синглетну куперівську пару, тому надалі ми так і будемо припускати.

Антисеметрія ферміонів пердбачає, що

$$\Psi(\mathbf{r}_{1},\sigma_{1},\mathbf{r}_{2},\sigma_{2}) = -\Psi(\mathbf{r}_{1},\sigma_{2},\mathbf{r}_{2},\sigma_{1}) \qquad (3.6.2)$$

хвильова функція $\varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ для спінового синглета є непарною функцією спінів σ_1 і σ_2 , тому вона має бути парною, тобто $\varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = +\varphi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1)$. І навпаки, якби стан був спіновим триплетом, хвильова функція мала б бути непарною функцією.

Припускаючи, що хвилі Блоха є плоскими хвильовими станами вільних електронів, ми можемо виразити $\varphi(r_1 - r_2)$ через їхнє розширення:

$$\varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)}$$
 (3.6.3)

де φ_{k} – це певний коефіцієнт розширення. Повна хвильова функція пари є сумою детермінанта Слатера:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \sum_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} \begin{vmatrix} \psi_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}_1) & \psi_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}_1) \\ \psi_{-\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}_1) & \psi_{-\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}_1) \end{vmatrix}$$
(3.6.4)

32

Кожен визначник Слатера включає в себе спіни які напрямлені вгору та вниз, а також електрони на **k** та **-k** рівнях.

Якщо підставити повну хвильову функції в рівняння Шрьодінгера, то отримаємо:

$$E_{\varphi_{k}} = -2|g_{eff}|^{2} \epsilon_{k} \varphi_{k} \sum_{k'} \varphi_{k'} \qquad (3.6.5)$$

де Е – сумарна енергія двох станів частинок. За допомогою самоузгоджуваного аргументу, ми можемо знайти сумарну енергію.

$$C = \sum_{k} \varphi_{k} \qquad (3.4.6)$$

Далі розв'яжемо для φ_k :

$$\varphi_{k} = -C \left| g_{eff} \right|^{2} \frac{1}{E - 2\epsilon_{k}} \qquad (3.4.7)$$

Самоузгодженість вимагає:

$$1 = -2|g_{eff}|^2 \sum_{k} \frac{1}{E - 2\epsilon_k}$$
(3.4.8)

Перетворимо суму по **k** на інтеграл по густині станів та для простоти замінимо ϵ_k на ϵ_F :

$$1 = -2|g_{eff}|^2 g(\epsilon_F) \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{1}{E - 2\epsilon_k} d\epsilon \qquad (3.4.9)$$

Межі інтегрування виникають через обмеження **k** у вузькій смузі навколо поверхні Фермі. Результат інтегрування можна переставити, щоб отримати значення енергії Е.

$$-E = 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\lambda}} \qquad (3.4.10)$$

де λ – параметр електрон-фононного парування.

$$\lambda = \left| g_{eff} \right|^2 g(\epsilon_F) \tag{3.4.11}$$

I цей параметр вважається малим, $\lambda \ll 1$.

Енергія зв'язаного стану дуже мала, коли сила взаємодії λ мала. Енергетична шкала для надпровідності задається енергією Дебая, помноженою на експоненціальний множник, тому температури переходу (T_c) набагато менші, ніж інші енергетичні шкали в твердих тілах. Оскільки через дуже малий експоненціальний фактор у більшості металевих надпровідників T_c становить близько 1К.

Існування зв'язаного стану можливе, навіть, якщо константа взаємодії λ є малою, що є унікальною особливістю заповненої рідини Фермі. Без заповненої рідини Фермі притягальна взаємодія в трьох вимірах не завжди призводить до виникнення зв'язаного стану. Тому заповнена поврехня Фермі відіграє вирішальну роль у теорії БКШ.

3.7 Хвильова функція БКШ

Д. Бардін, Л. Н. Купер і Д. Р. Шріффер (БКШ) спиралися на проблему Купера для розробки своєї теорії надпровідності, яка стверджує, що за наявності ефективної притягальної взаємодії практично кожен електрон на поверхні Фермі утворює куперівські пари. Однак записати хвильову функцію, яка б описувала багаточастинкову систему парних електронів складно, оскільки простий добуток станів не може охопити поняття макроскопічної квантової когерентності, необхідної для надпровідності.

Замість добутку стану електронних пар, Шріффер запропонував використати когерентний стан куперівських пар, який передбачає використання операторів, що породжують або знищують пари електронів з центром на **R**

$$\hat{\varphi}^+(\mathbf{R}) \qquad \hat{\varphi}(\mathbf{R})$$

34

Ці оператори, не підпорядковуються нормальній комутації Бозе, і тому ми не можемо їх вважати операторами які породжують і знищують бозе частинки. Тому будемо шукати рівномірний трансляційний інваріантний розв'язок в k-просторі.

$$\hat{P}_{k}^{+} = c_{k\uparrow}^{+} c_{k\downarrow}^{+} \qquad (3.7.1)$$

Даний оператор створює пару з нульовим сумарним кристалічним імпульсним числом і протилежними спінами. Шріфер запропонував хвильову функцію когерентного стану багатьох тіл в термінах оператора 3.5.1.

$$|\Psi_{BCS}\rangle = const \exp\left(\sum_{k} \alpha_{k}\right) \hat{P}_{k}^{+}|0\rangle$$
 (3.7.2)

α_{b k f} – комплексне число і використовується для мінімізації загальної енергії. |0> – вакуумний стан, в якому простір Фермі повністю заповнений.

Пара операторів 3.5.1 не задовольняють закон Бозе взаємодії, але вони комутують,

$$\left[\hat{P}_{k}^{+}, \hat{P}_{k'}^{+}\right] = 0 \qquad (3.7.3)$$

для різних k, $k \neq k'$. Проте з іншого боку, для однакових k, добуток $\hat{P}_k^+ \hat{P}_k^+$ має чотири електрони,

$$\hat{P}_{k}^{+}\hat{P}_{k}^{+} = c_{k\uparrow}^{+}c_{-k\downarrow}^{+}c_{k\uparrow}^{+}c_{-k\downarrow}^{+} = 0 \qquad (3.7.4)$$

 $c_{k\uparrow}^+ c_{k\uparrow}^+ = 0$, саме тому, воно дорівнює нулеві. Також варто зазначити, що

$$(\hat{P}_k^+)^2 = 0$$
 (3.7.5)

Використовуючи цей факт, а також, якщо розкладати кожен оператор експоненційно, то ми можемо переписати 3.5.2, а такому вигляді:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = const \prod_{k} (1 + \alpha_k \hat{P}^+_k) |0\rangle$$
 (3.7.6)

Нормалізаційну константу ми отримали з:

$$1 = \langle 0 | (1 + \alpha_k^* \hat{P}_k^+) (1 + \alpha_k \hat{P}_k^+) | 0 \rangle = 1 + |\alpha_k|^2 \quad (3.7.7)$$

Таким чином нормалізований стан БКШ має вигляд:

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{k} (u_k + v_k \,\hat{P}_k^+)|0\rangle \qquad (3.7.8)$$

де

$$u_{k} = \frac{1}{1 + |\alpha_{k}|^{2}} \qquad (3.7.9)$$
$$v_{k} = \frac{\alpha_{k}}{1 + |\alpha_{k}|^{2}} \qquad (3.7.10)$$

а також,

$$|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1 \quad (3.7.11)$$

Зазначимо, що α_k може бути будь-яким комплексним числом, оскільки це буває в когерентному стані. Хвильова функція БКШ не має конкретного числа частинок. Загальна кількість електронів, що беруть участь у хвильовій функції, є макроскопічною і має порядок розміру системи. Невизначеність у кількості частинок, яка характерна для когерентних станів, є незначною порівняно із загальною кількістю частинок.

Початковий стан БКШ по-різному поводиться з електронами і дірками, оскільки він починається з заповненого простору Фермі і додає пари електронів, але не пари дірок. Однак, пари дірок також включені в теорію, і стан БКШ можна перевизначити так, щоб електрони і дірки розглядалися більш рівномірно,

$$|\Psi_{BCS}\rangle = \prod_{k} (u_k c_{-k\downarrow} + v_k c_{-k\uparrow}^+)|0\rangle \qquad (3.7.12)$$

3.8 Гамільтоніан середнього поля

Використовуючи формулу 3.5.8 ми будемо знаходити параметри мінімізації енергії u_k та v_k .

$$\widehat{H} - \mu N = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{F}) c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} c_{\boldsymbol{k}\sigma} - \left| g_{eff} \right|^{2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow\uparrow} \quad (3.8.1)$$

Якщо ми візьмемо до уваги тільки взаємодії між куперівськими парами \mathbf{k} ↑ та $\mathbf{k}\downarrow$, то для них будуть $k_1 = -k_2$ і $\sigma_1 = -\sigma_2$. Якщо відкинути всі інші взаємодії, то отримаємо гаільтон

$$\widehat{H} = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{F}) c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} c_{\boldsymbol{k}\sigma} - \left| g_{eff} \right|^{2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow} c_{\boldsymbol{k}\uparrow\uparrow} \quad (3.8.2)$$

Гамільтоніан, згаданий вище, є складним і не може бути розв'язаний точно, оскільки він включає електрони, які взаємодіють. Однак використання пробної хвильової функції БКШ дозволяє розв'язати його за допомогою варіаційного методу, який мінімізує вільну енергію. Цей метод подібний до наближення середнього поля. Припущення полягає в тому, що куперівські пари набагато більші за середню відстань між частинками, що дозволяє замінити оператори в сумі над k' їхнім середнім значенням.

$$\Delta = -\left|g_{eff}\right|^2 \sum_{k'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \qquad (3.8.3)$$

то гамільтоніан набуває приблизно такого вигляду

$$\widehat{H}_{BCS} = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} (\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{F}) c_{\boldsymbol{k}\sigma}^{\dagger} c_{\boldsymbol{k}\sigma} - \left| g_{eff} \right|^{2} \sum_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger} \varDelta + \varDelta^{*} c_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} c_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \quad (3.8.4)$$

Цей гамільтоніан тепер достатньо простий, щоб все можна було розв'язати точно.

Гамільтон БКШ можна діагоналізувати замінною змінних, для цього потрібно ввести набір нових операторів, які є лінійною комбінацією початкових операторів.

$$b_{k\uparrow}^{+} = u_{k}c_{k\uparrow}^{+} + v_{k}c_{k\downarrow}$$

$$b_{-k\downarrow}^{+} = -v_{k}c_{k\uparrow}^{+} + u_{k}c_{-k\downarrow} \qquad (3.8.5)$$

Виявляється, що ці оператори теж анти комутують. Припускаємо, що и та v реальні значення, то отримаємо, що $u = \cos(\theta)$, $v = \sin(\theta)$. Нові оператори це 2x2 матриця повороту,

$$\begin{pmatrix} b_{k\uparrow}^+ \\ b_{-k\downarrow}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\uparrow}^+ \\ c_{-k\downarrow} \end{pmatrix}$$
(3.8.6)

Якщо вказати, що u та v є власними векторами, то ми можемо записати матрицю,

$$\begin{pmatrix} \epsilon_{k} - \epsilon_{F} & \Delta \\ \Delta^{*} & -(\epsilon_{k} - \epsilon_{F}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{k} \\ v_{k} \end{pmatrix} = E_{k} \begin{pmatrix} u_{k} \\ v_{k} \end{pmatrix}$$
(3.8.7)

Власні значення та енергії

$$E_{k} = \sqrt{(\epsilon_{k} - \epsilon_{F})^{2} + |\Delta|^{2}} \qquad (3.8.8)$$

Тепер ми можемо записати гамільтоніан БКШ в нових діагоналізованих операторах і бачимо, що гамільтоніан стає простим для розв'язку:

$$\widehat{H}_{BCS} = \sum_{k} E_{k} b_{k\uparrow}^{+} b_{k\downarrow} - E_{k} b_{-k\downarrow} b_{-k\downarrow}^{+} \qquad (3.8.9)$$

Моделювання та розрахунки

4.1 Методологія

Ми моделюємо гібридну систему надпровідник-феромагнетик, розширюючи, вже відому, теорію самоузгодженого вихру другого роду Ґюджі та Шлютера [49].

Ми починаємо з ефективного гамільтоніану Паулі для спінполяризованих електронних станів звичайного металу:

$$\widehat{H}^{0}_{\sigma\sigma'} = \frac{(\widehat{p} + eA)^2}{2m_e} \delta_{\sigma\sigma'} + V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})$$
(4.1.1)

де e – заряд електрона, $A(\mathbf{r})$ – потенціал магнітного вектора, $V_{\sigma\sigma'}(\mathbf{r})$ – загальний спін-залежний одиничний потенціал, де σ це \uparrow/\downarrow . Цей потенціал можна вважати сумою іонного потенціалу, потенціалу Гартрі та обміно-кореляційного спін-поляризованого потенціалу, який розраховано теорією функціонала густини (DFT). У такому випадку він виглядає:

$$V_{\sigma}(\boldsymbol{r}) = V_{ion}(\boldsymbol{r}) + V_{H}(\boldsymbol{r}) + V_{xc}(\boldsymbol{r}) + \mu_{B}(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}_{xc})\sigma_{\sigma\sigma'} \qquad (4.1.2)$$

де $V_{xc}(\mathbf{r})$ – спін-незалежна частина обмінно-кореляційного потенціалу, μ_B – магнетон Бора, $\mathbf{B}(r)$ – локальне магнітне поле і \mathbf{B}_{xc} - ефективне магнітне поле, що представляє обмінне поле спінової поляризації у феромагнетику. Тут $\sigma_{\sigma\sigma'}$ - це вектор матриці Паулі.

Для того, щоб змоделювати надпровідні аспекти гібридної системи, ми додаємо ефективну силу притягання до одночастинкового гамільтоніану, яка представлена контактним членом БКШ:

$$V(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -g(\mathbf{r})\boldsymbol{\delta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \qquad (4.1.3)$$

Де g(r) – це сила притягального потенціалу в **r**. У звичайних або феромагнітних частинах нанодроту ефективне притягання дорівнюватиме

нулю, тоді як у надпровідних частинах воно буде постійною величиною g. Однак, для простоти, ми не будемо враховувати будь-яке уповільнення притягання в цій роботі.

Повний ефективний гамільтоніан системи, має вигляд:

$$\widehat{H} = \int \left[\sum_{\sigma\sigma'} \left(\widehat{\psi}^+_{\sigma}(\boldsymbol{r}) \widehat{H}^0_{\sigma\sigma'} \widehat{\psi}_{\sigma'}(\boldsymbol{r}) \right) - g(\boldsymbol{r}) \widehat{\psi}^+_{\uparrow}(\boldsymbol{r}) \widehat{\psi}^+_{\downarrow}(\boldsymbol{r}) \widehat{\psi}^+_{\downarrow}(\boldsymbol{r}) \widehat{\psi}^+_{\uparrow}(\boldsymbol{r}) \right] d^3r \quad (4.1.4)$$

Тут $\hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\mathbf{r})$ та $\hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$ – звичайні оператори поля для електронів. В наближені Хартрі-Фока-Ґоркова, цей гамільтоніан діагоналізується за спін-залежним перетворенням Боголюбова-Валатіна:

$$\hat{\psi}_{\sigma}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n} (u_{n\sigma}(\boldsymbol{r})\hat{\gamma}_{n} + v_{n\sigma}^{*}(\boldsymbol{r})\hat{\gamma}_{n}^{+})$$
$$\hat{\psi}_{\sigma}^{+}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n} (u_{n\sigma}^{*}(\boldsymbol{r})\hat{\gamma}_{n}^{+} + v_{n\sigma}(\boldsymbol{r})\hat{\gamma}_{n}) \quad (4.1.5)$$

Головне, щоб оператори породження та знищення квазічастинок дотримувались закону антикумутації ферміонів,

$$\{\hat{\gamma}_n, \hat{\gamma}_n^+\} = \boldsymbol{\delta}_{nn\prime} \qquad (4.1.8)$$

мається на увазі, щоб

$$\sum_{n\sigma} \left(u_{n\sigma}^*(\boldsymbol{r}) u_{n\sigma'}(\boldsymbol{r}') + v_{n\sigma}(\boldsymbol{r}) v_{n\sigma'}^*(\boldsymbol{r}') \right) = \boldsymbol{\delta}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \boldsymbol{\delta}_{nn'} \quad (4.1.7)$$

Отриманий набір рівнянь Боголюбова – де Женна, має вигляд:

$$\begin{pmatrix} \widehat{H}_{1} + V_{\uparrow\uparrow} & V_{\uparrow\downarrow} & 0 & \Delta(\mathbf{r}) \\ V_{\downarrow\uparrow} & \widehat{H}_{1} + V_{\downarrow\downarrow} & -\Delta(\mathbf{r}) & 0 \\ 0 & -\Delta^{*}(\mathbf{r}) & -\widehat{H}_{1} - V_{\uparrow\uparrow} & -V_{\uparrow\downarrow} \\ \Delta^{*}(\mathbf{r}) & 0 & -V_{\downarrow\uparrow} & -\widehat{H}_{1} - V_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n\uparrow\sigma} \\ u_{n\downarrow\sigma} \\ v_{n\uparrow\sigma} \\ v_{n\downarrow\sigma} \end{pmatrix} = E_{n\sigma} \begin{pmatrix} u_{n\uparrow\sigma} \\ u_{n\downarrow\sigma} \\ v_{n\uparrow\sigma} \\ v_{n\downarrow\sigma} \end{pmatrix} (4.1.8)$$

де $\hat{H}_1 = \frac{(\hat{p} + eA)^2}{2m_e} - \mu, \mu -$ хімічний потенціал.

Самоузгоджений потенціал спарювання відповидає чистому спінсинглетному стану і задається формулою:

$$\Delta(\mathbf{r}) = g\langle \hat{\psi}^+_{\uparrow}(\mathbf{r}) \hat{\psi}^+_{\downarrow}(\mathbf{r}) \rangle \qquad (4.1.9)$$

Візьмемо випадок, коли намагніченість феромагнетика, B_{xc} , знаходиться в колінеарному напрямку із зовнішнім полем **B**. Вибравши її як вісь спін-квантування, ми отримаємо, що $V_{\uparrow\downarrow} = V_{\downarrow\downarrow} = 0$. В такому випадку, ми можемо розділити матрицю Боголюбова – де Женна на дві окремі матриці розміром 2x2.

$$\begin{pmatrix} \widehat{H}_{1} + V_{\uparrow\uparrow} & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^{*}(\mathbf{r}) & -\widehat{H}_{1} - V_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n\uparrow\sigma} \\ v_{n\downarrow\sigma} \end{pmatrix} = E_{n\sigma} \begin{pmatrix} u_{n\uparrow\sigma} \\ v_{n\downarrow\sigma} \end{pmatrix}$$
(4.1.10)
$$\begin{pmatrix} \widehat{H}_{1} + V_{\downarrow\downarrow} & -\Delta(\mathbf{r}) \\ -\Delta^{*}(\mathbf{r}) & -\widehat{H}_{1} - V_{\uparrow\uparrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{n\downarrow\sigma} \\ v_{n\uparrow\sigma} \end{pmatrix} = E_{n\sigma} \begin{pmatrix} u_{n\downarrow\sigma} \\ v_{n\uparrow\sigma} \end{pmatrix}$$
(4.1.11)

4.2 Розрахунок спектра

Для вивчення рівняння Боголюбова - де Женна, ми використовуємо чисельні методи для їх розв'язування. Алгоритм обчислень реалізовано з використанням мови програмування РҮТНОN, універсальної мови програмування.

Завдяки циліндричній симетрії системи рівняння Боголюбова – де Жена виражаються у формі, придатній для розрахунків. Крім того, вважається, що амплітуди u(r) і v(r) прямують до нуля в граничній точці. Розв'язки рівнянь отримано за допомогою методу Рунге-Кутта.

Враховуючи циліндричну симетрію системи і вибравши відповідний калібр, де параметр Δ(r) є дійсним, ми можемо виразити систему рівнянь Боголюбова-де-Женна як:

$$\bar{u}(r,\theta,z) = u_{unk_z}(r)e^{-i\mu\theta}e^{-ik_z z}$$

41

$$\bar{v}(r,\theta,z) = v_{\mu n k_z}(r) e^{i\mu\theta} e^{-ik_z z} \qquad (4.2.1)$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2} u_{\mu n k_z}(r) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} u_{\mu n k_z}(r) + U(r) u_{\mu n k_z}(r) + \Delta(r) v_{\mu n k_z}(r) = 0$$

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2} v_{\mu n k_z}(r) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} v_{\mu n k_z}(r) + U(r) v_{\mu n k_z}(r) - \Delta(r) u_{\mu n k_z}(r) = 0 \qquad (4.2.2)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(r) = \frac{\mu^2}{r^2} - (E_f - \left(\frac{k_z^2}{m_z}\right) - E_{\mu n k_z}).$$

Рівняння 4.2.2 описують рух електронів та дірок гібридній системі нанодроту. Функція u(r) відповідає за спектр електрона, а v(r) за спектр дірки. Система має вигляд як на рисунку 4.2.1.



Рис. 4.2.1. Більярд 1. Модель гібридного нанодроту.



Рис.4.2.2. Більярд 2. Модель гібридного нанодроту.

На прикладі руху електрону розглянемо як працює система. Оскільки у нас система складається з надпровідного та звичайного металу, то існує

певна гранична умова при переході із одного металу в інший. При розрахунку системи ми це врахували, тому хвильова функція буде затухати (рис. 4.2.3.). Для отримання цього результату ми використовували такі значення: $E_0 = 0.9866669921875 \text{ eB}, E_f = 1 \text{ eB}, \Delta = 0.1 \text{ eB}, k_z = 0, R_1 = 50 \text{ нм}, R_2 = 150 \text{ нм та } \mu = 1.$



Рис. 4.2.3. Амплітуда квазічастинки стану Андрєєва.

Отриманий спектр як функція кутового моменту відповідає рис. 4.2.1 та рис. 4.2.2. Видно, що при перетині позначки в 50 нм, спектр починає затухати.

Обговорення

Системи Андрєєвського більярда слугують аналогом класичного більярду, представляючи собою балістичний рух з андрєєвським відбиттям, що відбувається на межі розділу з надпровідником. Відбиття Андрєєва - це фундаментальний процес, в якому падаючий на надпровідник електрон перетворюється на дірку, одночасно додаючи куперівську пару до надпровідного конденсату. Електронно-діркова симетрія спектра Андрєєва проілюстрована на рисунках 5.1 і 5.2. Зі збільшенням хімічного потенціалу (μ) одновимірні розв'язки рівнянь Боголюбова - де Женна переходять у двовимірні. Важливо зазначити, що наш аналіз проводився в чистій межі, тобто $l \gg \lambda, \xi$.



Рис. 5.1. Аднрєєвський спектр як функція кутового моменту для більярду 1



Рис. 5.2. Аднрєєвський спектр як функція кутового моменту для більярду 2

Оцінку глибини проникнення та масштаб довжини порядку було виконано в [50]:

$$\begin{cases} \lambda(T) = \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 - t^4}}, & \text{ge } t = \frac{T}{T_c} \\ \xi(T) = \frac{\xi_0 (1 - 0.25t)}{\sqrt{1 - t}}, & (5.1) \end{cases}$$

де $\lambda_0 = 46$ нм, $\xi_0 = 74$ нм, майже характерні довжини свинцю при нульовій температурі в чистій межі. Ми також провели розрахунки для нанодротів MgB_2 , з параметрами: $R_1 = 150$ нм, $R_2 = 200$ нм, $M_z = 0$, $k_z = 0$, $\Delta = 0.003$ еВ та $E_f = 1$ еВ (рис. 5.3 та 5.4).

Спостережувані спектри мають вражаючу схожість з крилами метелика, демонструючи самоподібність і фрактальні характеристики. Ці спектри є яскравим прикладом фрактальних структур, знайдених у сфері квантової фізики. Метелик Гофстедтера, математична конструкція з фрактальною природою, відображає поведінку електронів у присутності магнітного поля. У цьому сценарії магнітне поле змушує вільні електрони рухатися по колах або окружностях.



Рис. 5.3. Андрєєвський спектр для MgB_2



Рис. 5.4. Андрєєвський спектр для MgB_2

Згідно з теорією, коли електрони «ув'язнені» в кристалічній атомній

решітці, їхні траєкторії руху стають значно складнішими. Подібний сценарій виникає в контексті більярду Андрєєва. Фрактальні структури є відносно рідкісними у сфері квантової фізики, тому відкриття метелика Гофстедтера залишалося невловимим протягом значного періоду, частково через експериментальні складнощі, пов'язані з цим. Однак дослідники з Манчестера досягли прориву, спостерігаючи складний візерунок, що нагадує метелика Гофстедтера (рис. 5.5), у графені, підданому впливу магнітного поля.



Рис. 5.5. Метелик - фрактал, що описує спектр електронів у періодичній структурі з магнітним полем [51].

Висновки

Ми дослідили гібридні нанодроти, де нормальна і надпровідна області безпосередній близькості, знаходяться В використовуючи рівняння Боголюбова - де Женна для опису надпровідності в циліндричному нанодроті. Використовуючи програму РҮТНОЛ, ми розробили чисельний метод для розв'язання цих рівнянь і представили попередні результати. Наші зусилля успішно привели до отримання квантових енергетичних рівнів і хвильових функцій надпровідного нанодроту. Обчислений спектр станів демонструє інтригуючі характеристики, що нагадують "більярд Андрєєва". Крім того, ми отримали попередні результати для сценаріїв з магнітним нанодротом і надпровідним нанодротом, що містить вихор. Обчислювальний метод, використаний для надпровідного нанодроту, може бути розширений дослідження сценаріїв як: гібридні нанодроти надпровідникдля феромагнетик і нанодроти, що містять один або кілька квантів надпровідного потоку.

Отримані спектри схожі на метелик Гофстедтера.

Список джерел

- 1. KRUCHININ, S. P. Multiband Superconductors. *Reviews in Theoretical Science*, 2016, 4.2: 165-178.
- 2. GINZBURG, Vitalii L. What problems of physics and astrophysics seem now to be especially important and interesting (thirty years later, already on the verge of XXI century)?. *Physics-Uspekhi*, 1999, 42.4: 353.
- WIGNER, Eugene; HUNTINGTON, H. B. On the possibility of a metallic modification of hydrogen. *The Journal of Chemical Physics*, 1935, 3.12: 764-770.
- SILVERA, Isaac F.; DIAS, Ranga. Metallic hydrogen. *Journal of Physics:* Condensed Matter, 2018, 30.25: 254003.
- 5. ASHCROFT, Neil W. Metallic hydrogen: A high-temperature superconductor?. *Physical Review Letters*, 1968, 21.26: 1748.
- 6. GINZBURG, Vitalii Lazarevich. Superfluidity and superconductivity in the universe. *Journal of Statistical Physics*, 1969, 1.1: 3-24.
- MANKOVICH, Christopher R.; FORTNEY, Jonathan J. Evidence for a dichotomy in the interior structures of Jupiter and Saturn from helium phase separation. *The Astrophysical Journal*, 2020, 889.1: 51.
- 8. DIAS, Ranga P.; SILVERA, Isaac F. Observation of the Wigner-Huntington transition to metallic hydrogen. *Science*, 2017, 355.6326: 715-718.
- Ginzburg V L, Landau L D, in Landau L D Collected Papers (Oxford: Pergamon Press, 1965) p. 546
- 10.BARDEEN, John; COOPER, Leon N.; SCHRIEFFER, John Robert. Theory of superconductivity. *Physical review*, 1957, 108.5: 1175.
- 11.ALLEN, Ph B.; DYNES, R. C. Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed. *Physical Review B*, 1975, 12.3: 905.

- 12.BEDNORZ, J. George; MÜLLER, K. Alex. Possible highT c superconductivity in the Ba- La- Cu- O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1986, 64.2: 189-193.
- 13.GRANT, Paul M. High-temperature superconductivity: Four years since Bednorz end Müller. Advanced Materials, 1990, 2.5: 232-253.
- 14.WOLTERS, Ch, et al. Bulk processing of HgBaCuO high T/sub c/superconductors by a two-zone technique. *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, 1995, 5.2: 1506-1509.
- 15.OLIVEIRA, L. N.; GROSS, E. K. U.; KOHN, W. Density-functional theory for superconductors. *Physical review letters*, 1988, 60.23: 2430.
- 16.WEIR, C. E., et al. Infrared studies in the 1-to 15-micron region to 30,000 atmospheres. *Journal of research of the National Bureau of Standards*. *Section A, Physics and chemistry*, 1959, 63.1: 55.
- 17.MAO, H. K. High-pressure physics: sustained static generation of 1.36 to 1.72 megabars. *Science*, 1978, 200.4346: 1145-1147.
- NELLIS, William J. Ultracondensed matter by dynamic compression. Cambridge University Press, 2017.
- 19.DORNHEIM, Tobias; GROTH, Simon; BONITZ, Michael. The uniform electron gas at warm dense matter conditions. *Physics Reports*, 2018, 744: 1-86.
- 20.AKAHAMA, Yuichi, et al. New high-pressure structural transition of oxygen at 96 GPa associated with metallization in a molecular solid. *Physical review letters*, 1995, 74.23: 4690.
- 21.SHIMIZU, K., et al. Superconductivity in oxygen. *Nature*, 1998, 393.6687: 767-769.
- 22.SCHILLING, James S. Superconductivity in the alkali metals. *High Pressure Research*, 2006, 26.3: 145-163.

- 23.FLORES-LIVAS, José A., et al. A perspective on conventional hightemperature superconductors at high pressure: Methods and materials. *Physics Reports*, 2020, 856: 1-78.
- 24.WITTIG, Jörg. Pressure-induced superconductivity in cesium and yttrium. *Physical review letters*, 1970, 24.15: 812.
- 25.TUORINIEMI, Juha, et al. Superconductivity in lithium below 0.4 millikelvin at ambient pressure. *Nature*, 2007, 447.7141: 187-189.
- 26.DROZDOV, A. P., et al. Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. *Nature*, 2015, 525.7567: 73-76.
- 27.ASHCROFT, N. W. Hydrogen dominant metallic alloys: high temperature superconductors?. *Physical Review Letters*, 2004, 92.18: 187002.
- 28.ANDERSON, Philip W. Theory of dirty superconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1959, 11.1-2: 26-30.
- 29.RICHARDSON, R. W. A restricted class of exact eigenstates of the pairingforce Hamiltonian. 1963.
- 30.MATVEEV, K. A.; LARKIN, A. I. Parity effect in ground state energies of ultrasmall superconducting grains. *Physical review letters*, 1997, 78.19: 3749.
- 31.RALPH, D. C.; BLACK, C. T.; TINKHAM, M. Gate-voltage studies of discrete electronic states in aluminum nanoparticles. *Physical review letters*, 1997, 78.21: 4087.
- 32.SCHECHTER, Moshe, et al. Thermodynamic properties of a small superconducting grain. *Physical Review B*, 2001, 63.21: 214518.
- 33.BENNEMANN, Karl-Heinz; KETTERSON, John B. (ed.). Superconductivity: Volume 1: Conventional and Unconventional Superconductors. Springer Science & Business Media, 2008
- 34.STENUIT, Geoffrey, et al. Vortex matter in lead nanowires. *The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems*, 2003, 33.1: 103-107.

- 35.KASUMOV, A. Yu, et al. Supercurrents through single-walled carbon nanotubes. *Science*, 1999, 284.5419: 1508-1511.
- 36.VON DELFT, Jan, et al. Parity-affected superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Physical review letters*, 1996, 77.15: 3189.
- 37.SMITH, Robert A.; AMBEGAOKAR, Vinay. Effect of level statistics on superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Physical review letters*, 1996, 77.24: 4962.
- 38.SIERRA, Germán, et al. Exact study of the effect of level statistics in ultrasmall superconducting grains. *Physical Review B*, 2000, 61.18: R11890.
- 39.INOSHITA, T., et al. Correlated electron transport through a quantum dot: The multiple-level effect. *Physical Review B*, 1993, 48.19: 14725.
- 40.IZUMIDA, Wataru; SAKAI, Osamu; SHIMIZU, Yukihiro. Kondo Effect in Single Quantum Dot Systems–Study with Numerical Renormalization Group Method–. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1998, 67.7: 2444-2454.
- 41.BUITELAAR, M. R.; NUSSBAUMER, T.; SCHÖNENBERGER, C. Quantum dot in the Kondo regime coupled to superconductors. *Physical Review Letters*, 2002, 89.25: 256801.
- 42.UEDA, Akiko; ETO, Mikio. Resonant tunneling and Fano resonance in quantum dots with electron-phonon interaction. *Physical Review B*, 2006, 73.23: 235353.
- 43.PASUPATHY, Abhay N., et al. The Kondo effect in the presence of ferromagnetism. *Science*, 2004, 306.5693: 86-89.
- 44.MATSUBAYASHI, Daisuke; ETO, Mikio. Spin splitting and Kondo effect in quantum dots coupled to noncollinear ferromagnetic leads. *Physical Review B*, 2007, 75.16: 165319.
- 45.VON DELFT, Jan; RALPH, Daniel C. Spectroscopy of discrete energy levels in ultrasmall metallic grains. *Physics Reports*, 2001, 345.2-3: 61-173.

46.LABBÉ, J. BARISIC S. and FRIEDEL. Phys. Rev. Lett, 1967, 19: 1039.

- 47.FRIEDEL, J. BCS superconductivity for weakly coupled clusters. *Journal de Physique II*, 1992, 2.4: 959-970.
- 48.ANNETT, James F. *Superconductivity, superfluids and condensates*. Oxford University Press, 2004.
- 49.GYGI, François; SCHLÜTER, Michael. Self-consistent electronic structure of a vortex line in a type-II superconductor. *Physical Review B*, 1991, 43.10: 7609.
- A. A. Shanenko et al., in Proc. of NATO-ARW: Physical Properties of Nanosystems, eds. J. Bonca and S. Kruchinin (Springer, Berlin, 2008), pp. 340–348.
- 51.HOFSTADTER, Douglas R. Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields. *Physical review B*, 1976, 14.6: 2239.