

UNIWERSYTET IM. ADAMA MICKIEWICZA W POZNANIU

ROZPRAWA DOKTORSKA

**Zbadanie prądu tunelowego w złączach typu metal-
nadprzewodnik trypletowy dla wybranych symetrii
parametru porządku.**

Piotr Wojtuś

Zakład Teorii Ciała Stałego
Wydział Fizyki
Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza

Promotor

Prof. UAM dr hab. Ryszard Wojciechowski

Poznań 2016



ALMA MATER POSNANIENSIS



Spis treści.

Spis treści.....	1
Podziękowania.....	3
Oświadczenie.....	4
Streszczenie.....	5
Summary.....	8
Rozdział 1. Wstęp do nadprzewodnictwa.....	11
Rozdział 1.1 Nadprzewodniki konwencjonalne.....	15
Rozdział 1.1.1 Własności termodynamiczne.....	15
Rozdział 1.1.2 Zarys teorii BCS.....	18
Rozdział 1.1.3 Oddziaływanie elektron – fonon i efektywne sprzężenie elektronów.....	24
Rozdział 1.2 Nadprzewodniki niekonwencjonalne.....	28
Rozdział 1.2.1 Symetria parametru porządku.....	31
Rozdział 1.2.2 Kilka uwag na temat symetrii parametru porządku.....	39
Rozdział 1.2.3 Przykłady funkcji szczeliny energetycznej.....	42
Rozdział 1.3 Złącza nadprzewodzące.....	45
Rozdział 2. Teoria odbicia Andreeva.....	50
Rozdział 2.1 Kwaziklasyczna granica równania Schrödingera.....	50
Rozdział 2.2 Równania Bogoliubowa-de Gennes’a.....	55
Rozdział 2.3 Kwaziklasyczna granica równania Bogoliubova.....	60
Rozdział 2.4 Odbicie Andreeva.....	62
Rozdział 2.5 Formalizm Blonder – Tinkham – Klapwijk (BTK).....	68
Rozdział 2.6 Zachowanie funkcji falowych (zszywanie funkcji).....	74
Rozdział 2.7 Modyfikacja formalizmu BTK.....	84
Rozdział 3. Własności rutenianu strontu – Sr_2RuO_4	87
Rozdział 3.1 Struktura krystalograficzna Sr_2RuO_4	87
Rozdział 3.2 Struktura elektronowa rutenianu strontu i jego powierzchnia Fermiego.....	90
Rozdział 3.2.1 Masa kwazicząstek.....	92
Rozdział 3.3 Anizotropowa przewodność elektryczna.....	93

Rozdział 3.4	Elektronowe ciepło właściwe.....	95
Rozdział 3.5	Podatność magnetyczna.	96
Rozdział 3.6	Kilka uwag o mechanizmach parowania w Sr_2RuO_4	97
Rozdział 3.7	Odkrycie stanu nadprzewodzącego. Pomiary potwierdzające istnienie stanu nadprzewodzącego w Sr_2RuO_4	99
Rozdział 3.7.1	Oporność elektryczna i podatność magnetyczna.	100
Rozdział 3.7.2	Parametry Ginzburga – Landaua.....	101
Rozdział 3.7.3	Ciepło właściwe w stanie nadprzewodzącym.	102
Rozdział 4.	Odbicie Andreeva w układzie ferromagnetyk / izolator / nadprzewodnik Sr_2RuO_4	109
Rozdział 4.1	Kąty krytyczne oraz wirtualne odbicie Andreeva.....	116
Rozdział 4.2	Wybrane stany trypletowe i kształt funkcji parametru porządku.	125
Rozdział 4.3	Rezonans w odbiciu Andreeva i asymetria względem kąta padania.	131
Rozdział 4.3.1	Wpływ fazy parametru porządku na ZBCP.....	141
Rozdział 4.3.2	Asymetria ze względu na kąty padania.....	147
Rozdział 4.4	Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego.	153
Rozdział 5.	Podsumowanie.	156
Rozdział 6.	Bibliografia.....	159

Podziękowania.

Chciałbym podziękować przede wszystkim panu profesorowi Ryszardowi Wojciechowskiemu, który był moim promotorem i kierownikiem pracy, za jego nieocenioną pomoc i opiekę naukową w czasie studiów doktoranckich.

Osobne podziękowania składam panu profesorowi Leonowi Kowalewskiemu za owocne dyskusje i wielką życzliwość.

Chciałbym podziękować również koleżankom i kolegom z Zakładu Teorii Ciała Stałego. Szczególne podziękowania składam pani profesor Andrei Lehmann-Szweykowskiej za uwagi krytyczne i cenne sugestie.

Dziękuję również mojej żonie Kasi za okazane wsparcie i cierpliwość.

Oświadczenie.

Ja, niżej podpisany Piotr Wojtuś, doktorant Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu oświadczam, że przedkładaną rozprawę doktorską pt. „Zbadanie prądu tunelowego w złączach typu metal-nadprzewodnik trypletowy dla wybranych symetrii parametru porządku” napisałem samodzielnie. Oznacza to, że przy pisaniu pracy, poza niezbędnymi konsultacjami, nie korzystałem z pomocy innych osób, a w szczególności nie zlecałem opracowania rozprawy lub jej części innym osobom, ani nie odpisywałem tej rozprawy lub jej części od innych osób. Jednocześnie przyjmuję do wiadomości, że gdyby powyższe oświadczenie okazało się nieprawdziwe, decyzja o nadaniu mi stopnia doktora zostanie cofnięta.

.....

Streszczenie.

Efekty tunelowe znane są w mechanice kwantowej prawie od samego początku jej istnienia. Tłumaczą one szereg zjawisk fizycznych, których nie można było wyjaśnić na gruncie starszych teorii. Mam tu na myśli mechanikę klasyczną, termodynamikę fenomenologiczną oraz klasyczne ujęcie teorii magnetyzmu i elektryczności. Przed 1900 rokiem nie udało się na przykład wyjaśnić promieniowania ciała doskonale czarnego [1]. Dopiero Max Planck w roku 1900 podał poprawny wzór opisujący rozkład promieniowania ciała doskonale czarnego, co zostało uznane za narodziny mechaniki kwantowej. Mechanika kwantowa odniosła wielki sukces i jest do dzisiaj podstawową i jedyną skuteczną teorią mikroświata. Wprowadziła m. in. termin tunelowanie, który odnosi się do przenikania cząstek przez bariery potencjału do obszarów niedostępnych na gruncie teorii klasycznych.

Przedmiotem niniejszej rozprawy jest zbadanie transportu elektronów przez barierę potencjału utworzoną na granicy faz pomiędzy metalem a nadprzewodnikiem. Badania przeprowadzone w rozprawie są badaniami teoretycznymi, do których wybrano złącze składające się z metalu w stanie normalnym (lub ferromagnetycznym) oddzielonym izolatorem od nadprzewodnika o parowaniu trypletowym. Wzorcowym przedstawicielem nadprzewodnika trypletowego jest rutenian strontu (Sr_2RuO_4) [2]. Nadprzewodnik ten jest pierwszym nadprzewodnikiem o strukturze perowskitu nie zawierającym miedzi. Charakteryzuje się wieloma anomalnymi własnościami [2], [3], [4], [5], [6], [7].

Jego temperatura przejścia w stan nadprzewodzący nie jest imponująca i wynosi ok 1K. Wyróżniającą cechą tego związku jest natomiast struktura krystaliczna podobna do warstwowej struktury wysokotemperaturowych nadprzewodników opartych na związkach miedzi. Kryształ Sr_2RuO_4 uzyskano w tym samym laboratorium IBM, gdzie wykryto pierwszy wysokotemperaturowy nadprzewodnik jakim jest $(La, Ba)_2CuO_4$ [8], ale nie przeprowadzono odpowiednich badań poniżej 4K. Podstawowe własności fizyczne rutenianu strontu dla obu faz, normalnej i nadprzewodzącej, są omówione w rozdziale 3. Między innymi omówiono strukturę elektronową oraz wskazano na podobieństwo w budowie krystalicznej Sr_2RuO_4 do związku $(La, Ba)_2CuO_4$. Zwrócono także uwagę na możliwe mechanizmy parowania elektronów (rozd.3.6). Istnieje duża liczba publikacji opisujących rutenian strontu, tu chciałbym wymienić niektóre z nich: [6], [9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [17].

W badaniach transportu ładunku przez złącza, które zawierają nadprzewodnik, istotną rolę odgrywa zjawisko odkryte w 1964 roku przez rosyjskiego fizyka Alexandra F. Andreeva [18]. Zostało ono omówione szczegółowo w drugim i czwartym rozdziale rozprawy.

Rozdział drugi, w głównej mierze, poświęcony jest omówieniu samego efektu Andreeva oraz formalizmowi użytemu w jego analizie. Do opisu odbicia Andreeva wykorzystano formalizm BTK. Skrót BTK pochodzi od nazwisk Blonder, Tinkham oraz Klapwijk [19]. Teoria BTK (użyta przez jej twórców, w swej oryginalnej wersji, do złącz zawierających nadprzewodniki konwencjonalne), wykorzystuje następujące elementy: kwaziklasyczną granicę równania Schrödingera, równanie Bogoliubowa-de Gennes'a oraz teorię rozpraszania Andreeva. Te zagadnienia zostały omówione w rozdziale 2 zaś rozdział 2.5 został poświęcony formalizmowi BTK. W przypadku spektroskopii Andreeva badamy zależności przewodności złącza zawierającego nadprzewodnik od energii i kierunku spinu padających elektronów. Analiza prądu tunelowego pozwala oszacować jego polaryzację spinową albo może służyć do określenia wartości spinu materiału tworzącego złącze. W niniejszej rozprawie wykorzystano jeszcze inny bardzo istotny i fundamentalny aspekt odbicia Andreeva związany z materiałem nadprzewodzącym wchodzącym w skład złącza. Chodzi mianowicie o symetrię parowania, a konkretnie o odpowiedź na pytanie czy odbicie Andreeva rozróżnia różne symetrie parowania.

Rozdział 4 jest poświęcony bezpośrednio temu zagadnieniu. Zaprezentowane są tam wyniki dla wybranych parametrów porządku. W szczególności zbadano i omówiono między innymi: wpływ kierunku spinu na znormalizowaną przewodność różniczkową, kąty krytyczne i ich wpływ na różniczkową przewodność tunelową, wirtualne odbicie Andreeva (ang. Virtual Andreev Reflection (VAR)), rezonans w odbiciu Andreeva łącznie z asymetrią względem kąta padania, tzw. Zero Bias Conductance Peak (ZBCP), wpływ fazy nadprzewodnika na ZBCP oraz wpływ zewnętrznego pola magnetycznego. Ponadto przedyskutowano problem unitarności i nieunitarności nadprzewodzących parametrów porządku (stanów nadprzewodzących). Z uwagi na to, że rozważamy złącza, w których najważniejszą rolę odgrywa nadprzewodnik, w rozprawie omówiono bardziej szczegółowo następujące zagadnienia: wstęp do nadprzewodnictwa, nadprzewodniki niekonwencjonalne oraz zjawisko odbicia Andreeva. Dysponując wynikami teoretycznymi można zaprojektować i przeprowadzić pomiary eksperymentalne, których wyniki mogą wspierać lub podważać teorię o występowaniu nadprzewodnictwa niekonwencjonalnego w rutenianie strontu.

Rozdział 4 zawiera szczegółowe omówienie wyników opublikowanych w [20], [21], [22] a także prezentowanych przez autora niniejszej rozprawy na następujących konferencjach:

- „ The European Conference Physics of Magnetism'02”, Poznań, 2002r. Konferencja międzynarodowa.
- „Nanostructured Systems: Basic Properties and Technology – MAGNA 2004”.Będlewo. Sesja plakatowa na konferencji krajowej.
- „ The European Conference Physics of Magnetism'05”, Poznań, 2005r. (Konferencja międzynarodowa).
- „XI Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa. Zjawiska kolektywne i ich współzawodnictwo.” Kazimierz Dolny 2005r.

W 2006 roku autor niniejszej rozprawy odbył miesięczną praktykę studencką w Laboratorium Reakcji Nuklearnych im. Flerova (Flerov Laboratory of Nuclear Reactions) znajdującego się przy Instytucie badań Nuklearnych w Dubnej (Rosja).

Summary.

Examination of the tunnelling current in the metal / isolator / triplet superconductor for chosen pairing symmetries.

Tunnelling effects have been known from the beginning of Quantum Mechanics. These effects can provide explanations for various physical phenomena which cannot be explained on the ground of the older theories. Bear in mind, I have got the classical mechanics, phenomenological thermodynamics and classical approach to magnetism and electricity. It had been impossible to explain black body radiation until 1900. Max Planck gave the proper formula, which describes the distribution in the spectrum of the black-body, in this same year. This moment has been chosen as the birthday of Quantum Mechanics. Quantum Mechanics has achieved numerous successes by providing explanations for phenomena in the microscopic scale and it is treated as the basic and only successful microscopic theory. The terminology of the tunnelling was forged soon after the birthday of Quantum Mechanics, which describes the process of the particle passing through the barrier into the area, which is not accessible for the classical particles.

The subject of this thesis is the theoretical investigation of electron transport through the potential barrier created on the border between normal metal (or ferromagnetic) and superconductor. The border between the metal and the superconductor with the slab of an isolator between them is called the interface. One side of the interface may contain normal or ferromagnetic metal, the other one is a piece of triplet superconductor. The representative triplet superconductor is strontium rutheniate and its chemical formula is as follows: Sr_2RuO_4 [2]. This specimen appears to be the first superconductor with the crystallographic structure of perovskite, which has got a pairing mechanism and an order parameter described as triplet. It is characterized by a number of anomalous properties [2], [3], [4], [5], [6], [7]. The critical temperature of strontium rutheniate is not impressive and it is equal to approx. 1 K. These types of superconductors are very often called “p-wave superconductors”. Their distinguishing feature is the crystallographic structure which is similar to the structures of copper based high temperature superconductors. The specimen of Sr_2RuO_4 had been obtained in the same laboratory where the first high temperature superconductor material was found, such as $(La, Ba)_2CuO_4$. Unfortunately, investigations were not carried out below 4K for strontium rutheniate at that time. The story of exposing superconductivity in Sr_2RuO_4 with the properties of the normal and superconductor phases of this specimen is shortly described in the chapter 3. Among other things, similarities in the crystallographic and electron bands structures between Sr_2RuO_4 and $(La, Ba)_2CuO_4$ are being discussed as well.

Attention is also paid to the possible mechanisms of electron pairing (section 3.6). There are a lot of papers about strontium rutheniate and I would like to quote some of them here: [6], [9], [10], [11], [12], [13], [14], [15], [16], [17].

These papers allowed me to shape a point of view about superconductivity and about the tunnelling effects located on the phase border between the metal and the superconductor. The order parameters, which we expect to be found in Sr_2RuO_4 , have been selected for numerical calculations. For comparison other order parameters have also been chosen. The physical phenomena discovered by Alexander. F Andreev [18] in 1964, plays a very important role in the field of research. This phenomenon is described in the second and fourth Chapters of this thesis. The second Chapter is mainly devoted to a discussion of the Andreev effect and a formalism used in its analysis. The following elements were discussed in Chapter 2: the quasiclassical limit of the Schrödinger equation, quasiclassical limit of the Bogoliubov equations and Andreev scattering. Chapter 2.5 is dedicated to BTK formalism. BTK is the abbreviation of Blonder, Tinkham and Klapwijk [19]. In terms of Andreev spectroscopy we examine the dependence of conductivity versus energy and the direction of the spins of the incident electrons. An analysis of the tunnelling current leads us either to an estimation of spin polarization in the current or it can provide information about the distribution of the spins in the bulk superconductor.

In this thesis, we analyse another very important aspect of the Andreev reflection, namely, the pairing symmetry and we asked the following question: can Andreev spectroscopy distinguish between different types of pairing symmetry? Chapter 4 is designated for this question. We presented our results for the proposed order parameters. In particular, the following physical phenomenon associated with Andreev spectroscopy were examined: the influence of the spin direction and critical angles on the normalized differential conductivity, the virtual Andreev reflection (VAR), the resonance in the Andreev reflection and the asymmetry of the tunnelling probability expressed in terms of incident angles, the Zero Bias Conductance Peak (ZBCP), and the influence of the phase of the superconductive order parameters on ZBCP. The influence of the external magnetic fields on the results is investigated as well. In addition, we discussed the problem of unitarity and non-unitarity of superconducting order parameters (superconducting states). Having theoretical results one can design and carry out some experimental tests which can support or reject the proposed order parameters of this unconventional superconductor.

Chapter 4 contains the results which have been published by the author of this thesis. The following papers were published [20], [21], [22] and the results were presented at the following conferences, as well:

- "The European Conference Physics of Magnetism'02", Poznań, Poland, 2002. Poster session during the international conference.
- "Nanostructured Systems: Basic Properties and Technology – MAGNA 2004", Będlewo, Poland. Poster session during this national conference.
- "The European Conference Physics of Magnetism'05", Poznań, Poland, 2005. Poster session during the international conference.

- “XI National School of Superconductivity. XI Krajowa Szkoła Nadprzewodnictwa. Zjawiska kolektywne i ich współzawodnictwo.” Kazimierz Dolny, Poland, 2005r. Oral presentation.

The author of this dissertation participated in the student scholarship and carried out physical experiments in Flerov Laboratory of Nuclear Reactions at the Joint Institute for Nuclear Research in Dubna, Russia. This scholarship took place in 2006 and the subject of the experiment referred to: Search for rare modes of fission fragments decay.

Rozdział 1. Wstęp do nadprzewodnictwa.

Z życia codziennego znamy pojęcia takie jak: przewodnik, półprzewodnik oraz izolator. Występują wokół nas. Jednym z prostszych kryteriów klasyfikacji ciał stałych jest ich podział ze względu na przewodność elektryczną lub opór właściwy [23]. Poniższa tabela prezentuje zakresy oporu właściwego [Ωm] dla różnych typów ciał stałych. Podział ten jest niepełny i nie uwzględnia innych własności fizycznych takich np. jak nadprzewodnictwo czy też magnetyzm, teorię struktury pasmowej, struktury krystalicznej, etc.

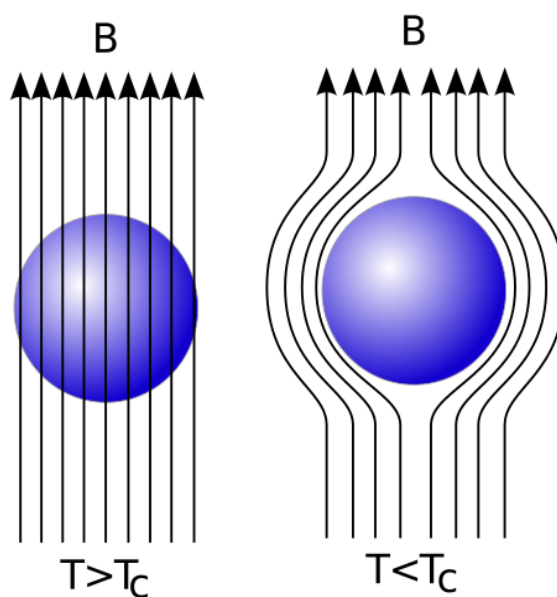
Przewodniki	$10^{-8} - 10^{-6}$
Półprzewodniki	$10^{-6} - 10^3$
Dielektryki (izolatory)	$10^3 - 10^{16}$

Tabela 1-1. Zakresy oporów właściwych ciał o różnych własnościach elektrycznych [Ωm] [23].

Paul Drude w 1900r zaproponował jedną z pierwszych teorii, zwaną modelem Drudego, opisujących mechanizm przewodnictwa elektrycznego [24], które wynika z zaproponowanego przez Drudego równania kinetycznego. Teoria ta, jest teorią klasyczną i bazuje na założeniu o swobodnym ruchu elektronów, które zderzają się z nieruchomymi jonami. W 1905 Lorentz rozszerzył model Drudego wprowadzając do niego rozkład Boltzmannna. Dalszym rozwinięciem teorii Drudego jest praca Arnolda Sommerfelda [25] oraz praca A. Sommerfelda i H. Bethe [26], w której autorzy uwzględniają fermionowy charakter elektronów poprzez rozkład Fermiego – Diraca. To podejście daje poprawny opis przewodnictwa elektronowego, w prostych metalach nie uwzględnia ono jednak oddziaływań kulombowskich pomiędzy elektronami oraz pomiędzy elektronami i jonami. Teoria ta nazywana jest dzisiaj teorią Drudego – Sommerfelda. W 1911 następuję odkrycie przez Heikego Kamerlingha-Onnesa nowego zjawiska fizycznego - nadprzewodnictwa [27]. H. Kamerlingh-Onnes dokonał pomiaru oporu elektrycznego rtęci w temperaturze ciekłego helu. Okazało się, że w temperaturze 4.2K opór rtęci zmalał od 0.1Ω do wielkości rzędu $10^{-5}\Omega$. Bazując na współczesnych pomiarach oporu, w których wykorzystuje się prąd zaindukowany w nadprzewodniku o kształcie pierścienia, zmierzony opór właściwy jest mniejszy niż $10^{-23}\Omega m$, a prąd nadprzewodzący był obserwowany przez 2 i pół roku [28], [29]. Dzisiaj wiemy, przejście fazowe od stanu normalnego do nadprzewodzącego jest przejściem ciągłym i zgodnie z przewidywaniami teoretycznymi oporność właściwa w temperaturze krytycznej (T_C) spada do zera. Powyżej tej temperatury materiał traci swoje własności nadprzewodzące. Temperatura T_C jest zdefiniowana i mierzona w przypadku braku zewnętrznego pola magnetycznego. Niemniej w przypadku niezerowego zewnętrznego pola magnetycznego, T_C okazuje się być funkcją tego pola.

W roku 1933 ukazała się praca W. Meissnera oraz R. Ochsenfelda odkrywająca nowe zjawisko dotyczące nadprzewodnictwa polegające na wypychaniu pola magnetycznego z obszaru nadprzewodnika [30]. Zjawisko to jest przykładem idealnego diamagnetyzmu, tzn., że wewnątrz nadprzewodnika indukcja magnetyczna $B = 0$ [31]. Krzywą namagnesowania nadprzewodnika przedstawiono schematycznie na rysunku 1-2 a. Taki kształt mają krzywe namagnesowania dla długich walcowatych próbek, umieszczonych w polu magnetycznym równoległym do ich osi [31]. Nadprzewodniki o takim zachowaniu nazywamy nadprzewodnikami I rodzaju. W tym miejscu należy zaznaczyć, że stan nadprzewodzący może być zniszczony przez: zwiększenie temperatury powyżej T_C , umieszczenie nadprzewodnika w polu magnetycznym o indukcji powyżej wartości krytycznej oraz przepływ prądu o natężeniu prądu powyżej wartości krytycznej dla danego nadprzewodnika. W przypadku nadprzewodników I rodzaju wartości krytyczne pola magnetycznego oraz prądu są małe. Wartości pól krytycznych są rzędu $(10^{-4} \div 10^{-2}) T$. Materiały takie jak, Pb, Hg, Nb i inne wykazujące nadprzewodnictwo zalicza się do nadprzewodników I rodzaju. Istnieje grupa materiałów, np.: stopy metali, nadprzewodniki organiczne, fazy A15, fazy Chevrela, materiały ciężko-fermionowe, a także fulereny i nadprzewodniki wysokotemperaturowe [32], które są zaliczane do nadprzewodników II rodzaju. W przypadku tych materiałów pole magnetyczne, którego wartość znajduje się pomiędzy dwoma wartościami krytycznymi H_{C1} , H_{C2} , wnika do wnętrza nadprzewodnika. W takim przypadku mówimy o niepełnym efekcie Meissnera. Fazę tę nazywamy „stanem mieszanym Abrikosova” [33]. Różnicę w zachowaniu nadprzewodników I oraz II rodzaju przedstawiono na rysunku 1.2. Nadprzewodzące próbki np. w kształcie cylindra lub pierścienia wykazują zjawisko kwantowania strumienia magnetycznego. Kwantowanie odnosi się do faktu, że strumień pola magnetycznego, w którym znajduje się próbka, nie może przyjmować dowolnych wartości. Stwierdzono, że strumień pola magnetycznego jest wielokrotnością $h/2e$. Wielkość ta została określona, jako kwant pola magnetycznego wygenerowanego przez prąd nadprzewodzący w nadprzewodniku w kształcie pierścienia [29]

W roku 1957 ukazała się praca J. Bardeena, L.N. Coopera oraz J.R. Schrieffera [34], w której zaproponowano mikroskopową teorię nadprzewodnictwa opartą na fononowym mechanizmie parowania. Była to pierwsza teoria mikroskopowa nadprzewodnictwa, zwana od nazwisk jej twórców teorią BCS. Zgodnie z teorią BCS, elektrony oddziałują z siecią krystaliczną (fononami) i w wyniku tego oddziaływania tworzą się pary Coopera, które poniżej T_C tworzą kondensat Bosego o własnościach nadprzewodzących. Efektywne oddziaływanie pomiędzy elektronami jest przyciągające. Dwa elektrony, tworzące parę Coopera posiadają przeciwne kierunki spinów i pędów [35]. Teoria ta, opisuje grupę nadprzewodników klasycznych zwanych też nadprzewodnikami konwencjonalnymi, lub z uwagi na zerowy całkowity spin pary, nadprzewodnikami singletowymi. Model nadprzewodnictwa opartego na oddziaływaniu fononowym jest jednym z najstarszych i został bardzo dobrze potwierdzony eksperymentalnie.

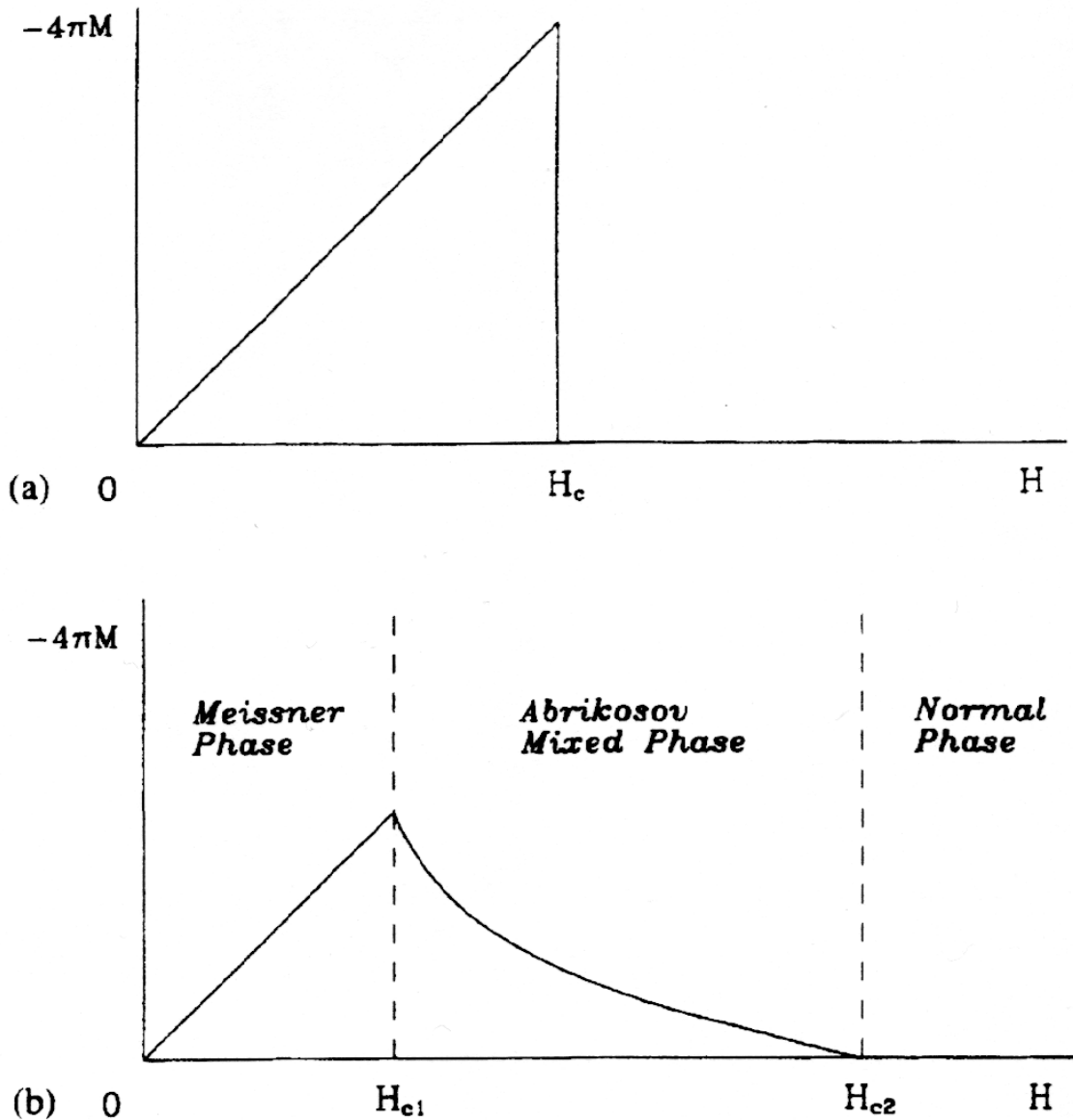


Rysunek 1-1. Wypychanie słabego, zewnętrznego pola magnetycznego ze środka nadprzewodnika dla $T < T_c$. W temperaturze powyżej T_c pole magnetyczne jest obecne w próbce [29].

Z mechanizmem fononowym związany jest efekt izotopowy. W 1950 roku odkryto przesunięcie temperatury krytycznej dla próbek rtęci zawierających różne izotopy tego pierwiastka. Do badań wykorzystano izotop rtęci ^{198}Hg oraz naturalnie występującą rtęć o średniej atomowej masie 200.6 [u] [36]. Odkrycie to zostało później zinterpretowane, jako potwierdzenie słuszności teorii BCS. Temperatura krytyczna dla przejścia rtęci w stan nadprzewodnictwa zależy od masy atomowej izotopu jak

$$T_c \propto M^{-1/2}. \quad (1-1)$$

Wykonano szereg eksperymentów z wykorzystaniem nadprzewodników i dla niektórych z nich, stwierdzono rozbieżności w zakresie stosowalności wzoru (1-1). Rozbieżności te zostały wyjaśnione w [37] oraz [38]. Eksperymenty przeprowadzone na próbkach nadprzewodzących, zaliczanych do klasy wysokotemperaturowych nadprzewodników, wykazały redukcję efektu izotopowego [39], [40] lub jego brak [41]. W przypadku Y-Ba-Cu-O (YBCO) [41] pomiary efektu izotopowego mogą sugerować istnienie innego mechanizmu parowania niż mechanizm fononowy. Odnotowano istnienie odwróconego efektu izotopowego dla próbek takich jak Pd-H (D) [42] oraz Pd-Ag-D [43]. Efekt ten opisuje wzrost temperatury krytycznej nadprzewodnika wraz ze wzrostem masy atomowej izotopu. Istnieją jednak nadprzewodniki, dla których teoria BCS nie stosuje się i mechanizm parowania może być wynikiem np. wymiany wirtualnych bozonów, innych niż fonony. Mogą to być np. magnony, plazmony lub ekscytony [44]. Teorie zajmujące się innymi mechanizmami niż mechanizm fononowy są określane mianem „niekonwencjonalnych”.



Rysunek 1-2. a) Namagnesowanie objętościowej próbki nadprzewodnika, wykazującego pełny efekt Meissnera (idealny diamagnetyzm), jako funkcja pola magnetycznego. Powyżej pola krytycznego H_c próbka jest normalnym nadprzewodnikiem, którego namagnesowanie jest zbyt małe, żeby było widoczne w tej skali.

b) Krzywa namagnesowania nadprzewodnika II rodzaju. Strumień magnetyczny zaczyna wnikać do próbki przy polu H_{c1} . Pomiędzy H_{c1} a H_{c2} próbka jest w stanie mieszanym i wykazuje nieskończoną przewodność elektryczną aż do H_{c2} . [31] [45]

Teoria przejść fazowych Ginzburga – Landaua wprowadza pojęcie parametru porządku [46]. Dla nadprzewodników parametr ten jest powiązany z wielkością i kształtem szczeliny energetycznej w nadprzewodniku. Dla konwencjonalnych nadprzewodników parametr ten jest izotropowy, a niekonwencjonalne nadprzewodniki charakteryzują się anizotropowym parametrem porządku np. anizotropowy spin – singlet, anizotropowy spin – tryplet [47].

Rozdział 1.1 Nadprzewodniki konwencjonalne.

Rozdział 1.1.1 Własności termodynamiczne.

Przejście metalu w stan nadprzewodzący bez obecności pola magnetycznego jest przejściem drugiego rodzaju. W przejściach drugiego rodzaju zwanych też przejściami ciągłymi, w punkcie przemiany fazowej tzn. w punkcie krytycznym, ciągłe są potencjały termodynamiczne i ich pierwsze pochodne. Nieciągłe są drugie pochodne potencjałów termodynamicznych. W przejściach drugiego rodzaju, np. entropia i objętość są funkcjami ciągłymi i nie występuje ciepło przemiany. W równowadze termodynamicznej potencjał Gibbsa w fazie normalnej (G_n) i nadprzewodzącej (G_s) dla danej temperatury T , są sobie równe, co umożliwia wyznaczenie pola krytycznego H_C dla nadprzewodników pierwszego rodzaju z następującego warunku:

$$G_n(T, H_C) = G_s(T, H_C) \quad (1-2)$$

Magnetyzacja próbki jest funkcją temperatury T oraz pola magnetycznego H . Różniczka potencjału Gibbsa $G = U - TS - \mu_0 HM + pV$ dla ustalonej temperatury i przy zaniedbaniu pV ma postać $dG = -\mu_0 M dH$. μ_0 jest przenikalnością magnetyczną próżni. Całkowanie dG dla ustalonej temperatury prowadzi do potencjału Gibbsa w postaci sumy dwóch wyrazów. Pierwszy wyraz odpowiada wartości potencjału Gibbsa w temperaturze T przy zerowym polu magnetycznym. Drugi wyraz określa zmianę potencjału Gibbsa w zerowej temperaturze, ale dla zmiany pola magnetycznego od wartości zerowej do H_C .

$$G(T, H_C) = G(T, 0) - \int_0^{H_C} \mu_0 M dH \quad (1-3)$$

Dla nadprzewodnika, który jest idealnym diamagnetykiem ($B = 0$), zachodzi związek $M = -H$, który wynika z relacji $\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M})$. Z wzoru (1-3) otrzymujemy wyrażenie na potencjał Gibbsa w nadprzewodniku:

$$G_s(T, H_C) = G_s(T, 0) + \frac{\mu_0 H_C^2}{2} \quad (1-4)$$

W stanie normalnym, namagnesowanie wyraża się wzorem $M = \chi H$. Podatność magnetyczna χ jest rzędu $\sim 10^{-5}$. Na tej podstawie wzór (1-3) przyjmuje postać:

$$G_n(T, H_C) \cong G_n(T, 0) \quad (1-5)$$

Podstawiając powyższe tożsamości do wzoru (1-2) oraz przenosząc $G_s(T, 0)$ na lewą stronę równania, otrzymuje się:

$$G_n(T, 0) - G_s(T, 0) = \frac{\mu_0 H_c^2}{2} \quad (1-6)$$

Wzór (1-6) wyraża różnicę energii pomiędzy stanem normalnym a nadprzewodzącym. Dla nadprzewodników I rodzaju pola krytyczne są małe i stąd zysk energetyczny jest niewielki, ale istotny [29]. Wykorzystując definicję entropii, $S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_H$ uzyskujemy:

$$S_S(T, 0) - S_N(T, 0) = \mu_0 H_c \frac{dH_c}{dT} \quad (1-7)$$

Zależność pola magnetycznego od temperatury przedstawia się zależnością:

$$H_c(T) = H_0 \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right] \quad (1-8)$$

Z $dH_c/dT < 0$ wynika, że entropia nadprzewodnika jest mniejsza od entropii w stanie normalnym, co oznacza, że stan nadprzewodzący jest stanem „bardziej uporządkowanym”.

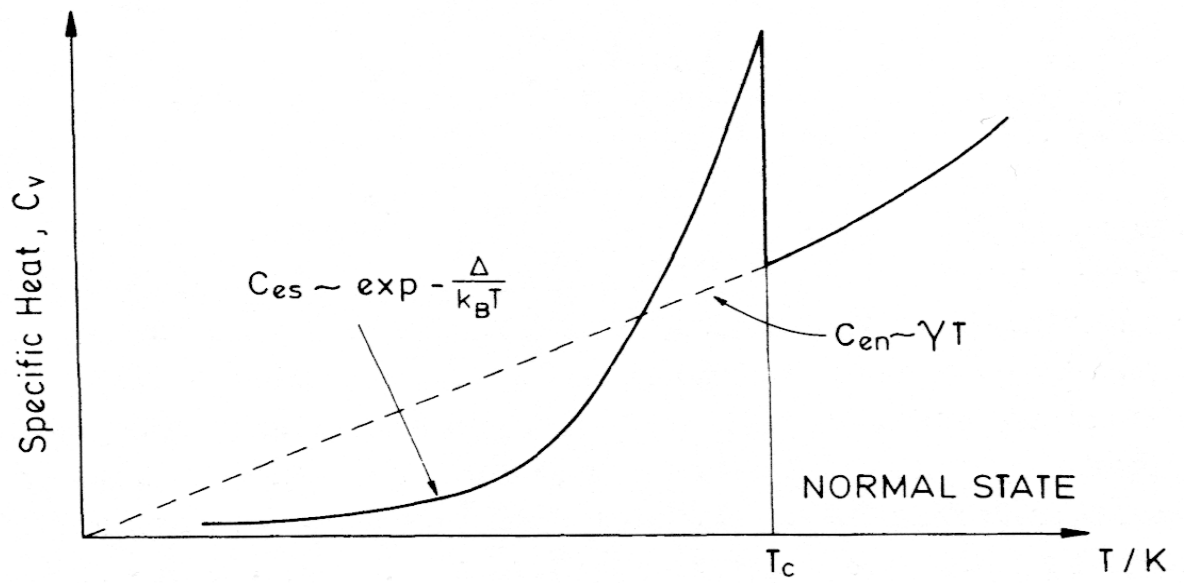
W granicy $T \rightarrow T_c$ wartość pola krytycznego H_c spada do zera, z czego wynika, że $S_S(T, 0) = S_N(T, 0)$. Oznacza to, że entropia jest funkcją ciągłą w temperaturze przejścia i nie pojawia się ciepło przemiany. Przejście metal – nadprzewodnik bez obecności pola magnetycznego, jest zatem przejściem drugiego rodzaju (ciągłym). Obliczając pochodną po temperaturze dla wyrażenia (1-7) otrzymuje się różnicę wyrażań na ciepło właściwe:

$$C_S(T) - C_N(T) = \mu_0 T \left[\left(\frac{dH_c}{dT} \right)^2 + H_c \frac{d^2 H_c}{dT^2} \right] \quad (1-9)$$

W temperaturze krytycznej różnica ta wyraża się zależnością:

$$C_S(T) - C_N(T) = \mu_0 T \left(\frac{dH_c}{dT} \right)_{T=T_c}^2 > 0 \quad (1-10)$$

Ciepło właściwe wykazuje nieciągłość w temperaturze krytycznej, co także jest potwierdzeniem, że przejście metal-nadprzewodnik jest przejściem drugiego rodzaju.



Rysunek 1-3. Schematyczne przedstawienie skoku ciepła właściwego w obszarze temperatury krytycznej dla przejścia fazowego stan normalny – nadprzewodnik [29].

Rozdział 1.1.2 Zarys teorii BCS.

Pierwsza mikroskopowa teoria nadprzewodnictwa, zwana od jej twórców teorią BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) [34], [48], powstała dopiero w roku 1957, prawie pół wieku od odkrycia nadprzewodnictwa. Podstawowym założeniem tej teorii jest przyciągające oddziaływanie pomiędzy elektronami wynikające z oddziaływania elektronów z fononami przewyższające odpychanie kulombowskie. Kiedy przyciągające oddziaływanie przewyższa odpychanie kulombowskie układ elektronowy staje się niestabilny ze względu na możliwość tworzenie się par elektronowych zwanych parami Coopera, które w fazie nadprzewodzącej tworzą naładowaną ciecz składającą się z nieoddziałujących par Coopera. Ciecz ta, przypomina pewnymi własnościami kondensat Bosego-Einsteina złożony z naładowanych cząstek. Można jednak pokazać, że operatory anihilacji i kreacji par Coopera nie spełniają ścisłych reguł komutacyjnych dla bozonów [49]. W teorii BCS źródłem oddziaływania przyciągającego jest oddziaływanie elektronów z siecią krystaliczną (fononami) i takie oddziaływanie bardzo dobrze wyjaśnia zjawisko nadprzewodnictwa w nadprzewodnikach niskotemperaturowych. Warto tutaj wspomnieć, że jakościowe rezultaty teorii BCS nie zależą od źródła potencjału przyciągającego. Nadprzewodniki, których własności bardzo dobrze opisuje teoria BCS nazywane są nadprzewodnikami konwencjonalnymi. Charakteryzują się one najbardziej symetryczną postacią funkcji falowej par Coopera. Pary takie mają zerowy moment pędu i zerowy spin. Nazywane są one dzisiaj również nadprzewodnikami singletowymi (ang. s-wave pairing superconductors, s-wave spin singlet superconductors). Wkrótce po powstaniu teorii BCS rozpoczęły się badania dotyczące tworzenia par Coopera o bardziej złożonej symetrii. Badania te były inspirowane odkrytym w roku 1972 zjawiskiem nadciekłości w He^3 [50] i zapoczątkowały badania nowych fascynujących materiałów, które nazywamy nadprzewodnikami niekonwencjonalnymi.

Teoria BCS pozwala samodzielnie wyznaczyć przerwę energetyczną, a pośrednio czynniki koherencji u_k , v_k i energię E_k wzbudzeń elementarnych zwanych kwazicząstkami Bogoliubowa. Jest to teoria typu średniego pola (przybliżenie Hartree-Focka). Powstanie teorii BCS poprzedziło kilka ciekawych badań:

1. Frölich pokazał [51] [52], że oddziaływanie elektronów z siecią krystaliczną może prowadzić do efektywnego przyciągającego oddziaływania pomiędzy elektronami.
2. Problem Coopera [35], to problem dwóch elektronów o energii większej niż energia Fermiego w obecności efektywnego przyciągającego oddziaływania. Cooper pokazał, że niezależnie od wielkości oddziaływania przyciągającego para elektronów tworzy stabilny stan związany. Parę taką nazywamy dzisiaj parą Coopera.

3. Schrieffer uogólnił zagadnienie jednej pary i skonstruował wieloelektronową funkcję falową.

Rozważmy teraz prosty model opisujący efektywne kontaktowe oddziaływanie pomiędzy elektronami. Hamiltonian, który opisuje takie oddziaływanie, może być wyrażony następująco w języku drugiej kwantyzacji [47]:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^{\dagger} c_{\vec{k}s} + g \sum_{\vec{k},\vec{k}',q} c_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow}^{\dagger} c_{\vec{k}'-\vec{q},\downarrow}^{\dagger} c_{\vec{k}'\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} \quad (1-11)$$

Gdzie \vec{k} jest wektorem falowym elektronu, a \vec{q} to np. wektor falowy fononu biorącego udział w oddziaływaniu. Operatory $c_{\vec{k}}^{\dagger}$ oraz $c_{\vec{k}}$ są operatorami kreacji oraz anihilacji elektronu o danym wektorze falowym \vec{k} . Kierunek spinu jest reprezentowany przez \uparrow, \downarrow . Sumowanie w pierwszym członie równania (1-11) przebiega po wszystkich stanach o danym wektorze \vec{k} i spinie $s = \uparrow, \downarrow$. Pierwszy człon wyraża energię kinetyczną elektronów. Energia pojedynczego elektronu $\xi_{\vec{k}}$ liczona jest względem potencjału chemicznego μ :

$$\xi_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}^2 - k_F^2) \quad (1-12)$$

$\varepsilon_{\vec{k}}$ wyraża energię kinetyczną elektronu o wektorze falowym \vec{k} znajdującego się w pierwszej strefie Brillouina. Drugi człon równania (1-11) opisuje oddziaływanie dwóch elektronów. Mediatorem tego oddziaływania jest np. fonon o wektorze falowym \vec{q} . Oddziaływanie pomiędzy elektronami jest reprezentowane przez stały element macierzy rozpraszania g za pomocą, którego można zdefiniować przyciągający potencjał oddziaływania kontaktowego:

$$U(\vec{r} - \vec{r}') = g \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1-13)$$

Potencjał ten będzie wyrażał przyciągające oddziaływanie dla $g < 0$. Transformata Fouriera wzoru (1-13) wyraża potencjał oddziaływania V , który jest równy g :

$$V(\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}') = \int d^3r U(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = V_{\vec{k},\vec{k}'} = g \quad (1-14)$$

W rozdziale 1.1.3 niniejszej pracy zostanie dla porządku wyprowadzona efektywna mikroskopowa relacja na stałą g dla pary elektronów w ramach teorii BCS tzn., gdy mediatorem oddziaływania są fonony. W dalszych rozdziałach pracy, dotyczących nadprzewodników niekonwencjonalnych podane są również inne możliwe źródła „sklejania” elektronów w pary.

Rozważmy interakcje, dla których spiny elektronów oddziałujących są przeciwne oraz kierunki wektorów falowych elektronów oddziałujących, co do wartości są takie same, ale o przeciwnych zwrotach. Podejście takie pozwala nam zapisać hamiltonian (1-11) w następującej postaci:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + g \sum_{\vec{k},\vec{k}'} c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} \quad (1-15)$$

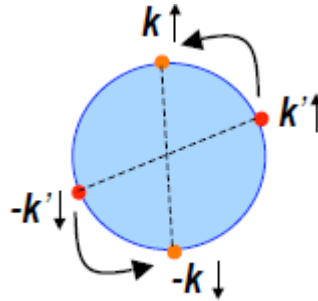
gdzie najpierw zastąpiono (we wzorze (1-11)) \vec{k} przez $-\vec{k}'$, a następnie $-\vec{k}' + q$ przez $-\vec{k}$. Zdefiniujemy wartość średnią (zwaną też średnią anomalną) dla pozadiagonalnych elementów utworzonych z dwóch operatorów anihilacji:

$$b_{\vec{k}} = \langle c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} \rangle,$$

gdzie,

$$\langle A \rangle = Tr[A e^{-\beta H_{mf}}] / Tr[e^{-\beta H_{mf}}]$$

Śreniowanie odbywa się po stanach Hamiltonianu pola średniego H_{mf} , którego jawna postać zostanie podana w dalszej części tego rozdziału. Tak zdefiniowana średnia może być różna od zera tylko dla stanów będących superpozycją stanów zawierających różne liczby cząstek. Średnie takie łamią również globalną symetrie cechowania U(1) (elektromagnetyczną), co ma bezpośredni związek z mechanizmem spontanicznego złamania symetrii Andersona-Higgsa [53], [54], [55].



Rysunek 1-4 Schematyczne przedstawienie oddziaływania elektronów. Całkowy moment pędu pary oddziałujących elektronów przed i po rozpraszaniu wynosi zero [56].

W procesie kondensacji bierze udział makroskopowa liczba cząstek i w przybliżeniu pola średniego fluktuacje wokół wartości średniej (1-16) mogą być pominięte. Wstawienie relacji

$$\begin{aligned} c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} &= b_{\vec{k}} + \{c_{-\vec{k},\downarrow} c_{\vec{k},\uparrow} - b_{\vec{k}}\} \\ c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} &= b_{\vec{k}}^* + \{c_{\vec{k},\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k},\downarrow}^{\dagger} - b_{\vec{k}}^*\} \end{aligned} \quad (1-17)$$

do wzoru (1-15) prowadzi to do hamiltonianu pola średniego:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + g \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \left\{ b_{\vec{k}'}^* c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} + b_{\vec{k}'} c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} - b_{\vec{k}}^* b_{\vec{k}} \right\} \\
&= \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \sum_{\vec{k}} \left\{ \Delta^* c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} + \Delta c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} - \Delta^* b_{\vec{k}} \right\}
\end{aligned} \tag{1-18}$$

W powyższym wzorze wprowadzono nowy parametr Δ , który definiuje wielkość przerwy energetycznej w nadprzewodniku, i który nazywany jest również parametrem porządku:

$$\Delta = -g \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'} \tag{1-19}$$

$$\Delta^* = -g \sum_{\vec{k}'} b_{\vec{k}'}^* \tag{1-20}$$

Hamiltonian (1-18) ma postać formy kwadratowej, którą można zdiagonalizować. W tym celu wprowadza się fermionowe operatory kwazicząstek γ , a liniową operację diagonalizacji nazywa się transformacją Bogoliubowa (Bogoliubowa-Valatina) [57], [45]. Od tego momentu będziemy używać pojęcia kwazicząstki. Wyrażenie dotychczasowych operatorów kreacji i anihilacji poprzez nowe operatory przedstawione jest poniżej:

$$\begin{aligned}
c_{\vec{k}\uparrow} &= u_{\vec{k}}^* \gamma_{\vec{k}1} + v_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}2}^{\dagger} \\
c_{-\vec{k}\downarrow} &= u_{\vec{k}}^* \gamma_{\vec{k}1} + v_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}2}^{\dagger}
\end{aligned} \tag{1-21}$$

oraz analogicznie

$$\begin{aligned}
c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} &= u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}1}^{\dagger} + v_{\vec{k}}^* \gamma_{\vec{k}2} \\
c_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} &= u_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}1}^{\dagger} + v_{\vec{k}}^* \gamma_{\vec{k}2}
\end{aligned} \tag{1-22}$$

Z warunku normowania funkcji falowej

$$|\Phi_{BCS}\rangle = \prod_{\vec{k}} \left\{ u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\vec{k}\downarrow}^{\dagger} \right\} |vac\rangle \tag{1-23}$$

dla elektronów w pobliżu powierzchni Fermiego, które znajdują się w efektywnym potencjale przyciągającym generowanym przez oddziaływanie elektron-fonon wynika, że czynniki koherencji $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ spełniają relację:

$$|u_{\vec{k}}|^2 + |v_{\vec{k}}|^2 = 1 \tag{1-24}$$

Operator kreacji kwazicząstki spełnia równanie ruchu:

$$\frac{d}{dt} \gamma_{\vec{k}s}^{\dagger} = i \left[H_{mf}, \gamma_{\vec{k}s}^{\dagger} \right] = E_{\vec{k}} \gamma_{\vec{k}s}^{\dagger} \tag{1-25}$$

gdzie, $E_{\vec{k}}$ jest energią kwazicząstek, a Hamiltonian średniego pola H_{mf} ma postać:

$$H_{mf} = \sum_{\vec{k}} [\xi_{\vec{k}} - E_{\vec{k}} + \Delta b_{\vec{k}}] + \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} (\gamma_{\vec{k}1}^\dagger \gamma_{\vec{k}1} + \gamma_{\vec{k}2}^\dagger \gamma_{\vec{k}2}) \quad (1-26)$$

Wskaźniki 1 oraz 2 odnoszą się do kwazicząstek o charakterze elektronopodobnym (ang. Electronlike Quasiparticle (ELQ)) i dziuropodobnym (ang. Holelike Quasiparticle (HLQ)). Energia wzbudzeń kwazicząstek dana jest przez wyrażenie:

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta^2} \quad (1-27)$$

Funkcja falowa stanu podstawowego (1-23) w teorii BCS ma postać koherentnej superpozycji przyczynków z różną ilością par Coopera. Czynniki koherencji $u_{\vec{k}}$, $v_{\vec{k}}$ wyrażają się następującymi wzorami:

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right) \quad (1-28)$$

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right) \quad (1-29)$$

Z relacji (1-23) i (1-24) wynika, że prawdopodobieństwo kreacji pary ($k \uparrow, -k \downarrow$) wynosi $|v_{\vec{k}}|^2$, zaś anihilacji $|u_{\vec{k}}|^2 = 1 - |v_{\vec{k}}|^2$.

Widmo hamiltonianu (1-26) posiada dwie gałęzie (rys.1.5) – elektronową i dziurową. Oddziaływanie przyciągające g prowadzi do niestabilności na powierzchni Fermiego. Wynikiem tego jest powstanie szczeliny energetycznej o szerokości 2Δ . Schematycznie przedstawiono tę sytuację na rysunku 1.5. Szczelina energetyczna, która powstała wokół powierzchni Fermiego, jest także wynikiem hybrydyzacji pasm energetycznych dla kwazicząstek o charakterze elektronopodobnym i dziuropodobnym. Funkcja szczeliny energetycznej jest równaniem samogodnym i ma postać:

$$\Delta = -g \sum_{\vec{k}} b_{\vec{k}} = -g \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}}^* v_{\vec{k}} [1 - f(E_{\vec{k}})] = -g \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\vec{k}}}{k_B T}\right) \quad (1-30)$$

gdzie, $f(E) = 1/(1 + e^{E/k_B T})$ jest funkcją rozkładu Fermiego – Diraca, a k_B jest stałą Boltzmana.

Należy zaznaczyć, że funkcja szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ zależy od temperatury. Temperaturę krytyczną T_C definiuje się, jako temperaturę, w której szczelina energetyczna zanika, tzn. $\Delta(T_C) = 0$. Zakłada się ponadto, że oddziaływanie przyciągające jest dużo mniejsze od energii Fermiego. Innymi słowy, oddziaływanie przyciągające jest obecne w wąskim zakresie energii wokół energii Fermiego. Zakres tej energii może być utożsamiany z pewną energią graniczną ε_c (ang. cut-off energy).

Zależność temperatury krytycznej T_C od wielkości ε_c wyraża się wzorem:

$$k_B T_C = 1.14 \varepsilon_c e^{\frac{-1}{|g|N_0}} \quad (1-31)$$

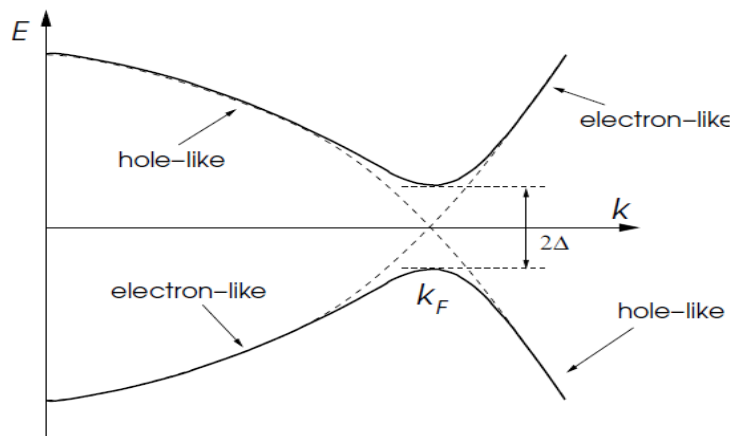
N_0 jest gęstością stanów elektronowych na poziomie Fermiego. Przybliżone wyrażenie określające szczelinę energetyczną w zerze temperatur ma postać:

$$\Delta(T=0) \approx 2\varepsilon_c e^{\frac{-1}{|g|N_0}} = 1.764 k_B T_C \quad (1-32)$$

Kondensacja par elektronów oraz otwarcie szczeliny energetycznej wokół powierzchni Fermiego prowadzi do niższej energii układu. Zysk energetyczny układu nazywa się energią kondensacji. W hamiltonianie (1-26) energia ta odpowiada pierwszemu członowi i może być przybliżona jako:

$$E_{kondensacji} = \sum_{\vec{k}} [\xi_{\vec{k}} - E_{\vec{k}} + \Delta b_{\vec{k}}] \approx -\frac{1}{2} N_0 |\Delta|^2 \quad (1-33)$$

Energia kondensacji zależy od gęstości stanów na poziomie Fermiego i wielkości szczeliny energetycznej w zerze temperatur. Taki wynik jest konsekwencją słabego sprzężenia, ($N_0 |g| \ll 1$), co z grubsza odpowiada założeniu, że potencjał oddziaływania jest dużo mniejszy od energii Fermiego.



Rysunek 1-5. Schematyczne przedstawienie spektrum energetycznego kwazicząstek. Linia ciągła przedstawia spektrum ze skończoną wartością Δ . Linia przerywana przedstawia widmo energetyczne dla $\Delta = 0$ [47].

Rozdział 1.1.3 Oddziaływanie elektron – fonon i efektywne sprzężenie elektronów.

Powróćmy jeszcze na chwilę do samego oddziaływania elektron – fonon. Mediatorem oddziaływania pomiędzy elektronami dla nadprzewodników konwencjonalnych są fonony. Niemniej, nie należy zapominać o odpychającym oddziaływaniu kulombowskim pomiędzy elektronami. Pojawia się pytanie, w jaki sposób oddziaływanie elektronów z siecią krystaliczną, poprzez wymianę fononów modyfikuje odpychające oddziaływanie pomiędzy dwoma elektronami. Odpowiedź na to pytanie znajdujemy w teorii BCS. Transformata Fouriera potencjału kulombowskiego dla dwóch elektronów, o wektorach falowych k oraz k' zmodyfikowanego przez oddziaływanie wielociałowe ma postać

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'} = \frac{4\pi e^2}{q^2 \varepsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (1-34)$$

gdzie, $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$. Względna przenikalność elektryczna $\varepsilon(\vec{q}, \omega)$ opisuje efekt dynamicznego ekranowania elektronów. Efekt ten jest wynikiem fluktuacji ładunku elektrycznego, którego źródłem jest z kolei przemieszczenie ładunku prowadzące do polaryzacji dodatnio naładowanej sieci krystalicznej. Wzór (1-34) może być przedstawiony, jako suma dwóch oddzielnych oddziaływań:

$$V_{\vec{k}, \vec{k}'}^{eff} = \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2} + \frac{4\pi e^2}{q^2 + k_{TF}^2} \frac{\omega_q^2}{\omega^2 - \omega_q^2} \quad (1-35)$$

gdzie, $\hbar\omega = \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}$. Pierwszy człon równania(1-35) jest to ekranowanie Thomasa – Fermiego (TF) [58]. Dla tego typu oddziaływania zaniedbuje się zależności od częstotliwości fononów. Wielkość k_{TF} jest wektorem Thomasa-Fermiego określającym stałą ekranowania. Długość ekranowania λ_{TF} można wyrazić jako:

$$\lambda_{TF} = k_{TF}^{-1} \quad (1-36)$$

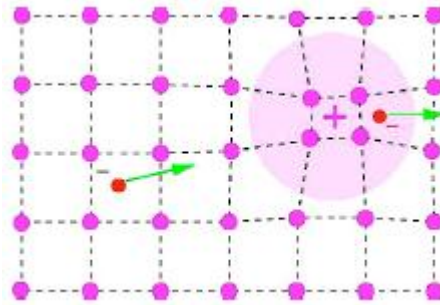
gdzie

$$k_{TF}^2 = \frac{6\pi e^2 n_e}{\varepsilon_F}$$

Długość ekranowania λ_{TF} jest rzędu kilku stałych sieciowych. Jest to, więc oddziaływanie krótkozasięgowe. Wielkość e jest ładunkiem elektronu, a n_e jest koncentracją elektronów. Drugi człon wyrażenia (1-35) wynika z oddziaływania z fononami i właśnie ten wyraz jest odpowiedzialny za efektywne przyciągające oddziaływanie pomiędzy elektronami [47]. W oddziaływaniu tym, uwzględnia się dynamikę jonów sieci krystalicznej. Czasy relaksacji dla jonów sieci krystalicznej są długie w porównaniu do skali czasowej związanej z ruchem elektronów. Elektrony w sieci krystalicznej pokonują znaczne odległości „nie odczuwając” zmian położeń jonów. Takie zachowanie elektronów jest konsekwencją dużej różnicy mas elektronu i jonu w sieci krystalicznej, co prowadzi do tzw. przybliżenia adiabatycznego. Z formalnego punktu widzenia pozwala to na zaniedbanie części wierzchołkowej diagramów Feynmana dla oddziaływania elektron – fonon [59].

Stosowanie przybliżenia adiabatycznego może być nieuzasadnione w przypadku dużych mas efektywnych elektronów, co ma miejsce np. w układach z ciężkimi fermionami [60].

Wielkość $\omega_q = vq$ opisuje spektrum energetyczne fononów akustycznych. Energia Debye'a $\hbar\omega_D$ jest maksymalną energią fononu, charakterystyczną dla danego materiału. W nadprzewodnikach jest to energia odcięcia dla efektywnego przyciągającego oddziaływania kulombowskiego pomiędzy elektronami.



Rysunek 1-6. Schematyczne przedstawienie ekranowania elektronu, jako wynik oddziaływania fononu odkształcającego sieć krystaliczną. Oddziaływanie elektron – fonon – sieć, prowadzi do efektu opóźnienia („the retardation effect of the electron – phonon interaction”). Potencjał oddziaływania dwóch elektronów $V_{k,k'} = \frac{4\pi e^2}{q^2}$ ulega renormalizacji i przyjmuje postać (1-34) [31].

Hamiltonian dla swobodnych fononów ma postać:

$$H_{op} = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} \quad (1-37)$$

gdzie $a_{\vec{q}}^{\dagger}$, $a_{\vec{q}}$ są operatorami kreacji i anihilacji fononów, wielkość $\hbar\omega_{\vec{q}}$ jest energią fononu o częstotliwości $\omega_{\vec{q}}$. Wielkość \vec{q} określa wektor falowy w pierwszej strefie Brillouina. Hamiltonian dla układu swobodnych elektronów ma omówioną już wcześniej postać:

$$H = \sum_{\vec{k},s} \xi_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^{\dagger} c_{\vec{k}s} \quad (1-38)$$

Za wychylenie atomów wraz z towarzyszącymi im elektronami z położenia równowagi (R_0) odpowiedzialne są fonony, które właśnie przez zmianę położenia atomów mają wpływ na potencjał sieci (V) [34], [61], [47]. Hamiltonian oddziaływania elektron – fonon może być zapisany w postaci:

$$H' = \sum_{\vec{k},\vec{k}',s} \left(\frac{\partial V}{\partial R} \right)_0 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{k}}} \right)^{\frac{1}{2}} c_{\vec{k}s}^{\dagger} c_{\vec{k}'s} \left(a_{\vec{q}} + a_{-\vec{q}}^{\dagger} \right) \delta(\vec{k}' + \vec{q} - \vec{k}) + h. c \quad (1-39)$$

gdzie, pochodna liczona jest w punkcie R_0 . Funkcja Diraca zapewnia zachowanie pędu. Następnym krokiem, jest zdefiniowanie dwóch wektorów stanu opisujących stany różniące się o dwa elektrony i jeden fonon. Mają one postać:

$$\psi_1 = |f_{\vec{k}}, f_{\vec{k}'}, n_{\vec{q}} \dots \rangle \quad (1-40)$$

$$\psi_2 = |f_{\vec{k}} + 1, f_{\vec{k}'} - 1, n_{\vec{q}} - 1 \dots \rangle \quad (1-41)$$

Gdzie liczby obsady f oraz n odnoszą się odpowiednio do elektronów i fononów. Obydwa stany należy rozpatrywać, jako dwa stany tego samego układu, w którym to, dokonał się proces rozpraszania elektronu na fononie. W wyniku tego oddziaływania fonon uległ anihilacji, ale jeden z elektronów zyskał dodatkową energię i jego wektor falowy uległ zmianie. Elektron, jako fermion, nie może dzielić tego samego stanu energetycznego i miejsca w przestrzeni z innym elektronem. W tym przypadku można powiedzieć, że elektron został „przeniesiony” przez to oddziaływanie nad powierzchnię Fermiego, a na jego miejscu została wykreowana dziura. Wartość różnicy energii pomiędzy tymi dwoma stanami (bez uwzględnienia zaburzeń) ma postać:

$$\begin{aligned} E_2^{(0)} - E_1^{(0)} &= \\ &= \xi_{\vec{k}}(f_{\vec{k}} + 1) + \xi_{\vec{k}'}(f_{\vec{k}'} - 1) + \hbar\omega_{\vec{q}}(n_{\vec{q}} - 1) - [\xi_{\vec{k}}f_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}'}f_{\vec{k}'} + \hbar\omega_{\vec{q}}n_{\vec{q}}] = \quad (1-42) \\ &= \xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}'} - \hbar\omega_{\vec{q}} \end{aligned}$$

Dolne indeksy oznaczają stany kwantowe a górne rząd poprawki. Poprawka drugiego rzędu dla przypadku, kiedy fonon jest kreowany i dochodzi do oddziaływania między elektronami. Element macierzowy związany z przejściem $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}$ ma postać:

$$E^{(2)} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} D^2 \frac{c_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}-\vec{q}}}{\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}-\vec{q}} - \hbar\omega_{\vec{q}}} \quad (1-43)$$

gdzie,

$$D = \left(\frac{\partial V}{\partial R} \right)_0 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{k}}} \right)^{1/2} \quad (1-44)$$

Po dodaniu dwóch przyczynków, związanych z przejściami $\vec{k}' = \vec{k} - \vec{q}$ i $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ oraz przy założeniu, że $\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}}$, efektywne oddziaływanie pomiędzy elektronami można wyrazić, jako:

$$H^{(2)} = D^2 \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{\omega_{\vec{q}}}{(\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}-\vec{q}})^2 - (\hbar\omega_{\vec{q}})^2} c_{\vec{k}'+\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}'} c_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger c_{\vec{k}} \quad (1-45)$$

Dla małych różnic energii elektronów $\xi_{\vec{k}} - \xi_{\vec{k}-\vec{q}}$, w porównaniu do energii fononu $\hbar\omega_{\vec{q}}$, znak oddziaływania efektywnego elektron-elektron może być ujemny, co prowadzi do przyciągania pomiędzy elektronami i obniżenia energii układu. Porównując wzór (1-45) z wzorem (1-11) widzimy, że efektywne przyciągające oddziaływanie opisywane parametrem g we wzorze (1-11) może wynikać z oddziaływania elektron-fonon.

Rozdział 1.2 Nadprzewodniki niekonwencjonalne.

Jak już wspomnieliśmy nadprzewodnictwo konwencjonalne jest związane z parowaniem typu s-wave. W tym przypadku para elektronów posiada całkowity spin równy zero ($S = 0$) oraz całkowity moment pędu także równy zero ($L = 0$). W analogii do mechaniki kwantowej, para ta opisywana jest izotropową funkcją falową i dlatego typ tego parowania określa się, jako s-wave. Słabe przyciąganie pomiędzy elektronami w ośrodku materialnym pochodzi od wymiany wirtualnego fononu i ekranowania odpychania kulombowskiego pomiędzy dwoma elektronami. Występowanie nawet niewielkiego przyciągania pomiędzy elektronami prowadzi do kondensacji bozonowej, która łamię globalną symetrię cechowania $U(1)$ [62].

Nadprzewodnictwo konwencjonalne jest z powodzeniem opisywane w ramach teorii BCS łącznie z jej uogólnieniem na przypadek silnego sprzężenia zwanego teorią Eliashberga [63]. Za nadprzewodniki niekonwencjonalne, uznaje się te materiały, które w punkcie przemiany fazowej łamię dodatkowe symetrie (np. symetrię sieci krystalicznej, symetrię rotacyjną spinu, symetrię związaną z odwróceniem czasu) lub mechanizm parowania jest oparty na innym mechanizmie niż oddziaływanie fononowe. W celu lepszego opisanie zagadnień związanych z nadprzewodnictwem niekonwencjonalnym wprowadza się uogólnioną teorię BCS [64], [65], [66], [47], [62]. W tym miejscu należy wspomnieć o sukcesie tego podejścia zastosowanego do ^3He . Jest to ciecz fermionowa, w której potencjał oddziaływania ma swoje źródło w oddziaływaniu pomiędzy jądrami atomów typu twardy rdzeń (the hard-core interaction). Występujące pary atomów ^3He , także nazywane parami Coopera, posiadają niezerowy całkowity moment pędu [67], [68], [69]. Parowanie to, określa się mianem p-wave z całkowitym spinem pary $S = 1$ oraz z całkowitym momentem pędu $L = 1$ i jest ono rezultatem fluktuacji spinowych.

Istnieje kilka grup materiałów, które zalicza się do nadprzewodników niekonwencjonalnych. Są to: nadprzewodniki ciężkofermionowe [70], [71], [72], [73], nadprzewodniki wysokotemperaturowe (tlenki metali przejściowych) np. oparte na miedzi [74], związki dla których nadprzewodnictwo istnieje w pobliżu kwantowego punktu krytycznego, który jest odpowiedzialny za zniszczenie elektronowej cieczy Fermiego, nadprzewodniki ferromagnetyczne [75] w tym na bazie żelaza [76], nadprzewodniki organiczne, związki z bizmutem, borowęglowe, fulereny [77] i inne [78].

Nadprzewodniki ciężkofermionowe, należą do tej klasy materiałów, które zawierają w swoim składzie metale ziem rzadkich np. cer lub aktynowce, np. uran. W przypadku tych typów pierwiastków, elektrony przewodnictwa pochodzą z niezapełnionych do końca powłok typu f (4f, 5f). Masa efektywna kwazicząstek w nadprzewodnikach ciężkofermionowych waha się od 100 do 1000 masy swobodnego elektronu.

Nadprzewodnictwo ciężko-fermionowe jest wynikiem kreacji par Coopera z kwazicząstek o tak dużej masie efektywnej. Tak duża masa efektywna powstaje w wyniku hybrydyzacji orbitali 4f. W związku $LaCu_2Si_2$ nie zawierającym elektronów 4f, nie występują ciężkie fermiony i nie wykazuje on właściwości nadprzewodzących. Spośród związków zawierających cer związek $CeCu_2Si_2$ [70] był pierwszym materiałem ciężkofermionowym, w którym odkryto nadprzewodnictwo. Nadprzewodnictwo w tym związku występuje pod normalnym ciśnieniem, w odróżnieniu od szeregu związków ceru wykazujących nadprzewodnictwo pod wpływem wysokich ciśnień, np. $CeRh_2Si_2$ [79], $CeIn_3$ [80]. W grupie nadprzewodników ciężko-fermionowych zaobserwowano nadprzewodnictwo także w związkach opartych na uranie. Do tej podgrupy można zaliczyć między innymi: UBe_{13} [81], UPt_3 [82]. Szczególną cechą nadprzewodnictwa w tych związkach jest współistnienie fazy nadprzewodzącej z uporządkowaniem antyferromagnetycznym.

Do innej klasy nadprzewodników można zaliczyć materiały, które wykazują nadprzewodnictwo w obszarze oddziaływań ferromagnetycznych. W związkach tych, występuje naturalne uporządkowanie spinów, które faworyzuje trypletowy stan spinowy. Jako przykładowe związki wykazujące nadprzewodnictwo współistniejące z ferromagnetyzmem, można wymienić UGe_2 [75], $URhGe$ [83]. W tych materiałach, nadprzewodnictwo pojawia się w pobliżu ferromagnetycznego kwantowego punktu krytycznego, tj. wtedy, kiedy temperatura przejścia ferromagnetycznego $T_C = 9.5 K$. Przypuszcza się, że mediatorem oddziaływań tworzących pary Coopera są magnony [84].

Następną grupą nadprzewodników niekonwencjonalnych są nadprzewodniki wysokotemperaturowe. Nazwa tej grupy odzwierciedla główną cechę tych związków, mianowicie nadprzewodnictwo pojawia się w wyższych temperaturach niż dla pozostałych grup. Na przykład dla $YBa_2Cu_3O_7$ temperatura przejścia oscyluje wokół 92.4K. Temperatura krytyczna silnie zależy od zawartości tlenu [29]. Inny nadprzewodnik mianowicie związek $HgBa_2Ca_2Cu_3O_8$ ma temperaturę krytyczną wynoszącą 133K. Nadprzewodniki wysokotemperaturowe charakteryzują się dużymi polami krytycznymi, które są na ogół większe niż 100 T [85]. Ponadto związki te wykazują silną anizotropię wielu wielkości fizycznych. Ich struktura krystaliczna jest typu perowskitu i składa się z warstw CuO_2 , które są odpowiedzialne za nadprzewodnictwo o charakterze dziurowym bądź elektronowym. Należy zaznaczyć, że w stanie normalnym materiały te są ceramicznymi izolatorami. Na przykład $YBa_2Cu_3O_6$, jest antyferromagnetycznym izolatorem. Proces ich domieszkowania tlenem, który wbudowuje się w łańcuchy CuO , prowadzi do powstania materiału o charakterze metalicznym. Parowanie dla związków wykazujących nadprzewodnictwo o charakterze dziurowym ma na ogół symetrię typu d-wave [86], [62].

Związkiem o analogicznej strukturze krystalicznej, ale o zupełnie odmiennym charakterze nadprzewodnictwa jest rutenian strontu (Sr_2RuO_4). Temperatura przejścia tego związku w stan nadprzewodzący wynosi $T_c \approx 1.5 K$ [2], [87], [88], [89] i z tego powodu trudno zaliczyć go do nadprzewodników wysokotemperaturowych. Ponadto zachodzi podejrzenie, że w tym materiale, mechanizm parowania jest zupełnie inny niż w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych. Symetria parowania dla tego związku jest typu spin tryplet z nieparzystą wartością momentu pary (ang. odd parity pairing).

Rozdział 1.2.1 Symetria parametru porządku.

Nadprzewodnictwo niekonwencjonalne charakteryzuje się anizotropową funkcją szczeliny energetycznej, która może zanikać w pewnych punktach (ang. nodes) lub wzdłuż pewnych linii (ang. node lines) na powierzchni Fermiego. Ponieważ szerokość szczeliny energetycznej liczona jest względem powierzchni Fermiego, szczelina energetyczna w nadprzewodniku w miejscach zerowych „dotyka” powierzchni Fermiego. W dalszej części rozprawy zamiast wyrażenia „punkty lub linie zerowe” zostanie użyta nazwa „struktura nodalna”. Struktura nodalna jest ściśle powiązana z mechanizmem parowania elektronów. Uważa się, że obecność struktury nodalnej może być manifestacją parowania opartego na mechanizmach magnetycznych i jest ona charakterystyczna dla nadprzewodników niekonwencjonalnych [90]. Rozważmy funkcję falową pary elektronów w postaci:

$$\Psi(r, s; r', s') = f(|\vec{r} - \vec{r}'|)\chi(s, s') \quad (1-46)$$

zawierającą część orbitalną $f(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ oraz spinową $\chi(s, s')$. Funkcja falowa opisująca układ dwóch fermionów jest antysymetryczna ze względu zmiany położeń lub spinów tychże fermionów. Można to zapisać w następującej postaci:

$$\Psi(r', s'; r, s) = -\Psi(r, s; r', s') = f(-\{\vec{r} - \vec{r}'\})\chi_{s',s} \quad (1-47)$$

Parzystość funkcji opisującej część orbitalną jest zależna od wartości $(-1)^l$, gdzie l jest wartością własną operatora momentu pędu. Parzystość części spinowej zależy od całkowitego spinu pary elektronów. Założenie, że część orbitalna jest parzysta, wymusza nieparzystość funkcji części spinowej. Podobnie, założenie o nieparzystości funkcji orbitalnej pociąga za sobą parzystość funkcji spinowej. Można to wyrazić w następujący sposób:

$$\begin{cases} f(-\vec{r}) = f(\vec{r}), & \chi_{s,s'} = -\chi_{s',s}, & l = 0, 2, 4, \dots, & S = 0 \\ f(-\vec{r}) = -f(\vec{r}), & \chi_{s,s'} = \chi_{s',s}, & l = 1, 3, 5, \dots, & S = 1 \end{cases} \quad (1-48)$$

Konwencjonalne nadprzewodniki to nadprzewodniki o parowaniu singletowym z $S = 0$ oraz $l = 0$ czyli będące w najbardziej symetrycznym stanie elektronów związanych w parę Coopera. Nadprzewodniki niekonwencjonalne to nadprzewodniki, dla których $l > 0$. Mogą one tworzyć stany o niższej symetrii niż symetria obrotowa, jeżeli uwzględnimy np. efekty pola krystalicznego.

Rozważmy przyciągające oddziaływanie elektronów dla przypadku, w którym zanika całkowity pęd pary. Odpowiedni hamiltonian ma postać [91]:

$$H = \sum_{\vec{k},s} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^{\dagger} c_{\vec{k}s} + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s_1 s_2 s_3 s_4} V_{\vec{k},\vec{k}';s_1,s_2,s_3,s_4} c_{\vec{k}s_1}^{\dagger} c_{-\vec{k}s_2}^{\dagger} c_{-\vec{k}'s_3} c_{\vec{k}'s_4} \quad (1-49)$$

gdzie, element macierzowy rozpraszania można przedstawić, jako:

$$V_{\vec{k},\vec{k}';s_1,s_2,s_3,s_4} = \langle -\vec{k}, s_1; \vec{k}, s_2 | \hat{V} | -\vec{k}', s_3; \vec{k}', s_4 \rangle \quad (1-50)$$

Wzór (1-49) opisuje bardziej złożone symetrie parowania niż te podane w hamiltonianie (1-15), w tym interesujące nas parowanie trypletowe. Z reguł antykomutacyjnych dla fermionów wynikają związki:

$$V_{\vec{k},\vec{k}';s_1,s_2,s_3,s_4} = -V_{-\vec{k},\vec{k}';s_2,s_1,s_3,s_4} = -V_{\vec{k},-\vec{k}';s_1,s_2,s_4,s_3} = V_{-\vec{k},-\vec{k}';s_2,s_1,s_4,s_3} \quad (1-51)$$

Elementy macierzowe oddziaływania spełniają również następujący warunek hermitowskości: $V_{\vec{k},\vec{k}';s_1,s_2,s_3,s_4}^* = V_{\vec{k}',\vec{k};s_3,s_4,s_1,s_2}$.

W zakresie słabego oddziaływania (ang. weak coupling regime), które jest przyciągające w zakresie zdefiniowanym przez energię odcięcia ε_C , elementy macierzowe, (1-50) są niezerowe przy czym $\varepsilon_C \ll \varepsilon_F$. W teorii pola średniego pozadiagonalne elementy macierzy rozpraszania (1-50) definiuje się następująco:

$$b_{\vec{k},s,s'} = \langle c_{-\vec{k}s} c_{\vec{k}s'} \rangle \quad (1-52)$$

Jest to uogólnienie wzoru (1-16). Po zastosowaniu przybliżenia pola średniego (teorii BCS) hamiltonian (1-49) przyjmuje następującą postać:

$$H' = \sum_{\vec{k},s} \varepsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}s}^{\dagger} c_{\vec{k}s} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{k},s_1,s_2} \left[\Delta_{\vec{k},s_1,s_2} c_{\vec{k}s_1}^{\dagger} c_{-\vec{k}s_2}^{\dagger} + \Delta_{\vec{k},s_1,s_2}^* c_{\vec{k}s_1} c_{-\vec{k}s_2} \right] + K + \dots \quad (1-53)$$

gdzie,

$$K = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \sum_{s_1,s_2,s_3,s_4} V_{\vec{k},\vec{k}';s_1,s_2,s_3,s_4} \langle c_{\vec{k}s_1}^{\dagger} c_{-\vec{k}s_2}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\vec{k}'s_3} c_{\vec{k}'s_4} \rangle \quad (1-54)$$

Zaniedbane zostały wyrazy wyższego rzędu (fluktuacyjne). Pozadiagonalne elementy macierzy rozpraszania, wyrażone wzorem (1-52), nazywane są także amplitudami pary i są one określone poniżej T_C . Można je rozwinąć na harmoniki sferyczne [62].

Funkcja szczeliny energetycznej $\Delta_{\vec{k},s,s'}$ jest funkcją wektora falowego \vec{k}' , oraz spinów s, s' . Można ją wyznaczyć z następujących samozgodnych równań, które jednocześnie definiują funkcję szczeliny energetycznej:

$$\begin{aligned}\Delta_{\vec{k},s,s'} &= - \sum_{\vec{k}',s_3s_4} V_{\vec{k},\vec{k}';s,s',s_3,s_4} b_{\vec{k}',s_3s_4} \\ \Delta_{\vec{k},s,s'}^* &= - \sum_{\vec{k}',s_1s_2} V_{\vec{k}',\vec{k};s_1,s_2,,s',s} b_{\vec{k}',s_2s_3}^*\end{aligned}\quad (1-55)$$

Szczelinę energetyczną (1-55), można przedstawić jako macierz zespoloną o wymiarze 2×2 w przestrzeni spinów:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\vec{k},\uparrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k},\uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\vec{k},\downarrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k},\downarrow\downarrow} \end{pmatrix}\quad (1-56)$$

Struktura funkcji, opisującej szczelinę energetyczną, jest związana z funkcją falową pary Coopera [62], [92]. Pozadiagonalne elementy macierzy (1-52) mogą być przedstawione jako iloczyn części orbitalnej i spinowej:

$$b_{\vec{k},s_1s_2} = \phi(\vec{k})\chi_{s_1s_2}\quad (1-57)$$

Parzystość funkcji (1-57) jest zdefiniowana w analogiczny sposób jak parzystość funkcji falowej (1-46). Załóżmy, że część orbitalna jest określona poprzez parzystą funkcję, wtedy część spinowa jest określana, jako singlet spinowy ($S=0$):

$$\phi(\vec{k}) = \phi(-\vec{k}) \Leftrightarrow \chi_{s_1s_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)\quad (1-58)$$

W przypadku, kiedy część orbitalna jest nieparzysta, część spinowa przyjmuje trzy wartości związane z parowaniem trypletowym ($S=1$):

$$\phi(\vec{k}) = -\phi(-\vec{k}) \Leftrightarrow \chi_{s_1s_2} = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}\quad (1-59)$$

Funkcja szczeliny spełnia zatem relacje:

$$\Delta_{\vec{k},s_1s_2} = -\Delta_{-\vec{k},s_2s_1} = \begin{cases} \Delta_{-\vec{k},s_1s_2} = -\Delta_{\vec{k},s_2s_1} & - \text{parzystość} \\ -\Delta_{-\vec{k},s_1s_2} = \Delta_{\vec{k},s_2s_1} & - \text{nieparzystość} \end{cases}\quad (1-60)$$

co, może być zapisane w postaci macierzowej:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = -\hat{\Delta}_{-\vec{k}}^T\quad (1-61)$$

W przypadku parowania singletowego, funkcja $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ opisana wzorem (1-56), jest macierzą antysymetryczną i może być wyrażona za pomocą funkcji skalarnej $\psi(k)$:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \Delta_{\vec{k},\uparrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k},\uparrow\downarrow} \\ \Delta_{\vec{k},\downarrow\uparrow} & \Delta_{\vec{k},\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \psi(k) \\ -\psi(k) & 0 \end{pmatrix} = i\hat{\sigma}_y\psi(k) \quad (1-62)$$

gdzie $\hat{\sigma}_y$ jest jedną ze spinowych macierzy Pauliego, a $\psi(k) = \psi(-k)$. Dla parowania singletowego spełniona jest zatem relacja:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}}\hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger = |\psi(k)|^2\hat{\sigma}_0 \quad (1-63)$$

gdzie $\hat{\sigma}_0$ jest dwuwymiarową macierzą jednostkową. W przypadku parowania trypletowego zapis za pomocą funkcji skalarnej jest niewystarczający. Wygodnie jest wprowadzić funkcję wektorową $\vec{d}(\vec{k})$ posiadającą trzy składowe [66]:

$$\vec{d}(\vec{k}) = [d_x(\vec{k}), d_y(\vec{k}), d_z(\vec{k})]. \quad (1-64)$$

Wprowadźmy wektor Pauliego $\vec{\sigma}$, którego poszczególne składowe wyrazimy za pomocą macierzy Pauliego:

$$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} \quad (1-65)$$

Mnożenie skalarne $\vec{d}(\vec{k}) \circ \vec{\sigma}$ można przedstawić jako:

$$\begin{aligned} & d_x(\vec{k})\sigma_x + d_y(\vec{k})\sigma_y + d_z(\vec{k})\sigma_z = \\ & = \begin{bmatrix} 0 & d_x(\vec{k}) \\ d_x(\vec{k}) & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -id_y(\vec{k}) \\ id_y(\vec{k}) & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_z(\vec{k}) & 0 \\ 0 & -d_z(\vec{k}) \end{bmatrix} = \\ & = \begin{bmatrix} d_z(\vec{k}) & d_x(\vec{k}) - id_y(\vec{k}) \\ d_x(\vec{k}) + id_y(\vec{k}) & -d_z(\vec{k}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1-66)$$

Dokonując przekształcenia polegającego na pomnożeniu macierzy (1-66) przez macierz σ_y oraz przez jednostkę urojoną i otrzymujemy:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{\vec{k}} &= i \begin{bmatrix} d_z(\vec{k}) & d_x(\vec{k}) - id_y(\vec{k}) \\ d_x(\vec{k}) + id_y(\vec{k}) & -d_z(\vec{k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} -d_x(\vec{k}) + id_y(\vec{k}) & d_z(\vec{k}) \\ d_z(\vec{k}) & d_x(\vec{k}) + id_y(\vec{k}) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1-67)$$

Wzór (1-67) można przedstawić w postaci

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = i (\vec{d}(\vec{k}) \circ \vec{\sigma}) \sigma_y \quad (1-68)$$

pamiętając, że spełniona jest relacja $\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}(-\vec{k})$. Obliczmy teraz wartość wyrażenia $\hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger$, które występuje we wzorze na energię wzbudzeń elementarnych. Macierz $\hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger$ ma postać:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger &= [i(\vec{d}(\vec{k}) \circ \vec{\sigma}) \sigma_y]^\dagger = \\ &= -i \sigma_y^\dagger (\vec{d}(\vec{k}) \circ \vec{\sigma})^\dagger = -i \sigma_y^\dagger (\vec{\sigma}^\dagger \circ \vec{d}(\vec{k})^\dagger) = \\ &= -i \sigma_y \left([\sigma_x \quad \sigma_y \quad \sigma_z] \circ \begin{bmatrix} d_x(\vec{k}) \\ d_y(\vec{k}) \\ d_z(\vec{k}) \end{bmatrix} \right) \end{aligned} \quad (1-69)$$

W dalszych wzorach, dla uproszczenia zapisu zrezygnowano z wyrażania wektora $\vec{d}(\vec{k})$ jako funkcji wektora falowego \vec{k} . Po podstawieniu macierzy Pauliego wzór (1-69) przyjmuje postać:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger = \begin{bmatrix} -d_x^* - id_y^* & d_z^* \\ d_z^* & d_x^* - id_y^* \end{bmatrix} \quad (1-70)$$

Wykonując mnożenie macierzy (1-67) oraz (1-70), otrzymujemy wyrażenie na $\hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger$ definiujące widmo wzbudzeń elementarnych w nadprzewodnikach z parowaniem trypletowym.

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger &= \begin{bmatrix} -d_x + id_y & d_z \\ d_z & d_x + id_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -d_x^* - id_y^* & d_z^* \\ d_z^* & d_x^* - id_y^* \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} |d_x|^2 + id_x d_y^* - id_x^* d_y + |d_y|^2 + |d_z|^2 & -d_x d_z^* + id_y d_z^* + d_x^* d_z - id_y^* d_z \\ -d_x^* d_z - id_y^* d_z + d_x d_z^* + id_y d_z^* & |d_z|^2 + |d_x|^2 - id_x d_y^* + id_x^* d_y + |d_y|^2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1-71)$$

Macierz (1-71) można przedstawić w innej równoważnej postaci:

$$\begin{aligned} \hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger &= (|d_x|^2 + |d_y|^2 + |d_z|^2) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} id_x d_y^* - id_x^* d_y & -d_x d_z^* + id_y d_z^* + d_x^* d_z - id_y^* d_z \\ -d_x^* d_z - id_y^* d_z + d_x d_z^* + id_y d_z^* & -id_x d_y^* + id_x^* d_y \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1-72)$$

W macierzy (1-72) występują wyrażenia zawierające takie kombinacje składowych wektora \vec{d} , analogiczne do wyrażeń występujących w iloczynie wektorowym $\vec{d} \times \vec{d}^*$. Mnożenie $\vec{d} \times \vec{d}^*$ wyraża się w postaci:

$$\begin{aligned} \vec{d} \times \vec{d}^* &= [d_x \ d_y \ d_z] \times [d_x^* \ d_y^* \ d_z^*] = \\ &= [(d_y d_z^* - d_z d_y^*) \ (d_z d_x^* - d_x d_z^*) \ (d_x d_y^* - d_y d_x^*)] \end{aligned} \quad (1-73)$$

Postąpimy podobnie jak w przypadku wzoru (1-68) i zbadajmy wynik mnożenia skalarnego wektora $\vec{d} \times \vec{d}^*$ określonego poprzez macierz wierszową (1-73) oraz wektora Pauliego (1-65). Mnożenie skalarne przedstawia się następująco:

$$\begin{aligned} (\vec{d} \times \vec{d}^*) \circ \vec{\sigma} &= \\ &= [(d_y d_z^* - d_z d_y^*) \ (d_z d_x^* - d_x d_z^*) \ (d_x d_y^* - d_y d_x^*)] \circ \begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 0 & d_y d_z^* - d_z d_y^* \\ d_y d_z^* - d_z d_y^* & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -id_z d_x^* + id_x d_z^* \\ id_z d_x^* - id_x d_z^* & 0 \end{bmatrix} + \\ &+ \begin{bmatrix} d_x d_y^* - d_y d_x^* & 0 \\ 0 & -d_x d_y^* + d_y d_x^* \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (1-74)$$

Wykonując dodawanie macierzy w wyrażeniu(1-74) oraz mnożąc całość przez i , wykazano, że, $i (\vec{d} \times \vec{d}^*) \circ \vec{\sigma}$ jest równe drugiej macierzy w równaniu (1-72). Zatem, wyrażenie $\hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger$ (patrz wzór (1-71)) można przedstawić w prostszej postaci:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger = |\vec{d}|^2 \hat{\sigma}_0 + i (\vec{d} \times \vec{d}^*) \circ \vec{\sigma} \quad (1-75)$$

Parowanie trypletowe, dla którego wyrażenie

$$\vec{q}(\vec{k}) = i (\vec{d} \times \vec{d}^*) \circ \vec{\sigma} \neq 0 \quad (1-76)$$

nazywane jest parowaniem nieunitarnym. Parowanie nieunitarne oznacza, że średnia wartość spinu jest niezerowa i wynosi $tr(\hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger \vec{\sigma})$. Oznacza to, że stan nieunitarny prowadzi do złamania symetrii odwrócenia czasu. Jeżeli $\vec{q}(\vec{k}) = 0$, to mamy do czynienia z parowaniem unitarnym.

Diagonalizacja Hamiltonianu (1-53) oparta na transformacji Bogoliubowa prowadzi do uzyskania wyrażeń na energię wzbudzeń. W przypadku parowania Hamiltonian (1-53) wygodnie jest przedstawić w postaci:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} C_{\vec{k}}^\dagger \hat{\varepsilon}_{\vec{k}} C_{\vec{k}} + K' \quad (1-77)$$

gdzie:

$$C_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} C_{\vec{k}\uparrow} \\ C_{\vec{k}\downarrow} \\ C_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger \\ C_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (1-78)$$

$$\hat{\varepsilon}_{\vec{k}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \xi_{\vec{k}} \hat{\sigma}_0 & \hat{\Delta}_{\vec{k}} \\ \hat{\Delta}_{\vec{k}}^\dagger & -\xi_{\vec{k}} \hat{\sigma}_0 \end{pmatrix} \quad (1-79)$$

Transformacja Bogoliubowa prowadzi do następującej, diagonalnej postaci Hamiltonianu

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}^\dagger \hat{E}_{\vec{k}} A_{\vec{k}} + K' \quad (1-80)$$

gdzie:

$$A_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} a_{\vec{k}\uparrow} \\ a_{\vec{k}\downarrow} \\ a_{-\vec{k}\uparrow}^\dagger \\ a_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (1-81)$$

oraz

$$\hat{E}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} E_{\vec{k}+} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_{\vec{k}-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_{-\vec{k}+} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_{-\vec{k}-} \end{pmatrix} \quad (1-82)$$

Transformacja Bogoliubowa dana jest przez macierz unitarną $\hat{U}_{\vec{k}}$:

$$\hat{U}_{\vec{k}} = \begin{pmatrix} \hat{u}_{\vec{k}} & \hat{v}_{\vec{k}} \\ \hat{v}_{-\vec{k}}^* & \hat{u}_{-\vec{k}}^* \end{pmatrix} \quad (1-83)$$

z uwzględnieniem następujących relacji:

$$C_{\vec{k}} = \hat{U}_{\vec{k}} A_{\vec{k}} \quad (1-84)$$

$$\hat{E}_{\vec{k}} = \hat{U}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\varepsilon}_{\vec{k}} \hat{U}_{\vec{k}} \quad (1-85)$$

$$\hat{U}_{\vec{k}} \hat{U}_{\vec{k}}^\dagger = \hat{U}_{\vec{k}}^\dagger \hat{U}_{\vec{k}} = \hat{1} \quad (1-86)$$

W przypadku parowania unitarnego, gdzie energia wzbudzeń kwazicząstek o charakterze dziuropodobnym jest równa energii wzbudzeń kwazicząstek o charakterze elektronopodobnym:

$$E_{\vec{k}} = E_{\vec{k}+} = E_{\vec{k}-} \quad (1-87)$$

rozwiązanie zagadnienia własnego prowadzi do następujących wyrażeń na czynniki koherencji:

$$\hat{u}_{\vec{k}} = \frac{(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}}) \hat{\sigma}_0}{\sqrt{2E_{\vec{k}}(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}})}} \quad (1-88)$$

$$\hat{v}_{\vec{k}} = \frac{-\hat{\Delta}_{\vec{k}}}{\sqrt{2E_{\vec{k}}(E_{\vec{k}} + \xi_{\vec{k}})}} \quad (1-89)$$

Energia wzbudzeń kwazicząstek w przypadku parowania unitarnego przyjmuje postać:

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\Delta_{\vec{k}}|^2} \quad (1-90)$$

gdzie

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \text{tr} (\hat{\Delta}_{\vec{k}}^{\dagger} \hat{\Delta}_{\vec{k}}) \quad (1-91)$$

Dla parowania nieunitarnego wzory określające macierze transformacji $\hat{u}_{\vec{k}}$ oraz $\hat{v}_{\vec{k}}$ mają bardziej skomplikowaną formę [92]. Macierze $\hat{u}_{\vec{k}}$ oraz $\hat{v}_{\vec{k}}$ określają także odpowiednio prawdopodobieństwo kreacji pary Coopera $|v_{\vec{k}}|^2$ lub prawdopodobieństwo jej anihilacji $|u_{\vec{k}}|^2$ (1-23). W przypadku parowania nieunitarnego energia wzbudzeń kwazicząstek o charakterze dziuropodobnym $E_{\vec{k}+}$ lub o charakterze elektronopodobnym $E_{\vec{k}-}$ wyraża się wzorem:

$$E_{\vec{k}\pm} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + |\vec{d}|^2 \pm |i(\vec{d} \times \vec{d}^*)|} \quad (1-92)$$

Energia wzbudzeń określona przez (1-92) w przeciwieństwie do energii wzbudzeń określonej równaniem (1-90), nie jest dwukrotnie zdegenerowana.

Rozdział 1.2.2 Kilka uwag na temat symetrii parametru porządku.

Własności symetrii parametru porządku wynikają z symetrii hamiltonianu. Jest on niezmienniczy względem operacji symetrii grupy $\mathcal{G} = SU(2) \times K \times U(1) \times SO(3)$ kryształu, będącej iloczynem prostym grupy obrotu spinu $SU(2)$, operatora odwrócenia czasu K , grupy symetrii cechowania $U(1)$ i grupy obrotu $SO(3)$. W kryształach dopuszczalne obroty są zdeterminowane symetrią punktową kryształu i grupę obrotu $SO(3)$ należy wtedy zastąpić grupą punktową G kryształu. Symbol \times oznacza iloczyn prosty grup (ang. direct product of groups) [90]. Przyjrzyjmy się bliżej operacji odwrócenia czasu.

Operator odwrócenia czasu \hat{K} działając na stan elektronowy $|\vec{k} \uparrow\rangle$ daje nowy stan o następujących własnościach:

$$\hat{K} |\vec{k} \uparrow\rangle = |-\vec{k} \downarrow\rangle \quad (1-93)$$

W przypadku nadprzewodników o parowaniu singletowym stan ten jest odpowiednim partnerem dla stanu wyjściowego $|\vec{k} \uparrow\rangle$. W tym przypadku, elektrony opisane przez stany $|\vec{k} \uparrow\rangle$ oraz $|-\vec{k} \downarrow\rangle$ są składnikami pary Coopera [93]. W przypadku parowania trypletowego, stan opisany wzorem (1-93) nie może być partnerem do utworzenia pary Coopera. W parowaniu trypletowym spiny elektronów tworzących parę muszą być równoległe. Dla tego typu parowania należy zastosować złożenie dwóch operacji, a mianowicie: odwrócenia czasu oraz inwersji. Operację działania operatora inwersji przedstawiono poniżej:

$$\hat{I} |\vec{k} \uparrow\rangle = |-\vec{k} \uparrow\rangle \quad (1-94)$$

Złożenie działania dwóch operacji tj. odwrócenia czasu i inwersji daje nam:

$$\hat{I}\hat{K} |\vec{k} \uparrow\rangle = |\vec{k} \downarrow\rangle \quad (1-95)$$

Działania operatorów opisane równaniami (1-93), (1-94) oraz (1-95) pozwalają uzyskać wszystkie możliwe trypletowe stany parowania [94]. Działanie operatora \hat{K} na operator anihilacji i funkcję szczeliny energetycznej przedstawia się następująco:

$$\hat{K} c_{\vec{k}s} = \sum_{s'} (-i \hat{\sigma}_y)_{s s'} c_{-\vec{k},s'}^\dagger \quad (1-96)$$

$$\hat{K} \hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{\sigma}_y \hat{\Delta}_{\vec{k}}^* \hat{\sigma}_y \quad (1-97)$$

gdzie $\hat{K} = -i\hat{\sigma}^y\hat{C}$ zaś \hat{C} jest operatorem sprzężenia zespolonego.

Podobnie można zdefiniować działanie operatora inwersji na operator anihilacji, a także na funkcję szczeliny energetycznej:

$$\hat{I} c_{\vec{k},s} = c_{-\vec{k},s} \quad (1-98)$$

$$\hat{I} \hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{\Delta}_{-\vec{k}} = \begin{cases} +\hat{\Delta}_{\vec{k}} & (\text{parowanie singletowe}) \\ -\hat{\Delta}_{\vec{k}} & (\text{parowanie trypletowe}) \end{cases} \quad (1-99)$$

Operator związany z obrotem ma następujące właściwości:

$$\hat{g} c_{\vec{k},s} = c_{R(g)\vec{k},s} \quad (1-100)$$

$$\hat{g} c_{\vec{k},s}^\dagger = c_{R(g)\vec{k},s}^\dagger \quad (1-101)$$

$$\hat{g} \hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{\Delta}_{R(g)\vec{k}} \quad (1-102)$$

gdzie $R(g)$ jest macierzą obrotu odpowiadającą działaniu operatora \hat{g} na wektor \vec{k} . Operator związany z obrotem spinu ma właściwości zdefiniowane poniżej:

$$\hat{g} c_{\vec{k},s} = \sum_{s'} D_{\mathcal{G}(g)}(g)_{s s'} c_{\vec{k},s'} \quad (1-103)$$

$$\hat{g} c_{\vec{k},s}^\dagger = \sum_{s'} D_{\mathcal{G}(g)}^*(g)_{s' s} c_{\vec{k},s'}^\dagger \quad (1-104)$$

$$\hat{g} \hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{D}^\tau \mathcal{G}(g) \hat{\Delta}_{\vec{k}} \hat{D} \mathcal{G}(g) \quad (1-105)$$

gdzie,

$$\hat{D} \mathcal{G}(g) = e^{i \vec{S} \cdot \vec{\phi}}. \quad (1-106)$$

$\vec{\phi}$ jest wektorem reprezentującym obrót całkowitego spinu \vec{S} pod wpływem działania operatora \hat{g} . Działanie operatora \hat{g} , zdefiniowane we wzorach (1-103) oraz (1-104), nie wpływa na stan singletowy ponieważ całkowity spin pary elektronów wynosi zero. W przypadku stanu trypletowego, mamy do czynienia z obrotem wektora $\vec{d}(\vec{k})$, co zostało przedstawione poniżej:

$$\hat{g} \vec{d}(\vec{k}) = \hat{R} \mathcal{G}(g) \vec{d}(\vec{k}) \quad (1-107)$$

gdzie $\hat{R} \mathcal{G}(g)$ jest trójwymiarową macierzą obrotu. Działanie związane z grupą cechowania $U(1)$ na operator anihilacji i na funkcję szczeliny energetycznej przedstawia się następująco:

$$\hat{\Phi} c_{\vec{k},s} = c_{\vec{k},s} e^{i\phi/2} \quad (1-108)$$

$$\hat{\Phi} \hat{\Delta}_{\vec{k}} = \hat{\Delta}_{\vec{k}} e^{i\phi} \quad (1-109)$$

Własności symetrii funkcji skalarnej i wektorowej opisujących szczelinę energetyczną zebrano w tabeli:

Operacja	Funkcja skalarna $\psi(\vec{k})$. Parowanie singletowe	Funkcja wektorowa $\vec{d}(\vec{k})$. Parowanie trypletowe
Przestawienie cząstki fermionowej.	$\psi(\vec{k}) = \psi(-\vec{k})$	$\vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}(-\vec{k})$
Obrót orbitalny.	$g \psi(\vec{k}) = \psi(R(g)\vec{k})$	$g \vec{d}(\vec{k}) = \vec{d}(R(g)\vec{k})$
Obrót spinowy.	$g \psi(\vec{k}) = \psi(\vec{k})$	$g \vec{d}(\vec{k}) = \hat{R}\zeta(g) \vec{d}(\vec{k})$
Odbicie czasu.	$\hat{K} \psi(\vec{k}) = \psi^*(-\vec{k})$	$K \vec{d}(\vec{k}) = -\vec{d}^*(-\vec{k})$
Cechowanie U(1).	$\hat{\Phi} \psi(\vec{k}) = e^{i\phi} \psi(\vec{k})$	$\hat{\Phi} \vec{d}(\vec{k}) = e^{i\phi} \vec{d}(\vec{k})$

Tabela 1-2. Zestawienie działania operatorów na skalarną i wektorową funkcję szczeliny energetycznej.

Dla wszystkich nadprzewodników, symetria cechowania jest łamana poniżej T_c . Dla większości nadprzewodników funkcja szczeliny energetycznej posiada tę samą symetrię przestrzenną, jaką posiada struktura krystaliczna związku nadprzewodzącego. W najprostszym przypadku odnosi się to do szczeliny izotropowej wyznaczonej w przestrzeni pędów. W przypadku niekonwencjonalnych nadprzewodników, symetria przestrzenna funkcji szczeliny energetycznej jest niższa niż symetria struktury krystalicznej. W przypadku nadprzewodników niekonwencjonalnych dochodzi do łamania pozostałych symetrii. Mogą zaistnieć przypadki, w których funkcja szczeliny energetycznej jest nieparzysta, dochodzi bowiem do złamania symetrii ze względu na odwrócenie czasu tj. złamana jest symetria K lub złamana jest grupa symetrii związana ze strukturą krystaliczną. W ciałach stałych obrót orbitalny jest ograniczony do grupy symetrii struktury krystalicznej. Wiąże się to z użyciem stanów o zredukowanej symetrii. Zakłada się, że w przypadku występowania sprzężenia spin – orbita kierunki spinów za „zamrożone” i podlegają obrotowi razem z orbitalnym momentem pędu.

Rozdział 1.2.3 Przykłady funkcji szczeliny energetycznej.

Omówione w tym rozdziale funkcje szczeliny energetycznej zostały odzwierciedlone na sferycznej powierzchni Fermiego. Funkcja określona przez równania (1-52) oraz (1-57) nazywana jest również amplitudą pary elektronów [62]. Wielkość szczeliny energetycznej jest określona przez następujące wyrażenia:

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} Tr(\Delta_{\vec{k}}^\dagger \Delta_{\vec{k}}) =$$

$$= \begin{cases} |\psi(\vec{k})|^2 & (\text{parowanie singletowe}) \\ |\vec{d}(\vec{k})|^2 & (\text{parowanie trypletowe – unitarne}) \\ |\vec{d}(\vec{k})|^2 \pm |\vec{d}^*(\vec{k}) \times \vec{d}(\vec{k})| & (\text{parowanie trypletowe – nieunitarne}) \end{cases} \quad (1-110)$$

W przypadku parowania nieunitarnego, wielkość szczeliny $|\Delta_{\vec{k}}|^2$ określona jest przez dwie funkcje, $|\vec{d}(\vec{k})|^2 + |\vec{d}^*(\vec{k}) \times \vec{d}(\vec{k})|$ oraz $|\vec{d}(\vec{k})|^2 - |\vec{d}^*(\vec{k}) \times \vec{d}(\vec{k})|$. W tym przypadku możemy mówić o dwóch różnych szczelinach, realizowanych w jednym nadprzewodniku [47].

Omówimy teraz kolejno cztery różne rodzaje parowania.

Unitarne parowanie izotropowe.

Ten rodzaj parowania jest realizowany zarówno w konwencjonalnych jak i niekonwencjonalnych nadprzewodnikach. W przypadku konwencjonalnego, singletowego parowania, funkcja skalarna opisująca szczelinę ma postać:

$$\psi(\vec{k}) = \Delta_0 \quad (1-111)$$

Wielkość szczeliny określa poniższa równość:

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = |\Delta_0|^2 \quad (1-112)$$

Podobnie jak w przypadku ${}^3\text{He}$ wśród niekonwencjonalnych nadprzewodników, wyróżnia się tylko jeden stan trypletowy o izotropowej symetrii parowania, zwany stanem Baliana – Werthamera [66]. Wektor $\vec{d}(\vec{k})$ jest w tym przypadku postaci:

$$\vec{d}(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} (\hat{x}k_x + \hat{y}k_y + \hat{z}k_z) = \frac{\Delta_0}{k_F} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} \quad (1-113)$$

Wielkość szczeliny wyraża się za pomocą wzoru (1-110) i ma postać:

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} Tr(\Delta_{\vec{k}}^\dagger \Delta_{\vec{k}}) = |\vec{d}(\vec{k})|^2 = \left(\frac{\Delta_0}{k_F}\right)^2 |\vec{k}|^2 = |\Delta_0|^2 \quad (1-114)$$

Stan Baliana – Werthamera opisuje fazę 3He typu B [66]. Choć wielkość szczeliny energetycznej dla funkcji określonych poprzez równania (1-111) oraz (1-113) jest taka sama, niemniej wielkości fizyczne otrzymane z wykorzystaniem tych funkcji charakteryzują się innymi własnościami.

Unitarne parowanie anizotropowe dla stanu singletowego.

Jako przykład rozważymy parowanie z całkowitym spinem $S = 0$ i orbitalnym momentem $l = 2$. Stan ten jest określany jako d-wave. Funkcja szczeliny energetycznej związana z tym stanem wyraża się wzorem [47]:

$$\psi(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} (k_x^2 - k_y^2) \quad (1-115)$$

Funkcja (1-115) posiada dwie linie nodalne dla wektorów k_x oraz k_y spełniających relację $k_y = \pm k_x$. Ten typ parowania realizowany jest w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych.

Unitarne parowanie anizotropowe dla stanu trypletowego.

Stan o następujących parametrach: $S = 1$ oraz $l = 1$ określany jest mianem p-wave. Dla tego przypadku symetrii możemy podać wektor $\vec{d}(\vec{k})$ opisujący funkcję szczeliny energetycznej [47][6]:

$$\vec{d}(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} \hat{z} (k_x \pm ik_y) \quad (1-116)$$

Dla tej funkcji wielkość szczeliny wynosi:

$$|\Delta_{\vec{k}}|^2 = |\Delta_0|^2 \frac{k_x^2 + k_y^2}{k_F^2} \quad (1-117)$$

Funkcja (1-116) posiada punkty nodalne dla wektora $\vec{k} \parallel (0,0,\pm 1)$. Para elektronów znajdująca się w tym stanie posiada rzut wektora momentu pędu $L_z = \pm 1$. Z tego powodu stan ten jest określany mianem „chiralny p-wave” lub „ABM” (analog stanu A zwanego też stanem Andersona-Brinkmana-Morela w 3He) [64], [95], [96].

Parowanie nieunitarne.

Jako przykład stanu nieunitarnego można podać stan opisujący fazę A_1 w cieczy ${}^3\text{He}$ [64], [95]. Wektor $\vec{d}(\vec{k})$ jest przedstawiony jako:

$$\vec{d}(\vec{k}) = \frac{\Delta_0}{k_F} (\hat{x} - i\hat{y})k_z \quad (1-118)$$

Macierz $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$, związana z wektorem $\vec{d}(\vec{k})$, została obliczona na podstawie wzoru (1-68) i ma następującą postać:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = 2 \frac{\Delta_0}{k_F} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & k_z \end{bmatrix} \quad (1-119)$$

Wartość $i(\vec{d} \times \vec{d}^*)$ została obliczona ze wzoru (1-76):

$$i(\vec{d} \times \vec{d}^*) = -\hat{z} \frac{|\Delta_0|^2}{k_F^2} k_z^2 \quad (1-120)$$

Rozdział 1.3 Złącza nadprzewodzące.

Rozdział ten jest poświęcony złączom nadprzewodzącym, to jest takim układom, które w swoim składzie zawierają, co najmniej jeden z elementów w stanie nadprzewodzącym. W celu wyjaśnienia podstawowych własności fizycznych tak skonstruowanych złącz, omówimy po krótku zarówno złącza metaliczne jak i złącza, w których pomiędzy metalem a nadprzewodnikiem znajduje się izolator.

Rozważmy złącze zbudowane ze zwężenia w kształcie cylindrycznym o długości L i średnicy d . Złącze takie, umożliwia zetknięcie np. dwóch różnych metali. Można wyróżnić dwa skrajne przypadki związane z budową złącza. Pierwszym przypadkiem jest układ, dla którego długość złącza L jest dużo mniejsza niż jego średnica d ($L \ll d$). Drugim skrajnym przypadkiem jest układ o odwrotnej zależności geometrycznej, mianowicie gdy $L \gg d$. Rozpatrując związek pomiędzy średnią drogą swobodną elektronu λ , a wymiarami geometrycznymi złącza d , L , można wyróżnić kilka rodzajów transportu elektronów.

Transport dyfuzyjny występuje, gdy wymiary złącza są dużo większe niż średnia droga swobodna elektronu tzn., gdy $\lambda \ll d, L$ (patrz rysunek 1-7a). Transport quasi-dyfuzyjny ma miejsce, gdy $d < \lambda < L$ (patrz rysunek 1-7b). Mówimy natomiast o zachowaniu balistycznym elektronów, gdy wymiary złącza są dużo mniejsze niż średnia droga swobodna elektronów, tzn. gdy $\lambda \gg d, L$ (patrz rysunek 1-7c). Wtedy nie występuje rozpraszanie elektronów w czasie przepływu przez złącze. Dodatkowo można wprowadzić inne skale długości charakteryzujące transport ładunku, takie jak: L_m - długość, na której nie dokonuje się zmiana pędu elektronu (statyczne rozpraszanie), L_ϕ – długość, na której nie dochodzi do zmiany fazy, to znaczy, że zachowana jest koherencja fazowa funkcji falowej (rozpraszanie fluktuacyjne). Transport ładunku będzie od relacji pomiędzy powyższymi długościami charakterystycznymi a geometrią złącza. W przypadku transportu balistycznego zachodzi relacja $L \ll L_m, L_\phi$. Transport dyfuzyjny ma miejsce, gdy $L > L_m$. Zachowanie klasyczne (transport niekoherentny, prawo Ohma) realizuje się, gdy $L_m, L_\phi \ll L$ [62], [97] Rozpraszanie dyfuzyjne ma miejsce w przypadku, kiedy $L > L_m$. Sytuacja ta jest przedstawiona na rysunku 1-7. Dochodzi wtedy do rozpraszania i transmisja cząstek przez złącze jest z tego powodu ograniczona. W zagadnieniach związanych z transportem elektronów przez złącza uwzględnia się także inne aspekty, są to między innymi warunki termiczne czy też lokalizację ładunku [97], [98]. Transport elektronów przez złącza metaliczne zależy między innymi od gęstości stanów oraz od położenia poziomów Fermiego w obydwu częściach złącza. Elektrony będą się przemieszczać z metalu o wyższym poziomie Fermiego do metalu o poziomie niższym. Sytuacja taka, może być wynikiem zetknięcia dwóch różnych próbek metalicznych lub może być wytworzona przez przyłożenie napięcia. Należy zaznaczyć, że przepływ elektronów jest możliwy, o ile występują puste stany po jednej stronie złącza [23], [29].

Proste złącza, zawierające dwa różne metale mogą być zmodyfikowane przez umieszczenie pomiędzy nimi warstwy izolatora. W skończonej temperaturze, obsadzenie poziomów energetycznych jest opisane funkcją rozkładu Fermiego-Diraca, $f(E)$ i w przypadku złącza zawierającego warstwę izolatora elektrony mogą tunelować w obydwie strony. Oznaczmy, jako lewą stronę złącza tę część, która posiada wyższy poziom Fermiego, natomiast część złącza o niższym poziomie Fermiego nazywać będziemy od tej chwili stroną prawą.

Liczba elektronów, które mogą przemieścić się z lewej strony na prawą stronę jest proporcjonalna do liczby stanów obsadzonych przez elektrony $N_1(E)$ po lewej stronie złącza oraz do liczby stanów nieobsadzonych przez elektrony $N_2(E)$ po prawej stronie. Prąd płynący z lewej strony na prawą stronę jest proporcjonalny do wyrażenia:

$$N_1(E - eV)f(E - eV)N_2(E)(1 - f(E)) \quad (1-121)$$

Do lewej strony złącza przyłożono ujemnie napięcie, eV , które wpływa na podwyższenie poziomu Fermiego. Podobne wyrażenie może być napisane do przepływu prądu z prawej strony na lewą. Prąd wypadkowy, jaki przepływa przez złącze jest różnicą ilości elektronów przepływających z lewej na prawą i z prawej na lewą stronę i wyraża się poniższym wzorem:

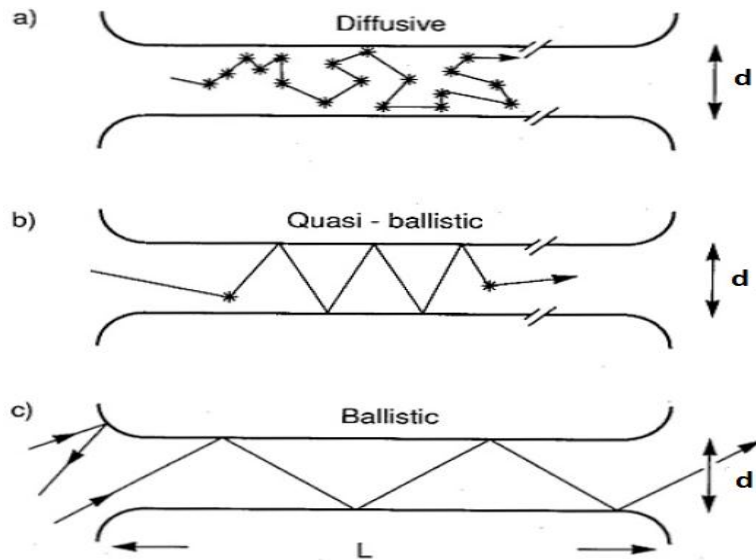
$$I = A \int N_1(E - eV)N_2(E)[f(E - eV) - f(E)]dE \quad (1-122)$$

gdzie macierz tunelowania opisuje prawdopodobieństwo tunelowania przez warstwę izolatora. Zakładając stałą wartość gęstości stanów $N(E)$ dla danego zakresu energii eV , można otrzymać dla małych wartości napięcia V oraz niskich temperatur następującą zależność wyrażającą natężenie prądu:

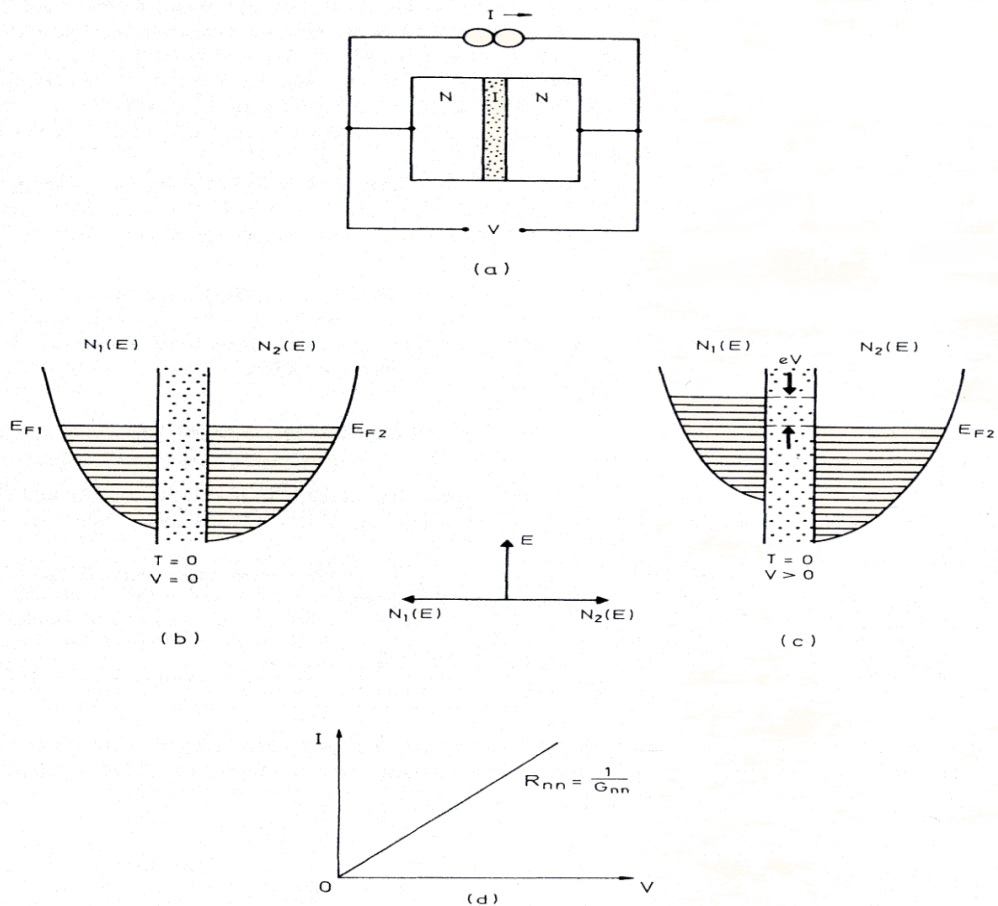
$$I = AN_1(E_F)N_2(E_F)eV = G_{nn}V \quad (1-123)$$

Wielkość G_{nn} reprezentuje przewodność złącza dla przypadku, kiedy obydwa metale znajdują się w stanie normalnym. Takie złącze zachowuje się zgodnie z prawem Ohma, tj. zależność natężenia prądu od przyłożonego napięcia jest liniowa. Sytuacja ta została schematycznie przedstawiona na rysunku 1-8.

Przejdźmy teraz do omówienia układu zawierającego po prawej stronie nadprzewodnik. Struktura elektronowa nadprzewodnika zawiera poziom Fermiego znajdujący się w przerwie energetycznej. Sytuacja ta jest przedstawiona na rysunku 1-9. Pojedyncze elektrony o energiach $|eV| < \Delta$ nie mogą tunelować do nadprzewodnika. Mogą natomiast wnikać dwa elektrony tworząc parę Coopera [62] Proces, w którym elektron wnika w obszar nadprzewodnika i jednocześnie wyrzucana jest z niego dziura nazywa się odbiciem Andreeva [18], [99]. Proces ten, prowadzi do charakterystycznego wzrostu przewodności różniczkowej dI/dV . Rozpatrzmy najpierw układ metal – izolator – nadprzewodnik bez uwzględnienia tego efektu. Szerokość szczeliny energetycznej wynosi 2Δ . Odpowiada to wielkości energii potrzebnej do rozerwania pary Coopera.



Rysunek 1-7. Schematyczne przedstawienie transportu dyfuzyjnego, kwazibalistycznego oraz balistycznego [98].



Rysunek 1-8 Złącze metal – izolator – metal, a) schemat ogólny budowy i pomiaru natężenia, b) układ dwóch metali o tych samych poziomach Fermiego, c) przyłożenie napięcia V do lewej części złącza skutkuje przesunięciem poziomu Fermiego o wielkość energii eV , d) charakterystyka ohmowa złącza [29].

Energie wzbudzenia opisane są równaniem (1-27). Gęstość stanów w obrębie szczeliny wyraża wzór:

$$N(E) = \frac{E N(E_F)}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \quad (1-124)$$

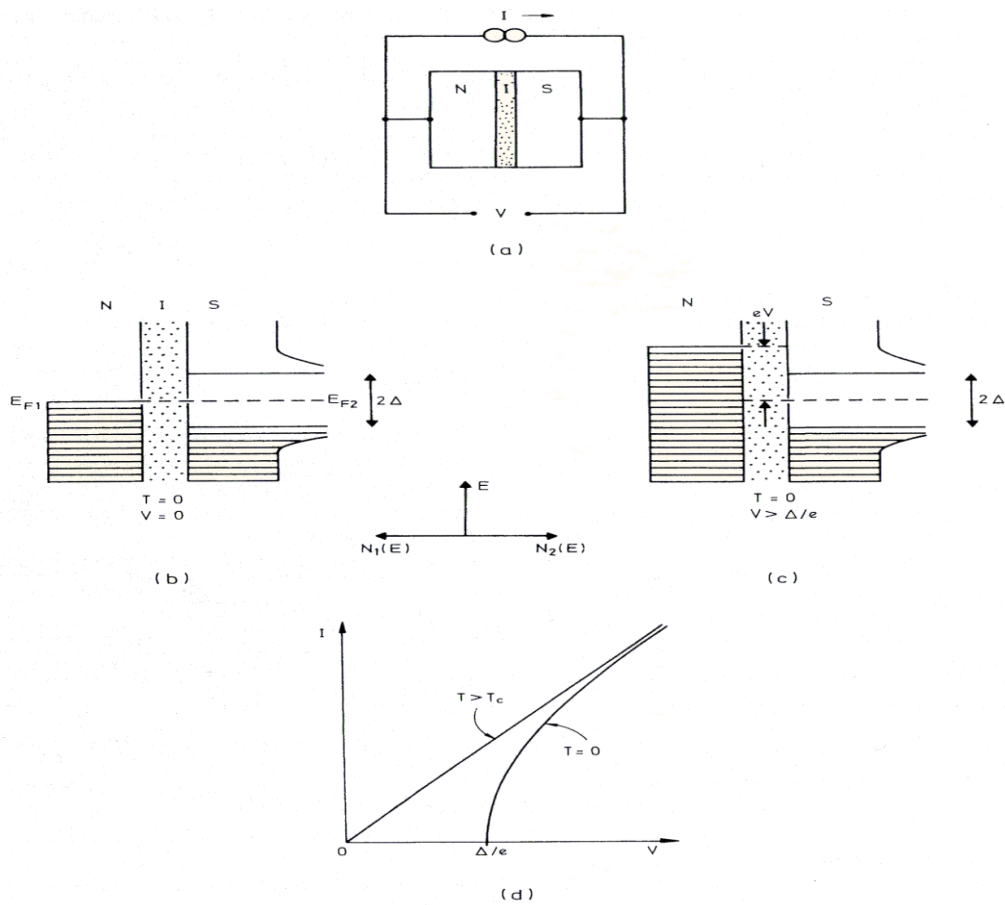
W przypadku, kiedy nie ma przyłożonego napięcia do złącza, elektrony nie mogą tunelować. Sytuacja ta jest przedstawiona na rysunku 1-9 b. Elektrony znajdujące się w metalu na poziomie Fermiego, nie mogą tunelować z powodu przerwy energetycznej. Zakres szczeliny energetycznej nadprzewodnika jest obszarem wzbronionym dla elektronów. Przyłożenie małego napięcia w $T = 0$ nie zmienia obrazu sytuacji. Elektrony zaczynają tunelować dopiero, kiedy napięcie przyłożone do metalu jest większe od $V > \Delta/e$. W przypadku złącza zawierającego nadprzewodnik wyrażenie na prąd tunelowy ma postać:

$$\begin{aligned} I &= A \int_{-\infty}^{+\infty} N_1(E - eV) N_{2s}(E) [f(E - eV) - f(E)] dE = \\ &= \frac{G_{nn}}{e} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{N_{2s}(E)}{N_{2s}(E_F)} [f(E - eV) - f(E)] dE \end{aligned} \quad (1-125)$$

$N_{2s}(E)$ oznacza gęstość stanów w obszarze nadprzewodnika dla energii E , zaś $N_{2s}(E_F)$ oznacza gęstość stanów w obszarze nadprzewodnika dla energii Fermiego. Definiując przewodność złącza jako $G_{ns} = dI/dV$ dla $T = 0$ otrzymuje się:

$$G_{ns} = G_{nn} \frac{N_{2s}(eV)}{N_{2s}(E_F)} \quad (1-126)$$

W niskich temperaturach charakterystyka I-V, przedstawiona na rysunku 1-9 d, jest silnie nieliniowa. Przewodność G_{ns} wyznacza gęstość stanów wzbudzonych dla niskich temperatur.



Rysunek 1-9 Złącze metal – izolator - nadprzewodnik, a) schemat ogólny budowy i pomiaru natężenia, b) wzajemne usytuowanie poziomu Fermiego (metal) oraz szczeliny energetycznej (nadprzewodnik), c) przyłożenie napięcia V do lewej części złącza skutkuje przesunięciem poziomu Fermiego o wielkość energii eV , d) charakterystyka złącza [29].

Rozdział 2. Teoria odbicia Andreeva.

Rozdział ten stanowi wprowadzenie do zagadnień omawianych w dalszej części rozprawy. Jest to niezbędne zarówno dla zrozumienia efektu Andreeva jak i formalizmu BTK [19].

Odbicie cząstki na granicy faz pomiędzy fazą normalną i nadprzewodzącą (N-S) omówione zostało po raz pierwszy przez Andreeva [18], który do tego celu wykorzystał kwaziklasyczną granicę równania Bogoliubowa [45].

Rozdział 2.1 Kwaziklasyczna granica równania Schrödingera.

Od momentu sformułowania w roku 1926 do chwili obecnej równanie Schrödingera jest podstawowym równaniem wykorzystywanym w mechanice kwantowej. Równanie to opisuje zachowanie układów kwantowych, tj. takich, które przejawiają dualizm korpuskularno-falowy. Na początku zajmiemy się granicą kwaziklasyczną równania Schrödingera gdy liczby kwantowe, które opisują układ stają się na tyle duże, że różnice energii pomiędzy poszczególnymi stanami energetycznymi stają się bardzo małe, a układu jeszcze nie można opisać równaniami mechaniki klasycznej.

Zacznijmy od poszukiwania rozwiązania dla niezależnego od czasu równania Schrödingera podanego w standardowej postaci:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U\Psi = E\Psi \quad (2-1)$$

gdzie: ∇ - jest operatorem nabra, Ψ - oznacza funkcję falową układu, U - oznacza energię potencjalną cząstki, zaś E - oznacza energię własną układu.

Postulujemy funkcję falową w następującej postaci:

$$\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (2-2)$$

gdzie S oznacza klasyczną funkcję działania.

Podstawiając wzór (2-2) do (2-1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\left(e^{\frac{i}{\hbar}S}\right)+U\left(e^{\frac{i}{\hbar}S}\right)=E\left(e^{\frac{i}{\hbar}S}\right) \quad (2-3)$$

otrzymujemy:

$$\frac{1}{2m}[(\nabla S)^2-i\hbar(\nabla^2 S)]+U=E \quad (2-4)$$

Równanie (2-4) jest alternatywną postacią równania Schrödingera. Kwaziklasyczne przybliżenie zwane też jako metoda WKB (Wentzla – Kramersa – Brioullina) polega na przedstawieniu S w postaci szeregu potęgowego względem \hbar i podstawieniu tego szeregu do równania (2-4). Zaletą tej metody jest to, że w odróżnieniu od metody perturbacyjnej, nie wymaga ona małości potencjału oddziaływania. Postać tego szeregu jest następująca:

$$S=S^{(0)}+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^1 S^{(1)}+\left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S^{(2)}+\dots \quad (2-5)$$

$S^{(i)}$ oznaczają funkcje stowarzyszone z S , które wyznaczamy z porównania wyrazów przy kolejnych potęgach \hbar . Podstawiając (2-5) do (2-4) i porównując wyrazy do pierwszej potęgi \hbar otrzymuje się układ sprzężonych równań:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m}(\nabla S^{(0)})^2-E+U &= 0 \\ \nabla S^{(0)}\nabla S^{(1)}+\frac{1}{2}\nabla^2 S^{(0)} &= 0 \\ &\dots \end{aligned} \quad (2-6)$$

Warto zaznaczyć, że tylko w niewielu przypadkach można znaleźć rozwiązanie analityczne tych równań. Załóżmy dla prostoty, że układ jest jednocząstkowy i ruch odbywa się w jednym wymiarze. Całkowanie pierwszego równania (2-6) prowadzi do:

$$S^{(0)}(x)=\pm\int\{2m[E-U(x)]\}^{1/2}dx+\text{const} \quad (2-7)$$

lub

$$S^{(0)}(x)=\pm\int p(x)dx+\text{const}$$

gdzie został wprowadzony pęd cząstki, $p(x)$, który jest funkcją położenia. Uwzględniając równanie (2-5) otrzymujemy:

$$S^{(1)}(x)=\ln p(x)^{-\frac{1}{2}}+\text{const} \quad (2-8)$$

Podstawiając (2-5) oraz (2-7) do wzoru (2-2) otrzymujemy wyrażenie na kwaziklasyczną funkcję falową w następującej postaci:

$$\Psi(x) = \frac{a_+}{[p(x)]^{+\frac{1}{2}}} \exp \left[+ \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right] + \frac{a_-}{[p(x)]^{+\frac{1}{2}}} \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx \right] \quad (2-9)$$

gdzie stałe całkowania zostały włączone do amplitud i obydwie znaki równania (2-7) zostały uwzględnione. Gęstość prawdopodobieństwa wyrażona jest poprzez $|\Psi(x)|^2 \approx \frac{1}{p}$, co jest zgodne z intuicją, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w określonym punkcie przestrzeni jest odwrotnie proporcjonalnie do jej prędkości. Innymi słowy, im wolniej cząstka się porusza tym dłużej pozostaje w danym obszarze. Porównując równania (2-3) oraz (2-5) można zauważyć, że kryterium stosowalności mechaniki klasycznej wyraża nierówność:

$$\left(\frac{dS}{dx} \right)^2 \gg \hbar \frac{d^2S}{dx^2} \quad (2-10)$$

W klasycznym przybliżeniu $\frac{dS}{dx} = p(x)$ i korzystając z wyrażenia deBroglie'a, $p = \frac{h}{\lambda}$ możemy zapisać powyższą nierówność w postaci

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll 2\pi \quad (2-11)$$

W klasycznym punkcie zwrotnym, gdzie cząstka zmienia kierunek wektora prędkości na przeciwny, pęd osiąga zero, a długość fali dąży do nieskończoności i relacja (2-4) nie jest spełniona. Przybliżenie kwaziklasyczne zawsze załamuje się w takich punktach. Dokładne rozważania na ten temat [100] pokazują, że całkowitą kwaziklasyczną funkcję falową można przedstawić jako superpozycję funkcji falowych biegnących wzdłuż kierunku $+x$ oraz $-x$ w postaci:

$$\psi^{\text{total}} = \psi^{\text{in}} + \psi^{\text{out}} = e^{\frac{i}{\hbar}S^{\text{in}}} + e^{\frac{i}{\hbar}S^{\text{out}}} \quad (2-12)$$

gdzie daleko od granicy układu:

$$S^{\text{out}} = S^{\text{in}} + \frac{n\pi}{4} \quad (2-13)$$

n jest liczbą całkowitą. Rozważmy układ składający się z N cząstek znajdujących się w przestrzeni o wymiarze $d > 1$.

Jeżeli istnieje transformacja kanoniczna prowadząca do równań Hamiltona zależnych od pojedynczych par kanonicznie sprzężonych współrzędnych, to funkcja wyrażająca klasyczne działanie może być zapisana w postaci sumy:

$$S = \sum_{i=1}^{3N} S_i \quad (2-14)$$

gdzie N jest liczbą cząstek poruszających się w przestrzeni trójwymiarowej. Prowadzi to do separowalności funkcji falowej układu:

$$\Psi = \prod_{i=1}^{3N} \Psi_i, \quad (2-15)$$

gdzie $\Psi_i = e^{\frac{i}{\hbar} S_i}$. Dla przypadku swobodnego elektronu poruszającego się w trójwymiarowej przestrzeni, niezaburzona funkcja falowa ma postać $\Psi \sim \exp(i \vec{k} \circ \vec{r})$. Podstawiając $S(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \circ \vec{r} = \vec{p} \circ \vec{r}$ oraz traktując $U(\vec{r})$ jako zaburzający potencjał skalarny, zaś $\vec{A}(\vec{r})$, jako zaburzający potencjał wektorowy uzyskujemy równanie (2-4) w postaci:

$$E = \frac{1}{2m} \left[\left(\nabla S - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 - i \hbar \nabla^2 S + i \hbar \frac{e}{c} \vec{\nabla} \circ \vec{A}(\vec{r}) \right] + U(\vec{r}) \quad (2-16)$$

Uwzględniając wyrazy najniższego rzędu i po zaniedbaniu wyrazów wyższego rzędu ($\nabla^2 S$ oraz $\vec{\nabla} \circ \vec{A}(\vec{r})$) otrzymujemy przybliżenie:

$$E = \frac{1}{2m} \left(\nabla S^{(0)} - \frac{e}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 + U(\vec{r}) \quad (2-17)$$

Wstawiając $\nabla S^{(0)} = \vec{p}$ otrzymujemy Hamiltonian dla naładowanej cząstki w polu magnetycznym. W przypadku elektronu, znajdującego się w jednorodnym polu magnetycznym, ruch elektronu odbywa się po orbitach spiralnych, a wymóg jednoznaczności funkcji prowadzi do zmiany S o wielokrotność $2\pi\hbar$ i dlatego dla całkowitego obiegu po orbicie otrzymujemy następujący warunek:

$$\oint \left(\hbar \vec{k} + \frac{e}{c} \vec{A} \right) \circ d\vec{r} = n h \quad (2-18)$$

Energia cząstki wyraża się wzorem:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\vec{k}_\perp^2 + \vec{k}_\parallel^2 \right) \quad (2-19)$$

gdzie, \vec{k}_\perp , \vec{k}_\parallel oznaczają składowe wektora \vec{k} odpowiednio prostopadłe i równoległe do przyłożonego pola magnetycznego.

Potencjał wektorowy \vec{A} może być wybrany w ramach dowolności cechowania, ale z ograniczeniem wynikającym np.: ze stałego pola magnetycznego.

Przybliżenie WKB można zastosować do zdegenerowanego gazu swobodnych elektronów. Dla niskoenergetycznych wzbudzeń, można napisać w pobliżu powierzchni Fermiego następującą funkcję falową:

$$\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}(S_F + s)}, \quad (2-20)$$

gdzie $S_F = \vec{p}_F \circ \vec{r}$ jest funkcją działania na powierzchni Fermiego, natomiast s reprezentuje małą poprawkę. Opierając się na postaci funkcji falowej danej przez równanie (2-20) można otrzymać wzór na energię w postaci:

$$E = \frac{1}{2m} \left[\left(\vec{p}_F + \nabla s - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - i\hbar \nabla^2 S + i\hbar \frac{e}{c} \vec{\nabla} \circ \vec{A} \right] + U \quad (2-21)$$

Definiując energię wzbudzenia jako $\varepsilon = |E - \mu|$, gdzie potencjał chemiczny $\mu = \frac{p_F^2}{2m}$, oraz odrzucając wyrazy $(\nabla s)^2$, $-\frac{1}{m} \frac{e}{c} \nabla S \vec{A}$ oraz $-i\hbar \nabla^2 S$ i stosując cechowanie Londona ($\nabla \circ \vec{A} = 0$), w elektrodynamice zwane cechowaniem Kulomba, otrzymujemy równanie (2-21) w postaci:

$$\varepsilon = \vec{v}_F \circ \left(\nabla s - \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \frac{e^2}{2m c^2} \vec{A}^2 + U \quad (2-22)$$

Równanie (2-22) możemy zapisać jako równanie Schrödingera:

$$H' \Psi' = \varepsilon \Psi' \quad (2-23)$$

gdzie

$$H' = \frac{\hbar}{i} \vec{v}_F \circ \left(\nabla - \frac{i}{\hbar} \frac{e}{c} \vec{A} \right) + \frac{e^2}{2m c^2} \vec{A}^2 + U, \quad (2-24)$$

Funkcja falowa $\Psi' \sim e^{\frac{i}{\hbar} s}$ w równaniu (2-23) jest teraz funkcją obwiedni, ponieważ szybkie oscylacje towarzyszące czynnikowi $e^{i\vec{k}_F \circ \vec{r}}$ w wyjściowej funkcji falowej zostały usunięte. Przypadek elektronu poruszającego się w periodycznej strukturze sieci krystalicznej jest bardziej skomplikowany. W przypadku braku zewnętrznego potencjału funkcje falowe mają postać funkcji Blocha, $\Psi \sim \exp(i\vec{k}_F \circ \vec{r}) u_{kn}(\vec{r})$, gdzie funkcja $u_{kn}(\vec{r})$ jest funkcją okresową o periodyczności sieci krystalicznej. Zachowanie elektronów Blocha w polu magnetycznym może objawiać się subtelnymi efektami, takimi jak kwantowanie Onsagera-Lifshitz'a, które stanowi uogólnienie kwantowania Landaua na przypadek dowolnej zależności energii elektronu od wektora falowego i prowadzi np. do efektu de Haasa van Alphen.

Rozdział 2.2 Równania Bogoliubowa-de Gennes'a.

Równania podane w tym rozdziale zostały wyprowadzone przez Bogoliubowa, Tolmacheva i Shirkova w 1959 roku [57]. Podobną metodę opisał de Gennes w 1966 roku [101]. Równania Bogoliubowa – de Gennes'a służą do opisu zachowania się gazu elektronowego w pobliżu granicy układu, centrów rozpraszania oraz innych niejednorodności w układzie. Metoda ta, została także użyta do opisu zjawiska odbicia Andreeva, które zachodzi na granicy nadprzewodnika i metalu. Rozważmy układ składający się z oddziałujących elektronów o masie m i ładunku e znajdujący się w polu magnetycznym, z którym związany jest potencjał wektorowy \vec{A} . Hamiltonian tego układu wyrazimy w reprezentacji drugiej kwantyzacji:

$$\hat{H} = \hat{H}^{(1)} + \hat{V}^{(2)} \quad (2-25)$$

gdzie, $\hat{H}^{(1)}$ jest jednoelektronowym Hamiltonianem i ma postać [45]:

$$\hat{H}^{(1)} = \int d^3\vec{r} \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A} \right)^2 \delta_{\alpha\beta} + U_{\alpha\beta}^{(1)}(\vec{r}) \right] \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \quad (2-26)$$

Postać członu oddziaływania $\hat{V}^{(2)}$ jest następująca:

$$\hat{V}^{(2)} = \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \hat{\Psi}_\delta^\dagger(\vec{r}) \Psi_\gamma^\dagger(\vec{r}') U_{\delta\gamma,\alpha\beta}^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}') \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}) \quad (2-27)$$

gdzie dla liter alfabetu greckiego oznaczających spiny elektronów stosuje się konwencje sumacyjna Einsteina. Człon zawierający potencjał wektorowy opisuje orbitalny ruch pojedynczego elektronu znajdującego się w zewnętrznym polu magnetycznym. Jeżeli zaniedbamy oddziaływanie zewnętrznego pola magnetycznego ze spinem elektronu (efekt Zeemana) oraz efekty relatywistyczne, to można zapisać energię oddziaływania elektronu z potencjałem struktury krystalicznej w postaci:

$$U_{\alpha\beta}^{(1)} = U^{(1)} \delta_{\alpha\beta} \quad (2-28)$$

Założmy, że oddziaływanie pomiędzy dwoma cząstkami nie zależy od spinu, co można wyrazić jako:

$$U_{\delta\gamma,\alpha\beta}^{(2)} = U^{(2)} \delta_{\delta\gamma} \delta_{\alpha\beta} \quad (2-29)$$

Dodatkowo można założyć, że $U_{\delta\gamma,\alpha\beta}^{(2)}$ nie zależy od czasu. $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}), (\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}))$ oznaczają operatory pola, które anihilują (kreują) cząstkę o spinie α w punkcie (\vec{r}) . Operatory te spełniają fermionowe relacje antykomutacji:

$$\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}') + \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}') \hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) = 0 \quad (2-30)$$

oraz:

$$\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r})\hat{\Psi}_\beta(\vec{r}') + \hat{\Psi}_\beta(\vec{r}')\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}) = \delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (2-31)$$

Zakładamy także, że oddziaływanie elektronów jest kontaktowe i może być zapisane w postaci:

$$U^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = -V\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (2-32)$$

gdzie, znak (-) oznacza oddziaływanie przyciągające, $U(\vec{r})$ oznacza średni potencjał jednoelektronowy, a cały układ można uważać za niejednorodny, to znaczy, że $V = V(\vec{r})$. Energie w układach wielu cząstek są zwykle mierzone względem energii Fermiego, μ :

$$\hat{H}'^{(1)} = \hat{H}^{(1)} - \mu\hat{N}, \quad (2-33)$$

gdzie:

$$\hat{N} = \int d^3\vec{r}\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) \quad (2-34)$$

jest operatorem liczby cząstek. W podejściu samozgodnym poszukujemy przybliżonego rozwiązania układu wielu ciał poprzez wprowadzenie efektywnego Hamiltonianu w taki sposób, aby zminimalizować całkowitą energię swobodną układu. W przypadku parowania singletowego efektywny Hamiltonian, może być zapisany, jako:

$$\hat{H}^{(e)} = \int d^3\vec{r}[\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r})H'_0\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) + \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r})V(\vec{r})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})\hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(\vec{r})\hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r})\hat{\Psi}_\downarrow(\vec{r})\hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r})] \quad (2-35)$$

gdzie

$$H'_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \frac{ie}{\hbar c}\vec{A}\right)^2 - \mu \quad (2-36)$$

zaś $\Delta(\vec{r})$ to potencjał parowania pary elektronów. Ze wzoru (2-27) widać, że można otrzymać efektywny Hamiltonian dla parowania trypletowego. W Hamiltonianie (2-35) pojawią się wtedy dodatkowe wyrazy proporcjonalne do $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r})\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r})$ ($\alpha = \uparrow, \downarrow$) oraz wyrazy sprzężone do nich po hermitowsku.

Jak wiadomo, teoria średniego pola w przypadku nadprzewodników dopuszcza nieznikające średnie wartości operatorów, $\hat{\Psi}_\uparrow^\dagger\hat{\Psi}_\downarrow^\dagger$ oraz $\hat{\Psi}_\downarrow\hat{\Psi}_\uparrow$. Wynika to z niezachowania liczby cząstek w stanie BCS. Dla układów w stanie normalnym operatory $\hat{\Psi}$ mogą być wyrażone w dowolnej bazie zupełnej układu funkcji falowych, takich jak na przykład funkcje własne w_n operatora H'_0 . Wtedy $H'_0w_n = \xi_nw_n$, gdzie ξ_n są energiami własnymi określonymi w odniesieniu do poziomu Fermiego. Stąd możemy napisać:

$$\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r}) = \sum_n w_n(\vec{r})\hat{c}_{n\alpha} \quad (2-37)$$

gdzie $\hat{c}_{n\alpha}$ jest operatorem anihilacji cząstki o spinie α będącej w stanie określonym przez liczbę kwantową n .

W przypadku jednorodnych nadprzewodników, Hamiltonian (2-35) może być zdiagonalizowany za pomocą kanonicznej transformacji Bogoliubowa (1-21) przy spełnieniu warunku (1-24), który zapewnia, zachowanie reguł antykomutacyjnych [45], [61]. Dla niejednorodnych nadprzewodników można poszukiwać bardziej ogólnej transformacji, która umożliwi opis np. w przypadku, gdy układ nie jest niezmienniczy translacyjnie, co znaczy, że pęd nie jest dobrą liczbą kwantową i funkcje falowe nie są falami płaskimi. Transformacja diagonalizująca ma następującą postać:

$$\hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}) = \sum_n [u_n(\vec{r})\hat{\gamma}_{n\uparrow} - v_n^*(\vec{r})\hat{\gamma}_{n\downarrow}^\dagger] \quad (2-38)$$

oraz

$$\hat{\Psi}_\downarrow(\vec{r}) = \sum_n [u_n(\vec{r})\hat{\gamma}_{n\downarrow} - v_n^*(\vec{r})\hat{\gamma}_{n\uparrow}^\dagger] \quad (2-39)$$

Równania (2-38) oraz (2-39) mogą prowadzić w pewnych przypadkach do niższej energii swobodnej zapewniając bardziej dokładne rozwiązania. Można rozwiązać układ równań dla nowych funkcji u_n oraz v_n . Żądamy, aby transformacja (2-38), (2-39) diagonalizowała $\hat{H}^{(e)}$ (2-35):

$$\hat{H}^{(e)} = E_{OS} + \sum_{n,\alpha} \varepsilon_n \hat{\gamma}_{n\alpha}^\dagger \hat{\gamma}_{n\alpha} \quad (2-40)$$

gdzie E_{OS} oznacza stan podstawowy nadprzewodnika. Z reguł komutacji dla $\hat{c}_{n\alpha}$ i $\hat{\gamma}_{n\alpha}$ oraz z równania (2-40) można otrzymać:

$$[\hat{H}_e, \hat{\gamma}_{n\alpha}] = -\varepsilon_n \hat{\gamma}_{n\alpha} \quad (2-41)$$

oraz

$$[\hat{H}_e, \hat{\gamma}_{n\alpha}^\dagger] = +\varepsilon_n \hat{\gamma}_{n\alpha}^\dagger \quad (2-42)$$

Korzystając z (2-30), (2-31) oraz (2-35) dostajemy:

$$[\hat{H}_e, \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r})] = -[H'_0 + U(\vec{r})]\hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}) - \Delta(\vec{r})\hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) \quad (2-43)$$

$$[\hat{H}_e, \hat{\Psi}_\downarrow(\vec{r})] = -[H'_0 + U(\vec{r})]\hat{\Psi}_\downarrow(\vec{r}) - \Delta(\vec{r})\hat{\Psi}_\uparrow^\dagger(\vec{r}) \quad (2-44)$$

Następnie podstawiamy równania (2-38), (2-39) bezpośrednio do równań (2-43), (2-44). Po rozpisaniu komutatora porównujemy współczynniki przy operatorach $\hat{\gamma}$ i uzyskujemy następujący układ Bogoliubowa-de Gennes'a:

$$\varepsilon_n u_n(\vec{r}) = [H'_0 + U(\vec{r})]u_n(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})v_n(\vec{r}) \quad (2-45)$$

$$\varepsilon_n v_n(\vec{r}) = -[H'_0 + U(\vec{r})]v_n(\vec{r}) + \Delta^*(\vec{r})u_n(\vec{r}) \quad (2-46)$$

Warto zauważyć, że dysponujemy teraz dwoma zestawami równań różniczkowych na funkcje własne u_n oraz v_n , które opisują stan nadprzewodzący. Do samozgodnego rozwiązania równań Bogoliubowa – de Gennes’a potrzebne są jeszcze równania na średni potencjał jednoelektronowy $U(\vec{r})$, potencjał chemiczny $\mu(\vec{r})$ oraz parametr porządku $\Delta(\vec{r})$. W tej rozprawie nie obliczamy funkcji $\Delta(\vec{r})$ w sposób samozgodny, ale wykorzystujemy jej postać, która uwzględnia wyniki badań doświadczalnych i teoretycznych rozważanych układów. W rozprawie nie obliczamy również samozgodnego potencjału $U(\vec{r})$. Równania (2-45), (2-46) można zapisać w postaci macierzowej:

$$\begin{bmatrix} [H'_0 + U(\vec{r})] & \Delta(\vec{r}) \\ \Delta^*(\vec{r}) & -[H'_0 + U(\vec{r})] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_n(\vec{r}) \\ v_n(\vec{r}) \end{pmatrix} = \varepsilon_n \begin{pmatrix} u_n(\vec{r}) \\ v_n(\vec{r}) \end{pmatrix} \quad (2-47)$$

Korzystając z reprezentacji spinorowej dla funkcji falowej $\psi = \begin{pmatrix} u(\vec{r}) \\ v(\vec{r}) \end{pmatrix}$ możemy zdefiniować Hamiltonian H'_0 w postaci:

$$H'_0 = \left[\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \hat{\sigma}_z \right)^2 + U(\vec{r}) - \mu \right], \quad (2-48)$$

a wprowadzając zespoloną funkcję szczeliny $\Delta(\vec{r}) = \Delta_1(\vec{r}) + i \Delta_2(\vec{r})$ możemy przepisać równanie (2-47) w postaci:

$$\varepsilon \psi = [H'_0 \hat{\sigma}_z + \Delta_1 \hat{\sigma}_x + \Delta_2 \hat{\sigma}_y] \psi \quad (2-49)$$

Symbole $\hat{\sigma}_i$ oznaczają macierze Pauliego.

W rozdziale 1.2.3 podano przykłady różnych funkcji szczeliny energetycznej. Rozważmy przypadek parowania anizotropowego. Oznacza to, że szczelina energetyczna jest funkcją kątów. Takie zachowanie szczeliny energetycznej może być wynikiem między innymi obecności zewnętrznego pola, granic próbki, struktury krystalicznej lub istnienia zanieczyszczeń [102]. Dla pełnego opisu warto jednak przytoczyć równania na $U(\vec{r})$ i $\Delta(\vec{r})$. Można je otrzymać wykorzystując wzór (1-13) lub (2-32) na oddziaływanie przyciągające pomiędzy elektronami. W przybliżeniu pola średniego parametr porządku $\Delta(\vec{r})$ wyraża się wzorem:

$$\Delta(\vec{r}) = -g \langle \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}) \hat{\Psi}_\downarrow(\vec{r}) \rangle \quad (2-50)$$

Równania ruchu (2-43), (2-44) dla operatorów pola $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r})$, $\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r})$ mają teraz postać:

$$i \frac{\partial \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r})}{\partial t} = [H'_0 + U(\vec{r})] \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}) - \Delta(\vec{r}) \hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) \quad (2-51)$$

$$-i \frac{\partial \hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r})}{\partial t} = [H'_0 + U(\vec{r})] \hat{\Psi}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) - \Delta^*(\vec{r}) \hat{\Psi}_\uparrow(\vec{r}) \quad (2-52)$$

Równania (2-51) - (2-52) różnią się od zwykłych równań Hartree-Focka tym, że operatory $\hat{\Psi}_\alpha(\vec{r})$, $\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\vec{r})$ tworzą sprzężony układ równań . Funkcja szczeliny energetycznej wyznaczana jest na podstawie (2-50) oraz (2-38), (2-39) i ma postać (szczegóły rachunkowe np. [103]):

$$\Delta(\vec{r}) = +g \sum_n u_n(\vec{r}) v_n(\vec{r}) [1 - 2f(\varepsilon_n)] \quad (2-53)$$

gdzie, $f(\varepsilon_n)$ jest funkcją Fermiego - Diraca. Równania Bogoliubowa – de Gennes’a (2-47), (2-138) są wykorzystywane do obliczania wielkości szczeliny energetycznej $\Delta(\vec{r})$ oraz do znajdowania wzbudzeń kwazicząstek w obecności niejednorodności spowodowanej istnieniem granic próbek. Niejednorodność w obrębie nadprzewodnika może być także wywołana przez zewnętrzne pole magnetyczne. Na przykład, kiedy nadprzewodnik jest w kontakcie z normalnym metalem lub innym nadprzewodnikiem, szczelina energetyczna zmienia się w pobliżu kontaktu dwóch próbek.

Rozdział 2.3 Kwaziklasyczna granica równania Bogoliubova.

Rozważmy układ nadprzewodzący opisany równaniami Bogoliubova (2-45), (2-46). Poszukujemy rozwiązań kwaziklasycznych tych równań w postaci:

$$u(\vec{r}) = e^{i/\hbar(S_F+s_u)} \quad (2-54)$$

$$v(\vec{r}) = e^{i/\hbar(S_F+s_v)} \quad (2-55)$$

gdzie, $S_F = \vec{p}_F \cdot \vec{r}$ jest działaniem dla elektronu na powierzchni Fermiego, zaś s_u i s_v są małymi poprawkami.

Podstawiając powyższe relacje do (2-45), (2-46) uzyskujemy następujące wyrażenia na energię wzbudzenia:

$$\varepsilon = \frac{1}{2m} \left[2\nabla S_F \circ \nabla s_u - \frac{2e}{c} \nabla S_F \circ \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} A^2 \right] + \Delta(\vec{r}) e^{i/\hbar(s_v-s_u)} \quad (2-56)$$

$$\varepsilon = -\frac{1}{2m} \left[2\nabla S_F \circ \nabla s_v + \frac{2e}{c} \nabla S_F \circ \vec{A} + \frac{e^2}{c^2} A^2 \right] + \Delta(\vec{r}) e^{i/\hbar(s_v-s_u)}, \quad (2-57)$$

Z uwagi na założenie o wolnej zmienności funkcji $s(u, v)$ oraz na założenie, że $s(u, v) \ll S_F$ zaniedbane zostały następujące człony $\nabla^2 s_{u,v}$, $(\nabla s_{u,v})^2$ oraz $\vec{A} \circ \nabla s_{u,v}$. Dodatkowo uwzględniono cechowanie Londona [104]. Wprowadzamy nowe zmienne wiążące s_u oraz s_v w następujący sposób:

$$\bar{s} = \frac{1}{2}(s_u + s_v) \quad (2-58)$$

$$s = \frac{1}{2}(s_u - s_v) \quad (2-59)$$

Transformacja odwrotna daje nam wyrażenia na s_u oraz s_v :

$$s_u = \bar{s} + s \quad (2-60)$$

$$s_v = \bar{s} - s \quad (2-61)$$

Obliczając sumę i różnicę równań (2-56), (2-57) i wprowadzając wyrażenia na prędkość elektronów na poziomie Fermiego, $\vec{v}_F = (1/m)\nabla S_F$, otrzymujemy:

$$\varepsilon = -\frac{e}{c} \vec{v}_F \circ \vec{A} + \vec{v}_F \circ \nabla s + \Delta(\vec{r}) \cos\left(\frac{2s}{\hbar}\right) \quad (2-62)$$

$$0 = \vec{v}_F \circ \nabla \bar{s} + \frac{e^2}{2mc^2} A^2 - i\Delta(\vec{r}) \sin\left(\frac{2s}{\hbar}\right) \quad (2-63)$$

Powyższe równania stanowią kwaziklasyczne przybliżenie równań Bogoliubova.

Warunki normalizacji mają postać:

$$\int d^3r [e^{i/\hbar(s_u - s_u^*)} + e^{i/\hbar(s_v - s_v^*)}] = 1 \quad (2-64)$$

$$\int d^3r [e^{i/\hbar(\bar{s} + s - \bar{s}^* - s^*)} + e^{i/\hbar(\bar{s} - s - \bar{s}^* + s^*)}] = 1 \quad (2-65)$$

Przez odpowiedni wybór cechowania można zaniedbać wyraz zawierający człon A^2 występujący w równaniu (2-63). Dla jednorodnego gazu Fermiego, przy założeniu, że $A = 0$ oraz $\nabla s = 0$, $\nabla \bar{s} = \vec{p} - \vec{p}_F$ można oznaczyć $\xi = \vec{v}_F \circ (\vec{p} - \vec{p}_F)$ i ostatecznie równania (2-62), (2-63) redukują się do postaci

$$\varepsilon^2 = \xi^2 + \Delta^2 \quad (2-66)$$

W przypadku, gdy występujące w układzie bariery i potencjały są wolno zmiennymi funkcjami odległości, można założyć, że funkcje te nie zmieniają się w zakresie charakterystycznej długości, którą w naszym przypadku jest elektronowa długość fali, tzn. odwrotność wektora falowego na powierzchni Fermiego. Można wtedy zapostulować alternatywną postać funkcji falowych, czyli tzw. funkcje Andreeva:

$$u(\vec{r}) = u'(\vec{r}) e^{i/\hbar(S_F)} \quad (2-67)$$

$$v(\vec{r}) = v'(\vec{r}) e^{i/\hbar(S_F)} \quad (2-68)$$

Gdzie $v'(\vec{r})$ i $u'(\vec{r})$ są obwiedniami funkcji falowych. Równanie Bogoliubowa – de Gennes'a może być teraz przedstawione jako:

$$\varepsilon u'(\vec{r}) = H' u'(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) v'(\vec{r}) \quad (2-69)$$

$$\varepsilon v'(\vec{r}) = -\bar{H}' v'(\vec{r}) + \Delta(\vec{r}) u'(\vec{r}) \quad (2-70)$$

gdzie, H' jest określone równaniem (2-24) zaś $\bar{H}'(\vec{A}) = H'(-\vec{A})$.

Rozdział 2.4 Odbicie Andreeva.

Równania Bogoliubowa – de Gennes’a mogą zostać wykorzystane do przedyskutowania i przedstawienia zjawiska rozpraszania zwanego też odbiciem Andreeva występującego na granicy układu złożonego np. z metalu i nadprzewodnika. Obydwie fazy mogą być oddzielone od siebie warstwą izolatora (I), wytworzoną np. przez utlenienie jednej z faz. Warstwa ta spełnia rolę bariery potencjału, przez którą mogą tunelować elektrony, dziury lub pary Coopera. Załóżmy, że mamy pojedynczy interfejs N-S w płaszczyźnie x-y, złożony z metalu w stanie normalnym (N), w obszarze $z < 0$ oraz materiału nadprzewodzącego (S) w obszarze $z > 0$. Dla powyższej geometrii oraz przy zaniedbaniu potencjału wektorowego równania Andreeva – Bogoliubowa podane w formie (2-69), (2-70) można zapisać, jako:

$$\varepsilon u'(\vec{r}) = \frac{\hbar v_F}{i} \vec{n} \circ \nabla u'(\vec{r}) + \Delta(z) v'(\vec{r}) \quad (2-71)$$

$$\varepsilon v'(\vec{r}) = - \frac{\hbar v_F}{i} \vec{n} \circ \nabla v'(\vec{r}) + \Delta(z) u'(\vec{r}) \quad (2-72)$$

gdzie v_F oznacza prędkość elektronu na powierzchni Fermiego, a \vec{n} oznacza wektor jednostkowy prostopadły do płaszczyzny x-y. Parametr porządku $\Delta(z)$ można otrzymać numerycznie rozwiązując odpowiednie równania samozgodne. W dalszych rozważaniach będziemy zakładać postać $\Delta(z)$ w zależności od rozpatrywanej symetrii parowania.

Ponadto, dla uproszczenia, zależność od z dla $\Delta(z)$ będzie przybliżona deltą Diraca, $\delta(z)$, co oznacza, że $\Delta(z)$ przyjmuje swoją maksymalną wartość, równowagową na granicy interfejsu.

$$\Delta(z) = \begin{cases} \Delta, & \text{dla } z \geq 0 \\ 0, & \text{dla } z < 0 \end{cases} \quad (2-73)$$

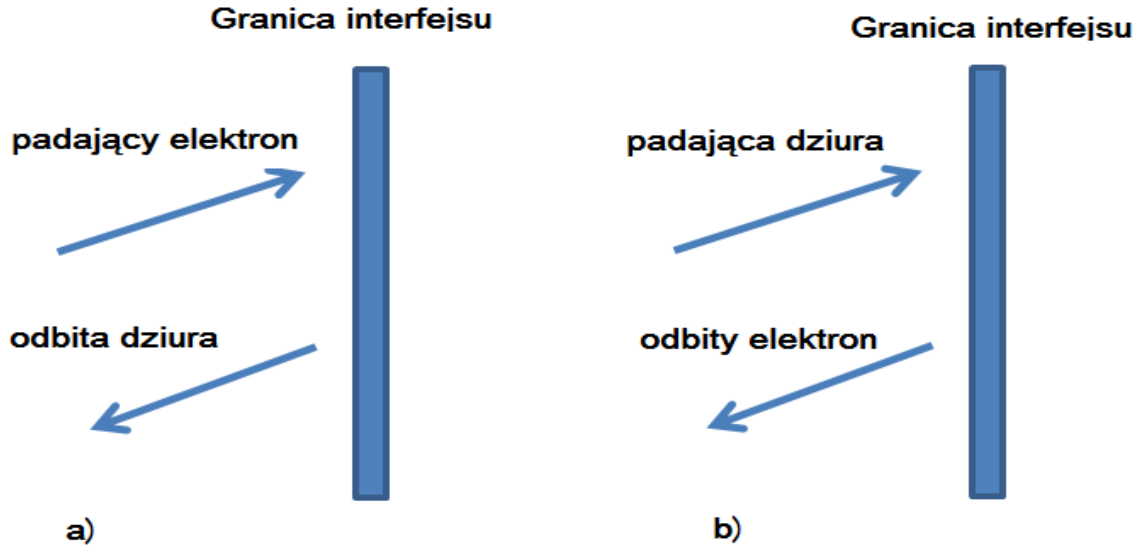
Wiadomo, że w rzeczywistych układach efekty bliskości powodują, że $\Delta(z)$ wzrasta od 0, do wartości równowagowej Δ na odległości rzędu długości koherencji $\xi = \hbar v_F / \Delta$. Omówimy najpierw układ zawierający nadprzewodnik izotropowy scharakteryzowany parametrem porządku Δ . Takie uproszczenie pozwala na otrzymanie jakościowych rozwiązań dla funkcji $u'(\vec{r})$ i $v'(\vec{r})$ oraz przedyskutowanie ich własności w całym obszarze złącza.

Dla $z \rightarrow -\infty$ tzn. dla obszaru zajmowanego przez metal w stanie normalnym $\Delta = 0$ i rozwiązania równań (2-71), (2-72) mają postać:

$$\begin{pmatrix} u'(\vec{r}) \\ v'(\vec{r}) \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ik^{(n)} \vec{r}} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-ik^{(n)} \vec{r}} \quad (2-74)$$

Wektor falowy dla cząstki w fazie normalnej $k^{(n)}$ spełnia zależność $\vec{n} \circ k^{(n)} = \varepsilon / \hbar v_F$ a współczynniki a i b w powyższym równaniu mogą być wyznaczone np. z warunków brzegowych.

Jeżeli składowa zeta wektora jednostkowego \vec{n} jest większa od zera, to pierwszy człon w równaniu (2-74) określa cząstkę (elektron) padającą w kierunku interfejsu, która przemieszcza się równoległe do wektora \vec{n} . Drugi wyraz opisuje wtedy ruch dziury (zwanej dziurą Andreeva), poruszającej się od granicy złącza faz (antyrównoległe do wektora \vec{n}), tzn. że wektor prędkości dziury jest przeciwnie skierowany niż wektor \vec{n} . Ta sytuacja jest przedstawiona na rysunku 2.1a.



Rysunek 2-1. Odbicie Andreeva: (a) $n_z > 0$; (b) $n_z < 0$. Strzałki oznaczają kierunki prędkości cząstek.

W drugim przypadku, gdy $n_z < 0$ drugi człon opisuje padającą dziurę na granicę złącza, natomiast pierwszy człon opisuje odbity elektron. Jest to pokazane na rysunku 2.1b. Przedstawmy rozwiązania równań (2-71), (2-72) w granicy $z \rightarrow +\infty$, tj. głęboko w obszarze nadprzewodnika, gdzie można postulować stałą wartość parametru porządku $\Delta(z) = \Delta$. Dla przypadku, kiedy $\varepsilon > \Delta$ rozwiązanie ma postać:

$$\begin{pmatrix} u'(\vec{r}) \\ v'(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 + \hbar \frac{v_F}{\varepsilon} \vec{n} \circ \vec{k}^{(s)}\right)^{1/2} \\ \left(1 - \hbar \frac{v_F}{\varepsilon} \vec{n} \circ \vec{k}^{(s)}\right)^{1/2} \end{bmatrix} e^{\vec{k}^{(s)} \circ \vec{r}} \quad (2-75)$$

gdzie $c/\sqrt{2}$ jest wielkością stałą, a wektor falowy w obszarze nadprzewodnika, $\vec{k}^{(s)}$, spełnia zależności:

$$\vec{k}^{(s)} \circ \vec{n} = \frac{1}{\hbar v_F} (\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}, n_z > 0 \quad (2-76)$$

$$\vec{k}^{(s)} \circ \vec{n} = -\frac{1}{\hbar v_F} (\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}, n_z < 0 \quad (2-77)$$

Gdy $\varepsilon < \Delta$ występuje tylko rozwiązanie zanikające eksponcjalnie w obszarze nadprzewodnika. Zauważmy ponadto, że $\vec{k}^{(n)}$ i $\vec{k}^{(s)}$, są wektorami falowymi obwiedni $u'(\vec{r})$ i $v'(\vec{r})$ i dlatego długości $\vec{k}^{(n)}$ i $\vec{k}^{(s)}$ są dużo mniejsze od k_F . Dla układu jednorodnego w pobliżu energii Fermiego zachodzi $\varepsilon \approx \hbar(k - k_F)v_F = \hbar v_F$ oraz $k_x^{(s)} = k_x^{(n)}$; $k_y^{(s)} = k_y^{(n)}$. Wymaganie ciągłości funkcji na granicy złącza tzn. dla $z = 0$ prowadzi do następujących wyrażen określających amplitudy funkcji określonych w równaniu (2-74):

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon}\right)^{1/2} \\ \left(1 - \frac{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon}\right)^{1/2} \end{bmatrix}; n_z > 0 \quad (2-78)$$

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \frac{c}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \left(1 - \frac{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon}\right)^{1/2} \\ \left(1 + \frac{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon}\right)^{1/2} \end{bmatrix}; n_z < 0 \quad (2-79)$$

Współczynnik transmisji T jest zdefiniowany, jako:

$$T \equiv \frac{(j_z)^{Tr}}{(j_z)^{In}} \quad (2-80)$$

gdzie $(j_z)^{Tr}$ oraz $(j_z)^{In}$ oznaczają odpowiednio składowe prądu gęstości prawdopodobieństwa przetransmitowane i padające w kierunku osi z. Gęstości prawdopodobieństwa ρ wyznaczamy z zależnych od czasu równań Bogoliubowa:

$$i\hbar \frac{\partial u(\vec{r})}{\partial t} = \hat{H}u(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})v(\vec{r}) \quad (2-81)$$

$$i\hbar \frac{\partial v(\vec{r})}{\partial t} = -\hat{H}^*v(\vec{r}) + \Delta(\vec{r})u(\vec{r}) \quad (2-82)$$

Mnożąc pierwsze równanie przez $u^*(\vec{r})$ oraz sprzężone drugie równanie przez $v(\vec{r})$ i odejmując je następnie stronami otrzymujemy:

$$i\hbar \left[u^*(\vec{r}, t) \frac{\partial u(\vec{r}, t)}{\partial t} + v(\vec{r}, t) \frac{\partial v^*(\vec{r}, t)}{\partial t} \right] = u^*(\vec{r}, t) \hat{H}u(\vec{r}, t) + v(\vec{r}, t) \hat{H}v^*(\vec{r}, t) \quad (2-83)$$

Całkując po całej przestrzeni otrzymujemy:

$$\begin{aligned}
& i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int [u^*(\vec{r}, t)u(\vec{r}, t) + v^*(\vec{r}, t)v(\vec{r}, t)] d^3\vec{r} = \\
& = \int [u^*(\vec{r}, t)\hat{H}u(\vec{r}, t) - u(\vec{r}, t)\hat{H}^*u^*(\vec{r}, t) + v(\vec{r}, t)\hat{H}v^*(\vec{r}, t) \\
& \quad - v^*(\vec{r}, t)\hat{H}^*v(\vec{r}, t)] d^3\vec{r}
\end{aligned} \tag{2-84}$$

gdzie $\hat{H} = -(\hbar^2/2m)[\nabla - (ie/\hbar c)\vec{A}]^2 + U(\vec{r})$. Korzystając z tożsamości Greena o zamianie całki po objętości na całkę po powierzchni obejmującej tę objętość, otrzymujemy równanie ciągłości:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \circ \vec{j}(\vec{r}, t) = 0, \tag{2-85}$$

gdzie

$$\rho(\vec{r}, t) = u^*(\vec{r}, t)u(\vec{r}, t) + v^*(\vec{r}, t)v(\vec{r}, t) \tag{2-86}$$

oraz

$$\begin{aligned}
\vec{j}(\vec{r}, t) = & -\frac{i\hbar}{2m} [u^*(\vec{r}, t)\nabla u(\vec{r}, t) - u(\vec{r}, t)\nabla u^*(\vec{r}, t) - v^*(\vec{r}, t)\nabla v(\vec{r}, t) \\
& + v(\vec{r}, t)\nabla v^*(\vec{r}, t)] - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r})u^*(\vec{r}, t)u(\vec{r}, t) + v^*(\vec{r}, t)v(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{2-87}$$

Wykorzystując relacje $u, v \propto e^{i(\vec{k}_F + \vec{k}^{(n,s)}) \circ \vec{r}}$ łącznie z (2-74), (2-75) i (2-87) otrzymujemy wzory na gęstości prądu prawdopodobieństwa cząstek padających oraz przechodzących przez interfejs:

$$(j_z)^{In} \cong |a|^2 \left(\frac{\hbar \vec{k}_F \circ \vec{n}_z}{m} \right), \quad \vec{n} > 0 \tag{2-88}$$

lub

$$(j_z)^{In} \cong |b|^2 \left(\frac{\hbar \vec{k}_F \circ \vec{n}_z}{m} \right), \quad \vec{n} < 0 \tag{2-89}$$

$$(j_z)^{Tr} \cong \begin{cases} |c|^2 \frac{\hbar v_F}{\varepsilon} \vec{k}^{(s)} \circ \vec{n} \left(\frac{\hbar \vec{k}_F \circ \vec{n}_z}{m} \right), & \varepsilon > \Delta \\ 0, & \varepsilon < \Delta \end{cases} \tag{2-90}$$

Zgodnie z definicją (2-80) współczynnik transmisji T wyrażamy wzorem:

$$T = \frac{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon} \left(\frac{c}{a} \right)^2, \quad \vec{n} > 0 \tag{2-91}$$

lub

$$T = \frac{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon} \left(\frac{c}{b}\right)^2, \vec{n} < 0 \quad (2-92)$$

Korzystając z (2-76), (2-77) otrzymujemy:

$$T = \frac{\hbar v_F \vec{k}^{(s)} \circ \vec{n}}{\varepsilon + (\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}} = \frac{2(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}{\varepsilon + (\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2}}, \quad \vec{n}_z > 0 \quad (2-93)$$

a w granicy małych $\varepsilon - \Delta > 0$, to znaczy dla stanów o energiach leżących tuż powyżej przerwy energetycznej, powyższy wzór można zapisać, jako:

$$T = 2^{\frac{3}{2}} \left(\frac{\varepsilon - \Delta}{\Delta}\right)^{1/2} \quad (2-94)$$

Dla bardziej ogólnej postaci $\Delta = \Delta(z)$ i małej wartości $\varepsilon - \Delta > 0$, współczynnik transmisji T ma postać:

$$T = f(n_z) \left(\frac{\varepsilon - \Delta}{\Delta}\right)^{1/2} \quad (2-95)$$

Gdzie $f(n_z)$ jest funkcją rzędu jedności zależną od kąta padania cząstki. Odbicie Andreeva jest niezwykle w tym sensie, że różni się zasadniczo od znanego np. w optyce odbicia lustrzanego. W przypadku odbicia lustrzanego tylko składowa prędkości prostopadła do granicy złącza ulega odwróceniu. Składowa równoległa do złącza pozostaje niezmienną (w tym kierunku układ jest niezmienniczy translacyjnie). Takie odbicie jest nazywane również odbiciem Snella i występuje dla elektronów, fotonów i innych cząstek. W przypadku złącza, zbudowanego z normalnego metalu połączonego z nadprzewodnikiem, mamy do czynienia z odbiciem Andreeva, dla którego odbita cząstka (np. dziura) ma wszystkie trzy składowe prędkości przeciwne do składowych prędkości padającej cząstki (elektronu), co wiąże się ze zmianą kierunku poruszania się odbitej cząstki (ang. retro reflection), przy czym pędy obydwu cząstek są takie same. Warto nadmienić, że zmiana kierunku prędkości na przeciwny występuje, gdy można zaniedbać Δ/E_F , co jest spełnione dla nadprzewodników niskotemperaturowych. Odbicie tego typu występuje wtedy, gdy elektron padający i drugi elektron, potrzebny do utworzenia pary Coopera, pochodzą z tego samego pasma przewodnictwa. Warto tutaj wspomnieć, że dla złącz zawierających grafen, oprócz odbicia Andreeva typu „retro” występuje również odbicie lustrzane (ang. specular reflection). Odbicie lustrzane Andreeva występuje w grafenie z powodu specyficznej struktury elektronowej. W grafenie pasmo walencyjne i przewodnictwa stykają się w punktach Diraca. Pojawia się wtedy możliwość, że elektron potrzebny do utworzenia pary Coopera pochodzi z pasma walencyjnego [105].

Odbicie Andreeva prowadzi do wielu ciekawych zmian w zjawiskach transportu. Powoduje np. wzrost prądu tunelowego przez złącze czy też znaczny wzrost oporności cieplnej. O prądzie tunelowym będziemy mówić w niniejszej rozprawie jeszcze wielokrotnie.

Poniżej przedstawię skrótnie efekt wzrostu oporności cieplnej. Wystarczy przyjąć, że temperatura T , w jakiej znajduje się układ jest znacznie poniżej temperatury krytycznej, $T \ll T_C$. Można wtedy w przybliżeniu zaniedbać przyczynki fononowej do przewodnictwa cieplnego. Do strumienia cieplnego przyczynki wnoszą głównie kwazicząstki o energii rzędu Δ . Te wzbudzenia leżą na szybko malejącej części rozkładu Boltzmanna, co oznacza, że całkowita liczba cząstek przechodzących przez interfejs jest niewielka. Strumień cieplny „ w ” z obszaru normalnego metalu do nadprzewodnika jest dany przez wyrażenie [45]:

$$w = \int_{v_z > 0} 2n(\varepsilon) \varepsilon v_z T(\varepsilon, v_z) \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \quad (2-96)$$

Gdzie $v_z = \partial\varepsilon/\partial p_z$ jest składową zetową prędkości, a $n(\varepsilon)$ jest funkcją rozkładu.

Podstawiając wyrażenie (2-95) na współczynnik transmisji do wyrażenia (2-96) otrzymujemy:

$$w = \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3} \int \varepsilon n(\varepsilon) \left(\frac{\varepsilon - \Delta}{\Delta} \right)^{1/2} d\xi \int \cos\theta f(\cos\theta) d(\cos\theta) \quad (2-97)$$

Dla $k_B T \ll \Delta$ kwantową funkcję rozkładu możemy zastąpić rozkładem Boltzmanna, tzn. $n(\varepsilon) = e^{-\varepsilon/k_B T}$ i przeprowadzając całkowanie uzyskujemy:

$$w = \frac{1}{2} \pi^{1/2} f_1 \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3} k_B T (k_B T \Delta)^{1/2} e^{-E/k_B T}, \quad (2-98)$$

gdzie f_1 jest pierwszym momentem funkcji $f(\cos\theta)$:

$$f_1 \equiv \int_0^\pi \cos\theta f(\cos\theta) d(\cos\theta) \quad (2-99)$$

W równowadze termicznej mamy stały przepływ energii cieplnej o równym natężeniu płynący z nadprzewodnika do normalnego metalu i odwrotnie. W obecności strumienia cieplnego będzie występował spadek temperatury, δT , co spowoduje przepływ energii cieplnej rzędu $Q = (dw/dT)\delta T$. Przeprowadzając różniczkowanie i pamiętając, że wielkość szczeliny energetycznej w nadprzewodniku jest dużo większa niż energia wzbudzeń cieplnych, tj. $\Delta \gg k_B T$ otrzymujemy następujące wyrażenia na wielkość energii cieplnej transportowanej przez złącze:

$$Q = \frac{\pi^{1/2}}{2} f_1 \frac{p_F^2}{\pi^2 \hbar^3} \Delta \left(\frac{\Delta}{k_B T} \right)^{1/2} e^{-\varepsilon/k_B T} \delta T \quad (2-100)$$

W stanie pośrednim istotny przyczynki do spadku temperatury δT , wnoszą liczne bariery występujące pomiędzy metalem a nadprzewodnikiem. Ilość i rodzaj tych barier zależy od obecności pola magnetycznego i geometrii próbki.

Rozdział 2.5 Formalizm Blonder – Tinkham – Klapwijk (BTK).

Teoria BTK [19] została sformułowana dla wyjaśnienia obserwowanego wzrostu prądu elektrycznego przepływającego przez złącze składające się z metalu i nadprzewodnika (N-S). W metodzie BTK uwzględniono zarówno metaliczny charakter złącza bez bariery potencjału pomiędzy metalem i nadprzewodnikiem, jak i tunelowy z barierą potencjału, która może być wynikiem np. utlenienia czy też lokalnego nieporządku. Formalizm BTK opiera się na równaniach Bogoliubowa – de Gennes’a, a opis nadprzewodnika oparty jest na modelu półprzewodnikowym (ang. semiconductor model), w którym półprzewodnikowa przerwa energetyczna jest zastąpiona przerwą energetyczną nadprzewodnika. Zasadniczą rolę w tym modelu odgrywa gęstość stanów $N_S(\varepsilon)$ w nadprzewodniku. Przy ograniczeniu się do procesów elastycznych użycie równań Bogoliubowa– de Gennes’a pozwala znaleźć funkcje falowe opisujące wszystkie procesy transportu ładunku po przyłożeniu do złącza zewnętrznego napięcia (bias voltage). Funkcje te zawierają nieznanne amplitudy prawdopodobieństwa tych procesów. Amplitudy wyznaczamy z odpowiednich warunków brzegowych, na styku metal – nadprzewodnik, dla funkcji falowych i ich pochodnych. Wiadomo, że przyłożenie do układu zewnętrznego napięcia generuje nierównowagowe obsady stanów kwazicząstek, które można wyznaczyć z równania Boltzmanna. W metodzie BTK zakładamy, że ruch ładunku można uważać za balistyczny. Takie założenie jest słuszne, gdy rozmiar kontaktu złącza z masywną elektrodą jest mały w porównaniu ze średnią drogą elektronu. Teoria BTK opisuje zjawiska odbicia i transmisji przez złącze N-S, gdy padający elektron porusza się prostopadle do złącza i opis redukuje się do zagadnienia jednowymiarowego. Zakładamy przy tym, że układ jest na tyle „czysty”, że można traktować pęd, jako dobrą liczbę kwantową. Jeżeli rozważymy tylko energię $E_{\vec{k}} > \Delta$, rozwiązania równania Bogoliubowa dla padających, odbitych i transmitowanych cząstek mogą być identyfikowalne z energią wzbudzenia kwazicząstek w konwencjonalnej teorii BCS (1-27). Ponieważ tylko kwadrat energii $\xi_{\vec{k}}^2$ wnosi wkład do energii wzbudzenia (1-27), to wzór ten wygeneruje parę wektorów falowych, k . W teorii BCS, parowanie dwóch elektronów w stanach k i $-k$, musi uwzględniać znaki obydwu wektorów falowych, co prowadzi do poczwórnej degeneracji dla każdego poziomu energetycznego $E_{\vec{k}}$, jest to przedstawione na rysunku 2.2. Oczywiście, należałoby uwzględnić także dodatkową dwukrotną degenerację związaną ze spinem elektronów, ale w przypadku braku procesu przerzutu spinu (ang. spin-flip proces) ma to znaczenie tylko przy normalizacji i nie musi być uwzględniane w przypadku transportu przez barierę szczególnie w nieobecności pola magnetycznego.

Kwazicząstki występujące w złączu N-S mogą być reprezentowane przez dwuelementowy jednokolumnowy wektor:

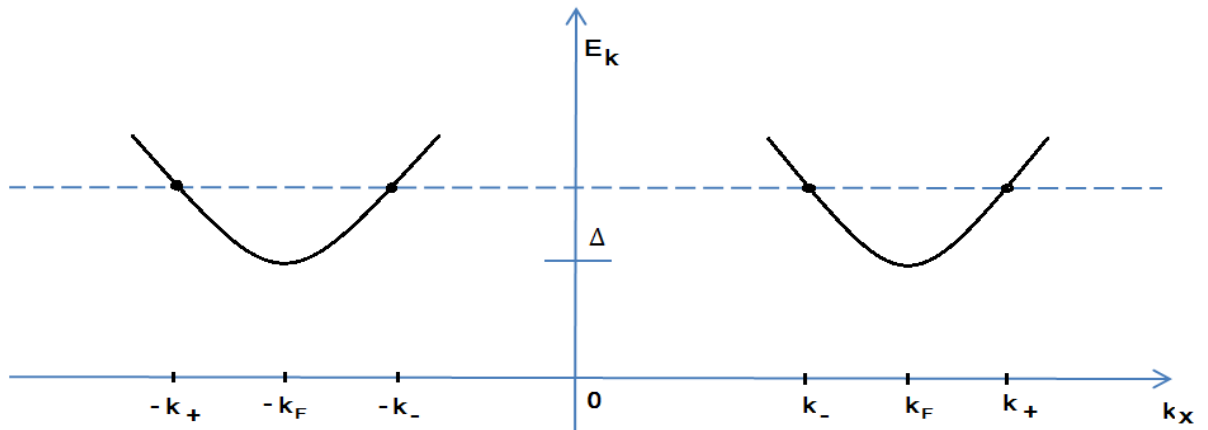
$$\Psi_k = \begin{bmatrix} u_k(x, t) \\ v_k(x, t) \end{bmatrix} \quad (2-101)$$

Gdzie u_k i v_k spełniają równania:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) - \mu(x) \right] u_k(x, t) + \Delta(x) v_k(x, t) = i\hbar \frac{\partial u_k}{\partial t} \rightarrow Eu \quad (2-102)$$

$$-\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) - \mu(x) \right] v_k(x, t) + \Delta(x) u_k(x, t) = i\hbar \frac{\partial v_k}{\partial t} \rightarrow Ev \quad (2-103)$$

$V(x)$ oznacza jednocząstkowy potencjał generujący barierę potencjału.



Rysunek 2-2. Wykres zależności energii wzbudzenia E_k w zależności od wektora falowego k ilustruje cztery typy kwazicząstek dla danej energii E_k : dwa wzbudzenia typu elektronowego ($\pm k_+$) i dwa wzbudzenia typu dziurowego ($\pm k_-$).

Rozważając obszar położony głęboko wewnątrz nadprzewodnika, gdzie $\Delta(x)$, $\mu(x)$ i $V(x)$ można uważać za stałe, rozwiązanie układu równań (2-102), (2-103) przybiera postać czasowo niezależnych fal płaskich. Wprowadzamy rozwiązania próbne postaci $u_k(x, t) = u_k e^{ikx - iE_k t/\hbar}$ oraz $v_k(x, t) = v_k e^{ikx - iE_k t/\hbar}$ i przyjmując, że $V(x) = 0$ możemy sprowadzić równania (2-102), (2-103) do postaci:

$$\begin{cases} E_k u_k = \left[-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right] u_k + \Delta v_k \\ E_k v_k = -\left[-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right] v_k + \Delta u_k \end{cases} \quad (2-104)$$

Dla każdej energii E_k z układu (2-104) otrzymuje się 4 odpowiednie wartości wektora k , tj. $\pm k_{\pm}$, gdzie:

$$\frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m} = \mu \pm \sqrt{E_k^2 - |\Delta|^2} \quad (2-105)$$

W równaniu (2-105) symbol k_+ oznacza kwazicząstkę elektronopodobną (ang. the electron-like quasiparticle) zaś symbol k_- oznacza kwazicząstkę dziuropodobną (ang. the hole-like quasiparticle).

Składowe u_k, v_k wektora Ψ_k (patrz (2-100)) mają postać:

$$\begin{cases} u_{k+}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}{E_k} \right) \equiv u_{k0}^2 > \frac{1}{2} \\ v_{k+}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}{E_k} \right) \equiv v_{k0}^2 < \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2-106)$$

$$\begin{cases} u_{k-}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}{E_k} \right) \equiv v_{k0}^2 < \frac{1}{2} \\ v_{k-}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}{E_k} \right) \equiv u_{k0}^2 > \frac{1}{2} \end{cases} \quad (2-107)$$

Odpowiednie funkcje falowe mają wtedy postać:

$$\Psi_{\pm k}^S = \begin{bmatrix} u_{\pm k_{\pm}}(x) e^{-iE_k t/\hbar} \\ v_{\pm k_{\pm}}(x) e^{-iE_k t/\hbar} \end{bmatrix} = e^{\pm i k_{\pm} x} \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}{E_k} \right)} \\ \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\sqrt{E_k^2 - \Delta^2}}{E_k} \right)} \end{bmatrix} e^{-iE_k t/\hbar} \quad (2-108)$$

Analogicznie w obszarze normalnej elektrody, odpowiednio daleko od granicy interfejsu, gdzie można przyjąć, że $V(x) = \Delta(x) = 0$. Wtedy $\frac{\hbar^2 k_{\pm}^2}{2m} = \mu \pm E_k$ funkcje falowe przyjmują odpowiednią postać dla gałęzi elektronowej i dziurowej:

$$\Psi_{\pm k_+}^N = \begin{bmatrix} u_{\pm k_+}(x) e^{-iE_k t/\hbar} \\ v_{\pm k_+}(x) e^{-iE_k t/\hbar} \end{bmatrix} = e^{\pm i k_+ x} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-iE_k t/\hbar} \text{(gałąź elektronowa)} \quad (2-109)$$

$$\Psi_{\pm k_-}^N = \begin{bmatrix} u_{\pm k_-}(x) e^{-iE_k t/\hbar} \\ v_{\pm k_-}(x) e^{-iE_k t/\hbar} \end{bmatrix} = e^{\pm i k_- x} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{-iE_k t/\hbar} \text{(gałąź dziurowa)} \quad (2-110)$$

Energia E_k wyraża się następująco:

$$E_k = \begin{cases} \frac{\hbar^2 k_+^2}{2m} - \mu, & (|k_+| > k_f) \\ \mu - \frac{\hbar^2 k_-^2}{2m}, & (|k_-| > k_f) \end{cases} \quad (2-111)$$

Model interfejsu metal - nadprzewodnik pochodzi od Demersa i Griffina i jest reprezentowany przez odpychający potencjał w postaci $V(x) = H\delta(0)$, gdzie δ oznacza funkcję Diraca. Czynniki koherencji u_k, v_k mają następującą postać:

$$u_k^2 = 1 - v_k^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_k}{E_k} \right) \quad (2-112)$$

gdzie, $\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu$. Czynniki fazowy przyjęto równy 1. Tylko dla złącz nadprzewodnik – nadprzewodnik (złącza Josephsona), czynnik fazowy odgrywa rolę. Wzbudzenia opisywane równaniami (2-102), (2-103) zawierają częściowo elektron wykreowany w stanie $+k$, za co odpowiedzialny jest wyraz $u_k c_{k\uparrow}^*$, oraz częściowo dziurę wykreowaną w stanie $-k$, za co z kolei jest odpowiedzialny wyraz $v_k c_{-k\downarrow}$. Z równania (2-105) wynika, że wzbudzenia z k_+ są typu elektronowego, a wzbudzenia z k_- są przeważnie typu dziurowego. Dla stanów stacjonarnych o energii E_k , pochodne czasowe w równaniach (2-102) i (2-103) mogą być zastąpione odpowiednio przez E_u oraz E_v . Zmiana efektywnego ładunku (w jednostkach e) wynikająca z działania operatorów $\gamma_{e,k+\uparrow}^\dagger$ (lub $\gamma_{h,k-\downarrow}^\dagger$) w równaniach (2-102) i (2-103) jest ułamkowa i ma postać:

$$Q_k = u_k^2 - v_k^2 = \varepsilon_k / E_k = \pm N_s(E)^{-1} \quad (2-113)$$

a $N_s(E)$ oznacza gęstość stanów w nadprzewodniku. Ładunek kwazicząstki, będącej superpozycją elektronu i dziury, nie jest wielkością całkowitą i przyjmuje wartości od $+1$ dla elektronu do -1 dla dziury. Wzbudzenia opisane w równaniach (2-102), (2-103) są identyczne. W obydwu przypadkach mamy do czynienia z jedną wykreowaną parą na poziomie potencjału chemicznego.

Całkowitą energię układu liczymy względem poziomu Fermiego μ i dlatego wzór (2-40) na energię całkowitą przyjmuje następującą postać po modyfikacji polegającej na dodaniu wyrazu μN :

$$E = E_{OS} + \sum_{n,\alpha} E_k \hat{\gamma}_{n\alpha}^\dagger \hat{\gamma}_{n\alpha} + \mu N \quad (2-114)$$

gdzie E_{OS} jest energią stanu podstawowego, zaś suma przebiega po wszystkich wzbudzeniach, które mają energię $E_k > 0$. Uwzględnienie potencjału chemicznego jest konieczne np. w przypadku transferu ładunku z podukładu 1 do podukładu 2.

Energia wzbudzenia kwazicząstki typu elektronowego o ładunku e w podukładzie 1 jest równa:

$$E_{ek} = \mu + E_k \quad (2-115)$$

Wzbudzenie kwazicząstki dziuropodobnej o ładunku $-e$ w podsystemie 2 różni się o 2μ i wynosi:

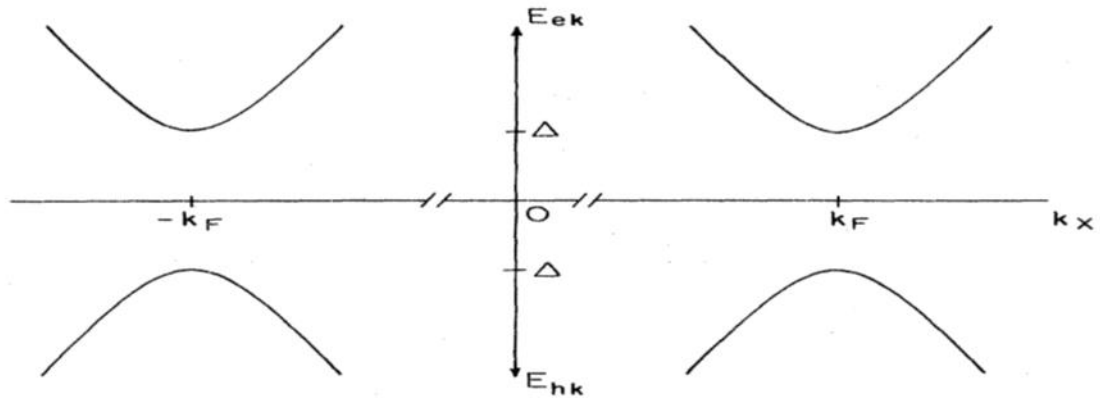
$$E_{hk} = -\mu + E_k = -(\mu - E_k) = -2\mu + E_{ek} \quad (2-116)$$

	Proces	Zachowanie energii
1	Elektron z 1 \rightarrow 2 (lub odwrotnie)	$\mu_1 + E_{k1} = \mu_2 + E_{k2}$
2	Dziura z 1 \rightarrow 2 (lub odwrotnie)	$\mu_1 - E_{k1} = \mu_2 - E_{k2}$
3	Kreacja elektronu w 1 i dziury w 2 (lub anihilacja obu)	$\mu_1 + E_{k1} = \mu_2 - E_{k2}$
4	Kreacja dziury w 1 i elektronu w 2 (lub anihilacja obu)	$\mu_1 - E_{k1} = \mu_2 + E_{k2}$

Tabela 2-1. Procesy jednocząstkowe generujące ładunek $\pm e$ i odpowiadające im prawa zachowania energii.

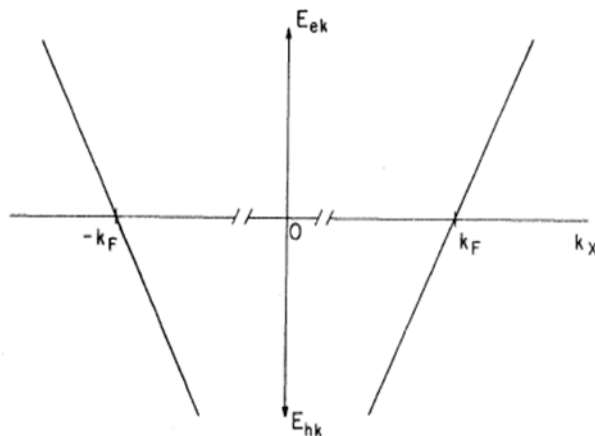
Podukłady 1 i 2 można utożsamiać ze złączem metal – nadprzewodnik. W tabeli 2-1 podano cztery procesy wzbudzania kwazicząstek. Przy założeniu, że każdy proces jest dozwolony również w odwrotną stronę mamy w istocie do czynienia z ośmioma procesami. Wszystkie energetycznie dozwolone przejścia zachodzą tylko poziomo, co widać wykreślając energię $\pm E_{ki}$ symetrycznie wokół każdego μ_i (rysunek 2-3). Tabela 2-1 zawiera cztery przypadki zawierające wszystkie kombinacje $\pm E_k$ i wszystkie horyzontalne przejścia włączając zjawiska odwrotne. Częstka padająca na interfejs od strony metalu może generować cząstki transmitowane przez barierę z dodatnią prędkością grupową (elektrony) i cząstki odbite z ujemną prędkością grupową (dziury). Te ograniczenia związane z prędkością grupową są odpowiedzialne za skończone prawdopodobieństwo przejścia cząstek przez barierę.

Równania Bogoliubowa- deGennesa w wersji BTK, dostarczają opisu matematycznego, za pomocą, którego można wyznaczyć prawdopodobieństwa procesów transportu. Rozważmy najpierw przypadek, kiedy $\Delta \rightarrow 0$.



Rysunek 2-3. Półprzewodnikowa wersja rysunku 2-2. Gałęzie kwazicząstek w dolnej części rysunku pozwalają na przejścia horyzontalne opisane w tabeli 2-1 [19].

Wzbudzenia typu elektronowego nie mogą teraz występować poniżej poziomu Fermiego, gdzie wszystkie stany są obsadzone (dla $T=0$ K) i dlatego muszą być ortogonalne do stanu podstawowego. Podobnie, wzbudzenie typu dziurowego jest możliwe tylko na zewnątrz sfery Fermiego. Gałęzie wzbudzeń kwazicząstkowych dla metalu, w pobliżu poziomu Fermiego, przedstawione są na rysunku 2-4.



Rysunek 2-4 Gałęzie wzbudzeń kwazicząstkowych dla metalu [19].

Rozdział 2.6 Zachowanie funkcji falowych (zszywanie funkcji).

Rozważmy padający elektron z dodatnią prędkością grupową ($dE_k/\hbar dk > 0$). Generuje on następujące procesy przedstawione na rysunku 2-5:

- Odbicie Andreeva (retro reflection), w wyniku którego powstaje dziura po tej samej stronie co padający elektron.
- Odbicie zwierciadlane padającego elektronu. Odbity elektron pozostaje po tej samej stronie co padający elektron.
- Transmisję kwazicząstki o charakterze elektronowym i dziurowym.

Odbita dziura Andreeva charakteryzuje się następującymi własnościami:

- Wektor falowy (pęd) odbitej dziury jest taki sam jak wektor falowy padającego elektronu, natomiast prędkość grupowa dziury jest przeciwna prędkości grupowej padającego elektronu.
- Dziura posiada dodatni ładunek i ujemną masę efektywną.

Po stronie metalu funkcje falowe można zapisać, jako:

$$\psi_{\text{inc}}^N = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{ik_+ x} \quad (2-117)$$

$$\psi_{\text{refl}}^N = a \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{ik_- x} + b \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-ik_+ x} \quad (2-118)$$

Sytuacja po stronie nadprzewodnika, wyrażona przez funkcje falowe wygląda następująco:

$$\psi_{\text{trans}}^S = c \begin{bmatrix} u_{k0} \\ v_{k0} \end{bmatrix} e^{ik_+ x} + d \begin{bmatrix} v_{k0} \\ u_{k0} \end{bmatrix} e^{-ik_- x} \quad (2-119)$$

gdzie, N i S oznaczają odpowiednio normalną (metaliczną) i nadprzewodzącą stronę interfejsu, wskaźnik „inc” oznacza funkcję falową związaną z padającym elektronem, wskaźniki „refl” i „trans” oznaczają funkcje falowe związane z odbiciem i transmisją cząstek. Współczynniki *a* oraz *b* oznaczają odpowiednio amplitudy prawdopodobieństwa odbicia dziury Andreeva i lustrzanego odbicia elektronu. Współczynnik *c*, jest to natomiast amplituda prawdopodobieństwa transmisji przez interfejs z wektorem falowym po tej samej stronie powierzchni Fermiego $k_+^{(n)} \rightarrow k_+^{(s)}$. *d* jest amplitudą prawdopodobieństwa transmisji przez interfejs z wektorem falowym po drugiej stronie powierzchni Fermiego $k_+^{(n)} \rightarrow -k_-^{(s)}$.

Bardziej szczegółowa dyskusja dotycząca prawdopodobieństw dla różnych procesów transportu ładunku zostanie przeprowadzona przy omawianiu stanów równowagowych generowanych w złączu N-S. Interfejs jest tak zorientowany, że współrzędna $x = 0$ oznacza punkt styku metalu i nadprzewodnika. Warunek ciągłości funkcji falowych w punkcie $x = 0$ ma zatem postać:

$$\psi^N(0) = \psi^S(0) = \psi(0) \quad (2-120)$$

Warunek ciągłości pierwszych pochodnych w punkcie $x = 0$ można przedstawić za pomocą równania:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi^S(0)}{dx} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d\psi^N(0)}{dx} = H\psi(0) \quad (2-121)$$

Aby pokazać słuszność równania (2-121) rozważmy niezależne od czasu równanie Schrödingera:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \quad (2-122)$$

gdzie \hat{H} jest hamiltonianem w postaci:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2-123)$$

Potencjał $V(x)$ równy jest:

$$V(x) = H\delta(x) \quad (2-124)$$

gdzie H jest wielkością bariery, a $\delta(x)$ jest deltą Diraca. Po podstawieniu wyrażenia (2-123) oraz (2-124) do (2-122) i wykonaniu całkowania w zakresie od $-\varepsilon$ do $+\varepsilon$, ε przyjmuje dowolnie małą wartość, otrzymujemy:

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + H\delta(x) \right] \psi(x) dx = \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} E \psi(x) dx \quad (2-125)$$

Całkowanie lewej strony równania (2-125):

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) dx + \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} H \delta(x) \psi(x) dx = \\
 & = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d}{dx} \psi(x) \right]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} + H \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \delta(x) \psi(x) dx = \quad (2-126) \\
 & = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right)_{x=+\varepsilon} - \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right)_{x=-\varepsilon} \right] + H \psi(0)
 \end{aligned}$$

Całkowanie prawej strony równania (2-125) daje wynik:

$$\begin{aligned}
 \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} E \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \psi(x) dx &= \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} E [F(x)]_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} = \\
 \lim_{|\varepsilon| \rightarrow 0} E [F(\varepsilon) - F(-\varepsilon)] &= E [F(0) - F(0)] = 0 \quad (2-127)
 \end{aligned}$$

co ostatecznie prowadzi do wyrażenia (2-121)

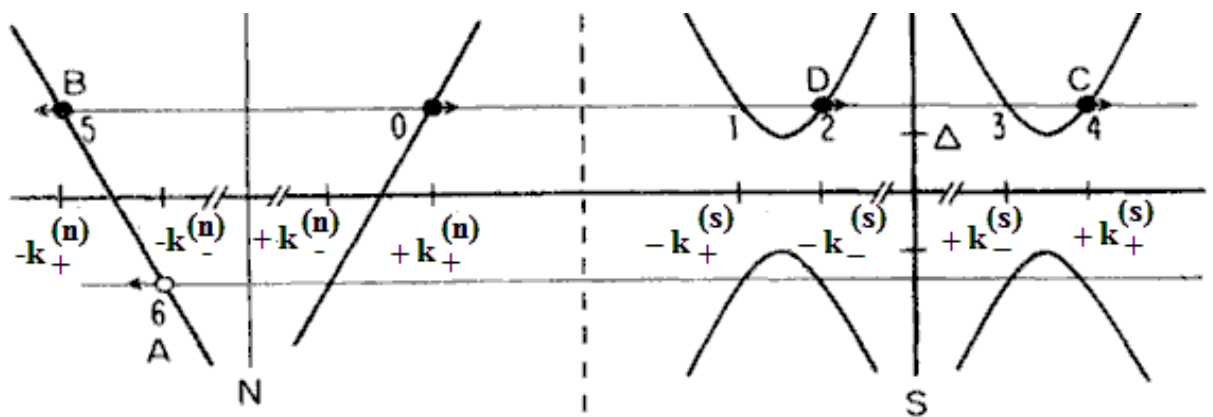
$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right)_{x=+\varepsilon} - \left(\frac{d}{dx} \psi(x) \right)_{x=-\varepsilon} \right] + H \psi(0) = 0 \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d}{dx} \psi^S(x) - \frac{d}{dx} \psi^N(x) \right] = -H \psi(0) \quad (2-128) \\
 & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi^S(x) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx} \psi^N(x) = H \psi(0)
 \end{aligned}$$

Otrzymany z warunków ciągłości (2-120) i (2-121) układ równań służy do wyznaczenia amplitud prawdopodobieństw procesów transportu ładunku przez złącze N-S. Prawdopodobieństwa wystąpienia odbicia Andreeva, $A(E)$ i normalnego odbicia $B(E)$ mają następującą postać:

$$(E > \Delta) \begin{cases} A(E) = |a(E)|^2 = \frac{u_0^2 v_0^2}{\gamma^2} \\ B(E) = |b(E)|^2 = \frac{(u_0^2 - v_0^2)^2 Z^2 (1 + Z^2)}{\gamma^2} \end{cases} \quad (2-129)$$

$$(E < \Delta) \begin{cases} A(E) = |a(E)|^2 = \frac{\Delta^2}{E^2 + (\Delta^2 - E^2)(1 + 2Z^2)^2} \\ B(E) = |b(E)|^2 = 1 - A \end{cases} \quad (2-130)$$

gdzie bezwymiarowa wysokość bariery to $Z = m\hbar/\hbar^2 k_f$, zaś $\gamma = u_0^2 + (u_0^2 - v_0^2)Z^2$.



Rysunek 2-5. Wykres zależności energii od pędu dla złącza N-S. Puste kółko oznacza dziurę, pełne zaś elektron. Strzałka wskazuje kierunek prędkości grupowej. Poszczególne symbole oznaczają: 0 – elektron wstrzeliwany do interfejsu, 2(D) i 4 (C) – cząstki przetransmitowane do nadprzewodnika, 5(B) i 6(A) – cząstki odbite [19].

W tym miejscu warto omówić stany równowagowe na granicy złącza N-S, do którego nie przyłożono napięcia zewnętrznego. Rysunek 2-5 pokazuje możliwe stany kwazicząstkowe, które pojawią się na granicy N-S. Stany oznaczone od 0 do 5 obsadzone są z tym samym prawdopodobieństwem równym $f_0(E)$, natomiast prawdopodobieństwo obsadzenia stanu dziurowego 6 o energii $-E$ wynosi $f_0(-E)$. Prawdopodobieństwa procesów A, B, C i D są określone poprzez kwadraty amplitud rozwiązań równania Bogoliubowa-de Gennes'a, a warunek unormowania tych prawdopodobieństw jest użytecznym narzędziem sprawdzenia poprawności wykonanych obliczeń. Elektron padający na interfejs od strony metalu z energią powyżej szeliny energetycznej ($E > \Delta$) i o wektorze $+k_+^{(n)}$ generuje cztery procesy A(E), B(E), C(E) i D(E).

Mają one następującą interpretację fizyczną. $C(E)$ opisuje prawdopodobieństwo przejścia przez interfejs elektronu z wektorem falowym $+k_+^{(n)}$ po tej samej stronie powierzchni Fermiego $(+k_+^{(n)} \rightarrow +k_+^{(s)})$ (ang. transmission without branchcrossing). $D(E)$ oznacza prawdopodobieństwo przejścia elektronu z wektorem falowym $+k_+^{(n)}$ po drugiej stronie powierzchni Fermiego $(+k_+^{(n)} \rightarrow -k_-^{(s)})$ (ang. transmission with branchcrossing). $B(E)$ oznacza prawdopodobieństwo zwykłego odbicia elektronu $(+k_+^{(n)} \rightarrow -k_+^{(n)})$. Najbardziej interesującym procesem jest proces oznaczony symbolem $A(E)$, opisującym prawdopodobieństwo odbicia Andreeva, w wyniku, którego odbita zostaje dziura z wektorem falowym $-k_-^{(n)}$ po przeciwnej stronie powierzchni Fermiego $(+k_+^{(n)} \rightarrow -k_-^{(n)})$ i równocześnie kreowana jest para Coopera w nadprzewodniku. Odbicie Andreeva, w odróżnieniu od pozostałych procesów (przedstawionych w tabeli 2-1), jest procesem dwucząstkowym wymagającym transferu ładunku „ $2e$ ” przez interfejs.

W przypadku odbicia Andreeva zasada zachowania energii wymaga przyrównania energii wzbudzonej kwazicząstki o charakterze elektronowym z energią wzbudzenia kwazicząstki o charakterze dziurowym i energią pary Coopera, równej podwojonemu potencjałowi chemicznemu, co wyraża następująca równość:

$$E_{ek} = E_{hk} + 2\mu \quad (2-131)$$

z której wynika:

$$\begin{aligned} E_{ek} - \mu &= E_{hk} + \mu \\ |E_{ek}| &= |E_{hk}| \end{aligned} \quad (2-132)$$

Widać stąd, że dziura jest generowana w takiej odległości poniżej poziomu potencjału chemicznego, w jakiej generowany jest elektron powyżej tego poziomu. Prawdopodobieństwa A, B, C i D oraz związane z nimi prawdopodobieństwa A', B', C' i D' dla kwazicząstki padającej ze strony nadprzewodnika na interfejs służą do wyznaczenia prądu prawdopodobieństwa. Rozważmy przepływ przez interfejs cząstek o energiach w zakresie od E do $E+dE$ włączając do rozważań tylko stany powyżej energii Fermiego. Prąd z lewej strony na prawą tzn. od metalu normalnego do nadprzewodnika, to prąd płynący do 4 (patrz rysunek 2-5). Jest on proporcjonalny do $v_F C(E) f_0(E) dE$, gdzie, v_F oznacza prędkość grupową na powierzchni Fermiego, $f_0(E)$ jest rozkładem Fermiego-Diraca. Prąd z nadprzewodnika do metalu, na rysunku 2-5 od stanu 1 do stanu 5, jest proporcjonalny do $v_F C'(E) f_0(E) N_S(E) dE$, gdzie $N_S(E)$ jest znormalizowaną gęstością stanów w nadprzewodniku. W stanie równowagi te przepływy są sobie równe, co prowadzi do relacji:

$$C'(E) N_S(E) = C(E) \quad (2-133)$$

$$D'(E) N_S(E) = D(E) \quad (2-134)$$

Równanie (2-134) zostało uzyskane z podobnych rozważań jak równanie (2-133) i dotyczy wzbudzeń, z wektorem falowym kwazicząstki znajdującym się po przeciwnej stronie powierzchni Fermiego. Wzory (2-133), (2-134) otrzymuje się korzystając ze symetrii względem odwrócenia czasu. Aby uniknąć podawania explicite gęstości stanów N_S i prędkości grupowej $v_g = N_S^{-1}v_F$, wyrażenia na $C'(E)$ i $D'(E)$ zostaną odpowiednio zastąpione przez $C(E)$ i $D(E)$.

Warto tutaj wspomnieć o dwóch sprawach. Po pierwsze, ze względu na symetrię względem potencjału chemicznego μ , prawdopodobieństwa $A(E)$, $B(E)$, $C(E)$ i $D(E)$ są parzystymi funkcjami energii E . Drugą ważną sprawą jest prawo zachowania prawdopodobieństwa. Dla wszystkich prawdopodobieństw związanych z transportem ładunku przez złącze zachodzi proste prawo sumowania do jedności:

$$A(E) + B(E) + C(E) + D(E) = 1 \quad (2-135)$$

Gdy wartość energii padającego elektronu jest mniejsza niż przerwa energetyczna, ($|E| < \Delta$) wtedy nie mogą być transmitowane kwazicząstki i dlatego $C = D = 0$. Równanie (2-135) redukuje się wtedy do postaci $A(E) = 1 - B(E)$. W tym przypadku do opisu transportu ładunku przez złącze wystarcza znajomość tylko jednej funkcji określającej prawdopodobieństwo odbicia zwykłego lub odbicia Andreeva. W ogólnym przypadku, wyrażenia określające prawdopodobieństwa A , B , C i D zależą od kąta padania elektronu na interfejs, a także od kształtu bariery potencjału rozpraszającego wytworzonej w złączu. Dla przejrzystości ograniczamy się tutaj do przypadku jednowymiarowego, a rzeczywista geometria trójwymiarowa naszego układu będzie uwzględniona dopiero przy omawianiu układów z trypletową symetrią parowania. Zakłada się ponadto, że przerwa energetyczna osiąga swoją wartość maksymalną na odległości mniejszej niż długość koherencji ξ . Potencjał wytworzony na granicy faz metal – nadprzewodnik został przybliżony deltą Diraca. Takie przybliżenie można stosować w np. przypadku utlenionej warstwy zlokalizowanej w kontakcie punktowym, w przypadku zlokalizowanego nieporządku w tzw. micromostkach (ang. the localized disorder in the neck of a short microbridge) lub też w przypadku celowo wytworzonych barier tlenkowych dla złącz wysokoprądowych. Rozwiązując równania Bogoliubowa - de Gennes'a otrzymujemy współczynniki, będące amplitudami prawdopodobieństw czterech omówionych wcześniej procesów transportu, które są funkcjami energii, przerwy energetycznej oraz wysokości bariery w interfejsie. W obliczeniach używa się bezwymiarowej wysokości bariery $Z = k_F H / 2E_F = H / \hbar v_F$. W tabeli 2-2 podano wyrażenia na prawdopodobieństwa odbić i transmisji A , B , C i D dla całego zakresu energii.

Rozważmy teraz sytuację, gdy do metalicznej części jednowymiarowego modelu złącza przyłożone jest napięcie V , które generuje stan nierównowagowy. Wtedy przez złącze płynąć będzie wypadkowy prąd $I(V)$ będący różnicą prądu płynącego od elektrody metalicznej (do której przyłożono napięcie V) do nadprzewodnika i prądu płynącego w kierunku przeciwnym. Przy czym zakładamy, że obydwie elektrody są na tyle duże, że znajdują się w równowadze termodynamicznej i stanowią rezerwuary ładunku elektrycznego. Oznacza to, że możemy skorzystać z równowagowych rozkładów ładunku w postaci funkcji Fermiego-Diraca. Do oszacowania wypadkowego prądu skorzystamy z uproszczonego wzoru Landauera-Büttikera zakładając stałą wartość współczynników przejść.

$$I(V) \propto N(0) \int_{-\infty}^{+\infty} [f_{\rightarrow}(E) - f_{\leftarrow}(E)] dE \quad (2-136)$$

gdzie $f_{\rightarrow}(E) = f_0(E - eV)$ oznacza prawdopodobieństwo obsady elektronów poruszających się od strony metalicznej, zaś $f_{\leftarrow}(E) = A(E)[1 - f_{\rightarrow}(-E)] + B(E)f_{\rightarrow}(E) + [C(E) + D(E)]f_0(E)$ to prawdopodobieństwo obsady, które odpowiada za przepływ prądu od nadprzewodnika do metalu. Podstawiając powyższe wyrażenia na $f_{\rightarrow}(E)$ i $f_{\leftarrow}(E)$ do wzoru (2-136) oraz korzystając z wzoru (2-135) i z własności funkcji Fermiego-Diraca: $f_0(-E) = 1 - f_0(E)$, możemy wyrazić wypadkowy prąd płynący przez złącze za pomocą współczynników odbicia normalnego i odbicia Andreeva:

$$I(V) \propto N(0) \int_{-\infty}^{+\infty} [f(E - eV) - f(E)][1 + |a(E)|^2 - |b(E)|^2] dE \quad (2-137)$$

Równanie (2-137) pokazuje, że człon związany z odbiciem Andreeva $|a(E)|^2$, jest przyczynkiem zwiększającym prąd. Człon związany z normalnym odbiciem $|b(E)|^2$, osłabia wartość prądu. Dla układów o rozmiarach nanometrów, prądy tunelowe nie spełniają prawa Ohma. Więcej informacji o prądach tunelowych w takich układach otrzymuje się z przewodności różniczkowej (dI/dV). Wiadomo, że skończone temperatury prowadzą między innymi do efektu rozmycia przyczynków pochodzących od różnych wartości energii. Źródłem tego rozmycia jest pochodna funkcji rozkładu Fermiego-Diraca $\partial f / \partial E = \partial f / \partial (eV)$. Aby zminimalizować efekty tego rozmycia, w dalszych rozważaniach ograniczamy się do temperatury $T = 0K$, dla której pochodna funkcji Fermiego – Diraca jest proporcjonalna do delty Diraca.

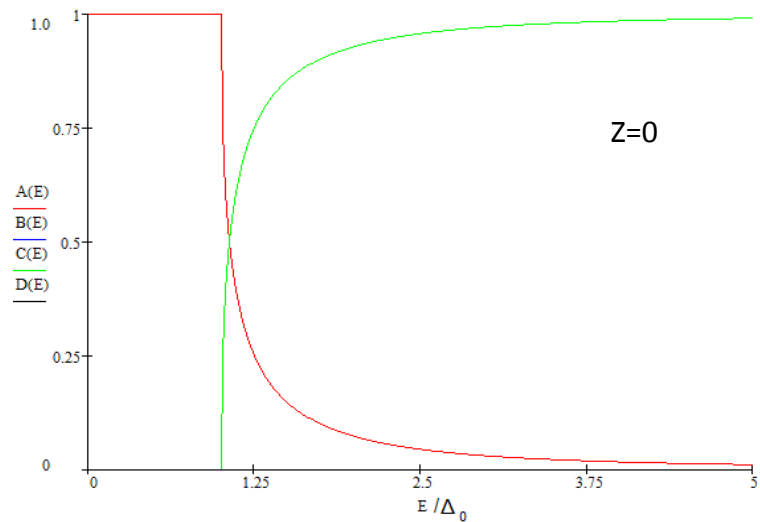
Różniczkowa przewodność tunelowa złącza dla zerowej temperatury jest proporcjonalna do $\frac{dI}{dV}(V) \propto [1 + |a(E)|^2 - |b(E)|^2]$.

Współczynnik odbicia Andreeva można wyznaczyć z różniczkowej przewodności tunelowej, co widać w eksperymencie wykorzystującym kontakt punktowy (ang. point contact) pomiędzy metalem i nadprzewodnikiem. Powszechnie używanym kontaktem punktowym jest tzw. kontakt punktowy Sharvina, składający się z dwóch elektrod, stanowiących dwa rezerwuary ładunku, połączonych bardzo wąskim elementem.

Analogiczne rozumowanie, wykorzystane powyżej dla złączy jednowymiarowych, można zastosować dla złączy dwu- i trójwymiarowych, dla których należy dodatkowo wykonać całkowanie po kątach określających trajektorie cząstek biorących udział w transporcie przez złącze. Wykresy od 2-6 do 2-9 ilustrują znaczenie wysokości bariery Z w transporcie ładunku przez złącze N-I-S.

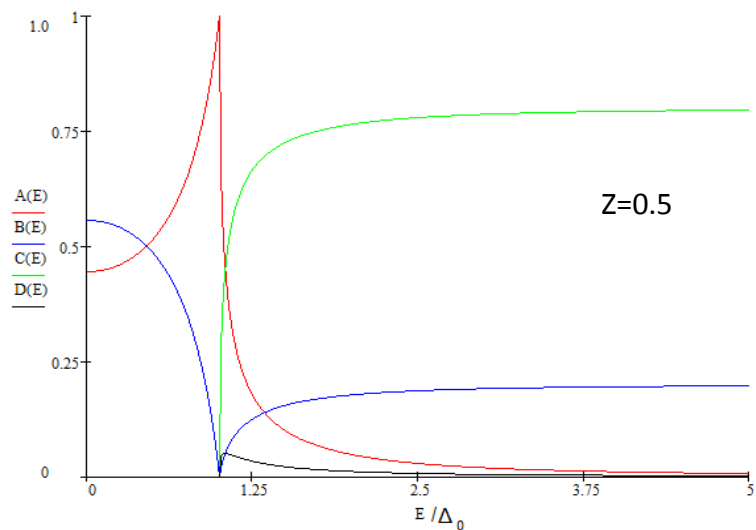
	A	B	C	D
Stan normalny	0	$\frac{Z^2}{1+Z^2}$	$\frac{1}{1+Z^2}$	0
Ogólna postać				
$E < \Delta$	$\frac{\Delta^2}{E^2 + (\Delta^2 - E^2)(1 + 2Z^2)^2}$	$1 - A$	0	0
$E > \Delta$	$\frac{u_0^2 v_0^2}{\gamma^2}$	$\frac{(u_0^2 - v_0^2)^2 Z^2 (1 + Z^2)}{\gamma^2}$	$\frac{u_0^2 (u_0^2 - v_0^2)^2 (1 + Z^2)}{\gamma^2}$	$\frac{v_0^2 (u_0^2 - v_0^2) Z^2}{\gamma^2}$
Brak bariery ($Z=0$)				
$E < \Delta$	1	0	0	0
$E > \Delta$	$\frac{v_0^2}{u_0^2}$	0	$1 - A$	0
Silna bariera [$(u^2 - v^2) \gg 1$]				
$E < \Delta$	$\frac{\Delta^2}{4Z^2(\Delta^2 - E^2)}$	$1 - A$	0	0
$E > \Delta$	$\frac{u_0^2 v_0^2}{Z^4(u_0^2 - v_0^2)}$	$1 - \frac{1}{Z^2(u_0^2 - v_0^2)}$	$\frac{u_0^2}{Z^2(u_0^2 - v_0^2)}$	$\frac{v_0^2}{Z^2(u_0^2 - v_0^2)}$

Tabela 2-2. Wartości prawdopodobieństw transmisji i odbicia dla złącza N-I-S [19]

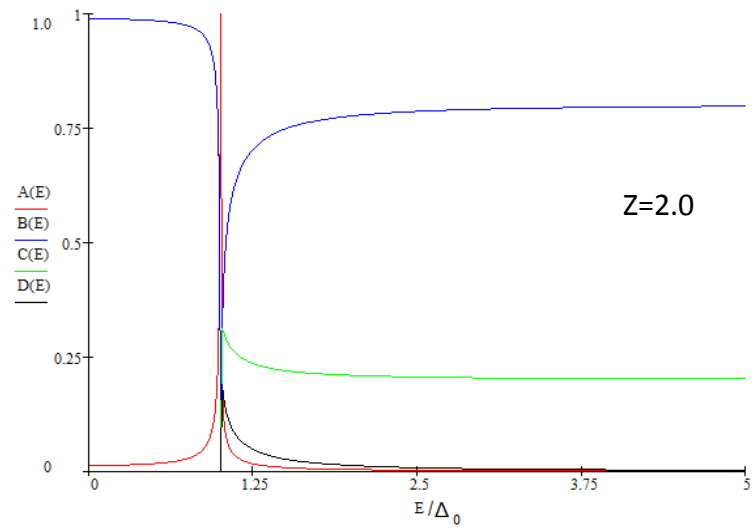


Rysunek 2-6. Współczynniki transportu dla $Z=0$.

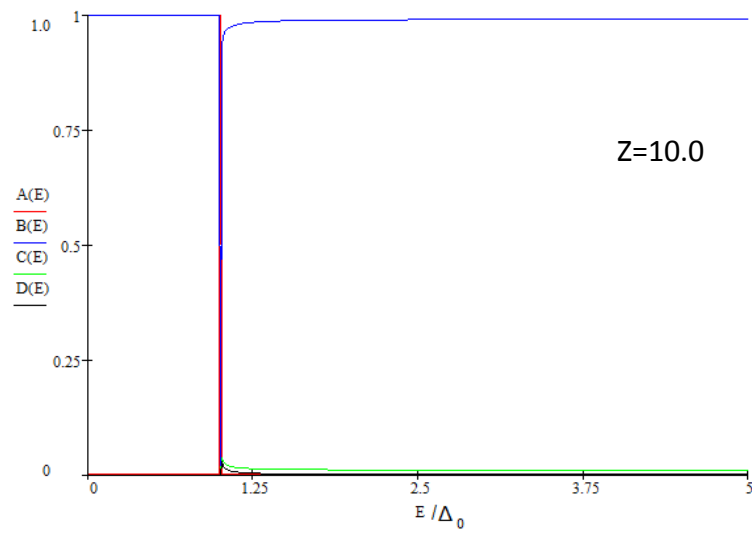
W przypadku braku bariery występują dwa procesy, tj. odbicie Andreeva, które jest opisane krzywą $A(E)$ oraz transmisja kwazicząstek elektronopodobnych dla $E > \Delta$ - krzywa $C(E)$. Zwykłe odbicie ($B(E)$) i transmisja typu „branch crossing” ($D(E)$) nie wnoszą przyczynku do przewodności różniczkowej. Współczynniki podane są w tabeli 2-2. Δ_0 jest amplitudą funkcji opisującej parametr porządku, jakim jest Δ .



Rysunek 2-7 Współczynniki transportu dla $Z=0.5$.



Rysunek 2-8. Współczynniki transportu dla $Z=2.0$.



Rysunek 2-9. Współczynniki transportu dla $Z=10.0$.

Rozdział 2.7 Modyfikacja formalizmu BTK.

Rozwiązania równań (2-102) - (2-103) nie uwzględniają wpływu zewnętrznego pola magnetycznego lub pola molekularnego oraz zależności kątowej parametru porządku. Pole molekularne pojawi się, gdy normalny metal (N) tworzący złącze zastąpimy metalem ferromagnetycznym (F). Zależność kątowa jest natomiast istotna w przypadku nadprzewodników niekonwencjonalnych. Rozważmy zatem złącze, w którym metal (N) zastąpiony jest ferromagnetykiem (F). Załóżmy, że kierunek pola molekularnego jest zgodny z kierunkiem osi z. Pozwala nam to na podział rozkładu spinów elektronów na dwa przyczynki: spiny skierowane w dodatnim kierunku osi z (\uparrow), oraz spiny skierowane w ujemnym kierunku osi z (\downarrow). Rozszerzone równanie Bogoliubowa – de Gennesa zastosowane do złącza F/I/S w konfiguracji z-y ma postać [9], [21], [106]:

$$\begin{pmatrix} (H_0 - E)\check{1} - U(x)\check{\sigma}_z\Theta(-x) & \check{\Delta}(\theta_s)\Theta(x) \\ \check{\Delta}^\dagger(\theta_s)\Theta(x) & -[(H_0 - E)\check{1} - U\check{\sigma}_z\Theta(-x)]^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\uparrow(x) \\ u_\downarrow(x) \\ v_\uparrow(x) \\ v_\downarrow(x) \end{pmatrix} = \check{0} \quad (2-138)$$

gdzie

$$H_0 = -\hbar^2\nabla^2/2m + V(x)\delta(x) - E_F \quad (2-139)$$

$V(x)$ oznacza wysokość bariery potencjału, $\delta(x)$ jest delta Diraca, E oznacza energię elektronu, E_F jest energią Fermiego, $U(x)$ jest energią wymiany, $\check{\sigma}_z$ jest zetową macierzą Pauliego, $\Theta(x)$ jest funkcją Heaviside'a, m określa masę cząstki. Granica interfejsu znajduje się w płaszczyźnie z-y. Transport ładunku odbywa się wzdłuż osi x. Bariera potencjału jest generowana przez izolator umieszczony w $x = 0$. θ_s oznacza kąt pomiędzy wektorem falowym cząstki przetransmitowanej a normalną do interfejsu. Macierz $\check{\Delta}(\theta_s)$ określającą szczelinę energetyczną nadprzewodnika, jest uogólnieniem wzoru (1-56) i ma następującą postać:

$$\check{\Delta}(\theta_s, x) = \check{\Delta}(\theta_s)\Theta(x) = \begin{bmatrix} \Delta_{\uparrow\uparrow}(\theta_s) & \Delta_{\uparrow\downarrow}(\theta_s) \\ \Delta_{\downarrow\uparrow}(\theta_s) & \Delta_{\downarrow\downarrow}(\theta_s) \end{bmatrix} \Theta(x) \quad (2-140)$$

gdzie

x jest tutaj współrzędną środka masy pary elektronów. Kierunki spinów elektronów oznaczono poprzez \uparrow, \downarrow . Dla ruchu cząstek w płaszczyźnie x-y rozpatrujemy tylko zmianę współrzędnej x oraz rzuty wektorów falowych na oś y . W ogólności można rozpatrywać zależność szczeliny od kąta θ_s i współrzędnej \vec{r} , która wynika z przejścia od współrzędnych położeniowych (\vec{r}_1, \vec{r}_2) elektronów tworzących parę, do współrzędnych ruchu względnego $\vec{r}_w = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ i współrzędnych środka masy $\vec{r} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$.

Transformacja Fouriera funkcji szczeliny do przestrzeni wektora falowego \vec{k} ma postać:

$$\Delta(\vec{k}, \vec{r}) = \int d\vec{r}_w \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_w) \tilde{\Delta}(\vec{r}_w, \vec{r}) \quad (2-141)$$

Pozwala ona przedstawić funkcję szczeliny jako funkcję wektora \vec{k} i \vec{r} ($\Delta_{SS'}(\vec{k}, \vec{r})$). Ponieważ interesujące są dla nas pędy w pobliżu powierzchni Fermiego, to znaczy takie, dla których $\vec{k} \cong \vec{k}_F$. Oznacza to, że szczelina energetyczna zależy od kierunku wektora falowego tj. od kątów i współrzędnej środka masy kwazicząstki przez co otrzymujemy $\Delta(\theta_S, \vec{r})$ a w podanej konfiguracji złącza $\Delta(\theta_S, x)$.

W przypadku stanów nieunitarnych spin padającego elektronu jest zachowany przy odbiciu Andreeva. Np. w przypadku rutenianu strontu oś kwantyzacji jest oś prostopadła do płaszczyzny RuO₂. Równanie Bogoliubowa – de Gennes'a zawiera cztery niewiadome składowe parametru porządku, które mogą być rozdzielone na dwa niezależne układy równań. Pierwszy układ może opisywać unitarne wzbudzenia w nadprzewodniku, gdzie $\Delta_{\downarrow\uparrow}$ oraz $\Delta_{\uparrow\downarrow}$ są różne od zera. Drugi układ może opisywać nieunitarne wzbudzenia, dla których $\Delta_{\uparrow\uparrow}$ oraz $\Delta_{\downarrow\downarrow}$ są różne od zera [9]. Dla stanów unitarnych funkcja falowa po stronie ferromagnetyka składa się z trzech członów: członu opisującego padający elektron, członu opisującego odbitą dziurę (odbicie Andreeva) oraz członu zawierającego informację o odbitym elektronie. Postać funkcji jest następująca:

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow(\downarrow)}^u(x) = & \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(ik_{\uparrow(\downarrow)}x \cos(\theta)) + a_{\downarrow(\uparrow)} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \exp(ik_{\downarrow(\uparrow)}x \cos(\theta_A)) \\ & + b_{\uparrow(\downarrow)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp(-ik_{\uparrow(\downarrow)}x \cos(\theta)) \end{aligned} \quad (2-142)$$

gdzie θ to kąt padania i odbicia elektronu, zaś θ_A oznacza kąt odbicia dziury. Kąty są liczone od normalnej do interfejsu. Ruch elektronu odbywa się wzdłuż osi x, a wektory falowe cząstek zostały wyrzutowane na oś x. Podobnie rzutowania wprowadzone są dla funkcji falowej w obszarze nadprzewodnika $\psi^S(x)$. Zmiana wartości wektora $k_{\uparrow(\downarrow)}$, a co z tym idzie, energii kwazicząstki pod wpływem zewnętrznego pola wyraża się wzorem:

$$k_{\uparrow(\downarrow)} = k_F \sqrt{1 \pm X}, \quad (2-143)$$

gdzie $X = U/E_F$. W obszarze nadprzewodzącym faza parametru porządku odgrywa ważną rolę:

$$\begin{aligned} \psi^S(x) = & c_{\uparrow(\downarrow)} \begin{pmatrix} u(\theta_S) \\ \phi_+^* v(\theta_S) \end{pmatrix} \exp(ik_S x \cos(\theta_S)) \\ & + d_{\uparrow(\downarrow)} \begin{pmatrix} \phi_- v(\pi - \theta_S) \\ u(\pi - \theta_S) \end{pmatrix} \exp(-ik_S x \cos(\theta_S)) \end{aligned} \quad (2-144)$$

Dla obszaru nadprzewodnika przyjęto założenie, że wektor falowy kwazicząstek \vec{k}_s jest równy, co do wartości wektorowi falowemu na poziomie Fermiego po stronie ferromagnetyka, tzn. $k_s = k_F$. Wektor ten wyraża się wzorem

$$k_s = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E_F} \quad (2-145)$$

Czynnik fazowy przerwy energetycznej określa wyrażenie:

$$\phi_{\pm} = \Delta_{\pm}(\theta_s) / |\Delta(\theta_s)| \quad (2-146)$$

gdzie $\Delta_+(\theta_s) = \Delta(\theta_s)$, a $\Delta_-(\theta_s) = \Delta(\pi - \theta_s)$. ϕ_{\pm}^* oznacza sprzężenie zespolone do wyrażenia (2-146). $u(\theta_s)$ oraz $v(\theta_s)$ oznaczają czynniki koherencji. Kierunki spinów przy współczynnikach $c_{\uparrow[\downarrow]}$ oraz $d_{\uparrow[\downarrow]}$ oznaczają kierunek spinu padającego elektronu. Warunki „zszywania” funkcji falowych są takie same jak poprzednio ((2-120) i (2-121)). Schematyczne przedstawienie sytuacji na granicy interfejsu dla stanu unitarnego i nieunitarnego pokazano na rysunku 4-1.

Rozdział 3. Własności rutenianu strontu – Sr_2RuO_4 .

W rozdziale tym przedstawiono podstawowe własności rutenianu strontu w stanie normalnym i nadprzewodzącym. W części poświęconej nadprzewodnictwu omówiono te eksperymenty, które mogą świadczyć o nadprzewodnictwie niekonwencjonalnym w tym związku.

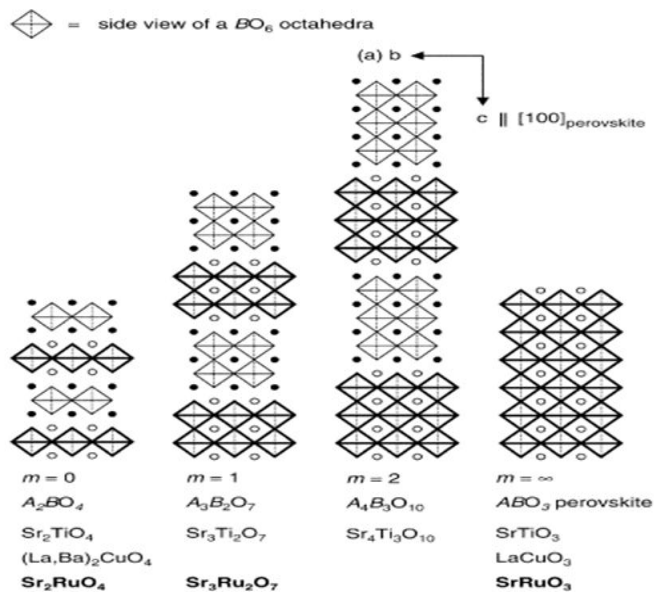
Rozdział 3.1 Struktura krystalograficzna Sr_2RuO_4 .

Na podstawie badań rentgenograficznych ustalono, że rutenian strontu, Sr_2RuO_4 , ma strukturę perowskitu [4], [3]. Struktura ta została przedstawiona na rysunkach 3-1 i 3-2. Rysunek 3-1 przedstawia szkic struktury krystalicznej homologów perowskitu. Struktura rutenianu strontu jest jedną z wielu struktur, które może przyjmować mieszanina Sr, Ru i O. Sposób przygotowania próbki, skład materiałów wyjściowych oraz technika spiekania mają wpływ na skład końcowy ceramiki Sr_2RuO_4 . Poniżej znajduje się krótki opis homologów struktur perowskitu zdefiniowanych wzorem $A_{m+2}B_{m+1}O_{3m+4}$, do których należy Sr_2RuO_4 . Rodzina związków opisanych za pomocą powyższego wzoru jest także nazywana strukturą lub serią Ruddlesden-Popper [3]. Pierwsze badania nad systemem Sr-Ti-O przeprowadzono w latach 1957 i 1958 [107], [108]. Seria $A_{m+2}B_{m+1}O_{3m+4}$ zawiera następujące składniki: A oznacza kationy metali Sr, La, Ba; symbol B to kationy metali: Ru, Ti zaś O oznacza atom tlenu. Związek, którym zajmujemy się w tej pracy należy do homologu z $m=0$. Próbką o takiej strukturze została przygotowana w IBM Zürich Research Laboratory, (Szwajcaria), w latach 1989-1992 przez F. Lichtenberga. Lichtenberg ustalił na początku swoich badań w 1989, że dwa związki z powyższego homologu znajdują się w bazie danych ICDD – International Centre for Diffraction Data i są to Sr_2RuO_4 ($m=0$) oraz SrRuO_3 ($m = \infty$). Związek o składzie $\text{Sr}_3\text{Ru}_2\text{O}_7$ ($m = 1$) był także przedmiotem badań podjętych w pracy [109]. Wyznaczone parametry struktury krystalicznej w temperaturach 100 i 295 K podane zostały w publikacji [4]. Dane te wskazują, że stałe sieciowe wykazują małą zależność temperaturową.

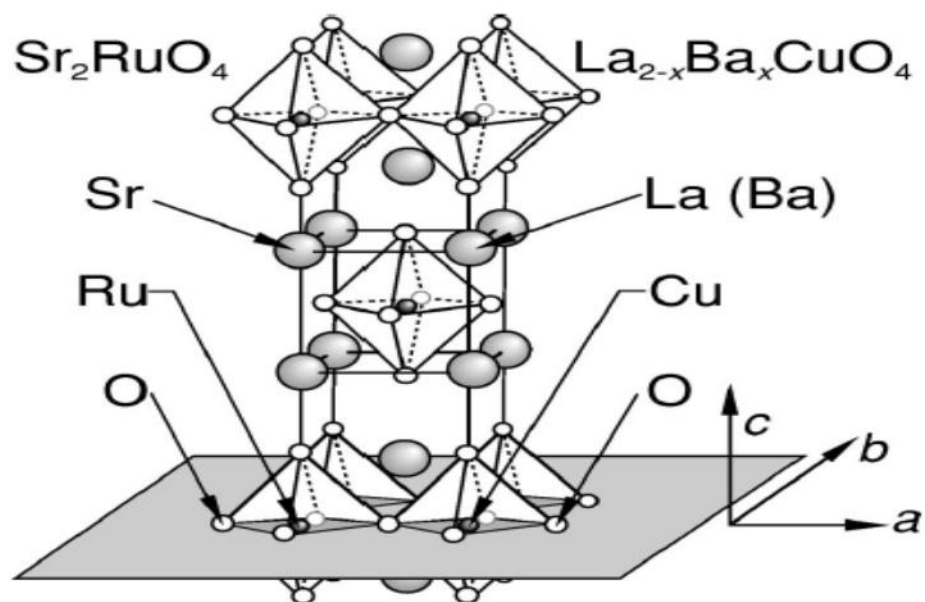
Na podstawie badań [4], [3], [107], [108] można podać następujące własności struktury tego związku:

- rutenian strontu krystalizuje w strukturze K_2NiF_4
- jest to struktura tetragonalna przestrzennie centrowana (body centered tetragonal structure), $I4/mmm$. Grupa punktowa kryształu to grupa D_{4h} .

- stosunek długości wiązania pomiędzy Sr-O a Ru-O powinien wynosić $\sqrt{2}$. Długości wiązań podane w pracy [4] są następujące: dla Sr-O 2.736Å oraz dla Ru-O 1.930Å. Stosunek tych dwóch wartości wynosi 1.418 i jest bardzo bliski $\sqrt{2} = (1.414)$. Dla związku K_2NiF_4 odpowiednie stosunki długości wynoszą $\sqrt{2}$ i jest to jeden z wyznaczników tej struktury.
- stałe sieciowe wynoszą $a = 3.8603(5)\text{Å}$, $c = 12.729(3)\text{Å}$ w temperaturze 100K
- objętość komórki elementarnej $V = 189.69\text{Å}^3$.
- czterowartościowy ruten ma konfigurację $4d^4$ i posiada parzystą liczbę elektronów (w odróżnieniu od atomów miedzi w miedziowo – tlenowych nadprzewodnikach wysokotemperaturowych, gdzie miedź jest w konfiguracji $3d^9$ (spin $S=1/2$) z nieparzystą liczbą elektronów).



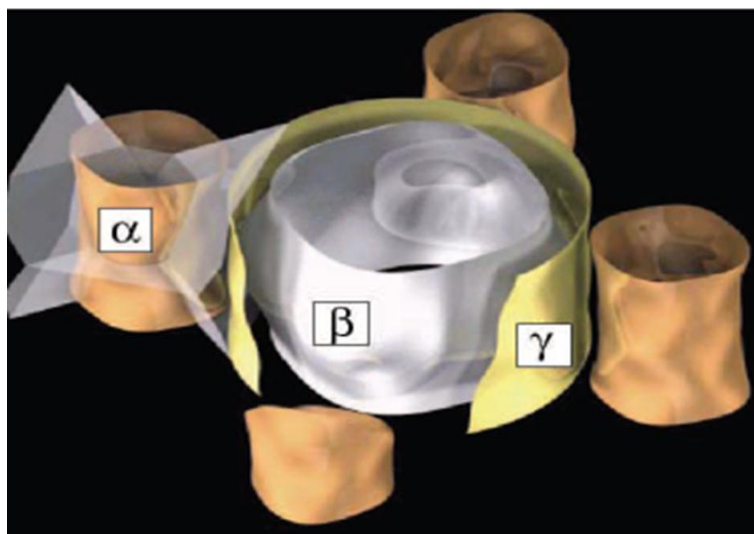
Rysunek 3-1. Szkic struktury krystalograficznej homologów perowskitu o wzorze ogólnym $A_{m+2}B_{m+1}O_{3m+4}$ dla $m = 0,1,2$ oraz ∞ . Puste kropki (o) reprezentują kationy typu A (Sr). Pełne kropki (●) reprezentują kationy typu B (Ru). Atomy tlenu są obecne w narożnikach ośmioboku $BO_6(RuO_6)$. Rzut struktury wykonany jest na oś a lub b. Warstwy są tworzone dzięki łączeniu ośmioboków we wspólnych wierzchołkach. Wzdłuż osi c, grubość warstwy wynosi $m+1$ i wzrasta wraz ze wzrostem liczby koordynacyjnej m. Pogrubione i cienkie linie ośmioboku $BO_6(RuO_6)$ i także pełne i puste kropki wskazują różnice w wysokości w płaszczyźnie rysunku [3].



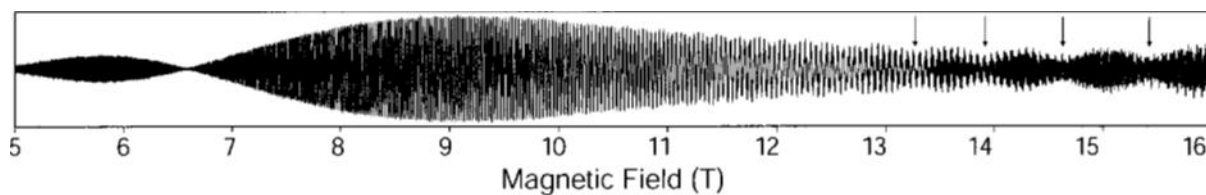
Rysunek 3-2. Struktura Sr_2RuO_4 pokazująca lokalizację Ru w ośmiokącie utworzonym z 6 atomów tlenu oraz dziewięciokrotną koordynację atomu Sr. Struktura ta jest podobna do struktury nadprzewodników tlenkowo-miedziowych, co symbolicznie zaznaczono poprzez podanie analogów po prawej stronie [6].

Rozdział 3.2 Struktura elektronowa rutenianu strontu i jego powierzchnia Fermiego.

Badania związane z określeniem struktury elektronowej zostały zapoczątkowane zaraz po odkryciu nadprzewodnictwa w rutenianie strontu. W 1995 roku zostały przeprowadzone obliczenia struktury elektronowej związku, w których wykorzystano metodę DFT-LDA (ang. Density Functional Theory) oraz przybliżenie oparte na lokalnej gęstości elektronowej LDA (ang. the Local - Density Approximation). Obliczenia te, przewidywały, że powierzchnia Fermiego zawiera trzy silnie dwuwymiarowe cylindryczne powierzchnie [7]. Powierzchnie Fermiego przedstawiono na rysunku 3-3. Obliczenia wykazały, że powierzchnie α i β są zdeterminowane przez orbitale atomowe rutenu (Ru) $4d_{xz,yz}$. Natomiast powierzchnia γ wynika z orbitalu d_{xy} . Elektronowa struktura rutenianu strontu została szczegółowo omówiona w pracach [110], [111], które potwierdziły strukturę elektronową zaproponowaną przez Oguchi [7]. Obliczenia numeryczne zostały poparte wynikami doświadczalnymi. W celu uzyskania wiarygodnych danych wyhodowano kryształ Sr_2RuO_4 o wysokiej czystości. Umożliwiło to przeprowadzenie badań efektu Shubnikhova – de Haasa oraz de Haasa – van Alphen [112].

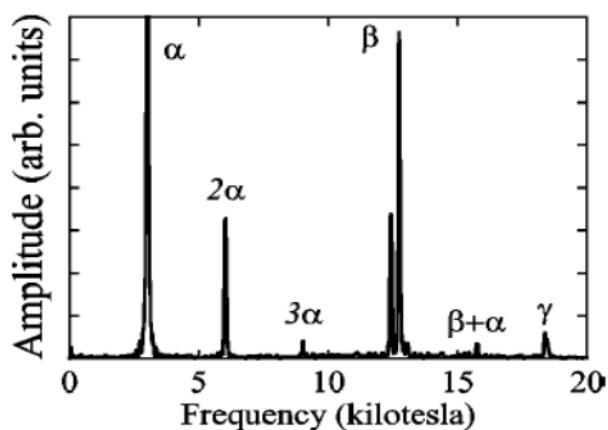


Rysunek 3-3. Struktura elektronowa Sr_2RuO_4 . Na rysunku widoczne są trzy cylindryczne struktury. Subpowierzchnia α znajduje się w czterech narożach jest typu dziurowego. Subpowierzchnia β jest wewnętrzną strukturą układu z prawie kwadratowym przekrojem. Subpowierzchnia γ jest zewnętrzną strukturą w stosunku do subpowierzchni β . Subpowierzchnia γ posiada prawie kołowy przekrój poprzeczny. Jedna czwarta część każdej subpowierzchni α znajduje się w pierwszej strefie Brillouina. Pofaldowania na subpowierzchniach zostały powiększone piętnastokrotnie. Subpowierzchnie β i γ są typu elektronowego [113].



Rysunek 3-4. Typowe dane dla efektu de Haasa-van Alpheny uzyskane dzięki pomiarom na wysokiej jakości kryształce Sr_2RuO_4 [114].

Na rysunku 3-4 [114] przedstawiono sygnał $\partial^2 M / (\partial B)^2$ (M oznacza namagnesowanie) uzyskany metodą modulacji polowej. Amplituda pola modulującego została dostrojona tak, aby stłumić sygnał innych dominujących sygnałów o niskiej częstotliwości. Metoda ta opisana jest w książce Shoenberga [115]. Transformata Fouriera obliczona dla wyników podanych na rysunku 3-4 zawiera trzy fundamentalne składowe, oznaczone odpowiednio α , β i γ (rysunek 3-5). Składowe te odpowiadają, w przybliżeniu, trzem warstwom określonym na powierzchni Fermiego przedstawionym na rysunku 3-3. W celu uzyskania danych o dużej rozdzielczości, wykonano serię pomiarów obracając próbki dookoła osi: (100) oraz (110). Dzięki temu udało się zauważyć pofałdowania na subpowierzchniach.



Rysunek 3-5. Transformata Fouriera dla wyniku przedstawionego na rysunku 3-4. Widoczne są trzy główne składowe powierzchni Fermiego (α, β, γ) oraz ich harmoniczne składowe. Rozszczepienie piku β jest spowodowane pofałdowaniem powierzchni wzdłuż osi c [116].

Rozdział 3.2.1 Masa kwazicząstek.

Masa cyklotronowa kwazicząstek, wyznaczona dla subpowierzchni Fermiego α, β, γ może być otrzymana z temperaturowych zależności amplitud oscylacji obserwowanych w zjawisku de Haasa – van Alphen [117]. W pracy [117] przedstawiono wyniki badań zależności masy od przyłożonego pola magnetycznego, aż do wartości pola 33T. Wartości otrzymane podczas tych pomiarów określono z dokładnością $\pm 10\%$ dla powierzchni β , dokładność $\pm 5\%$ uzyskano dla pozostałych dwóch powierzchni Fermiego. Wyniki przedstawiono w tabeli 3-1. Autorzy pokazują, że rutenian strontu nie wykazuje anomalnego zachowania typu non-Fermi liquid w zależności masy cyklotronowej od przyłożonego pola magnetycznego i temperatury. Dlatego elektrony i dziury w tym związku można traktować, jako dobrze zdefiniowaną ciecz Fermiego. Otrzymane masy efektywne są zgodne z masami otrzymanymi z ciepła właściwego [87]. Oznaczenia w tabeli 3-1 są następujące:

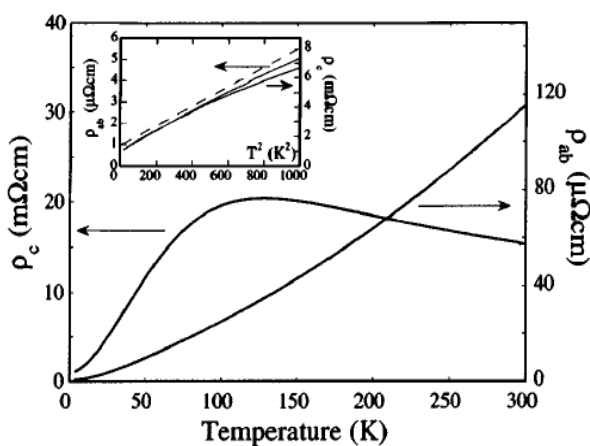
- $k_F \equiv \sqrt{A_e/\pi}$, gdzie A_e jest powierzchnią przekroju powierzchni Fermiego dla poszczególnych subpowierzchni. Opublikowane wyniki struktury pasmowej dają przewidywane wartości k_F z dokładnością $\pm 5\%$. Jest to uśredniona wartość wektora falowego elektronów na powierzchni Fermiego.
- Masa cyklotronowa m^* w jednostkach masy elektronu została podana na podstawie [117]
- Wartości m_{band} podane zgodnie z [118]
- $v_F \equiv \hbar k_F/m^*$ oznacza prędkość na poziomie Fermiego
- Kwadrat prędkości jest uśredniony po całej strefie Brillouina
- $t_{\perp}(K)$ oznacza całą przeskoku w kierunku osi c .

Powierzchnia Fermiego	α	β	γ
Charakter	Dziurowy	Elektronowy	Elektronowy
$k_F(\text{\AA}^{-1})$	0.304	0.622	0.753
$m^*(m_e)$	3.3	7.0	16.0
m^*/m_{band}	3.3	3.5	5.5
$v_F(ms^{-1})$	1.0×10^5	1.0×10^5	5.5×10^4
$\langle v_{\perp}^2 \rangle (m^2 s^{-2})$	7.4×10^5	3.1×10^6	1.0×10^5
$t_{\perp}(K)$	7.3	15.0	2.7

Tabela 3-1 Parametry kwazicząstek w Sr_2RuO_4 w stanie normalnym [117], [118].

Rozdział 3.3 Anizotropowa przewodność elektryczna.

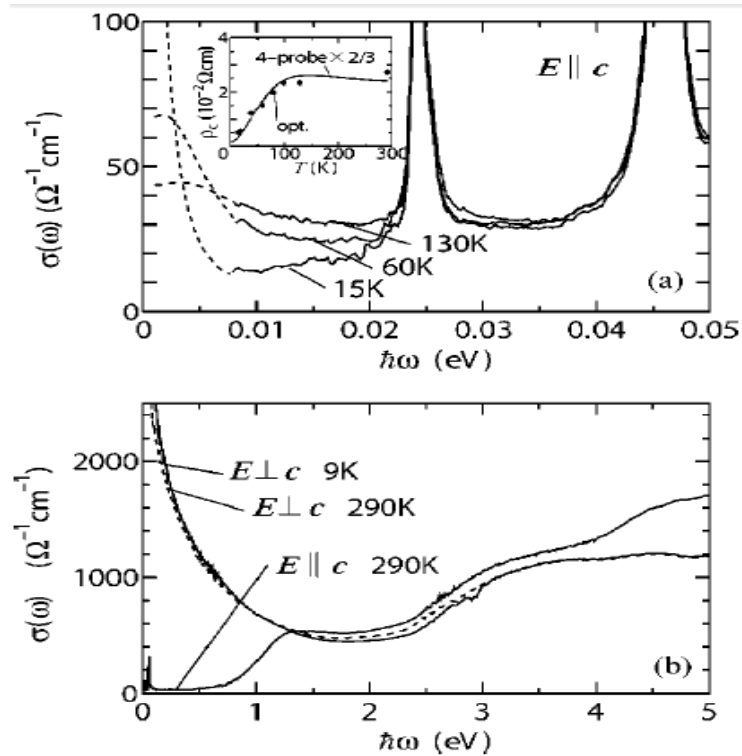
Badania przewodnictwa elektrycznego i odkrycie jego anizotropii zostały po raz pierwszy dokonane przez Lichtenberga i współpracowników [119] na dwa lata przed odkryciem nadprzewodnictwa w rutenianie strontu. Badanie te zostały potwierdzone w publikacji [120], a wyniki są przedstawione poniżej.



Rysunek 3-6. Anizotropowa oporność w Sr_2RuO_4 na podstawie publikacji [120]. Linia przerywana na mniejszym wykresie pokazuje niskotemperaturową zależność przewodności od T , spodziewaną dla cieczy Fermiego.

Oporność elektryczna jest silnie anizotropowa. Stosunek oporności mierzonej w płaszczyźnie a - b do oporności w kierunku osi c waha się od 400 do 4000. W wyższych temperaturach, oporność międzypłaszczyznowa ρ_c , maleje wraz ze wzrostem temperatury, co jest charakterystyczne dla przypadku niekoherentnego mechanizmu przewodzenia. W zachowaniu oporności międzypłaszczyznowej w zakresie niskich temperatur można wyróżnić szerokie maksimum, którego wartość jest rejestrowana przy ok. 130K (patrz rysunek 3-6). W zakresie jeszcze niższych temperatur oporność elektryczna jest zgodna z metalicznym zachowaniem aż do osiągnięcia T_c . Oporność mierzona w płaszczyźnie a - b wykazuje charakter metaliczny, poczynając od 300K do temperatury przejścia w stan nadprzewodzący. Poniżej temperatury ok. 20K obydwie zmierzone oporności tj. ρ_{ab} i ρ_c wykazują metaliczny charakter a ich zależność temperaturowa może być wyrażona z dobrym przybliżeniem jako proporcjonalna do T^2 . Sugeruje to zachowanie się elektronów zgodnie z opisem dla cieczy Fermiego [121]. Należy zaznaczyć, że badana próbka wykazywała resztkową oporność poniżej $1 \mu\Omega$ cm, co świadczy o jej bardzo wysokiej czystości. Następnym ważnym aspektem transportu prądu stałego pokazanego na rysunku 3-6 jest niezależna od temperatury anizotropia oporności poniżej 20K. Sugeruje to, że założenie o anizotropii masy efektywnej może być uznane za poprawne w konstruowaniu modelu przewodnictwa. Tłumaczy to, wysoko anizotropową, ale nadal zasadniczo trójwymiarową przewodność w niskich temperaturach, gdzie koherentne wiązania są tworzone wzdłuż osi c .

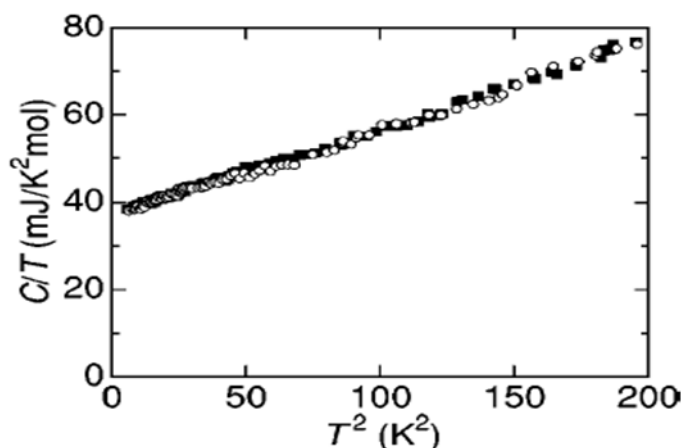
Idea koherentnego transportu ładunku we wszystkich kierunkach w niskich temperaturach w Sr_2RuO_4 jest zgodna z badaniami przeprowadzonymi nad przewodnością prądu zmiennego [122]. Główne wyniki tej pracy są zaprezentowane na rysunku 3-7. Poniżej 30 K maksimum Drudego jest widoczne dla pomiarów przeprowadzonych z polem elektrycznym przyłożonym równolegle jak i prostopadle do płaszczyzny RuO_2 . Badania te potwierdzają istnienie cieczy Fermiego w niskich temperaturach [87].



Rysunek 3-7. Fotoprzewodnictwo dla Sr_2RuO_4 pokazujące maksimum Drudego dla transportu prostopadłego do płaszczyzny Ru-O_2 w niskich temperaturach (a). Fotoprzewodnictwo dla transportu ładunku w płaszczyźnie Ru-O_2 wskazuje na istnienie maksimum Drudego w wysokich temperaturach (b). Wstawka z wykresem w (a) jest porównaniem fotoprzewodnictwa z przepływem stałego prądu (dc transport) prostopadłego do powierzchni Ru-O [33].

Rozdział 3.4 Elektronowe ciepło właściwe.

Ciepło właściwe rutenianu strontu w stanie normalnym było przedmiotem licznych badań [2], [123], [124]. Początkowe dane uzyskane dla próbek polikrystalicznych charakteryzowały się dużym rozrzutem i dopiero pomiary uzyskane na monokryształach, otrzymane na Uniwersytetach w Hiroszimie i Kyoto, dały spójne i wiarygodne wyniki. Rezultaty badań przedstawiono na rysunku 3-8.

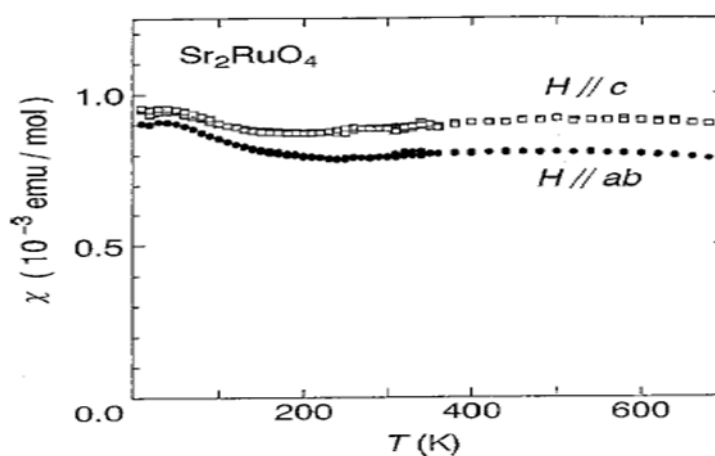


Rysunek 3-8. Całkowite ciepło właściwe Sr_2RuO_4 podzielone przez temperaturę jako funkcja T^2 . Wypełnione kwadraty reprezentują pomiary w przypadku braku pola magnetycznego. Otwarte okręgi reprezentują pomiary wykonane w silnym polu magnetycznym o wartości 14T. Pole magnetyczne przyłożone jest równoległe do osi c [116].

Poniżej 15K, ciepło właściwe jest dobrze określone poprzez wyrażenie $\gamma_{el}T + \beta_{ph}T^3$ gdzie: $\gamma_{el} = 38 \pm 2$ mJ/(mol K^2) – współczynnik związany z elektronowym ciepłem właściwym, $\beta_{ph} = 0.200 \pm 0.005$ mJ/(mol K^4) – współczynnik związany z fononowym ciepłem właściwym. Wykres na rysunku 3-8 pokazuje, że nie zaobserwowano różnicy w pomiarach ciepła właściwego w polu magnetycznym i bez obecności tego pola. Odejmując przyczynek fononowy do ciepła właściwego, uzyskany na podstawie danych z rysunku 3-8, otrzymujemy stałą wartość elektronowego ciepła właściwego dla temperatur poniżej 15K, co jest zgodne z teorią cieczy Fermiego. Wartość γ_{el} szacowana z większości obliczeń struktury pasmowej Sr_2RuO_4 daje wyniki mniejsze o czynnik 3 – 4. Jest to zgodne z obecnością silnych korelacji elektronowych, które w obliczeniach opartych na LDA są uwzględnione tylko w przybliżeniu.

Rozdział 3.5 Podatność magnetyczna.

Typowe zachowanie temperaturowej zależności podatności magnetycznej χ , dla fazy normalnej Sr_2RuO_4 zostały pokazane na rysunku 3-9. Jak widać podatność jest zdominowana przez izotropowy, słabo zależny od temperatury przyczynki spinowy (paramagnetyzm Pauliego), pomimo silnie anizotropowej struktury elektronowej. Podatność spinową otrzymano odejmując od całkowitej podatności dwa przyczynki: podatność diamagnetyczną elektronów rdzeniowych oraz podatność typu Van Vlecka wynikającą z efektów pola krystalicznego.



Rysunek 3-9. Statyczna podatność magnetyczna Sr_2RuO_4 . Pomiary wykonano w obecności pola magnetycznego 1T przyłożonego równoległe do płaszczyzny a - b oraz równoległe do osi c [87].

Rozdział 3.6 Kilka uwag o mechanizmach parowania w Sr_2RuO_4 .

Rutenian strontu jest kandydatem na niekonwencjonalny nadprzewodnik. Mechanizm parowania elektronów jest tu odmienny niż w przypadku nadprzewodników, dla których parametr porządku jest typu s-wave [125]. Jako mechanizm „sklejania” elektronów bierze się pod uwagę różne czynniki np. fluktuacje spinowe, ładunkowe, orbitalne, czy też odpychanie kulombowskie. Wydaje się, że niekonwencjonalny parametr porządku, który charakteryzuje się anizotropową strukturą, wzmacnia efekty magnetyczne. Z tego powodu, jedną z ważnych informacji w odniesieniu do nadprzewodników niekonwencjonalnych jest informacja o efektach spinowych. Odnosi się to szczególnie do materiałów takich jak Sr_2RuO_4 , z uwagi na niską wartość T_C i dużą wartość długości koherencji. Dokładna znajomość struktury elektronowej umożliwiła przetestowanie roli fluktuacji spinowych w tym materiale. Podstawowe informacje na temat spektrum fluktuacji spinów otrzymuje się z urojonej części dynamicznej podatności magnetycznej materiału, $\chi''(q, \omega)$, którą można otrzymać z nieelastycznego rozpraszania neutronów. Podczas tego eksperymentu przekrój czynny na oddziaływania neutronów ze spinami badanego układu jest bardzo mały, co wymaga stosowania dużego kryształu o wysokiej czystości [126]. Inną techniką, która umożliwiła pomiar $\chi''(q, \omega)$ bez potrzeby wykorzystywania dużych kryształów, jest jądrowy rezonans magnetyczny (NMR). W celu uzyskania informacji na temat charakteru fluktuacji spinów należy zbadać czas relaksacji dla atomów położonych w różnych pozycjach w kryształach. Atomy tlenu znajdujące się w różnych odległościach od atomu rutenu będą miały zmienioną wartość częstotliwości Larmora. Znając czas relaksacji dla różnych położań atomów tlenu i rutenu można spróbować określić charakter tych fluktuacji. W pracy [127] zmierzono sygnał NMR pochodzący od rutenu (^{101}Ru) oraz tlenu (^{17}O). Pomiar czasu relaksacji przeprowadzono w zakresie od 4K do temperatury pokojowej. Pokazano, że fluktuacje spinowe w Sr_2RuO_4 są zdominowane przez zachowanie ferromagnetyczne. Późniejsze badania związane z nieelastycznym rozpraszaniem neutronów [127] pokazały, że występujące duże fluktuacje spinowe mają charakter antyferromagnetyczny, a nie ferromagnetyczny. Fluktuacje te wynikają z zagnieżdżenia subpowierzchni Fermiego α i β . Te wyniki zostały potwierdzone w niezależnej teoretycznej pracy [128]. Dodatkowo są one zgodne z wynikami badania oscylacji kwantowych [115], [113]. W latach 1998 - 1999 ukazały się publikacje [129], [130] zawierające wyniki pomiarów NMR dla ^{17}O . Podczas tego eksperymentu pola magnetyczne przyłożone do próbki były zorientowane równolegle i prostopadle do osi c. Pokazano, że międzyplaszczynowe fluktuacje spinów mają silnie antyferromagnetyczny charakter, co nie jest zgodne z wynikami badań nad nieelastycznym rozpraszaniem neutronów [131]. W badaniach tych nie zaobserwowano bowiem ferromagnetycznych korelacji fluktuacji spinów pomiędzy płaszczynami. Brak jednoznacznych wniosków z pomiarów dynamicznej podatności magnetycznej, dotyczących charakteru fluktuacji spinowych, uniemożliwia odpowiedź na pytanie, które subpowierzchnie Fermiego (α, β, γ) są odpowiedzialne za nadprzewodnictwo.

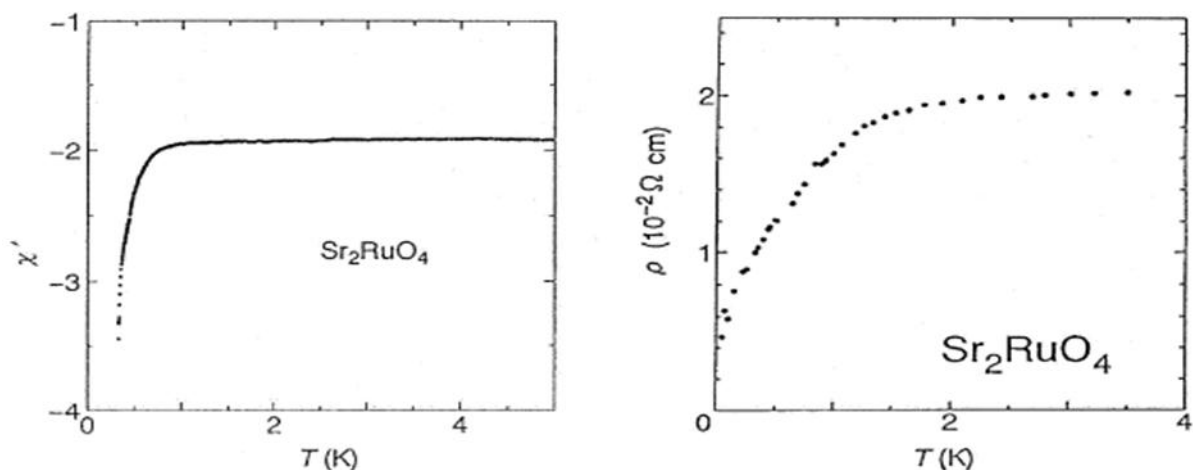
Innymi słowy nie wiemy np. czy wszystkie subpowierzchnie mają równy udział w tym zjawisku. Przykładowo, jeżeli za nadprzewodnictwo jest odpowiedzialna subpowierzchnia γ , to efekty zagnieżdżenia na subpowierzchniach α i β , mogą mieć znikome znaczenie dla mechanizmu nadprzewodzącego. Za najbardziej prawdopodobny mechanizm parowania uważa się jednowęzłowe odpychanie kulombowskie pomiędzy elektronami rutenu z pasma γ , które utworzone jest głównie z orbitali d_{xy} [125]. Elektrony te wnoszą największy wkład do gęstości stanów na powierzchni Fermiego i mają także największą masę efektywną (ok. $16m_e$, patrz tabela 3.1), co prowadzi do silnych korelacji elektronowych. Można pokazać, że wyrazy wyższego rzędu rozwinięcia potencjału parowania względem jednowęzłowego parametru odpychania kulombowskiego mają nietrywialną zależność od wektora falowego i może to prowadzić do efektywnego potencjału przyciągającego (patrz np. [125]).

Rozdział 3.7 Odkrycie stanu nadprzewodzącego. Pomiary potwierdzające istnienie stanu nadprzewodzącego w Sr_2RuO_4 .

Badania struktury krystalicznej rutenianu strontu zostały wykonane w pierwszych latach po II Wojnie Światowej. W tym okresie nie badano nadprzewodnictwa w związkach ceramicznych i dopiero w 1986 roku w IBM Zürich Research Laboratory w Szwajcarii Bednorz i Müller odkryli nadprzewodnictwo w związku $(\text{La, Ba})_2\text{CuO}_4$ [8]. W 1990 roku Lichtenberg otrzymał krystaliczną próbkę rutenianu strontu i przeprowadził badania własności fizycznych w niskich temperaturach aż do temperatury 4K [3]. Nikt nie podejrzewał, że struktura perowskitu bez udziału atomów miedzi może charakteryzować się nadprzewodnictwem. Przełom w badaniach rutenianu strontu dokonał się w Japonii. W 1994 roku Maeno i Hashimoto, obaj pochodzący z Uniwersytetu w Hiroszimie, poszukiwali nadprzewodnictwa w Sr_2RuO_4 w temperaturach poniżej 4K. Pierwsze pomiary zostały dokonane na próbkach polikrystalicznych. Otrzymano obiecujące rezultaty, co zachęciło badaczy do wykonania dalszych badań na próbce otrzymanej w 1990 w Zurichu. Rezultaty tych badań na próbkach polikrystalicznych zostały zawarte w pracy magisterskiej Hashimoto [132] oraz w pracach [122], [2] oraz [3]. Wyniki dla podatności magnetycznej mogłyby wskazywać na występowanie nadprzewodnictwa w temperaturze ok 1 K. Nie zostały one jednak poparte badaniami oporności, która wciąż była większa niż zero. Wymienieni badacze z Japonii przedłożyli swoje wyniki autorowi przełomowego odkrycia w zakresie nadprzewodnictwa wysokotemperaturowego, Bednorzowi i ten zaciekawiony otrzymanymi rezultatami wysłał otrzymany w 1990 roku kryształ rutenianu strontu do Uniwersytetu w Hiroszimie. Odkrycie nadprzewodnictwa w krystalicznej próbce Sr_2RuO_4 nastąpiło w 1994 roku [2]. Temperatura przejścia w stan nadprzewodzący została określona na 0.93K. Chciałbym zaznaczyć, że temperatura przejścia w stan nadprzewodzący nie jest spektakularna, jednak na uwagę zasługuje fakt wykrycia nadprzewodnictwa w związku metalicznym o strukturze perowskitu i bez obecności atomów miedzi. Już w 1995 roku Rice i Sigrist [5] oraz Baskaran w 1996 [133] sugerowali istnienie nadprzewodnictwa w stanie trypletowym w tym związku.

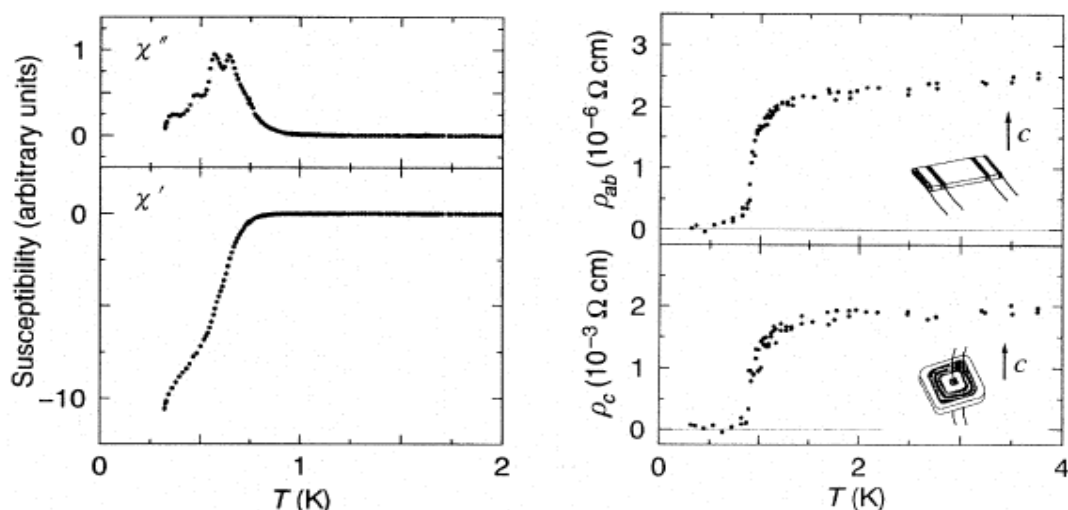
Rozdział 3.7.1 Oporność elektryczna i podatność magnetyczna.

Oporność elektryczna materiału w stanie nadprzewodzącym, mierzona metodą stałoprądową, jest zerowa lub wykazuje bardzo małą wartość. Dla próbek polikrystalicznych podatność magnetyczna wykazuje spadek poniżej 1K, a oporność wykazuje spadek już poniżej 2K. Takie zachowanie nie rozstrzyga definitywnie o występowaniu nadprzewodnictwa z uwagi na nieosiągnięcie zerowej oporności [132] (patrz rys.3.10)



Rysunek 3-10. Podatność magnetyczna, χ' wyrażona w arbitralnych jednostkach oraz oporność elektryczna ρ polikrystalicznej próbki Sr_2RuO_4 , jako funkcje temperatury poniżej 5K [132], [3].

Podobne zachowanie obserwuje się dla monokryształów (patrz rys.3-11). Na podstawie uzyskanych wyników ustalono wartość temperatury przejścia w stan nadprzewodzący. Temperatura ta wynosi 0.93K. Wyniki uzyskano w 1994 roku wykonując badania na kryształach wychodowanym w 1990 [2]



Rysunek 3-11. Zachowanie monokryształu Sr_2RuO_4 w niskiej temperaturze. Lewa strona rysunku zawiera rzeczywistą χ' oraz urojoną χ'' część podatności magnetycznej. Prawa strona rysunku przedstawia oporność ρ_c wyznaczoną odpowiednio prostopadle do płaszczyzny $a-b$ oraz w płaszczyźnie $a-b$, oznaczoną ρ_{ab} .

Rozdział 3.7.2 Parametry Ginzburga – Landaua.

Pierwszy zbadany kryształ Sr_2RuO_4 miał temperaturę krytyczną $T_c=0.93\text{K}$. Próbki wyhodowane później przez zespół Akima Takashi charakteryzowały się temperaturą przejścia 1.49K [134]. Dla tych próbek wyznaczono następujące parametry termodynamiczne:

- Górne pola krytyczne dla próbki z $T_c=1.49\text{K}$ były przedmiotem badań z wykorzystaniem oporności zależnej od pola magnetycznego. Pole magnetyczne było przyłożone równoległe do płaszczyzny $a-b$, ($H \parallel a - b$) oraz do osi c ($H \parallel c$) [134].

Pomiary wykonano także dla pola magnetycznego równoległego do osi c , z wykorzystaniem pomiarów podatności w zmiennym polu magnetycznym (AC susceptibility). Pomiary te posłużyły do wyznaczenia następujących wartości:

- górne pole krytyczne $\mu_0 H_{c2}(0)$ dla pola $H \parallel ab$, wynosi 1.5T
- górne pole krytyczne $\mu_0 H_{c2}(0)$ dla pola $H \parallel c$, wynosi 0.075T .

Dokładność pomiarów oszacowana została na 5%.

Termodynamiczne pole krytyczne $H_c(0)$, oszacowane dla próbki z $T_c=1.48\text{K}$ na podstawie pomiarów ciepła właściwego [135] wynosi 0.023T . Dane powyższe mogą posłużyć do wyznaczenia długości koherencji (ξ), parametru Ginzburga – Landaua (κ) oraz głębokości wnikania (λ).

Długości koherencji zdefiniowane są następująco:

$$\xi_{ab}(0) = [\Phi_0/2\pi\mu_0 H_{c2\parallel c}(0)]^{1/2} \quad (3-1)$$

$$\xi_c(0) = [\Phi_0/2\pi\xi_{ab}\mu_0 H_{c2\parallel ab}(0)]^{1/2} \quad (3-2)$$

Gdzie ξ_{ab} oznacza długość koherencji w płaszczyźnie $a-b$, ξ_c oznacza długość koherencji w kierunku osi c , zaś Φ_0 oznacza kwant strumienia magnetycznego. W celu wyznaczenia parametrów Ginzburga – Landaua, κ_{ab} oraz κ_c , posłużono się relacją:

$$H_{c2}(0) = \sqrt{2}\kappa(0)H_c(0) \quad (3-3)$$

oraz wykorzystano następujące zależności:

$$\kappa_{ab} = \lambda_{ab}/\xi_{ab} \quad (3-4)$$

$$\kappa_c = (\lambda_{ab}\lambda_c/\xi_{ab}\xi_c)^{1/2} \quad (3-5)$$

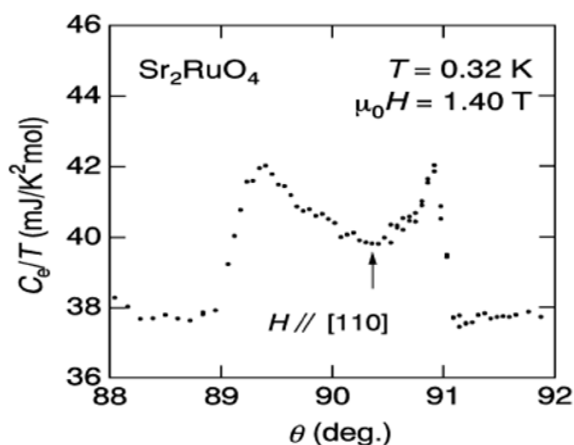
gdzie λ_{ab} oznacza głębokość wnikania pola magnetycznego dla prądów ekranujących płynących w płaszczyźnie $a-b$.

Parametr		ab	c
$\mu_0 H_{c2\parallel c}(0)(T)$	0.075		
$\mu_0 H_{c2\parallel ab}(0)(T)$	1.50		
$\mu_0 H_c(0)(T)$	0.023		
$\xi(0)(\text{\AA})$		660	33
$\lambda(0)(\text{\AA})$		1520	3.0×10^4
$\kappa(0)$		2.3	46
$\gamma_s = \xi_{ab}(0)/\xi_c(0)$	20		

Tabela 3-2 Parametry termodynamiczne dla próbki Sr_2RuO_4 . Parametr anizotropii stanu nadprzewodzącego zdefiniowany jest przez γ_s [6].

Rozdział 3.7.3 Ciepło właściwe w stanie nadprzewodzącym.

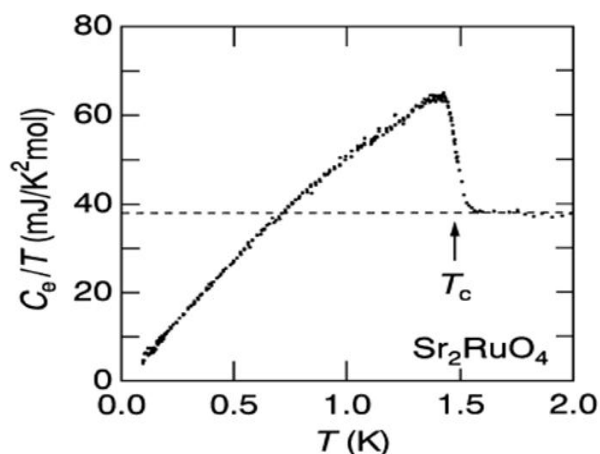
Kryształ Sr_2RuO_4 , który został poddany badaniu otrzymano metodą „płynącej strefy – floating zone” z zastosowaniem promieniowania podczerwonego, jako źródła energii potrzebnej do stopienia próbki [3]. Kryształ otrzymany w laboratorium przez Shuji NishiZaki oraz Yoshiteru Maeno [136] był dobrej jakości i wykazywał temperaturę przejścia w stan nadprzewodnictwa $T_c = 1.48\text{K}$. Termodynamiczna temperatura przejścia dla rutenianu strontu, T_{c0} została oszacowana na 1.50K . Dla podanego kryształu stosunek wielkości T_c / T_{c0} wynosi 0.99. Fakt ten, pozwala zaliczyć badany kryształ, jako prawie pozbawionego zanieczyszczeń [135]. Szczątkowa oporność jest na poziomie $0.1\mu\Omega \text{ cm}$. Uwzględniając fakt, że $T_c = 1.48\text{K}$ można oszacować poziom zanieczyszczeń poniżej 100ppm (ang. parts per milion). Dla badanego kryształu położenie głównych osi kryształu ustalono na podstawie badań krystalograficznych. Pomiarów ciepła właściwego dokonano w zakresie temperatur od 0.09 do 2.5K. Dokładność wykonania pomiarów ciepła właściwego była oceniona przez autorów [135] na poziomie 5, 10 oraz 100nJ/K dla temperatur 0.1, 0.3 oraz 1.0K. Rutenian strontu posiada trzy cylindryczne powierzchnie Fermiego i dla poprawnego wykonania pomiarów niezbędne było zorientowanie pola magnetycznego równoległe do płaszczyzny a - b . Dokładność orientacji pola magnetycznego względem płaszczyzny a - b wynosiła 0.3° . Badania wykazują zależność ciepła właściwego od wzajemnej orientacji próbki i pola magnetycznego. Stwierdzono, że układ jest w stanie nadprzewodzącym pomiędzy dwoma maksimumami na rysunku 3-12 tzn. wtedy gdy pole magnetyczne jest prawie równoległe do płaszczyzny a - b . Wyniki pomiarów elektronowego ciepła właściwego przedstawione są na rysunku 3-12. Technika pomiarowa także została omówiona w publikacji [135]. Zaznaczyć należy, że krzywa zależności elektronowego ciepła właściwego od kąta nie jest symetryczna względem lokalnego minimum. Jest to odzwierciedlenie faktu przyszpilenia (pinning) strumienia pola magnetycznego w próbce.



Rysunek 3-12. Zależność elektronowego ciepła właściwego (podzielonego przez T) od kąta θ pomiędzy kierunkiem pola magnetycznego i osią [001]. Strzałka wskazuje kąt, dla którego wykonano większość pomiarów [135].

Ciepło właściwe w zerowym polu magnetycznym.

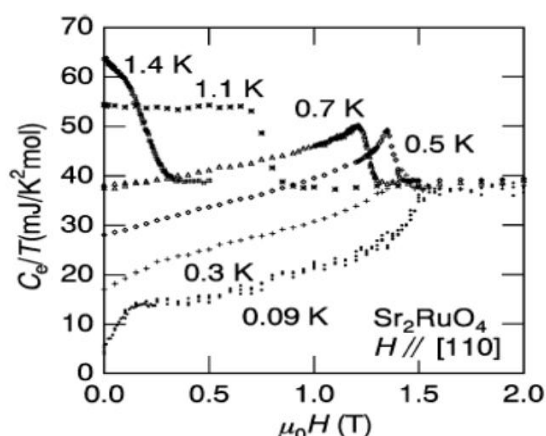
Symetria i struktura parametru porządku w rutenianie strontu jest nadal przedmiotem intensywnych badań. W szczególności chodzi o to czy funkcja przerwy energetycznej posiada punkty lub/i linie nodalne na powierzchni Fermiego. Konsekwencją zerowania się przerwy energetycznej jest zmiana zachowania elektronowego ciepła właściwego poniżej temperatury przejścia fazowego z eksponencjalnego na potęgowe. Dla linii nodalnych elektronowe ciepło właściwe jest proporcjonalne do kwadratu temperatury, natomiast dla punktów nodalnych jest ono proporcjonalne do trzeciej potęgi temperatury. Z tego powodu pomiary ciepła właściwego w niskich temperaturach są cennym źródłem informacji o symetrii parametru porządku. Rysunek 3-13 przedstawia rezultaty pomiaru temperaturowej zależności elektronowego ciepła właściwego bez obecności pola magnetycznego. Współczynnik elektronowego ciepła właściwego (współczynnik Sommerfelda) wynosi $\gamma_N = 37.5$ mJ/K²mol. Przejście w stan nadprzewodnictwa następuje w przedziale $\Delta T = 60$ mK, gdzie odnotowuje się skok ciepła właściwego od 25% do 75%. Względna wielkość zmiany $\Delta C_e / \gamma_N T_{c0}$, w temperaturze przejścia wynosi 0.74 ± 0.02 . Wielkość ta jest znacznie niższa niż przewidywana przez model z izotropową przerwą energetyczną, która powinna wynosić 1.43. Można uznać, że jest ona porównywalna z wartością 0.95 dla nadprzewodników charakteryzujących się przerwą energetyczną z horyzontalną linią nodalną [135]. Ponadto zależność C_e/T od temperatury w niskich temperaturach nie jest eksponencjalną, ale zależy liniowo od T.



Rysunek 3-13. Elektronowe ciepło właściwe w zerowym polu magnetycznym podzielone przez temperaturę, C_e/T jako funkcja temperatury dla próbki Sr_2RuO_4 [135]. Linia przerywana reprezentuje wartości C_e/T dla szczeliny izotropowej z horyzontalną linią nodalną znajdującą się na cylindrycznej powierzchni Fermiego.

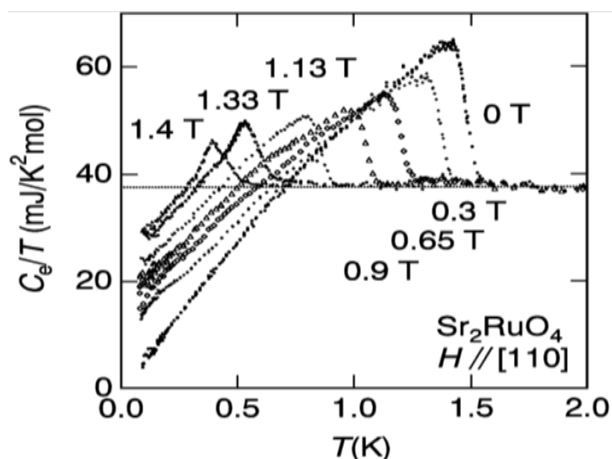
Ciepło właściwe w polu magnetycznym w stałej temperaturze.

Autorzy publikacji [135] wykonali również pomiary elektronowego ciepła właściwego w stałych temperaturach w zależności od przyłożonego pola magnetycznego przyłożonego zgodnie z kierunkiem [110]. Rysunek 3-14 przedstawia wartości elektronowego ciepła właściwego podzielonego przez T , jako funkcję pola magnetycznego. Zachowanie się krzywych w niskich temperaturach jest niezwykle. W temperaturze $T=0.09\text{K}$, zależność C_e/T ostro rośnie aż do osiągnięcia pola $\mu_0 H' = 0.15\text{ T}$ i osiąga plateau dla wartości C_e/T równej w przybliżeniu 0.40. Dla większych pól magnetycznych C_e/T rośnie stopniowo aż do osiągnięcia pola 1.3T. Po osiągnięciu wartości przyłożonego pola 1.3T, krzywe wznoszą się bardziej gwałtownie i w pobliżu $\mu_0 H_{c2} = 1.5\text{ T}$ osiągają stałą wartość odpowiadającą współczynnikowi elektronowego ciepła właściwego. Takie zachowanie wskazuje na istnienie dwóch charakterystycznych pól krytycznych H_{c2} oraz H'_{c2} .



Rysunek 3-14. Zależność elektronowego ciepła właściwego podzielonego przez T od przyłożonego pola magnetycznego dla różnych temperatur. Pole magnetyczne przyłożone wzdłuż jest kierunku [110] (rysunek z pracy [135])

Temperaturowa zależność ciepła właściwego w stałym polu magnetycznym.

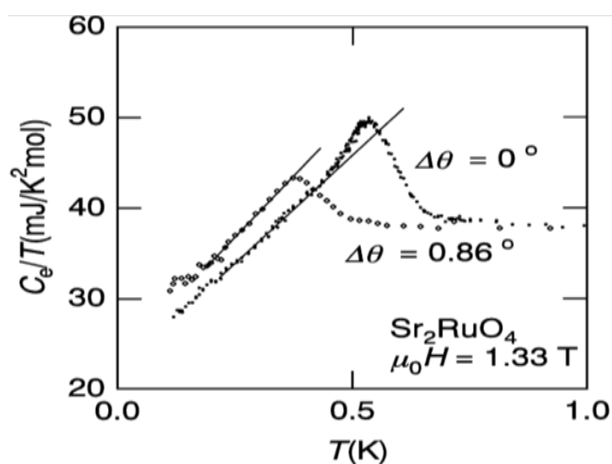


Rysunek 3-15. Zależność temperaturowa C_e/T od temperatury dla stałych pól magnetycznych równoległych do kierunku [110] (rysunek z pracy [135])

Wyniki pomiarów zależności C_e/T od temperatury dla wybranych pól magnetycznych przedstawiono na rysunku 3-15. Warto zaznaczyć, że krzywa reprezentująca pomiary dla zerowego pola jest zgodna z wynikami przedstawionymi na rysunku 3-13. Na rysunku 3-15 można zauważyć nietypowe zachowanie się krzywych w niskich temperaturach. Wartość C_e/T gwałtownie rośnie począwszy od temperatury 0.1K. Poniżej 1.2T zależność temperaturowa C_e/T ma nachylenie większe niż w pobliżu T_c . Z drugiej strony, powyżej 1.2T, nachylenie w pobliżu $T_c(H)$ staje się mniej wypukłe. Wielkość C_e/T można wyrazić za pomocą wzoru:

$$C_e/T = \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p \quad (3-6)$$

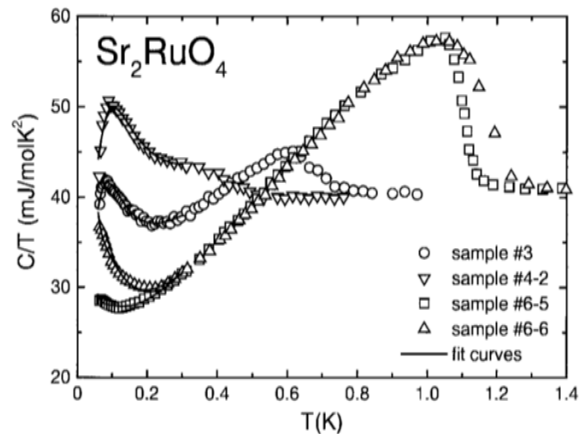
Duże nachylenie krzywej odpowiada dodatkowej entropii uwolnionej w wyższych polach magnetycznych. Dodatkowa, uwolniona entropia jest zjawiskiem powiązanim z wzajemnym położeniem pola magnetycznego i płaszczyzny $a-b$ [135]. Przeprowadzone badanie zależności C_e/T od wzajemnego położenia pola magnetycznego i płaszczyzny $a-b$ jest przedstawione na rysunku 3-16. Zmiana nachylenia krzywej na rysunku 3-16 dla $\Delta\theta = 0^\circ$, świadcząca o dodatkowym przyczynku do ciepła właściwego, zanika nawet dla małych odchyień w wzajemnym położeniu pola magnetycznego i płaszczyzny $a-b$ ($\Delta\theta = 0.86^\circ$). Największy wzrost entropii następuje wtedy, gdy pole magnetyczne jest przyłożone w płaszczyźnie $a-b$.



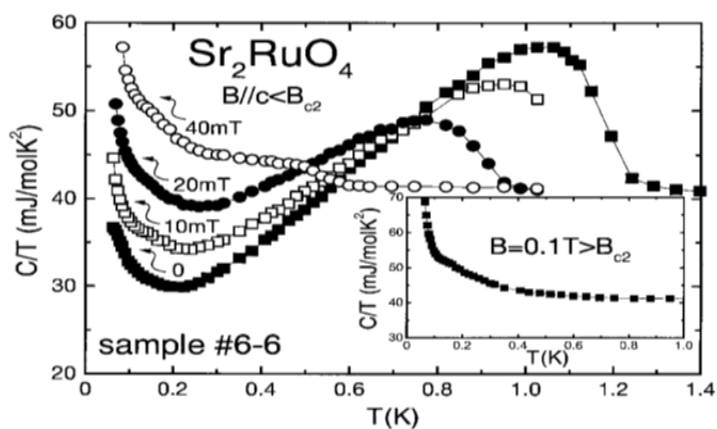
Rysunek 3-16. Efekt zmiany orientacji pola magnetycznego w stosunku do płaszczyzny ab w Sr_2RuO_4 . Rysunek przedstawia zależność C_e/T w funkcji temperatury [135].

Pomiary ciepła właściwego dla próbek Sr_2RuO_4 otrzymanych w różnych warunkach.

Do pomiarów ciepła właściwego wykorzystano cztery różne kryształy. Różnice pomiędzy nimi były spowodowane różnym stosunkiem SrCO_3 (99.99% czystości) do RuO_2 (99.9% czystości), które były użyte jako wyjściowe materiały polikrystaliczne. W trakcie wytwarzania monokryształów zastosowano różne prędkości przesuwania materiału przez ogrzewaną strefę. Prędkości te wynoszą odpowiednio: 10mm/h dla próbek opisanych, jako #3 oraz #4-2; dla próbek oznaczonych #6-5 oraz #6-6 prędkość ta wynosiła 40 mm/h. Wszystkie próbki zostały sprawdzone za pomocą dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego. Wykonując pomiary magnetyzacji (DC-magnetisation) na próbce #6-5, nie stwierdzono obecności zanieczyszczeń magnetycznych. W otrzymanych kryształach Sr_2RuO_4 nie stwierdzono (z dokładnością do $10^{-4} \mu_B/f.u.$) obecności domieszek ferromagnetycznych. Rysunek 3-17 przedstawia wyniki pomiaru ciepła właściwego dla czterech próbek monokrystalicznych w funkcji temperatury. Różnice w jakości próbek prowadzą do różnych temperatur przejścia w stan nadprzewodzący. Wartości T_c lokują się pomiędzy 0.43K a 1.17K. Drugim czynnikiem, który wskazuje na jakość próbek jest szerokość anomalii związanej z przejściem w T_c . Dla wszystkich kryształów widoczne są dodatkowe wkłady do ciepła właściwego w temperaturach poniżej 0.3K. Można wyodrębnić istnienie lokalnych maksimum dla próbek #3 oraz #4-2. W przypadku próbek #6-5 oraz #6-6 widoczne są zmiany przebiegu krzywych pomiarowych w okolicy $T = 0.3\text{K}$. Zmiany przebiegu krzywych C/T są lepiej widoczne w przypadku przyłożonego pola magnetycznego. Rysunek 3-18 przedstawia pomiary dla próbki #6-6 w polu magnetycznym. Do porównania, na rysunku 3-17 ta sama próbka wykazuje małą zmianę przebiegu krzywej. W obecności pola magnetycznego, rysunek 3-18, te zmiany są lepiej widoczne. Ten sam efekt występuje dla pozostałych próbek. Pole magnetyczne, było skierowane równoległe do osi c.



Rysunek 3-17. Temperaturowa zależność C/T [137].



Rysunek 3-18. Wyniki pomiarów ciepła właściwego, jako C/T w funkcji T dla różnych pól magnetycznych uzyskane przez zespół C. Langhammera [137]. Mniejszy wykres, przedstawia wyniki dla pola magnetycznego, którego wartość przewyższa B_{c2} .

Jak już wspomniano w niniejszej rozprawie, pomiary ciepła właściwego dla temperatur poniżej temperatury krytycznej są jedną z najczulszych metod rozstrzygających o tym czy szczelina ma niezerową wartość na całej powierzchni Fermiego czy też znika wzdłuż linii lub w punktach na powierzchni Fermiego. Zależność eksponencjalna elektronowego ciepła właściwego jest charakterystyczna dla nadprzewodników konwencjonalnych, dla których przerwa energetyczna przyjmuje stałą wartość na całej powierzchni Fermiego. Zależności wykładnicze C_e , dla temperatur $T < T_c$, wskazują na obecność miejsc zerowych szczeliny energetycznej na powierzchni Fermiego. Zależność $C_e \sim T^2$ świadczy o obecności linii nodalnej. Natomiast zależność $C_e \sim T^3$ wskazuje na obecność punktów nodalnych [92]. Wyznaczenie elektronowego ciepła właściwego wymaga precyzyjnego uwzględnienia wszystkich istotnych przyczynków do całkowitego ciepła właściwego.

W przypadku Sr_2RuO_4 , w zakresie niskich temperatur, można wyróżnić następujące składowe ciepła właściwego [137] anomalia Schottky'ego C_{Sch} , przyczynę jądrowy anomalii Schottky'ego $C_N = \alpha/T^2$ [138], przyczynę pochodzący od stanu normalnego $C_n = \gamma_n T$ oraz przyczynę pochodzący od linii nodalnej $C_e = \delta T^2$. Wszystkie te przyczynki wnoszą wkład do całkowitego ciepła właściwego i zależność tę można przedstawić w postaci:

$$C/T = (C_N + C_n + C_e + C_{\text{Sch}})/T = \alpha/T^3 + \gamma_n + \delta T + \frac{A}{T} \left(\frac{\Delta}{T}\right)^2 \frac{e^{\Delta/T}}{(1 + e^{\Delta/T})^2} \quad (3-7)$$

Wzór (3-7) daje bardzo dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi dla $T < 0.3\text{K}$ przedstawionymi na rysunku 3-17.

Rozdział 4. Odbicie Andreeva w układzie ferromagnetyk / izolator / nadprzewodnik Sr_2RuO_4 .

Natura nadprzewodnictwa w Sr_2RuO_4 była i jest nadal przedmiotem intensywnych badań teoretycznych, jak i doświadczalnych [125]. Struktura krystalograficzna rutenianu strontu jest strukturą warstwową typu perowskitu, którą także charakteryzują się wysokotemperaturowe nadprzewodniki zawierające miedź (miedziany). Podobieństwo struktury krystalicznej nie przekłada się jednak na występowanie podobieństwa w strukturze elektronowej, czy też na podobieństwo symetrii parowania. W odróżnieniu od nadprzewodzących miedzianów, które w stanie normalnym są antyferromagnetycznymi izolatorami, rutenian strontu jest dobrym metalem w stanie normalnym, wykazującym zachowanie typu cieczy Fermiego. Jest pierwszym nadprzewodnikiem niekonwencjonalnym o dobrze potwierdzonym eksperymentalnie spinowym stanie trypletowym pary Coopera. Na podstawie obserwacji zjawiska przesunięcia Knighta (ang. the Knight shift), w zakresie temperatur obejmujących temperaturę krytyczną, wnioskuje się, że symetria parowania jest nieparzysta, np. $l = 1$. Analogicznie jak w 3He spin pary Coopera jest w stanie trypletowym [139]. Trypletowy stan spinowy został również potwierdzony eksperymentalnie w badaniach lokalnego namagnesowania za pomocą dyfrakcji neutronowej w eksperymencie Shulla-Wedgewooda [140]. Ponadto, na podstawie uzyskanych wyników z spektroskopii mionowej ($\mu SR - muon spin relaxation$) wnioskuje się, że w rutenianie strontu symetria względem odwrócenia czasu jest złamana [10]. Pomiar ciepła właściwego wskazuje na występowanie linii nodalnych w funkcji przerwy energetycznej [135]. Z drugiej strony, również tunelowa spektroskopia spolaryzowanych spinów może dostarczyć użytecznych danych wykorzystywanych do ustalenia anizotropowej symetrii parowania. Dane eksperymentalne dotyczące przewodnictwa tunelowego, uzyskiwane z badań złącz metal normalny (N) lub metal ferromagnetyczny (F) / izolator / nadprzewodnik trypletowy ((N)F/I/TS) są omówione w publikacji [20]. Na podstawie ich analizy, można np. rozróżnić stany unitarne od nieunitarnych. Podstawowym zjawiskiem w tego typu złączach jest odbicie Andreeva i związana z nim transmisja elektronopodobnych i dziuopodobnych kwazicząstek w rutenianie strontu. W niniejszej pracy przedyskutowano charakterystyczne cechy odbicia Andreeva, które mogą pozwolić na rozróżnienie pomiędzy symetriami parametru porządku w tym także pomiędzy stanami unitarnymi i nieunitarnymi. Przede wszystkim jednak przedyskutowano asymetrię występującą w amplitudzie odbicia Andreeva w zależności od kąta padania elektronu. Przedyskutowano także zachowanie się piku rezonansowego, którego źródłem jest tzw. związany stan Andreeva (ang. Andreev bound state). Obliczono ponadto, spinowo zależny prąd tunelowy i pokazano, że wykazuje on silną zależność od energii wymiany U . Wykazano istnienie piku dla zerowego napięcia określanego, jako zero-bias conductance peak (ZBCP), który występuje dla nadprzewodników niekonwencjonalnych [141].

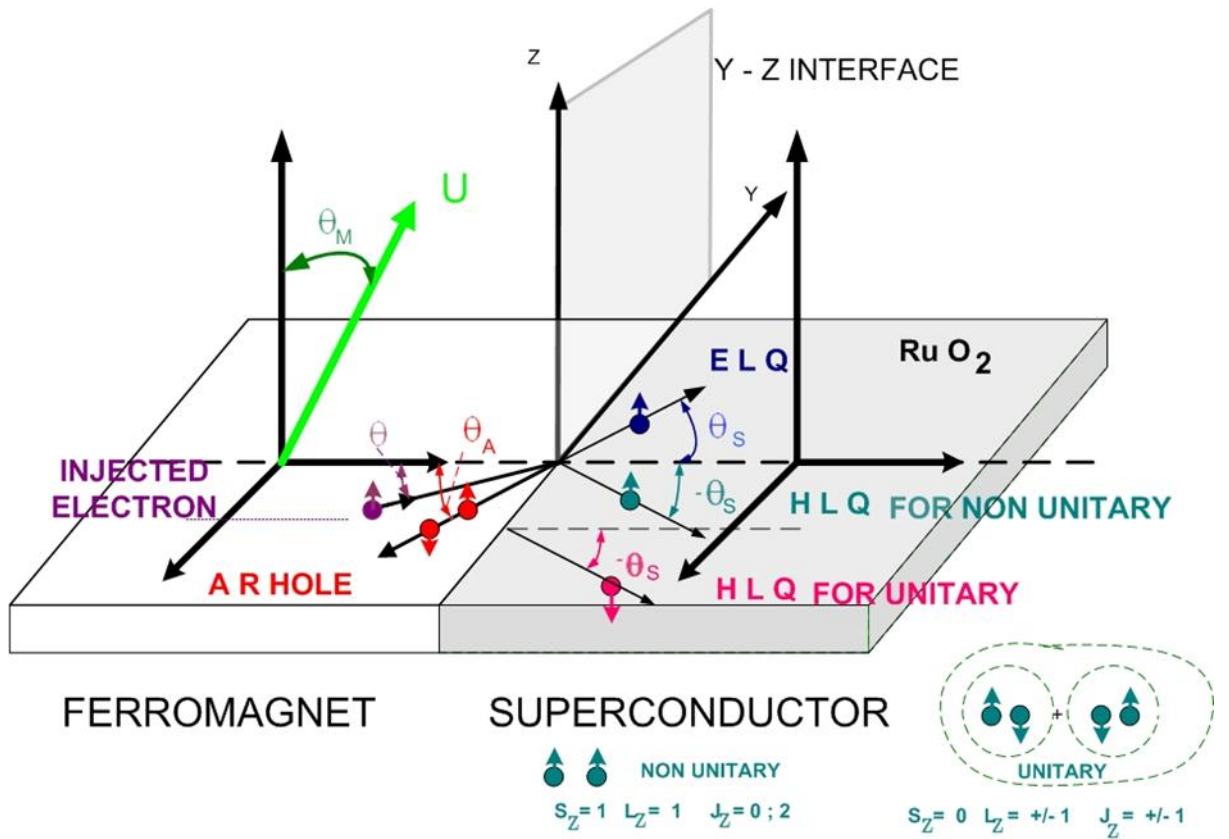
ZBCP występuje zarówno w przypadku parowania parzystego ($np. l = 2$), jak i parowania nieparzystego ($np. l = 1$). W złączu F/I/TS, w obecności silnego pola wymiany, spinowo spolaryzowany prąd wykazuje ostre minimum widoczne w różniczkowej przewodności dla zerowego napięcia. Istnienie minimum wynika ze zjawiska odbicia Andreeva, a wielkość minimum zależy od wielkości pola wymiany w ferromagnetyku oraz od kierunku wektora \vec{d} opisującego parametr porządku w nadprzewodniku trypletowym. W przypadku nadprzewodników trypletowych można zdefiniować wiele możliwych stanów parowania zgodnych z symetrią układu. Podstawowym kryterium poprawnego wyboru stanu odpowiedzialnego za nadprzewodnictwo jest jego zgodność z danymi eksperymentalnymi. Pomimo bardzo wielu badań zarówno eksperymentalnych jak i teoretycznych nie ma jednoznacznego rozstrzygnięcia dotyczącego symetrii parametru porządku w ruteniu strontu [125] [142]. W rozdziale 1.2 oraz dalszych została podana ogólna definicja przerwy energetycznej dla trypletowego stanu spinu pary Coopera. Ogólny charakter tej definicji oznacza, że uwzględnia ona wszystkie możliwe nieparzyste stany orbitalne, takie jak p-wave ($l = 1$), f-wave ($l = 3$) itd., bez uwzględnienia symetrii układu np. symetrii sieci krystalicznej, czy też symetrii pola krystalicznego.

Wszystkie stany odpowiedzialne za niekonwencjonalne parowanie możemy podzielić na dwie kategorie: unitarne i nieunitarne (patrz równanie (1-76)). Spektrum wzbudzeń kwazicząstek, występujących w nadprzewodniku o parowaniu unitarnym posiada dwie identyczne gałęzie. W przypadku nadprzewodnika z parowaniem nieunitarnym, mamy do czynienia z dwiema różnymi gałęziami widma energetycznego. Niektórzy autorzy wykluczają możliwość występowania stanów nieunitarnych (tzn. stanów łamiących symetrię względem odwrócenia czasu) w nadprzewodniku Sr_2RuO_4 [125] [106] [13]. W pracy [20] rozważono bardziej ogólną kwestię stawiając pytanie, o to czy wyniki uzyskane za pomocą spektroskopii odbicia Andreeva pozwolą na rozróżnienie pomiędzy unitarnością a nieunitarnością stanów w nadprzewodniku. W obecnej rozprawie wybrano kilka przykładowych stanów typu p-wave oraz f-wave, aby zbadać czy transport ładunku przez złącze N(F)/I/S pozwala na rozróżnienie pomiędzy tymi stanami. Zależności potęgowe występujące w funkcjach temperatury takich wielkości jak ciepło właściwe lub prędkość relaksacji jądrowej sugerują występowanie linii nodalnych parametru porządku. Z tego punktu widzenia obiecującymi stanami są stany posiadające symetrię f-wave. Niestety, nie ma jeszcze wystarczająco dobrej teorii opisującej mechanizm parowania dla tego typu symetrii [17], [143]. W pracach [20], [21] oraz [22] wyznaczono (z równań Bogoliubowa – de Gennes'a (2-138)) amplitudy prawdopodobieństwa dla wszystkich procesów transportu, które zostały zdefiniowane przez funkcje falowe (2-142) oraz (2-144). Znaczenie symboli użytych w powyższych pracach zostało opisane w rozdziale 2.7. Rozwiązując równania zdefiniowane w rozdziale 2.7 dla stanów unitarnych otrzymano wyrażenia na amplitudy prawdopodobieństwa. Z uwagi na rozróżnienie kierunków spinów w ferromagnetyku, wprowadza się dwa zależne od spinu wyrażenia na amplitudy odbić. Energia wymiany U jest bezpośrednio odpowiedzialna za dystrybucję kierunku spinów w ferromagnetyku.

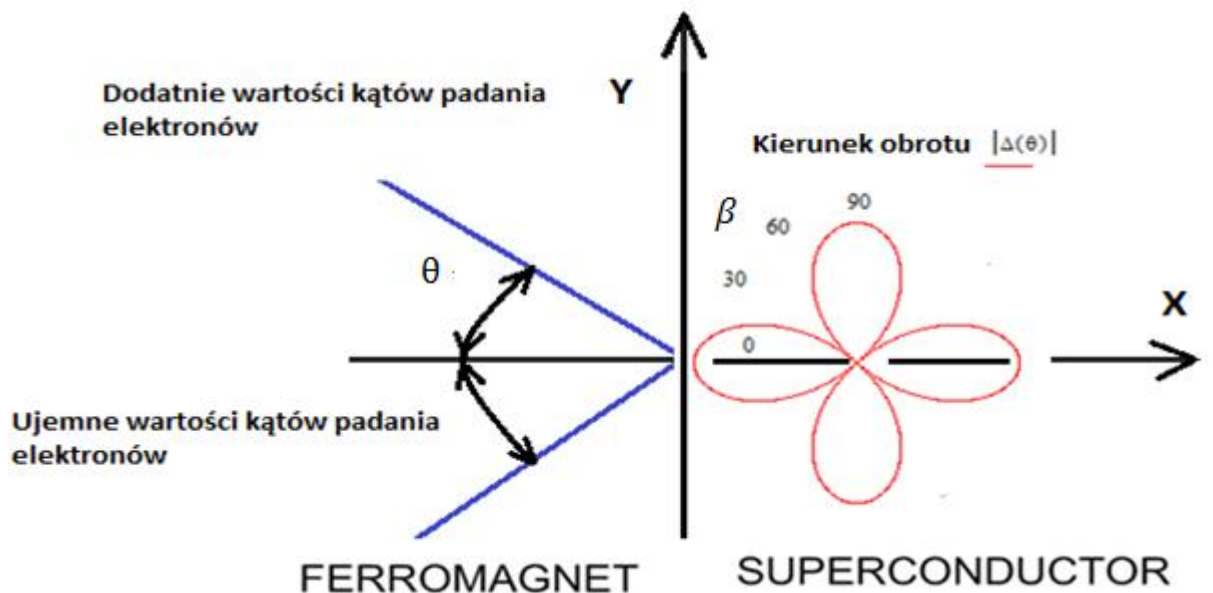
W przypadku zwykłego metalu i bez obecności zewnętrznego pola magnetycznego, mamy do czynienia z jednakową ilością spinów w „górze” i w „dół”. Inna sytuacja występuje w ferromagnetyku. Pole wymiany zaburza równomierny rozkład spinów co z kolei prowadzi do efektywnej zmiany wektora falowego elektronów padających od strony ferromagnetyka. Zmodyfikowana długość wektora falowego padającego elektronu wyrażona jest wzorem (2-143). Należy zaznaczyć, że wielkość energii wymiany U jest wyrażona przez parametr $X = U / E_F$, gdzie E_F jest energią Fermiego. W pracach [20], [21], [22] wybrano następujące wartości X : 0, 0.25, 0.4, 0.5, 0.8 oraz 0.999. Dla $X=0$ mówimy o braku pola wymiany (przypadek normalnego metalu). Dla tego przypadku wektory falowe padających elektronów ze spinami „w górę” i „w dół” mają taką samą długość równą k_F . W przypadku gdy $X = 0.999$ (silny ferromagnetyk) otrzymujemy następujące zależności: $k_{\uparrow} = k_F \sqrt{1 + 0.999} \approx 1.414$, $k_{\downarrow} = k_F \sqrt{1 - 0.999} \approx 0.032$. Ze wzrostem pola wymiany, wzrasta energia kinetyczna elektronów posiadających ten sam kierunek spinu, co kierunek pola wymiany. Wektor falowy kwazicząstek po stronie nadprzewodnika wyraża wzór (2-145). W celu wyznaczenia przewodności różniczkowej dla złącza F/I/S przedstawionego na rysunku 4-1 przyjęto funkcje falowe dane wzorami (2-142) i (2-144). W obliczeniach numerycznych przyrównano do jedności: m – masę spoczynkową elektronu, \hbar - stałą Plancka, E_F – energię Fermiego. Bariera (H) wytworzona na granicy interfejsu wyraża się przez dwie wielkości, a mianowicie, barierę potencjału na złączu utworzoną poprzez izolator (Z), oraz pole wymiany ferromagnetyka U , wynikające z efektu bliskości (ang. proximity effect). Wysokość bariery, zależy więc od kierunku spinu padającego elektronu i wyraża się wzorem:

$$H_{\uparrow[\downarrow]} = Z \mp U \quad (4-1)$$

Wpływ pola wymiany na trajektorie dziur Andreeva oraz kwazicząstek w obszarze nadprzewodnika został omówiony w rozdziale poświęconym kątom krytycznym i wirtualnemu odbiciu Andreeva. Amplitudy prawdopodobieństwa dla procesów związanych z odbiciem dziury Andreeva oraz z odbitym elektronem wyrażają się podanymi poniżej wzorami, które wynikają z warunków brzegowych na funkcje falowe (2-142) (2-144) i ich pierwsze pochodne (wzory (2-120) (2-128)).



Rysunek 4-1. Przedstawienie sytuacji na złączu. Objasnienia symboli znajduja sie w tekście.



Rysunek 4-2. Rzut zacza F/I/S na paszczyzne XY. β jest katem pomiedzy normalna do interfejsu a osia (100) nadprzewodnika.

Amplituda prawdopodobieństwa odbicia dziury Andreeva wynosi:

$$a_{\downarrow\uparrow} = \frac{\text{Licznik}_{a_{\downarrow\uparrow}}}{M_{\uparrow\downarrow}} \quad (4-2)$$

Amplituda prawdopodobieństwa odbicia elektronu:

$$b_{\uparrow\downarrow} = \frac{\text{Licznik}_{b_{\uparrow\downarrow}}}{M_{\uparrow\downarrow}} \quad (4-3)$$

gdzie:

$$\text{Licznik}_{a_{\downarrow\uparrow}} = -4 k_{\uparrow\downarrow} k_S \cos\theta \cos\theta_S v(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \phi_+^* \quad (4-4)$$

$$\begin{aligned} \text{Licznik}_{b_{\uparrow\downarrow}} = & -\delta_- k_S^2 (\cos\theta_S)^2 + \\ & -\delta_+ k_{\uparrow\downarrow} k_S \cos\theta \cos\theta_S + \\ & +\delta_+ k_{\downarrow\uparrow} k_S \cos\theta_A \cos\theta_S + \\ & +\delta_- k_{\downarrow\uparrow} k_{\uparrow\downarrow} \cos\theta \cos\theta_A + \\ & -i2\delta_- k_{\downarrow\uparrow} \cos\theta_A H + \\ & -i2\delta_- k_{\uparrow\downarrow} \cos\theta H + \\ & -4\delta_- H^2 \end{aligned} \quad (4-5)$$

$$\begin{aligned} M_{\uparrow\downarrow} = & = \delta_- k_S^2 (\cos\theta_S)^2 + \\ & -\delta_+ k_{\uparrow\downarrow} k_S \cos\theta \cos\theta_S + \\ & -\delta_+ k_{\downarrow\uparrow} k_S \cos\theta_A \cos\theta_S + \\ & +\delta_- k_{\downarrow\uparrow} k_{\uparrow\downarrow} \cos\theta \cos\theta_A + \\ & +2i\delta_- k_{\downarrow\uparrow} \cos\theta_A H + \\ & -2i\delta_- k_{\uparrow\downarrow} \cos\theta H + \\ & +4\delta_- H^2 \end{aligned} \quad (4-6)$$

$$\delta_+ = v(\theta_S) v(\pi - \theta_S) \phi_+^* \phi_- + u(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \quad (4-7)$$

$$\delta_- = v(\theta_S) v(\pi - \theta_S) \phi_+^* \phi_- - u(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \quad (4-8)$$

Czynniki fazowe ϕ_+ , ϕ_- zdefiniowane są wzorem (2-144). Czynniki koherencji $u(\theta)$ oraz $v(\theta)$ wyrażają się wzorami

$$u(\theta) = \sqrt{\left(1 + \frac{\sqrt{E^2 - |\Delta(\theta)|^2}}{2E}\right)} \quad (4-9)$$

$$v(\theta) = \sqrt{\left(1 - \frac{\sqrt{E^2 - |\Delta(\theta)|^2}}{2E}\right)} \quad (4-10)$$

Przewodnictwo tunelowe złącza F/I/TS dla danej energii E , kąta padania θ i dla obydwu kierunków spinu wyraża się wzorem:

$$\sigma_{k\uparrow[\downarrow]}(E, \theta) = Re \left(1 + \frac{k_{\downarrow[\uparrow]} \cos\theta_A}{k_{\uparrow[\downarrow]} \cos\theta} |a_{\downarrow[\uparrow]}|^2 - |b_{\uparrow[\downarrow]}|^2 \right) \quad (4-11)$$

Uwzględnienie wszystkich kątów padania wymaga całkowania wzoru (4-11) po kącie padania:

$$\sigma_{k\uparrow[\downarrow]}(E) = \int_{-\text{kąt krytyczny}\uparrow[\downarrow]}^{\text{kąt krytyczny}\uparrow[\downarrow]} d\theta \cos\theta \sigma_{k\uparrow[\downarrow]}(E, \theta) P_{\uparrow[\downarrow]} k_{\uparrow[\downarrow]} \quad (4-12)$$

gdzie, czynnik $P_{\uparrow[\downarrow]} = (1 \pm X)/2$ jest miarą polaryzacji spinu „w górę” i „w dół” [16]. Definicje i relacje dotyczące kątów krytycznych, stanowiących granice całkowania przedstawione są w rozdziale 4.1. Całkowite różniczkowe przewodnictwo tunelowe jest sumą różniczkowych przewodności tunelowych dla obu kierunków spinów:

$$\sigma_k(E) = \sigma_{k\uparrow}(E) + \sigma_{k\downarrow}(E) \quad (4-13)$$

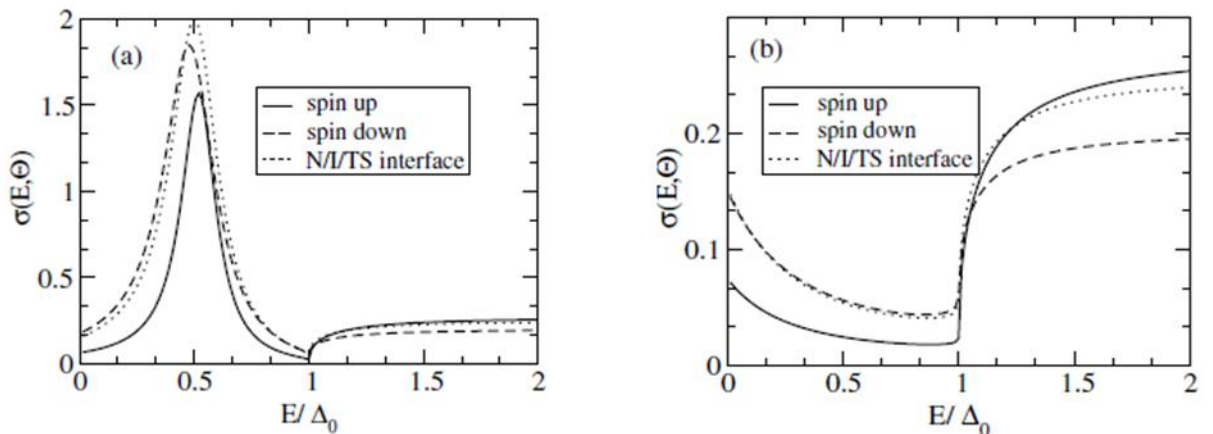
Normowanie całkowitej różniczkowej przewodności tunelowej wyrażonej wzorem (4-13) dokonuje się przez żądanie, aby $\sigma_k(E \gg \Delta) = 1$. Jest to ten zakres energii elektronu, w którym wpływ szczeliny energetycznej można pominąć i nie występuje odbicie Andreeva. W praktyce okazuje się, że przewodność praktycznie nie zmienia się już dla wartości energii większych od $|E/\Delta_0| = 2$. Dlatego też jako czynnik normujący przyjęto wartość przewodnictwa właśnie dla tej wartości energii. W obliczeniach numerycznych energię normujemy względem amplitudy parametru porządku Δ_0 .

Algorytm postępowania w przypadku stanów nieunitarnych jest taki sam jak dla stanów unitarnych. Różnice pojawiają się w zapisie funkcji falowej (2-142) (2-144). W przypadku nieunitarnym składnik funkcji odpowiedzialny za odbicie dziury Andreeva posiada spin o tym samym kierunku, co spin padającego elektronu. Przetransmitowana kwazicząstka o charakterze dziurowym ma także ten sam kierunek spinu, co spin padającego elektronu. Sytuacja ta jest przedstawiona na rysunku 4-1. Jak już wspomniano rutenian strontu posiada tę samą strukturę krystaliczną, jaką posiadają nadprzewodniki wysokotemperaturowe na bazie miedzi. Podobieństwa pomiędzy tymi układami zostały omówione w rozdziale 3.1. Należy podkreślić, że struktury elektronowe i własności tych układów w stanie nadprzewodzącym są zupełnie inne pomimo podobieństwa struktury krystalicznej. Istnieją przekonujące dowody, że stan nadprzewodzący w rutenianie strontu nie jest nadprzewodnikiem typu s-wave [139]. W pracach [20], [21], [22] przeanalizowano tunelowanie ładunków w układach zbudowanych z ferromagnetyka, izolatora i nadprzewodnika o trypletowej symetrii. W pracy [20] rozważano następujące parametry porządku i konfiguracje złącza:

- a) złącze w konfiguracji xy, a transport ładunku odbywa się wzdłuż osi z. Dla unitarnego parametru porządku o wektorze \vec{d} w postaci $d_z(\vec{k}) = (k_x + ik_y)\cos(ck_z)$ występują linie nodalne dla $k_z = \pm \pi/2c$, gdzie c jest stałą sieci wzdłuż osi $c(z)$.
- b) złącze w konfiguracji zy, a transport ładunku wzdłuż osi x równoległej do płaszczyzny RuO_2 . Dla nieunitarnego parametru porządku o wektorze \vec{d} w postaci $d_z(\vec{k}) = (k_x - ik_y)^2(\hat{x} + i\hat{y})$ pary Coopera mają spiny równoległe o wartości $S_z = 1$ i moment orbitalny $L_z = 1$. Moment pędu pary jest prostopadły do płaszczyzny RuO_2 .

Z przeprowadzonych obliczeń wynikają następujące wnioski:

- Znormalizowana przewodność na złączu F/I/TS zależy od kierunku spinu padającego elektronu. Jest to wyraźnie widoczne na rysunku 4-3, gdzie przewodność dla spinów „w górę” ma mniejszą wartość niż przewodność dla spinów „w dół” dla zakresu energii $E/\Delta_0 \in (0,1)$.
- Dla zakresu znormalizowanej energii $E/\Delta_0 \in (1,2)$ sytuacja jest odwrotna.
- Wykres zależności przewodności od energii nie jest symetryczny względem energii $E/\Delta_0 = 1$ i dla układu unitarnego występuje silne maksimum. Obecność tego maksimum dla E/Δ_0 rzędu 0.5 jest spowodowana istnieniem linii nodalnej, co prowadzi do wzmocnienia odbicia Andreeva.



Rysunek 4-3 Znormalizowana przewodność $\sigma_{\uparrow(\downarrow)}(E, \theta)$ wykreślona jako funkcja energii padającego elektronu dla a) stanu unitarnego $d_z(\vec{k}) = (k_x + ik_y)\cos(ck_z)$ oraz b) stanu nieunitarnego $d_z(\vec{k}) = (k_x - ik_y)^2(\hat{x} + i\hat{y})$. Wielkości przewodności określono dla kierunków spinów „w górę” i „w dół” dla $X=0.5$ oraz dodatkowo wyznaczono przewodność dla $X=0$ (N/I/TS). Przedstawiono wyniki dla kąta padania, $\theta = 30^\circ$. W obu przypadkach energia kwazicząstek jest mierzona względem energii Fermiego E_F , os magnetyzacji $\theta_M = 0$, wielkość bariery $Z = 2mH/\hbar^2 k_F = 1.5$ [20].

Rozdział 4.1 Kąty krytyczne oraz wirtualne odbicie Andreeva.

Przedyskutujemy teraz problem zależności kątów odbicia i transmisji od kąta padania elektronu na złącze składające się z materiału nienadprzewodzącego i nadprzewodnika. Rozważmy sytuację, gdy kierunek spinu elektronów padających na granicę interfejsu jest zgodny z kierunkiem lokalnego pola wymiany U. Kierunek ten odpowiada spinowi „w górę” [↑]. Składowe pędu w kierunku równoległym do interfejsu są zachowane z powodu niezmienniczości translacyjnej w tym kierunku. Ta zasada prowadzi do następujących relacji dla stanu unitarnego:

$$k_{\uparrow} \sin(\theta) = k_{\downarrow} \sin(\theta_A) = k_S \sin(\theta_S) \quad (4-14)$$

gdzie wektory falowe określone są odpowiednio przez równania (2-143), (2-145). Z wzoru (4-14) można łatwo otrzymać wyrażenia na kąty jakie tworzą wektory falowe padającego elektronu (θ), odbitej dziury Andreeva (θ_A) oraz wektor falowy kwazicząstek w nadprzewodniku (θ_S), liczone względem normalnej do interfejsu (patrz rysunek (4-1)). Kąt odbicia Andreeva wyraża się wzorem:

$$\theta_A = \arcsin\left(\frac{k_{\uparrow}}{k_{\downarrow}} \sin(\theta)\right) = \arcsin\left(\sqrt{\frac{1+X}{1-X}} \sin(\theta)\right) \quad (4-15)$$

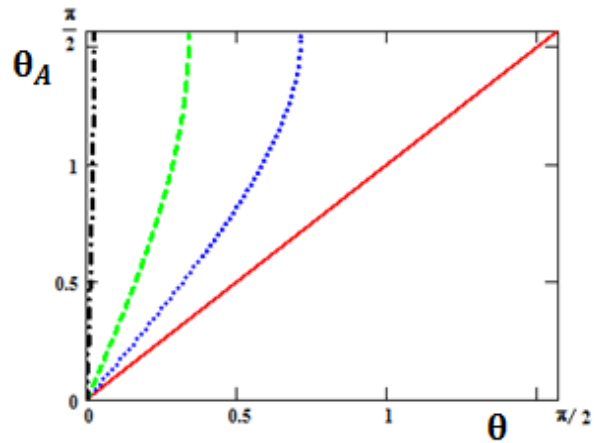
zaś kąt θ_S wynosi:

$$\theta_S = \arcsin\left(\frac{k_{\uparrow}}{k_S} \sin(\theta)\right) = \arcsin\left(\sqrt{1+X} \sin(\theta)\right) \quad (4-16)$$

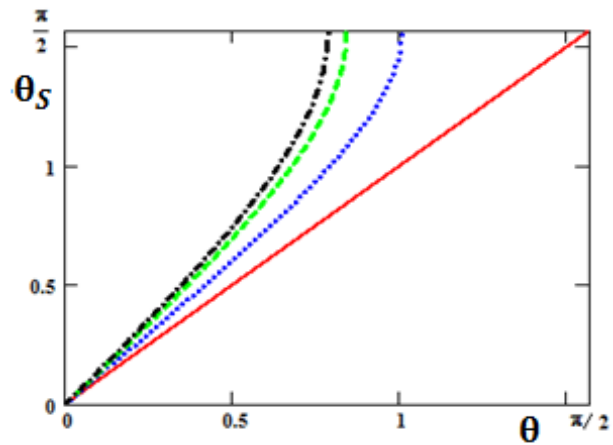
Wyniki obliczeń dla kątów określonych przez wzory (4-15) i (4-16) w zależności od pola wymiany przedstawiono na rysunkach 4-4 oraz 4-5. Zdefiniujemy kąt krytyczny $\theta_{C(S \text{ lub } A)\uparrow}$ jako taki kąt padania elektronu na interfejs, dla którego kąt propagacji kwazicząstki θ_S lub kąt odbicia dziury Andreeva θ_A wynosi $\pi/2$. Na rysunkach 4-4 oraz 4-5, widać, że istnieje taki kąt padania θ , że przy danym polu wymiany X kąty θ_A oraz θ_S osiągają wartość $\pi/2$. Wykorzystajmy ponownie wzór (4-14) aby wyznaczyć wyrażenia na kąty krytyczne kładąc $\theta_A = \pi/2$ oraz $\theta_S = \pi/2$. Kąty krytyczne wyrażone są wzorami:

$$\theta_{CA\uparrow} = \arcsin\left(\frac{k_{\downarrow}}{k_{\uparrow}} \sin(\theta_A)\right) = \arcsin\left(\sqrt{\frac{1-X}{1+X}}\right) \quad (4-17)$$

$$\theta_{CS\uparrow} = \arcsin\left(\frac{k_S}{k_{\uparrow}} \sin(\theta_S)\right) = \arcsin\left(\sqrt{\frac{1}{1+X}}\right) \quad (4-18)$$



Rysunek 4-4. Kąt odbicia dziury Andreeva θ_A jako funkcja kąta padania θ wyznaczony z wzoru (4-15) dla spinu padającego elektronu „w górę”. Wartość pola wymiany $X = 0$ (czerwona linia ciągła), 0.4 (niebieska linia kropkowana), 0.8 (zielona linia przerywana), 0.999 (czarna linia przerywana-kropkowana), θ – kąt padania elektronu. Kąty są wyrażone w radianach.



Rysunek 4-5. Kąt propagacji kwazicząstek θ_S w nadprzewodniku jako funkcja kąta padania θ wyznaczony ze wzoru (4-16) dla spinu padającego elektronu „w górę”. Wartości parametrów pola wymiany są takie same jak na rysunku 4-4. Kąty są wyrażone w radianach.

Dygresja o zespolonej funkcji arcus sinus.

Funkcja

$$y = \sin(\theta) \quad (4-19)$$

dla dziedziny $\theta \in R$ przyjmuje wartości z przedziału $\langle -1, 1 \rangle$. Funkcja odwrotna do (4-19) to arcus sinus:

$$\theta = \arcsin(y) \quad (4-20)$$

gdzie, $y \in \langle -1, 1 \rangle$ a $\theta \in \langle -\pi/2, \pi/2 \rangle$. W przypadku, kiedy wartość $|y| > 1$ to arcus sinus jest zespolony i wyraża się wzorem:

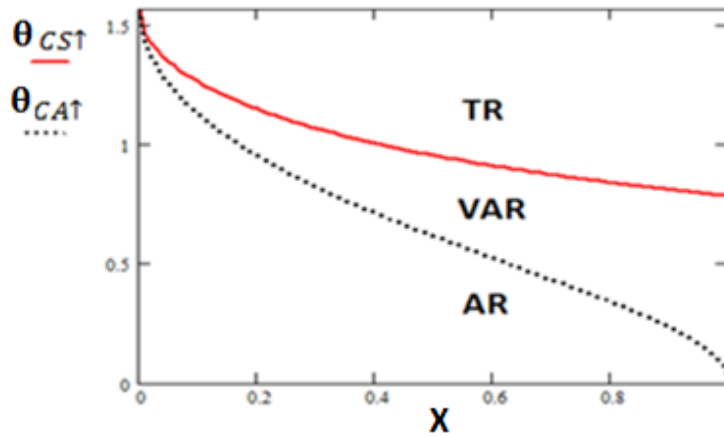
$$\theta = \arcsin(y) = \frac{1}{i} \ln \left(i y + \sqrt{1 - y^2} \right) \quad (4-21)$$

gdzie, y będzie teraz określony w dziedzinie liczb zespolonych, tj. $y = \alpha + i \beta$, a logarytm liczby zespolonej przedstawia się wzorem:

$$\ln z = \ln|z| + i \operatorname{argument}(z) = \ln|z| + i (\phi + 2k\pi) \quad (4-22)$$

gdzie, $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, a $\operatorname{argument}(z) = \operatorname{Arg}(z) + 2k\pi$. $\operatorname{Arg}(z)$ oznacza wartość główną (principal value) $(-\pi < \operatorname{Arg}(z) \leq \pi)$, dla której funkcja logarytmiczna staje się funkcją jednoznaczną.

Na rysunku 4-6 przedstawione są kąty krytyczne zdefiniowane równaniami (4-17) oraz (4-18) w funkcji pola wymiany X.



Rysunek 4-6. Kąty krytyczne w zależności od X dla złącza F/I/S (stan unitarny) dla padającego elektronu ze spinem „w górę”. Oznaczenia wyjaśnione są w tekście pracy. Kąty są wyrażone w radianach.

Obszar pod krzywą $\theta_{CA\uparrow}$, oznaczony jako AR (Andreev Reflection) obejmuje następujące zjawiska: odbicie normalne elektronu od interfejsu, propagację kwazicząstki w nadprzewodniku oraz odbicie dziury Andreeva. Dla tych trzech procesów mamy niezerowe wartości prawdopodobieństwa. Krzywa $\theta_{CA\uparrow}$ określa granicę występowania normalnego odbicia Andreeva. Powyżej tej krzywej, ale poniżej krzywej $\theta_{CS\uparrow}$ rozciąga się obszar określany, jako wirtualne odbicie Andreeva (VAR). Powyżej krzywej $\theta_{CA\uparrow}$ wyrażenie $\arcsin\left(\frac{k_{\downarrow}}{k_{\uparrow}} \sin(\theta_A)\right)$ musi być wyrażony za pomocą wzoru (4-21). W obszarze VAR ograniczonym od góry krzywą $\theta_{CS\uparrow}$ kąt $\theta_A = \pi/2$. Jest to obszar, w którym dziura Andreeva zanika eksponencjalnie w ferromagnetyku [144] a kąty dla trajektorii odbitych elektronów oraz dla kwazicząstek w nadprzewodniku są rzeczywiste. Krzywa $\theta_{CS\uparrow}$, opisuje wartość kąta krytycznego dla kwazicząstek. Powyżej tej krzywej dobrze określone trajektorie posiadają elektrony odbite od interfejsu. Stąd też wywodzi się nazwa TR, określająca proces całkowitego odbicie elektronów (TR – Total Reflection). W obszarze TR, dziury Andreeva oraz kwazicząstki zanikają eksponencjalnie w odpowiednich obszarach z uwagi na fakt, że kąt propagacji tych obiektów wynosi $\pi/2$. Rozważmy składową pędu dziury Andreeva wzdłuż osi odciętych. Kwadrat długości wektora falowego odbitej dziury Andreeva $k_{A\downarrow}^2$ można wyrazić jako sumę kwadratów poszczególnych składowych:

$$k_{A\downarrow}^2 = k_{Ax\downarrow}^2 + k_{Ay\downarrow}^2 \quad (4-23)$$

Na podstawie wzoru (4-14) składowa $k_{Ay\downarrow}$ wyraża się jako:

$$k_{Ay\downarrow} = k_{e\uparrow} \sin(\theta) \quad (4-24)$$

gdzie $k_{e\uparrow}$ jest długością wektora falowego padającego elektronu ze spinem „w górę”.

Podstawiając (4-24) do wzoru (4-23) znajdujemy wzór na składową wektora dziury Andreeva w kierunku osi odciętych, tj. $k_{Ax\downarrow}$:

$$k_{Ax\downarrow} = \sqrt{k_{A\downarrow}^2 - (k_{e\uparrow} \sin(\theta))^2} = k_{e\uparrow} \sqrt{\frac{k_{A\downarrow}^2}{k_{e\uparrow}^2} - \sin^2(\theta)} \quad (4-25)$$

Z powyższych relacji widać, że w przypadku, kiedy kąt padania elektronu na interfejs jest równy lub większy niż $\theta_{CA\uparrow}$ prawo zachowania pędu (4-14), z uwagi na to że $\theta_A = \pi/2$, może być wyrażone jako:

$$k_{e\uparrow} \sin(\theta_{CA\uparrow}) = k_{A\downarrow} \quad (4-26)$$

Wykorzystując wzór (4-26) można wyrażenie (4-25) przekształcić do postaci:

$$k_{Ax\downarrow} = k_{e\uparrow} \sqrt{\frac{k_{e\uparrow}^2 \sin^2(\theta_{CA\uparrow})}{k_{e\uparrow}^2} - \sin^2(\theta)} = k_{e\uparrow} \sqrt{\sin^2(\theta_{CA\uparrow}) - \sin^2(\theta)} \quad (4-27)$$

gdzie $\sin^2(\theta_{CA\uparrow}) - \sin^2(\theta) < 0$ co prowadzi do następującego wyrażenia na $k_{Ax\downarrow}$:

$$k_{Ax\downarrow} = ik_{e\uparrow} \sqrt{\sin^2(\theta) - \sin^2(\theta_{CA\uparrow})} \quad (4-28)$$

Widać stąd, że dla kątów padania większych niż $\theta_{CA\uparrow}$, kwazicząstka może się przemieszczać w nadprzewodniku, ale odbita dziura Andreeva ma urojoną składową x-ową pędu. Mówimy wtedy o urojonym kącie odbicia Andreeva. Proces ten nazywany jest wirtualnym odbiciem Andreeva (VAR) [144]. Urojona składowa pędu w kierunku osi odciętych oznacza eksponencjalny zanik dziury Andreeva w obszarze ferromagnetyka ($x < 0$), co wynika ze wzoru na funkcję falową dziury Andreeva (patrz wzory (2-74), (2-118)):

$$\begin{aligned} \Psi &\propto \exp(ik_{\downarrow} \cos \theta_A x) = \exp(ik_{Ax\downarrow} x) = \\ &= \exp\left(x k_{e\uparrow} \sqrt{\sin^2(\theta) - \sin^2(\theta_{CA\uparrow})}\right) \end{aligned} \quad (4-29)$$

Dla kątów padania większych niż $\theta_{CA\uparrow}$ argument funkcji arcsin we wzorze (4-15) jest większy od 1, a zatem kąt θ_A staje się zespolony. Oznaczmy przez u argument arcsin ze wzoru (4-15):

$$u = \sqrt{\frac{1+X}{1-X}} \sin(\theta) \quad (4-30)$$

gdzie podobnie jak poprzednio $u > 1$ i należy do zbioru liczb rzeczywistych. Kąt odbicia dziury Andreeva można wyrazić przez zespolony logarytm (patrz wzór (4-21)). Wzór (4-15) można wtedy przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned} \theta_A = \arcsin(u) &= -i \ln \left(i u + \sqrt{1-u^2} \right) = \\ &= -i \ln \left[i \left(u + \sqrt{u^2+1} \right) \right] = -i \ln \left| u + \sqrt{u^2+1} \right| + \frac{\pi}{2} \end{aligned} \quad (4-31)$$

Wzór (4-31) jest słuszny dla $\theta > \theta_{CA\uparrow}$.

W przypadku, gdy kierunek spinu elektronu jest skierowany „w dół”, odpowiednie równania wyrażające zachowanie pędu przyjmują postać:

$$k_{\downarrow} \sin(\theta) = k_{\uparrow} \sin(\theta_A) = k_S \sin(\theta_S) \quad (4-32)$$

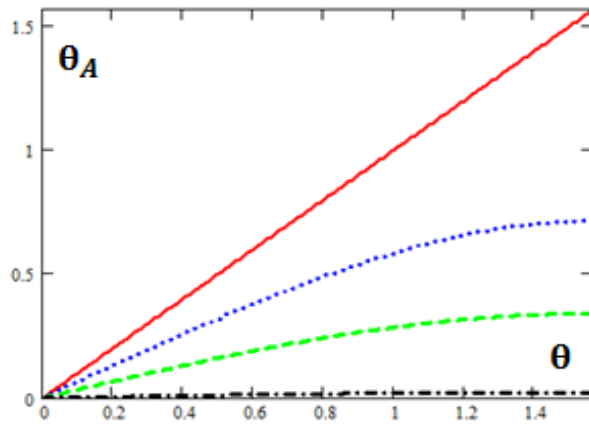
Kąt odbicia Andreeva dla spinu „w dół” wyraża się wzorem:

$$\theta_A = \arcsin \left(\frac{k_{\downarrow}}{k_{\uparrow}} \sin(\theta) \right) = \arcsin \left(\sqrt{\frac{1-X}{1+X}} \sin(\theta) \right) \quad (4-33)$$

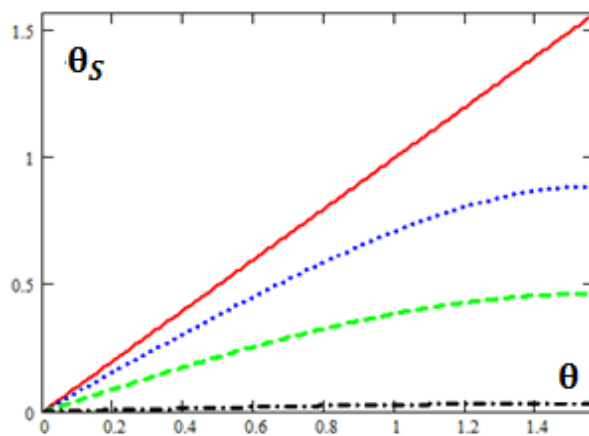
Kąt propagacji kwazicząstki w obszarze nadprzewodnika:

$$\theta_S = \arcsin \left(\frac{k_{\downarrow}}{k_S} \sin(\theta) \right) = \arcsin \left(\sqrt{1-X} \sin(\theta) \right) \quad (4-34)$$

Dla padającego elektronu ze spinem „w dół” nie ma kątów granicznych, ponieważ wektor falowy tego elektronu (k_{\downarrow}) jest mniejszy od wektora falowego dziury Andreeva k_{\uparrow} (dla pól wymiany różnych od zera), a z prawa zachowania pędu (4-32) wynika, że kąt padania elektronu θ , jest zawsze większy zarówno od kąta odbicia dziury θ_A jak również od kąta propagacji θ_S . Sytuacja ta jest przedstawiona na rysunkach 4-7 oraz 4-8. Warto zaznaczyć, że zarówno w przypadku stanów unitarnych jak i nieunitarnych tylko kąt odbicia elektronu spełnia prawo Snella. Pozostałe kąty, z uwagi na różne wartości wektorów falowych przypisanych poszczególnym kwazicząstkom, są różne, co prowadzi np. do zjawiska VAR. Dla stanów nieunitarnych kąt odbicia dziury (θ_A) jest identyczny z kątem padania elektronu (θ).



Rysunek 4-7. Kąt odbicia dziury Andreeva jako funkcja kąta padania elektronu ze spinem „w dół” wyznaczony z wzoru (4-33). Wartości pola wymiany jak na rysunku 4-4. Kąty są wyrażone w radianach.



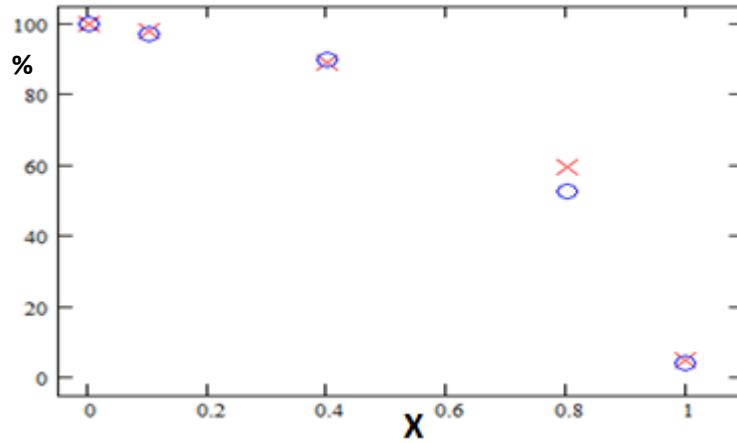
Rysunek 4-8. Kąt propagacji kwazicząstek w obrębie nadprzewodnika jako funkcja kąta padania elektronu ze spinem „w dół” wyznaczony z wzoru (4-34). Wartości pola wymiany jak na rysunku 4-4. Kąty są wyrażone w radianach.

Z uwagi na fakt, że kąty krytyczne istnieją tylko dla elektronów ze spinem „w górę”, oszacowano wpływ tychże kątów na prąd tunelowy. Zastosowane podejście pozwoli także oszacować wpływ wirtualnego odbicia Andreeva (VAR) na uzyskane wyniki. Dla kątów padania zawartych w przedziale $(\theta_{CA\uparrow}, \theta_{CS\uparrow})$ wektor falowy dziury Andreeva jest urojony (patrz wzór (4-12)) i mamy do czynienia ze zjawiskiem VAR. Oznacza to, że dziura Andreeva nie propaguje się. Nie oznacza to jednak, że znika prąd, ponieważ dla tego zakresu kąta padania różna od zera jest amplituda odbicia Andreeva. Oznacza to, że przyczynę do prądu wnoszą kwazicząstki poruszające się w nadprzewodniku. Dla kątów padania przewyższających kąt krytyczny $\theta_{CS\uparrow}$ znika całkowicie prąd płynący przez złącze. Oszacowanie przyczynków pochodzących od różnych kątów krytycznych przebiega następująco. Całkując po energii wyrażenie (4-12) na różniczkową przewodność tunelową dla elektronów ze spinem „w górę” otrzymujemy całkowity prąd tunelowy dla temperatury $T=0K$.

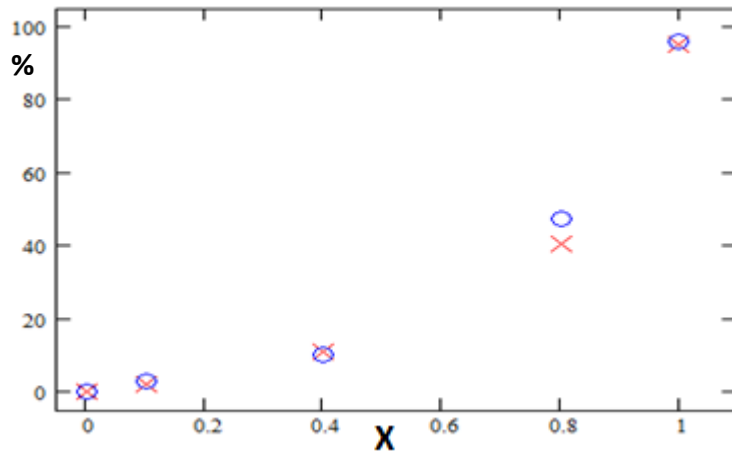
Obliczenia wykonano dla parametrów porządku takich jak $B_{1g} \times E_u$ oraz izotropowy p-wave (patrz strona 141) z następującymi charakterystykami złącza: $Z=0$, $\beta = 0$, $X= 0, 0.1, 0.4, 0.8$ oraz 0.999 . Dla każdego parametru porządku obliczono całki po kątach w zakresie kątów krytycznych ((4-15), (4-16), (4-12)) oraz całki po energii w zakresie $E/\Delta_0 = \pm 2$. Posłużyły one do obliczenia wpływu poszczególnych zakresów na wartość przewodnictwa tunelowego dla elektronów ze spinem w górę. Procentowy udział poszczególnych przyczynków w przewodnictwie tunelowym dla elektronu padającego o spinie w górę przedstawia wzór:

$$\frac{\int_{E/\Delta_0=-2}^{E/\Delta_0=+2} \sigma_{k\uparrow}(E; \theta \in \langle -\theta_C, \theta_C \rangle) dE}{\int_{E/\Delta_0=-2}^{E/\Delta_0=+2} \sigma_{k\uparrow}(E; \theta \in \langle -\pi/2, \pi/2 \rangle) dE} \times 100 \quad (4-35)$$

Z przeprowadzonych obliczeń dla całkowania ograniczonego przez kąt większy od kąta krytycznego θ_{CS} wynika, że ten kąt krytyczny nie ma praktycznie wpływu na prąd tunelowy dla spinów „w górę”. Procentowy udział dla zakresu ograniczonego poprzez $\pm\theta_{CS}$, określony wzorem (4-35), jest równy 100% dla obydwu parametrów porządku (dla X w zakresie 0 do 0.999), jeżeli całkujemy zarówno po rzeczywistych, jaki i urojonych kątach. Jeżeli ograniczymy całkowanie tylko do kątów rzeczywistych, to zakres całkowania zostaje ograniczony do $\pm\theta_{CA}$ i prąd tunelowy zdeterminowany jest wyłącznie przez zwykłe odbicie Andreeva (AR). Wpływ kąta krytycznego θ_{CA} na prąd tunelowy dla elektronów ze spinem „w górę” przedstawiono na rysunku 4-9. Uzyskane wartości procentowego wkładu do prądu tunelowego dla kilku wartości X , dla elektronów ze spinem „w górę”, wahają się od 4% do 100% dla obu parametrów porządku. Dla $X=0$ wszystkie trzy całkowania przeprowadza się w tych samych granicach równych $\pm\pi/2$. Procentowy udział wirtualnego odbicia Andreeva w prądzie tunelowym określony jest z całkowania po kątach zawartych pomiędzy krzywymi θ_{CS} oraz θ_{CA} (obszar VAR na rys. 4-6). Z uwagi na fakt, że procentowy udział w różniczkowej przewodności tunelowej dla zakresu całkowania ograniczonego kątem krytycznym θ_{CS} jest równy 100%, udział VAR dla parametrów podanych powyżej można określić, jako 100% minus procentowy udział prądu tunelowego wyznaczonego dla zakresu całkowania ograniczonego kątem krytycznym θ_{CA} . Wyniki obliczeń przedstawiono na rysunku 4-10. Przeprowadzone powyżej szacowanie pokazują, że aby otrzymać poprawne wyniki na prąd tunelowy nie możemy ograniczać całkowania wyłącznie po kątach do zakresu $\pm\theta_{CA}$. Dlatego w niniejszej pracy przyjęto zakres całkowania po kątach od $-\pi/2$ do $+\pi/2$, który uwzględnia, poprzez całkowanie po kącie urojonym przyczynki pochodzące od VAR.



Rysunek 4-9. Procentowy udział prądu tunelowego wynikającego z odcicia Andreeva, wyznaczonego z całkowania ograniczonego kątem krytycznym θ_{CA} w całkowitym prądzie tunelowym dla elektronów ze spinem „w górę”. Czerwone krzyżyki oznaczają wyniki dla izotropowego p-wave parametru porządku. Niebieskie okręgi reprezentują wyniki dla parametru porządku $B_{1g}x E_u$.



Rysunek 4-10. Procentowy udział wirtualnego odcicia Andreeva w całkowitym prądzie tunelowym wyznaczonym dla padających elektronów ze spinem „w górę”. Oznaczenie kolorów zgodne z rysunkiem 4-9

Rozdział 4.2 Wybrane stany trypletowe i kształt funkcji parametru porządku.

W niniejszym rozdziale przedstawione zostaną moduły odpowiednich funkcji przerwy energetycznej Δ w układzie biegunowym, które były rozważane między innymi w pracach [16], [21], [22] oraz [20]. Dla każdego parametru porządku przeprowadzono krótką dyskusję związaną z występowaniem miejsc zerowych.

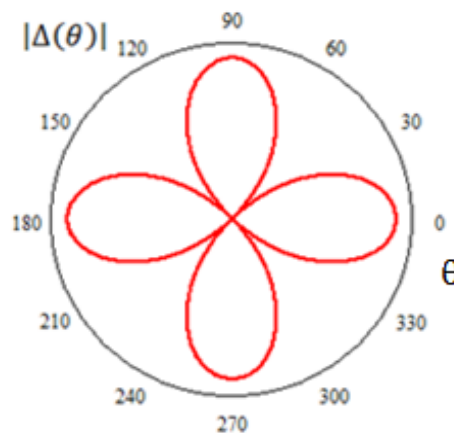
- Stan unitarny 2D f-wave B1g x Eu,

gdzie B1gxEu oznacza iloczyn prosty nieprzywiedlnych reprezentacji grupy punktowej D_{4h} jednowymiarowej B1g i dwuwymiarowej Eu. Symbole g oraz u oznaczają odpowiednio symetryczność (niem. gerade) oraz antysymetryczność (niem. ungerade) względem operacji inwersji przestrzennej.

Funkcja parametru porządku wyrażona jest za pomocą formuły:

$$\Delta(\theta) = \Delta_0 \cos 2(\theta - \beta) [\cos(\theta - \beta) + i \sin(\theta - \beta)] \quad (4-36)$$

gdzie θ oznacza kąt pomiędzy wektorem falowym kwazicząstki liczonym względem normalnej do interfejsu, zaś β jest kątem pomiędzy normalną do interfejsu a osią (100) nadprzewodnika. (patrz rysunek 4-2). Miejsca zerowe wyznaczone są przez równania $\cos 2(\theta - \beta) = 0$ i dla $\beta = 0$ znajdują się w punktach, dla których $\theta = \frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}$.



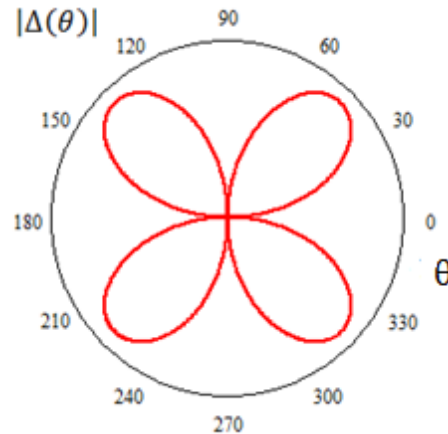
Rysunek 4-11. Moduł parametru porządku B1g x Eu w układzie biegunowym jako funkcja kierunku wektora falowego. Kąty są wyrażone w stopniach.

- Stan unitarny 2D f-wave B2g x Eu.

Funkcja parametru porządku jest wyrażona za pomocą formuły:

$$\Delta(\theta) = \Delta_0 \sin 2(\theta - \beta) [\cos(\theta - \beta) + i \sin(\theta - \beta)] \quad (4-37)$$

Miejsca zerowe określone są przez równanie $\sin 2(\theta - \beta) = 0$ i dla $\beta = 0$ znajdują się one w punktach, dla których $\theta = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3}{2}\pi$.



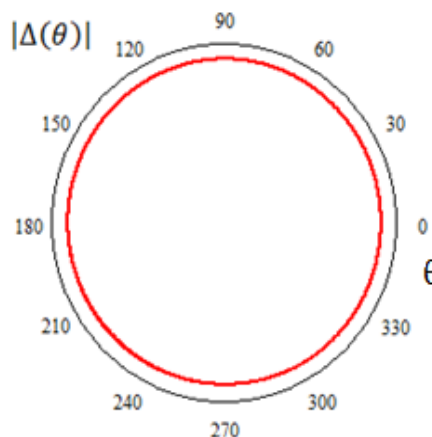
Rysunek 4-12. Moduł parametru porządku B2g x Eu w układzie biegunowym jako funkcja kierunku wektora falowego. Kąty są wyrażone w stopniach.

- Izotropowy unitarny stan p-wave.

Funkcja parametru porządku jest wyrażona za pomocą formuły [17], [125]:

$$\Delta(\theta) = \Delta_0 e^{i(\theta - \beta)} \quad (4-38)$$

Funkcja ta nie posiada miejsc zerowych.



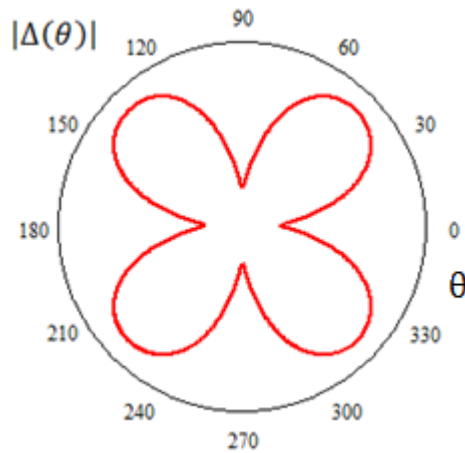
Rysunek 4-13. Moduł parametru porządku dla izotropowego unitarnego stanu p-wave w układzie biegunowym jako funkcja kierunku wektora falowego. Kąty są wyrażone w stopniach.

- Unitarny stan p-wave .

Funkcja parametru porządku jest wyrażona za pomocą wzoru [17], [145]

$$\Delta(\theta) = \frac{\Delta_0}{SM} [\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] \quad (4-39)$$

gdzie $k_x a = R\pi \cos(\theta - \beta)$, $k_y a = R\pi \sin(\theta - \beta)$, $SM = 1.125$, $R = 0.9$. Funkcja nie posiada miejsc zerowych.



Rysunek 4-14 Moduł unitarnego parametru porządku dla stanu p-wave ([17], [145]) w układzie biegunowym jako funkcja kierunku wektora falowego. Kąty są wyrażone w stopniach.

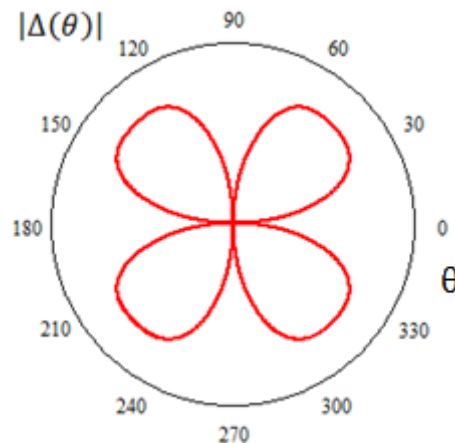
- Unitarny nodalny stan p-wave.

Funkcja parametru porządku jest wyrażona za pomocą formuły [17], [146]:

$$\Delta(\theta) = \frac{\Delta_0}{SM} [\sin(k_x a) + i \sin(k_y a)] \quad (4-40)$$

gdzie $k_x a = \pi \cos(\theta - \beta)$, $k_y a = \pi \sin(\theta - \beta)$, $SM = 1.125$. Miejsca zerowe tej funkcji określone są przez jednoczesne zerowanie się dwóch czynników, $\sin(k_x a)$ oraz $\sin(k_y a)$.

Dla $\beta = 0$ znajdują się one w punktach, dla których $\theta = 0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3}{2}\pi$.



Rysunek 4-15. Moduł parametr porządku dla unitarnego nodalnego stanu p-wave w układzie biegunowym jako funkcja kierunku wektora falowego. Kąty są wyrażone w stopniach.

- Unitarny chiralny stan p-wave (analog stanu ABM w ^3He).

W układzie sferycznym parametr porządku $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ jest wyrażony jako funkcja kąta θ oraz φ . Część orbitalna parametru porządku [6] można wyrazić za pomocą funkcji sferycznej dla $l=1$ w postaci:

$$Y_{1\pm 1} = \left(\frac{3}{8}\pi\right)^{1/2} \sin(\theta) \exp(\pm i\varphi) = \left(\frac{3}{8}\pi\right)^{1/2} (k_x \pm i k_y) \quad (4-41)$$

Wektor \vec{d} (1-116) związany z tym stanem ma formę macierzową [125] :

$$\vec{d}(\vec{k}) = \Delta_0 \vec{e}_z (k_x \pm i k_y) = \Delta_0 \begin{bmatrix} 0 & \\ & 0 \\ k_x \pm i k_y & \end{bmatrix} \quad (4-42)$$

Wykorzystując wzór (1-68) otrzymujemy wzór na parametr porządku $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = \begin{bmatrix} 0 & k_x \pm i k_y \\ k_x \pm i k_y & 0 \end{bmatrix} \quad (4-43)$$

Kwadrat modułu funkcji $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ znajdujemy się za pomocą wzoru (1-91). Obliczenia prowadzą do następujących wyrażień:

$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}|^2 = \frac{1}{2} \text{tr} \begin{bmatrix} (k_x \mp i k_y)(k_x \pm i k_y) & 0 \\ 0 & (k_x \mp i k_y)(k_x \pm i k_y) \end{bmatrix} = k_x^2 + k_y^2 \quad (4-44)$$

W tym miejscu należy zaznaczyć, że dla $l_z = 1$ oraz $l_z = -1$ moduł $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ ma tę samą postać, co ma wpływ na wartość energii wzbudzeń kwazicząstek, która nie zależy od wartości rzutu orbitalnego momentu pędu pary elektronów. Składowe wektora \vec{k} we współrzędnych sferycznych przyjmują następującą postać:

$$k_x = k_F \sin\theta \cos\varphi \quad (4-45)$$

$$k_y = k_F \sin\theta \sin\varphi \quad (4-46)$$

Wyznaczając moduł $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ otrzymujemy następujące zależności:

$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}| = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} = [k_F^2 (\sin\theta)^2 ((\cos\varphi)^2 + (\sin\varphi)^2)]^{1/2} = k_F \sin\theta \quad (4-47)$$

Rozważmy przypadek, dla którego kąt zenitalny $\theta = \pi/2$, co oznacza rzut $|\hat{\Delta}_{\vec{k}}|$ na płaszczyznę xy , która w przypadku rutenianu strontu jest płaszczyzną tworzącą silnie anizotropową strukturę tego związku.

Anizotropia strukturalna przejawia się w anizotropii wielkości fizycznych omówionych w rozdziale 3 niniejszej rozprawy.

Wzór (4-47) wyraża się teraz jako:

$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}| = k_F[(\cos\varphi)^2 + (\sin\varphi)^2]^{1/2} = \Delta_0 \quad (4-48)$$

W celu zachowania notacji występującej w literaturze dokonano zamiany kątów $\varphi \rightarrow \theta$, co prowadzi do następującego wyrażania na moduł parametru porządku:

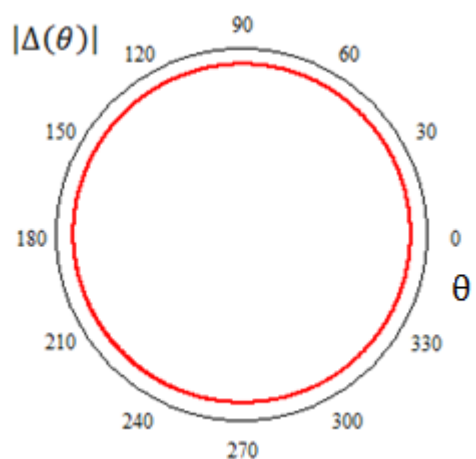
$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}| = \Delta_0[(\cos\theta)^2 + (\sin\theta)^2]^{1/2} \quad (4-49)$$

Warto zauważyć, że wyrażenie $(\cos\theta)^2 + (\sin\theta)^2$ można przedstawić jako $e^{i\theta}e^{-i\theta}$ i przedstawiają okrąg o promieniu jednostkowym. Funkcję $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ na podstawie (4-49) można przedstawić jako:

$$\hat{\Delta}_{\vec{k}} = \Delta_0 e^{i\theta} \quad (4-50)$$

gdzie $\Delta_0 = k_F$.

Iloczyn wektorowy $\vec{d}^*(\vec{k}) \times \vec{d}(\vec{k}) = 0$, co oznacza, że powyższy parametr porządku jest unitarny. Z uwagi na zachowanie funkcji falowej (4-41) stan ten posiada punkty nodalne dla wektora $\vec{k} \parallel (0,0,\pm 1)$ (porównaj przypis do wzoru (1-116)).



Rysunek 4-16. Moduł parametr porządku dla unitarnego chiralnego stanu p-wave (patrz (4-50)) jako funkcja kierunku wektora falowego. Kąty są wyrażone w stopniach.

- Zmodyfikowany unitarny chiralny stan p-wave.

Wektor $\vec{d}(\vec{k})$ wyrażony wzorem (4-42) można zmodyfikować przez wprowadzenie czynnika modulującego $\cos(k_z c)$ w kierunku osi z (c jest stałą sieciową wzdłuż osi (001 nadprzewodnika). Postać $\vec{d}(\vec{k})$ jest teraz następująca:

$$\vec{d}(\vec{k}) = \Delta_0 \vec{e}_z \cos(k_z c)(k_x \pm i k_y) = \Delta_0 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \cos(k_z c)(k_x \pm i k_y) \end{bmatrix} \quad (4-51)$$

Moduł parametru porządku $|\hat{\Delta}_{\vec{k}}|$ ma teraz postać:

$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}| = \cos(k_z c)(k_x^2 + k_y^2)^{1/2} \quad (4-52)$$

Wykorzystując wzory na składowe wektora \vec{k} wzór (4-52) można wyrazić w postaci:

$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}| = k_F \cos(c k \cos\theta) \sin\theta (e^{i\varphi} e^{-i\varphi})^{1/2} \quad (4-53)$$

W płaszczyźnie xy ($\theta = \pi/2$) wzór (4-53) można przepisać w postaci

$$|\hat{\Delta}_{\vec{k}}| = k_F (e^{i\varphi} e^{-i\varphi})^{1/2} \quad (4-54)$$

Dla tego parametru porządku występują linie nodalne dla $k_z = \pm \pi/2c$. W celu zachowania jednolitej notacji w rozprawie dokonano zamiany kątów $\varphi \rightarrow \theta$. Wzór (4-54) jest identyczny ze wzorem (4-49) i w płaszczyźnie xy moduł $\hat{\Delta}_{\vec{k}}$ ma postać identyczną ze wzorem (4-50). Iloczyn wektorowy $\vec{d}^*(\vec{k}) \times \vec{d}(\vec{k}) = 0$, pokazuje, że powyższy parametr porządku jest również unitarny.

Rozdział 4.3 Rezonans w odbiciu Andreeva i asymetria względem kąta padania.

Z wzoru (4-11), który określa poszczególne przyczynki do przewodnictwa tunelowego, widać, że maksymalną wartość przewodności uzyskuje się dla przypadku, kiedy kwadrat amplitudy prawdopodobieństwa związanego z odbiciem dziury Andreeva wynosi 1, a odpowiedni kwadrat amplitudy prawdopodobieństwa odbicia elektronu wynosi 0. Wzrost prawdopodobieństwa odbicia dziur Andreeva i zmniejszenie prawdopodobieństwa odbicia elektronów prowadzi zawsze do wzmocnienia przewodności. W celu określenia przyczyny odpowiedzialnej za wzrost przewodności przeanalizujemy wzory (4-2) - (4-8). Przedyskutujmy przypadek małych kątów padania oraz słabego pola wymiany. W rozważanym przypadku brak jest bariery na złączu, tj. $H = 0$. Przy tych założeniach możemy przekształcić wzory określające $a_{\downarrow[\uparrow]}$ i $b_{\uparrow[\downarrow]}$ do postaci:

$$a_{\downarrow[\uparrow]} = \frac{4k_{\uparrow[\downarrow]} v(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \phi_+^*}{(k_{\downarrow[\uparrow]} + k_{\uparrow[\downarrow]}) \delta_+} \quad (4-55)$$

$$b_{\uparrow[\downarrow]} = \frac{(k_{\downarrow[\uparrow]} - k_{\uparrow[\downarrow]})}{-(k_{\downarrow[\uparrow]} + k_{\uparrow[\downarrow]})} \quad (4-56)$$

Z wzoru (4-55) widać, że dwa czynniki związane z fazą parametru porządku mogą wpływać na wartość $a_{\downarrow[\uparrow]}$. Pierwszym z nich jest δ_+ , a drugim $v(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \phi_+^*$ (patrz wzory (2-146), (4-7), (4-9), (4-10)). Zmniejszenie wartości parametru δ_+ wpływa na zwiększenie modułu $a_{\downarrow[\uparrow]}$. Amplituda prawdopodobieństwa odbicia elektronu $b_{\uparrow[\downarrow]}$, w tym przybliżeniu, zależy tylko od wektorów falowych padających elektronów $k_{\downarrow[\uparrow]}$ i jak widać δ_+ oraz $v(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \phi_+^*$ nie mają bezpośredniego wpływu na odbicie elektronów. Wpływają one natomiast na wartość $b_{\uparrow[\downarrow]}$ pośrednio poprzez $a_{\downarrow[\uparrow]}$ (patrz (2-135)). Zbadamy zachowanie parametru δ_+ przy nadal obowiązującym założeniu dotyczącym wartości kąta padania, pola wymiany i braku bariery na złączu. W takim przypadku można napisać explicite

$$\begin{aligned} v(\theta_S) &= v(\pi - \theta_S) \\ \phi_+^* \phi_- &= 1 \\ u(\theta_S) &= u(\pi - \theta_S) \end{aligned} \quad (4-57)$$

Na tej podstawie wzór (4-7) przyjmuje postać:

$$\delta_+ = v(\theta_S)^2 + u(\theta_S)^2 \quad (4-58)$$

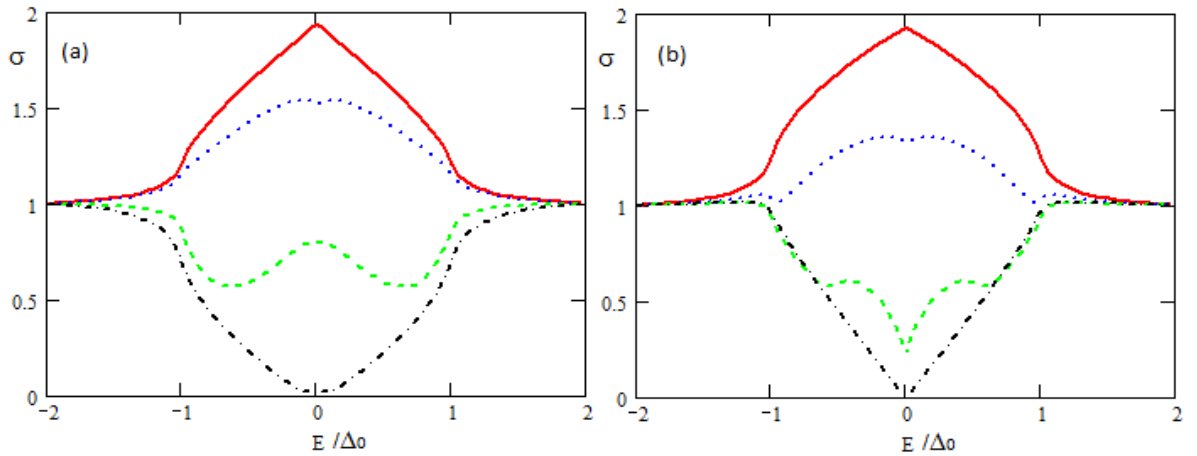
Z wzoru (1-24) widać, że $\delta_+ \approx 1$. Na czynnik $v(\theta_S) u(\pi - \theta_S) \phi_+^*$ mamy następujące wyrażenie:

$$v(\theta_S) v(\pi - \theta_S) \approx v(\theta_S) u(\theta_S) = \frac{|\Delta(\theta)|}{2E} \quad (4-59)$$

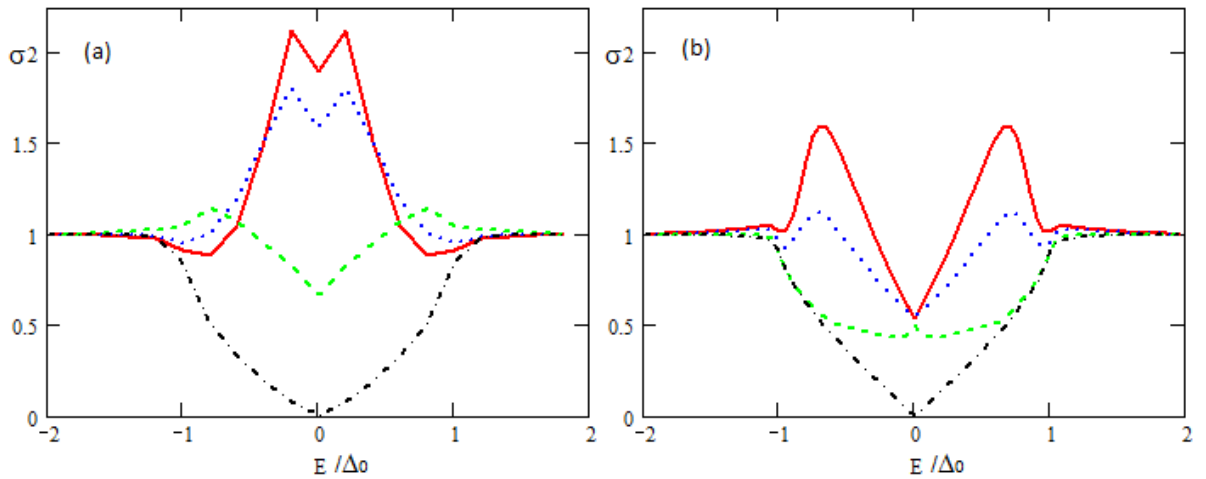
Czynnik fazowy ϕ_+^* może być przybliżony przez postać $e^{i\theta}$. Widać, że kwadratu modułu $a_{\downarrow\uparrow}$ osiąga maksimum kiedy:

- $|\Delta(\theta)|/E = (k_{\downarrow\uparrow} + k_{\uparrow\downarrow})/(2k_{\uparrow\downarrow})$, dla ujemnych i dodatnich wartości energii $|a_{\downarrow\uparrow}|^2 = 1$;
- funkcje opisujące parametry porządku (4-36), (4-37), (4-39) oraz (4-40) zwrócone są jednym z ramion w kierunku interfejsu;
- elektrony padają pod kątem bliskim zeru. Wtedy $e^{i\theta} \approx 1$. Efekt jest największy, kiedy ramię rozety jest zwrócone w kierunku interfejsu.

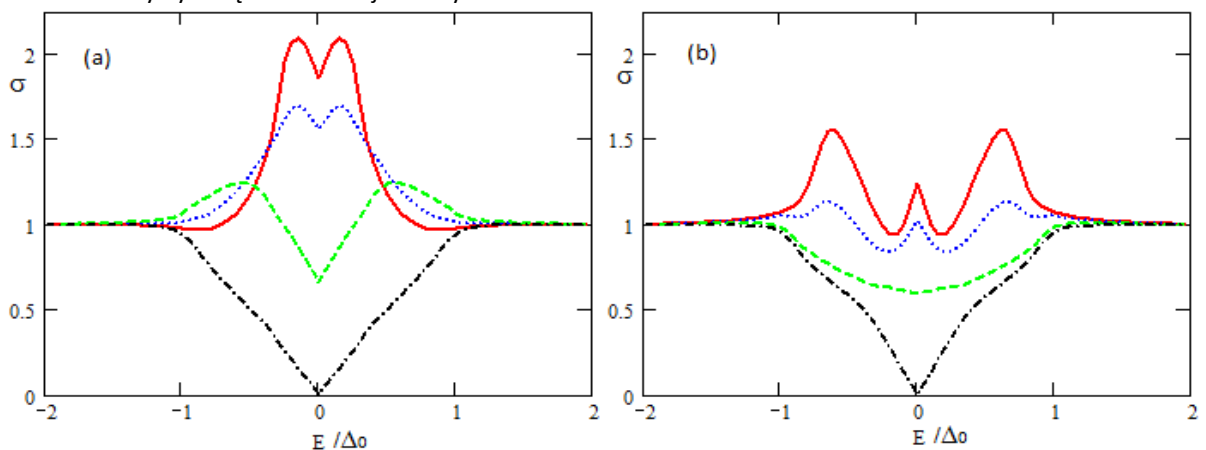
Gdy moduł $a_{\downarrow\uparrow}$ osiąga maksimum mówimy o rezonansie w zjawisku odbicia Andreeva [20], [21], [22]. Zjawisko rezonansu i asymetrii kątów padania omówione są bardziej szczegółowo w następnych rozdziałach. Dla wyżej przedstawionych parametrów porządku obliczono różniczkową tunelową przewodność złącza (4-13). W obliczeniach wykorzystano wzory (4-1) - (4-12). Obliczenia wykonano dla temperatury $T = 0K$. W przypadku temperatur większych od zera należałoby dodatkowo uwzględnić rozmycie funkcji rozkładu Fermiego-Diraca. Uwzględnienie tego rozmycia prowadzi do utraty wielu istotnych szczegółów analizowanych zjawisk. Z tego powodu w niniejszej rozprawie w obliczeniach przyjęto temperaturę $T = 0K$. Zakres całkowania w wzorze (4-12) wynosi $\pm \pi/2$. Rozpraszanie na domieszkach oraz korelacje elektronowe zostały pominięte.



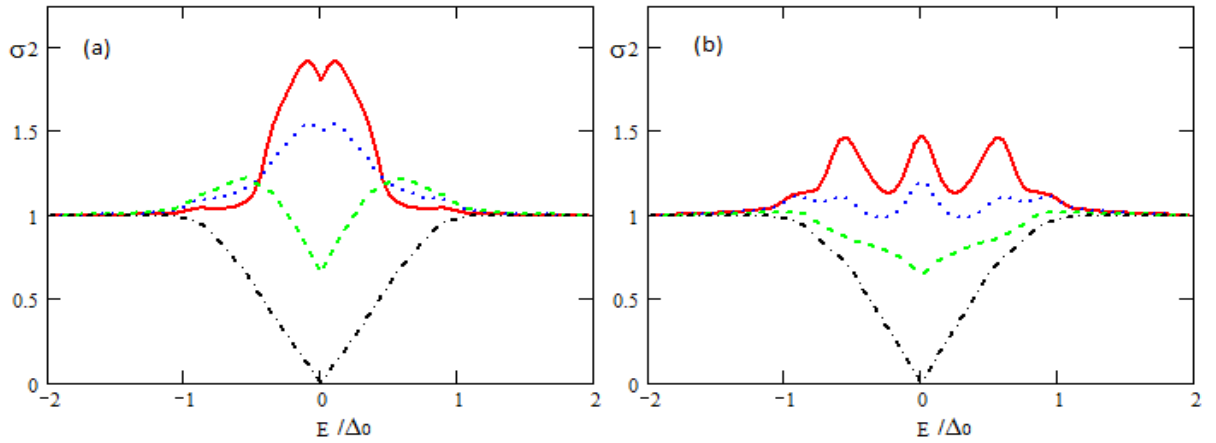
Rysunek 4-17. Znormalizowana przewodność dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania $B_{1g} \times E_u$ (a), oraz dla symetrii parowania $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach $Z = 0, \beta = 0$. Oznaczenia $X=0$ (czerwona linia ciągła), $X=0.4$ (niebieska linia kropkowana), $X=0.8$ (zielona linia przerywana), 0.999 (czarna linia przerywana-kropkowana).



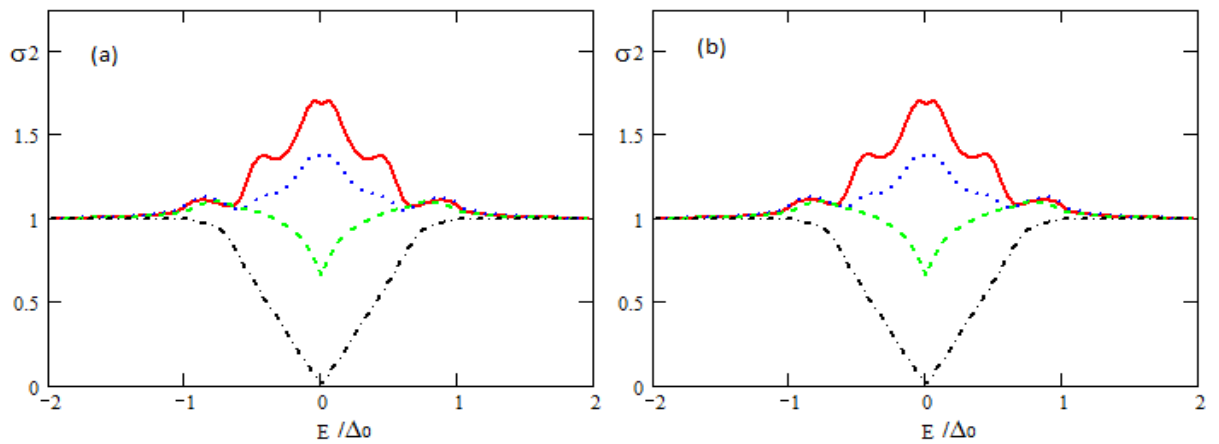
Rysunek 4-18. Znormalizowana przewodność dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania $B_{1g} \times E_u$ (a) oraz dla symetrii parowania $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach $Z = 1.25, \beta = 0$. Wartości parametrów wymiany oraz ich oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.



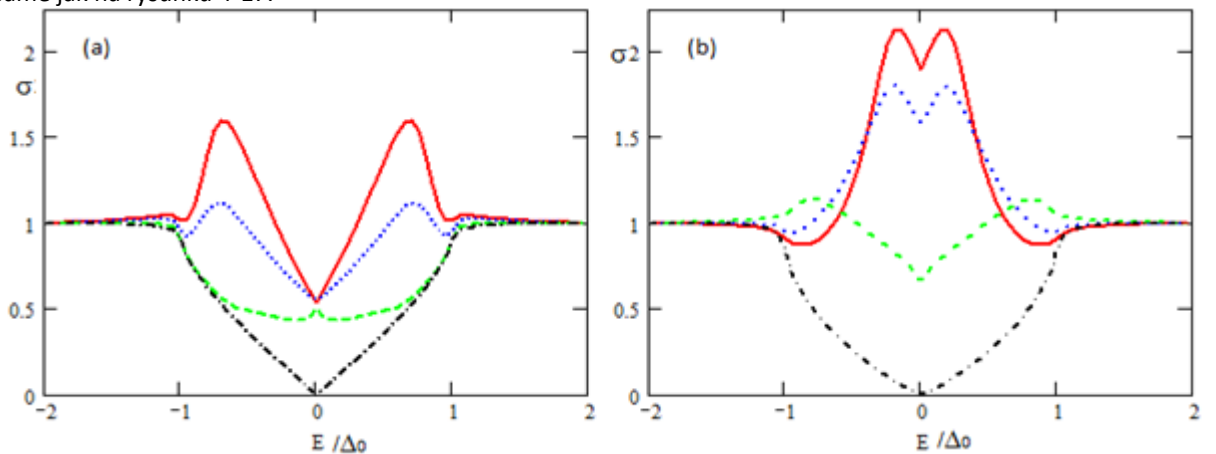
Rysunek 4-19. Znormalizowana przewodność dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania $B_{1g} \times E_u$ (a) oraz dla symetrii parowania $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach $Z = 1.25, \beta = \pi/16$. Wartości parametrów wymiany oraz ich oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.



Rysunek 4-20. Znormalizowana przewodność dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania $B_{1g} \times E_u$ (a) oraz dla symetrii parowania $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach $Z = 1.25, \beta = \pi/11$. Wartości parametrów wymiany oraz ich oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.



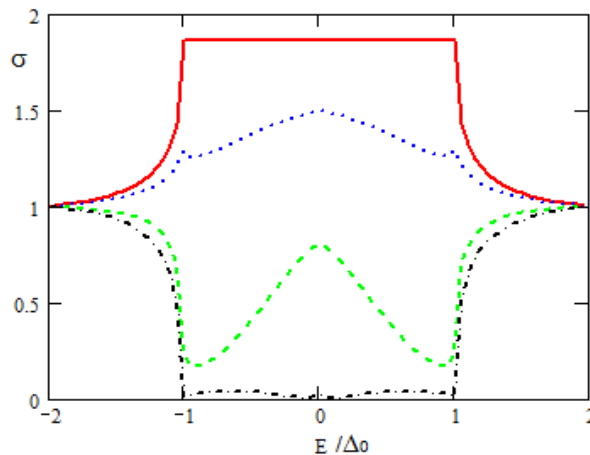
Rysunek 4-21. Znormalizowana przewodność dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania $B_{1g} \times E_u$ (a) oraz dla symetrii parowania $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach $Z = 1.25, \beta = \pi/8$. Symetria $B_{2g} \times E_u$ (b) prowadzi do tych samych wyników, co symetria $B_{1g} \times E_u$ (a). Wartości parametrów wymiany oraz ich oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.



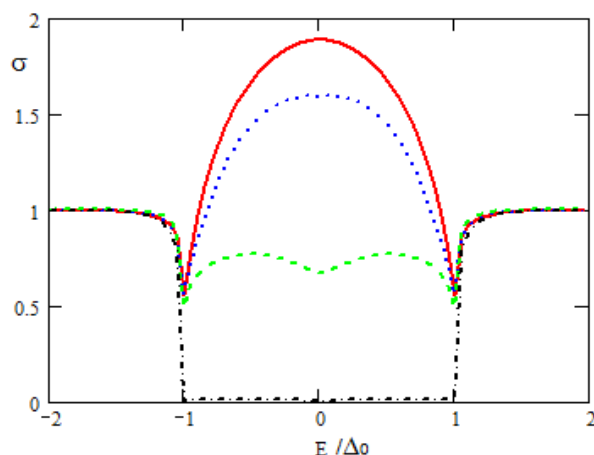
Rysunek 4-22. Znormalizowana przewodność dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania $B_{1g} \times E_u$ (a) oraz dla symetrii parowania $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach $Z = 1.25, \beta = \pi/4$. Wartości parametrów wymiany oraz ich oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.

Dyskusja wyników.

Dyskusję wyników przedstawionych na wykresach 4-17 – 4-22 warto rozpocząć od podziału zakresu energii na obszar centralny, któremu odpowiada znormalizowany zakres energii $(-1,1)$ i na dwa symetryczne zakresy $(-2,-1)$ oraz $(1,2)$. Jak wynika z wszystkich dwunastu wykresów w zakresach $(-2,-1)$ i $(1,2)$ przewodność dla podanych wartości energii wymiany wynosi w przybliżeniu 1. Wpływ energii wymiany na zachowanie tunelowej różniczkowej przewodności w tych zakresach jest słabo widoczny. Dla $X > 0$ w podanych zakresach energii, w nadprzewodniku znajdują się nieobsadzone stany dla padających elektronów z częściowo lub prawie całkowicie spolaryzowanym spinem. Obszar centralny zajmuje przedział energii pomiędzy -1 a 1 , a to znaczy, że energia padających elektronów nie przekracza wartości przerwy energetycznej. Rozważmy przypadek, gdy metal znajdujący się po lewej stronie nie jest ferromagnetykiem. W przypadku parametrów porządku zdefiniowanych wzorami (4-38), (4-50), (4-54) całkowite różniczkowe przewodnictwo tunelowe σ jest stałe i wynosi ~ 2 dla $Z=0$ oraz $X=0$. Wyniki dla tych trzech parametrów porządku przedstawiono na rysunku 4-23. Z uwagi na zastosowanie normalizacji opisanej na początku niniejszego rozdziału, wartość różniczkowego przewodnictwa tunelowego nieznacznie odbiega od nominalnej wartości wynoszącej 2. Rozbieżność ta nie wpływa na wyniki analizy i na kształt funkcji σ .



Rysunek 4-23. Znormalizowana całkowita przewodność różniczkowa dla złącza F/I/TS obliczona dla następujących symetrii parowania: izotropowy p-wave (4-38), chiralny stan p-wave (4-50) oraz zmodyfikowany chiralny stan p-wave (4-54) $Z=0, \beta=0$. Zastosowano takie same wartości parametrów wymiany oraz oznaczenia krzywych jak na rysunku 4-17.

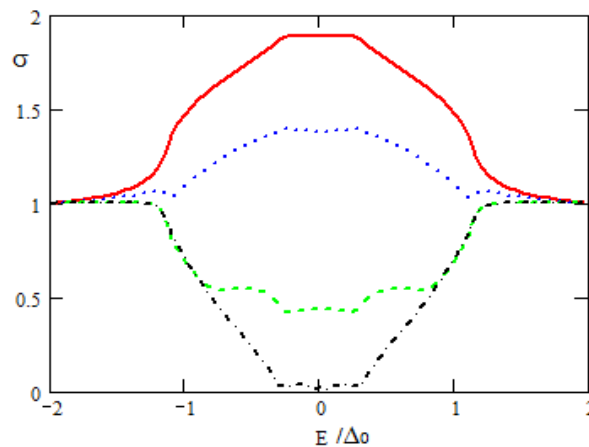


Rysunek 4-24. Znormalizowana całkowita przewodność różniczkowa dla złącza F/I/TS obliczona dla następujących symetrii parowania: izotropowy p-wave (4-38), chiralny stan p-wave (4-50) oraz zmodyfikowany chiralny stan p-wave (4-54) $Z= 1.25, \beta = 0$. Zastosowano takie same wartości parametrów wymiany oraz oznaczenia krzywych jak na rysunku 4-17.

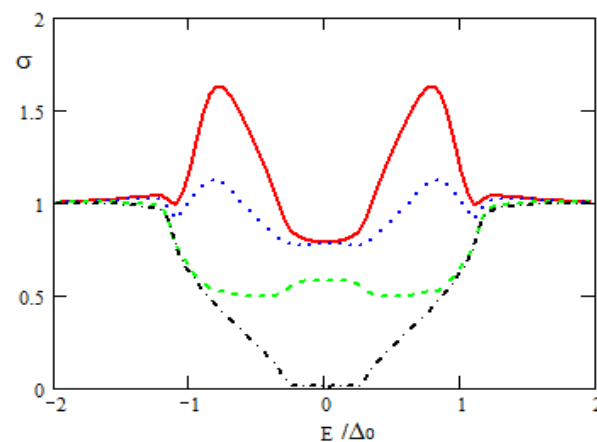
Dla $Z=0$ oraz $X=0$ wartość całkowitej różniczkowej przewodności tunelowej równa się 2 co oznacza, że każdy elektron pochodzący z metalu, którego energia jest w zakresie przerwy energetycznej, tuneluje w obszar nadprzewodnika jako cząstka elektronopodobna. Z procesem tym nierozdzielnie związany jest drugi proces, a mianowicie odbicie Andreeva, który po stronie metalu generuje dziurę z równoczesnym przejściem w obszar nadprzewodnika drugiego elektronu, który tworzy kwazicząstkę o charakterze dziuropodobnym, gdy energia padającego elektronu E jest większa od przerwy energetycznej, lub parę Coopera, gdy energia E jest w obrębie szczeliny energetycznej. W temperaturze $T=0K$, w obrębie przerwy energetycznej nie występują wzbudzone elektrony, jako kwazicząstki pochodzące z kondensatu. Jedynym źródłem kwazicząstek są elektrony, które przetunelowały z metalu. Jako kwazicząstki mogą one przyjmować dowolne energie w obrębie szczeliny energetycznej nadprzewodnika, z uwagi na to, że tworzą pary Coopera.

Zjawisko odbicia Andreeva należy interpretować, jako tunelowanie elektronu w obszar nadprzewodnika z jednoczesnym utworzeniem pary Coopera. Sparowane elektrony, tworzące parę Coopera, nie podlegają statystyce Fermiego-Diraca i tworzą kwazicząstki o charakterze bozonowym. W przypadku stanów unitarnych, odbita dziura ma spin przeciwny niż padający elektron. W wyniku tego, kwazicząstka o charakterze dziurowym ma spin przeciwny do spinu kwazicząstki o charakterze elektronowym. W ten sposób tworzy się para kwazicząstek o przeciwnych wektorach falowych. Schematycznie jest to przedstawione na rysunku 4-1. W przypadku rutenianu strontu, który uznawany jest za dwuwymiarowy analog 3He , przyjmuje się, całkowity spin pary $S = 1$ oraz moment orbitalny $L = 1$. Dla stanów unitarnych $S_z = 0$ i wtedy rzut wektora całkowitego momentu pędu $J_z = S_z + L_z$ wynosi $J_z = \pm 1$. Należy jednak nadmienić, że problem symetrii parowania w rutenianie strontu, a w szczególności roli oddziaływania spin-orbita jest nadal przedmiotem badań [6], [147].

W świetle analizy przeprowadzonej w tym rozdziale, można stwierdzić, że prawdopodobieństwo znalezienia kwazicząstek o charakterze elektronowym lub dziurowym jest takie samo i wynosi $u(\Theta_S)^2$ (lub $v(\Theta_S)^2$) dla $E/\Delta_0 \in (-1,1)$. Włączenie anizotropii doskonale jest widoczne w przypadku parametru porządku opisanego jako stan p-wave zaproponowanego przez K.Miyake i O.Narikiyo (patrz (4-39)). Całkowita przewodność różniczkowa dla tego stanu przedstawiona została na rysunku 4-25. Można wskazać zakres energii, gdzie dla $X = 0$ przewodność σ jest stała i wynosi około 2. Szerokość tego zakresu jest proporcjonalna do długości promienia okręgu obejmującego parametr porządku. Całkowita przewodność różniczkowa wynosi ~ 2 dla zakresu energii z przedziału $E/\Delta_0 \in (-0.25, 0.25)$. Poza tym zakresem, ale wciąż w przedziale $(-1,1)$, przewodność maleje symetrycznie do wartości około 1. Jest to spowodowane faktem, że amplituda odbicia Andreeva maleje na korzyść zwykłych odbić elektronu od interfejsu. Zachowanie takie jest efektem anizotropii parametru porządku. Rozpatrywany stan jest sumą izotropowego składnika, od którego pochodzi przewodność rzędu ~ 2 , wyznaczona na krótkim odcinku plateau dla $X=0$, oraz nieizotropowej rozetki, która jest odpowiedzialna za obniżenie wartości przewodności.



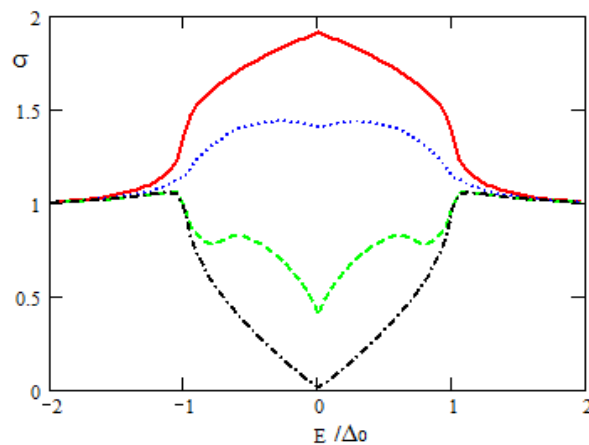
Rysunek 4-25. Znormalizowana całkowita przewodność różniczkowa dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania p-wave zaproponowanej przez K.M oraz O.N przedstawionej wzorem (4-39), $Z=0, \beta=0$. Wartości parametrów wymiany oraz oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.



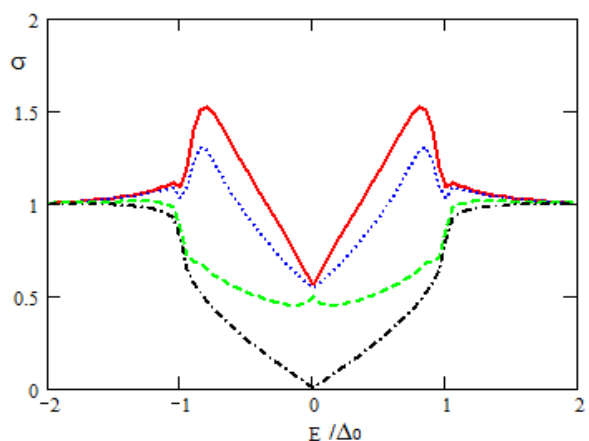
Rysunek 4-26. Znormalizowana całkowita przewodność różniczkowa dla złącza F/I/TS obliczona dla symetrii parowania p-wave zaproponowanej przez K.M oraz O.N przedstawionej wzorem (4-39), $Z=1.25, \beta=0$. Wartości parametrów wymiany oraz oznaczenia krzywych są takie same jak na rysunku 4-17.

Należy zaznaczyć, że przewodność ta nie maleje skokowo tylko łagodnie przechodzi do wartości 1. Dla obliczonej przewodności, wskazanej na rysunku 4-25, kąt obrotu β wynosi 0. Model, którym się posługujemy zakłada, że elektrony mogą docierać do bariery pod dowolnymi kątami z zakresu $\pm \pi/2$. Kąty propagacji kwazicząstek są określone przez równania (4-14) - (4-34). Powoduje to, że elektrony wpadając do nadprzewodnika, tworzą pary Coopera o różnych energiach wiązania, zdeterminowanych kształtem funkcji szeliny energetycznej. W przypadku występowania maksimum przewodności dla energii różnych od zera mówimy o występowaniu stanów związanych, co jest określone przez (4-58) oraz (4-59).

W przypadku parametrów porządku takich jak stan 2D f-wave $B_{2g} \times E_u$ (patrz wzór(4-37)) oraz unitarny stan nodalny p-wave (patrz wzór(4-40)), dla których wyniki obliczeń przewodności przedstawiono na rysunkach 4-17 b oraz 4-27, nie obserwuje się plateau na krzywej dla wartości równej 2.



Rysunek 4-27. Znormalizowana całkowita przewodność różniczkowa dla złącza F/I/TS obliczona dla unitarnego nodalnego stanu p-wave danego wzorem (4-40). $Z = 0, \beta = 0$. Wartości parametrów wymiany oraz oznaczenia krzywych takie same jak na rysunku 4-17.



Rysunek 4-28. Znormalizowana całkowita przewodność różniczkowa dla złącza F/I/TS obliczona dla unitarnego nodalnego stanu p-wave danego wzorem (4-40). $Z = 1.25, \beta = 0$. Wartości parametrów wymiany oraz oznaczenia krzywych takie same jak na rysunku 4-17.

Jest to spowodowane brakiem izotropowego składnika parametru porządku w wyniku czego na powyższych wykresach obserwuje się maksimum dla $E/\Delta_0 = 0$. Zachowanie to określane jest, jako ZBCP. Łagodny zanik przewodności do wartości 1 został omówiony powyżej. Efekty związane z wewnętrznym polem magnetycznym pochodzącym od uporządkowania ferromagnetycznego ($X > 0$) są doskonale widoczne na rysunkach 4-23, 4-25, 4-27 oraz 4-17 (a) i (b). Całkowita znormalizowana przewodność różniczkowa złącza spada z początkowej wartości $\sigma = 2$ dla $X = 0$ do zera w przypadku X zmierzającego do 1. W przypadku stanów opisanych wzorami (4-38), (4-39), (4-50) oraz (4-51) widać, że plateau przechodzi przez pośrednie wartości przewodności aż do osiągnięcia 0. Wyjątkiem jest przypadek, na rysunku 4-23 dla $X=0.8$ gdzie zamiast plateau obserwuje się lokalne maksimum dla $E/\Delta_0 = 0$. W przypadku stanów $B_{1g} \times E_u$ (patrz wzór (4-36)) oraz $B_{2g} \times E_u$ (patrz wzór (4-37)) maksima przechodzą w minimum o wartości $\sigma = 0$ dla $X=0.999$. Wewnętrzne pole magnetyczne, występujące w ferromagnetyku, jest odpowiedzialne za polaryzację spinów elektronów. Oznacza to, że w miarę wzrostu wewnętrznego pola wymiany pojawia się przewaga elektronów z kierunkiem spinu zgodnym z kierunkiem tego pola. Dla stanów unitarnych, dziura Andreeva musi mieć spin przeciwny do kierunku spinu padającego elektronu, tak, aby mogła powstać para Coopera, której całkowity spin wynosi zero. W miarę wzrostu pola wymiany z dostępnego rezerwuaru elektronów eliminowane są te cząstki, które posiadają kierunek spinu przeciwny niż pole wymiany. Efektem tego jest zanikanie przewodności wskutek braku elektronów o spinach przeciwnych do spinów padających elektronów, co uniemożliwia pojawienie się stanów związanych po stronie nadprzewodnika. Można powiedzieć, że np. w przypadku $B_{2g} \times E_u$ ZBCP przechodzi w minimum przewodności dla energii $E=0$, zwane Zero Bias Conductance Deep (ZBCD). Wszystkie uwagi odnoszące się do przypadku $Z=0$ dotyczą również $B_{1g} \times E_u$ oraz $B_{2g} \times E_u$ w obecności bariery ($Z=1.25$) oraz zmiany orientacji próbki nadprzewodzącej w stosunku do interfejsu ($\beta \neq 0$). Przy przejściu od przypadku przedstawionego na rysunku 4-17 ($Z=0$), do przypadku przedstawionego na rysunku 4-18 ($Z=1.25$) zauważamy, że następuje rozszczepienie głównego piku. Przewodność przedstawiona na rysunku 4-17 (a) dla $Z=0$ i $X=0$, w przypadku włączenia bariery potencjału $Z=1.25$ rozszczepia się na dwa maksima, które są oddalone od siebie o ok. 0.4 jednostek E/Δ_0 , co jest przedstawione na rysunku 4-18 (a). W przypadku przedstawionym na rysunku 4-17 (b), dla którego występuje zjawisko ZBCP (dla $X=0$), przy włączonej barierze potencjału $Z=1.25$ następuje rozszczepienie na dwa maksima. (patrz rys. 4-18 (b)). Odległość pomiędzy głównymi pikami na rysunku 4-18 (b) jest rzędu 1.6 jednostek E/Δ_0 . Różnica ta związana jest z różnymi mechanizmami powstawania maksimum dla stanów $B_{2g} \times E_u$ oraz $B_{1g} \times E_u$. Zwiększając wartość pola wymiany zauważamy, że główne piki ulegają zmniejszeniu oraz widać przejście w ZBCD. Wpływ orientacji parametrów porządku względem interfejsu na otrzymane wyniki został przedstawiony graficznie na wykresach 4-19, 4-20, 4-21 oraz 4-22. W wyniku obrotu o kąt $\beta = \pi/4$ następuje zmiana charakteru fizycznych parametrów porządku.

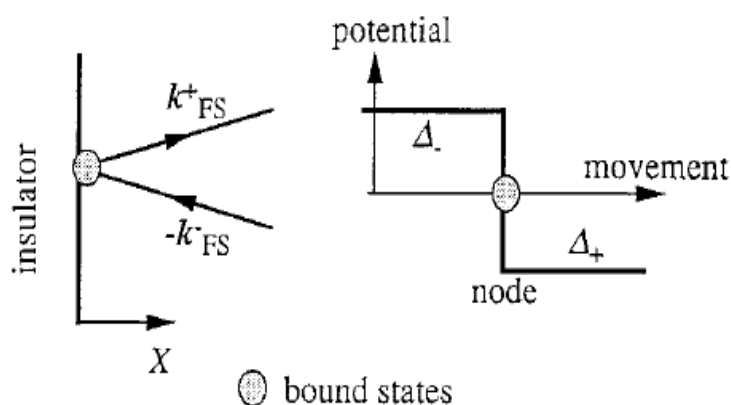
Aby pokazać jak dokonuje się ta transformacja, wybrano pośrednie wartości kąta β wynoszące $\pi/16, \pi/11, \pi/8$. Na wykresach widać, że pozycja pików ulega zmianie i po dokonaniu obrotu o kąt $\pi/8$ przewodności dla obydwóch parametrów porządku są takie same (patrz rys. 4-21). Dla $\beta = \pi/4$ $B_{1g} \times E_u$ przechodzi w $B_{2g} \times E_u$ i odwrotnie, wykresy przewodności na złączu także przedstawiają tę charakterystykę co jest widoczne na rysunku 4-21. Zmniejszanie wartości przewodności dla różnych pól wymiany opisano powyżej. Charakter zaniku maksimum jest taki sam jak dla $X=0, Z=0$. Zaznaczyć należy, że każde maksimum na wykresach odpowiada stanom związanym, za które odpowiedzialne są punkty nodalne parametru porządku

Rozdział 4.3.1 Wpływ fazy parametru porządku na ZBCP.

W celu przedyskutowania wpływu fazy parametru porządku na procesy odbicia (elektronu lub dziury na granicy złącza, warto zdefiniować następujące efektywne potencjały pary oznaczone Δ_+ oraz Δ_- (patrz wzór (2-146)):

$$\Delta_{\pm} \equiv \Delta(\pm \vec{k}_{\pm}/k_F) = |\Delta_{\pm}| \exp(i\theta_{\pm}) \quad (4-60)$$

gdzie kąt $\theta_+ = \theta$ zaś $\theta_- = \pi - \theta$. Istotną cechą tunelowania przez złącze F/I/S jest kreacja kwazicząstek określanych, jako elektronopodobne (ELQ) lub dziuropodobne (HLQ). Wektor falowy związany z ELQ jest opisany przez $\pm k_+$ a wektor opisujący HLQ $\pm k_-$ (patrz wzór (2-105)). Rozważmy zachowanie par kwazicząstek $+k_+$ oraz $-k_-$. Na rysunku 4-29 przedstawiony jest proces odbicia kwazicząstek i wynikająca z tego zmiana efektywnego potencjału.



Rysunek 4-29. Trajektoria kwazicząstki w pobliżu interfejsu I-S. Padająca z nadprzewodnika kwazicząstka jest elastycznie odbita od warstwy izolatora. Efektywny potencjał parujący odczuwalny przez kwazicząstkę ulega zmianie spowodowanej zmianą wektora falowego typu dziuropodobnego $-k_{FS}^- \equiv -k_-$ na elektronopodobny $k_{FS}^+ \equiv k_+$. Stany związane formują się w punkcie nodalnym parametru porządku [148].

Należy zaznaczyć, że pochodzenie ZBCP nie może być wyjaśnione na podstawie standardowego podejścia do teorii tunelowania. Należy uwzględnić wpływ fazy parametru porządku Δ_+ , Δ_- [148], [149]. Satoshi Kashiwaya [141] podaje następującą definicję ZBCP. ZBCP polega na formowaniu się zero energetycznych stanów związanych na powierzchni Fermiego co jest spowodowane przesunięciem fazy o czynnik π .

Definicja Satoshi Kashiwaya została sformułowana dla nadprzewodników o symetrii parowania typu d-wave, spin-singlet [141]. Stosowanie tej definicji można jednak rozciągnąć na nadprzewodnictwo o innej symetrii parowania np. trypletowe (p-wave) lub f-wave, o ile parametr porządku posiada punkty lub linie nodalne.

Rozważmy zatem wpływ różnicy faz $\theta_+ - \theta_-$ na formowanie się ZBCP. Z zerowania się mianownika wyrażenia (4-11) dla $X=0$ dla dużych wysokości bariery Z otrzymujemy następujące równanie na energię stanów związanych E_p :

$$\Gamma_+ \Gamma_-|_{E=E_p} = \exp(i\theta_+ - i\theta_-) \quad (4-61)$$

gdzie,

$$\Gamma_{\pm} = \frac{E - \sqrt{E^2 - |\Delta_{\pm}|^2}}{|\Delta_{\pm}|} \quad (4-62)$$

Wzór (4-62) określający Γ_{\pm} można przedstawić w postaci zespolonej:

$$\Gamma_{\pm} = |\Gamma_{\pm}| \exp(i \theta_{\Gamma_{\pm}}) \quad (4-63)$$

gdzie wzór na kąt $\theta_{\Gamma_{\pm}}$ ma postać:

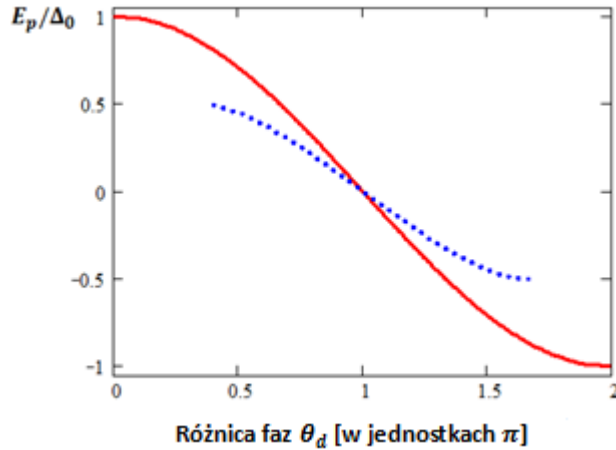
$$\theta_{\Gamma_{\pm}} = -\arctg \left(\frac{\sqrt{|\Delta_{\pm}|^2 - E^2}}{E} \right) \quad (4-64)$$

Zwróćmy uwagę, że przewodnictwo tunelowe podobnie, jak w przypadku rezonansowego tunelowania nie zależy od wartości Z [150]. W pracy [148] rozważa się złącze S/N/S, gdzie grubość warstwy metalu w stanie normalnym wynosi d . W niniejszej pracy rozważa się złącza N/I/S lub F/I/S co oznacza, że $d = 0$. Wtedy zero energetyczny, powierzchniowy stan związany pojawia się na styku izolator – nadprzewodnik, a kwantowy warunek dla fazy parametru porządku dający stany związane kwazicząstek przedstawia się następująco:

$$\theta_{\Gamma_+} + \theta_{\Gamma_-} + \theta_d = 2 j \pi \quad (4-65)$$

gdzie: $\theta_d = \theta_+ - \theta_-$, zaś j jest liczbą całkowitą. Zwróćmy uwagę na to, że różnica faz (4-65) jest funkcją energii E .

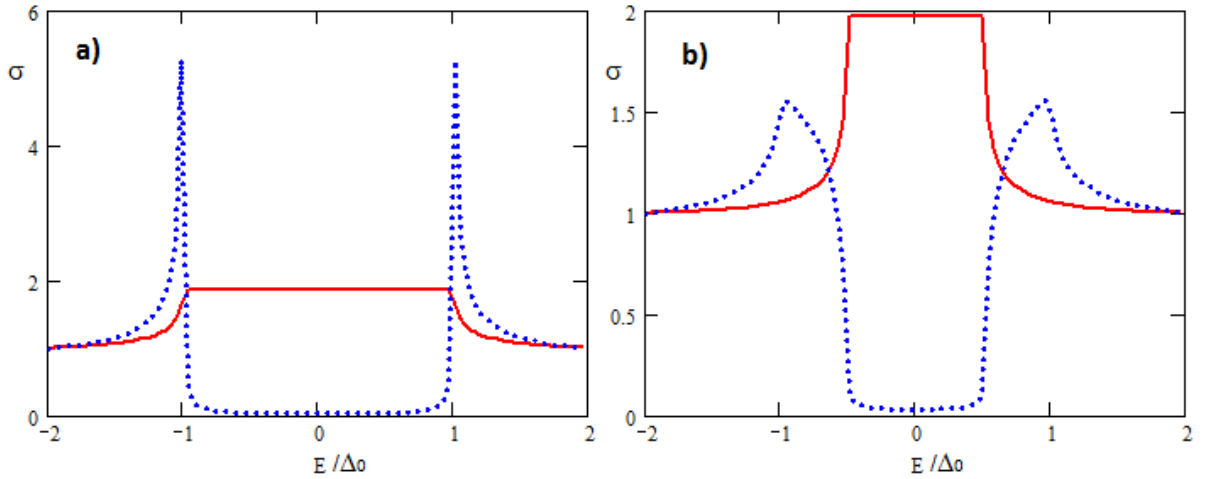
Rozpatrzmy dwa proste przypadki ilustrujące, dla jakich wartości różnicy faz pojawia się stan związany dla energii równej zero. Dla pierwszego przypadku $|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$. W drugim przypadku $2|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$. Moduły tych parametrów porządku nie zależą od kąta θ . Sytuację tę przedstawiono na rysunku 4-30.



Rysunek 4-30. Zależność energii stanów związanych od różnicy faz θ_d . Przypadek $|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$ reprezentowany jest przez ciągłą czerwoną linię. Przypadek $2|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$ reprezentuje kropkowana linia niebieska.

W przypadku, kiedy $\theta_d = 1$ otrzymujemy stany związane o zerowej energii. W przypadku $|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$, stany związane o energii różnej od zera mogą istnieć w zakresie od $\theta_d = 0$ do $\theta_d = 2\pi$. Dla przypadku $2|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$ obszar, w którym stany związane istnieją, zawiera się w przedziale różnicy faz θ_d pomiędzy $\pi/3$ a $5\pi/3$.

Przeanalizujemy najpierw zachowanie się znormalizowanej całkowitej różniczkowej przewodności tunelowej dla złącza N/I/S obliczonej za pomocą wzoru (4-13). Wyniki przedstawione są na rysunku 4-31. Do obliczeń przyjęto wartość $|\Delta_{\pm}| = 1$ (rysunek 4-31a) oraz $|\Delta_+| = 0.5, |\Delta_-| = 1$ (rysunek 4-31b). Warto zauważyć, że wyniki przedstawione na rysunku 4-31a) pokrywają się z wynikami uzyskanymi dla następujących parametrów porządku: izotropowy p-wave (patrz wzór (4-38)), chiralny p-wave (patrz wzór (4-50)) oraz zmodyfikowany chiralny p-wave (patrz wzór (4-51)) dla $Z=0$. Dla wartości energii $E/\Delta_0 = 0$ oraz dla $Z=0$ istnieje stan związany, dla którego znormalizowana całkowita różniczkowa przewodność tunelowa wynosi 2. Niemniej jednak, nie obserwuje się istnienia piku ZBCP. Obserwuje się natomiast plateau, którego szerokość jest powiązana z modułem parametru porządku. Wyniki przedstawione na rysunku 4-31a) reprezentują rezultat dla parametru porządku typu s-wave.



Rysunek 4-31. Znormalizowana całkowita różniczkowa przewodność tunelowa dla przypadku a) $|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$ oraz dla przypadku b) $2|\Delta_+| = |\Delta_-| = |\Delta_0|$. Krzywa oznaczona ciągłą czerwoną linią odnosi się do bariery $Z=0$. Krzywa oznaczona kropkowaną niebieską linią przedstawia wyniki dla $Z=5$.

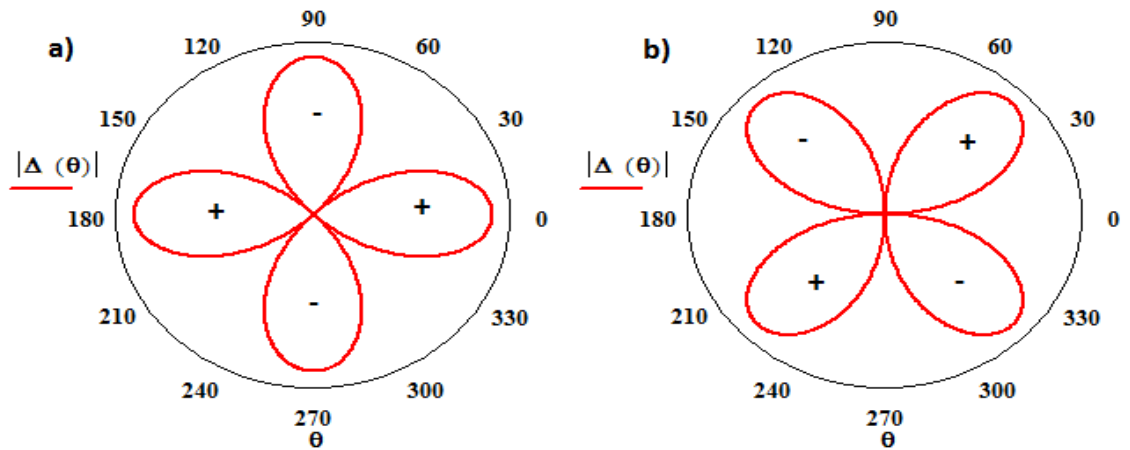
Wyniki obliczeń znormalizowanej całkowitej różniczkowej przewodności tunelowej dla stanu $d_{x^2+y^2}$ -wave w postaci (patrz rysunek 4-32):

$$\Delta_{\pm}(\theta) = \Delta_0 \cos(2(\theta \mp \beta)) \quad (4-66)$$

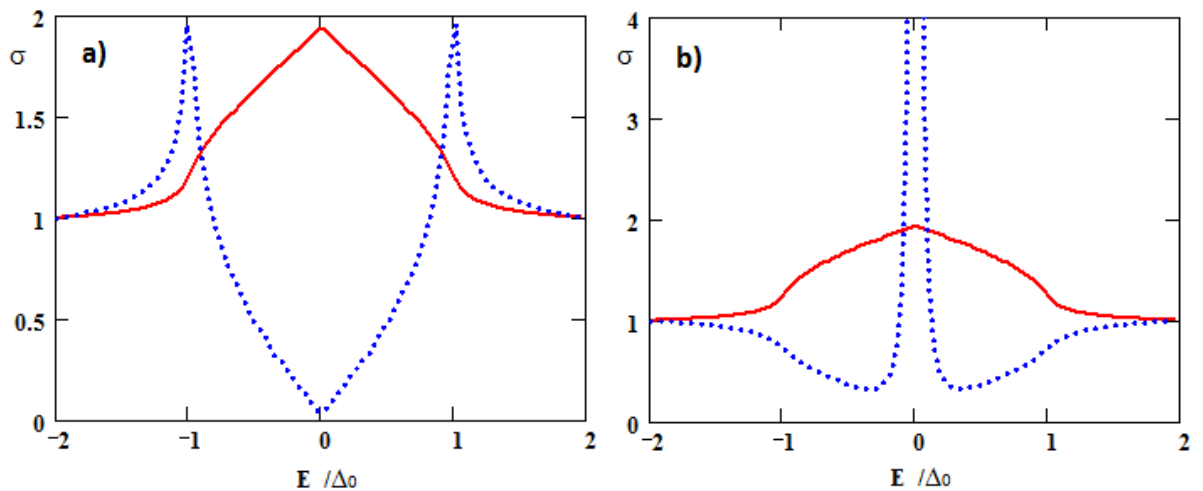
są zamieszczone na rysunkach 4-33a) oraz 4-33b). Można stwierdzić, że w przypadku, kiedy jedno z ramion parametru porządku zwrócone jest w kierunku interfejsu mamy do czynienia z rezonansem. Natomiast jeśli parametr porządku zwrócony jest punktem nodalnym w kierunku interfejsu pojawia się ZBCP. Na rysunku 4-32 zaznaczono za pomocą \pm fazy parametry porządku. W przypadku ZBCP można stwierdzić, że elektron padający pod kątem zerowym do interfejsu w równym stopniu odczuwa wpływ obydwu potencjałów Δ_+ i Δ_- , co oznacza, że wypadkowy potencjał dla tego elektronu wynosi zero. W przypadku, kiedy elektrony padają pod innymi kątami, zaczynają one „odczuwać” przewagę jednego z potencjałów. Dla tych elektronów, wypadkowy znak potencjału może być dodatni bądź ujemny. Rysunek 4-33b) przedstawia ZBCP, który występuje dla $\Delta_{\pm}(\theta) = \Delta_0 \cos(2(\theta \mp \pi/4))$, a jego wysokość rośnie ze wzrostem wysokości bariery Z .

Wyniki dla parametru porządku $B_{2g} \times Eu$ (patrz wzór (4-37)) przedstawione zostały na rysunkach od 4-17(b) do 4-22(b). Na rysunku 4-18b), gdzie wartość bariery wynosi $Z=1.25$, zauważalne jest rozszczenie piku. Zależność energetyczna znormalizowanej całkowitej różniczkowej przewodności dla parametru porządku $B_{2g} \times Eu$ przy wartości bariery $Z=5$ została przedstawiona na rysunku 4-34.

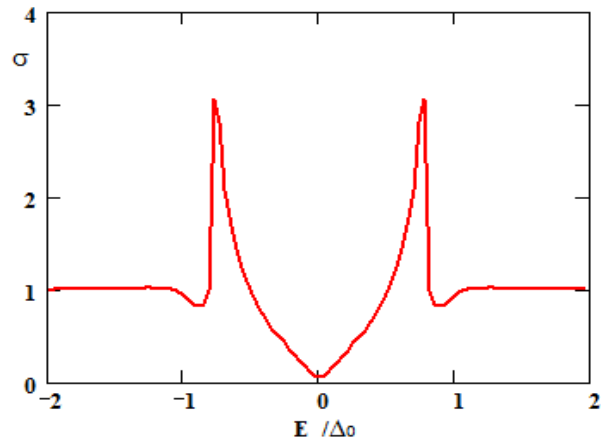
Widać, że dla parametru porządku $B_{2g} \times E_u$ nie obserwuje się ZBCP dla bariery Z większej od zera i dla kąta $\beta = 0$. Istnieje różnica w zachowaniu się ZBCP pomiędzy parametrami porządku określonymi przez funkcje rzeczywiste, takie jak $d_{x^2+y^2}$ -wave, oraz parametrami porządku określonymi przez funkcje zespolone. W przypadku tych drugich ZBCP występuje tylko dla Z równego zero (patrz uwaga o warunkach na istnienie stanów związanych - wzór (4-61))



Rysunek 4-32. Moduł parametru porządku $\Delta_{\pm}(\theta) = \Delta_0 \cos(2(\theta \mp \beta))$ dla stanu $d_{x^2+y^2}$ dla przypadku a) $\beta = 0$ oraz b) $\beta = \pi/4$. Znaki plus i minus odpowiadają znakom w dolnym indeksie parametru porządku $\Delta_{\pm}(\theta)$.



Rysunek 4-33. Znormalizowana całkowita różniczkowa przewodność tunelowa dla parametru porządku $\Delta_{\pm}(\theta) = \Delta_0 \cos(2(\theta \mp \beta))$ dla stanu $d_{x^2+y^2}$ dla przypadku a) $\beta = 0$ oraz b) $\beta = \pi/4$. Krzywe oznaczone ciągłą czerwoną linią odnoszą się dla bariery $Z=0$. Krzywe oznaczone kropkowaną niebieską linią przedstawiają wyniki dla $Z=5$.



Rysunek 4-34. Znormalizowana całkowita różniczkowa przewodność tunelowa dla parametru porządku $B_{2g} \times E_u$ dla $\beta = 0$ oraz $Z=5$.

Poniżej zostały zebrane w punktach warunki dotyczące występowania ZBCP:

- Parametr porządku musi posiadać punkt lub linię nodalną na powierzchni Fermiego.
- Linia lub punkt nodalny musi znajdować się na osi, która jest wyznaczona przez elektrony padające pod kątem $\theta = 0^\circ$. Elektrony te wnoszą największy wkład do zjawiska ZBCP.
- Brak bariery potencjału na złączu ($Z=0$) dla parametrów porządku określonych za pomocą funkcji zespolonych.
- ZBCP istnieje dla barier potencjału większych od zera ($Z>0$) dla parametrów porządku określonych za pomocą funkcji rzeczywistych.
- Spełnienie warunku kwantowego dla różnicy faz, (patrz wzór (4-65)).

Rozdział 4.3.2 Asymetria ze względu na kąty padania.

Interesującym aspektem rozważanego problemu jest występowanie różnic prawdopodobieństwa odbicia dziury Andreeva w zależności od kąta padania elektronów. Na rysunkach 4-35 - 4-46 przedstawiono kwadraty amplitud prawdopodobieństwa odbicia dziury od interfejsu. Przy czym dziura Andreeva ma spin „w dół”, ($|a_{\downarrow}|^2$) dla padających elektronów ze spinem „w górę” lub odwrotnie kierunek spinu dziury jest „w górę”, ($|a_{\uparrow}|^2$) dla przypadku, kiedy padające elektrony mają spin „w dół” (tak jest dla stanów unitarnych). Włączenie bariery jest w głównej mierze odpowiedzialne za powstawanie rozszczepienia na dwa piki dla dodatnich kątów padania. Pole wymiany przy rozszczepieniu gra mniejszą rolę, natomiast odpowiedzialne jest za rozszczepienie wartości prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla różnych kierunków spinów padających cząstek. Wszystkie te różnice obserwuje się dla kątów większych od 0° . Za różnice w zachowaniu prawdopodobieństw odpowiedzialny jest czynnik $\phi_+^* \phi_-$ występujący w równaniach (4-7) - (4-8) definiujących $a_{\downarrow[\uparrow]}$. Czynniki fazowe ϕ_+ oraz ϕ_- są zdefiniowane przez wzór (2-146). Na użytek poniższej dyskusji wyrażmy funkcję Δ , w innej postaci:

$$\Delta(\theta) = \Delta_0 e^{i\theta} \quad (4-67)$$

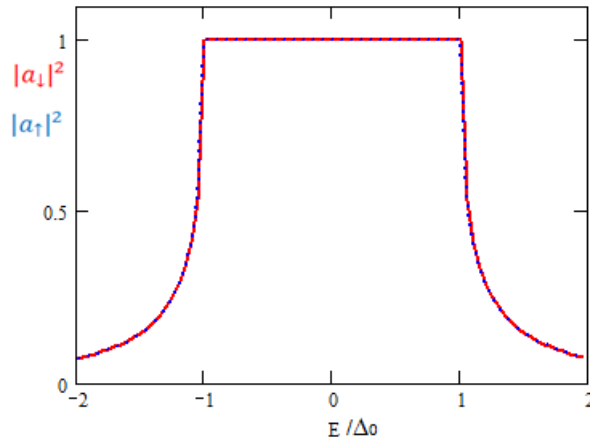
gdzie, Δ_0 jest amplitudą. Zgodnie z (2-146) uzyskuje się proste wyrażenie na czynnik $\phi_+^* \phi_-$:

$$\phi_+^* \phi_- = -e^{-i2\theta} \quad (4-68)$$

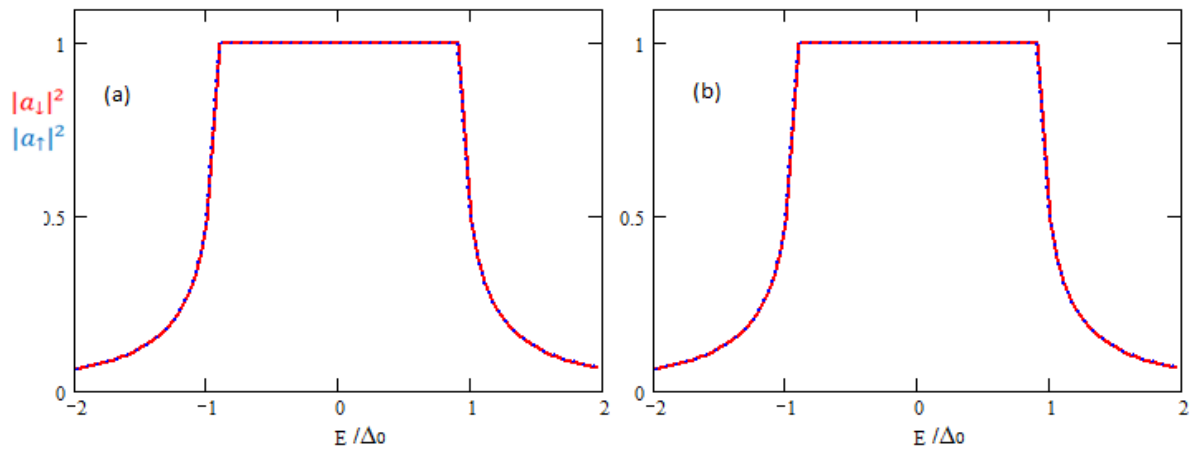
Zmiana kąta θ na $-\theta$ powoduje zmianę znaku fazy w wyrażeniu (4-68), co prowadzi do relacji:

$$\phi_+^* \phi_-(-\theta) = -e^{i2\theta} \quad (4-69)$$

Czynnik $\phi_+^* \phi_-$ jest częścią $\delta_{\pm}(E, \theta_S)$, równania (4-7) - (4-8). Czynniki te występują we wzorach definiujących $a_{\downarrow[\uparrow]}$ (4-2) oraz $b_{\uparrow[\downarrow]}$ (4-3).

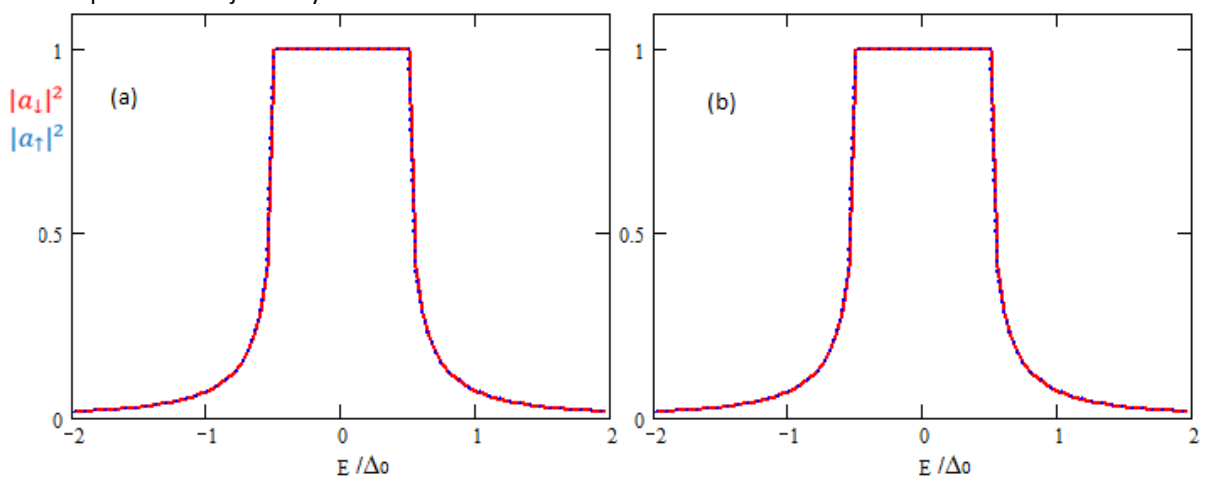


Rysunek 4-35. Prawdopodobieństwa $|a_l|^2$ odbicia dziury Andreeva dla padającego elektronu ze spinem „w dół” dla stanu B1g x Eu, dla przypadku $\theta = 0^\circ$. Odbita dziura ma spin „w górę”. Analogicznie $|a_r|^2$ oznacza prawdopodobieństwo odbicia dziury Andreeva, gdy kierunek spinu padającego elektronu jest „w górę”. Spin odbitej dziury ma kierunek „w dół”. Prawdopodobieństwa wyznaczone na podstawie wzoru (4-2) dla parametrów: X=0, Z=0, $\beta = 0^\circ$.



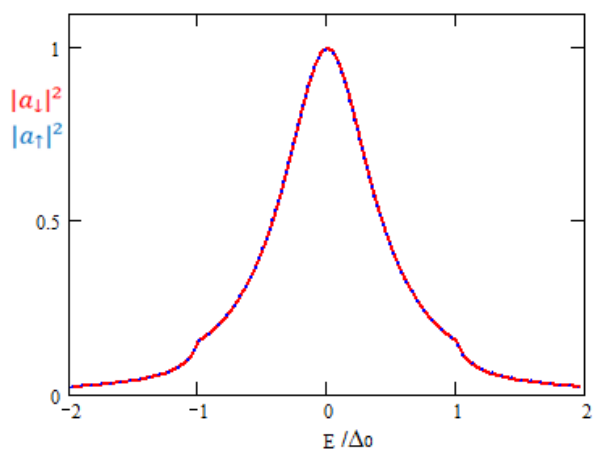
Rysunek 4-36. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 10^\circ$ (a) $\theta = -10^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-35.

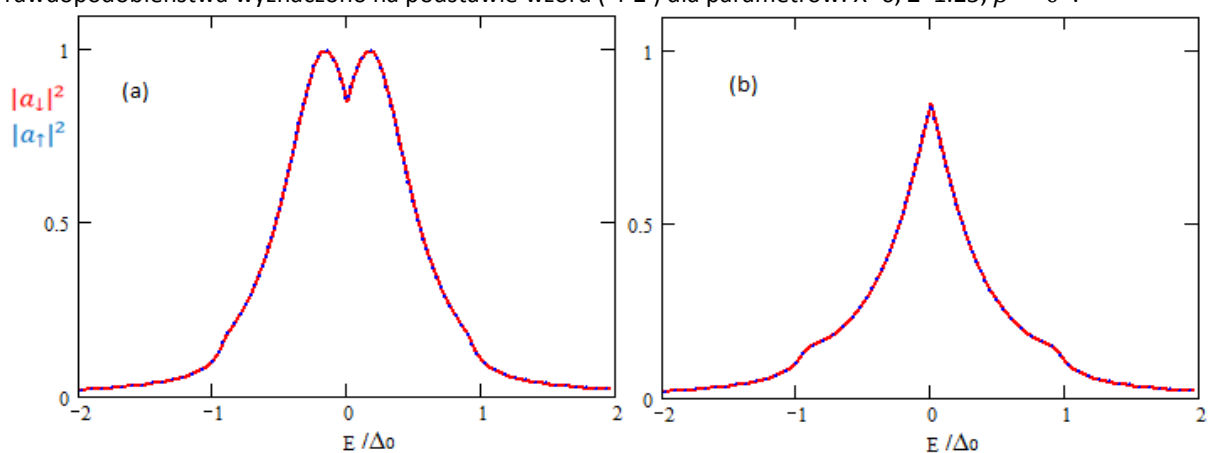


Rysunek 4-37. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 30^\circ$ (a) $\theta = -30^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-35.

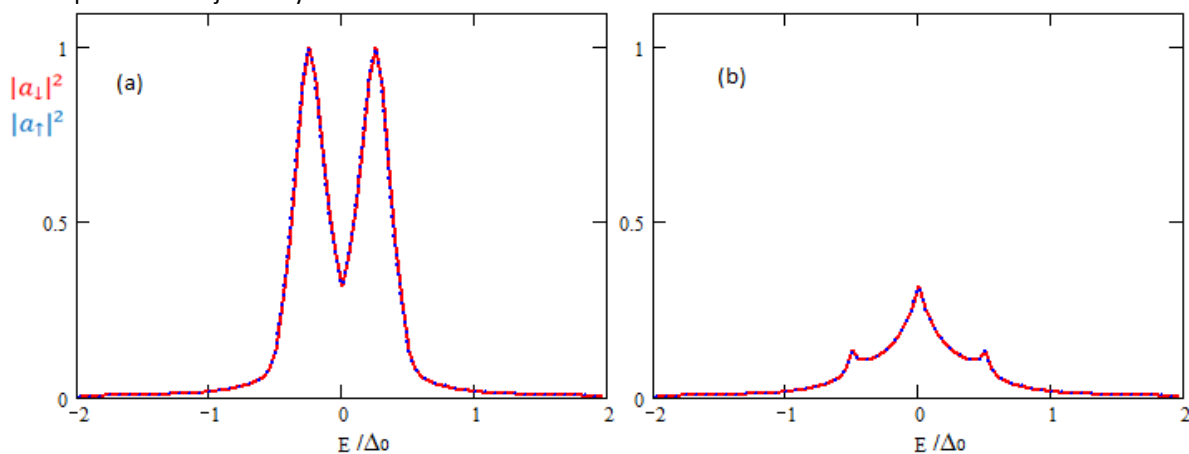


Rysunek 4-38. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu dla przypadku $\theta = 0^\circ$. Prawdopodobieństwa wyznaczone na podstawie wzoru (4-2) dla parametrów: $X=0, Z=1.25, \beta = 0^\circ$.



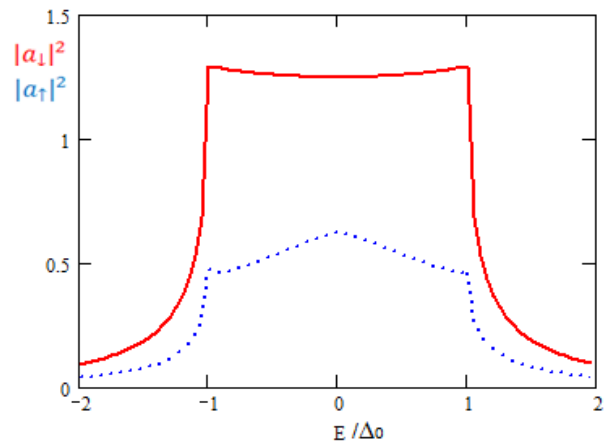
Rysunek 4-39. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 10^\circ$ (a) $\theta = -10^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-38.

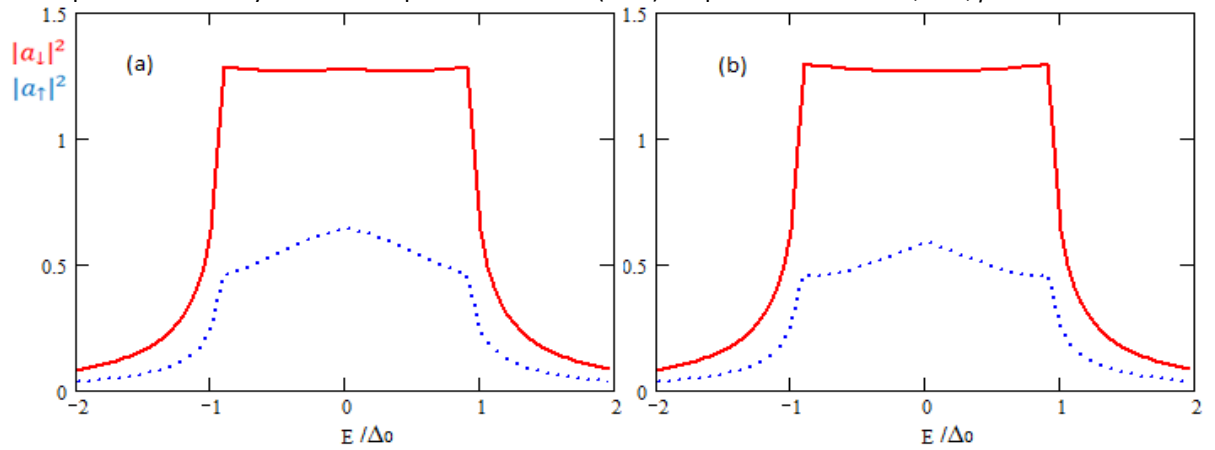


Rysunek 4-40. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 30^\circ$ (a) $\theta = -30^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-38.

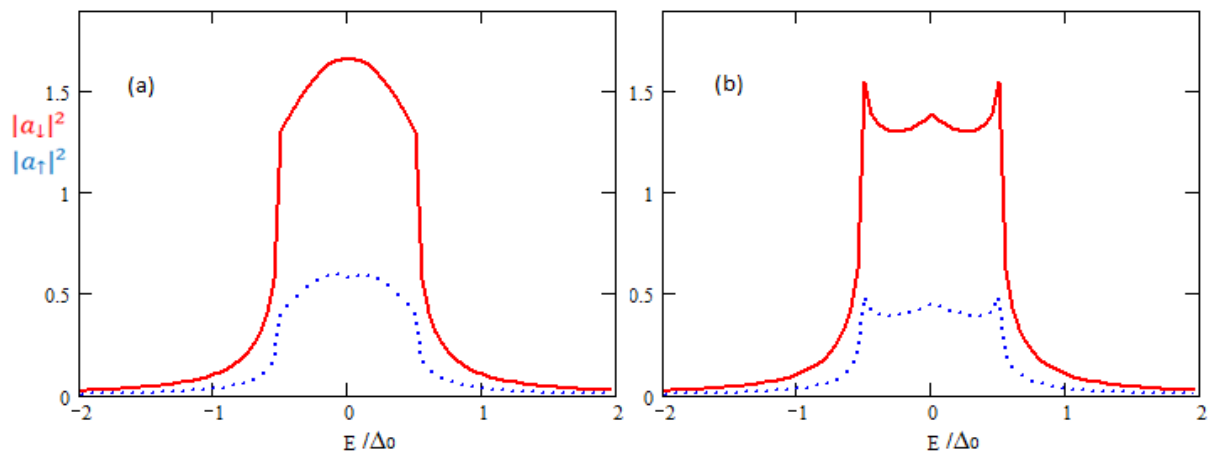


Rysunek 4-41. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu dla przypadku $\theta = 0^\circ$. Prawdopodobieństwa wyznaczone na podstawie wzoru (4-2) dla parametrów: $X=0.4, Z=0, \beta = 0^\circ$.



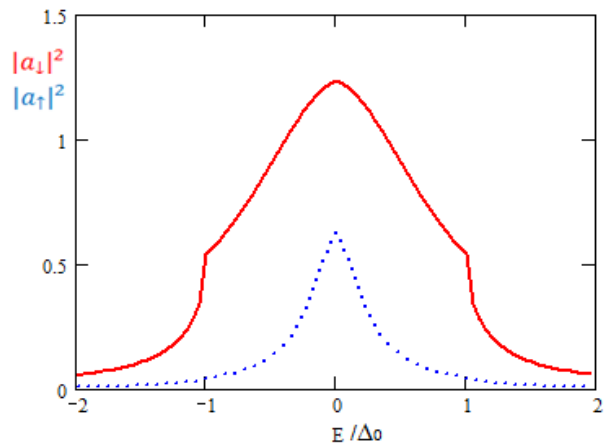
Rysunek 4-42. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 10^\circ$ (a) $\theta = -10^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-41.

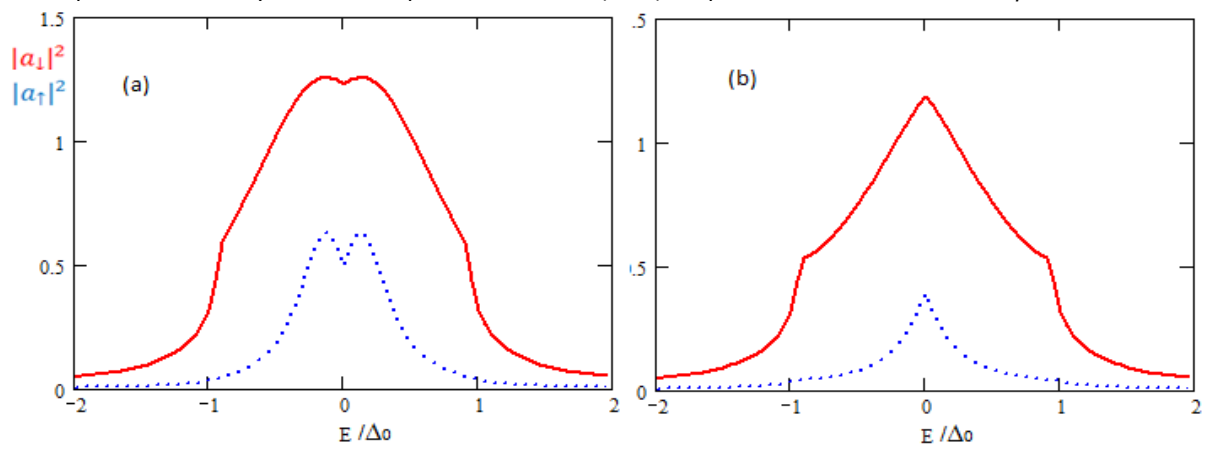


Rysunek 4-43. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 30^\circ$ (a) $\theta = -30^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-41.

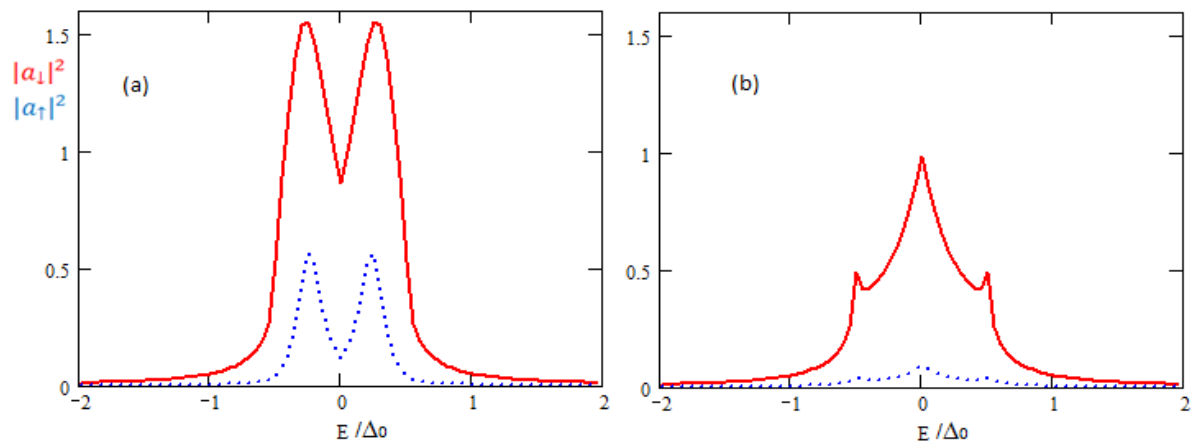


Rysunek 4-44. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu dla przypadku $\theta = 0^\circ$. Prawdopodobieństwa wyznaczone na podstawie wzoru (4-2) dla parametrów: $X=0.4, Z=1.25, \beta = 0^\circ$.



Rysunek 4-45. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 10^\circ$ (a) $\theta = -10^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-44.



Rysunek 4-46. Prawdopodobieństwa odbicia Andreeva dla stanu B1g x Eu i kąta padania $\theta = 30^\circ$ (a) $\theta = -30^\circ$ (b).

Wartości parametrów jak na rysunku 4-44.

Najważniejsze wnioski z przedstawionych powyżej graficznie wyników można sformułować następująco:

- Włączenie bariery jest w głównej mierze odpowiedzialne za powstawanie rozszczepienia krzywej prawdopodobieństwa odbicia Andreeva na dwa piki dla dodatnich kątów padania. Pole wymiany przy rozszczepieniu gra mniejszą rolę, natomiast odpowiedzialne jest za zróżnicowanie rozszczepienia dla różnych kierunków spinów padających cząstek. Wszystkie te różnice obserwuje się dla kątów większych niż 0° .
- Zmiana znaku kąta padania z wartości dodatnich na ujemne powoduje zmianę wartości $|a_{\downarrow\uparrow}|^2$ (4-2).

Rozdział 4.4 Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego.

Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego uwzględnimy przez spinowy efekt Zeemana. Oznacza to, że w poprzednio używanych wzorach wystarczy dokonać zmiany energii E na $E \pm \mu_B H$, gdzie μ_B oznacza magneton Bohra, a H jest natężeniem pola magnetycznego. Wyrażenie na różniczkowe przewodnictwo tunelowe przyjmuje wtedy postać [17]:

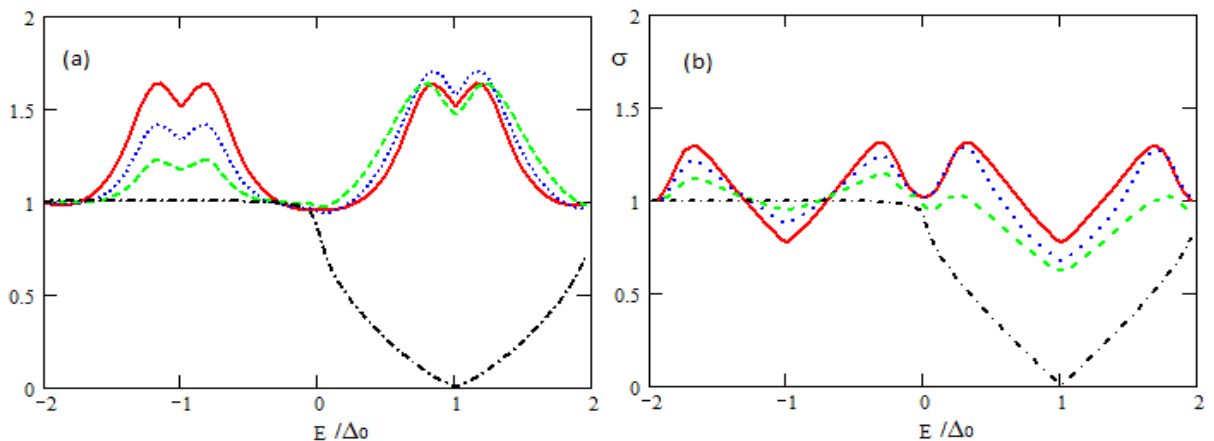
$$\sigma_k(E) = \sigma_{k\uparrow}(E - \mu_B H) + \sigma_{k\downarrow}(E + \mu_B H) \quad (4-70)$$

gdzie $\sigma_{k\uparrow[\downarrow]}(E \mp \mu_B H)$ oznacza odpowiednio przyczynek do przewodnictwa pochodzący od elektronów ze spinami skierowanymi zgodnie z kierunkiem pola i przeciwnie do niego. Na podstawie tej zależności wyliczono znormalizowane całkowite różniczkowe przewodności tunelowe, które zostały przedstawione na rysunkach 4-47 – 4-49 dla następujących parametrów: $\beta = 0, Z = 1.25$ oraz dla parametrów pól wymiany $X=0$ (czerwona linia), 0.2 (niebieska linia), 0.4 (zielona linia) oraz 0.999 (czarna linia). Wartość rozszczepienia przewodności wyrażonej w jednostkach E/Δ_0 zależy w sposób liniowy od zewnętrznego pola magnetycznego H . Zasadniczym efektem związanym z wpływem zewnętrznego pola magnetycznego jest zaburzenie symetrycznego rozkładu pików wokół $E/\Delta_0 = 0$. W trakcie analizy wpływu zewnętrznego pola magnetycznego na przewodnictwo tunelowe można wyróżnić trzy rodzaje zachowań w zależności od zewnętrznego pola magnetycznego, pola wymiany i zakresu energii E/Δ_0 .

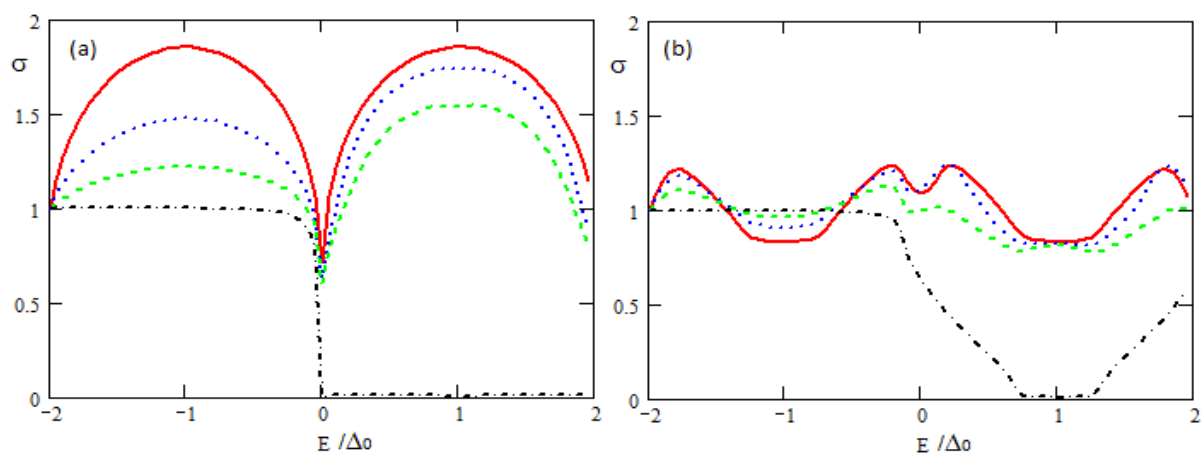
Pierwszy rodzaj. Dla bardzo dużych wartości energii wymiany X obserwuje się podobne charakterystyki znormalizowanego całkowitego różniczkowego przewodnictwa tunelowego dla wszystkich rozpatrywanych parametrów porządku, co jest widoczne na rysunkach 4-47 do 4-49. Dla zakresu energii $E/\Delta_0 \in (-2,0)$ wartość $\sigma_k(E)$ z dobrym przybliżeniem można przyjąć za, równą jedności. Analizując wzór (4-11) dochodzimy do wniosku, że składniki $\frac{k_{\downarrow\uparrow} \cos\theta_a}{k_{\uparrow\downarrow} \cos\theta} |a_{\downarrow\uparrow}|^2$ oraz $|b_{\uparrow\downarrow}|^2$ mają wtedy te same wartości. Dla tej wartości pola wymiany i dla stałego pola magnetycznego $\mu_B H/\Delta_0 = 1$, nie ma prawie elektronów ze spinem „w dół” i dlatego można przyjąć, że $\frac{k_{\uparrow} \cos\theta_a}{k_{\downarrow} \cos\theta} |a_{\downarrow}|^2 = 0$ oraz $|b_{\downarrow}|^2 = 0$. Oznacza to, że tylko elektrony ze spinem „w górę” są odpowiedzialne za przewodnictwo i spełniony jest warunek $\frac{k_{\downarrow} \cos\theta_a}{k_{\uparrow} \cos\theta} |a_{\downarrow}|^2 \approx |b_{\uparrow}|^2$. Dla energii z zakresu $E/\Delta_0 \in (0,2)$, elektrony ze spinem „w górę” także wpływają na znormalizowaną różniczkową przewodność tunelową. Na przykład przewodność może przyjmować wartość $\sigma_k(E) = 0$ w pewnym zakresie energii lub w jednym punkcie. Wtedy $|a_{\downarrow}|^2 = 0$ oraz $|b_{\uparrow}|^2 = 1$. Jest to widoczne na rysunkach: 4-47(a), 4-47(b), 4-49 ($\sigma_k(E) = 0$ w punkcie), 4-48(a), 4-48(b) ($\sigma_k(E) = 0$ – plateau o szerokości odpowiednio 2 oraz 1/2 w jednostkach E/Δ_0). Krzywe oznaczone kolorem czarnym.

Drugi rodzaj. Dla $X=0$ obserwuje się symetryczny rozkład pików wokół wartości $E/\Delta_0 = 0$. Jest to spowodowane jednakową dystrybucją elektronów z kierunkiem spinu zgodnym i przeciwnym do zewnętrznego pola magnetycznego. Lokalne pole wymiany nie wpływa na dystrybucję elektronów z różnymi zwrotami spinów. Na rysunkach 4-47(a-b), 4-48 (a-b), 4-49 krzywe oznaczone kolorem czerwonym uwidoczniają ten typ zachowania.

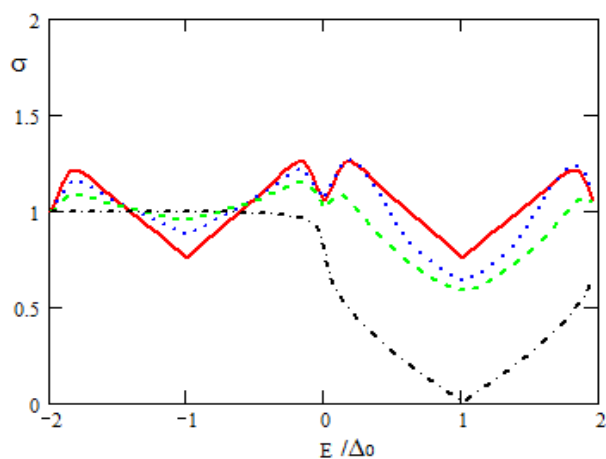
Trzeci rodzaj zachowania obejmuje wyniki dla pośrednich wartości X tzn. pomiędzy $0 < X < 1$. W przypadku parametrów porządku takich jak: $B_{1g} \times E_u$ (4-36), izotropowy stan p-wave (4-38), chiralny stan p-wave (4-50) oraz zmodyfikowany chiralny stan p-wave (4-51), można zauważyć korelacje pomiędzy wielkością lokalnego pola wymiany i wysokością pików. Jest to szczególnie widoczne w zakresie $E/\Delta_0 \in (-2,0)$, w którym lokalne pole wymiany współdziała z zewnętrznym polem magnetycznym i widać zwiększający się deficyt elektronów ze spinem w dół. W przypadku parametrów porządku takich jak: $B_{2g} \times E_u$ (4-37), p-wave (4-39), oraz stan p-wave nodalny (4-40), korelacja pomiędzy wysokością pików i wartością lokalnego pola magnetycznego nie jest tak wyraźnie widoczna. Jest to pokazane na rysunkach 4-47(a-b), 4-48(a-b), 4-49. Odpowiednie krzywe oznaczone są kolorem niebieskim ($X = 0.4$) i zielonym ($X = 0.8$).



Rysunek 4-47. Wpływ pola magnetycznego na przewodność tunelową dla następujących parametrów porządku: $B_{1g} \times E_u$ (a) oraz $B_{2g} \times E_u$ (b). W obydwóch przypadkach obliczenia wykonano dla następujących parametrów $\beta = 0, Z = 1.25, \frac{\mu_B H}{\Delta_0} = 1$ oraz dla podanych w tekście parametrów pola wymiany X .



Rysunek 4-48. Wpływ pola magnetycznego na przewodność tunelową dla następujących parametrów porządku: izotropowy stan p-wave (4-38), chiralny stan p-wave (4-50), zmodyfikowany chiralny stan p-wave (4-51) (a) oraz stan p-wave (4-39) (b). Parametry jak na rysunku 4-47.



Rysunek 4-49. Wpływ pola magnetycznego na przewodność tunelową dla parametru porządku: stan nodalny p-wave (4-40). Parametry jak na rysunku 4-47.

Rozdział 5. Podsumowanie.

Badanie transportu elektronów przez złącza zawierające nadprzewodnik cieszą się dużym zainteresowaniem zarówno z punktu widzenia badań podstawowych dotyczących np. symetrii parowania w nadprzewodniku, jak i w kontekście możliwych zastosowań praktycznych np. do badania zależnego od spinu transportu ładunku w spintronice. Celem niniejszej rozprawy było zbadanie prądu tunelowego w złączach zawierających nadprzewodnik o trypletowej symetrii parowania i barierę potencjału utworzoną na granicy faz pomiędzy metalem (w stanie normalnym lub ferromagnetycznym) a nadprzewodnikiem. Wybór trypletowej symetrii parowania wynika z odkrycia nadprzewodnictwa trypletowego w tak fascynującym materiale, jakim jest rutenian strontu. Spin pary Coopera w tym materiale ma wartość jeden co oznacza, że część spinowa parametru porządku jest funkcją parzystą i analogicznie do 3He , możliwe są w tym materiale różne spinowe stany trypletowe lub ich kombinacje. Z zakazu Pauliego wynika, że część orbitalna parametru porządku musi wtedy być funkcją nieparzystą, tzn. funkcją składającą się z harmonik sferycznych o nieparzystej wartości momentu pędu l . W najprostszym przypadku jest to orbitalny triplet ($l = 1$). Konkretna postać parametru porządku zależy od wielu czynników takich jak oddziaływanie spin-orbita, struktura elektronowa czy też pole krystaliczne. W rozprawie zostały zbadane parametry porządku, które ewentualnie mogą realizować się w Sr_2RuO_4 . Dla porównania, dodatkowo przeanalizowano także inne parametry porządku. Jak było wspomniane we wstępie, zasadniczym celem niniejszej rozprawy było podanie odpowiedzi na pytanie: "Czy spektroskopia Andreeva w układzie metal ferromagnetyczny / izolator / nadprzewodnik trypletowy jest czuła na symetrię parametru porządku?".

Zasadnicze wyniki rozprawy poprzedzone są omówieniem takich zagadnień, jak: podstawowe własności termodynamiczne nadprzewodników, zarys teorii BCS wraz z podaniem podstaw teorii dla nadprzewodników niekonwencjonalnych, symetrie parametru porządku z przykładami obliczeń dla symetrii singletowej i trypletowej. Dodatkowo omówiono przykładowe funkcje szczeliny energetycznej, a następnie także transport elektronów przez złącza nadprzewodzące takie jak N/I/S, F/I/S. W niniejszej rozprawie zasadniczą rolę odgrywa odbicie Andreeva i dlatego zjawisko to zostało opisane szczegółowo w rozdziale 2 wraz z równaniami Bogoliubowa – de Gennes'a. Równania te posłużyły do wyznaczenia odpowiednich amplitud prawdopodobieństwa procesów odpowiedzialnych za transport przez złącze, co z kolei posłużyło do obliczenia różniczkowej tunelowej przewodności złącza. W tym samym rozdziale omówiono również formalizm BTK, który pozwala na użycie równań Bogoliubowa – de Gennes'a w przypadku nadprzewodników niekonwencjonalnych. Sporą część pracy stanowi rozdział 3, poświęcony fizycznym własnościom rutenianu strontu, pierwszego materiału krystalicznego, w którym realizuje się trypletowy stan spinowy.

Omówiono też pokrótce podobieństwa i różnice pomiędzy rutenianem strontu i materiałami nadprzewodzącymi na bazie miedzi. Porównano odpowiednie struktury elektronowe oraz inne własności fizyczne stanu normalnego i nadprzewodzącego. Rozdział 4 zawiera wyniki obliczeń przeprowadzonych przez autora niniejszej rozprawy. Dla zaproponowanych parametrów porządku, zdefiniowanych wzorami (4-36), (4-37), (4-38), (4-39), (4-40), (4-50), (4-51), wyznaczono różniczkowe przewodności tunelowe w szerokim zakresie parametrów modelu. Całkowite różniczkowe przewodnictwo tunelowe zostało wyznaczone także dla przypadków z niemagnetyczną barierą na złączu. Ponadto zbadano wpływ obrotu parametru porządku oraz zewnętrznego pola magnetycznego na prąd tunelowy.

Najważniejszymi wnioskami niniejszej rozprawy są:

- Stwierdzenie braku wirtualnego odbicia Andreeva dla stanów unitarnych w przypadku, kiedy spiny padających elektronów mają zwroty przeciwne niż lokalne pole wymiany.
- Zbadanie wpływu kątów krytycznych oraz wirtualnego odbicia Andreeva na różniczkową przewodność tunelową. Wpływ kątów krytycznych jest istotny w przypadku, kiedy padające elektrony mają kierunek spinu zgodny z lokalnym polem wymiany. Stwierdzono, że wpływ kąta krytycznego θ_{CS} na uzyskane wyniki jest bardzo mały, poniżej 0.02%. Wpływ kąta krytycznego θ_{CA} został przedstawiony na rysunkach 4-9 oraz 4-10.
- Wyjaśnienie dlaczego zakres całkowania dla prezentowanych wyników różniczkowej przewodności tunelowej wynosi $\pm \frac{\pi}{2}$.
- Wyjaśnienie pochodzenia punktów nodalnych dla unitarnego chiralnego stanu p-wave (4-50).
- Pokazanie, że rezonans w odbiciu Andreeva występuje wtedy gdy wartość $|\Delta(\theta)|/E = (k_{\downarrow[\uparrow]} + k_{\uparrow[\downarrow]})/(2k_{\uparrow[\downarrow]})$, $|a_{\downarrow[\uparrow]}|^2 = 1$, a „ramiona” modułu funkcji parametru porządku zwrócone są w kierunku interfejsu.
- Zbadanie wpływu kąta obrotu dwóch parametrów porządku $B_{1g} \times E_u$ oraz $B_{2g} \times E_u$ (patrz wzory (4-36), (4-37)) na różniczkową przewodność tunelową uwzględniając pole wymiany oraz wysokość bariery potencjału.
- Wyjaśnienie pochodzenia piku ZBCP jako efektu związanego z fazą parametru porządku.
- Przeanalizowano asymetrię amplitud prawdopodobieństwa ze względu na kąty padania elektronów.
- Zbadanie wpływu efektu Zeemana na różniczkową przewodność tunelową.

Chociaż spektroskopia Andreeva nie rozstrzyga o mechanizmie parowania, umożliwia ona jednak rozróżnienie parametrów porządku ze względu na ich symetrię czy też na inne własności takie jak na przykład unitarność.

Rozdział 6. Bibliografia.

Uwaga redakcyjna.

Bibliografia została wykonana za pomocą bazy danych w programie Word z wykorzystaniem stylu ISO690 – Numerical Reference. W przypadku ponownego cytowania tego samego składu autorskiego, edytor tekstu umieszcza myślnik w następnym rekordzie w miejscu przeznaczonym na skład autorski.

1. **Planck, Max.** Entropie und Temperatur strahlender Wärme. *Annalen der Physik*. 1900, Vol. 306, 4, pp. 719-737.
2. **Maeno, Y, et al., et al.** Superconductivity in a layered perovskite without copper. *Nature*. 1994, Vol. 372, pp. 532-534.
3. **Lichtenberg, F.** The story of Sr₂RuO₄. *Progress in Solid State Chemistry*. 2002, Vol. 30, pp. 103-131.
4. **Walz, L and Lichtenberg, F.** Refinement of the Structure of Sr₂RuO₄ with 100 and 295 K X-ray Data. *Acta Crystallographica*. 1993, Vol. C49, pp. 1268-1270.
5. **Rice, T M and Sigrist, M.** Sr₂RuO₄: an electronic analogue of 3-He. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1995, Vol. 7, pp. L643-L648.
6. **Mackenzie, Andrew Peter and Maeno, Yoshiteru.** The superconductivity of Sr₂RuO₄ and the physics of spin-triplet pairing. *Reviews of Modern Physics*. April 2003, Vol. 75, pp. 657-712.
7. **Oguchi, Tamio.** Electronic band structure of the superconductor Sr₂RuO₄. *Physical Review B*. 1995, Vol. 51, 2, pp. 1385–1388.
8. **Bednorz, J G and Muller, K A.** Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter (now called :The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems)*. 1986, Vol. 64, 2, pp. 189-193.
9. **Honerkamp, Carsten and Sigrist, Manfred.** Andreev Reflection in Unitary and Non-Unitary Triplet States. *Journal of Low Temperature Physics*. 1998, Vol. 111, 5/6, pp. 895-915.
10. **Luke, G M, et al., et al.** Time-reversal symmetry-breaking superconductivity in Sr₂RuO₄. *Nature*. 6 August 1998, Vol. 394, pp. 558-561.

11. **Sato, Masatoshi and Kohmoto, Mahito.** <http://arxiv.org/>. *arXiv:cond-mat/0003046v1 [cond-mat.supr-con]*. [Online] Mechanism of spin-triplet superconductivity in Sr₂RuO₄, 3 March 2000.
12. **Litak, G, et al., et al.** <http://arxiv.org/>. *arXiv:cond-mat/0203601v1 [cond-mat.supr-con]*. [Online] P-wave Pairing in Superconducting Sr₂RuO₄, 28 March 2002.
13. **Wysokinski, Karol, et al., et al.** <http://arxiv.org/>. *arXiv:cond-mat/0211199v1 [cond-mat.supr-con]*. [Online] Spin triplet superconductivity in Sr₂RuO₄, 11 November 2002.
14. **Hasegawa, Yasumasa, Machida, Kazushige and Ozaki, Masa-aki.** Spin-Triplet Superconductivity with Line Nodes in Sr₂RuO₄. *Journal of the Physical Society of Japan*. February 2000, Vol. 69, 2, pp. 336-339.
15. **Sigrist, Manfred and Monien, Hartmut.** <http://arxiv.org/>. *arXiv:cond-mat/0102464v1 [cond-mat.str-el]*. [Online] Phenomenological theory of the 3 Kelvin phase in Sr₂RuO₄, 26 February 2001.
16. **Stefanakis, N.** Charge current in ferromagnet-superconductor junction with pairing state of broken time-reversal symmetry. *Physical Review B, Condensed Matter*. 2001(b), Vol. 64, 24.
17. —. Charge current in ferromagnet-triplet superconductor junctions. *Journal of Physics, Condensed Matter*. April 2001(a), Tom 13, strony 3643-3654.
18. **Andreev, Alexander F.** Thermal conductivity of the intermediate state of superconductors. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 46, 1823 (1964) [*Sov. Phys. JETP* 19, 1228 (1964)].
19. **Blonder, G E, Tinkham, M and Klapwijk, T M.** Transition from metallic to tunneling regimes in superconducting microconstrictions: Excess current, charge imbalance, and supercurrent conversion. *Physical Review B*. 1982, Vol. 25, 7, pp. 4515-4532.
20. **Wojciechowski, Ryszard J, Kowalewski, Leon and Wojtus, Piotr.** Tunneling current in ferromagnetic metal - odd parity superconductor junction. *Physica Status Solidi B*. 2003, Vol. 236, 2, pp. 392-395.
21. **Kowalewski, Leon, Wojciechowski, Ryszard J and Wojtus, Piotr.** Andreev reflection at ferromagnetic metal - triplet superconductor junction. *Physica Status Solidi B*. 2006, Vol. 243, 1, pp. 112-115.
22. —. Resonance Tunneling in Ferromagnet - Triplet Superconductors Junctions. *Acta Physica Polonica A*. 2007, Vol. 111, 5, pp. 683-691.
23. **Gieworkian, R G and Szepiel, W W.** *Fizyka*. Warszawa : Państwowe Wydawnictwa Naukowe, 1975.

24. **Drude, P.** Zur Elektronentheorie der Metalle. *Annalen der Physik*. 1900, Vol. 306, 3, pp. 566–613.
25. **Sommerfeld, A.** Zur Elektronentheorie der Metalle; II. Teil. Galvanomagnetische und thermomagnetische Effecte. *Annalen der Physik*. 1900, Vol. 308, 11, pp. 369–402.
26. **Sommerfeld, A and Bethe , H.** Elektronentheorie der Metalle. [ed.] H Geiger and K Scheel. *Handbuch der Physik*. 1993, Vol. 24, 2, pp. 333–622.
27. **Onnes, H K.** The resistance of pure mercury at helium temperatures. *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden*. 12, 1911.
28. **Sarangi, S, et al., et al.** <http://arxiv.org>. <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0506426v2>. [Online] Experimental Evidence for Zero DC Resistance of Superconductors, Aug 2005.
29. **Cyrot, Michel and Pavuna, Davor.** *Introduction to Superconductivity and High-Tc Materials*. Singapore : Word Scientific, 1992. ISBN 13 978-981-02-0144.
30. **Meissner, W and Ochsenfeld, R.** Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*. 1933, Vol. 21, 44, pp. 787-788.
31. **Kittel, Charles.** *Wstęp do fizyki ciała stałego*. Warszawa : s.n., 1999. ISBN 83-01-12706-6.
32. **Abrikosow, Aleksiej A.** *Type II superconductors and the vortex lattice*. Stockholm : s.n., 8 December 2003. Wykład noblowski.
33. **Abrikosow, A A.** *Dokł. Akad. Nauk SSSR*. 1952, Vol. 86, p. 489.
34. **Bardeen, J, Cooper, L N and Schrieffer, J R.** Theory of Superconductivity. *Physical Review*. 1 December 1957, Vol. 108, 5, pp. 1175-1204.
35. **Cooper, L N.** Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas. *Physical Review*. 15 November 1956, Vol. 104, 4.
36. **Maxwell, E.** Isotope Effect in the Superconductivity of Mercury. *Physical Review*. 1950, Vol. 78, p. 477.
37. **Swihart , James C.** Isotope Effect in the Bardeen-Cooper-Schrieffer and Bogoliubov Theories of Superconductivity. *Physical Review*. 1959, Vol. 116, 1, p. 45.
38. **Garland, James W.** Isotope Effect in Superconductivity. *Physical Review Letters*. 1963, Vol. 11, 3, pp. 114-119.
39. **Batlogg, B, et al., et al.** Nonzero Isotope Effect in La_{1.85}Sr_{0.15}CuO₄. *Physical Review Letters*. 1987, Vol. 59, 8, p. 912.

40. **Faltens, Tanya A, et al., et al.** Observation of an Oxygen Isotope Shift in the Superconducting Transition Temperature of $\text{La}_{1.85}\text{Sr}_{0.15}\text{CuO}_4$. *Physical Review Letter*. 1987, Vol. 59, 8, p. 915.
41. **Bourne, L C, et al., et al.** Search for Isotope Effect in Superconducting Y-Ba-Cu-O. *Physical Review Letters*. 1987, Vol. 58, 22, p. 2337.
42. **Stritzker, B and Buckel, W.** Superconductivity in the Palladium-Hydrogen and the Palladium-Deuterium Systems. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*. 1972, Vol. 257, 1, pp. 1-8.
43. **Hertel, P.** Superconductivity in PdH, PdD and PdAgD Systems. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*. 1974, Vol. 268, 2, pp. 111-115.
44. **Gonczarek, Ryszard and Gładysiewicz-Kudrawiec, Marta.** *Scenariusz van Hove'a w nadprzewodnictwie wysokotemperaturowym*. Wrocław : Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, 2004. p. 160. 8370858368, 9788370858360.
45. **Ketterson, John B and Song, S N.** *Superconductivity*. s.l. : Cambridge University Press, 1999. ISBN 0-521-56562-6.
46. **Landau, L D and Ginzburg, V L.** *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 1950, Vol. 20, p. 1064. an English translation is available in *Men of Physics: L.D. Landau, ed. D. ter Haar, Vol. 1* (Pergamon, Oxford, 1965), p. 138.
47. **Sigrist, Manfred.** Introduction to Unconventional Superconductivity. *Boulder School for Condensed Matter and Materials Physics*. [Online] <http://boulderschool.yale.edu/sites/default/files/files/Introduction-to-Unconventional-Superconductivity.pdf>.
48. **Bardeen, J, Cooper, L N and Schrieffer, J R.** Microscopic Theory of Superconductivity. *Physical Review*. 1957, Vol. 106, 1, pp. 162-164.
49. **Kaplan, I G, Navarro, O and Sanchez, J A.** Statistical properties of the Cooper pair operators. *Physica Status Solidi b*. 2005, Vol. 242, 9, pp. 1973-1796.
50. **Osheroff, D D, Richardson, R C and Lee, D M.** Evidence for a New Phase of Solid He3. *Physical Review Letters*. 3 April 1972, Vol. 28, p. 885.
51. **Fröhlich, H.** Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature. *Physical Review*. 1950, Vol. 79, 5, pp. 845-856.
52. —. Isotope Effect in Superconductivity. *Proceedings of the Physical Society. Section A*. 1950, Vol. 63, p. 778.

53. **Anderson, P W.** Plasmons, Gauge Invariance, and Mass. *Physical Review*. 1963, Vol. 130, 1, pp. 439–442.
54. **Englert, F and Brout, R.** Broken Symmetry and the Mass of Gauge Vector Mesons. *Physical Review Letters*. 1964, Vol. 13, 9, pp. 321–323.
55. **Higgs, P W.** Broken symmetries, massless particles and gauge fields. *Physics Letters*. 1964, Vol. 12, 2, pp. 132-133.
56. **Sigrist, Manfred.** Symmetry aspects of Superconductivity. *Boulder School for Condensed Matter and Materials Physics*. [Online] <http://boulderschool.yale.edu/2014/boulder-school-2014-lecture-notes>.
57. **Bogoliubov, N N, Tolmachev, V V and Shirkov, D V.** *A New Method in the Theory of Superconductivity*. New York : s.n., 1959.
58. **Piętka, Maciej.** *Ruchliwość elektronów w półprzewodniku z domieszkowaniem typu delta w obecności napięcia bramkowego*. Instytut Fizyki Teoretycznej, Uniwersytet Warszawski. Warszawa : s.n., 2001. Praca doktorska.
59. **Migdal, Arkady B.** Interaction between electrons and the lattice vibrations in a normal metal. *Sov. Phys. JETP*. 1958, Vol. 7(6), pp. 996-1001.
60. **Wojciechowski, Ryszard J.** Migdal's theorem in heavy fermion systems. *Physica B: Condensed Matter*. Jan 1999, Vols. 259–261, pp. 498–500.
61. **Shrivastava, Keshav N.** *Superconductivity Elementary Topics*. Singapore : World Scientific Publishing Co, 2000. ISBN 981-02-4451-7.
62. **Goll, Gernot.** *Unconventional Superconductors. Experimental Investigation of the Order-Parameter Symmetry*. s.l.: Springer, 2006. ISBN-10 3-540-28985-2 Springer Berlin Heidelberg New York.
63. **Eliashberg, G M.** Interaction between electrons and lattice vibration in a superconductor. *Soviet Physics JETP*. September 1960, Vol. 11, 3.
64. **Anderson, P W and Morel, P.** Generalized Bardeen - Cooper - Schrieffer states and aligned orbital angular momentum in the proposed low temperature phase of liquid He-3. *Physical Review Letters*. 1960, Vol. 5, 4, pp. 136-138.
65. **Anderson , P W and Morel , P.** Generalized Bardeen-Cooper-Schrieffer States and the Proposed Low-Temperature Phase of Liquid He-3. *Physical Review*. 1961, Vol. 123, 6, pp. 1911–1934.
66. **Balian , R and Werthamer , N R.** Superconductivity with Pairs in a Relative p Wave. *Physical Review*. 1963, Vol. 131, 4, p. 1553.

67. **Leggett, Anthony J.** A theoretical description of the new phases of liquid He-3. *Reviews of Modern Physics*. April 1975, Vol. 47, 2.
68. —. Interpretation of Recent Results on He-3 below 3 mK: A New Liquid Phase? *Physical Review Letters*. October 1972, Vol. 29, 18.
69. **Wheatley John C.** Experimental properties of superfluid He-3. *Reviews of Modern Physics*. 1975, Tom 47, 2, strony 415-470.
70. **Steglich, F, et al., et al.** Superconductivity in the Presence of Strong Pauli Paramagnetism: CeCu₂Si₂. *Physical Review Letters*. 1979, Vol. 43, 25, p. 1892.
71. **Lang, M, et al., et al.** Cooperative Effects in CeCu₂Si₂. *Physica Scripta*. 1991, Vol. T39, pp. 135-139.
72. **Hegger, H, et al., et al.** Pressure-Induced Superconductivity in Quasi-2D CeRhIn₅. *Physical Review Letters*. 2000, Vol. 84, 21.
73. **Bauer, E, et al., et al.** Heavy Fermion Superconductivity and Magnetic Order in Noncentrosymmetric CePt₃Si. *Physical Review Letters*. 2004, Vol. 92, 2, p. 027003.
74. **Schilling, A, et al., et al.** Superconductivity above 130 K in the Hg–Ba–Ca–Cu–O system. *Nature*. 1993, Vol. 363, pp. 56-58.
75. **Saxena, S S, et al., et al.** Superconductivity on the border of itinerant-electron ferromagnetism in UGe₂. *Nature*. 10 August 2000, Vol. 406, p. 587.
76. **Hata, Y, et al., et al.** Crystal structure and superconductivity of FeSr₂YCu₂O_{6+y} superconductor. *Physica C*. 2010, Vol. 470, pp. 592-593.
77. **Ramirez, A P.** C₆₀ and its superconductivity. *Supercond. Rev.* 1, 1-101 (1994). 1994, Vol. 1, p. 1.
78. **Domański, T.** Nadprzewodniki: nowe fakty i teorie. *Postepy Fizyki*. 2006, Vol. 57, 3.
79. **Movshovich, R, et al., et al.** Superconductivity in heavy-fermion CeRh₂Si₂. *Physical Review B*. 1996, Vol. 53, 13, pp. 8241–8244.
80. **Mathur, N D, et al., et al.** Magnetically mediated superconductivity in heavy fermion compounds. *Nature*. 2 July 1998, Vol. 394, p. 39.
81. **Ott, H R, et al., et al.** UBe-13: An Unconventional Actinide Superconductor. *Physical Review Letters*. 1983, Vol. 50, 20, pp. 1595–1598.
82. **Stewart, G R, et al., et al.** Possibility of Coexistence of Bulk Superconductivity and Spin Fluctuations in UPt₃. *Physical Review Letters*. 1984, Vol. 52, 8, pp. 679–682.

83. **Aoki, D, et al., et al.** Coexistence of superconductivity and ferromagnetism in URhGe. *Nature*. 11 October 2001, Vol. 413, pp. 613-616.
84. **Fay, D and Appel, J.** Coexistence of p-state superconductivity and itinerant ferromagnetism. *Physical Review B*. 1980, Vol. 22, 7, pp. 3173-3182.
85. **Kopnin, N B.** *Theory of Superconductivity*. Fall : Aalto University, School of Science and Technology, Department of Applied Physics., 2010. Low Temperature Laboratory, kopnin@boojum.hut.fi. Tfy-3.4801 (6 cr.) P, I-II.
86. **Tsuei , C C and Kirtley, J R.** Pairing symmetry in cuprate superconductors. *Reviews of Modern Physics*. 2000, Vol. 72, 4, pp. 969–1016.
87. **Maeno, Y, et al., et al.** Two-Dimensional Fermi Liquid Behavior of the Superconductor Sr₂RuO₄. *Journal of the Japan Physical Society*. 1997, Vol. 66, 5, pp. 1405-1408.
88. **Maeno, Y.** Electronic states of the superconductor Sr₂RuO₄. *Physica C*. 1997, Vols. 282-287, Part 1, pp. 206-209 .
89. **Sigrist, M, et al., et al.** Sr₂RuO₄ - A realization of spin triplet pairing? *Physica C*. 1997, Vols. 282-287, Part 1, pp. 214-217 .
90. **Matsuda, Y, Izawa, K and Vekhter, I.** Nodal structure of unconventional superconductors probed by angle resolved thermal transport measurements. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2006, Vol. 18, pp. R705-R752.
91. **Sigrist, Manfred.** *Introduction to Unconventional Superconductivity*. Theoretische Physik ETH-Honggerberg. Zurich, Switzerland : s.n.
92. **Sigrist, Manfred and Ueda , Kazuo .** Phenomenological theory of unconventional superconductivity. *Reviews of Modern Physics*. 1991, Vol. 63, 2, pp. 239-311.
93. **Anderson, P W.** Theory of dirty superconductors. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1959, Vol. 11, 1-2, pp. 26-30.
94. —. Structure of "triplet" superconducting energy gaps. *Physical Review B*. 1984, Vol. 30, 7, pp. 4000-4002.
95. **Anderson, P W and Brinkman, W F.** Anisotropic Superfluidity in He-3: A Possible Interpretation of Its Stability as a Spin-Fluctuation Effect. *Physical Review Letters*. 1973, Vol. 30, 20, p. 1108.
96. **Kambara, H, et al., et al.** Chiral superconducting phase transition in 3-K phase of Sr₂RuO₄. *Physica C*. 2009, Vol. 469, pp. 1030-1033.
97. *Tutorial on electronic Transport*. **Nygaard, Jesper**. Gothenburg, Sweden : Göteborg University, Chalmers University of Technology and University College of Borås, June 26 - July

1, 2005. NT05: Sixth International Conference on the Science and Application of Nanotubes. <http://nanotube.msu.edu/nt05/abstracts/NT05tutor-Nygard.pdf>.

98. **Galperin, Yuri M.** *Introduction to Modern Solid State Physics*. Oslo : University of Oslo, Department of Physics, P.O. Box 1048 Blindern, 0316 Oslo. FYS 448, <http://folk.uio.no/yurig/>.

99. **Cadden-Zimansky, P, Jiang, Z and Chandrasekhar, V.** Charge imbalance, crossed andreev reflection and elastic co-tunelling in ferromagnet / superconductor / normal-metal structures. *New Journal of Physics*. 2007, Vol. 9, p. 116.

100. **Landau, L D and Lifshitz, E M.** *Quantum Mechanics*. Oxford : Pergamon, 1977.

101. **deGennes, P G.** *Superconductivity of Metals and Alloys*. New York : Benjamin, 1966.

102. **Tsuneto, T.** *Superconductivity and Superfluidity*. Cambridge : Cambridge University Press, 2005. ISBN-13 978-0-521-57073-2.

103. **Krzyszczak, Jaromir.** *Dynamika par Coopera w układach fermionów z oddziaływaniem zależnym od czasu*. Wydział Matematyki, Fizyki i Informatyki, Uniwersytet Marii Curie - Skłodowskiej w Lublinie. Lublin : s.n., 2006. Praca magisterska.

104. **Timm, Carsten.** *Theory of Superconductivity*. Dresden : TU Dresden, Institute of Theoretical Physics, 2011. http://www.physik.tu-dresden.de/~timm/personal/teaching/thsup_w11/Theory_of_Superconductivity.pdf.

105. **Beenakker, C W. J.** Specular Andreev Reflection in Graphene. *Physical Review Letters*. 2006, Vol. 97, p. 067007.

106. **Bruder, Ch.** Andreev scattering in anisotropic superconductors. *Physical Review B*. 1990, Vol. 41, 7, pp. 4017-4032.

107. **Ruddlesden, S N and Popper, P.** New compounds of the K₂NiF₄ type. *Acta Crystallographica*. 1957, Vol. 10, pp. 538-539.

108. —. The compound Sr₃Ti₂O₇ and its structure. *Acta Crystallographica*. 1958, Vol. 11, pp. 54-55.

109. **Müller-Buschbaum, Hk and Wilkens, J.** Ein Beitrag über Sr₂RuO₄ und Sr₃Ru₂O₇ Zur Oktaederstreckung von M⁴⁺ in K₂NiF₄- und Sr₃Ti₂O₇-Typ-Verbindungen. *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 1990, Vol. 591, pp. 161-166.

110. **Singh, David J.** Relationship of Sr₂RuO₄ to the superconducting layered cuprates. *Physical Review B*. 1995, Vol. 52, 2, pp. 1358–1361.

111. **Hase, Izumi and Nishihara, Yoshikazu.** Electronic structure of Sr₂RuO₄ and Sr₂RhO₄. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1996, Vol. 65, 12, pp. 3957-3963.

112. **Mackenzie, A P and Julian, S R.** *The second conference on Physical Phenomena at High Magnetic Fields.* Singapore : Word Scientific, 1996. p. 537.
113. **Bergemann, C, et al., et al.** Quasi-two-dimensional Fermi liquid properties of the unconventional superconductor Sr₂RuO₄. *Advances in Physics.* 2003, Vol. 52, 7, pp. 639-725.
114. **Bergemann, C, et al., et al.** Detailed Topography of the Fermi Surface of Sr₂RuO₄. *Physical Review Letters.* 2000, Vol. 84, 12, pp. 2662-2665.
115. **Shoenberg, D.** *Magnetic Oscillation in Metals.* Cambridge, England : Cambridge University Press, 1984.
116. **Mackenzie, A P, et al., et al.** The Fermi Surface Topography of Sr₂RuO₄. *Journal of the Physical Society of Japan.* 1998, Vol. 67, 2, pp. 385-388.
117. **Bergmann, C, et al., et al.** Normal state of the unconventional superconductor Sr₂RuO₄. *Physica B.* 2001, Vols. 294-295, pp. 371-374.
118. **McMullan, G J, Ray, M P and Needs, R J.** Comparison of the calculated and observed Fermi surfaces of Sr₂RuO₄. *Physica B.* 1996, Vols. 223-224, 1-4, pp. 529-531.
119. **Lichtenberg, F, et al., et al.** Sr₂RuO₄: A metallic substrate for the epitaxial growth of YBa₂Cu₃O₇. *Applied Physics Letters.* 1992, Vol. 60, 9, pp. 1138-1140.
120. **Hussey, N E, et al., et al.** Normal-state magnetoresistance of Sr₂RuO₄. *Physical Review B.* 1998, Vol. 57, 9, pp. 5505-5511.
121. **Schofield, A J.** Non-Fermi liquids. *Contemporary Physics.* 1999, Vol. 40, 2, pp. 95-112.
122. **Katsufuji, T, Kasai, M and Tokura, Y.** In-Plane and Out-of-Plane Optical Spectra of Sr₂RuO₄. *Physical Review Letters.* 1996, Vol. 76, 1, pp. 126-129.
123. **Neumeier, J J, et al., et al.** Magnetic, thermal, transport, and structural properties of Sr₂RuO_{4+d}: Enhanced charge-carrier mass in a nearly metallic oxide. *Physical Review B.* 1994, Vol. 50, 24, pp. 17910-17916.
124. **Carter, S A, et al., et al.** Mechanism for the metal-insulator transition in Sr₂Ir_{1-x}Ru_xO₄. *Physical Review B.* 1995, Vol. 51, 23, pp. 17184-17187.
125. **Maeno, Y, et al., et al.** Evaluation of Spin-Triplet superconductivity in Sr₂RuO₄. *Journal of the Physical Society of Japan.* 2012, Vol. 81, 1, p. 011009.
126. **Sidis, Y, et al., et al.** Evidence for Incommensurate Spin Fluctuations in Sr₂RuO₄. *Physical Review Letters.* 1999, Vol. 83, 16, pp. 3320-3323.

127. **Imai, T, et al., et al.** 17 O NMR Evidence for Orbital Dependent Ferromagnetic Correlations in Sr₂RuO₄. *Physical Review Letters*. 1998, Vol. 81, 14, pp. 3006-3009.
128. **Mazin, I I and Singh, D J.** Competitions in Layered Ruthenates: Ferromagnetism versus Antiferromagnetism and Triplet versus Singlet Pairing. *Physical Review Letters*. 1999, Vol. 82, 21, pp. 4324-4327.
129. **Mukuda, H, et al., et al.** Spin fluctuations in the ruthenium oxides RuO₂, SrRuO₃, CaRuO₃, and Sr₂RuO₄ probed by Ru NMR. *Physical Review B*. 1999, Vol. 60, 17, pp. 12279-12285.
130. **Mukuda, Hidekazu, et al., et al.** Novel Character of Spin Fluctuations in Spin-Triplet Superconductor Sr₂RuO₄: 17 O-NMR Study. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1998, Vol. 67, 11, pp. 3945-3951.
131. **Servant, F, et al., et al.** Two-dimensional spin fluctuation in Sr₂RuO₄. *Solid State Communications*. 2000, Vol. 116, 9, pp. 489-493.
132. **Hashimoto, H.** *Master Thesis*. s.l. : University of Hiroshima, 1995.
133. **Baskaran, G.** Why is Sr₂RuO₄ not a high T_c superconductor? Electron correlation, Hund's coupling and p-wave instability. *Physica B*. 1996, Vols. 223-224, 1-4, pp. 490-495.
134. **Akima, Takashi, Nishizaki, Shuji and Maeno, Yoshiteru.** Intrinsic Superconducting Parameters of Sr₂RuO₄. *Journal of the Physical Society of Japan*. 1999, Vol. 68, 2, pp. 694-695.
135. **NishiZaki, Shuji, Maeno, Yoshiteru and Mao, Zhiqiang.** Changes in the Superconducting State of Sr₂RuO₄ under Magnetic Fields Probed by Specific Heat. *Journal of the Physical Society of Japan*. 2000, Vol. 69, 2, pp. 572-578.
136. —. Effect of Impurities on the Specific Heat of the Spin-Triplet Superconductor Sr₂RuO₄. *Journal of Low Temperature Physics*. 1999, Vol. 117, 5-6, pp. 1581-1585.
137. **Langhammer, C, et al., et al.** Low-temperature specific heat of Sr₂RuO₄. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*. 2002, Vol. 26, 4, pp. 413-416.
138. **Lounasmaa, O V.** *Nuclear Specific Heats in Metals and Alloys, in Hyperfine Interactions*. New York : Academic Press, 1967. OSTI 4571958.
139. **Ishida, K, et al., et al.** Spin-triplet superconductivity in Sr₂RuO₄ identified by 17O Knight shift. *Nature*. 1998, Vol. 396, pp. 658-660.
140. **Duffy, J A, et al., et al.** Polarized-Neutron Scattering Study of the Cooper-Pair Moment in Sr₂RuO₄. *Physical Review Letters*. 2000, Vol. 85, 25, p. 5412.

141. **Kashiwaya, Satoshi and Tanaka, Yukio.** Tunnelling effects on surface bound states in unconventional superconductors. [ed.] IOP Publishing Ltd. *Reports on Progress in Physics*. 2000, Vol. 63, pp. 1641-1724. <http://iopscience.iop.org/0034-4885/63/10/202>.
142. **Annett, J F, et al., et al.** Gap nodes and time reversal symmetry breaking in strontium ruthenate. *The European Physical Journal B*. 2003, Vol. 36, pp. 301-312.
143. **Zhitomirsky, M E and Rice, M.** Interband Proximity Effect and Nodes of Superconducting Gap in Sr₂RuO₄. *Physical Review Letters*. 2001, Vol. 87, 5, p. 057001.
144. **Kashiwaya, S, et al., et al.** Spin current in ferromagnet-insulator-superconductor junctions. *Physical Review B*. August 1999, Vol. 60, 5, p. 3572.
145. **Miyake, K and Narikiyo, O.** Model for Unconventional Superconductivity of Sr₂RuO₄: Effect of Impurity Scattering on Time-Reversal Breaking Triplet Pairing with a Tiny Gap. *Physical Review Letters*. 1999, Vol. 83, 7, pp. 1423-1426.
146. **Dahm, Thomas, Won, Hyekyung and Maki, Kazumi.** <http://arxiv.org>. *arXiv:cond-mat/0006301v1*. [Online] Models of Superconductivity in Sr₂RuO₄., 20 Jun 2000.
147. **Veenstra, C N, et al., et al.** Spin-Orbital Entanglement and the Breakdown of Singlets and Triplets in Sr₂RuO₄ Revealed by Spin- and Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. *Physical Review Letters*. 2014, Vol. 112, p. 127002.
148. **Kashiwaya, Satoshi, et al., et al.** Theory for tunneling spectroscopy of anisotropic superconductors. *Physical Review B*. 1996, Vol. 53, 5, pp. 2667-2676.
149. **Tanaka, Y and Kashiwaya, S.** Anomalous charge transport in triplet superconductor junction. *Physical Review B*. 2004, Vol. 70, 1, p. 12507.
150. **Tanaka, Yukio and Kashiwaya, Satoshi.** Theory of Tunneling Spectroscopy of d-Wave Superconductors. *Physical Review Letters*. 1995, Vol. 74, 17, pp. 3451-3454.
151. **Ishida, K, et al., et al.** Anisotropic pairing in superconducting Sr₂RuO₄: Ru NMR and NQR studies. *Physics Review B*. 1997, Vol. 56, 2, pp. R505-R508.