

UNIVERSITATEA “BABEȘ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA

FACULTATEA DE FIZICĂ

SPECIALIZAREA FIZICĂ

**LUCRARE DE LICENȚĂ**

Coordonator științific

Prof. Dr. Ioan Grosu

Absolvent

Mihai-Sebastian Ienciu

2022

UNIVERSITATEA “BABEȘ-BOLYAI” CLUJ-NAPOCA

FACULTATEA DE FIZICĂ

SPECIALIZAREA FIZICĂ

**LUCRARE DE LICENȚĂ**

**SUPRACONDUCTIBILITATE ÎN DICALCOGENIDE**

Coordonator științific

Prof. Dr. Ioan Grosu

Absolvent

Mihai-Sebastian Ienciu

2022

# Cuprins

Introducere.....	4
1. Noțiuni teoretice.....	5
1.1. Supraconductibilitatea. Efectul Meissner.....	5
1.2. Ecuațiile London.....	6
1.3. Lungimea de coerență.....	7
1.4. Clasificarea supraconductorilor.....	7
2. Teoria Bardeen-Cooper-Schrieffer.....	11
2.1. Perechile Cooper.....	11
2.2. Modelarea teoretică.....	13
2.3. Verificările teoriei.....	18
3. Teoria în dicalcogenide cu metale de tranziție.....	24
3.1. Charge Density Wave (CDW). Tranziții Peierls.....	24
3.2. Modelul teoretic al supraconductibilității în dicalcogenide cu metale de tranziție.....	28
3.3. Rolul unui strat izolator în modificarea constantei de cuplaj $g$ .....	39
4. Concluzii.....	45
Bibliografie.....	46

## Introducere

Studiul materialelor supraconductoare a început odată cu descoperirea fenomenului de către H. Kamerlingh-Onnes în anul 1911, când acesta efectua studii la temperaturi joase asupra diferitelor materiale, printre care și Mercur. Acesta a observat căderea bruscă a rezistenței către 0 sub o anumită temperatură – temperatura critică. De atunci și până în zilele noastre s-au găsit noi clase de materiale care au această proprietate și diferite efecte, cum ar fi efectul Meissner sau Josephson, iar pe partea teoretică există varii teorii și modele care să explice apariția supraconductibilității .

În cadrul acestei lucrări vom parcurge câteva repere importante în istoria fizicii supraconductorilor și vom vedea câteva mărimi definitorii pentru aceste materiale. În continuare vom discuta despre cea mai de succes teorie microscopică a supraconductibilității și anume, teoria elaborată de J. Bardeen, L. Cooper și R. Schrieffer în 1957. Teoria BCS (așa cum este abreviată convențional) descrie excelent fenomenul de supraconductibilitate în anumite materiale (supraconductorii BCS), aducându-le autorilor Premiul Nobel în Fizică, dar nu este o teorie perfectă. Vom vedea în al doilea capitol modurile în care această teorie a fost verificată de-a lungul timpului și vom discuta aspectele unde are neajunsuri. Aceste discuții, cuprinse în primele două capitole, deservește ca sprijin teoretic pentru transpunerea și dezvoltarea problemei supraconductibilității la dicalcogenidele cu metale de tranziție. Aceasta este o clasă de materiale semiconductoare (care prezintă totuși supraconductibilitate), iar pentru studiul lor vom folosi modelul propus de B. Uchoa, G.G. Cabrera și A.H. Castro Neto.

Pe baza respectivului model vom căuta să modelăm în al treilea capitol variația câtorva mărimi importante în situația în care alipim un strat izolator de dicalcogenida noastră, folosindu-ne de o schimbare a frecvenței Debye pentru undele care se va propaga în volumul materialului. Vom vedea la final ce rezultate interesante vor rezulta din această abordare fenomenologică a problemei, mai ales la nivelul temperaturii critice.

# 1. Noțiuni teoretice

Supraconductibilitatea este fenomenul prin care un material prezintă rezistență zero la înaintarea unui curent electric. Materialele aflate într-o astfel de stare sunt numite materiale supraconductoare, sau, mai simplu spus - supraconductori.

Descoperirea acestui fenomen a avut loc în anul 1911<sup>[11]</sup>, când Heike Kamerlingh-Onnes, împreună cu un număr de studenți studiau comportarea materialelor la temperaturi joase. Unul dintre studenți a observat că la temperaturi sub aproximativ 4.15 K rezistența scade brusc la 0. Kamerlingh-Onnes a creat un experiment în care menținea un fir de mercur închis la temperatura joasă. Curentul rămâne în circuit chiar și după îndepărtarea sursei pentru un timp îndelungat. Acest fenomen nu a putut fi înțeles pentru mai mulți ani deoarece lipsea baza necesară construirii unei teorii concludente și anume, mecanica cuantică dezvoltată de Heisenberg și Schrödinger.

Pentru a dezvolta acest subiect este nevoie să discutăm despre anumite noțiuni teoretice care ne vor ajuta să înțelegem mai profund acest fenomen.

## 1.1. Supraconductibilitatea. Efectul Meissner.

Principala caracteristică de interes când vine vorba de supraconductori este scăderea foarte rapidă a rezistenței materialului către 0 atunci când se trece de o anumită valoare a temperaturii numită valoare critică și pe care de acum înainte o vom menționa folosind notația convențională  $T_C$ . Ceea ce Kamerlingh-Onnes a observat a fost trecerea mercurului în stare supraconductoare datorită scăderii temperaturii sub temperatura critică a elementului, care este în jur de 4 K. Însă, această condiție nu este suficientă pentru a menține un material în starea supraconductoare (condiția menționată fiind  $T < T_C$ ), lucru care a fost demonstrat de Walther Meissner și Robert Ochsenfeld în anul 1933.

Cei doi (Meissner și Ochsenfeld) au arătat că, la trecerea unui material din stare normală în stare supraconductoare, materialul devine diamagnet perfect. Au observat că, pe lângă faptul că un câmp magnetic nu poate pătrunde într-un material supraconductor, orice câmp magnetic interior este expulzat. Acest fapt nu poate fi explicat dacă noi considerăm că singura necesitate pentru a avea un supraconductor este ca temperatura sa să fie mai joasă decât temperatura critică, ceea ce înseamnă că există un anumit câmp critic (care de acum înainte va fi notat  $H_C$ ), iar valori ale unui câmp magnetic mai mari decât câmpul critic ar duce la distrugerea stării supraconductoare. Câmpul critic poate fi bine aproximat cu ajutorul următoarei relații :

$$H_C \approx H_0 \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_C} \right)^2 \right] \quad (1.1)$$

unde  $H_C$  reprezintă valoarea câmpului critic la temperatura  $T$ , iar  $H_0$  este valoarea câmpului critic pentru temperatura de zero absolut.

Mai există o a treia mărime care trebuie luată în calcul pentru a menține starea supraconductoare a unui material și anume densitatea de curent critică -  $J_C$ . Această urmează ca o consecință a existenței unei valori critice a câmpului magnetic. Dacă noi am crește intensitatea curentului printr-un supraconductor va crește și valoarea câmpului magnetic indus în vecinătate, iar dacă acesta ar trece de valoarea critică  $H_C$  starea supraconductoare dispăre.

Am menționat mai devreme că existența temperaturii critice nu poate explica efectul Meissner. Acest lucru poate fi demonstrat considerând o sarcină care se deplasează liber prin material. Folosind legea a doua a mecanicii newtoniene și ecuațiile lui Maxwell se poate arăta că un câmp magnetic în supraconductor ar trebui să fie constant în timp, pe când efectul Meissner ne condiționează ca valoarea câmpului să fie zero. Deci un material care se află la o temperatură inferioară celei critice nu este neapărat să fie supraconductor.

## 1.2. Ecuațiile London.

Pentru a obține ecuațiile găsite de frații London vom folosi modelul Drude al conductivității electrice. Astfel, folosind  $\tau$  pentru a nota timpul de relaxare și  $v$  pentru viteza de drift a electronilor, vom scrie următoarea relație :

$$m \frac{dv}{dt} = eE - \frac{mv}{\tau} \quad (1.2)$$

Într-un metal obișnuit, unde vom nota cu  $n$  densitatea de electroni pe unitatea de volum, putem scrie legea lui Ohm pentru densitatea de curent  $J = nev = \sigma E$ , unde  $\sigma$  este conductivitatea electrică. Dar, într-un supraconductor, conductivitatea perfectă denotă dispariția celui de al treilea termen din ecuația (1.2) (adică timpul de relaxare, care este în speță intervalul mediu între două ciocniri, tinde spre infinit). Acest lucru este valabil pentru o anumită densitate de electroni  $n_s$  și atunci ecuația (1.2) devine :

$$\frac{dJ_s}{dt} = \left( \frac{n_s e^2}{m} \right) E = \frac{E}{\Lambda} = \left( \frac{c^2}{4\pi\lambda^2} \right) E \quad (1.3)$$

unde, cu  $\lambda$  se notează adâncimea de penetrare, care este o mărime măsurabilă experimental. Aceasta este prima ecuație London. Prin prelucrarea relației (1.3) folosind ecuațiile lui Maxwell și identități ale operatorilor se ajunge la concluzia că un câmp electric este ecranat exponențial pe distanța  $\lambda$  în supraconductor, rezultat care implică și ecranarea pe aceeași distanță a unui câmp magnetic variabil în timp.

A doua ecuație London face referire la fenomenul menționat mai sus, arătând că ecranarea are loc și pentru câmpuri magnetice independente de timp, lucru necesar pentru o descriere corectă a efectului Meissner. Prin notarea cu  $\mathbf{h}$  a valorii microscopice a densității de flux magnetic vom putea scrie a doua ecuație :

$$\mathbf{h} = -c \operatorname{curl} (\mathbf{A} \mathbf{J}_s) \quad (1.4)$$

### 1.3. Lungimea de coerență.

Pe lângă adâncimea de penetrare despre care tocmai ce am discutat, mai există o altă mărime importantă care trebuie menționată – lungimea de coerență, notată cu  $\xi_0$ . Ecuațiile London sunt ecuații locale, legând densitatea de curent pentru un punct aflat în  $\mathbf{r}$  cu potențialul vector  $\mathbf{A}$  în același punct. Deviații între valorile teoretice așteptate pentru adâncimea de penetrare la zero absolut și cele experimentale l-au motivat pe Alfred Brian Pippard să introducă efecte non-locale, spunând că variația spațială a unor mărimi precum densitatea de electroni supraconductori nu se poate efectua pe distanțe arbitrar de mici, ci pe o lungime finită - lungimea de coerență. Doar electronii care se află cu o valoare de  $\sim k_B T_C$  în vecinătatea energiei Fermi pot participa în fenomenul de supraconductibilitate, ceea ce înseamnă că acei electroni vor avea un impuls  $\Delta p \approx \frac{k_B T_C}{v_F}$ , unde  $v_F$  este viteza Fermi<sup>[1]</sup>. Astfel, folosind principiul de incertitudine al lui Heisenberg, putem defini lungimea de coerență ca fiind :

$$\xi_0 = a \frac{\hbar v_F}{k_B T_C} \quad (1.5)$$

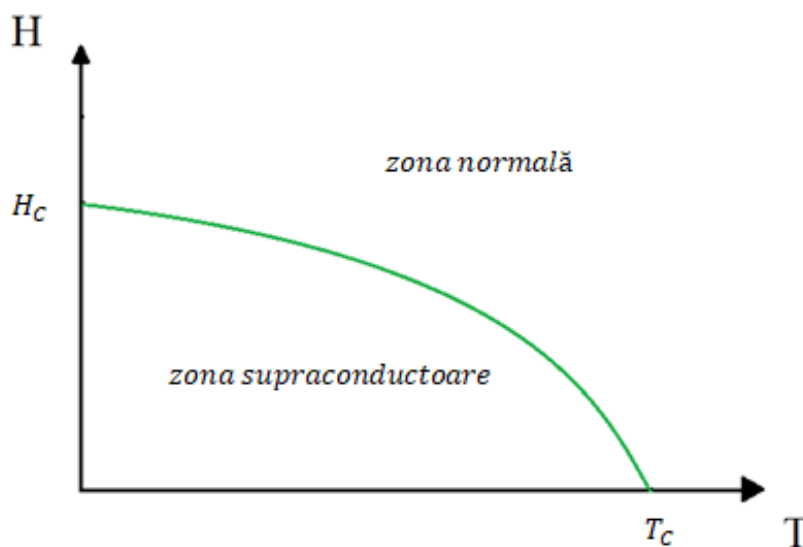
unde  $a$  este o constantă.

### 1.4. Clasificarea supraconductorilor.

Materialele supraconductoare sunt în principal împărțite în două categorii – de tip I și de tip II<sup>[12]</sup>. Această împărțire este datorată proprietăților magnetice diferite ale materialelor.

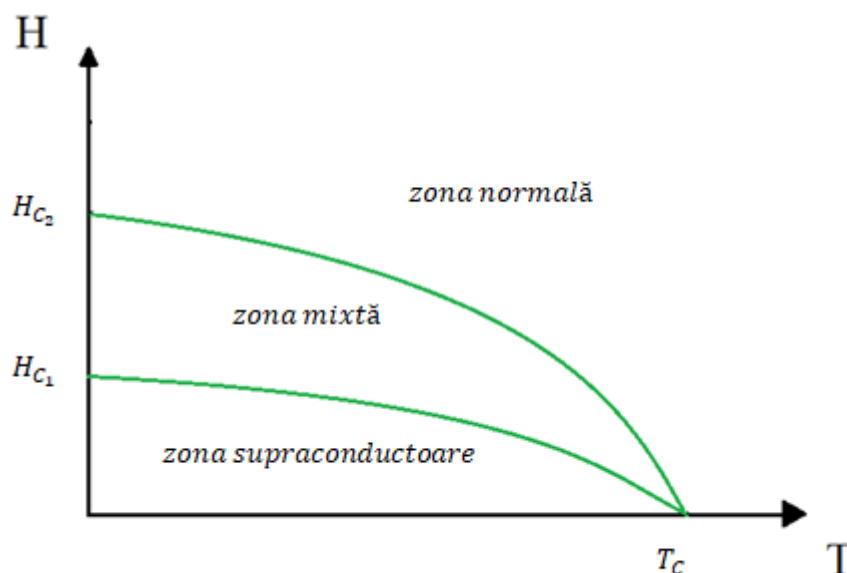
Pentru cei de tipul I, în momentul în care câmpul magnetic aplicat trece de valoarea critică  $H_C$ , supraconductorul trece în starea normală printr-o tranziție de fază de ordinul II. În general, metalele pure sunt supraconductori de tipul I, dar există și aliaje precum  $TaSi_2$ <sup>[10]</sup> care nu se încadrează în această clasificare.

Supraconductorii de tipul II prezintă un comportament mai complex. În loc de un unic câmp critic, pentru aceste materiale vom avea două valori ale câmpului magnetic – câmp critic inferior  $H_{C_1}$  și câmp critic superior  $H_{C_2}$ . Sub valoarea câmpului critic inferior avem un comportament asemănător cu un supraconductor de tipul I, iar peste valoarea câmpului critic superior materialul se comportă normal, însă, între valorile celor două câmpuri critice ( $H_{C_1} < H < H_{C_2}$ ) avem o stare mixtă unde fluxul de câmp magnetic penetrează parțial materialul. Această stare este caracterizată de formarea unor vortexuri de flux care se vor aranja de obicei în structuri periodice<sup>[13]</sup>. În jurul acestor vortexuri se va crea un curent electric care va ecrana restul materialului de câmpul magnetic. Valoarea câmpului critic depinde de temperatura la care se află și de temperatura critică, după cum am menționat într-un subcapitol anterior prin relația (1.1). Dependențele câmpului pentru un supraconductor de tip I și de tip II sunt prezentate grafic în figurile 1.1.a și 1.1.b.



**Fig. 1.1.a** Dependența câmpului critic de temperatură pentru un supraconductor de tip I.





**Fig. 1.1.b** Dependența câmpurilor critice de temperatură pentru un supraconductor de tip II.

Materialul aflat în stare mixtă va rămâne teoretic tot supraconductor, însă, trebuie menționat faptul că aceste vortexuri nu sunt fixe – ele se pot deplasa. Prin deplasarea lor se va disipa energie, ceea ce duce la creșterea temperaturii și eventual pierderea supraconductibilității. Fixarea lor se poate face prin introducerea de defecte în structură cristalină a materialului și este un domeniu de interes pentru a putea crea material cu o densitate de curent critică mare care să poată fi utilizate în aplicații.

Mai există și așa numiții supraconductori cu temperatură ridicată (în limba engleză *high-temperature superconductors*; îi vom nota pentru conveniență de acum înainte ca HTS). Această categorie cuprinde materialele care au o temperatură critică mai mare de 77 grade Kelvin<sup>[14]</sup>. Evident, datorită acestor temperaturi critice ridicate, acești compuși sunt de mare interes în ceea ce privește posibilele lor aplicații, studiul lor fiind o parte importantă a fizicii materialelor supraconductoare. Totuși, în cazul acestor supraconductori nu putem vorbi despre o teorie unică care să explice cum de aceste materiale au o temperatură critică atât de ridicată, fiind prezente mai multe teorii care încearcă să aducă explicații. Știm că la baza efectului se află tot o pereche formată din doi electroni, dar natura acestei perechi (despre care vom vorbi mai detaliat în capitolul 3) este încă un subiect dezbătut, chiar dacă experimentele par să favorizeze o împerechere de tip *d wave*<sup>[2]</sup>. Lawrence și Doniach<sup>[3]</sup> au fost printre primii care au venit cu un model care poate fi utilizat în studiul straturilor de dicalcogenide cu metale de tranziție (*transition metal dichalcogenides* sau pe scurt, TMD) unde priveau materialul supraconductor ca fiind o înșiruire de supraconductori bidimensionali și cuplați print intermediul efectului de

tunelare Josephson între straturi alăturate<sup>[1]</sup>. În capitolele ce urmează discuția noastră se va axa pe modelul propus de Uchoa, Cabrera și Castro Neto<sup>[4]</sup>, unde problema supraconductibilității în TMD este tratată într-o fază supraconductoare de tip *s wave*, dar mai întâi vom vedea bazele pe care se construiește acest model.

## 2. Teoria Bardeen-Cooper-Schrieffer.

Teoria Bardeen-Cooper-Schrieffer (pe care de acum înainte o vom nota convențional prin teoria BCS) este prima teorie microscopică a supraconductibilității. Punctul de bază al teoriei sunt așa numitele perechi Cooper, care sunt perechi de electroni formate prin interacțiunea cu fononii rețelei. Acestea au fost descrise de către Leon Cooper<sup>[5]</sup> în anul 1956. În următorul an, 1957, cei trei fizicieni vor publica două articole<sup>[6][7]</sup> în care dezvoltă modelul teoretic care le poartă numele și pentru care ulterior vor primi, în anul 1972, premiul Nobel în fizică. În cele ce urmează vom discuta despre bazele acestei teorii și ce perspectivă ne oferă asupra fenomenului de supraconductibilitate.

### 2.1. Perechile Cooper.

Leon Cooper<sup>[5]</sup> a plecat de la ideea că într-un material metalic s-ar putea să apară proprietăți supraconductoare la temperaturi destul de scăzute dacă spectrul energetic al unui electron avea o bandă interzisă energetică, independent de volum, de ordinul produsului între temperatura critică și constanta lui Boltzmann<sup>[8]</sup>. De aici a considerat că doi electroni, având interacțiuni între ei de natură atractivă, pot forma o stare legată, chiar dacă energia lor va fi mai mare decât zero. Prin alegerea funcției de undă a sistemului format din cei doi electroni ca un produs al două funcții plane și rezolvând ecuația Schrödinger a considerat că electronii cu o energie apropiată în valoare cu cea a energiei Fermi vor fi responsabili de supraconductibilitate<sup>[7]</sup>. Altfel spus, electronii aflați într-un strat energetic subțire aproape de suprafața Fermi sunt implicați în principal în crearea stării supraconductoare<sup>[7]</sup>.

Evident, acest fenomen este unul de natură cuantică care nu poate fi explicat prin prisma fizicii clasice. Putem totuși descrie procesul prin care are loc formarea unei perechi Cooper în mod intuitiv. Vom lua un electron care se deplasează printr-un material. La temperaturi mai mari decât valoarea critică a respectivului material, electronul se va ciocni de ionii rețelei cristaline, lucru care duce la apariția rezistivității. Dacă temperatura este sub valoarea temperaturii critice, din cauza temperaturii scăzute, energia termică va avea la rândul său o valoare redusă, ceea ce duce la vibrații termice cu amplitudine mică în rețea. Electronul nostru care se deplasează printre ionii rețelei va produce o deformare a structurii, mișcând ionii din pozițiile lor. Deoarece ionii vor fi atrași de către particula de sarcină negativă, în vecinătatea și în urma electronului se va acumula un exces de sarcină pozitivă. Această acumulare de sarcină pozitivă va acționa asupra unui alt electron printr-o forță de atracție, lucru care duce la formarea perechii de electron-electron. Pentru ca această slabă forță de atracție să poată învinge repulsia Coulombiană dintre

electroni, cele două particule trebuie să fie destul de îndepărtate. De fapt, distanța dintre diferite perechi este în medie mai mică decât distanța dintre constituenții unei perechi<sup>[15]</sup>, distanță care este de ordinul a câtorva sute de nanometrii (amintim faptul că valoarea constantelor de rețea este de ordinul zecimilor unui nanometru, sau echivalent, de ordinul a câtorva Ångströmi). Putem spune că perechile Cooper se suprapun destul de mult.

Vom dezvolta puțin această discuție a perechilor Cooper prin formalismul mecanicii cuantice, considerând o problemă de mecanică cuantică relativ simplă<sup>[16]</sup>. Vom lua doi electroni care se află în interacțiune de natură atractivă. Hamiltonianul se poate scrie în acest caz ca fiind :

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}_1}^2}{2m} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}_2}^2}{2m} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \quad (2.1)$$

Fiind o problemă cu două particule vom trece în coordonate noi unde avem distanța dintre particule  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  și poziția centrului de masă, care va fi dat de relația  $\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$ . Astfel vom putem rescrie Hamiltonianul sistemului sub forma următoare :

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

unde  $m^*$  este masa totală a sistemului iar  $\mu$  este masa redusă, în acest caz fiind  $m / 2$ . Observăm că potențialul nu depinde de coordonata centrului de masă  $\mathbf{R}$ . Următorul pas este scrierea ecuației Schrödinger, care în acest caz va fi :

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{R}}^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (2.3)$$

Soluția va fi de forma  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \psi(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}$ . Vom putea scrie utilizând această soluție următoarea relație :

$$\left[ -\frac{\hbar^2 \nabla_{\mathbf{r}}^2}{2\mu} + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \tilde{E} \psi(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

unde vom avea  $\tilde{E} = E$  dacă impulsurile sunt egale și de sens opus. Acesta este cazul în care  $E$  este minimă. Următorul pas în cadrul acestei tratări este transformata Fourier a ecuației Schrödinger, introducând următoarea relație :

$$\psi(\mathbf{k}) = \int d^3r \psi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5)$$

Vom prelucra ecuația Schrödinger și dacă definim energia unuia dintre electronii liberi ca fiind

$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  vom putea scrie următoarea formulă :

$$\int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} V(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \psi(\mathbf{k}') = (E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}) \psi(\mathbf{k}) \quad (2.6)$$

Din (2.6) vedem că, pentru a avea o stare legată între cei doi electroni paranteza din dreapta trebuie să fie mai mică decât zero. Astfel spus, vom avea stări legate dacă  $E < 2\varepsilon_{\mathbf{k}}$ , ceea ce înseamnă că energia totală a sistemului nostru va fi mai mică decât energia a doi electroni liberi. Vom da acum o funcție de undă modificată ca fiind :

$$\Delta(\mathbf{k}) = (E - 2\varepsilon_{\mathbf{k}}) \psi(\mathbf{k}) \equiv - \int \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \cdot \frac{V(\mathbf{k} - \mathbf{k}')}{2\varepsilon_{\mathbf{k}'} - E} \Delta(\mathbf{k}') \quad (2.7)$$

Pentru a ne apropia de rezultatele date de Cooper vom presupune că potențialul nostru este o constantă  $-V_0$  dacă energiile electronilor sunt mai mici decât  $\hbar\omega_D$  (unde  $\omega_D$  reprezintă frecvența Debye; de fapt, această condiție este mai corect scrisă ca energia electronului cuprinsă între energia Fermi și suma energiei Fermi cu energia dată de frecvența Debye) și zero în rest. Soluția căutată va avea termenul din stânga din ecuația (2.7) (funcția modificată) constant. De aici apare implicația că spinii celor doi electroni care alcătuiesc o pereche Cooper trebuie să fie antiparaleli.

În limita cuplării slabe, adică când produsul dintre densitatea de stări la nivelul Fermi și potențialul  $V$  este mult mai mic decât 1, vom putea scrie :

$$E \cong 2E_F - 2\hbar\omega_D e^{\left(-\frac{2}{NV}\right)} \quad (2.8)$$

unde vedem că energia totală a perechii Cooper va fi mai mică decât energia Fermi. Acest lucru duce la concluzia că un potențial arbitrar mic de atracție între doi electroni de spini antiparaleli și impulsuri egale dar opuse va duce la condensarea electronilor într-o stare cu energie mai mică decât cea a sistemului inițial – condensatul BCS.

## 2.2. Modelarea teoretică

În subcapitolul precedent am văzut cazul unei singure perechi Cooper (sistemul format din doi electroni) dar în realitate, în materialul nostru supraconductor avem un ansamblu de astfel de sisteme. Pentru a trece mai departe va trebui să purtăm o scurtă discuție despre operatorii cuantici de anihilare și creare. Vom defini acești operatori în contextul de față, unde considerăm electroni care au un anumit spin și un anumit impuls, astfel că operatorii vor depinde de impulsul  $\mathbf{k}$  și de spinul electronilor  $\sigma$ . Spinul poate avea două orientări – spin în sus  $\uparrow$  și spin în jos  $\downarrow$ .

Notarea lor se va face cu  $c_{k\sigma}$  pentru operatorul de anihilare pentru un electron de impuls  $\mathbf{k}$  și spin  $\sigma$ , iar  $c_{k\sigma}^\dagger$  va desemna operatorul de creare pentru un electron de impuls  $\mathbf{k}$  și spin  $\sigma$ .

Relațiile de comutare pentru aceștia vor fi<sup>[17]</sup>:

$$\{c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}^\dagger\} = \delta^{(3)}(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.9.a)$$

$$\{c_{k\sigma}, c_{k'\sigma'}\} = 0 = \{c_{k\sigma}^\dagger, c_{k'\sigma'}^\dagger\} \quad (2.9.b)$$

Hamiltonianul pe care îl vom utiliza va fi dat de relația următoare<sup>[16]</sup>, unde primul termen se leagă de energia cinetică a electronilor, iar al doilea termen se referă la energia de interacțiune a perechii Cooper.

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{kk'} V_{kk'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \quad (2.10)$$

Următorul pas este să folosim decuplarea *mean-field* pentru a desface termenul din a doua sumă. Avem, în primul rând, pentru operatorii de creare ((2.11) se poate scrie analog și pentru operatorii de anihilare):

$$c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger = \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle + \delta(c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) \quad (2.11)$$

$$\delta(c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger) \delta(c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow}) = 0 \quad (2.12)$$

Astfel putem aproxima termenul respectiv ca fiind<sup>[17]</sup>:

$$\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \cong \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} + \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger - \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \quad (2.13)$$

Pentru a ne ușura scrierea și a anticipa puțin ceea ce urmează, vom defini funcția de gap  $\Delta_k$ :

$$\Delta_k = -\frac{1}{N} \sum_{k'} V_{kk'} \langle c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \rangle \quad (2.14)$$

În sfârșit vom putea scrie noul nostru Hamiltonian:

$$H \cong \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - \sum_k (\Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow}) + \sum_k \Delta_k \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \quad (2.15)$$

Acum că am reușit să rescriem Hamiltonianul, acesta trebuie diagonalizat, iar pentru a realiza acest lucru vom utiliza metoda lui Bogoliubov. Pentru a realiza acest procedeu trebuie mai întâi să definim operatori fermionici, pe care îi vom nota cu  $\varphi_{k\sigma}$  și coeficienții Bogoliubov care vor fi notați cu  $u_k$  și  $v_k$ . Relațiile de definiție vor fi<sup>[16]</sup>:

$$c_{k\uparrow} = u_k^* \varphi_{k\uparrow} + v_k \varphi_{-k\downarrow}^\dagger \quad (2.16.a)$$

$$c_{-k\downarrow}^\dagger = u_k \varphi_{-k\downarrow}^\dagger - v_k \varphi_{k\uparrow} \quad (2.16.b)$$

Acești operatori vor satisface relațiile date de setul (2.9). Pentru ca acest lucru să fie asigurat apare o condiție de normare, mai concret  $|u_k|^2 + |v_k|^2 = 1$ . Folosim setul de relații (2.16) și îl introducem în formula Hamiltonianului dată în (2.14) pentru a găsi următoarea egalitate<sup>[18]</sup>:

$$H = H_0 + H_1 + H_2 \quad (2.17)$$

unde  $H_0$  va fi un termen constant, iar  $H_1$  și  $H_2$  vor fi date de relațiile (2.18) și (2.19). Termenul de  $H_2$  va trebui să fie egal cu 0 pentru a diagonaliza Hamiltonianul.

$$H_1 = \sum_k [\varepsilon_k (|u_k|^2 - |v_k|^2) + \Delta_k u_k v_k^* + \Delta_k^* u_k^* v_k] (\varphi_{k\uparrow}^\dagger \varphi_{k\uparrow} + \varphi_{-k\downarrow}^\dagger \varphi_{-k\downarrow}) \quad (2.18)$$

$$H_2 = \sum_k [2\varepsilon_k u_k v_k - \Delta_k u_k^2 + \Delta_k^2 v_k^2] \varphi_{k\uparrow}^\dagger \varphi_{-k\downarrow}^\dagger + [2\varepsilon_k u_k^* v_k^* - \Delta_k^* (u_k^*)^2 + \Delta_k (v_k^*)^2] \varphi_{k\uparrow} \varphi_{-k\downarrow} \quad (2.19)$$

Putem observa acum că al doilea termen din  $H_2$  este de fapt conjugata hermitică a primului termen. Condiția ca acest termen ( $H_2$ ) să fie zero se va restrânge deci la a egaliza paranteza cu zero. Luând în considerare condiția de normare a coeficienților Bogoliubov vom putea să îi scriem ca fiind<sup>[18]</sup>:

$$|u_k|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}} \right) \quad (2.20)$$

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}} \right) \quad (2.21)$$

Hamiltonianul în forma sa finală va fi scris ca :

$$H = \sum_k E_k (\varphi_{k\uparrow}^\dagger \varphi_{k\uparrow} + \varphi_{-k\downarrow}^\dagger \varphi_{-k\downarrow}) + E' \quad (2.22)$$

unde  $E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}$  iar  $E' = \sum_k (\varepsilon_k - \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2} + \Delta_k \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle)$ . De reținut că acest Hamiltonian este diagonal în raport cu operatorii fermionici iar  $E'$  reprezintă energia stării fundamentale. Funcția de gap pe care am definit-o înainte reprezintă cât de mare este gap-ul la nivelul Fermi, adică când  $\varepsilon_k = 0$ .

Vom dezvolta puțin acum ecuația funcției de gap și vom discuta cele două soluții care se găsesc pentru rezolvarea acesteia. Punctul de plecare este ecuația (2.14), unde impunem condiția ca :

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V_0; & |\varepsilon_k|, |\varepsilon_{k'}| \leq \hbar\omega_D \\ 0; & \text{în rest} \end{cases} \quad (2.23)$$

Această condiție se va propaga în funcția dată de relația (2.13) și vom avea două posibilități :

$$\Delta_k = \begin{cases} \Delta; & |\varepsilon_k|, |\varepsilon_{k'}| \leq \hbar\omega_D \\ 0; & \text{în rest} \end{cases} \quad (2.24)$$

Dacă luăm operatorii fermionici putem scrie distribuția Fermi-Dirac (FD) sub forma :

$$\langle \varphi_{k\uparrow}^\dagger \varphi_{k\uparrow} \rangle = \frac{1}{e^{\frac{E_k}{k_B T}} + 1} \quad (2.25)$$

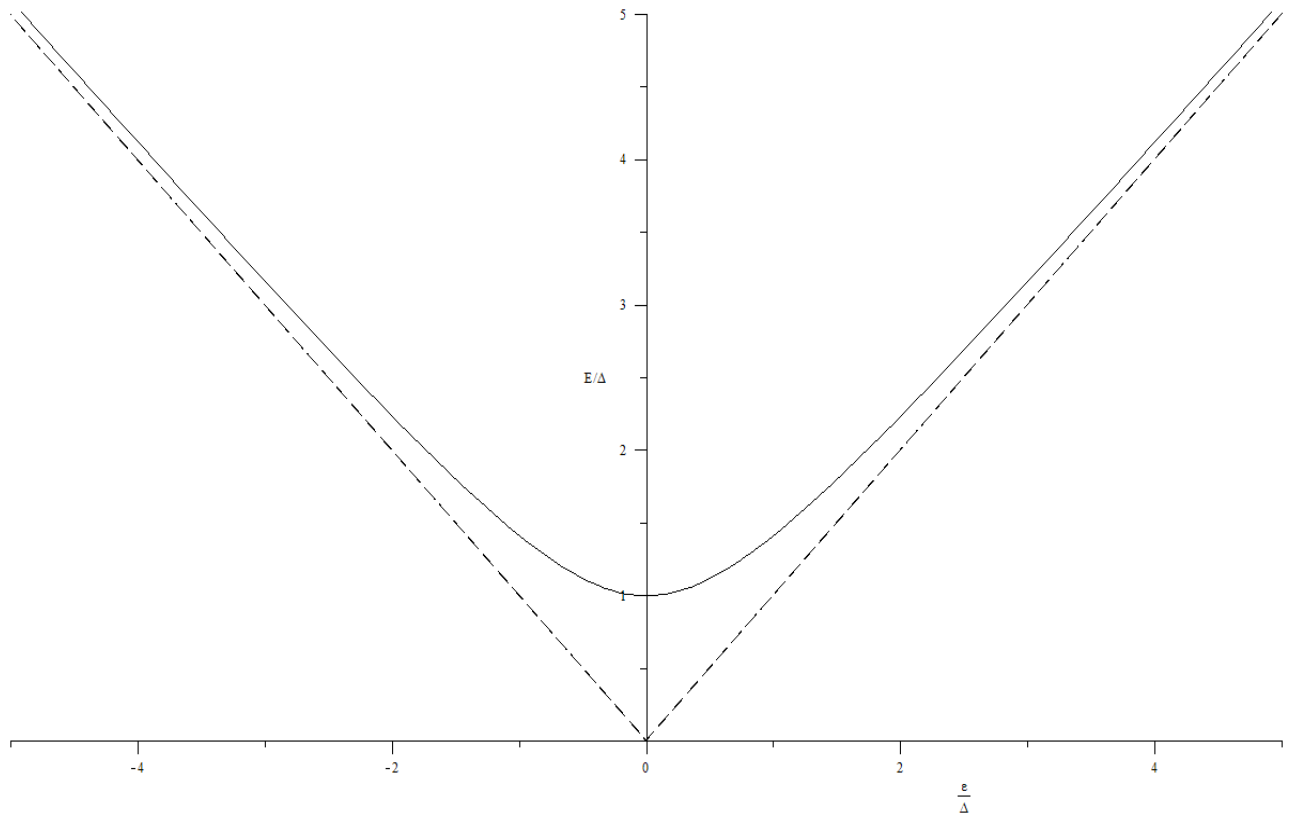
Folosind acum (2.23) și (2.24) vom putea rescrie funcția de gap ca fiind :

$$\Delta_k = \frac{V_0}{N} \sum_{k \leq k_D} \frac{\Delta}{2\sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}} \tanh\left(\frac{1}{2k_B T} \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}\right) \quad (2.26)$$

Vom avea două soluții, prima fiind cea trivială în care  $\Delta = 0$ . Aceasta nu este de mare interes pentru actuala discuție deoarece corespunde stării normale. Cea care corespunde stării supraconductoare apare când  $T \rightarrow 0$ . Dacă  $T$  tinde spre 0, tangenta hiperbolică va tinde spre valoarea 1. Se va găsi astfel a doua soluție care are forma de  $\Delta \cong 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{v_0\rho}}$ , unde  $\rho$  reprezintă densitatea de stări la nivelul Fermi, iar energia  $E' < 0$ .

Putem reprezenta grafic, folosind de exemplu software-ul matematic Maple, dependența raportului  $\frac{E}{\Delta}$  ca funcție de raportul  $\frac{\varepsilon}{\Delta}$ , iar rezultatul va fi graficul din figura 2.1.





**Fig. 2.1.** Apariția unui gap energetic între starea normală (reprezentată cu linie punctată) și starea supraconductoare (reprezentată cu linie continuă).

Ultimul aspect pe care îl vom trata în acest subcapitol este determinarea stării fundamentale BCS. Vom nota această stare cu  $|BCS\rangle$ . Dacă acționăm asupra stării fundamentale cu un operator de anihilare rezultatul va fi zero. Putem să scriem deci, folosindu-ne de operatorii fermionici de anihilare, relația :

$$\varphi_{k\uparrow}|BCS\rangle = 0 \quad (2.27)$$

Operatorul fermionic de anihilare este dat de identitatea :

$$\varphi_{k\uparrow} = u_k c_{k\uparrow} - v_k c_{-k\downarrow}^\dagger \quad (2.28)$$

Înlocuind (2.27) în ecuația (2.26) putem găsi următoarea egalitate :

$$u_k c_{k\uparrow}|BCS\rangle = v_k c_{-k\downarrow}^\dagger|BCS\rangle \quad (2.29)$$

Pentru a scrie această relație în funcție de starea fundamentală a electronilor vom scrie starea BCS ca o combinație arbitrară de perechi Cooper, rezultând :

$$|BCS\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger)|0\rangle \quad (2.30)$$

unde am notat cu  $|0\rangle$  starea fundamentală pentru electroni. Practic, această relație ne spune că starea fundamentală este alcătuită din stări astfel încât dacă starea de impuls  $\mathbf{k}$  și spin  $\uparrow$  este ocupată și starea de impuls  $-\mathbf{k}$  și spin  $\downarrow$  trebuie să fie ocupată. Stările cu impuls și spin opus sunt fie ambele ocupate fie ambele goale<sup>[32]</sup>.

### 2.3. Verificările teoriei.

Teoria BCS are destule neajunsuri, probabil unul dintre cele mai importante fiind inabilitatea de a explica fenomenul de supraconductibilitate în materialele cu temperatură critică ridicată. Totuși, există și multe moduri prin care această teorie a fost verificată și vom vedea acum câteva dintre acestea.

Unul dintre succesele majore ale teoriei este faptul că formula energiei libere dată de Ginzburg și Landau<sup>[19]</sup> poate fi dedusă folosind ca punct de plecare teoria microscopică BCS. Acest lucru a fost făcut de Gor'kov<sup>[20]</sup> și vom vedea și noi foarte sumar cum se realizează această deducere în cele ce urmează. Vom începe prin a lua parametrul din teoria GL care în cazul nostru va reprezenta funcția de undă a stării supraconductoare. Sub valoarea critică a temperaturii această funcție de undă este nenulă iar la temperaturi peste valoarea critică se anulează. Vom lua o funcțională care ne va da diferența între energia liberă a celor două stări – supraconductoare și liberă. Deasupra temperaturii critice, această funcție ar trebui să fie pozitivă, iar sub valoarea critică să fie negativă. Acest fapt provine din definiția funcționalei noastre ca diferență între energia liberă a stărilor supraconductoare și normale; în stare normală ( $T > T_C$ ) energia liberă a stării normale va fi mai mică decât cea a stării supraconductoare și invers dacă ne aflăm în starea supraconductoare. Lucrul important de extras de aici este că, în momentul în care  $T = T_C$ , această funcțională are valoarea zero. Vom putea dezvolta energia liberă în funcție de puterile lui  $\psi(\mathbf{r})$ , care este funcția de undă. Din considerente de simetrie și analiticitate impunem ca termenii care apar în dezvoltare să fie doar puterile pare. Astfel, vom putea scrie :

$$F(\psi, \psi^*) = a|\psi|^2 + \frac{b}{2}|\psi|^4 \quad (2.31)$$

Relația (2.30) se poate scrie echivalent înlocuind modulul pătrat al funcției de undă :

$$F(\psi, \psi^*) = a\psi\psi^* + \frac{b}{2}\psi\psi^*|\psi|^2 \quad (2.32)$$

La echilibru energia liberă va avea o valoare minimă. Putem astfel să extragem soluțiile pentru funcția de undă derivând în funcție de  $\psi$ .

$$\frac{\partial F}{\partial \psi} = a\psi^* + b\psi^*|\psi|^2 = 0 \quad (2.33)$$

Această relație poate fi rescrisă dând factor comun pe  $\psi^*$  iar soluțiile care rezultă vor corespunde fiecare unei stări (după cum am menționat înainte, funcția de undă e nulă dacă materialul se află în stare supraconductoare).

$$\psi^*(a + b|\psi|^2) = 0 \quad (2.34)$$

Prima soluție va fi  $|\psi^*| = 0 \Leftrightarrow |\psi| = 0$ , iar a doua va fi  $|\psi| = \sqrt{\frac{-a}{b}}$ . Aceste două soluții pot fi înlocuite în (2.30) pentru a găsi valorile energiei libere corespunzătoare  $F = 0$ , respectiv  $F = -\frac{a^2}{2b}$ . Parametrul  $b$  trebuie să fie un parametru pozitiv, deci, ca soluția noastră să aibă sens parametrul  $a$  va trebui să negativ. În stare normală totuși, acest parametru este pozitiv, ceea ce înseamnă că  $a$  se anulează în  $T_C$ . Putem deci spune că  $a$  este o funcție care depinde direct proporțional de  $(T - T_C)$ . Dacă înlocuim asta în soluțiile noastre găsim că modulul funcției de undă depinde de radicalul diferenței respective. Dacă funcția de undă nu mai este constantă formula se va modifica deoarece vom lua în considerare cuplarea perechii Cooper (care este încărcată electric) cu câmpul electromagnetic, care se va realiza prin apariția unui termen dependent de  $\frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{2e}{c}\mathbf{A}$ . În acest caz  $\mathbf{A}$  reprezintă potențialul vector magnetic. Va apărea de asemenea și energia câmpului electromagnetic. Energia liberă va deveni<sup>[17]</sup>:

$$F[\psi(\mathbf{r}), \psi^*(\mathbf{r}), \mathbf{A}] = a|\psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{b}{2}|\psi(\mathbf{r})|^4 + \frac{1}{4m} \left| \left( \frac{\hbar}{i}\nabla + \frac{2e}{c}\mathbf{A} \right) \psi(\mathbf{r}) \right|^2 + \frac{B^2}{8\pi} \quad (2.35)$$

Putem dezvolta această discuție căutând relațiile de echilibru, minimizând în (2.34) energia liberă atât în funcție de funcția de undă cât și în funcție de potențialul vector. Demonstrația este laborioasă și nu o vom include în această lucrare. Rezultatul totuși este unul interesant – găsim o densitate de curent cu următoarea formă<sup>[17]</sup>:

$$\mathbf{J} = -\left(\frac{e\hbar n_s}{2m}\right)\nabla\theta - \left(\frac{e^2 n_s}{mc}\right)\mathbf{A} \quad (2.36)$$

Dacă avem faza uniformă, primul termen devine zero și rămânem cu ecuația London. Dacă al doilea termen este zero observăm că o fază neuniformă va crea un curent în material. Această situație din urmă ne arată de asemenea că la apropierea a doi supraconductori cu faze diferite, între ei va apărea un curent prin joncțiune, fenomen cunoscut sub numele de efect Josephson. Acest efect are numeroase aplicații, în special în proiectarea și realizarea circuitelor cuantice și dispozitive precum SQUID-uri, qubiți supraconductori sau dispozitive RSFQ. Este un efect

important în fizica supraconductorilor și astfel ne vedem nevoiți să vorbim, chiar dacă extrem de succint, despre el.

Efectul Josephson a fost propus de către B.D. Josephson în anul 1962<sup>[21]</sup>, când acesta avea doar 22 de ani. Baza este efectul de tunelare, un efect cuantic prin care o particulă poate trece de o barieră de potențial, chiar dacă nu are energia necesară, lucru care nu este permis în cazul fizicii clasice. Modul în care Josephson a abordat problema a fost prin a lua doi supraconductori separați de un mediu izolator (bariera de potențial) și a considerat că termenul Hamiltonianului responsabil de trecerea electronilor prin barieră se poate lua ca fiind o perturbație. În loc de operatorii Bogoliubov a utilizat operatori de creare și anihilare cvasi-particulă, care vor scoate sau adăuga un electron din aceeași parte cu cvasi-particula și vor lăsa numărul de pe cealaltă parte nemodificat. De asemenea a utilizat operatori de creare a perechilor, care adaugă o pereche de electroni într-o parte, lăsând numărul de cvasi-particule neschimbat pe cealaltă. Calculând Hamiltonianul în cazul în care avem efect de tunel și extrăgând densitatea de curent a arătat cum poate apărea o densitate de curent nenulă între doi supraconductori separați de un strat izolator.

O altă verificare importantă a teoriei BCS a fost experimentul lui I. Giaever și K. Megerle<sup>[22]</sup>, în care au arătat cum depinde gap-ul energetic ca funcție de temperatură. Chiar și existența acestei benzi interzise este bazată în teoria BCS. Metoda de măsurare era bazată pe tunelarea electronilor prin straturi subțiri izolatoare, folosind probe alcătuite dintr-un strat subțire de oxid izolator așezat între două filme de metal evaporat. Curentul de tunelare va depinde de tensiunea aplicată între cele două filme subțiri. Dacă tensiunea este mică iar materialele se află în stare normală dependența va fi liniară, dar dacă suntem în cazul supraconductor atunci caracteristica va fi neliniară. Măsurătorile au fost efectuate pentru patru probe diferite de Plumb, Staniu, Aluminiu și Indiu. Rezultatele experimentale, puse în comparație cu cele teoretice care reies din teoria BCS, sunt prezentate mai jos.

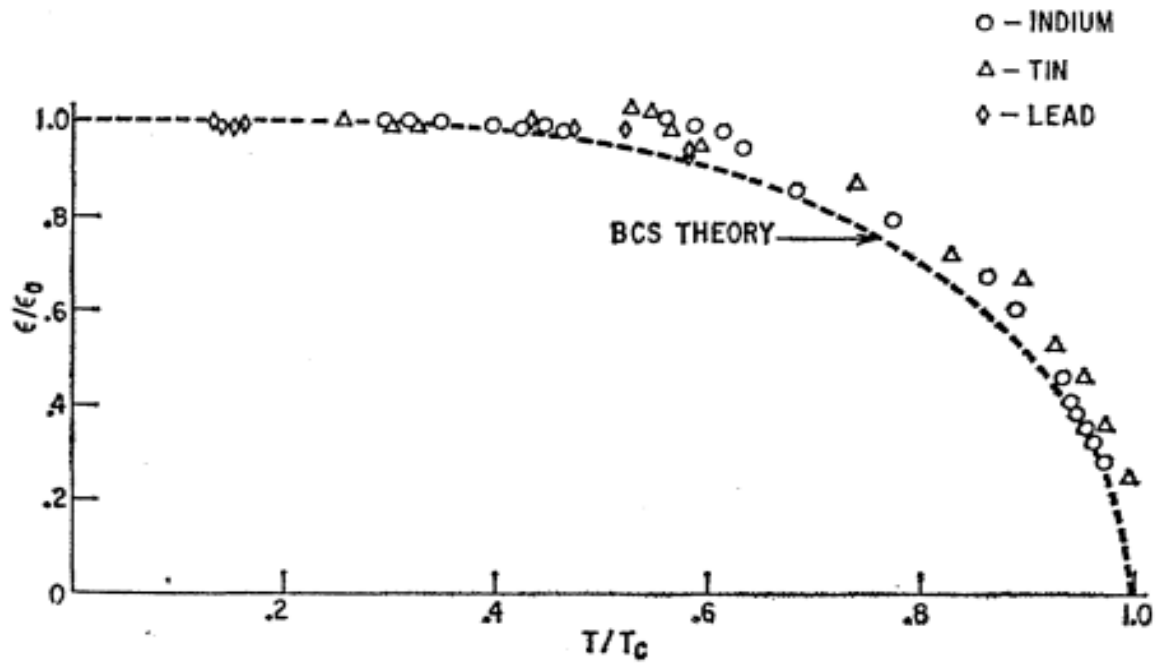


Fig. 2.2. Gap-ul energetic al filmelor subțiri de In, Sn și Pb ca funcție de temperatura redusă  $(\frac{T}{T_c})$  comparat cu teoria<sup>[22]</sup>.

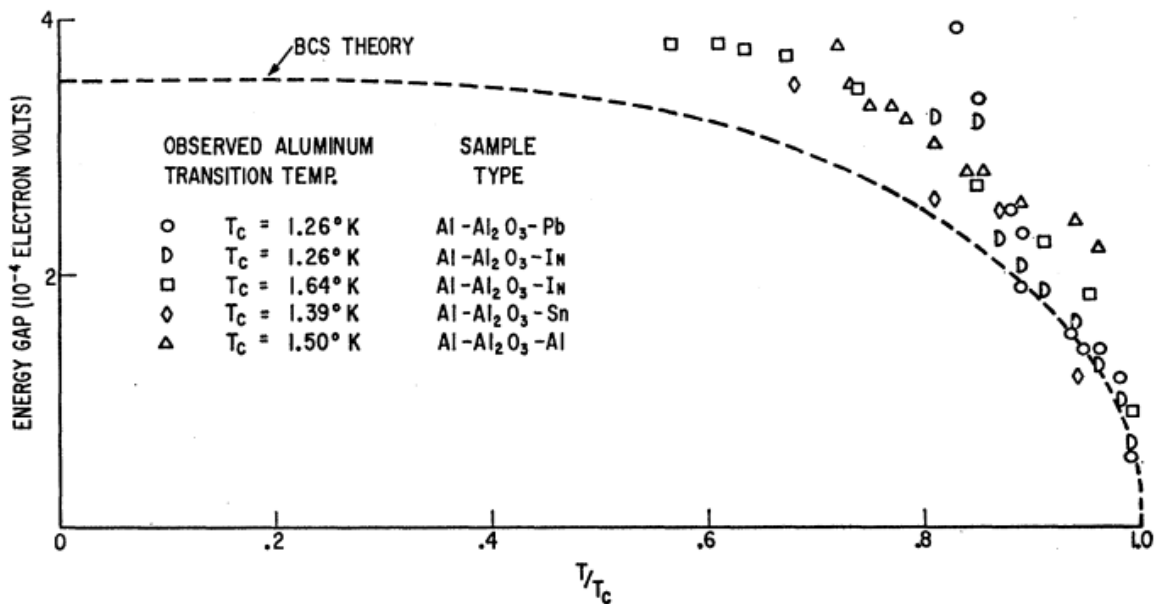


Fig. 2.3. Gap-ul energetic ca funcție de temperatura redusă pentru varii filme de Al, comparat cu teoria BCS<sup>[22]</sup>.

Aceste două figuri arată cât de bine se potrivesc rezultatele obținute empiric de cele prezise de teoria BCS, Aluminiul având discrepanțe mari deoarece nu se încadrează în categoria de supraconductori BCS. După cum am spus și la începutul subcapitolului, această teorie *nu* poate explica comportamentul tuturor materialelor supraconductoare.

Un alt aspect pe care îl vom trata ca parte a discuției curente este legat de efectul izotopic. Acest efect se referă la faptul că temperatura critică a unui material supraconductor variază invers proporțional cu masa izotopului din care este compus materialul. Descoperirea a avut loc în anul 1950 de către două grupuri care lucrau cu Mercur<sup>[23][24]</sup>. Influența izotopului se face resimțită la nivelul vibrațiilor rețelei, modificându-le frecvența, dar în rest nu afectează în mod esențial proprietățile electrice ale unui material. Din aceste două experimente a rezultat că temperatura de tranziție (critică) este cu atât mai ridicată cu cât masa izotopică este mai mică. Acest lucru este incorporat și în teoria BCS unde energia de legătură a perechilor Cooper este legată de vibrațiile rețelei cristaline. Temperatura critică este dată de relația<sup>[7]</sup> :

$$T_C = \frac{1.134}{k_B} E_D e^{-\frac{1}{N_0 V}} \quad (2.36)$$

unde  $k_B$  este constanta Boltzmann,  $E_D$  este energia Debye,  $N_0$  reprezintă densitatea de stări la nivelul Fermi iar  $V$  este potențialul de cuplaj electron-fonon. Ca funcție de masa izotopică putem scrie relația dintre aceasta și temperatura critică ca<sup>[25]</sup> :

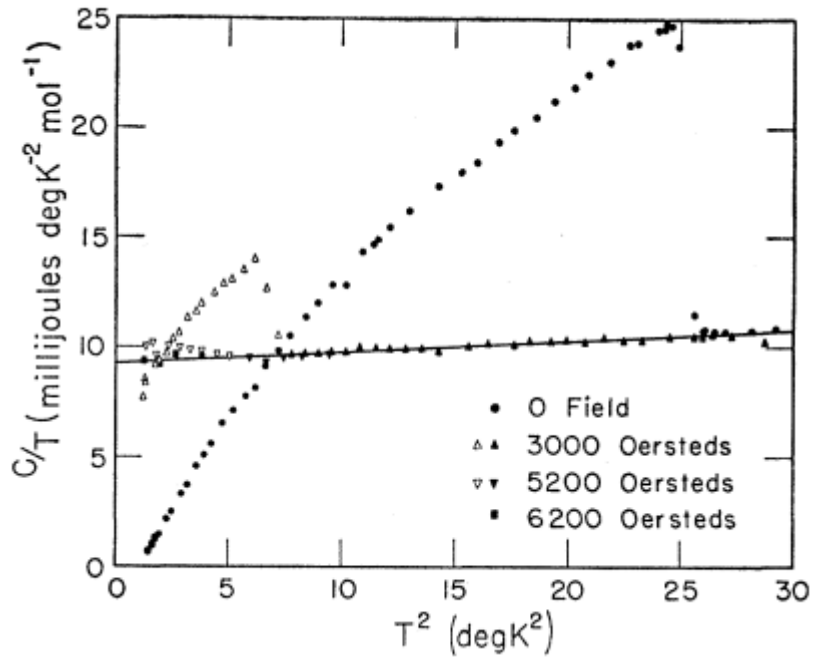
$$T_C M^{\frac{1}{2}} = \text{constantă} \quad (2.37)$$

unde  $M$  reprezintă masa izotopică. Puterea  $1/2$  nu este aceeași pentru materiale diferite, motivul fiind că spectrul frecvențelor se deplasează. Totuși, acel coeficient poate fi determinat, sau cel puțin estimat, pentru materiale supraconductoare folosind date obținute pentru căldura specifică. Plumbul, de exemplu, are o valoare a coeficientului de  $0.73$ <sup>[26]</sup>.

Un ultim experiment pe care îl vom vedea este cel al măsurării căldurii specifice a Vanadiului în starea normală și cea supraconductoare<sup>[41]</sup>. Ceea ce au observat este că, pe cum răcim Vanadiul sub temperatura sa critică, căldura sa specifică crește brusc, în mod exponențial, într-un domeniu de doar 4K. Această creștere sugerează mai departe existența unei benzi interzise. Dependența căldurii specifice poate fi scrisă sub următoarea formă :

$$C = \gamma e^{-\frac{\alpha}{k_B T}} \quad (2.38)$$

unde  $\gamma$  și  $\alpha$  sunt două constante. Constanta din exponențială, adică  $\alpha$ , s-a determinat ulterior ca fiind jumătate din lărgimea benzii interzise.



**Fig. 2.4.** Reprezentarea grafică a dependenței  $C/T$  de  $T^2$ . Observăm acel salt în jurul valorii de  $25 K^2$ . Menționăm faptul că temperatura critică a Vanadiului este de  $5.4 K$ <sup>[41]</sup>.

Impactul muncii monumentale depuse de Bardeen, Cooper și Schrieffer nu poate fi subestimat. Toate aceste exemple, și multe altele pe care nu le-am mai discutat în cadrul acestui subcapitol, deservește ca exemple ilustrative pentru a demonstra validitatea acestei teorii.

### 3. Teoria în dicalcogenide cu metale de tranziție.

Dicalcogenidele cu metale de tranziție (TMD) sunt o clasă de materiale semiconductoare cvasi-bidimensionale. Structura lor este de forma  $MX_2$  unde  $M$  reprezintă un metal din clasa metalelor de tranziție și  $X$  este un calcogen (elemente din grupa 16 de pe tabelul periodic). În general grosimile straturilor de TMD sunt de ordinul a doar câtorva Ångströmi și prezintă proprietăți precum supraconductibilitatea<sup>[28]</sup>. Aceste materiale au numeroase aplicații, cum ar fi în domeniul de medicină unde ar putea fi folosite în tratarea cancerului, distribuirea medicamentelor sau regenerarea anumitor structuri<sup>[37]</sup> sau în domeniul optoelectronicii<sup>[38][39]</sup>. Discuția de la finalul acestui capitol, pentru a anticipa puțin, se va axa pe modificarea temperaturii critice în contextul în care apropiem de dicalcogenida noastră un strat izolator, dar înainte vom parcurge niște repere teoretice, esențiale pentru tema curentă.

#### 3.1. Charge Density Wave (CDW). Tranziții Peierls.

În primul rând, ca o scurtă mențiune, am ales ca termenul de *charge density wave* să rămână netradus deoarece vom folosi de acum înainte doar prescurtarea de CDW. Pentru a începe discuția noastră din acest subcapitol, CDW se referă la o modulație statică a electronilor de conducție, fiind un fenomen care este adesea acompaniat de modificări periodice ale rețelei cristaline<sup>[29]</sup>. Motivul pentru care apar este că starea fundamentală pentru un lichid Fermi este instabilă iar electronii care trec într-o stare de CDW au energia mai scăzută.

Înainte de teoria BCS, despre care am vorbit în prealabil (vezi capitolul 2), H. Fröhlich a încercat să modeleze o teorie microscopică a supraconductibilității<sup>[31]</sup> plecând de la ideea că benzi interzise energetice ar putea să apară datorită interacțiunii electron-fonon sub o anumită temperatură. El a sugerat că electronii sunt transportați de astfel de CDW aflate în mișcare. Într-un material cvasi-unidimensional conducția este de tip metalic și electronii interacționează puternic cu fononii care au numărul de undă  $2k_F$ , iar ca rezultat frecvența scade odată cu temperatura până se ajunge la temperatura de tranziție Peierls, unde frecvența devine zero<sup>[32]</sup>. Fononii sunt bozoni, deci putem avea mai mulți care să ocupe aceeași stare. La temperaturi scăzute modul de vibrație al fononilor cu numărul de undă  $2k_F$  va fi ocupat și va apărea o modificare periodică a rețelei, ceea ce duce la formarea unei CDW. Fröhlich a considerat că această undă se va putea deplasa și că gap-urile Peierls care apar în jurul energiei Fermi vor fi deplasate în spațiul impulsurilor. Totuși, o CDW nu se poate deplasa liberă, ci este influențată de defecte în material, acestea împiedicând deplasarea undei.



Să vedem acum câte ceva despre tranzițiile Peierls, dat fiind faptul că au apărut în cadrul discuției noastre din acest subcapitol și până acum nu le-am tratat separat. Pentru început vom lua un caz simplu - un conductor unidimensional unde fiecare ion are doi electroni<sup>[35]</sup>. Vom considera Hamiltonianul ca având forma :

$$H = E_0 + V = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (3.1)$$

unde  $E_0$  este energia lanțului de electroni care nu interacționează iar  $V$  este un potențial periodic (adică  $V(x + a) = V(x)$ ). Semnificația lui  $a$  este de constantă a rețelei cristaline, care ne dă distanța dintre ioni. Vom considera în continuare că sistemul nostru are lungime  $L$  și un număr de  $N$  ioni. Putem scrie atunci relația :

$$L = Na \quad (3.2)$$

În lipsa potențialului, funcțiile de undă electronice se pot scrie sub forma undelor plane, iar potențialul, prin modificările aduse rețelei, va reflecta parțial aceste unde. Ne vom îndrepta atenția asupra cazului când lungimea de undă a electronului devine egală cu  $2a$ . În acest caz, unda care se reflectă și unda incidentă vor fi similare. Numărul total de electroni este  $2N$  și vom avea condițiile de limită :

$$k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad \text{unde } n \text{ este un număr întreg.} \quad (3.3)$$

Acest lucru înseamnă că avem o distanțare egală între  $k$ -uri astfel încât numărul total între  $k_F$  și  $-k_F$  este egal cu  $\frac{Lk_F}{\pi}$ . După cum am spus, vom avea  $2N$  electroni, deci  $N$  spini de un tip și vom putea scrie relația :

$$k_F = \frac{\pi}{a} \quad (3.4)$$

Următorul pas este găsirea elementelor matricei  $V(x)$  între stările proprii ale  $E_0$ . Acestea vor fi componentele Fourier  $V_{k-k'}$  ale lui  $V(x)$ . Menționăm faptul că  $V(x)$  este real, deci  $V_{-nK} = V_{nK}^*$ ,  $K$  fiind egal cu  $\frac{2\pi}{a}$ . Putem scrie potențialul nostru sub următoarea formă :

$$V(x) = \sum_n V_{nK} e^{inKx} \quad (3.5)$$

Primul termen va fi independent de  $x$ , deci este o constantă pe care o putem anula pentru conveniență. Energia de ordinul întâi se va elimina datorită acestui fapt. Energia de ordin doi va fi egală cu :

$$E_k^2 = \frac{|V_K|^2}{E_k^0 - E_{k+K}^0} + \frac{|V_{-K}|^2}{E_k^0 - E_{k-K}^0} \quad (3.6)$$

Dacă termenii sunt mici vom avea rezultate rezonabile, însă acest lucru nu este general valabil, iar pentru a continua va trebui să apelăm la teoria perturbațiilor cvasi-degenerate, mai concret să diagonalizăm Hamiltonianul în subspațiul dat de stările  $|k\rangle^{(0)}$  și  $|k-K\rangle^{(0)}$ . Valorile proprii pe care le obținem în urma acestei operații sunt date de următoarea relație :

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_k^0 + E_{k-K}^0) \pm \sqrt{\left(\frac{E_k^0 - E_{k-K}^0}{2}\right)^2 + |V_K|^2} \quad (3.7)$$

Observăm că dacă  $k$  tinde spre valoarea  $\pi/a$ , termenii din diferența de sub radical se apropie în mărime cu termenii dați de  $V_K$  iar energiile vor devia de la valorile neperturbate. Apare astfel un așa numit gap energetic, gap care există și în materiale reale. Pentru cazul nostru cu ioni cu doi electroni, banda inferioară va fi umplută cu electroni, ceea ce va duce la comportament de izolator; dar dacă ionii ar fi monovalenți banda ar fi doar parțial ocupată și materialul ar avea comportament metalic. Reamintim că aceste cazuri au loc pentru un material unidimensional.

Acum vrem să vedem ce se întâmplă dacă atomii rețelei se deplasează astfel încât să formeze perechi iar noua constantă de rețea să fie egală cu  $2a$ . Ei bine, folosind relația (3.7) unde  $K = \pi/a$ , putem scrie pentru acest caz scăderea în energia electronilor :

$$2 \int_0^{\frac{\pi}{2a}} \frac{(E_k^0 - E_-)L}{\pi} dk = 2 \int \left( \frac{1}{2}(E_k^0 - E_{k-K}^0) + \sqrt{\left(\frac{E_k^0 - E_{k-K}^0}{2}\right)^2 + |V_K|^2} \right) \frac{L}{\pi} dk \quad (3.8)$$

Putem scrie relația (3.9) în vecinătatea lui  $k = \pi/2a$ , pe care o extindem mai apoi :

$$E_k^0 = E_{\pi/2a}^0 + \hbar v q \quad (3.9)$$

unde  $q = k - \pi/2a$ .

$$E_{k-K}^0 = E_{-\pi/2a}^0 - \hbar v q \quad (3.10)$$

Dar  $E_{\pi/2a}^0 = E_{-\pi/2a}^0$ , rezultă deci :

$$E_k^0 - E_{k-K}^0 = 2\hbar v q \quad (3.11)$$

Dacă introducem și relația (3.11) în (3.8) vom găsi la final :

$$2 \int_0^{\frac{\pi}{2a}} \frac{(E_k^0 - E_-)L}{\pi} dk = 2 \int_{-D}^0 \left( \hbar v q + \sqrt{(\hbar v q)^2 + |V_K|^2} \right) \frac{L}{\pi} dq \quad (3.12)$$

Considerăm acum că modulul lui  $\hbar vq$  este mai mare decât modulul lui  $V_K$ . În acest caz vom putea rescrie paranteza de sub integrală ca fiind :

$$\hbar vq + \sqrt{(\hbar vq)^2 + |V_K|^2} = \hbar vq + |\hbar vq| \sqrt{1 + \frac{|V_K|^2}{(\hbar vq)^2}} \quad (3.13)$$

Putem dezvolta radicalul folosind :

$$(1 + x)^n \cong 1 + nx, \quad \text{dacă } x \ll 1 \quad (3.14)$$

Rezultatul va fi :

$$\sqrt{1 + \frac{|V_K|^2}{(\hbar vq)^2}} \cong 1 + \frac{1}{2} \frac{|V_K|^2}{(\hbar vq)^2} \quad (3.15)$$

Înlocuim, folosindu-ne de (3.13) și (3.15), termenii în relația (3.12). Termenii care depind direct proporțional de  $q$  se vor reduce. Explicația este că am avea sub integrală suma  $\hbar vq + |\hbar vq|$ , iar dacă ne uităm la definiția lui  $q$  vedem că acesta este negativ (în cazul de față unde limita de integrare pentru  $k$  este mai mic decât  $\pi/2a$ ), ceea ce înseamnă că acei doi termeni se vor reduce. Vom găsi astfel, după efectuarea calculelor rămase, următoarea ecuație :

$$\Delta E \cong 2|V_K|^2 \int_{-D}^{-|V_K|} \frac{1}{2\hbar v} \frac{Ldq}{\pi|q|} = \frac{L|V_K|^2}{\hbar v} \ln\left(\frac{|V_K|}{D}\right) \quad (3.16)$$

Vedem o dependență de logaritm, adică dacă modul de  $V_K$  este foarte mic logaritmul va domina relația (3.15). Formarea de perechi are un cost energetic asupra rețelei, iar acesta este proporțional cu  $V_K^2$ , adică, mereu, o oarecare dimerizare (formare de perechi), oricât de mică, va avea loc într-un șir unidimensional. Pentru a utiliza formularea clasică – un lanț unidimensional echidistant cu ioni monovalenți este instabil<sup>[35]</sup>. Această formare de perechi este de fapt tranziția Peierls.

Pentru prezenta lucrare, aceste noțiuni discutate în cadrul subcapitolului actual sunt relevante deoarece în dicalcogenidele cu metale de tranziție vor apărea tranziții Peierls care duc la apariția CDW-urilor<sup>[33]</sup>.

Vom menționa tot în cadrul acestui subcapitol un concept util și anume supraconductibilitatea de tip *s-undă* și cea de tipul *d-undă* (există și altele, cum ar fi de exemplu tipul *p-undă*, dar ne vom axa doar pe tipurile *s* și *d*). Aceste două denumiri fac referire la simetria funcției de undă a perechilor Cooper în spațiul impulsurilor. Cuplarea de tip *s-undă* caracterizează materialele convenționale care respectă teoria BCS și au perechi Cooper cu spinul total zero<sup>[36]</sup>. Din moment

ce perechea Cooper se va forma din doi electroni de impuls egal dar de semn opus (și spini antiparaleli) impulsul din centrul de masă va fi nul. Funcția de undă a perechii va avea simetrie sferică; va fi simetrică la interschimbarea celor două particule constituente.

După cum am menționat în capitolele anterioare, supraconductorii cu temperatură critică înaltă nu mai pot fi descriși corect de către teoria BCS. Totuși, putem considera că formarea perechilor Cooper și aspecte ale teoriei BCS se pot încă aplica pentru această clasă de materiale, chiar dacă cu modificări necesare. De exemplu, o stare cuplată s-ar putea forma din orice interacțiune de natură atractivă care să fie mai puternică decât repulsia Coulombiană, cum ar fi de exemplu fluctuații ale spinului<sup>[40]</sup>. În acest caz gap-ul energetic va depinde de impuls și pentru anumite valori se va anula. Vor apărea astfel linii nodale unde vor exista mai multe excitații ale cvasiparticulelor decât în cazul s-undă. Acest caz corespunde simetriei de tip d-undă. Ambele tipuri discutate se pot asemăna cu orbitalii atomici ai Hidrogenului, de unde vine și denumirea lor.

### 3.2. Modelul teoretic al supraconductibilității în dicalcogenide cu metale de tranziție.

În anul 2005, B. Uchoa, G. G. Cabrera și A.H. Castro Neto au prezentat în cadrul unui articol<sup>[4]</sup> proprietățile fizice ale unei teorii microscopice care căuta să unifice, în contextul dicalcogenidelor cu metale de tranziție, existența fenomenului de supraconductivitate și cel al apariției CDW-urilor. Pentru început vom vedea cum au ajuns la o formulare a Hamiltonianului.

Hamiltonianul pentru electronii aflați în starea CDW se compune în următorul fel<sup>[4]</sup>:

$$H_{CDW} = H_e + H_{e-c} \quad (3.17)$$

unde  $H_e$  este corespunde electronilor liberi aflați în jurul nodurilor, iar  $H_{e-c}$  reprezintă Hamiltonianul de schimb între electroni aflați în două noduri diferite. Fiecare dintre aceste două componente sunt scrise extins în relațiile ce urmează.

$$\begin{aligned} H_e &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, i} [\varepsilon_{\mathbf{k}} c_{\sigma, \mathbf{k}}^\dagger c_{\sigma, \mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i} c_{\sigma, \mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}^\dagger c_{\sigma, \mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}] = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}, \sigma, a, b, i} \psi_{a, i, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) [(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}) \eta_0^{a b} + (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i}) \eta_3^{a b}] \psi_{b, i, \sigma} \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$H_{e-c} = \sum_{i, \mathbf{k}} \Delta_{c\mathbf{k}} c_{\sigma \mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i} + conj. herm. = \sum_{i, a, b, \sigma, \mathbf{k}} \Delta_{c\mathbf{k}} \psi_{a, i, \sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \eta_1^{a b} \psi_{b, i, \sigma}(\mathbf{k}) \quad (3.19)$$

În formulele (3.18) și (3.19) intervin operatorii de creare și anihilare cu care am lucrat și în subcapitolele anterioare. Se notează cu  $Q_i$  vectorii de undă CDW, iar indicele  $i$  poate lua valorile 1,2 sau 3. Indicii  $a$  și  $b$  vor reprezenta cele două spații nodale, notate cu + și -. Matricele Pauli care vor acționa în indicii nodali se notează cu  $\eta_\mu$ , unde  $\mu$  ia valori de la 0 la 3. Indicele zero reprezintă identitatea iar ceilalți trei direcțiile x,y și z, în această ordine. Următorul pas este să aplicăm condiția de *nesting*, care ne spune că  $\varepsilon_{\mathbf{k}} + \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} = 0$ , iar dacă vom lua limita lungimii de undă mari și a energiei scăzute vom putea rescrie Hamiltonianul ca fiind :

$$H_{CDW} = \sum_{\mathbf{k},i,\sigma} \Psi_{i,\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) [v_F k_\perp \eta_3 + v_\Delta k_\parallel \eta_1] \Psi_{i,\sigma}(\mathbf{k}) \quad (3.20)$$

unde am introdus spinorii :

$$\Psi_{i,\sigma}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} c_{\mathbf{k},\sigma} \\ c_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}_i,\sigma} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{+,i,\sigma}(\mathbf{k}) \\ \psi_{-,i,\sigma}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

Termenii notați cu  $k_\perp$  și  $k_\parallel$  reprezintă componenta normală și cea paralelă a impulsului la suprafața Fermi, iar  $v_F$  este viteza Fermi. Cu  $v_\Delta$  am notat  $\frac{\partial \Delta_c}{\partial k_\parallel}$ . Din cauza gap-ului CDW, în cristal apare piezoelectricitatea. Presupunem o cuplare piezoelectrică electron-fonon. Putem aproxima un condensat de perechi cu centre de masă de impuls  $\mathbf{Q}_i$  și spin nul. În cazul dicalcogenidelor cu metale de tranziție, împrăștierea CDW nu afectează gradul de degenerare al condensatului, deci nu vom mai lua în considerare indicele  $i$  de acum înainte. Putem scrie Hamiltonianul de interacțiune a perechii ca fiind<sup>[42]</sup> :

$$H_p = -g \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sum_{a,b,c,d} \eta_2^{a,b} \eta_2^{c,d} \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \times \psi_{c,\uparrow}(\mathbf{k}') \psi_{d,\downarrow}(-\mathbf{k}') \quad (3.22)$$

unde introducem constanta de cuplaj  $g$ . Această constantă va depinde invers proporțional de frecvența Debye<sup>[42]</sup>. Am ales ordinul 2 pentru matricele Pauli pentru a se potrivi cu simetria funcției de undă. Folosind aproximația *mean-field* putem rescrie relația (3.22) sub următoarea formă :

$$H_p = -g \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b} [\Delta_s \psi_{a,\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}) \eta_2^{a,b} \psi_{b,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) + conj. herm.] + \frac{\Delta_s^2}{g} \quad (3.23)$$

unde  $\Delta_s$  este parametrul de ordine complex supraconductor. Până în acest punct am considerat că potențialul chimic este nul și avem simetrie particulă-gol, dar dacă vrem să considerăm și cazul

în care nu mai avem simetrie va trebui să includem un termen legat de potențialul chimic, care ne va introduce o vecinătate în jurul punctului Dirac.

$$H_\mu = -\mu \sum_{a,\sigma} \psi_{a,\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \psi_{a,\sigma}(\mathbf{k}) \quad (3.24)$$

Pentru diagonalizare vom dezvolta (3.21) pentru spațiul Nambu și vom introduce un nou set de matrice Pauli, pe care le vom nota cu  $\tau_\mu$  și care vor fi operatori în spațiul ( $\uparrow k, \downarrow -k$ ).

$$\Psi(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \psi_{+,\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{+,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \\ \psi_{-,\uparrow}(\mathbf{k}) \\ \psi_{-,\downarrow}^\dagger(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Putem acum rescrie Hamiltonianul ca fiind :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger(\mathbf{k}) [v_F k_\perp \tau_0 \eta_3 + v_\Delta k_\parallel \tau_0 \eta_1 + \Delta_s \tau_1 \eta_2 - \mu \tau_3 \eta_0] \Psi(\mathbf{k}) \quad (3.26)$$

Un alt mod de a scrie relația (3.26) este ca :

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \Psi^\dagger \vec{\omega} \Psi \quad (3.27)$$

Folosind această notație putem scrie parametrul de ordine ca fiind :

$$\Delta_s = -g \sum_{\mathbf{k}} \langle \Psi^\dagger(\mathbf{k}) \tau_1 \eta_2 \Psi(\mathbf{k}) \rangle \quad (3.28)$$

În urma diagonalizării vom avea 4 ramuri, două pentru particule și două pentru goluri. Dorim acum să calculăm ecuația benzii interzise, iar pentru a face acest lucru vom apela la metoda funcției Green pentru multe corpuri. Funcția corespunzătoare Hamiltonianului din relația (3.27) va fi dată de :

$$\vec{G}(\mathbf{k}, i\omega_n) = - \int_0^{\frac{1}{k_B T}} dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau [\Psi \Psi^\dagger] \rangle = (i\omega_n - \vec{\omega}_\mathbf{k})^{-1} \quad (3.29)$$

unde  $\omega_n$  reprezintă frecvențele Matsubara. Luând în considerare faptul că matricele Pauli sunt anti-comutative, putem scrie funcția Green :

$$\vec{G}(\omega_n, \mathbf{k}) = -(i\omega_n + \vec{\omega}_\mathbf{k}) \frac{\omega_n^2 + E_k'^2 + 2\mu v_F \tau_3 \vec{\eta} \cdot \vec{k}}{[\omega_n^2 + E_{k,\mu}^2][\omega_n^2 + E_{k,-\mu}^2]} \quad (3.30)$$

unde am notat cu :

$$E_{\mathbf{k}}'^2 = v_F^2 k^2 + \mu^2 + \Delta_S^2 \quad (3.31)$$

Folosind funcția Green introdusă putem rescrie parametrul de ordine din (3.28) sub următoarea formă :

$$2\Delta_S = -\frac{g}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\omega_n=-\infty}^{\infty} Tr[\tau_1 \eta_2 \vec{G}(\omega_n, \mathbf{k})] \quad (3.32)$$

Rezultatul, după calcularea trace-ului :

$$2\Delta_S = \frac{g v_F \Delta_S}{2\pi v_{\Delta}} \sum_{\sigma=\pm 1} \int_0^{\Lambda} dk \frac{\mathbf{k}}{E_{\mathbf{k},\sigma\mu}} \tanh\left(\beta \frac{E_{\mathbf{k},\sigma\mu}}{2}\right) \quad (3.33)$$

unde cu  $\Lambda$  se notează un *cut-off* al impulsului în apropierea nodurilor, iar :

$$E_{\mathbf{k},\sigma\mu} = \sqrt{(v_F \mathbf{k} + \sigma\mu)^2 + \Delta_S^2} \quad (3.34)$$

Vom dori acum să găsim o formulă pentru temperatura critică, punctul nostru de plecare fiind (3.33). Putem vedea la o primă trecere prin relație că putem simplifica  $\Delta_S$  în ambele părți și că suma va conține doi termeni :

$$\frac{4v_{\Delta}\pi}{g v_F} = \int_0^{s_1} \frac{dk \cdot k}{E_{\mathbf{k},+\mu}} + \int_0^{s_{-1}} \frac{dk \cdot k}{E_{\mathbf{k},-\mu}} \quad (3.35)$$

Ne vom îndrepta puțin atenția acum asupra termenului de sub radical din relația (3.34), unde înlocuim  $k$  cu  $s_{\sigma}$ . Acesta îl putem scrie în două moduri - fiecare corespunde uneia dintre integralele din (3.35) în funcție de semnul lui  $s_{\sigma}$ . Din cele două cazuri putem extrage relații care să ne dea  $s_{\sigma}$ . Vom avea :

$$\alpha = (v_F s_{\sigma} + \sigma\mu)^2 + \Delta_S^2 \quad (3.36)$$

Cazul în care  $\sigma$  este + ne va da :

$$v_F s_{+1} = \sqrt{\alpha - \Delta_S^2} - \mu \Rightarrow s_{+1} = \frac{1}{v_F} (\sqrt{\alpha - \Delta_S^2} - \mu) \quad (3.37)$$

iar celălalt caz :

$$v_F s_{-1} = \sqrt{\alpha - \Delta_S^2} + \mu \Rightarrow s_{-1} = \frac{1}{v_F} (\sqrt{\alpha - \Delta_S^2} + \mu) \quad (3.38)$$

Vom lua acum cele două integrale din (3.35) separat. Să începem cu integrala numărul 1 – cea din stânga :

$$I_1 = \int_0^{s_{+1}} \frac{dk \cdot k}{\sqrt{(v_F k + \sigma\mu)^2 + \Delta_S^2}} \quad (3.39)$$

Vom efectua schimbarea de variabilă. Notăm  $v_F k + \mu = x \Rightarrow dx = v_F dk$ , deci  $dk = \frac{dx}{v_F}$ . De asemenea,  $k = \frac{x-\mu}{v_F}$ . Vom putea scrie în acest moment :

$$I_1 = \int_{\mu}^{v_F s_{+1} + \mu} dx \frac{x - \mu}{v_F^2} \frac{1}{\sqrt{x^2 + \Delta_S^2}} \quad (3.40)$$

Înlocuim acum  $s_{+1}$  cu relația (3.37) și vom avea :

$$I_1 = \frac{1}{v_F^2} \int_{\mu}^{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2}} dx \frac{x - \mu}{\sqrt{x^2 + \Delta_S^2}} \quad (3.41)$$

Această integrală o vom desface într-o diferență de două integrale folosind numărătorul fracției. Cele două integrale rezultante vor fi :

$$I_{1,1} = \int_{\mu}^{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2}} dx \frac{x}{\sqrt{x^2 + \Delta_S^2}} = \left( \sqrt{x^2 + \Delta_S^2} \right) \Big|_{\mu}^{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2}} = \sqrt{\alpha} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_S^2} \quad (3.42)$$

$$I_{1,2} = \int_{\mu}^{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2}} dx \frac{1}{\sqrt{x^2 + \Delta_S^2}} = \ln \left| x + \sqrt{x^2 + \Delta_S^2} \right| \Big|_{\mu}^{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2}} = \ln \left| \frac{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2} + \sqrt{\alpha}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_S^2}} \right| \quad (3.43)$$

Astfel, integrala de care noi am plecat (relația (3.41)) va putea fi scrisă sub forma :

$$I_1 = \frac{1}{v_F^2} \left\{ \sqrt{\alpha} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_S^2} - \mu \ln \left| \frac{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2} + \sqrt{\alpha}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_S^2}} \right| \right\} \quad (3.44)$$

Putem parcurge pașii în mod analog pentru integrala din dreapta în relația (3.35), iar rezultatul va fi foarte asemănător :

$$I_2 = \frac{1}{v_F^2} \left\{ \sqrt{\alpha} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_S^2} + \mu \ln \left| \frac{\sqrt{\alpha - \Delta_S^2} + \sqrt{\alpha}}{-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_S^2}} \right| \right\} \quad (3.45)$$

Introducând aceste două rezultate în ecuația (3.35) vom avea :



$$\frac{4\pi v_{\Delta}}{g v_F} = \frac{1}{v_F^2} \left\{ \sqrt{\alpha} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} - \mu \ln \left| \frac{\sqrt{\alpha - \Delta_s^2} + \sqrt{\alpha}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}} \right| + \sqrt{\alpha} - \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} - \mu \ln \left| \frac{-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}}{\sqrt{\alpha - \Delta_s^2} + \sqrt{\alpha}} \right| \right\} \quad (3.46)$$

$$\frac{4\pi v_{\Delta} v_F}{g} = 2\sqrt{\alpha} - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} - \mu \ln \left| \frac{-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}} \right| \quad (3.47)$$

Dacă potențialul chimic tinde spre valori mici putem aproxima  $\alpha$  cu  $v_F^2 s_{\sigma}^2 + \Delta_s^2 = \varepsilon_c^2 + \Delta_s^2$ . Astfel, relația (3.47) va deveni :

$$\frac{4\pi v_{\Delta} v_F}{g} = 2\sqrt{\varepsilon_c^2 + \Delta_s^2} - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} - \mu \ln \left| \frac{-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}} \right| \quad (3.48)$$

Dacă, în plus, potențialul chimic este mult mai mic decât parametrul  $\Delta_s$  vom putea scrie :

$$\frac{4\pi v_{\Delta} v_F}{g} = 2\sqrt{\varepsilon_c^2 + \Delta_s^2} - 2\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} + \mu \ln \left| \frac{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}}{\Delta_s} \right| \quad (3.49)$$

Dacă anulăm potențialul chimic :

$$\frac{4\pi v_{\Delta} v_F}{g} = 2\sqrt{\alpha} - 2\Delta_s \quad (3.50)$$

În cazul în care potențialul chimic este nul va fi valabilă relația  $\alpha = v_F^2 \Lambda^2$ . Înlocuind în (3.50) vom găsi :

$$\frac{2\pi v_{\Delta} v_F}{g} = v_F \Lambda - \Delta_s \quad (3.51)$$

Dar  $\Lambda = \frac{2\pi v_{\Delta}}{g c}$ , deci vom putea scoate parametrul din (3.51). Rezultatul va fi :

$$\Delta_{s, \mu=0} = 2\pi v_{\Delta} v_F g_c^{-1} \left( 1 - \frac{g_c}{g} \right) \quad (3.52)$$

Dacă raportul între potențialul chimic și parametru este mai mic decât 1, logaritmul din (3.48) va putea fi aproximat ca :

$$\ln \left| \frac{-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}} \right| \cong \ln \left( \frac{\Delta_s - \mu}{\Delta_s + \mu} \right) = \ln \left( \frac{1 - \frac{\mu}{\Delta_s}}{1 + \frac{\mu}{\Delta_s}} \right) \cong \ln \left( 1 - \frac{\mu}{\Delta_s} \right)^2 = -\frac{2\mu}{\Delta_s} \quad (3.53)$$

Relația (3.47) va putea fi rescrisă în următorul fel :

$$\frac{4\pi v_{\Delta} v_F}{g} = 2\sqrt{\alpha} - 2\Delta_s + \frac{2\mu^2}{\Delta_s} \quad (3.54)$$

Dacă înlocuim  $\alpha$  și ducem toți termenii într-o parte, vom putea scrie :

$$1 = \frac{g}{2\pi v_{\Delta} v_F} \left( v_F \Lambda - \Delta_s + \frac{\mu^2}{\Delta_s} \right) \quad (3.55)$$

Dacă adăugăm înaintea minusului din paranteză un  $-\Delta_{s,\mu=0}$  și după aceea îl adunăm vom regăsi următoarea relație :

$$1 = 1 + \frac{g}{2\pi v_{\Delta} v_F} \left( \Delta_{s,\mu=0} - \Delta_s + \frac{\mu^2}{\Delta_s} \right) \quad (3.56)$$

$$\Rightarrow \Delta_{s,\mu=0} - \Delta_s + \frac{\mu^2}{\Delta_s} = 0$$

$$\Delta_s^2 - \Delta_{s,\mu=0} \Delta_s - \mu^2 = 0$$

Soluțiile aceste ecuații de gradul doi vor fi :

$$\Delta_{s1,2} = \frac{\Delta_{s,\mu=0} \pm \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 + 4\mu^2}}{2} \quad (3.57)$$

Ne va conveni soluția cu plus, iar la final vom avea :

$$\Delta_s = \frac{\Delta_{s,\mu=0}}{2} \left[ 1 + \sqrt{1 + \frac{4\mu^2}{\Delta_{s,\mu=0}^2}} \right] \quad (3.58)$$

Acest rezultat corespunde cazului în care raportul potențialului chimic și al parametrului este mai mic decât unu. Să vedem acum ce se întâmplă în cazul opus, când raportul parametrului și al potențialului chimic este mai mic decât 1. În acest caz putem aproxima  $\sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2} \cong \mu$ .

Logaritmul din (3.47) va fi atunci :

$$\ln \left( \frac{-\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}}{\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta_s^2}} \right) \cong 2 \ln \left( \frac{\Delta_s}{2\mu} \right) \quad (3.59)$$

Relația (3.47) se va putea scrie atunci ca :

$$\frac{4\pi v_{\Delta} v_F}{g} = 2\sqrt{\alpha} - 2\mu - 2\mu \ln\left(\frac{\Delta_S}{2\mu}\right) \quad (3.60)$$

Înlocuind  $\Lambda$  cu relația găsită în (3.51) și simplificând ce se poate vom avea următoarea relație :

$$\mu \ln\left(\frac{\Delta_S}{2\mu}\right) = \frac{2\pi v_{\Delta} v_F}{g_c} - \frac{2\pi v_{\Delta} v_F}{g} - \mu \quad (3.61)$$

De aici putem extrage o formulă pentru parametrul  $\Delta_S$  :

$$\Delta_S = 2\mu e^{2\pi v_{\Delta} v_F (g_c^{-1} - g^{-1}) \mu^{-1} - 1} \quad (3.62)$$

Ne vom îndrepta atenția din nou asupra relației (3.33). Vom desface relația în două integrale din nou, de data asta fiind integrale care conțin tangenta hiperbolică. Vom începe din nou prin a rezolva integrala din stânga, cea pentru care  $\sigma$  este +. O vom scrie direct în funcție de  $x$ , după ce am realizat schimbarea de variabilă ca și în cazul inițial (relația (3.40)).

$$I'_1 = \int_{\mu}^{v_{FS+1} + \mu} dx \frac{x - \mu}{v_F^2} \frac{1}{\sqrt{x^2 + \Delta_S^2}} \tanh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{x^2 + \Delta_S^2}\right) \quad (3.63)$$

Reamintim faptul că  $\beta = (k_B T)^{-1}$ .

Asemănător cu pașii pe care i-am parcurs în rezolvarea integralei din (3.40), în cazul în care  $\Delta_S \rightarrow 0$ . În acest caz temperatura va tinde la valoarea sa critică. Vom sparge integrala în diferența a două integrale și le vom calcula pe rând pe fiecare. Vom rezolva acum cele două integrale :

$$I'_{1,1} = \int_{\mu}^{\sqrt{\alpha}} dx \tanh\left(\frac{\beta_c x}{2}\right) \quad (3.64)$$

Vom efectua schimbarea variabilei  $\frac{\beta_c x}{2} = y \Rightarrow dy = \frac{\beta_c dx}{2}$ .

$$I'_{1,1} = \int_{\frac{\beta_c \mu}{2}}^{\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}} dy \frac{2}{\beta_c} \tanh(y) \quad (3.65)$$

Această integrală se poate rezolva ușor cu ajutorul unui tabel de integrale, iar rezultatul final va fi :

$$I'_{1,1} = \frac{2}{\beta_c} \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta_c \mu}{2}\right)} \right] \quad (3.66)$$

A doua integrală rezultată din (3.63) se va rezolva tot prin schimbarea variabilei, iar formula pentru aceasta va fi :

$$I'_{1,2} = \int_{\frac{\beta_c}{2}\mu}^{\frac{\beta_c}{2}\sqrt{\alpha}} dy \frac{1}{y} \tanh(y) \quad (3.67)$$

Vom lăsa relația (3.67) sub această formă. Trecând la a doua integrală cu ajutorul căreia vom rescrie (3.33). Reamintim faptul că lucrăm în cazul în care temperatura tinde la valoarea sa critică.

$$I'_2 = \int_{\mu}^{\sqrt{\alpha}} dx \frac{x + \mu}{v_F^2} \cdot \frac{1}{x} \tanh\left(\frac{\beta_c}{2}x\right) \quad (3.68)$$

Aceasta se va despărți în suma a două integrale pe care le vom rezolva prin aceeași schimbare de variabilă ca la integralele precedente. Rezultatele vor fi :

$$I'_{2,1} = \frac{2}{\beta_c} \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta_c \mu}{2}\right)} \right] \quad (3.69)$$

$$I'_{2,2} = \int_{-\frac{\beta_c}{2}\mu}^{\frac{\beta_c}{2}\sqrt{\alpha}} dy \frac{1}{y} \tanh(y) \quad (3.70)$$

Observăm imediat din relațiile (3.69) și (3.66) că  $I'_{1,1} = I'_{2,1}$ .

Suma celor două integrale va fi :

$$I'_1 + I'_2 = \frac{1}{v_F^2} [I'_{1,1} - \mu I'_{1,2} + I'_{2,1} + \mu I'_{2,2}] = \frac{1}{v_F^2} [2I'_{1,1} + \mu(I'_{2,2} - I'_{1,2})] \quad (3.71)$$

Următorul pas este să rezolvăm diferența dintre cele două integrale din paranteza rotundă. Observăm că putem rupe prima integrală în suma a două integrale – prima integrală cu limitele de la  $-\frac{\beta_c}{2}\mu$  la  $\frac{\beta_c}{2}\mu$ , iar a doua cu limitele de la  $\frac{\beta_c}{2}\mu$  la  $\frac{\beta_c}{2}\sqrt{\alpha}$ . Astfel, a doua integrală și integrala  $I'_{1,2}$  se vor reduce, și rămânem cu următoarea integrală :

$$\dot{I} = \int_{-\frac{\beta_c}{2}\mu}^{\frac{\beta_c}{2}\mu} dy \frac{1}{y} \tanh(y) \quad (3.72)$$

Această relație se va dezvolta prin rezolvarea prin părți a integralei. În aproximația *weak-coupling* tangenta hiperbolică a  $\frac{\beta_c \mu}{2}$  va tinde la 1. Rezultatul din paranteza rotunda va fi :

$$I'_{2,2} - I'_{1,2} = 2 \left[ \ln \left( \frac{\beta_c \mu}{2} \right) - \int_0^{\infty} dy \ln(y) \operatorname{sech}^2(y) \right] = 2 \left[ \ln \left( \frac{\beta_c \mu}{2} \right) + \ln \left( \frac{4e^\gamma}{\pi} \right) \right] \quad (3.73)$$

Revenind în ecuația (3.71) vom putea înlocui rezultatul obținut pentru a găsi :

$$I'_1 + I'_2 = \frac{2}{v_F^2} \left\{ \frac{2}{\beta_c} \ln \left[ \frac{\cosh \left( \frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2} \right)}{\cosh \left( \frac{\beta_c \mu}{2} \right)} \right] + \mu \ln \left( \frac{2e^\gamma}{\pi} \beta_c \mu \right) \right\} \quad (3.74)$$

Putem în final să înlocuim în relația inițială și vom avea :

$$1 = \frac{g}{2\pi v_\Delta v_F} \left\{ \frac{2}{\beta_c} \ln \left[ \frac{\cosh \left( \frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2} \right)}{\cosh \left( \frac{\beta_c \mu}{2} \right)} \right] + \mu \ln \left( \frac{2e^\gamma}{\pi} \beta_c \mu \right) \right\} \quad (3.75)$$

Putem rescrie această relație dacă luăm în considerare identitatea :

$$\cosh \left( \frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2} \right) \cong e^{\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}} \quad (3.76)$$

Atunci, (3.75) se va putea scrie ca :

$$1 \cong \frac{g}{2\pi v_\Delta v_F} \left[ \sqrt{\alpha} - \mu + \mu \ln \left( \frac{2e^\gamma}{\pi} \beta_c \mu \right) \right] \quad (3.77)$$

Dacă înlocuim acum  $\alpha$  cu  $v_F^2 \Lambda^2$  și  $\Lambda$  cu  $\frac{2\pi v_\Delta}{g_c}$  vom găsi următoarea relație :

$$\frac{g_c}{g} = 1 + \frac{\mu}{\sqrt{\alpha}} \left[ \ln \left( \frac{2e^\gamma}{\pi} \beta_c \mu \right) - 1 \right] \quad (3.78)$$

Ducem 1 în partea stângă, iar mai apoi înmulțim cu  $\sqrt{\alpha}/\mu$ . Rezultatul va fi :

$$\ln \left( \frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{1}{k_B T_c} \mu \right) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\mu} \left( \frac{g_c}{g} - 1 \right) + 1 \quad (3.79)$$

De aici putem extrage formula pentru temperatura critică :

$$T_c = \frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\mu}{k_B} e^{\sqrt{\alpha}(1-g_c/g)\mu^{-1}-1} \quad (3.80)$$

O altă metodă de a găsi o formulă a temperaturii critice ar fi să ne uităm la relația (3.72) și să o scriem ca :

$$\dot{I} = 2 \int_0^{\frac{\beta_c \mu}{2}} dy \frac{1}{y} \tanh(y) \quad (3.81)$$

Să vedem ce se întâmplă dacă limita superioară este mult mai mică decât 1. Integrala din (3.66) devine :

$$I'_{1,1} = \frac{2}{\beta_c} \ln \left[ \frac{\cosh\left(\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}\right)}{\cosh\left(\frac{\beta_c \mu}{2}\right)} \right] \cong \frac{2}{\beta_c} \ln \left[ \cosh\left(\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}\right) \right] \quad (3.82)$$

$$\dot{I} = 2 \int_0^{\frac{\beta_c \mu}{2}} dy \frac{1}{y} \left( y - \frac{1}{3} y^3 \right) = \beta_c \mu \quad (3.83)$$

Vom putea scrie atunci relația :

$$1 = \frac{g}{4\pi v_\Delta v_F} \left\{ \frac{4}{\beta_c} \ln \left[ \cosh\left(\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}\right) \right] + \beta_c \mu^2 \right\} \quad (3.84)$$

$$1 = \frac{g}{2g_c \sqrt{\alpha}} \left\{ \frac{4}{\beta_c} \ln \left[ \cosh\left(\frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2}\right) \right] + \beta_c \mu^2 \right\} \quad (3.85)$$

Această relație se poate rescrie sub o formă mai convenabilă dacă luăm în considerare faptul că :

$$\ln[\cosh(x)] = \ln(e^x + e^{-x}) - \ln(2) = x + \ln(1 + e^{-2x}) - \ln(2) \quad (3.86)$$

$$\frac{2g_c}{g} = \frac{4}{\sqrt{\alpha} \beta_c} \left[ \frac{\beta_c \sqrt{\alpha}}{2} + \ln(1 + e^{-\beta_c \sqrt{\alpha}}) - \ln(2) \right] + \frac{\beta_c \mu^2}{\sqrt{\alpha}} \quad (3.87)$$

Termenul exponențial din logaritm este mult mai mic decât 1, deci tot acel logaritm se reduce la 0. După ce desfacem parantezele și mai prelucrăm ecuația vom ajunge la următorul rezultat :

$$\frac{g_c}{g} = 1 - \frac{\ln(4)}{\sqrt{\alpha} \beta_c} + \frac{\beta_c \mu^2}{2\sqrt{\alpha}} \quad (3.88)$$

$$\frac{\ln(4)}{\beta_c} - \frac{\beta_c \mu^2}{2} = \sqrt{\alpha} \left( 1 - \frac{g_c}{g} \right) \quad (3.89)$$

Dar, termenul din dreapta egalului din relația (3.89) este chiar  $\Delta_{s,\mu=0}$ . Putem înlocui și  $\beta_c$  pentru a găsi o formulă pentru temperatura critică.

$$(k_B T_c)^2 \cdot 2 \cdot \ln(4) - 2\Delta_{s,\mu=0}(k_B T_c) - \mu^2 = 0 \quad (3.90)$$

Găsim soluțiile pentru temperatura critică și o vom lua pe cea cu semn pozitiv. Relația pentru temperatura critică va fi :

$$T_c = \frac{\Delta_{s,\mu=0} + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}}{2k_B \ln(4)} \quad (3.91)$$

### 3.3. Rolul unui strat izolator în modificarea constantei de cuplaj $g$ .

Ce dorim să facem în cadrul acestui subcapitol este să vedem ce rol are un strat izolator pus în contact cu supraconductorul nostru, mai exact cum se modifică constanta de cuplaj. Pentru a face asta ne vom uita la modificarea frecvenței Debye. Vom presupune că stratul izolator va avea o influență doar până la o anumită grosime, iar în lipsa sa vom avea o frecvență Debye inițială  $\omega_D^0$ . Vom lua axa perpendiculară la contactul dintre materiale ca fiind direcția  $x$ . Forma funcției va fi una exponențială, mai concret :

$$\omega_D(x) = \omega_D^0 f(x) \quad (3.92)$$

Vom pleca de la următoarea relație fenomenologică pentru  $f(x)$  :

$$\omega_D(x) = \omega_D^0 \cdot \frac{\omega_L}{\omega_D^0} \left[ 1 + \left( \frac{\omega_D^0}{\omega_L} - 1 \right) e^{-\frac{x}{L}} \right] \quad (3.93)$$

unde  $L$  este o lungime caracteristică în stratul izolator. Frecvența va scădea pe măsură ce crește stratul izolator, deci  $\omega_L < \omega_D^0$ . Altfel spus, putem scrie frecvența la lungime maximă ca :

$$\omega_L = \frac{\omega_D^0}{n} \quad (3.94)$$

unde  $n$  este un număr real mai mare decât 1. Putem rescrie relația (3.93) introducând raportul din fața parantezei în paranteză și să folosim (3.94) pentru a găsi următoarea relație :

$$\omega_D(x) = \omega_D^0 \left[ \frac{1}{n} + \left( 1 - \frac{1}{n} \right) e^{-\frac{x}{L}} \right] = \omega_D^0 f(x) \quad (3.95)$$

La limită, această formulă ne verifică cerințele inițiale.

$$\lim_{x \rightarrow 0} \omega_D(x) = \omega_D^0 \left[ \frac{1}{n} + \left( 1 - \frac{1}{n} \right) \right] = \omega_D^0 \quad (3.96)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \omega_D^0(x) = \omega_D^0 \cdot \frac{1}{n} = \omega_L \quad (3.97)$$

Știm că  $g \sim \omega_D^{-1}$  [42], deci, dacă frecvența va depinde de acest strat izolator, această modificare se va propaga și în constanta de cuplaj. Vom avea atunci relația :

$$g(x) = \frac{g}{f(x)} \quad (3.98)$$

Să vedem acum ce consecințe are această modificare a constantei de cuplaj. În primul rând are consecințe la nivelul parametrului de ordine atunci când potențialul chimic este nul, adică  $\Delta_{s,\mu=0} \rightarrow \Delta_{s,\mu=0}(x)$ .

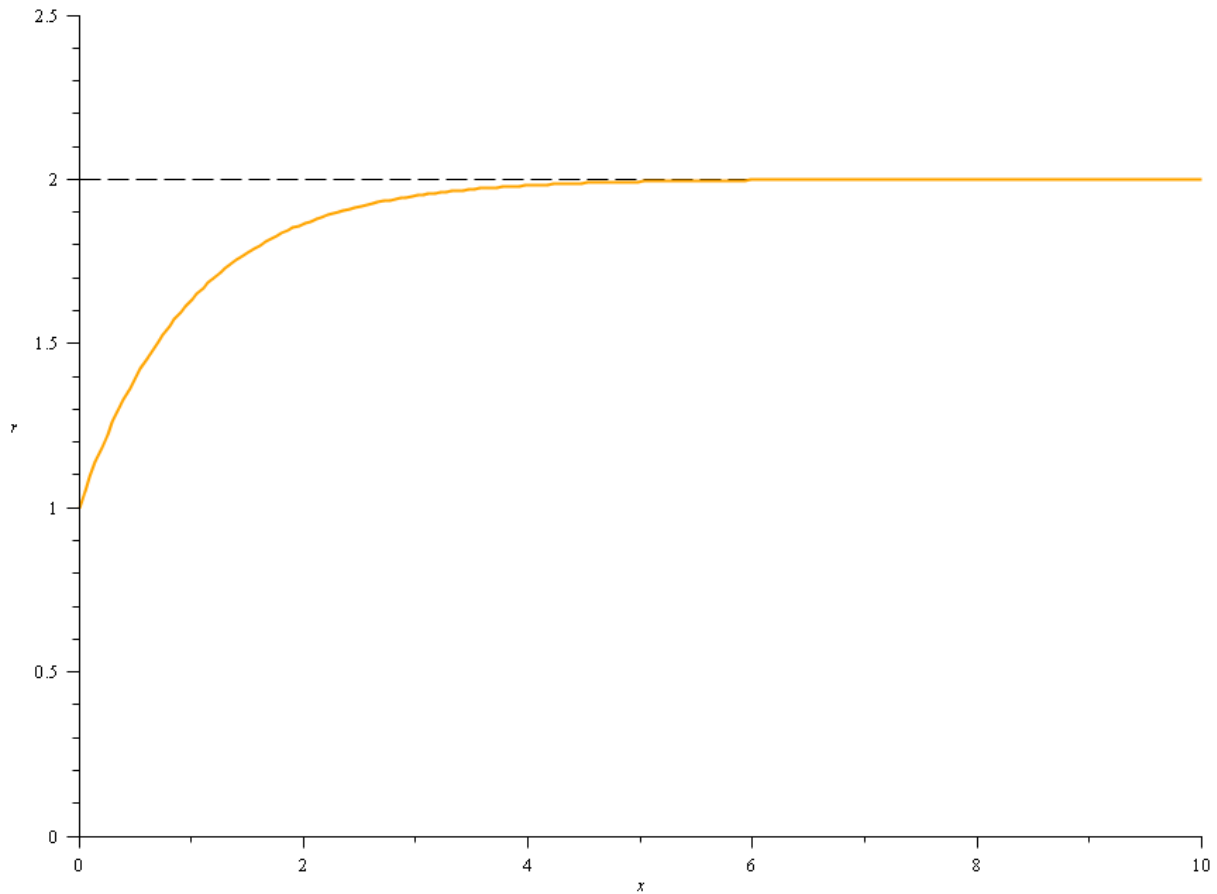
$$\Delta_{s,\mu=0}(x) = 2\pi v_\Delta v_F g_c^{-1} \left[ 1 - \frac{g_c}{g(x)} \right] = 2\pi v_\Delta v_F g_c^{-1} \left[ 1 - \frac{g_c}{g} f(x) \right] \quad (3.99)$$

Să vedem acum raportul între  $\Delta_{s,\mu=0}(x)$  și  $\Delta_{s,\mu=0}$ .

$$r = \frac{\Delta_{s,\mu=0}(x)}{\Delta_{s,\mu=0}} = 1 - \frac{\frac{g_c}{g} [f(x) - 1]}{1 - \frac{g_c}{g}} \quad (3.100)$$

Vom reprezenta grafic acest raport pentru valori arbitrare ale mărimilor care intervin. De exemplu,  $n = 2$ , raportul  $g_c/g = 2/3$  iar  $L = 1$ . Reprezentând astfel  $r$  grafic vom obține figura 3.1.





**Fig. 3.1.** Graficul dependenței lui  $r(x)$ . Se observă creșterea exponențială a funcției urmată de o stabilizare.

Să vedem acum ce modificări sunt aduse la nivelul temperaturii critice, în aproximația cuplării slabe, de către variația cu  $x$  a constantei de cuplaj. Din relația (3.80) putem scrie :

$$T_c(x) = \frac{2e^\gamma}{\pi} \frac{\mu}{k_B} e^{\sqrt{\alpha}(1-\frac{g_c}{g}f(x))\mu^{-1}-1} \quad (3.101)$$

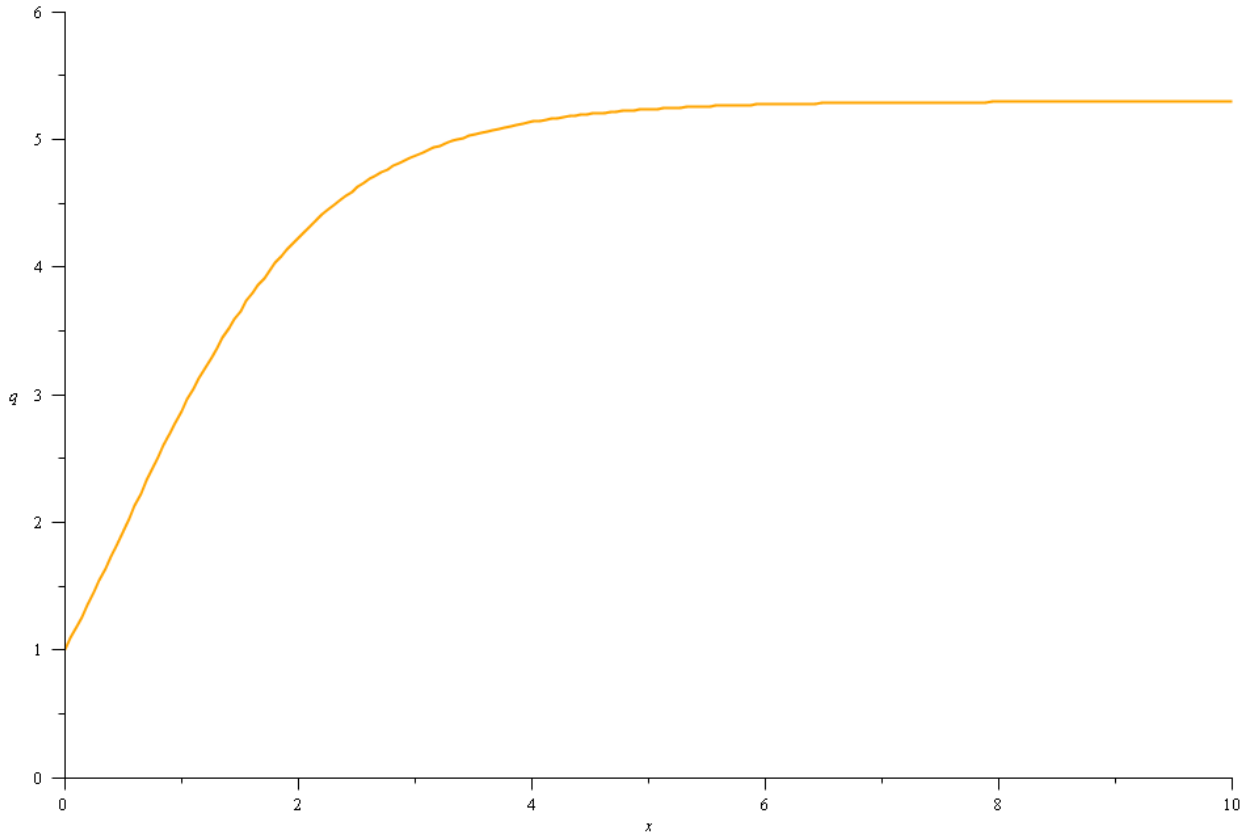
Acum, din relațiile (3.101) și (3.80) putem defini un nou raport :

$$q = \frac{T_c(x)}{T_c} = \frac{e^{\sqrt{\alpha}(1-\frac{g_c}{g}f(x))\mu^{-1}-1}}{e^{\sqrt{\alpha}(1-\frac{g_c}{g})\mu^{-1}-1}} \quad (3.102)$$

$$q = e^{\sqrt{\alpha}(1-\frac{g_c}{g}f(x))\mu^{-1}-1-\sqrt{\alpha}(1-\frac{g_c}{g})\mu^{-1}+1} \quad (3.103)$$

$$q = e^{\frac{\sqrt{\alpha} \cdot g_c}{\mu \cdot g}[1-f(x)]} \quad (3.104)$$

Vom reprezenta grafic și acest raport, alegând din nou câteva valori arbitrare. În cazul de față vom lua  $n = 2$ ,  $\frac{g_c}{g} = 2/3$ ,  $L = 1$  și  $\frac{\sqrt{a}}{\mu} = 5$ . Figura 3.2. este graficul lui  $q(x)$  pentru valorile menționate anterior.



**Fig. 3.2.** Graficul dependenței  $q(x)$ . Observăm din nou o creștere exponențială până la o anumită valoare către care funcția tinde exponențial.

Ultimul lucru pe care îl vom discuta este rolul substratului asupra variației temperaturii critice în aproximația de cuplare tare. Pentru a face acest lucru ne vom folosi de formula dată în relația (3.91). Modificările aduse de stratul izolator vor fi :

$$T_c(x) = \frac{\Delta_{S,\mu=0}(x) + \sqrt{\Delta_{S,\mu=0}^2(x) + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}}{2k_B \ln(4)} \quad (3.105)$$

Folosindu-ne de relația (3.100) vom putea rescrie formula precedentă ca :

$$T_c(x) = \frac{\Delta_{s,\mu=0} \cdot r + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 \cdot r^2 + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}}{2k_B \ln(4)} \quad (3.106)$$

Dar  $r$  este dat tot de relația (3.100) și putem nota fracția din dreapta cu un termen  $b$ .

$$r = 1 - b \quad (3.107)$$

$$T_c(x) = \frac{\Delta_{s,\mu=0} \cdot r + r \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 \cdot + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4) \cdot r^{-2}}}{2k_B \ln(4)} \quad (3.108)$$

Dar putem scrie :

$$\frac{1}{r^2} = 1 + \left( \frac{1}{r^2} - 1 \right) \quad (3.109)$$

$$T_c(x) = r \cdot \frac{\Delta_{s,\mu=0} + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 \cdot + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4) \cdot \left[ 1 + \left( \frac{1}{r^2} - 1 \right) \right]}}{2k_B \ln(4)} \quad (3.110)$$

Vom defini raportul  $k$  ca fiind :

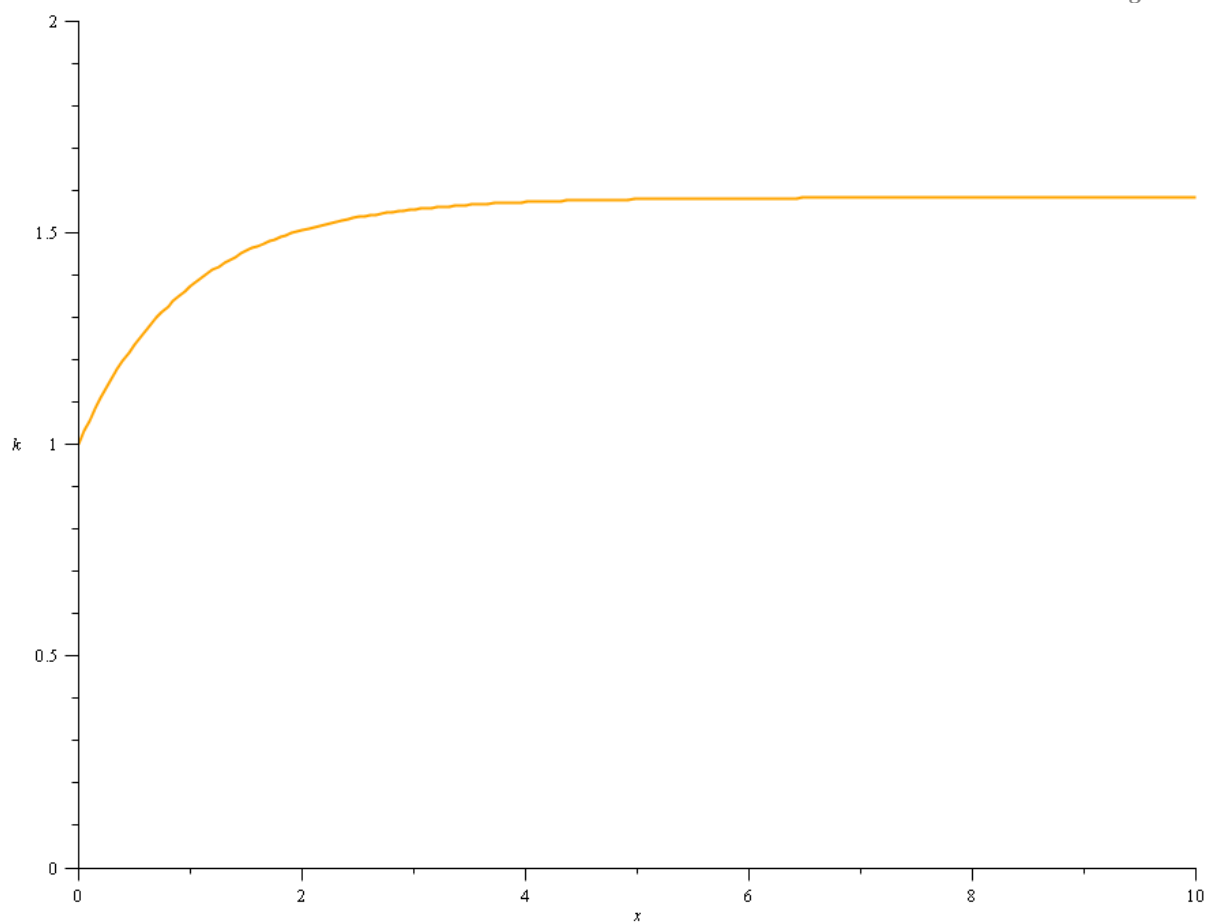
$$k = \frac{T_c(x)}{T_c} \quad (3.111)$$

$$\frac{T_c(x)}{T_c} = \frac{\Delta_{s,\mu=0} \cdot r + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 \cdot r^2 + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}}{2k_B \ln(4)} \cdot \frac{2k_B \ln(4)}{\Delta_{s,\mu=0} + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}} \quad (3.112)$$

$$k = \frac{\Delta_{s,\mu=0} \cdot r + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 \cdot r^2 + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}}{\Delta_{s,\mu=0} + \sqrt{\Delta_{s,\mu=0}^2 + \mu^2 \cdot 2 \cdot \ln(4)}} \quad (3.113)$$

$$k = \frac{r + \sqrt{r^2 + \frac{\mu^2}{\Delta_{s,\mu=0}^2} \cdot 2 \cdot \ln(4)}}{1 + \sqrt{1 + \frac{\mu^2}{\Delta_{s,\mu=0}^2} \cdot 2 \cdot \ln(4)}} \quad (3.114)$$

La fel ca și în celelalte cazuri, vom reprezenta grafic atribuind valori arbitrare mărimilor care intervin. Vom lua  $n = 2$ ,  $\frac{g_c}{g} = 2/3$ ,  $L = 1$  și  $\frac{\mu}{\Delta_{s,\mu=0}} = 1/2$ . Graficul este reprezentat în figura 3.3.



**Fig. 3.3.** Graficul dependenței  $k(x)$ .

## 4. Concluzii

În cadrul acestei lucrări am dorit să evidențiem efectul pe care îl are un strat izolator asupra unei dicalcogenide cu metal de tranziție folosind un model fenomenologic simplu în care stratul aduce modificări la nivelul frecvenței Debye, care mai apoi se propagă în mărimile de interes ale supraconductorului (funcția de gap, temperatura critică). Pentru a ne atinge acest scop am parcurs mai multe aspecte teoretice, începând cu noțiuni generale cum ar fi ecuațiile găsite de frații London sau mărimile caracteristice unui supraconductor, dar și modurile în care putem clasifica supraconductorii. Următorul pas a fost să discutăm despre perechile Cooper – partea de bază a teoriei microscopice BCS, ca mai apoi să tratăm teoria ca atare și să vedem cum se definesc diferite mărimi. La finalul celui de al doilea capitol am văzut modurile prin care teoria BCS este validată, atât experimental cât și prin consecințele sale teoretice. În al treilea capitol ne-am concentrat pe studiul supraconductibilității în materialele dicalcogenide cu metale de tranziție, unde supraconductibilitatea este produsă atât prin mecanisme de cuplare a electronilor, cât și prin CDW. La început am discutat despre câteva aspecte teoretice ale CDW, iar mai apoi am văzut modul în care putem formula diferite mărimi în cadrul modelului propus. Am dezvoltat discuția pentru mărimile de interes pe care urma să le utilizăm la calculele noastre, care au fost efectuate în ultimul subcapitol.

La prelucrarea ecuațiilor se observă că atât în cazul parametrului de ordine cât și al temperaturii critice (fie ea în aproximația cuplării slabe sau în aproximația cuplării tari) raportul între mărimea modificată de influența stratului și mărimea în absența stratului este supraunitar, ceea ce înseamnă că valorile respective cresc în prezența unui strat izolator. Evident, acest fapt aduce cu sine posibilități aplicative, mai ales în ceea ce privește temperatura critică – pentru ca un supraconductor să fie cât mai util în aplicații temperatura sa critică se dorește a fi cât mai mare. Trebuie menționat faptul că acest model este unul relativ simplist iar problema poate fi dezvoltată în continuare, primul pas fiind verificarea empirică a rezultatelor găsite, iar în cazul unor discrepanțe, abordarea mult mai riguroasă a problemei teoretice.

## Bibliografie

- [1] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, Dover Publications Inc., second edition, New York, 2004;
- [2] Tinkham, M. (1994). *Introduction to the phenomenology of high temperature superconductors*. *Physica C: Superconductivity*, 235-240, 3–8. doi:10.1016/0921-4534(94)91301-3;
- [3] W. E. Lawrence and S. Doniach în *Proceedings of the 12th Int. Conference on Low Temp. Phys.*, (Kyoto, 1970), E. Kanda, ed. (Keigaku, Tokyo, 1971), p. 361;
- [4] Uchoa, B., Cabrera, G. G., & Castro Neto, A. H. (2005). *Nodal liquid and s-wave superconductivity in transition metal dichalcogenides*. *Physical Review B*, 71(18). doi:10.1103/physrevb.71.184509;
- [5] Cooper, L. N. (1956). *Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas*. *Physical Review*, 104(4), 1189–1190. doi:10.1103/physrev.104.1189;
- [6] Bardeen, J., Cooper, L. N., & Schrieffer, J. R. (1957). *Microscopic Theory of Superconductivity*. *Physical Review*, 106(1), 162–164. doi:10.1103/physrev.106.162;
- [7] Bardeen, J., Cooper, L. N., & Schrieffer, J. R. (1957). *Theory of Superconductivity*. *Physical Review*, 108(5), 1175–1204. doi:10.1103/physrev.108.1175;
- [8] Bardeen, J. (1955). *Theory of the Meissner Effect in Superconductors*. *Physical Review*, 97(6), 1724–1725. doi:10.1103/physrev.97.1724;
- [9] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, Course of Theoretical Physics Volume 8, Pergamon Press, Oxford, 1963;
- [10] U. Gottlieb, J. C. Lasjaunias, J. L. Tholence, O. Laborde, O. Thomas, R. Madar, *Superconductivity in TaSi<sub>2</sub> single crystals*, *Phys. Review B*. **45**, p. 4803 – 4806, 1992.
- [11] <https://en.wikipedia.org/wiki/Superconductivity>, accesat la data de 15.05.2022;
- [12] <https://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/superconductivity/index.php>, accesat la data de 10.05.2022;
- [13] H. F. Hess, R. B. Robinson, R. C. Dynes, J. M. Valles, Jr., J. V. Waszczak, *Scanning-Tunneling-Microscope Observation of the Abrikosov Flux Lattice and the Density of States near and inside a Fluxoid*, *Phys. Rev. Lett.* **62**, p. 214 – 218, 1989;
- [14] [https://en.wikipedia.org/wiki/High-temperature\\_superconductivity#cite\\_note-arstechnica:-25-years-on-1](https://en.wikipedia.org/wiki/High-temperature_superconductivity#cite_note-arstechnica:-25-years-on-1), accesat la data de 15.05.2022;

- [15] R. Feynman, R. Leighton, M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics – Vol. III, The New Millenium Edition*, Basic Books, New York, 2011;
- [16] [https://portal.ifi.unicamp.br/images/files/graduacao/aulas-on-line/fen-emerg/lecture\\_notes\\_BCS.pdf](https://portal.ifi.unicamp.br/images/files/graduacao/aulas-on-line/fen-emerg/lecture_notes_BCS.pdf), accesat la data de 5.03.2022.
- [17] <http://www.phys.ufl.edu/courses/phy4523/spring12/Sample%202.pdf>, accesat la data de 20.05.2022.
- [18] M. Hofmann, *BCS Theory*, Univ. Heidelberg, Germania, 2021, notițe de curs cu link-ul de acces <https://shorturl.ae/Jn0xM>, accesat la data de 25.05.2022;
- [19] V.L. Ginzburg and L.D. Landau, *On the theory of superconductivity*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20, 1064 (1950). English translation in: L. D. Landau, *Collected papers* (Oxford: Pergamon Press, 1965) p. 546;
- [20] L.P. Gor'kov, *Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau equations in the theory of supraconductivity*, Sov-Phys JETP (U.S.S.R.) 36(9), p. 1364-1367, 1959, tradus de D. ter Haar;
- [21] Josephson, B. D. (1962). *Possible new effects in superconductive tunnelling*. Physics Letters, 1(7), 251–253. doi:10.1016/0031-9163(62)91369-0;
- [22] Giaever, I., & Megerle, K. (1961). *Study of Superconductors by Electron Tunneling*. Physical Review, 122(4), 1101–1111. doi:10.1103/physrev.122.1101;
- [23] Maxwell, E. (1950). *Isotope Effect in the Superconductivity of Mercury*. Physical Review, 78(4), 477–477. doi:10.1103/physrev.78.477;
- [24] Reynolds, C. A., Serin, B., Wright, W. H., & Nesbitt, L. B. (1950). *Superconductivity of Isotopes of Mercury*. Physical Review, 78(4), 487–487. doi:10.1103/physrev.78.487;
- [25] Reynolds, C. A., Serin, B., & Nesbitt, L. B. (1951). *The Isotope Effect in Superconductivity. I. Mercury*. Physical Review, 84(4), 691–694. doi:10.1103/physrev.84.691;
- [26] De Launay, J. (1954). *The Isotope Effect in Superconductivity*. Physical Review, 93(4), 661–665. doi:10.1103/physrev.93.661;
- [27] A. Kolobov, J. Tominaga, *Two-Dimensional Transition-metal Dichalcogenides*, Springer Intl. Publishing, 2016;
- [28] Eftekhari, A. (2017). *Tungsten dichalcogenides (WS<sub>2</sub>, WSe<sub>2</sub>, and WTe<sub>2</sub>): materials chemistry and applications*. Journal of Materials Chemistry A, 5(35), 18299–18325. doi:10.1039/c7ta04268j;

- [29] D. Laughlin, K. Hono, *Physical Metallurgy, Fifth Edition: 3-Volume Set (Volume 1)*, Elsevier, Oxford (UK), 2014;
- [30] Wilson, J. A., Di Salvo, F. J., & Mahajan, S. (1975). *Charge-density waves and superlattices in the metallic layered transition metal dichalcogenides*. *Advances in Physics*, 24(2), 117–201. doi:10.1080/00018737500101391;
- [31] Frohlich, H. (1954). *On the Theory of Superconductivity: The One-Dimensional Case*. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 223(1154), 296–305. doi:10.1098/rspa.1954.0116;
- [32] Bardeen, J. (1990). *Superconductivity and Other Macroscopic Quantum Phenomena*. *Physics Today*, 43(12), 25–31. doi:10.1063/1.881218;
- [33] McMillan, W. L. (1975). *Landau theory of charge-density waves in transition-metal dichalcogenides*. *Physical Review B*, 12(4), 1187–1196. doi:10.1103/physrevb.12.1187;
- [34] Fröhlich, H. (1950). *Theory of the Superconducting State. I. The Ground State at the Absolute Zero of Temperature*. *Physical Review*, 79(5), 845–856. doi:10.1103/physrev.79.845;
- [35] <https://galileo.phys.virginia.edu/classes/752.mf1i.spring03/PeierlsTrans.htm>, accesat la data de 27.5.2022
- [36] <https://musr.ca/theses/Sonier/MSc/node15.html>, accesat la data de 10.06.2022;
- [37] Anju, S., & Mohanan, P. (2021). *Biomedical applications of transition metal dichalcogenides (TMDCs)*. *Synthetic Metals*, 271, 116610. doi:10.1016/j.synthmet.2020.11661;
- [38] Thakar, K., & Lodha, S. (2020). *Optoelectronic and photonic devices based on transition metal dichalcogenides*. *Materials Research Express*, 7(1), 014002. doi:10.1088/2053-1591/ab5c9c;
- [39] Lee, J., Shin, J.-H., Lee, G.-H., & Lee, C.-H. (2016). *Two-Dimensional Semiconductor Optoelectronics Based on van der Waals Heterostructures*. *Nanomaterials*, 6(11), 193. doi:10.3390/nano6110193;
- [40] Ueda, K., & Moriya, T. (1995). *Spin fluctuation spectra and high temperature superconductivity*. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 140-144, 2005–2006. doi:10.1016/0304-8853(94)00938-4;
- [41] Corak, W. S., Goodman, B. B., Satterthwaite, C. B., & Wexler, A. (1956). *Atomic Heats of Normal and Superconducting Vanadium*. *Physical Review*, 102(3), 656–661. doi:10.1103/physrev.102.656;



[42] Castro Neto, A. H. (2001). *Charge Density Wave, Superconductivity, and Anomalous Metallic Behavior in 2D Transition Metal Dichalcogenides*. Physical Review Letters, 86(19), 4382–4385. doi:10.1103/physrevlett.86.4382;

[43] Grosu, I. (2020). *Role of Substrate in Transition Metal Dichalcogenides Superconductivity*. Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. doi:10.1007/s10948-020-05583-2;

## DECLARAȚIE PE PROPRIE RĂSPUNDERE

Subsemnatul, Ienciu Mihai-Sebastian, declar că Lucrarea de licență/diplomă/disertație pe care o voi prezenta în cadrul examenului de finalizare a studiilor la Facultatea de Fizică, din cadrul Universității Babeș-Bolyai, în sesiunea iunie 2022, sub îndrumarea Prof. Dr. Ioan Grosu, reprezintă o operă personală. Menționez că nu am plagiat o altă lucrare publicată, prezentată public sau un fișier postat pe Internet. Pentru realizarea lucrării am folosit exclusiv bibliografia prezentată și nu am ascuns nici o altă sursă bibliografică sau fișier electronic pe care să le fi folosit la redactarea lucrării.

Prezenta declarație este parte a lucrării și se anexează la aceasta.

Data,  
20.06.2022

Nume,  
IENCIU MIHAI-SEBASTIAN  
Semnătură  
