

INSTYTUT FIZYKI
POLITECHNIKA WROCŁAWSKA

UOGÓLNIONE RÓWNANIE NA SZCZELINĘ
DLA UKŁADU FERMIEGO ZE
SPAROWANIEM TYPU S I JEGO
KONSEKWENCJE TERMODYNAMICZNE

Maciej Mulak

Praca doktorska wykonana pod opieką
Prof. dr hab. Ryszarda Gonczarka

Wrocław, 1997 r.

*Autor pracy składa serdeczne podziękowania
Profesorowi Ryszardowi Gonczarkowi za stałą,
troskliwą opiekę naukową i wszechstronną
pomoc w przygotowywaniu rozprawy doktorskiej
oraz podczas całego okresu studiów doktoranckich*

Spis treści

1. Wstęp	1
2. Parametryczne równania na szczelinę dla S -sparowanych układów fermionów	4
2.1. BCS-owski rodowód modelu	4
2.2. Postać funkcji F dla rozszerzonego modelu BCS uwzględniającego pola H i V_s	6
2.3. Parametryzacja uogólnionego równania na szczelinę	6
2.3.1. Krok pierwszy parametryzacji	6
2.3.2. Krok drugi parametryzacji	7
2.3.3. Geometryczna interpretacja τ , $X(\tau)$, $Y(\tau)$	9
2.4. Formalna postać równania na szczelinę dla S -sparowanych układów fermionów	10
2.5. Analiza równań parametrycznych na szczelinę w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$	11
2.6. Uniwersalny stosunek teorii BCS $\Delta(0)/T_c$ w formalizmie równań parametrycznych	12
2.7. Równania parametryczne na szczelinę po wyeliminowaniu λ i ω_D	13
2.8. Analityczne formy równań parametrycznych na szczelinę wygodne przy rozwinięciach w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$	13
2.9. Związek parametru modelu F_∞ i stałej sprzężenia λ	15
3. Termodynamika układów fermionów ze sparowaniem typu S w formalizmie równań parametrycznych na szczelinę. Wyznaczanie funkcji termodynamicznych	16
3.1. Parametryczna postać $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$	16
3.2. Parametryczne postacie wzorów na ΔS i ΔC	19
3.3. Parametryczna postać krytycznej indukcji magnetycznej $B_c(T)$	19
3.4. Wzajemna odpowiedniość wyrażeń parametrycznych na $\Delta C = C_s - C_n$ i $\Delta(T)$	20
3.5. Wnioski płynące ze współzależności ΔC i $\Delta(T)$	21
3.6. Charakterystyczna własność szczeliny $\Delta(T)$ w granicy $T \rightarrow 0$ w formalizmie	22
3.7. Własności ΔC i C_s w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$	22
3.7.1. Granica $T \rightarrow 0$	23
3.7.2. Rola parametru F_∞ w formalizmie	23
3.7.3. Granica $T \rightarrow T_c$	24

4. Zastosowanie formalizmu równań parametrycznych na szczelinę dla rozszerzonego modelu BCS uwzględniającego wpływ H i V_s. Postacie $\Delta(T)$, Ω_s, C_s w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$	25
4.1. Analityczna postać równania na szczelinę $\Delta(T)$ dla rozszerzonego modelu BCS w granicy $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$)	26
4.2. Analityczna postać równania na szczelinę $\Delta(T)$ dla rozszerzonego modelu BCS w granicy $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$)	28
4.3. Postaci analityczne Ω_s i C_s dla modelu rozszerzonego BCS w granicy $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$)	30
4.3.1. Udokładniona postać $\Delta(T)$	30
4.3.2. Analityczna postać $\Delta\Omega$	32
4.3.3. Analityczna postać zredukowanej pojemności cieplnej C_s dla $T \rightarrow T_c$	33
4.4. Postaci analityczne Ω_s i C_s dla modelu rozszerzonego BCS w granicy $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$)	34
5. Zastosowanie formalizmu równań parametrycznych na szczelinę dla rozszerzonego modelu BCS uwzględniającego wpływ H i V_s. Numeryczne obliczenia $\Delta(T)$, Ω_s i C_s	35
5.1. Obliczenia numeryczne szczeliny $\Delta(T)$	35
5.2. Modelowe obliczenia numeryczne $\Delta\Omega$ i C_s	39
6. Zastosowanie formalizmu równań parametrycznych do badania modelu statystycznej cieczy spinowej	42
6.1. Założenia teoretyczne modelu SCS	42
6.2. Funkcja F w modelu statystycznej cieczy spinowej	44
6.3. Obliczenia numeryczne dla dwóch modeli statystycznej cieczy spinowej	44
6.4. Przesłanki fizyczne modelu statystycznej cieczy spinowej	46
7. Lemat o możliwości pojawienia się skoku parametru porządku w układzie fermionów ze sparowaniem typ S	48
7.1. Lemat	51
7.2. Wnioski z Lematu. Nowe formuły dla T_c^*	54
7.3. Egzemplifikacja numeryczna Lematu	55
8. Wykorzystanie parametrycznej formuły $\Delta C(T)$ do konwersji danych eksperymentalnych	60
9. Podsumowanie rezultatów	65
Literatura	66

1. Wstęp

Celem pracy jest przedstawienie metody parametryzacji równania na szczelinę dla uogólnionego modelu *BCS* nadprzewodników. Prowadzi to do zwartego matematycznie formalizmu równań parametrycznych, pozwalającego na zbadanie ogólnych własności dość szerokiej klasy układów fermionów ze sparowaniem typu *S*, przy czym cechy te są bezpośrednimi konsekwencjami termodynamicznymi przyjętej postaci równania na szczelinę energetyczną.

Do układów opisywanych w prezentowanym formalizmie, których równanie na szczelinę może być zapisane w ogólnej formie równania modelowego (2.2), należą wszystkie modele *BCS* uwzględniające wpływ pól zewnętrznych np. magnetycznego i przepływu nadciekłego (zbadane gruntownie w pracy), a także bardziej złożone modele nie-*BCS*-owskie, o zasadniczo zmodyfikowanym jądrze całkowym w równaniu na szczelinę [7, 11] (w pracy zbadano jeden z nich).

Wprowadzona metoda parametryzacji równania szczelinowego, która umożliwia jego rozwikłanie i numeryczne rozwiązanie, pozwala także na analizę szerokiej klasy przebiegów $\Delta(T)$, również istotnie odmiennych od klasycznego *BCS* (krzywe z dodatnią pochodną, patrz np. Rys.7.1). Ponadto, zaproponowany formalizm równań parametrycznych pozwala badać odmienne formy zależności temperaturowej $\Delta(T)$, w których musi wystąpić skok parametru porządku (zrenormalizowanej szczeliny energetycznej), ze skokiem entropii i utajonym ciepłem. Świadczyć o tym mogą również przedstawione w pracy, zaczerpnięte z innych źródeł, ostatnie wyniki eksperymentalne (Rys.7.3) i dobrze już ugruntowane pewne inne obliczenia teoretyczne (Rys.7.1, 7.2).

Punktem wyjścia do konstrukcji analizowanego w pracy modelu równań parametrycznych, jest klasyczne, standardowe równanie *BCS* (2.1) [15] dobrze opisujące szczelinę energetyczną nadprzewodników klasycznych (niskotemperaturowych). Dokonane uogólnienie następuje poprzez wprowadzenie ogólnego jądra całkowego F (kernel function), zamiast występującej w teorii *BCS* funkcji tangens hiperboliczny. Nie narusza to charakterystycznej struktury *BCS*-owskiego równania szczelinowego, a dla prostszych wariantów F zachowane są też korzenie standardowej teorii *BCS* Bardeena, Coopera, Schrieffera.

W celu zapewnienia jednoznaczności używanej terminologii należy podkreślić, że przez *uogólnienie* równania na szczelinę w pracy uważa się postać równania z ogólną funkcją F , podczas gdy *rozszerzony* model *BCS* dopuszcza tylko uwzględnienie pól

zewnątrznych, gdy jądro jest wyrażone przez funkcję tangens hiperboliczny. Ograniczenie rozważań do układów fermionów ze sparowaniem typu S zapewnia weryfikację modelu na gruncie modeli mikroskopowych.

Kluczowy krok rozważań stanowi parametryzacja tak uogólnionego równania na szczelinę (2.2). Wprowadzone parametry mają prostą interpretację geometryczną (rozdz.2.3.3) i są bardzo efektywne w gruntownym badaniu modelu, zarówno metodami analitycznymi (w granicach temperatur $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$), jak i w końcowej fazie, dla obliczeń czysto numerycznych.

Tak dogodne sparowanie parametryzacji uogólnionego równania na szczelinę umożliwia przepisanie go w nowej, formalnej postaci (2.20), która pomimo, iż jest bardzo zwarta i symboliczna, ma bezpośrednie zastosowanie do wyprowadzenia parametrycznej formuły na różnicę potencjałów termodynamicznych, pomiędzy fazą sparowaną i normalną ($\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$) i dalszych pochodnych. Jest to istotna zaleta parametryzacji. Użyta parametryzacja daje także możliwość nieco szerszej interpretacji stałej sprzężenia λ , dopuszczającej jej znacznie większe wartości (rzędu 100 razy). Obiecująco zatem mogą przedstawiać się próby wykorzystania formalizmu do opisu nadprzewodników wysokotemperaturowych. Temat ten, jedynie w pracy zasygnalizowany, wymaga dalszych studiów (rozdz.2.9).

Zastosowanie metod analizy funkcjonalnej do badania sparowanych równań na szczelinę, pozwala wyprowadzić, w dwóch granicach temperatur $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$, ściśle, ogólniejsze, analityczne formuły na temperaturę krytyczną (2.33), temperaturową zależność $\Delta(T)$ (2.35) oraz uogólnić uniwersalny stosunek teorii BCS $\Delta(0)/T_c$, poprzez wyrażenie go za pomocą dwóch charakterystycznych stałych formalizmu Q i F_∞ (2.26).

Warto też podkreślić, że wprowadzenie parametrycznej, *rozwikłanej* formuły na szczelinę, jest dogodne dla obliczeń numerycznych, gdyż zapewnia szybką zbieżność całek. Mimo to, ze względu na samouzgodniony charakter równania na szczelinę, jego efektywne rozwiązywanie jest uciążliwe.

Druga część pracy (rozdz.3 i następne), jest poświęcona licznym konsekwencjom termodynamicznym uogólnionego i sparowanego równania na szczelinę dla S -sparowanych układów fermionów.

W pracy pokazano, że za pomocą sparowanej postaci szczeliny $Y(\tau)$ można wyrazić w sposób formalny (rozdz.3.1, 3.2, 3.3), wszystkie podstawowe wielkości termodynamiczne układu, jak potencjał termodynamiczny Ω , entropię S i pojemność cieplną C (możliwe jest poszerzenie tej listy np. o wielkość indukcji krytycznej B_c), a właściwie ich różnice pomiędzy fazą nadprzewodzącą s i normalną n , odpowiednio więc mamy $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$, $\Delta S = S_s - S_n$, $\Delta C = C_s - C_n$, co jest bardziej wygodne w dalszych rozważaniach.

Szczególnie owocna w fizyczne wnioski jest postać wzoru na $\Delta\Omega$ (3.5) lub (3.6), która pozwala np. od razu wyeliminować pewne hipotetyczne postacie $\Delta(T)$ (patrz Lemat). Można by stwierdzić, że kosztem złożoności wzoru na $\Delta\Omega$ (3.6), zyskujemy możliwość bezpośredniej identyfikacji typu fazy układu (s lub n) i punktu przejścia

fazowego. Określa to znak i miejsce zerowe wyrażenia na $\Delta\Omega$.

W kolejnych częściach pracy (rozdz.4 i 5 oraz 6) podano przykłady zastosowań rozwiniętego formalizmu dla pewnych konkretnych postaci funkcji F .

Jako pierwszy został rozważony rozszerzony model BCS uwzględniający obecność pola magnetycznego H i przepływu nadciekłego V_s (rozdz.4). Wyprowadzono analityczne formuły na $\Delta(T)$, potencjał termodynamiczny i pojemność cieplną fazy s , w dwóch granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$. Otrzymane rezultaty są uogólnieniem znanych wyników klasycznych [5], ale wychodzą poza granice dotychczas stosowanych przybliżeń. Przedyskutowano również, przedstawione graficznie (rozdz.5), wyniki numeryczne dla wybranych wartości pól zewnętrznych H i V_s .

Następnie rozpatrzono przypadek znacznie bardziej złożonej funkcji F , określonej w [7] (na podstawie [9, 10]), odpowiadającej tzw. *statystycznej cieczy spinowej* (6.1), nie będącej już układem BCS -owskim (istotna modyfikacja hamiltonianu). Obliczenia numeryczne przeprowadzono dla dwóch wariantów modelu [3] (rozdz.6). Zarówno dla rezultatów analitycznych jak i numerycznych, dokonano pouczającego porównania ze standardowymi wielkościami BCS [5]. Ponieważ przeprowadzone rozważania dotyczą układów z całkowicie wykluczającymi się stanami, na pewno interesujące jest rozszerzenie badań w oparciu o wyniki zamieszczone w pracy [11].

W rozdz.3.4 przedstawiona została bezpośrednia analityczna zależność pomiędzy $\Delta C = C_s - C_n$ a $\Delta(T)$ oraz, wynikający z niej ogólny, podstawowy warunek na zachowanie się BCS -owskiego typu zależności $\Delta(T)$ przy $T \rightarrow 0$ (3.21). Okazuje się, że jest on bezpośrednią konsekwencją III zasady termodynamiki.

Pouczającą ilustracją wykorzystania formalizmu równań parametrycznych jest również numeryczna procedura odtwarzania wielkości termodynamicznych w oparciu o eksperymentalną postać $\Delta(T)$, po sfitowaniu punktów eksperymentalnych. Technice tej poświęcony jest rozdz.8.

W ostatniej części przedstawiono własności pojemności cieplnej dla analizowanych modeli s -parowanych układów fermionów, w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$ (rozdz.3.7).

Wszystkie zamieszczone wzory i wykonane obliczenia odnoszą się do jednostkowej objętości.

2. Parametryczne równania na szczelinę dla S -sparowanych układów fermionów

2.1. BCS-owski rodowód modelu

Punktem wyjścia naszych rozważań jest standardowe równanie na szczelinę energetyczną w klasycznym modelu BCS [6]

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} \tanh \sqrt{\left(\frac{\xi}{2kT}\right)^2 + \left(\frac{\Delta(T)}{2kT}\right)^2} \quad (2.1)$$

Zakładamy, że dla szerokiej klasy nadprzewodników, w ogólności s -sparowanych układów fermionów – co uzasadnione zostaje w pracy – równanie na szczelinę można zapisać w następującej, ogólniejszej postaci

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)}} F\left(\frac{\xi}{2T}, \frac{\Delta(T)}{2T}, \frac{a}{2T}, \frac{b}{2T}\right) \quad (2.2)$$

gdzie, jak powyżej, $\lambda = N(0) \cdot g$ jest bezwymiarową stałą sprzężenia, a i b odpowiadają polom zewnętrznym, odpowiednio magnetycznemu i przepływowi nadciekłem. Dla układów swobodnych, bez uwzględniania oddziaływań Fermi–cieczowych mamy $a = \mu_B H$, $b = p_F V_s$, gdzie H jest zewnętrznym polem magnetycznym, V_s prędkością przepływu nadciekłego, p_F pędem Fermiego.

$F(l_1, l_2, l_3, l_4)$ jest pewną ogólną funkcją, o której zakładamy jedynie, że jej asymptotyczne własności są analogiczne do określonych w modelu *BCS*. Przyjmujemy zatem tylko, że F jest **ograniczona** i w granicznych przypadkach może być aproksymowana zgodnie z relacjami

$$\begin{aligned} \text{gdy } l_1 \rightarrow 0 \text{ i } |l_3 + l_4| < |l_2| \text{ to } F(l_1, l_2, l_3, l_4) &\sim l_1 \rightarrow 0 \\ \text{gdy } l_1 \text{ lub } l_2 \rightarrow \infty \text{ wówczas } F(l_1, l_2, l_3, l_4) &\equiv F_\infty \end{aligned} \quad (2.3)$$

Warunek $|l_3 + l_4| < |l_2|$ odpowiada w istocie kryterium stabilności fazy nadprzewodzącej, gdyż należy zadbać aby pola zewnętrzne nie zniszczyły sparowania. Warunek drugi jest mocniejszy od pierwszego.

Dokonane uogólnienie tj. wprowadzenie zamiast tangensa hiperbolicznego funkcji F , z zachowaniem sfaktoryzowanej postaci równania (2.2) jest kluczowe dla dalszych rozważań.

Należy zaznaczyć, że tak przyjęty model dopuszcza do badania różne postacie F , które mogą być wyznaczone mikroskopowo dla układów o zadanym hamiltonianie. Odmienne niż w (2.2) przyjąć też można argumenty funkcji F [11]. Istotne bowiem, co warto raz jeszcze podkreślić, okazują się tylko własności asymptotyczne F , w szczególności graniczna wartość F_∞ (2.3), która jest ważnym parametrem modelu. Pojawia się ona we wszystkich końcowych rezultatach na funkcje termodynamiczne (Ω, S, C, B_c) .

Dotychczasowe rozważania noszą charakter fenomenologiczny. Posiadają one jednak bezpośrednie związki z mikroskopowym opisem (w języku np. funkcji Greena) badanych układów [7], gdzie punktem wyjścia jest ich hamiltonian. Na powyższe równanie na szczelinę (2.2) spojrzeć można bowiem, jako na zbiór potencjalnych prób uwzględniania nowych mechanizmów oddziaływania parującego fermiony w układzie do stanu S [9, 10, 13, 14]. Próby uwzględnienia nowych, coraz bardziej wyrafinowanych mechanizmów parowania, poprzez wprowadzenie dodatkowych członów modyfikujących standardowy hamiltonian BCS [15], a w konsekwencji energie kwazicząstek, prowadzą do rekonstrukcji równania na szczelinę.

Należy odnotować, że podjęte zostały próby takiej modyfikacji hamiltonianu BCS do opisu nadprzewodników wysokotemperaturowych (HTSC). Interesującym tego przykładem jest praca [11], gdzie w hamiltonianie uwzględniono przyciąganie fononowe pomiędzy parami (fermiony wiązane w kwadrupole) jako możliwe oddziaływanie w HTSC, co ma ciekawe konsekwencje eksperymentalne. Za takimi związanymi stanami w HTSC (czwórki fermionów), może przemawiać odkrycie połówkowego fluksonu [17, 18]. W eksperymentach tych wartość fluksonu wynosi $\Phi_0/2 = h/4e$, co wskazuje na obecność nośników o ładunku $4e$. Postać funkcji F odpowiadającej temu modelowi, która może być wykorzystana w równaniu (2.2), jest podana w pracy [11]. Inną postacią F jest zaproponowana w [7] w ramach modelu tzw. *statystycznej cieczy spinowej* (SCS) [9, 10], która to funkcja została wykorzystana w pracy (rozdz.5) do przetestowania równania (2.2), przy analizie termodynamiki układu SCS.

Otwartym zagadnieniem pozostają dalsze modyfikacje hamiltonianu i określanie, na ich podstawie, odmiennych postaci F , które mogłyby być wykorzystane w równaniu (2.2).

Wprowadzenie ogólnego jądra całkowego F z zachowaniem sfaktoryzowanej postaci (2.2) umożliwi w końcu kluczową dla rozważań jego parametryzację, przedstawioną poniżej. Dzięki niej możliwe staje się wyprowadzenie rozwikłanych, parametrycznych formuł na szczelinę, szeregu wielkości termodynamicznych oraz ich efektywne numeryczne obliczenie.

2.2. Postać funkcji F dla rozszerzonego modelu BCS uwzględniającego pola H i V_s

Dla rozszerzonego modelu BCS funkcja $F(l_1, l_2, l_3, l_4)$ przyjmuje postać

$$F\left(\frac{\xi}{2T}, \frac{\Delta(T)}{2T}, \frac{\mu_B H}{2T}, \frac{p_F V_s}{2T}\right) = \frac{1}{4} \sum_{i=0}^1 \int_{-1}^1 dz \tanh \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} + (-1)^i \mu_B H + z p_F V_s}{2T} \quad (2.4)$$

Wykorzystanie jej do przeprowadzenia ścisłych obliczeń analitycznych i numerycznych w modelu pozwala określić wpływ pól zewnętrznych H i V_s na takie wielkości jak Δ , Ω , S , C [5].

Można pokazać, że dla powyższego modelu BCS (2.4) $F_\infty = 1$. Ponadto F jest parzystą funkcją pól H i V_s . Zaznaczyć należy, że H i V_s winny być zastąpione przez ich pola efektywne, gdy uwzględnione jest oddziaływanie Fermi–cieczowe [16].

2.3. Parametryzacja uogólnionego równania na szczelinę

Poniżej przedstawiono metodę parametryzacji równania (2.2), która pozwala je rozwiązać (także w obszarach braku stabilności) i obliczyć szczelinę w funkcji temperatury. Przeprowadzona jest ona w dwóch krokach

2.3..1. Krok pierwszy parametryzacji

Wprowadzamy bezwymiarowe zredukowane wielkości

$$U = \frac{\xi}{T_c}, \quad X = \frac{T}{T_c}, \quad Y = \frac{\Delta(T)}{T_c}, \quad A = \frac{a}{T_c}, \quad B = \frac{b}{T_c} \quad (2.5)$$

Zaznaczmy, że formalnie, na tym poziomie ogólności rozważań, T_c uważać można za *dowolną stałą* w skali temperatury (energii). Jej sens fizyczny, jako temperatury krytycznej, będzie określony później (2.24). Podstawiając parametry (2.5) do równania (2.2) przyjmuje ono postać

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_D/T_c} \frac{dU}{\sqrt{U^2 + Y^2}} F\left(\frac{U}{2X}, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) \quad (2.6)$$

Równanie to całkujemy przez części otrzymując

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \int_0^{\omega_D/T_c} d \ln(U + \sqrt{U^2 + Y^2}) F\left(\frac{U}{2X}, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) = \\ &= \left[\ln(U + \sqrt{U^2 + Y^2}) F\left(\frac{U}{2X}, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) \right]_0^{\omega_D/T_c} - \\ &\quad - \int_0^{\omega_D/T_c} \ln(U + \sqrt{U^2 + Y^2}) dF \end{aligned} \quad (2.7)$$

gdzie z uwagi na szybką zbieżność całki przyjęliśmy $\omega_D/T_c \rightarrow \infty$. Podstawiając granicę całkowania dostajemy

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln\left(\frac{\omega_D}{T_c} + \sqrt{(\omega_D/T_c)^2 + Y^2}\right) F\left(\frac{\omega_D/T_c}{2X}, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) - \\ &\quad - \ln(Y) F\left(0, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) - \int_0^{\infty} dU \ln(U + \sqrt{U^2 + Y^2}) \times \\ &\quad \times \frac{\partial}{\partial U} F\left(\frac{U}{2X}, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) \end{aligned} \quad (2.8)$$

gdzie z kolei, wykorzystując własność (2.3) funkcji F (przyjmujemy bowiem $\omega_D/2T \rightarrow \infty$) oraz fakt, że $\Delta \ll \omega_D$ (o około 2 rzędy wielkości), a zatem $Y \ll \omega_D/T_c$, dostajemy w rezultacie równanie (2.2)

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln\left(\frac{2\omega_D}{T_c}\right) F_{\infty} - \ln(Y) F\left(0, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) - \\ &\quad - \int_0^{\infty} dU \ln(U + \sqrt{U^2 + Y^2}) \frac{\partial}{\partial U} F\left(\frac{U}{2X}, \frac{Y}{2X}, \frac{A}{2X}, \frac{B}{2X}\right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

2.3..2. Krok drugi parametryzacji

By uprościć zapis równania (2.9) wprowadzamy teraz bezwymiarowe wielkości

$$\begin{aligned} u &= \frac{U}{2X} = \frac{\xi}{2T} \quad , \quad \tau = \frac{Y}{2X} = \frac{\Delta(T)}{2T} \\ \alpha &= \frac{A}{2X} = \frac{a}{2T} \quad , \quad \beta = \frac{B}{2X} = \frac{b}{2T} \end{aligned} \quad (2.10)$$

które oprócz technicznego uproszczenia zapisu (2.9) posiadają klarowną i pouczającą interpretację geometryczną (rozdz.2.2.3), a parameter τ odgrywa podstawową rolę w dalszej analizie formalizmu równań parametrycznych. Po ich podstawieniu równanie (2.9) przybiera formę

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} &= \ln\left(\frac{2\omega_D}{T_c}\right) F_{\infty} - \ln(Y) F(0, \tau, \alpha, \beta) - \\ &\quad - \int_0^{\infty} du \ln[2X(u + \sqrt{u^2 + \tau^2})] \frac{\partial}{\partial u} F(u, \tau, \alpha, \beta) \end{aligned} \quad (2.11)$$

która po drobnych przekształceniach z wykorzystaniem relacji $Y = 2X \cdot \tau$ oraz asymptotycznej własności F (2.3) zapisana może być w dwóch ekwiwalentnych postaciach

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} = \ln \left(\frac{2\omega_D}{T_c} \right) F_\infty - \ln(2X) F_\infty - \ln(\tau) F(0, \tau, \alpha, \beta) - \\ - \int_0^\infty du \ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) \frac{\partial}{\partial u} F(u, \tau, \alpha, \beta) \end{aligned} \quad (2.12)$$

bądź

$$\begin{aligned} \frac{1}{\lambda} = \ln \left(\frac{2\omega_D}{T_c} \right) F_\infty - \ln(Y) F_\infty - \int_0^\infty du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \times \\ \times \frac{\partial}{\partial u} [F(u, \tau, \alpha, \beta) - F_\infty] \end{aligned} \quad (2.13)$$

Podkreślmy, że obie postacie (2.12) i (2.13) są całkowicie równoważne poprzez związek $Y = 2X \cdot \tau$.

W rezultacie otrzymujemy więc **rozwikłane**, parametryczne równania na szczylinę w funkcji temperatury (w zredukowanych jednostkach). Skrótowo zapisać je można jako

$$Y = Y(\tau) \quad \text{lub} \quad X = X(\tau) \quad (2.14)$$

Są one kluczowe w analizie funkcji termodynamicznych (rozdz.3) oraz umożliwiają bezpośrednie obliczenie $\Delta(T)$, pamiętając, że $Y = \Delta(T)/T_c$, w całym zakresie temperatur $(0, T_c)$ (rozdz.4.1).

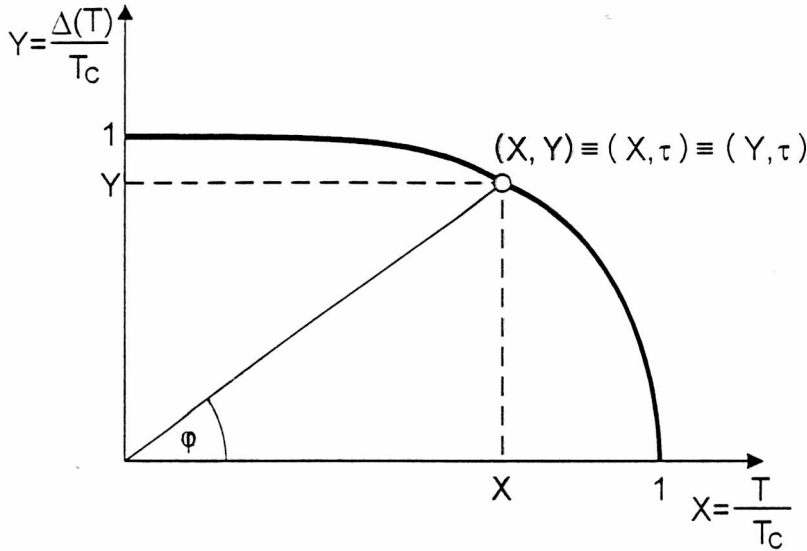
Z (2.12) i (2.13) wynika ponadto, że możemy formalnie traktować X i Y jako funkcje parametru τ , przy czym

$$Y(\tau) = 2\tau \cdot X(\tau) \quad (2.15)$$

dlatego godna uwagi jest bliższa analiza parametru τ oraz $Y(\tau)$ i $X(\tau)$.

2.3.3. Geometryczna interpretacja τ , $X(\tau)$, $Y(\tau)$

Przy definiowaniu parametru τ (2.10), a także $X(\tau)$ i $Y(\tau)$ (2.5), warto odwołać się do elementarnej intuicji geometrycznej. Rozważmy, dla skupienia uwagi, *BCS*-owską krzywą $\Delta(T)$ (w jednostkach zredukowanych)



Rys.2.1

Geometryczna interpretacja $X(\tau)$, $Y(\tau)$ i τ

Rozpatrując zależność $\Delta(T)$, która dla nowych, zredukowanych wielkości przyjmuje postać $Y(X)$, by opisać dowolny punkt krzywej zamiast pary zmiennych (X, Y) możemy stosować wymiennie (Y, τ) lub (X, τ) przy czym

$$\tau = \frac{\Delta(T)}{2T} = \frac{1}{2} \tan(\varphi) \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} X &= R(\tau) \cos(\varphi) \\ Y &= R(\tau) \sin(\varphi) \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$R(\tau) = \frac{\sqrt{1+4\tau^2}}{2\tau} Y(\tau) = \sqrt{1+4\tau^2} X(\tau) \quad (2.18)$$

gdzie $Y(\tau) = 2\tau \cdot X(\tau)$

Zmianie kąta φ od 0 do $\pi/2$ odpowiada zmiana parametru τ od 0 do ∞ . Powyższa interpretacja jest zatem przejściem do biegunowego układu współrzędnych (2.17) i (2.18). Gdy

$$T \rightarrow 0 \Rightarrow \tau \rightarrow \infty \quad X \rightarrow 0 \quad Y = \frac{\Delta(0)}{T_c} \quad \Delta = \Delta(0)$$

$$T \rightarrow T_c \Rightarrow \tau \rightarrow 0 \quad X = 1 \quad Y \rightarrow 0 \quad \Delta = 0 \quad (2.19)$$

Dla zastosowań numerycznych (rozdz.4) istotny jest fakt, że $R(\tau)$ jest wolno zmienną funkcją τ .

W istocie funkcje $Y(\tau)$ i $X(\tau)$ wyznaczają ogólną, parametryczną formę zależności szczeliny od temperatury, co umożliwia badanie **znacznie szerszej klasy** (również nie- BCS -owskich), przebiegów $\Delta(T)$ (patrz rozdz.5). Podstawową zaletą wprowadzonego parametru τ jest możliwość odrębnego badania $Y(\tau)$ tj. szczeliny w funkcji τ oraz $X(\tau)$ tj. zredukowanej temperatury od τ . Pozwala to na opis nawet egzotycznych form krzywych $\Delta(T)$, niekoniecznie funkcyjnych (wielowartościowych).

2.4. Formalna postać równania na szczelinę dla S -sparowanych układów fermionów

Ze struktury równania parametrycznego na szczelinę (2.12) lub (2.13) wyłania się bardziej ogólna formuła równania dla uogólnionego modelu BCS . Przedstawić ją można w postaci

$$\frac{1}{\lambda} = f_0(\tau) - F_\infty \ln(Y) \quad (2.20)$$

lub nieco inaczej, w jeszcze bardziej zwartym zapisie

$$\frac{1}{\lambda} = f(Y, \tau) \quad \text{lub} \quad \frac{1}{\lambda} = f'(X, \tau) \quad (2.21)$$

przy czym funkcja f spełnia warunek (analogicznie dla X)

$$f(Y, \tau) = f_0(\tau) - F_\infty \ln(Y) \quad (2.22)$$

gdzie λ – stała sprzężenia, $f(Y, \tau)$ oraz $f_0(\tau)$ – **funkcje analityczne**. Funkcja f_0 zależy tylko od zmiennej Δ/T , a F_∞ jest stałą formalizmu (patrz. (2.3).

Separowalność $f(Y, \tau)$ lub $f(X, \tau)$ ma podstawowe znaczenie w otrzymywaniu wyrażenia na $\Delta\Omega(\tau)$ (3.6), a więc i w wyprowadzeniu pozostałych funkcji termodynamicznych układu.

Równanie (2.20), o ciekawej własności rozdzielania parametru τ i Y wydaje się najbardziej pojemną formą równania na szczelinę dla S -sparowanego układu fermionów opisywanego w modelu. Mimo wysoce uproszczonego i symbolicznego zapisu jest ono przydatne w rachunkach (rozdz.3).

2.5. Analiza równań parametrycznych na szczelinę w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$

Otrzymane równania parametryczne na szczelinę (2.12) i (2.13) zawierają dwie stałe tj. λ – parametr sprzężenia oraz ω_D – częstość Debye’a, które są dość niewygodne w szczegółowych obliczeniach. Możliwe jest jednak ich zastąpienie przez jedną z pozostałych krytycznych wielkości: temperaturę krytyczną lub szczelinę energetyczną w zerze temperatury. Wymaga to zbadania równań w dwóch skrajnych granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$, co jest wyjątkowo dogodnie dla formuł postaci (2.12) i (2.13).

Granica $T \rightarrow 0$

Gdy $T \rightarrow 0$ wówczas $Y = \Delta(0)/T_c$, $X = 0$, $\tau \rightarrow \infty$ i równanie parametryczne na szczelinę dla (2.13) przyjmuje postać

$$\frac{1}{\lambda} = \ln \frac{2\omega_D}{T_c} \cdot F_\infty - \ln \frac{\Delta(0)}{T_c} \cdot F_\infty$$

skąd

$$\frac{1}{\lambda} = F_\infty \ln \frac{2\omega_D}{\Delta(0)} \quad (2.23)$$

Granica $T \rightarrow T_c$

Z kolei gdy $T \rightarrow T_c$ wówczas $Y = 0$, $(\Delta = 0)$, $X = 1$, $\tau = 0$. Zwróćmy uwagę, że dopiero teraz formalnie nadać można sens fizyczny wielkości T_c , utożsamiając ją z temperaturą krytyczną (dla której znika szczelina).

Z kolei, z równania parametrycznego na szczelinę dla $X(\tau)$ (2.12)

$$\frac{1}{\lambda} = F_\infty \ln \frac{2\omega_D}{T_c} - F_\infty \ln 2 - \int_0^\infty du \ln(2u) \frac{\partial}{\partial u} F(u, 0, 0, 0)$$

gdzie kładziemy $\alpha = \beta = 0$, bowiem dla $T \rightarrow T_c$ znika w ogóle faza s ($\Delta = 0$), a więc przepływ nadciekły, nie ma też potrzeby uwzględniania H . Stąd

$$\frac{1}{\lambda} = F_\infty \ln \frac{\omega_D}{T_c} - Q \quad (2.24)$$

gdzie

$$Q = \int_0^\infty du \ln(2u) \frac{\partial}{\partial u} F(u, 0, 0, 0) \quad (2.25)$$

Q obok F_∞ jest podstawowym parametrem modelu i podobnie jak F_∞ jest liczbą. W przypadku klasycznego BCS $Q = \ln(\pi/2e^C) = -0.128$, z kolei dla rozważanego dalej w pracy przypadku nie-BCS-owskiego (rozdz.6), $Q = 0.517$ (patrz dalej równanie (2.28)).

2.6. Uniwersalny stosunek teorii BCS $\Delta(0)/T_c$ w formalizmie równań parametrycznych

Porównując powyższe równania (2.23) i (2.24) na $1/\lambda$ otrzymujemy stałą teorii *BCS* w nowej postaci

$$\frac{\Delta(0)}{T_c} = 2 \exp\left(\frac{Q}{F_\infty}\right) \quad (2.26)$$

Dla porównania, w standardowym modelu *BCS*

$$\frac{\Delta(0)}{T_c} = \pi/e^C = 1.76 \quad (2.27)$$

Tam bowiem $F_\infty = 1$ oraz $Q = \ln \pi/2e^C$.

Równość (2.26) wydaje się dość ciekawym uogólnieniem klasycznego stosunku $\Delta(0)/T_c$, wyrażonego tu poprzez parametry formalizmu. Również tu musi to być wielkość stała. Jak należało się spodziewać dla modelu typu *BCS*, $\Delta(0)$ musi być proporcjonalna do T_c .

Ponadto interesująca i nietrywialna wydaje się sama korelacja dwóch podstawowych parametrów modelu F_∞ i Q . Ze wzoru (2.26) wynika, że stosunek $\Delta(0)/T_c$ jest niezależny od parametru F_∞ , tym samym od stałej sprzężenia λ . Oznacza to, że mechanizmy oddziaływania, a nie ich wielkość, decydują o wzajemnej relacji pomiędzy $\Delta(0)$ i T_c .

Pouczającym wydaje się zapisanie (2.26) dla układu nie-*BCS*-owskiego zaproponowanego przez Czerwonkę, dla tzw. statystycznej cieczy spinowej [7, 8] (na podstawie [9, 10]). Zgodnie z obliczeniami przedstawionymi w [7], struktura równania szczelinowego układu pokrywa się z (2.2), chociaż funkcja F staje się dość złożona. Bez trudu jednak można określić Q , które przyjmuje następującą postać

$$Q = \int_0^\infty du \ln(2u) \frac{d}{du} \sum_{i=0}^1 \frac{\sinh u}{2 \cosh u + 4 + 3 \exp[(-1)^i u]} \quad (2.28)$$

skąd po numerycznym obliczeniu całki $Q = 0.517$. Ponieważ tu $F_\infty = 5/8$, stąd dla rozważanego modelu, wykorzystując uogólnioną relację (2.26) znajdujemy

$$\frac{\Delta(0)}{T_c} = 2.287 \quad (2.29)$$

$\Delta(0) > \Delta(0)_{BCS}$ o około 23%, co jest znaczącą różnicą. Próba uogólnienia stosunku $\Delta(0)/T_c$ z wykorzystaniem równań parametrycznych na szczelinę (2.26), jest jedną z wielu spotykanych w literaturze metod analizowania uniwersalnych stosunków teorii *BCS*, przede wszystkim $\Delta(0)/T_c$ [19, 20, 21, 22]. Szeroko dyskutowane są też odmienne, w szczególności większe, wartości tej stałej w HTSC [21, 19].

2.7. Równania parametryczne na szczelinę po wyeliminowaniu λ i ω_D

Wykorzystując relacje (2.23) i (2.24) wyprowadzone powyżej, odpowiednio w granicach temperatur $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$, które wiążą pomiędzy sobą wielkości λ , ω_D , T_c oraz $\Delta(0)$, można wyeliminować λ i ω_D z równań (2.12) i (2.13). Podstawiając do nich (2.23) i (2.24) w efekcie otrzymujemy dwa ekwiwalentne równania parametryczne na szczelinę w postaci (2.30) i (2.31) (porównaj (2.12), (2.13)).

$$\begin{aligned} \ln X \cdot F_\infty &= Q - \ln \tau \cdot F(0, \tau, \alpha, \beta) \\ &- \int_0^\infty du \ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) \frac{\partial}{\partial u} F(u, \tau, \alpha, \beta) \end{aligned} \quad (2.30)$$

lub

$$\begin{aligned} \ln Y \cdot F_\infty &= Q + \ln 2 - \\ &- \int_0^\infty du [\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau] \frac{\partial}{\partial u} F(u, \tau, \alpha, \beta) \end{aligned} \quad (2.31)$$



gdzie $X(\tau)$ oraz $Y(\tau)$ zawsze związane są relacją $Y(\tau) = 2\tau \cdot X(\tau)$.

Tak więc spośród czterech parametrów teorii λ , ω_D , T_c oraz $\Delta(0)$ tylko dwa są niezależne.

Powyższe równania (2.30) i (2.31) wydają się najdogodniejsze do obliczeń numerycznych. W pracy wykorzystano (2.31) (rozdz.5). Tę ich własność zawdzięczamy głównie silnej zbieżności wyrażeń podcałkowych.

Podkreślmy, że otrzymane dwie pary równań parametrycznych na szczelinę, odpowiednio z λ i ω_D (2.12) i (2.13) oraz po ich wyeliminowaniu (2.30) i (2.31), są równoważne.

Wynika stąd, że w ramach rozwiniętego formalizmu relacja $\Delta(0)/T_c$ musi być uniwersalna i niezależna od innych parametrów teorii, także dla przypadków nie-BCS-owskich, choć może przyjmować wtedy inne wartości.

2.8. Analityczne formy równań parametrycznych na szczelinę wygodne przy rozwinięciach w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$

Z równań parametrycznych (2.30) i (2.31) można otrzymać inne formy analityczne, wygodne przy rozwinięciach analitycznych w granicznych przypadkach $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$) oraz $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$).

W tym celu wykorzystuje się następujący związek całkowy

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) \frac{\partial}{\partial u} F(u, \tau, \alpha, \beta) - \right. \\
& \quad \left. - \ln(2u) \frac{\partial}{\partial u} F(u, 0, 0, 0) \right] = \\
& = \ln \tau \cdot F(0, \tau, \alpha, \beta) - \int_0^\infty du \left[\frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} - \frac{F(u, 0, 0, 0)}{u} \right] \tag{2.32}
\end{aligned}$$

Istotnie całkując oba składniki po lewej stronie równości (2.32) przez części i wykorzystując własności (2.3) funkcji F dostajemy

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty du \ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) \frac{\partial}{\partial u} F(u, \tau, \alpha, \beta) - \int_0^\infty du \ln(2u) \frac{\partial}{\partial u} F(u, 0, 0, 0) = \\
& = \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) F(u, \tau, \alpha, \beta) \right]_0^\infty - \int_0^\infty du \frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} - \\
& \quad - \left[\ln(2u) \frac{\partial}{\partial u} F(u, 0, 0, 0) \right]_0^\infty + \int_0^\infty du \frac{F(u, 0, 0, 0)}{u} = \\
& = -\ln \tau \cdot F(0, \tau, \alpha, \beta) - \int_0^\infty du \left[\frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} - \frac{F(u, 0, 0, 0)}{u} \right]
\end{aligned}$$

Stosując otrzymany wzór do równania (2.30) otrzymujemy bezpośrednio

$$\ln \frac{T}{T_C} = \frac{1}{F_\infty} \int_0^\infty du \left[\frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} - \frac{F(u, 0, 0, 0)}{u} \right] \tag{2.33}$$

Z kolei posłużymy się związkiem całkowym postaci

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \frac{\partial}{\partial u} [F(u, \tau, \alpha, \beta) - F_\infty] = \\
& = - \int_0^\infty du \frac{F(u, \tau, \alpha, \beta) - F_\infty}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \tag{2.34}
\end{aligned}$$

Analogicznie jak powyżej, poprzez całkowanie przez części i wykorzystanie asymptotycznych własności (2.1) funkcji F oraz podstawienie do równania (2.31), uwzględniając również (2.26), otrzymujemy

$$\ln \frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} = \frac{1}{F_\infty} \int_0^\infty du \frac{F(u, \tau, \alpha, \beta) - F_\infty}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \quad (2.35)$$

Otrzymane równania (2.33) i (2.35) są całkowicie ekwiwalentne, ale ich różne postacie są wygodniejsze przy rozwinięciach analitycznych odpowiednio w granicach $T \rightarrow T_c$ i $T \rightarrow 0$.

2.9. Związek parametru modelu F_∞ i stałej sprzężenia λ

Dzięki formalnej postaci równania parametrycznego na szczelinę (2.20) można dokonać próby interpretacji parametru F_∞ jako czynnika bezpośrednio modyfikującego cego wielkość stałej sprzężenia.

Zauważmy, że po podzieleniu (2.20) stronami przez F_∞ otrzymujemy równanie

$$\frac{1}{F_\infty \lambda} = \frac{f_0(\tau)}{F_\infty} - \ln(Y) \quad (2.36)$$

które ma analogiczną formę, jak dla modelu BCS , gdzie $F_\infty = 1$, gdyż wówczas

$$\frac{1}{\lambda_{BCS}} = f_0(\tau) - \ln(Y) \quad (2.37)$$

Wynika stąd, że

$$\frac{1}{\lambda_{BCS}} \equiv \frac{1}{F_\infty \lambda} \quad (2.38)$$

Zatem w ramach utworzonego formalizmu można rozważać układy o silnym wiązaniu, jeżeli mechanizmy oddziaływania zapewniają dostatecznie małą wartość parametru F_∞ .

3. Termodynamika układów fermionów ze sparowaniem typu S w formalizmie równań parametrycznych na szczelinę. Wyznaczanie funkcji termodynamicznych.

Formalne zapisanie równania na szczelinę (2.20) pozwala wyciągnąć pewne interesujące wnioski o własnościach termodynamicznych S -sparowanego układu fermionów. Skonstruowany model matematyczny umożliwia bowiem analizę obszernej klasy przebiegów $\Delta(T)$, w tym także niestabilnych fizycznie.

Naszym celem jest wykorzystanie uogólnionego równania (2.20), a także otrzymanych w poprzednim rozdziale jawnych form równań parametrycznych na szczelinę $Y(\tau)$ (lub $X(\tau)$) (2.30) i (2.31) do zbadania stabilności układu, przejść fazowych (i ich typu), entropii i pojemności cieplnej lub krytycznego pola magnetycznego (krytycznej indukcji magnetycznej).

Naszą uwagę koncentrujemy tu nad wygodnymi do analizy **różnicami** podstawowych wielkości termodynamicznych, pomiędzy fazą nadprzewodzącą i normalną. Tak więc obiektem naszych zainteresowań są odpowiednio wielkości: $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$, $\Delta S = S_s - S_n$, $\Delta C = C_s - C_n$. Kluczową wielkością jest różnica potencjału termodynamicznego $\Delta\Omega$, która bezpośrednio określa stabilność fazy i punkt przejścia fazowego ($\Delta\Omega = 0$). Pozostałe wielkości, jak ΔS i ΔC są jej pochodnymi.

3.1. Parametryczna postać $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$

Punktem wyjścia niech będzie standardowa formuła [6] pozwalająca zapisać

$$\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n = \int_0^Y \left(\frac{d}{d\Delta'} \frac{1}{g} \right) (\Delta')^2 d\Delta' \quad (3.1)$$

Wzór ten otrzymujemy po zapisaniu różnicy potencjałów termodynamicznych układu cząstek oddziałujących za pośrednictwem energii oddziaływania układu o uzmiennionej stałej sprzężenia (wg pomysłu Pauliego) [6]. Istotnie

$$\begin{aligned}
\Omega_s - \Omega_n &= \int_0^1 d\lambda \frac{1}{\lambda} \langle \lambda \widehat{H}_1 \rangle = -\frac{1}{2} \int_0^g \frac{dg'}{g'} \int d^3x g' \langle \widehat{\psi}_\alpha^\dagger \widehat{\psi}_\beta^\dagger \widehat{\psi}_\beta \widehat{\psi}_\alpha \rangle \simeq \\
&\simeq - \int_0^g dg' \left(\frac{1}{g'} \right)^2 \int d^3x |\Delta(\mathbf{x})|^2 = - \int_0^g dg' \left(\frac{1}{g'} \right)^2 \Delta^2 = \\
&= \int_0^g dg' \frac{d(1/g')}{dg'} \Delta^2 = \int_0^\Delta d\Delta' (\Delta')^2 \left(\frac{d}{d\Delta'} \frac{1}{g} \right) \quad (3.2)
\end{aligned}$$

Mając na uwadze fakt, że $\lambda = N(0) \cdot g$, równanie (3.1) można zapisać w postaci

$$\begin{aligned}
\Delta\Omega &= \Omega_s - \Omega_n = \int_0^\Delta \left(\frac{\partial}{\partial \Delta'} \frac{1}{g} \right) (\Delta')^2 d\Delta' = \\
&= T_c^2 \int_0^{\Delta/T_c} \left(\frac{\partial}{\partial (\frac{\Delta'}{T_c})} \frac{1}{\frac{\lambda}{N(0)}} \right) \left(\frac{\Delta'}{T_c} \right)^2 d \left(\frac{\Delta'}{T_c} \right) = \\
&= N(0) T_c^2 \int_0^Y \left(\frac{\partial}{\partial Y'} \frac{1}{\lambda} \right) (Y')^2 dY' \quad (3.3)
\end{aligned}$$

Następnie wykorzystując formalną postać równania na szczelinę (2.20) i (2.21) przekształcamy $\Delta\Omega$ do postaci sparametryzowanej

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta\Omega}{N(0) T_c^2} &= \int_0^Y \left(\frac{d}{dY'} \frac{1}{\lambda} \right) (Y')^2 dY' = \\
&= \int_0^Y \left[\frac{d}{dY'} f(Y', \tau') \right] (Y')^2 dY' = \\
&= \int_0^Y \frac{d}{dY'} [f_0(\tau') - F_\infty \ln Y'] (Y')^2 dY' = \\
&= \int_0^Y \left[\frac{\partial f_0}{\partial \tau'} \frac{d\tau'}{dY'} - F_\infty \frac{\partial \ln Y'}{\partial Y'} \right] (Y')^2 dY' = \\
&= \int_0^Y \frac{\partial f_0}{\partial \tau'} (Y')^2 \frac{d\tau'}{dY'} dY' - F_\infty \int_0^Y Y' dY' = \\
&= \int_0^\tau \frac{\partial f_0}{\partial \tau'} (Y')^2 d\tau' - F_\infty \frac{Y^2}{2} = \\
&= 4X^2 \int_0^\tau \frac{\partial f_0}{\partial \tau'} (\tau')^2 d\tau' - F_\infty \frac{Y^2}{2} =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= 4X^2 \left\{ \left[f_0(\tau')(\tau')^2 \right]_0^\tau - \int_0^\tau f_0(\tau') (2\tau') d\tau' \right\} - F_\infty \frac{Y^2}{2} = \\
&= -\frac{1}{2}F_\infty Y^2 + 4X^2 f_0 \tau^2 - 8X^2 \int_0^\tau f_0 \tau' d\tau'
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Podstawiając ponownie zależność (2.20) w formie

$$f_0(\tau) = \frac{1}{\lambda} + F_\infty \ln Y(\tau)$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta\Omega}{N(0)T_c^2} &= -\frac{1}{2}F_\infty Y^2 + 4X^2 \tau^2 \left(\frac{1}{\lambda} + F_\infty \ln Y(\tau) \right) - \\
&\quad - 8X^2 \int_0^\tau \left(\frac{1}{\lambda} + F_\infty \ln Y(\tau') \right) \tau' d\tau' = \\
&= F_\infty \left[-\frac{1}{2} Y^2 - 8X^2 \int_0^\tau \ln \frac{Y(\tau')}{Y(\tau)} \tau' d\tau' \right]
\end{aligned}$$

czyli

$$\frac{\Delta\Omega(\tau)}{N(0)T_c^2 F_\infty} = -\frac{1}{2} Y^2(\tau) - 8X^2(\tau) \int_0^\tau d\tau' \tau' \ln \frac{Y(\tau')}{Y(\tau)} \tag{3.5}$$

Ponadto wykorzystując zależność $Y(\tau) = 2\tau \cdot X(\tau)$ wzór (3.5) przekształcić można do postaci

$$\frac{\Delta\Omega(\tau)}{N(0)T_c^2 F_\infty} = -8X^2(\tau) \int_0^\tau d\tau' \tau' \ln \frac{X(\tau')}{X(\tau)} \tag{3.6}$$

Należy podkreślić, że X i Y traktujemy jako funkcje niezależnego parametru τ . Postać (3.6) jest również dogodna do obliczeń numerycznych (rozdz.5). Przypomnijmy, że zmieniając temperaturę od 0 do T_c , τ zmienia się od ∞ do 0. Odpowiada to zmianie Y od $Y(0)$ do 0 i X od 0 do 1.

Do parametrycznej formuły na $\Delta\Omega(\tau)$ doprowadzić nas musi również bezpośrednie wykorzystanie we wzorze (3.3) pełnych postaci równań parametrycznych (2.12) lub (2.13). Powyższe wyprowadzenie wydaje się jednak znacznie bardziej klarowne i zwarte.

3.2. Parametryczne postacie wzorów na ΔS i ΔC

Stosując związki termodynamiczne

$$\Delta S = S_s - S_n = -\frac{\partial \Delta \Omega}{\partial T} \quad (3.7)$$

$$\Delta C = C_s - C_n = -T \frac{\partial^2 \Delta \Omega}{\partial T^2} \quad (3.8)$$

można po zróżniczkowaniu $\Delta \Omega(\tau)$ po $X(\tau)$ (tj. temperaturze) i kilku przekształceniach, otrzymać formuły parametryczne na różnicę entropii

$$\frac{\Delta S(\tau)}{16N(0)T_c F_\infty} = X(\tau) \int_0^\tau d\tau' \tau' \left[\ln \frac{X(\tau')}{X(\tau)} - \frac{1}{2} \right] \quad (3.9)$$

a po powtórny zróżniczkowaniu po $X(\tau)$, na różnicę pojemności cieplnej

$$\frac{\Delta C(\tau)}{16N(0)T_c F_\infty} = X(\tau) \left[\int_0^\tau d\tau' \tau' \left[\ln \frac{X(\tau')}{X(\tau)} - \frac{3}{2} \right] - \frac{1}{2} \frac{X(\tau) \tau}{\partial X(\tau)/\partial \tau} \right] \quad (3.10)$$

W stanie normalnym dla cieczy Fermiego mamy [5]

$$S_n = C_n = \frac{2}{3} \pi^2 N(0) T = \frac{2}{3} \pi^2 N(0) T_c X(\tau) \quad (3.11)$$

Relacje te pozwalają wyseparować z powyższych równań i określić S_s i C_s fazy nadprzewodzącej.

3.3. Parametryczna postać krytycznej indukcji magnetycznej $B_c(T)$

Krytyczne pole magnetyczne lub krytyczna indukcja magnetyczna dla układów S -sparowanych może być określona na podstawie związków termodynamicznych [5, 6].

$$\Delta \Omega = \Omega_n - \Omega_s = \frac{H_c^2}{8\pi} \quad (3.12)$$

Wykorzystując parametryczną postać $\Delta \Omega(\tau)$ (3.6), krytyczna indukcja magnetyczna może być przedstawiona w postaci

$$B_c(T) = B_c(0) \sqrt{\frac{\Delta \Omega}{\gamma_0 N(0) (T_c)^2 F_\infty}} \quad (3.13)$$

gdzie

$$B_c(0) = T_c \sqrt{2\gamma_0 \mu_0 N(0) F_\infty} \quad (3.14)$$

oraz

$$\gamma_0 = \frac{\Delta\Omega(\tau = \infty)}{N(0)(T_c)^2 F_\infty} \quad (3.15)$$

przy czym $\tau = \infty$ odpowiada $T = 0$.

3.4. Wzajemna odpowiedniość wyrażeń parametrycznych na $\Delta C = C_s - C_n$ i $\Delta(T)$

Ze wzorów (3.9) i (3.10) wynika, że

$$\frac{\Delta C}{2N(0)T_c F_\infty} = \frac{\Delta S}{2N(0)T_c F_\infty} - Y(\tau) \frac{\partial Y(\tau)}{\partial X(\tau)} \quad (3.16)$$

Zwróćmy uwagę, że równania parametryczne na $\Delta\Omega(\tau)$, $\Delta S(\tau)$ oraz $\Delta C(\tau)$, razem z wyjściowymi równaniami na szczelinę $Y = Y(\tau)$ i $X = X(\tau)$, pozwalają konsystentnie opisać ogólne własności termodynamiczne układu S -sparowanych fermionów.

Biorąc pod uwagę związek

$$\Delta C = T \frac{\partial \Delta S}{\partial T} \quad (3.17)$$

równanie (3.10) staje się *niejednorodnym liniowym równaniem różniczkowym*. Jego rozwiązanie pozwala wyznaczyć ΔS w postaci

$$\frac{\Delta S}{2N(0)T_c F_\infty} = X \int_X^1 \frac{Y^2(X')}{(X')^3} dX' - \frac{1}{2} \frac{Y^2}{X} \quad (3.18)$$

Stąd bezpośrednio, wykorzystując (3.10) dostajemy

$$\frac{\Delta C}{2N(0)T_c F_\infty} = X \int_X^1 \frac{Y^2(X')}{(X')^3} dX' - \frac{1}{2} \frac{Y^2}{X} - Y \frac{\partial Y}{\partial X} \quad (3.19)$$

Otrzymane wzory dowodzą, że entropia oraz pojemność cieplna w stanie sparowanym, są jednoznacznie zadane dla ustalonej formy zależności szczeliny energetycznej od temperatury.

3.5. Wnioski płynące ze współzależności

ΔC i $\Delta(T)$

Ostatnia zależność warta jest krótkiej dyskusji. Po pierwsze ΔC , a zatem i pojemność cieplna fazy nadprzewodzącej C_s , może być w zupełności określona przez postać parametru porządku (zredefiniowana szczelina energetyczna $Y = \Delta(T)/T_c$) w funkcji temperatury (patrz (3.19)). Dokładniejszej analizie tego faktu poświęcony jest rozdz.8 (metoda konwersji danych eksperymentalnych).

Ponadto, wykorzystując III zasadę termodynamiki (Tw. Nernsta) oraz jej konsekwencje wynikające dla pojemności cieplnej, można wykazać, że w granicy gdy $X \rightarrow 0$ ($T \rightarrow 0$) szczelina (Y) jest wolno zmienną funkcją temperatury (X) (patrz np. poglądowy Rys.2.1).

Z kolei, gdy $X \rightarrow 1$ ($T \rightarrow T_c$) wzór (3.18) pozwala określić skok entropii przy przejściu fazowym

$$\Delta S(X=1) = -N(0)T_c F_\infty Y^2(X=1) \quad (3.20)$$

Powyższy wzór (3.20), znajduje zastosowanie przy badaniu pewnych hipotetycznych krzywych $\Delta(T)$, odbiegających istotnie od przebiegów typu *BCS* (patrz Lemat). Obejmuje on, dzięki swej ogólnej parametrycznej formie, również przypadek **nieciągłego parametru porządku** czyli skoku szczeliny do zera w $T = T_c^*$, tj. dla $X = 1$. Wówczas $Y(X=1) > 0$, zatem $\Delta S(X=1) > 0$ i w konsekwencji pojawia się ciepło utajone przejścia fazowego. Parametryzacja $\Delta(T)$ pozwala zatem na istotne rozszerzenie rozważań o przemiany fazowe I rodzaju. Jak zostanie to pokazane w rozdz.7, skok Δ pojawiać się musi w T_c^* w okolicy T_c , gdzie zawsze $T_c^* > T_c$, dla pewnych określonych $\Delta(T)$ z dodatnią pochodną $\partial\Delta/\partial T$.

Należy zauważyć, że w literaturze rozważane są przypadki przejścia z fazy s do n jako przemiany I rodzaju [23], pomimo iż ten typ przejścia powszechnie uważany jest za II rodzaju, gdyż jest związany z ciągłym zanikiem parametru porządku.

Posługując się z kolei wzorem (3.19), można określić skok pojemności cieplnej w punkcie T_c^* . W tym celu musielibyśmy znać jednak lewostronną pochodną

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial X} \right)_{T \rightarrow T_c}$$

3.6. Charakterystyczna własność szczeliny $\Delta(T)$ w granicy $T \rightarrow 0$ w formalizmie

Zgodnie z III zasadą termodynamiki pojemność cieplna dążyć musi do zera, gdy $T \rightarrow 0$, zarówno w stanie normalnym, zgodnie z (3.11), jak i nadprzewodzącym. W konsekwencji, w granicy $T \rightarrow 0$ ($X \rightarrow 0$) $\Delta C = C_s - C_n \rightarrow 0$.

Badając (3.19), na postać parametryczną ΔC , stwierdzić można, że ten podstawowy warunek termodynamiczny jest spełniony tylko wtedy, gdy szczelina spełnia relację

$$\left(\frac{\partial \Delta(T)}{\partial T} \right)_{T=0} = \left(\frac{\partial Y(X)}{\partial X} \right)_{X=0} = 0 \quad (3.21)$$

Istotnie, szczegółowa analiza (3.19) wykazuje, że dla $X \rightarrow 0$, ($T \rightarrow 0$) pojawiają się wyrazy proporcjonalne do $\partial Y / \partial X$, które w tej granicy muszą także zniknąć.

Warunek zerowania się pochodnej $\left(\frac{\partial Y}{\partial X} \right)_{X=0}$ ma bezpośrednią interpretację geometryczną. Krzywa $\Delta(T)$ nie może w pobliżu $T \rightarrow 0$ gwałtownie rosnąć lub maleć. Musi, przynajmniej w otoczeniu $T = 0$, być funkcją wolnozmienną i prostopadłą do osi rzędnych. Podkreślmy, że jest to bezpośrednia konsekwencja zasady Nernsta.

Warunek (3.21) narzuca więc pewne ograniczenie dla klasy nadprzewodników opisywanych w rozważanym tu reżimie uogólnionego *BCS*, tj. opisywanych równaniem parametrycznym (2.20). Nadprzewodniki nie spełniające warunku (3.21) nie mogą być opisywane za pomocą modeli spełniających warunek (2.20)

Otrzymany warunek plateau krzywej $\Delta(T)$, świadczy o silnej korelacji par Coopera w granicy $T \rightarrow 0$, w modelach objętych rozważanym formalizmem.

3.7. Własności ΔC i C_s w granicach

$$T \rightarrow 0 \text{ i } T \rightarrow T_c$$

Dokonajmy modyfikacji wzoru (3.19) pozwalającej na wyciągnięcie kilku kolejnych wniosków, tym razem dotyczących własności pojemności cieplnej fazy nadprzewodzącej. Całkując (3.19) przez części otrzymujemy

$$\frac{\Delta C}{16N(0)T_c F_\infty} = X \int_X^1 \frac{Y^2(X') - Y^2(X)}{(X')^3} dX' - \frac{1}{2}XY^2 - Y \frac{\partial Y}{\partial X} \quad (3.22)$$

3.7..1. Granica $T \rightarrow 0$

Głębsza analiza formuły (3.22) wykazuje, że w granicy $X \rightarrow 0$ ($T \rightarrow 0$) ΔC można wyrazić za pomocą dwóch grup członów, odpowiednio proporcjonalnych do X i $\partial Y/\partial X$, a zatem

$$\Delta C = -aX - b \frac{\partial Y(X)}{\partial X} \quad (3.23)$$

przy czym, w ogólności, nie możemy ustalić znaku stałych a i b . Jawne zapisanie ich znaku wprowadzamy dla zgodności z dalszymi rozważaniami.

W podstawowym modelu BCS , realizowanym z dużą dokładnością w klasycznych nadprzewodnikach niskotemperaturowych (LTSC), $a = \frac{2}{3}\pi^2 N(0)T_c$, stąd zaś $C_s \sim \partial Y(X)/\partial X$, gdy uwzględnimy (3.11) oraz fakt, że $\Delta C = C_s - C_n$. Jednakże, w układach bardziej złożonych, np. HTSC, powyżej wprowadzone stałe mogą być dowolne lub a może zostać pominięte. Wówczas, ponieważ $\partial Y(X)/\partial X < X$

$$C_s \sim X \quad (3.24)$$

Zauważmy, że zgodnie z (3.18) i (3.19) podobne własności jak ΔC posiada również ΔS ($\Delta S \rightarrow 0$ gdy $T \rightarrow 0$).

3.7..2. Rola parametru F_∞

Prezentowany formalizm zawiera charakterystyczny, dodatkowy parametr F_∞ , występujący we wszystkich otrzymanych wielkościach termodynamicznych. W praktyce, w celu obliczenia ich wartości musimy znać wartość F_∞ . Poniżej przedstawiono kilka jego podstawowych własności. Jego obecność należy wiązać z mechanizmami oddziaływania kwazicząstek. Dlatego można szukać jego koneksji np. z teorią silnego sprzężenia Eliashberga [24] (gdzie pojawia się funkcja spektralna), wymaga to jednak precyzyjniejszych analiz.

Rozważmy znaczenie parametru F_∞ . Zauważmy przede wszystkim, że odpowiedni dobór F_∞ pozwala wyeliminować człon liniowy z C_s , zgodnie z wyrażeniem (3.23).

Przedział dopuszczalnych wartości F_∞ może być określony z warunku stabilności układu, np. zawsze musimy założyć, że $C_s \geq 0$. Taka sytuacja stwarza pewien problem dla niektórych modeli rozważanych w omawianym formalizmie. Może zająć bowiem przypadek, gdy C_s dąży do zera w sposób nieliniowy (jak w modelu BCS), istnieje przedział temperatur, gdzie C_s staje się ujemne. Jest to sytuacja nie do zaakceptowania. Jeżeli zatem będziemy wymagać aby $C_s \geq 0$ dla wszystkich temperatur, wówczas w konsekwencji C_s może dążyć do zera liniowo z temperaturą.

Z sytuacjami takimi stykamy się podczas przedstawionych poniżej konkretnych obliczeń numerycznych modelu (rozdz.6.3). Lokalne maksimum szczeliny energetycznej implikuje bowiem lokalne minimum pojemności cieplnej nadprzewodnika, która w konsekwencji mogłaby przyjmować (teoretycznie) ujemne wartości.

3.7..3. Granica $T \rightarrow T_c$

Rozważmy z kolei własności ΔC , gdy $T \rightarrow T_c$ ($X = 1$). W oparciu o (3.22) można zauważyć, że gdy $X \rightarrow 1$ ($Y \rightarrow 0$), człony pierwszy i drugi stają się małe dla ciągłych przejść fazowych, zatem na kształt zależności ΔC wpływ ma tylko trzeci człon $-Y(X)\frac{\partial Y(X)}{\partial X}$. W konsekwencji ΔC osiągać może wartość niezerową (skok pojemności cieplnej w punkcie przejścia) tylko wtedy, gdy

$$\frac{\partial Y(X)}{\partial X} \rightarrow \infty \quad (3.25)$$

gdyż Y zawsze dąży do zera.

Odwracając sytuację oznacza to, że jeżeli nachylenie krzywej $\Delta(T)$ przy $T = T_c$ jest skończone (tzn. $\frac{\partial Y(X)}{\partial X} < \infty$, $X = 1$), to $\Delta C = 0$, czyli nie ma skoku pojemności cieplnej w punkcie przejścia fazowego.

Zauważmy też, że $\Delta S = 0$ w $T = T_c$ zawsze, dla ciągłych przejść fazowych.

Opisana sytuacja nie odnosi się do nieciągłych przejść fazowych, gdyż skok entropii (3.20) implikuje nieciągłość pojemności cieplnej.

4. Zastosowanie formalizmu równań parametrycznych na szczelinę dla rozszerzonego modelu *BCS* uwzględniającego wpływ H i V_s .

Postacie $\Delta(T)$, Ω_s , C_s
w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$

Istnieje kilka równoważnych metod analitycznego badania formuł na szczelinę w dwóch granicach temperatur $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$) oraz $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$). Metoda wykorzystująca wzory (2.33) i (2.35), otrzymane bezpośrednio z ogólnych równań parametrycznych (2.30) i (2.31) (odpowiednio dla $T \rightarrow T_c$ i $T \rightarrow 0$), wydaje się szczególnie efektywna i pouczająca.

W rozdziale tym do wspomnianych wzorów zastosowana jest funkcja F postaci (2.4). Naszym celem jest określenie analitycznych formuł na $\Delta(T)$ oraz podstawowe funkcje termodynamiczne w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$, z uwzględnieniem zewnętrznych pól H i V_s . Otrzymane rezultaty w liniowym przybliżeniu przechodzą w znane z literatury [5] wzory dla modelu *BCS*, opisujące wspomniane wielkości. Możliwe są także dokładniejsze poprawki przez uwzględnienie dalszych członów rozwinięć (patrz np. (4.1)), lecz ich rola wydaje się coraz mniej znacząca. Wyniki te uzupełnione są o przedstawione w następnym rozdziale rezultaty numeryczne, dla przykładowych wartości pól zewnętrznych.

4.1. Analityczna postać równania na szczelinę $\Delta(T)$ dla rozszerzonego modelu BCS w granicy $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$)

Wykorzystując wzór (2.33) dokonujemy rozwinięcia jego wyrażenia podcałkowego względem małych parametrów τ oraz H i V_s (wymóg stabilności fazy s) i ograniczamy się do dwóch członów rozwinięcia ($\tau, \alpha, \beta \rightarrow 0$). Wówczas

$$\begin{aligned} \frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} - \frac{F(u, 0, 0, 0)}{u} &= \left[\frac{d \left(\frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \right)}{du} \right]_{\tau=\alpha=\beta=0} (\tau + \alpha + \beta) + \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{d^2 \left(\frac{F(u, \tau, \alpha, \beta)}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \right)}{du^2} \right]_{\tau=\alpha=\beta=0} (\tau + \alpha + \beta)^2 \end{aligned} \quad (4.1)$$

gdzie przypomnijmy, że F jest postaci (2.4).

Przy rozwinięciu $\sqrt{u^2 + \tau^2}$ względem małego τ argument funkcji $\tanh$ możemy zapisać jako

$$\sqrt{u^2 + \tau^2} + (-1)^i \frac{\mu_B H}{2T} + \frac{z p_F V_s}{2T} \simeq u + \frac{1}{2} \frac{\tau^2}{u} + (-1)^i \frac{\mu_B H}{2T} + \frac{z p_F V_s}{2T} \quad (4.2)$$

a zatem za τ, α, β przyjmujemy odpowiednio: $\frac{1}{2} \frac{\tau^2}{u}$, $(-1)^i \frac{\mu_B H}{2T}$, $\frac{z p_F V_s}{2T}$. Ograniczając się **jedynie do pierwszego** członu rozwinięcia (4.1), wzór (2.33) przyjmuje postać

$$\ln \frac{T}{T_c} = \frac{1}{F_\infty} \int_0^\infty du \frac{1}{4} \sum_{i=0}^1 \int_{-1}^1 dz \frac{d}{du} \left(\frac{\tanh u}{u} \right) \left(\frac{1}{2} \frac{\tau^2}{u} + (-1)^i \frac{\mu_B H}{2T} + \frac{z p_F V_s}{2T} \right) \quad (4.3)$$

stąd zaś

$$\ln \frac{T}{T_c} = \int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{d}{du} \left(\frac{\tanh u}{u} \right) \frac{1}{4} \cdot 2 \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta^2(T)}{4T^2} = -\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2} \frac{\Delta^2}{T_c^2} \quad (4.4)$$

Postać (4.4) została otrzymana z (4.3). Po wysumowaniu po i , wycalkowaniu po z , udziały pochodzące od H i V_s zerują się (każdy z osobna), natomiast dzięki pierwszemu wyrazowi (niezależnemu od i oraz z) dwukrotnie pojawi się czynnik 2. Ponadto przyjęto $F_\infty = 1$ (dla rozszerzonego BCS), $\tau = \frac{\Delta(T)}{2T}$ oraz wykorzystano relację całkową

$$\int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{d}{du} \left(\frac{\tanh u}{u} \right) = -\frac{7\zeta(3)}{\pi^2} \quad (4.5)$$

gdzie $\zeta(x)$ jest funkcją Riemanna.

Uwzględniając drugi człon rozwinięcia (4.1) zauważyć można, że po rozpisaniu $(\tau + \alpha + \beta)^2$, odpowiednie iloczyny mieszane przyrostów nie dają wkładu w sumowaniu po i oraz całkowaniu po z . Ponieważ pomijamy człon $z \tau^4$, tak więc efektywne okazują się jedynie przyrosty

$$\frac{\mu_B^2 H^2}{4T^2} + \frac{z^2 p_F^2 V_s^2}{4T^2}$$

Dodatkowo rachunki upraszcza też fakt, że dla tych przyrostów mianownik $\sqrt{u^2 + \tau^2}$ nie ulega zmianie. Stąd pojawiający się czynnik $1/u$ (dla $\tau \rightarrow 0$).

Powyższe fakty pozwalają ostatecznie zapisać drugi człon rozwinięcia (4.1) w postaci

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \int_0^\infty du \frac{1}{4} \sum_{i=0}^1 \int_{-1}^1 dz \frac{1}{u} \frac{d^2}{du^2} \tanh u \left(\frac{(+1)^i \mu_B^2 H^2}{4T^2} + \frac{z^2 p_F^2 V_s^2}{4T^2} \right) = \\ = \int_0^\infty du \frac{1}{4} \int_{-1}^1 dz \frac{1}{u} \frac{d^2 \tanh u}{du^2} \left(\frac{\mu_B^2 H^2}{4T^2} + \frac{z^2 p_F^2 V_s^2}{4T^2} \right) = \\ = \frac{1}{4} \int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{d^2 \tanh u}{du^2} \left(\frac{2\mu_B^2 H^2}{4T^2} + \frac{2p_F^2 V_s^2}{12T^2} \right) = \\ = \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{-14\zeta(3)}{\pi^2} \right) \left(\frac{\mu_B^2 H^2}{2T^2} + \frac{p_F^2 V_s^2}{6T^2} \right) = \\ = \frac{-7\zeta(3)}{8\pi^2} \left(\frac{2\mu_B^2 H^2}{T^2} + \frac{2}{3} \cdot \frac{p_F^2 V_s^2}{T^2} \right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

gdzie z kolei wykorzystaliśmy związek całkowy

$$\int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{d^2 \tanh u}{du^2} = -\frac{14\zeta(3)}{\pi^2}, \quad (4.7)$$

Ostatecznie, zbierając razem pierwsze dwa człony rozwinięcia (2.33) otrzymujemy

$$\ln \frac{T}{T_c} = -\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2} \left(\Delta^2 + 2\mu_B^2 H^2 + \frac{2}{3} p_F^2 V_s^2 \right) \quad (4.8)$$

a rozwijając $\ln$ wokół 1, (4.8) upraszcza się do postaci

$$\frac{T}{T_c} - 1 = -\frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2} \left(\Delta^2 + 2\mu_B^2 H^2 + \frac{2}{3} p_F^2 V_s^2 \right) \quad (4.9)$$

skąd

$$\Delta = \left[\frac{8\pi^2 T_c^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) - 2\mu_B^2 H^2 - \frac{2}{3} p_F^2 V_s^2 \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.10)$$

Otrzymany wzór jest zgodny z [5] dla klasycznego *BCS* (gdzie $H = V_s = 0$)

$$\Delta = \left[\frac{8\pi^2 T_c^2}{7\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (4.11)$$

Zatem, zewnętrzne pola H i V_s pomniejszają wartość szczeliny, przy czym ich wpływ systematycznie wzrasta gdy $T \rightarrow T_c$ powodując znikanie szczeliny w temperaturach niższych od T_c .

Z obliczeń numerycznych zilustrowanych na Rys.(4.2) i Rys.(4.3), można wnioskować, że zewnętrzne pole magnetyczne wywiera **znacznie** istotniejszy wpływ na zmiany wielkości szczeliny, niż efekty związane z energią mechaniczną przepływu nadciekłego. Zakładamy wtedy oczywiście, że obie energie oddziaływania, w jednostkach zredukowanych (bezwymiarowych), są jednakowe.

4.2. Analityczna postać równania na szczelinę $\Delta(T)$ dla rozszerzonego modelu *BCS* w granicy $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$)

Aby z kolei określić analityczną postać $\Delta(T)$ w naszym modelu z F o postaci (2.4), w granicy $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$), wykorzystujemy wzór (2.35). W tym przypadku argumenty funkcji F są duże, możemy więc zastąpić *tangens hiperboliczny* przez funkcję eksponencjalną (wygodniejszą przy całkowaniu) zgodnie z relacją

$$\tanh \psi \simeq 1 - 2 \exp(-2\psi) \quad (4.12)$$

Funkcję F można zapisać w następującej postaci

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{4} \sum_{i=0}^1 \int_{-1}^1 dz \tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + (-1)^i \frac{\mu_B H}{2T} + \frac{z p_F V_s}{2T} \right) = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{i=0}^1 \int_{-1}^1 dz \left[1 - 2 \exp \left(-2\sqrt{u^2 + \tau^2} - (-1)^i \frac{\mu_B H}{T} - \frac{z p_F V_s}{T} \right) \right] = \\ &= 1 - \frac{1}{2} \sum_{i=0}^1 \int_{-1}^1 dz \exp \left(-2\sqrt{u^2 + \tau^2} - (-1)^i \frac{\mu_B H}{T} - \frac{z p_F V_s}{T} \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

rozpisując sumę

$$\begin{aligned} F &= 1 - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dz \exp \left(-2\sqrt{u^2 + \tau^2} - \frac{\mu_B H}{T} - \frac{z p_F V_s}{T} \right) - \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dz \exp \left(-2\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{\mu_B H}{T} - \frac{z p_F V_s}{T} \right) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Obie całki obliczyć można przez proste podstawienie. Po wycalkowaniu mamy

$$\begin{aligned}
F &= 1 - \frac{1}{2} \cdot 2 \frac{T}{p_F V_s} \exp(-2\sqrt{u^2 + \tau^2}) \exp\left(-\frac{\mu_B H}{T}\right) \sinh\left(\frac{p_F V_s}{T}\right) - \\
&\quad - \frac{1}{2} \cdot 2 \frac{T}{p_F V_s} \exp(-2\sqrt{u^2 + \tau^2}) \exp\left(+\frac{\mu_B H}{T}\right) \sinh\left(\frac{p_F V_s}{T}\right) = \\
&= 1 - 2 \exp(-2\sqrt{u^2 + \tau^2}) \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T}
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Całe wyrażenie podcałkowe w (2.35) przyjmuje ostatecznie postać

$$-2 \exp(-2\sqrt{u^2 + \tau^2} - \ln \sqrt{u^2 + \tau^2}) \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \tag{4.16}$$

Ponieważ dla dużych τ powyższe wyrażenie staje się małe, więc rozwijamy je wokół maksimum

$$-2 \exp\left(-2\tau - \ln \tau - \frac{1}{\tau} u^2\right) \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \tag{4.17}$$

Wstawiając tak przekształcone wyrażenie podcałkowe do wzoru (2.35) otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\ln \frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} &\simeq \frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} - 1 = \\
&= -2 \exp(-2\tau) \frac{1}{\tau} \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \int_0^\infty \exp(-u^2/\tau) du = \\
&= -2 \exp(-\Delta/T) \left(\frac{1}{\tau}\right) \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \frac{\sqrt{\pi} \cdot \sqrt{\tau}}{2}
\end{aligned} \tag{4.18}$$

gdzie, na podstawie [50]

$$\int_0^\infty \exp(-q^2 x^2) dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2q} \quad (q > 0) \tag{4.19}$$

A zatem

$$\Delta = \Delta(0) - 2 \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right) \frac{\sqrt{2\pi T}}{2\sqrt{\Delta}} \Delta(0) \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \tag{4.20}$$

stąd

$$\Delta = \Delta(0) - \sqrt{2\pi T \Delta} \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right) \cosh\left(\frac{\mu_B H}{T}\right) \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \tag{4.21}$$

Wzór ten redukuje się do znanej postaci [5], gdy $H = V_s = 0$

$$\Delta = \Delta(0) - \sqrt{2\pi T \Delta} \exp\left(-\frac{\Delta}{T}\right) \tag{4.22}$$

W rozważanej granicy $T \rightarrow 0$

$$\Delta = \Delta(T) \simeq \Delta(0) = \Delta_0$$

Formuła (4.22) wynika z fizycznego faktu, że zmiana Δ jest związana z pojawianiem się kwazicząstek, których liczba jest proporcjonalna do $\exp(-\Delta(0)/T)$ [5].

4.3. Postaci analityczne Ω_s i C_s dla modelu rozszerzonego BCS w granicy $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$)

4.3.1. Udokładniona postać $\Delta(T)$

Biorąc pod uwagę, że Δ , h i v_s są małe w porównaniu do T , gdzie $T \rightarrow T_c$, rozwijamy wyrażenie podcałkowe we wzorze (2.33) względem τ , uwzględniając relację

$$\int_0^\infty \frac{du}{u} \frac{d}{du} \left[\frac{1}{u} \frac{d}{du} \left(\frac{\tanh u}{u} \right) \right] = \frac{93\zeta(5)}{\pi^4} \quad (4.23)$$

wzór (2.33) zredukować można do postaci

$$\begin{aligned} \ln \frac{T_c}{T} = & \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2 T_c^2} \left(\Delta^2 + 2\mu_B^2 H^2 + \frac{2}{3} p_F^2 V_s^2 \right) - \\ & - \frac{93\zeta(5)}{128\pi^4 T_c^4} \left(\Delta^4 + 8\Delta^2 \mu_B^2 H^2 + \frac{8}{3} \Delta^2 p_F^2 V_s^2 + \right. \\ & \left. + \frac{8}{3} \mu_B^4 H^4 + \frac{8}{15} p_F^4 V_s^4 + \frac{48}{9} \mu_B^2 H^2 p_F^2 V_s^2 \right) \end{aligned} \quad (4.24)$$

Wprowadźmy następujące oznaczenia

$$P = \frac{7\zeta(3)}{8\pi^2}, \quad Q = \frac{93\zeta(5)}{128\pi^4} \quad (4.25)$$

oraz

$$\begin{aligned} U = & \mu_B^2 H^2 + \frac{1}{3} p_F^2 V_s^2 \\ W = & \frac{8}{3} \mu_B^4 H^4 + \frac{8}{15} p_F^4 V_s^4 + \frac{48}{9} \mu_B^2 H^2 p_F^2 V_s^2 \end{aligned} \quad (4.26)$$

Jak okaże się później, znacznie istotniejsza jest wielkość U , która wyraża wpływ pól zewnętrznych H i V_s . Równanie (4.24) wyrazić można zatem w formie

$$\ln \frac{T_c}{T} = \frac{P}{T^2} (\Delta^2 + 2U) - \frac{Q}{T^4} (\Delta^4 + 8\Delta^2 U + W) \quad (4.27)$$

Naszym celem jest określenie wpierw, z (4.27), dokładniejszej postaci Δ (w porównaniu z (4.11)), przy uwzględnieniu wpływu pól zewnętrznych.

Po lewej stronie równania (4.27) dokonujemy rozwinięcia $\ln \frac{T_c}{T}$, po prawej $\frac{1}{T^2}$ (wokół $T = T_c$). Odpowiednio

$$\ln \frac{T_c}{T} = -\ln \frac{T}{T_c} = \eta + \frac{1}{2}\eta^2 + \frac{1}{3}\eta^3 \quad (4.28)$$

gdzie

$$\eta = 1 - \frac{T}{T_c} \quad (4.29)$$

oraz

$$\frac{1}{T^2} = \frac{1}{T_c^2} \cdot \frac{1}{1 - \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)} = \frac{1}{T_c^2} \frac{1}{1 - 2\eta} \quad (4.30)$$

Wstawiając rozwinięcia do (4.27) i wymnażając obustronnie przez $(1 - 2\eta)$, pomijając już człony z η^4 otrzymujemy

$$\begin{aligned} \eta - \frac{3}{2}\eta^2 - \frac{2}{3}\eta^3 = \frac{P}{T_c^2} (\Delta^2 + 2U) - \frac{Q}{T_c^4} (\Delta^4 + 8\Delta^2 U + W) - \\ - \frac{Q}{T_c^4} (\Delta^4 + 8\Delta^2 U + W) 2\eta \end{aligned} \quad (4.31)$$

Dokonując dalszych przekształceń i selekcji mniejszych wyrazów, Δ określamy perturbacyjnie z poniższego równania

$$\frac{T_c^2}{P}\eta - \frac{3}{2}\frac{T_c^2}{P}\eta^2 = \Delta^2 + 2U - \frac{Q}{T_c^2 P} (\Delta_0^4 + 8\Delta_0^2 U) \quad (4.32)$$

gdzie

$$\Delta_0^2 = \frac{T_c^2}{P}\eta$$

(patrz (4.11)).

Stąd otrzymujemy

$$\Delta^2 = \frac{T_c^2}{P}\eta - \frac{T_c^2}{P}\eta^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{Q}{P^2}\right) - 2U + 8\frac{Q}{P^2}\eta U \quad (4.33)$$

Trzy dodatkowe składniki w powyższym wzorze (4.33) dają **udokładnioną** postać Δ^2 , w porównaniu do (4.11).

W dalszej części rozważań wykorzystamy też odpowiednio

$$\begin{aligned} \Delta^4 = \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \eta^2 - 2\left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{Q}{P^2}\right) \eta^3 - 4\frac{T_c^2}{P} U \eta + \\ + 4\frac{T_c^2}{P} \left(\frac{3}{2} + 3\frac{Q}{P^2}\right) U \eta^2 \end{aligned} \quad (4.34)$$

oraz

$$\Delta^6 = \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^3 \eta^3 - 6 \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 U \eta^2 \quad (4.35)$$

4.3..2. Analityczna postać $\Delta\Omega$

Zapisując (4.27) po podstawieniu $\tau = \frac{\Delta}{2T}$ w formie

$$\ln \frac{T_c}{T} = P \left(4\tau^2 + \frac{2U}{T^2}\right) - Q \left(16\tau^4 + 32\tau^2 \frac{U}{T^2} + \frac{W}{T^4}\right) \quad (4.36)$$

obliczamy postać $\Delta\Omega$ zgodnie z (3.6)

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega}{T_c^2 N(0)} &= -8 \left(\frac{T}{T_c}\right)^2 \int_0^\tau d\tau' \tau' \left[\ln \frac{T(\tau')}{T_c} - \ln \frac{T(\tau)}{T_c} \right] = \\ &= 8 \frac{T^2}{T_c^2} \left[-P\tau^4 + \frac{16}{3}Q\tau^6 + 8Q\frac{U}{T^2}\tau^4 \right] = \\ &= -\frac{1}{2}P \frac{\Delta^4}{T_c^2 T^2} + \frac{2}{3}Q \frac{\Delta^6}{T_c^2 T^4} + 4QU \frac{\Delta^4}{T_c^2 T^4} \end{aligned} \quad (4.37)$$

Ponownie stosując rozwinięcie

$$\frac{1}{T^2} \simeq \frac{1}{T_c^2} (1 + 2\eta)$$

i dokonując dalszej selekcji wyrazów zachowujemy

$$\frac{\Delta\Omega}{T_c^2 N(0)} = -\frac{1}{2}P \frac{\Delta^4}{T_c^4} (1 + 2\eta) + \frac{2}{3}Q \frac{\Delta^6}{T_c^6} + 4QU \frac{\Delta_0^4}{T_c^6} \quad (4.38)$$

Podstawiając wyrażenia (4.34) i (4.35) za Δ^4 i Δ^6 , natomiast w ostatnim składniku za Δ_0 (4.11), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega}{T_c^2 N(0)} &= -\frac{1}{2} \frac{P}{T_c^4} \left\{ \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \eta^2 - 2 \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{Q}{P^2}\right) \eta^3 - \right. \\ &\quad \left. -4 \frac{T_c^2}{P} U \eta + 4 \frac{T_c^2}{P} \left(\frac{3}{2} + 3 \frac{Q}{P^2}\right) U \eta^2 \right\} (1 + 2\eta) + \\ &\quad + \frac{2}{3} \frac{Q}{T_c^6} \left\{ \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^3 \eta^3 - 6 \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 U \eta^2 \right\} + \frac{4QU}{T_c^6} \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \eta^2 \end{aligned} \quad (4.39)$$

zatem

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega}{T_c^2 N(0)} &= -\frac{1}{2} \frac{P}{T_c^4} \left\{ \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \eta^2 - 2 \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 \left(\frac{3}{2} - \frac{Q}{P^2}\right) \eta^3 - \right. \\ &\quad \left. -4 \frac{T_c^2}{P} U \eta + \left(\frac{T_c^2}{P}\right)^2 2\eta^3 - 2 \frac{T_c^2}{P} \left(1 - 6 \frac{Q}{P^2}\right) U \eta^2 \right\} + \\ &\quad + \frac{2}{3} \frac{Q}{P^3} \eta^3 - 4 \frac{Q}{P^2 T_c^2} U \eta^2 + 4 \frac{Q}{P^2 T_c^2} U \eta^2 \end{aligned} \quad (4.40)$$

Porządkując wyrażenia dostajemy

$$\frac{\Delta\Omega}{T_c^2 N(0)} = -\frac{1}{2P}\eta^2 + \frac{1}{P}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\frac{Q}{P^2}\right)\eta^3 + 2\frac{U}{T_c^2}\eta + \frac{U}{T_c^2}\eta^2\left(1 - 6\frac{Q}{P^2}\right)$$

oraz zapisując jawnie η (patrz (4.29))

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega}{T_c^2 N(0)} = & -\frac{1}{2P}\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 + \frac{1}{P}\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\frac{Q}{P^2}\right)\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^3 + \\ & + 2\frac{U}{T_c^2}\left(1 - \frac{T}{T_c}\right) + \frac{U}{T_c^2}\left(1 - 6\frac{Q}{P^2}\right)\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 \end{aligned} \quad (4.41)$$

4.3..3. Analityczna postać zredukowanej pojemności cieplnej C_s dla $T \rightarrow T_c$

Wykorzystując związki termodynamiczne (3.7) i (3.8) otrzymujemy

$$\frac{\Delta S}{T_c^2 N(0)} = -\frac{1}{PT_c}\eta + \frac{3}{PT_c}\eta^2\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\frac{Q}{P^2}\right) + 2\frac{U}{T_c^3} + \frac{2U}{T_c^3}\eta\left(1 - 6\frac{Q}{P^2}\right) \quad (4.42)$$

z kolei

$$\frac{\Delta C}{T_c^2 N(0)} = \frac{T}{PT_c^2} - \frac{6T}{PT_c^2}\eta\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{3}\frac{Q}{P^2}\right) - \frac{2UT}{T_c^4}\left(1 - 6\frac{Q}{P^2}\right) \quad (4.43)$$

$$\frac{\Delta C}{N(0)} = \frac{T}{P} - \frac{T}{P}\eta\left(3 - 2\frac{Q}{P^2}\right) - \frac{2UT}{T_c^2}\left(1 - 6\frac{Q}{P^2}\right) \quad (4.44)$$

ponieważ $\frac{C_n}{N(0)} = \frac{2\pi^2}{3}T$, zatem

$$\frac{C_s}{N(0)} = \left(\frac{1}{P} + \frac{2\pi^2}{3}\right)T - \frac{T}{P}\left(3 - 2\frac{Q}{P^2}\right) - \frac{2UT}{T_c^2}\left(1 - 6\frac{Q}{P^2}\right) \quad (4.45)$$

Zredukowaną postać pojemności cieplnej zapisać można ostatecznie w formie

$$\frac{C_s(T)}{C_n(T_c)} = C_1 + C_2 M + C_3 \left(\frac{T}{T_c} - 1\right) \quad (4.46)$$

przy czym pomijamy człony z $\left(\frac{T}{T_c}\right)^2$. Współczynniki liczbowe wynoszą odpowiednio

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{3}{2P\pi^2} + 1 = 2.426 \\ C_2 &= \frac{3}{\pi^2}\left(6\frac{Q}{P^2} - 1\right) = 0.938 \\ C_3 &= \frac{6}{P\pi^2} - 3\frac{Q}{P^3\pi^2} + 1 = 4.762 \end{aligned} \quad (4.47)$$

Ponieważ klasyczny wynik [5] bez wpływu pól H i V_s ma postać

$$\frac{C_s(T)}{C_n(T_c)} = 2.42 + 4.76 \left(\frac{T}{T_c} - 1\right) \quad (4.48)$$

zatem można wykazać, że dodatkowy człon $C_2 M$ zwiększa skok zredukowanej pojemności cieplnej zawsze w temperaturze $T < T_c$ wynikającej z rozwiązania równania (4.33), po położeniu $\Delta = 0$.

4.4. Postaci analityczne Ω_s i C_s dla modelu rozszerzonego BCS w granicy $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$)

Wyrażenie (2.35) można zapisać w postaci

$$\ln \frac{\Delta(\tau)}{\Delta(0)} = \frac{1}{F_\infty} \int_0^\infty du \frac{F(u, \tau, \alpha, \beta) - F_\infty}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \quad (4.49)$$

W pobliżu $T \rightarrow 0$ $\Delta\Omega$ zgodnie z (3.5) przyjmuje formę

$$\frac{\Delta\Omega}{\nu(0)T_c^2 F_\infty} = -\frac{1}{4}Y^2(0) + 8X^2 \int_0^\tau d\tau' \tau' \ln \frac{\Delta(\tau')}{\Delta(0)} \quad (4.50)$$

Po rozwinięciu wyrażenia podcałkowego w (4.43), podobnie jak przy $Y(\tau)$, gdy $T \rightarrow 0$ (patrz wyprowadzenie wzoru (4.16)), dostajemy (dla $F_\infty = 1$)

$$\Delta\Omega_s = -\frac{\nu(0)}{4}\Delta^2(0) - \nu(0)e^{-\Delta/T} \sqrt{2\pi\Delta T^3} \cosh \frac{\mu_B H}{T} \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \quad (4.51)$$

lub

$$\Delta\Omega_s = -\nu(0) \left[\frac{\Delta^2(0)}{4} + (\Delta(0) - \Delta) T \right] \quad (4.52)$$

gdy porównamy z (4.21)

Z wyrażenia (4.45) po dwukrotnym zróżniczkowaniu możemy wyznaczyć pojemność cieplną fazy sparowanej w postaci

$$\begin{aligned} C_s = & \nu(0) \sqrt{2\pi\Delta/T^3} e^{-\Delta/T} \left[(\Delta^2 + \mu_B^2 H^2 + p_F^2 V_s^2) \cosh \frac{\mu_B H}{T} \frac{\sinh(p_F V_s/T)}{p_F V_s/T} \right. \\ & + \frac{2T}{V} \left(\mu_B H p_F V_s \sinh \frac{\mu_B H}{T} \cosh \frac{p_F V_s}{T} \right. \\ & - \mu_B H \Delta \sinh \frac{\mu_B H}{T} \sinh \frac{p_F V_s}{T} \\ & \left. \left. - p_F V_s \Delta \cosh \frac{\mu_B H}{T} \cosh \frac{p_F V_s}{T} \right) \right] \quad (4.53) \end{aligned}$$

gdzie należy przyjąć $H > 0$ i $V_s > 0$.

Ponieważ rozważamy przypadek $T \rightarrow 0$, wyrażenie (4.47) należy zredukować do postaci

$$C_s = \frac{1}{4} \nu(0) \sqrt{2\pi\Delta/T p_F V_s} (\Delta - \mu_B H - p_F V_s)^2 e^{-(\Delta - \mu_B H - p_F V_s)/T} \quad (4.54)$$

która zapewnia właściwą dokładność wszystkich członów w wyznaczonej formule.

5. Zastosowanie formalizmu równań parametrycznych na szczelinę dla rozszerzonego modelu *BCS* uwzględniającego wpływ H i V_s . Numeryczne obliczenia $\Delta(T)$, Ω_s i C_s

5.1. Obliczenia numeryczne szczeliny $\Delta(T)$

W celu obliczenia $\Delta(T)$ (tj. $Y(\tau)$), dla funkcji F postaci (2.4), przekształcamy wzór (2.31), aby otrzymać jawną formułę na $Y(\tau)$. Przedstawiona poniżej procedura obliczania $Y(\tau)$ jest podstawowym elementem numerycznym pracy. Jest ona wykorzystana w dalszej części do obliczania wielkości $\Delta\Omega$, ΔS , ΔC_s , przez całkowanie, różniczkowanie i transformacje algebraiczne $Y(\tau)$.

W celu wykonania późniejszych obliczeń numerycznych rozpatrzmy najpierw samą funkcję F (2.4) i dokonajmy podstawienia

$$\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} + (-1)^i \mu_B H + z p_F V_s}{2T} = t \quad (5.1)$$

$$dz = \frac{2T}{p_F V_s} dt$$

Wówczas funkcja F upraszcza się do postaci

$$F = \frac{1}{4} \sum_{i=0}^1 \int_{\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} + (-1)^i \mu_B H - p_F V_s}{2T}}^{\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T)} + (-1)^i \mu_B H + p_F V_s}{2T}} \frac{2T}{p_F V_s} \tanh t dt =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^1 \frac{T}{p_F V_s} \left[\ln \cosh t \right]_{\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T) + (-1)^i \mu_B H + p_F V_s}}{2T}}^{\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T) + (-1)^i \mu_B H - p_F V_s}}{2T}} = \\
&= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^1 \frac{T}{p_F V_s} \left[\ln \cosh \left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T) + (-1)^i \mu_B H + p_F V_s}}{2T} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \ln \cosh \left(\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2(T) + (-1)^i \mu_B H - p_F V_s}}{2T} \right) \right] \quad (5.2)
\end{aligned}$$

Rozpatrzmy kolejno $\frac{\partial}{\partial u} F$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial u} F &= \frac{1}{2} \frac{T}{p_F V_s} \sum_{i=0}^1 \left[\tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{(-1)^i \mu_B H}{2T} + \frac{p_F V_s}{2T} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{(-1)^i \mu_B H}{2T} - \frac{p_F V_s}{2T} \right) \right] \frac{u}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \quad (5.3)
\end{aligned}$$

Zatem, wstawiając (5.3) do równania (2.31) otrzymujemy

$$\begin{aligned}
\ln \left(\frac{Y(\tau)}{2} \right) F_\infty &= Q - \int_0^\tau du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \frac{u}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \frac{T}{p_F V_s} \sum_{i=0}^1 \left[\tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{(-1)^i \mu_B H}{2T} + \frac{p_F V_s}{2T} \right) - \right. \\
&\quad \left. - \tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{(-1)^i \mu_B H}{2T} - \frac{p_F V_s}{2T} \right) \right] \quad (5.4)
\end{aligned}$$

stąd

$$\begin{aligned}
Y(\tau) &= 2 \exp \left\{ \left(\frac{Q}{F_\infty} \right) - \right. \\
&\quad - \frac{1}{F_\infty} \int_0^\tau du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \frac{u}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \times \\
&\quad \times \frac{1}{2} \sum_{i=0}^1 \left(\frac{\tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{(-1)^i \mu_B H}{2T} + \frac{p_F V_s}{2T} \right)}{\frac{p_F V_s}{T}} - \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \frac{(-1)^i \mu_B H}{2T} - \frac{p_F V_s}{2T} \right)}{\frac{p_F V_s}{T}} \right) \right\} \quad (5.5)
\end{aligned}$$

Uwzględniając, że $Q = \ln \pi / 2e^{-C}$ oraz $F_\infty = 1$ wyrażenie (5.5) przyjmuje postać

$$\begin{aligned}
Y(\tau) &= \frac{\Delta}{T_c} \pi e^{-C} \exp \left[- \frac{1}{2} \int_0^\tau du \left[\ln(u + \sqrt{u^2 + \tau^2}) - \ln \tau \right] \frac{u}{\sqrt{u^2 + \tau^2}} \times \right. \\
&\quad \left. \times \sum_{i=0}^1 \frac{\tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} + \omega + (-1)^i \chi \right) - \tanh \left(\sqrt{u^2 + \tau^2} - \omega + (-1)^i \chi \right)}{2\omega} \right] \quad (5.6)
\end{aligned}$$

gdzie

$$\omega = \frac{p_F V_s}{2T} \quad \text{oraz} \quad \chi = \frac{\mu_B H}{2T} \quad (5.7)$$

Wielkości χ i ω reprezentujące w (5.6) dodatkowe pola można również zapisać jako funkcje τ . Odpowiednio

$$\chi = \frac{1}{2} \pi e^{-c} \frac{\sqrt{1+4\tau^2}}{R(\tau)} \cdot h \quad (5.8)$$

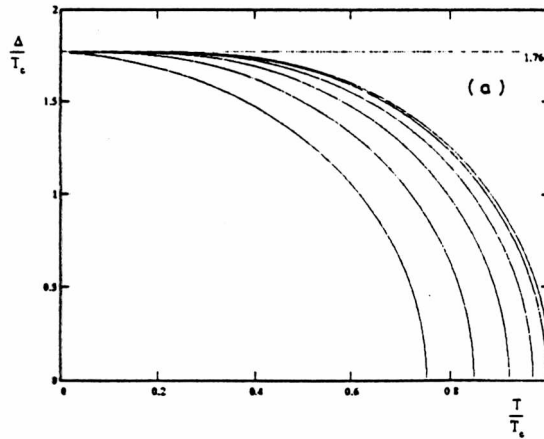
$$\omega = \frac{1}{2} \pi e^{-c} \frac{\sqrt{1+4\tau^2}}{R(\tau)} \cdot v \quad (5.9)$$

gdzie $h = \mu_B H / \Delta(0)$ i $v = p_F V_s / \Delta(0)$ są odpowiednio zredukowanymi wielkościami pola magnetycznego i nadprzepływu. Pamiętamy przy tym, że $X(\tau) = \frac{1}{2\tau} Y(\tau)$ oraz, zgodnie z (2.18)

$$R(\tau) = \frac{\sqrt{1+4\tau^2}}{2\tau} Y(\tau)$$

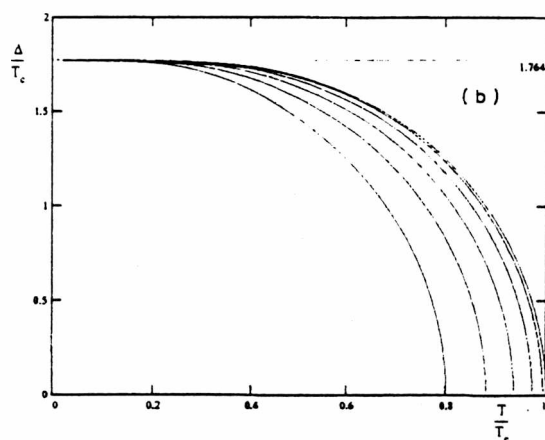
jest **wolno zmienną** funkcją τ . Ten dogodny fakt wykorzystujemy w obliczeniach określając kształt szczeliny dla ustalonego pola magnetycznego i przepływu nadciekłego, w drodze samouzgodnionych iteracji.

Poniżej przedstawiono na Rys.5.1, 5.2 i 5.3 przykładowe wyniki dla kilku wybranych wartości h i v .



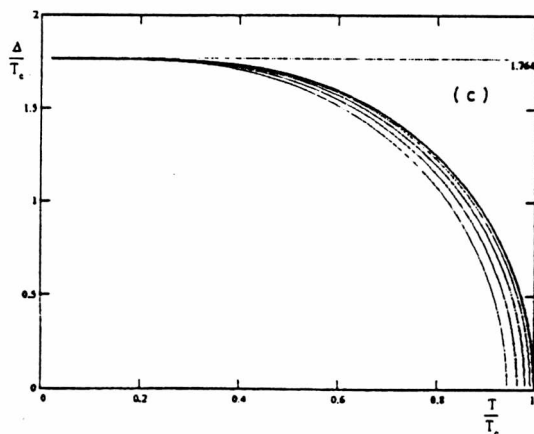
Rys.5.1

Przykładowe postacie szczeliny energetycznej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości h i v , przy ich jednoczesnym wpływie. Krzywe (od góry w dół) otrzymano dla następujących wartości (h, v) : $(0, 0)$; $(0.1, 0.1)$; $(0.2, 0.2)$; $(0.3, 0.3)$; $(0.4, 0.4)$; $(0.5, 0.5)$



Rys.5.2

Przykładowe postacie szczeliny energetycznej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości h przy $v = 0$. Krzywe (od góry w dół) otrzymano dla następujących wartości h : 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5



Rys.5.3

Przykładowe postacie szczeliny energetycznej w zależności od zredukowanej temperatury dla wybranych wartości v przy $h = 0$. Jak wyżej, krzywe (od góry w dół) otrzymano dla następujących wartości v : 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5

Wpływ zewnętrznego pola magnetycznego na szczelinę energetyczną okazuje się być znacznie większy od nadprzepływu (Rys.4.2). Wartości Δ zmniejszają się gdy h lub v (lub obie jednocześnie) rosną. Towarzyszy temu obniżanie się temperatury krytycznej. Nie ulega zmianie klasyczny kształt *BCS*-owski krzywych $\Delta(T)$.

5.2. Modelowe obliczenia numeryczne $\Delta\Omega$ i C_s

Dzięki określonej w rozdz.5.1 procedurze obliczania $Y(\tau)$ patrz (5.6), (analogicznie, z równoważnego równania parametrycznego, porównaj (2.30) i (2.31)), wyprowadzić można wyrażenie na $X(\tau)$ można obliczyć numerycznie zredukowaną różnicę potencjału termodynamicznego pomiędzy fazą s i n $\Delta\Omega$ według wzoru (3.6).

Przypomnijmy, że różnicę pojemności cieplnej pomiędzy fazą s i n , ΔC , określamy następnie zgodnie ze związkiem termodynamicznym (3.8), otrzymując w rezultacie (3.10). Aby określić C_s separujemy składnik normalny C_n określony zgodnie z (3.11).

Tak więc przekształcając (3.10), tj. rozpisując całkę i wykorzystując związek

$$\ln \frac{X(\tau')}{X(\tau)} - \frac{1}{2} = \ln \frac{Y(\tau')}{Y(\tau)}$$

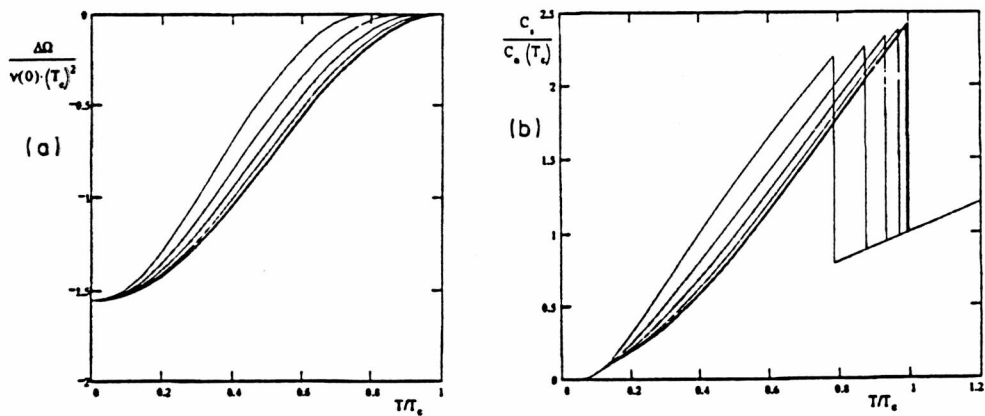
oraz przyjmując $F_\infty = 1$, otrzymujemy wyrażenie

$$\begin{aligned} \frac{C_s}{2N(0)T_c} = & \frac{1}{3}\pi^2 X(\tau) + 8X(\tau) \int_0^\tau d\tau' \tau' \ln \frac{Y(\tau')}{Y(\tau)} - \\ & - 4X(\tau)\tau^2 - 4 \frac{X^2(\tau)\tau}{\partial X(\tau)/\partial \tau} \end{aligned} \quad (5.10)$$

które całkujemy numerycznie.

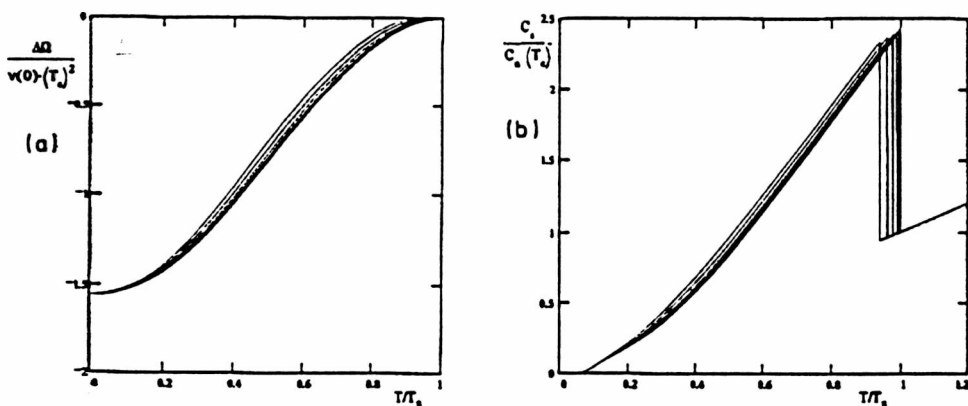
Przypomnijmy, że $2N(0)$ jest gęstością stanów na poziomie Fermiego, przypadającą na jedną cząstkę.

Rezultaty obliczeń wg wzorów (3.6) oraz (5.10), dla wybranych wartości pól zewnętrznych h i v , przedstawiono na poniższych rysunkach Rys.5.4, 5.5, 5.6.



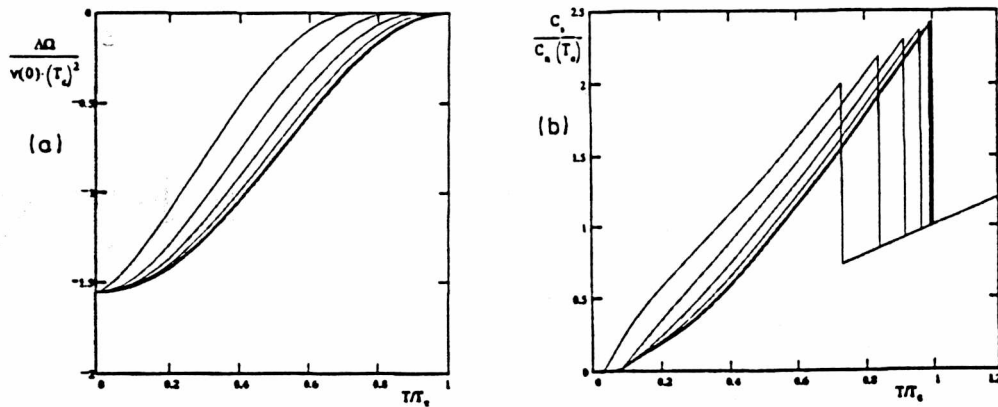
Rys.5.4

Przykładowe wykresy a) zredukowanej różnicy potencjału termodynamicznego pomiędzy fazą s i n oraz b) zredukowanej pojemności cieplnej fazy s vs. zredukowana temperatura dla wybranych wartości pól h i v , w rozszerzonym modelu BCS . Krzywe, odpowiednio od dołu do góry, odpowiadają $h = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ przy $v = 0$. $\Delta\Omega$ osiąga minimum -1.55 dla $T = 0$. Gdy h rośnie, krzywa $\Delta\Omega$ podnosi się do góry. Analogicznie, maksimum pojemności cieplnej (b) przesuwa się w lewo i przybiera, dla h jak wyżej, kolejno wartości: $[h, T/T_c, C_s/C_n(T_c)]$: $(0, 1, 2.43)$; $(0.1, 0.99, 2.42)$; $(0.2, 0.97, 2.38)$; $(0.3, 0.94, 2.33)$; $(0.4, 0.8, 2.26)$; $(0.5, 0.79, 2.19)$



Rys.5.5

Patrz opis Rys.5.4. Krzywe, odpowiednio od dołu do góry, odpowiadają $v = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ przy $h = 0$. Podobnie jak na Rys.5.4 $\Delta\Omega$ osiąga minimum -1.55 dla $T = 0$. Gdy v rośnie, krzywa $\Delta\Omega$ podnosi się do góry. Analogicznie, maksimum pojemności cieplnej (b) przesuwa się nieco w lewo i przybiera kolejno wartości: $[v, T/T_c, C_s/C_n(T_c)]$: $(0, 1, 2.43)$; $(0.1, 1, 2.42)$; $(0.2, 0.99, 2.42)$; $(0.3, 0.98, 2.40)$; $(0.4, 0.96, 2.37)$; $(0.5, 0.94, 2.34)$.



Rys.5.6

Patrz opis Rys.5.4. W tym przypadku uwzględniono wpływ h i v . Krzywe, odpowiednio od dołu do góry, odpowiadają następującym wartościom (h, v) : $(0, 0)$; $(0.1, 0.1)$; $(0.2, 0.2)$; $(0.3, 0.3)$; $(0.4, 0.4)$; $(0.5, 0.5)$. Podobnie jak na Rys.5.4 i 5.5 $\Delta\Omega$ osiąga minimum -1.55 dla $T = 0$. Gdy v i h rośnie, krzywa $\Delta\Omega$ podnosi się do góry. Analogicznie, maksimum pojemności cieplnej (b) przesuwają się nieco w lewo i przybiera kolejno wartości: $[v, h, T/T_c, C_s/C_n(T_c)]$: $(0, 0, 1, 2.43)$; $(0.1, 0.1, 0.99, 2.42)$; $(0.2, 0.2, 0.96, 2.37)$; $(0.3, 0.3, 0.92, 2.30)$; $(0.4, 0.4, 0.84, 2.18)$; $(0.5, 0.5, 0.73, 1.99)$. W ostatnim przypadku ($v = h = 0.5$) złamany jest eksponencjalny charakter C_s przy $T = 0$. Plateau $\Delta\Omega = 0$ jest tu znacznie mniejsze, niż na Rys.5.4 i 5.5.

6. Zastosowanie formalizmu równań parametrycznych do badania modelu statystycznej cieczy spinowej

Oprócz zaprezentowanych powyżej zastosowań równań parametrycznych na szczelinę do rozszerzonego o wpływ pól zewnętrznych H i V_s modelu BCS , tj. określenia i zbadania poprawionych formuł analitycznych na szczelinę w granicach $T \rightarrow T_c$ ($\tau \rightarrow 0$) i $T \rightarrow 0$ ($\tau \rightarrow \infty$), porównaj np. (2.35), a także wykorzystania sparyzowanych form $Y(\tau)$ (lub $X(\tau)$), $\Delta\Omega(\tau)$ i $C_s(\tau)$ do ich obliczeń numerycznych (dla wybranych H i V_s), porównaj Rys.5.1 – 5.6, rozwinięty formalizm wydaje się mieć znacznie szersze pole zastosowań, również do przypadków wykraczających poza model BCS .

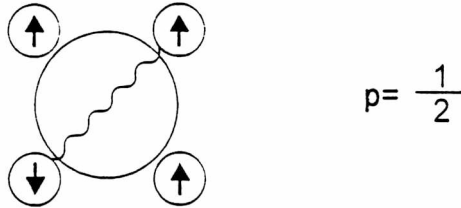
Ogólność podejścia zapewnia tu funkcja F w sfaktoryzowanym równaniu (2.2) obejmującym całą klasę układów S -sparowanych. Jej określenie wyłącznie przez własności asymptotyczne sprawia, że równanie to staje się wystarczająco pojemne i możliwe do zastosowania w analizie bardziej złożonych sytuacji fizycznych. W konsekwencji F , która jest kluczowym elementem formalizmu i zawiera (poglądowo) cały "zapis genetyczny" układu, jest jednak wtedy bardziej skomplikowana [7, 11].

Poniżej rozpatrzono dwa przypadki – choć możliwe byłyby dalsze uogólnienia – istotnie zmodyfikowanych funkcji F , odpowiadające modelom nie- BCS -owskim [7, 11]. Przedstawiono również pewne ich koneksje eksperymentalne. Jeden z modeli, zbadany dokładniej, odpowiada układowi tzw. statystycznej cieczy spinowej (SCS), sformułowanemu przez Spalka *et al.* [9, 10] (również [25, 26, 27, 28]) i rozszerzonemu przez Czerwonkę [7, 8].

6.1. Założenia teoretyczne modelu SCS

W ogólności, w modelu tym kwazicząstki fermionowe mogą obsadzać tylko w określony sposób dozwolone stany kwantowo-mechaniczne układu. Postać hamiltonianu w modelu zaproponowanym w [9, 10] ogranicza całkowitą liczbę kwazicząstek

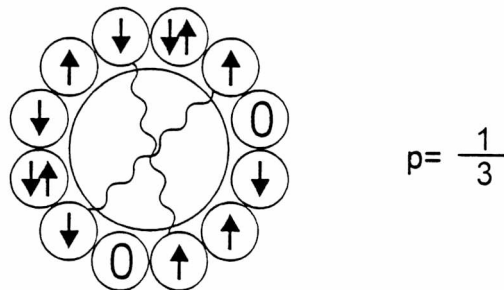
w tym samym stanie, podczas gdy w podejściu rozwiniętym przez Czerwonko [7, 8] w najprostrzej wersji, ich liczba wynosi dokładnie jeden (ściśła restrykcja). Innymi słowy, w przestrzeni stanów zabronione jest wtedy podwójne obsadzenie stanu o tym samym kwazipędzie. Ma to daleko idące konsekwencje. Taki rozkład kwazicząstek powoduje, że kreacja par Coopera staje się możliwa tylko wtedy, gdy w stanach z przeciwnymi pędami $\mathbf{p}$ (na sferze Fermiego), istnieją kwazicząstki z przeciwnymi spinami. Spontaniczna kreacja par Coopera następuje zatem w tym modelu z pewnym prawdopodobieństwem. Określić go można z funkcji rozkładu, tu wynosi ono $1/2$. Poglądowy schemat Rys.6.1 dla dwóch $\mathbf{p}$, ilustruje rozważaną sytuację



Rys.6.1

Schematyczne przedstawienie pierwszego wariantu modelu SCS ($\alpha = 3$).
Prawdopodobieństwo powstania pary Coopera wynosi $1/2$.

Podobne rozważania można uogólnić np. na przypadek gdy niedozwolone jest potrójne (poczwórne) obsadzanie przez spin dwóch stanów z przeciwnymi pędami $\mathbf{p}$ (łącznie) [3]. Taki z kolei rozkład kwazicząstek implikuje sytuację, w której spontaniczna kreacja par Coopera wystąpić może z prawdopodobieństwem $1/3$. Uproszczony Rys.6.2 przedstawia dyskutowany przypadek



Rys.6.2

Schematyczne przedstawienie drugiego wariantu modelu SCS ($\alpha = 5$).
Prawdopodobieństwo kreacji pary Coopera wynosi $1/3$.

6.2. Funkcja F w modelu statystycznej cieczy spinowej

Zgodnie z [7], a także [3], jądro funkcyjne równania na szczelinę F , obejmujące dwa omówione wyżej przypadki, przyjęte zostało w formie

$$F_\alpha(\xi, \Delta(T)) = \sum_{i=0}^1 \frac{\sinh \left[\frac{1}{T} \sqrt{\xi^2 + 2\Delta^2(T)} \right]}{2 \cosh \left[\frac{1}{T} \sqrt{\xi^2 + 2\Delta^2(T)} \right] + 4 + \alpha \exp [(-1)^i \xi/T]} \quad (6.1)$$

skąd równanie na szczelinę przybiera postać (porównaj [1])

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\omega_D} \frac{F_\alpha(\xi, \Delta(T))}{\sqrt{\xi^2 + 2\Delta^2(T)}} d\xi \quad (6.2)$$

gdzie $\alpha = 3$ i $\alpha = 5$ odpowiednio dla dwóch dyskutowanych wariantów układu. W granicy $\xi \rightarrow \infty$ funkcja F_α redukuje się do postaci

$$F_\alpha = \frac{2 + \alpha}{2(1 + \alpha)} \quad \xi \rightarrow \infty \quad (6.3)$$

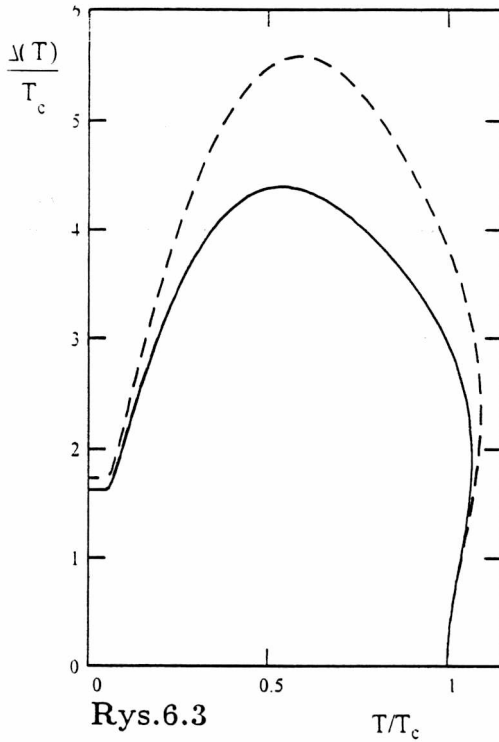
Stąd dla $\alpha = 3$ $F_\infty = 5/8$, a dla $\alpha = 5$ $F_\infty = 7/12$. Przypomnijmy również, że dla standardowego oraz rozszerzonego modelu BCS (z H i V_s), $F_\infty = 1$. Dla przypadku $\alpha = 3$ Q zdefiniowane w (2.25) przyjmuje postać (2.28) (patrz również dalsze uwagi, w szczególności wzór (2.29)).

6.3. Obliczenia numeryczne dla dwóch modeli statystycznej cieczy spinowej

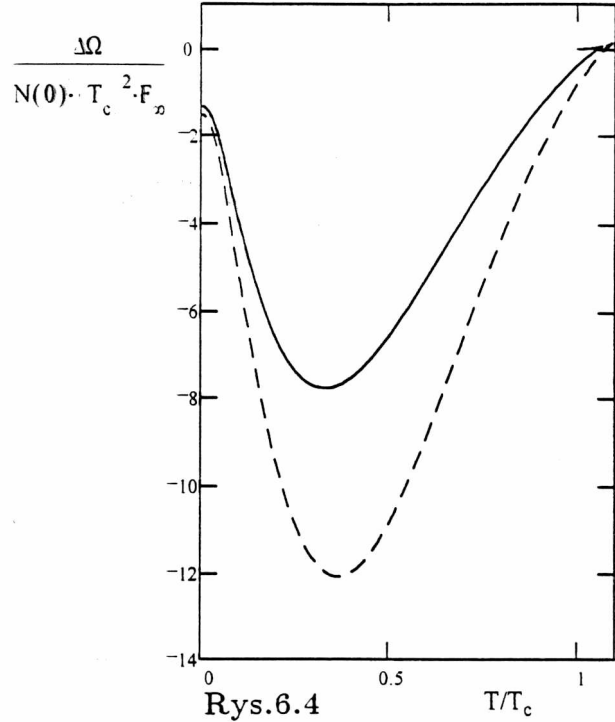
Celem poniższych rozważań jest wyznaczenie temperaturowej zależności $\Delta(T)$ oraz funkcji termodynamicznych $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$, S i C , dla omawianych dwóch modyfikacji układu SCS. Wykorzystano przy tym metody, a w fazie końcowej, techniczne procedury numeryczne (całkowania), wyłożone w rozdz.5. Użyto funkcji F w postaci (5.1), przy czym wszystkie znaczące wyniki zostały szczegółowo przeanalizowane.

Przez wielkości te manifestuje się kilka anomalnych własności fizycznych modelu (kształt $\Delta(T)$). Po sformułowaniu w rozdz.7 Lematu, który dotyczy takich nierealizowanych fizycznie przebiegów krzywych wyżej wspomnianych wielkości, ostateczne rezultaty zostaną zrekapitulowane. Niemniej poniżej przedstawiono pierwsze, oryginalne wyniki dla przyjętego modelu S -sparowanej SCS [3].

Otrzymane przebiegi zredukowanej szczeliny energetycznej oraz zredukowanej różnicy $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$, w funkcji zredukowanej temperatury, dla $\alpha = 3$ i $\alpha = 5$, przedstawiono odpowiednio na Rys.6.3 i Rys.6.4.



Rys.6.3



Rys.6.4

Rys.6.3

Szczelina energetyczna $\Delta(T)$ w funkcji zredukowanej temperatury T/T_c otrzymana dla dwóch wariantów modelu SCS (patrz wzór (6.1)) tj. dla $\alpha = 3$ (linia ciągła) oraz $\alpha = 5$ (linia przerywana). Współrzędne kilku charakterystycznych i ekstremalnych punktów dane są w schematyczny sposób:

Dla $\alpha = 3$:

$$\left(\frac{T}{T_c}; \frac{\Delta(T)}{T_c}\right) : (0.00; 1.62), (0.53; 4.39), (1.91; 1.07)$$

Dla $\alpha = 5$:

$$\left(\frac{T}{T_c}; \frac{\Delta(T)}{T_c}\right) : (0.00; 1.73), (0.59; 5.58), (1.09; 2.33)$$

Rys.6.4

Różnica potencjału termodynamicznego $\Delta\Omega$ pomiędzy fazą s i n $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$ w funkcji zredukowanej temperatury otrzymana dla $\alpha = 3$ (linia ciągła) i $\alpha = 5$ (linia przerywana). Współrzędne charakterystycznych i ekstremalnych punktów dane są w schematyczny sposób:

Dla $\alpha = 3$:

$$\left(\frac{T}{T_c}; \frac{\Delta\Omega}{N(0)F_{\infty}T_c^2}\right) : (0.00; -1.32), (0.33; -7.77), (1.05; 0.00)$$

Dla $\alpha = 5$:

$$\left(\frac{T}{T_c}; \frac{\Delta\Omega}{N(0)F_{\infty}T_c^2}\right) : (0.00; -1.52), (0.37; -12.08), (1.07; 0.00)$$

W istocie, jak pokazano poniżej, przedstawione rezultaty okazują się нефизyczne dla pewnych obszarów temperatury powyżej T_c (zależności нефunkcyjne). Jest to przedmiotem wnikliwej analizy w rozdz.7. Powyższe sytuacje spełniają założenia rozważanego i dowiedzionego tam Lematu. Zgodnie z nim, poprawne przebiegi krzywych $\Delta(T)$ i $\Delta\Omega$ przedstawione zostały na Rys.7.8 i 7.9. Rzeczywiste przejście fazowe zachodzi dla temperatury krytycznej $T_c^* > T_c$, gdy $\Delta\Omega = 0$. W konsekwencji pojawić się musi **skok parametru porządku**.

Zredefiniowanie temperatury przejścia (T_c^*) prowadzi do modyfikacji postaci krzywych (Rys.7.10 – 7.13). Tam też są one przedyskutowane.

6.4. Przesłanki fizyczne modelu statystycznej cieczy spinowej

Wprowadzenie pojęcia statystycznej cieczy spinowej umożliwia nowe podejście do opisu własności silnie skorelowanych elektronów w metalu i może, obok klasycznego podejścia cieczy Fermiego, pogodzić pewne nieoczekiwane fakty eksperymentalne z kwazicząstkowym obrazem elektronów w ciele stałym [26, 27, 28]. Zagadnienie to dyskutowane jest także w pracach [29, 30, 31, 32, 33].

Fizycznie, model SCS oparty jest na podstawowej obserwacji, że kiedy wartość energii odpychania kulombowskiego U znacznie przewyższa szerokość pasma kwazicząstki W , tzn. $U \gg W$, wykluczone muszą być stany z podwójnym obsadzeniem spinów $|\mathbf{k} \downarrow \uparrow\rangle$ w przestrzeni odwrotnej i rzeczywistej. Innymi słowy, silne oddziaływanie wprowadza długozasięgowy wpływ na stany kwazicząstkowe. Termodynamika SCS w stanie normalnym, magnetycznym i nadprzewodzącym została zbadana w pracach [9, 10, 8, 25].

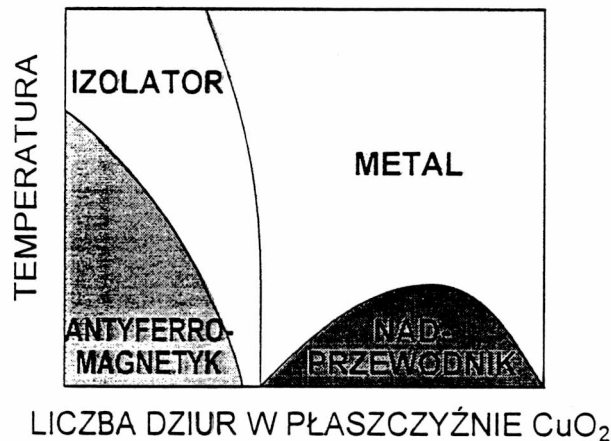
Rzeczą interesującą jest, iż fenomenologiczna koncepcja SCS opisuje podstawowe cechy stanu normalnego HTSC oraz ciągłego przejścia of HTSC do antyferromagnetycznego izolatora Motta (gdy liczba obadzeń $n \rightarrow 1$). Mowa tu o układach dwuwymiarowych, podczas badania których koncepcja SCS otrzymała dodatkowy impuls. W układach $2D$ uwzględnia się właśnie zakaz podwójnego obsadzania stanów $|\mathbf{k} \downarrow \uparrow\rangle$ [39].

Ciągła ewolucja silnie skorelowanej cieczy elektronowej do izolatora magnetycznego, gdzie ważne są tylko spinowe stopnie swobody, była prawdopodobnie argumentem, by nazwać stan wyjściowy statystyczną cieczą spinową.

Dość powszechne dane eksperymentalne [36, 37, 38, 42] sugerują, że nadprzewodniki wysokotemperaturowe (HTSC) w stanie normalnym nie mogą być traktowane jak metale konwencjonalne. Jednym z poważnych argumentów jest fakt, iż w ramach teorii Landaua cieczy Fermiego, trudne do opisanie są własności transportowe tych układów (przejaw własności nie-Fermi cieczerwych) [36, 41]. Za tym, że stan normalny HTSC posiada jednak charakter silnie skorelowanej cieczy spinowej, w sensie stanu jakościowo odmiennego, przemawia np. gładka ewolucja podatno-

ści magnetycznej od stanu metalicznego do magnetycznego izolatora. Podczas gdy układ podlega takiemu stopniowemu przejściu, masa efektywna nie rozbiega się (jest skończona), ale gęstość ładunku dąży do zera (co wynika z pomiarów ciepła właściwego i stałej Hall'a) [37]. Równocześnie fotoemisja potwierdza istnienie powierzchni Fermiego jak w reżimie metalicznym [38, 40].

Dla przypomnienia i uzupełnienia stwierdzić warto, że sam stan nadprzewodzący w HTSC (kupratach) pojawia się, gdy izolator Motta przechodzi w metal, przy czym jest obserwowany tylko w specyficznym zakresie koncentracji nośników (dziur) [43].



Rys.6.5 Schematyczny diagram fazowy dla nadprzewodnika wysokotemperaturowego za [43].

Co prawda, przy badaniu HTSC rodzi się podstawowe pytanie, czy aby dwuwymiarowość tych materiałów (w stanie normalnym) nie generuje po prostu pewnego rodzaju stanu cieczy Fermiego (wciąż "klasycznej"), analogicznego do odpowiadającego stanu w układach o wyższej wymiarowości. Wyżej cytowane fakty eksperymentalne coraz dobitniej przemawiają jednak za tym, że jest to jakościowo odmienny stan skorelowanych elektronów cieczy spinowej.

Innymi układami silnie skorelowanych fermionów, poza HTSC, w których analizie znaleźć można potencjalne zastosowanie koncepcji SCS są: tlenki metali przejściowych (np. V_2O_3) (również z przejściem metal–izolator typu Motta–Hubbarda), układy ciężkich fermionów (UPt_3 , $CeAl_3$, URu_2Si_2), czy ciekły hel-3 bliski zestalenia [30].

Układy te, przynajmniej w reżimie niskich temperatur, traktowane są jak dotąd powszechnie, jako ciecze Landaua–Fermiego, prawie zlokalizowane.

7. Lemat o możliwości pojawienia się skoku parametru porządku w układzie fermionów ze sparowaniem typu S

Rezultaty obliczeń numerycznych dla modelu tzw. statystycznej cieczy spinowej, o nie BCS-owskiej postaci F [7], dostarczają krzywych $\Delta(T)$ odmiennych od przebiegów klasycznych.

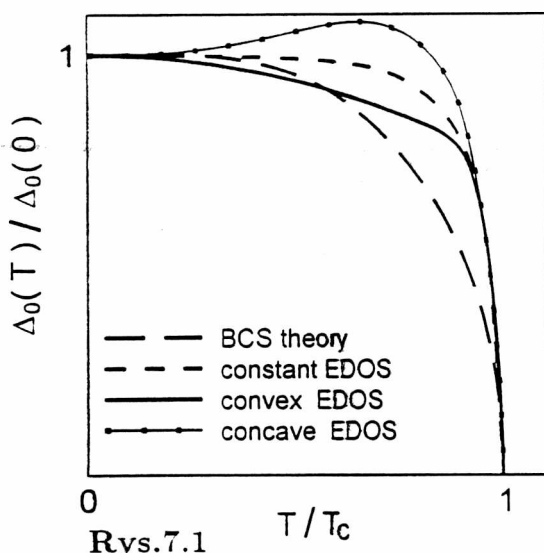
Po pierwsze, w dość szerokim zakresie temperatur krzywa posiada dodatnią pochodną (rośnie i osiąga maksimum). Przede wszystkim jednak, powyżej T_c mamy do czynienia z zależnością niefunkcyjną (dwuwartościową) (patrz np. Rys.6.3).

Posłużymy nam to za punkt wyjścia do gruntownej analizy takiej formy temperaturowej zależności szczeliny $\Delta(T)$. Efektem rozważań będzie sformułowanie i udowodnienie pewnego twierdzenia, opisującego takie właśnie fizyczne zachowania.

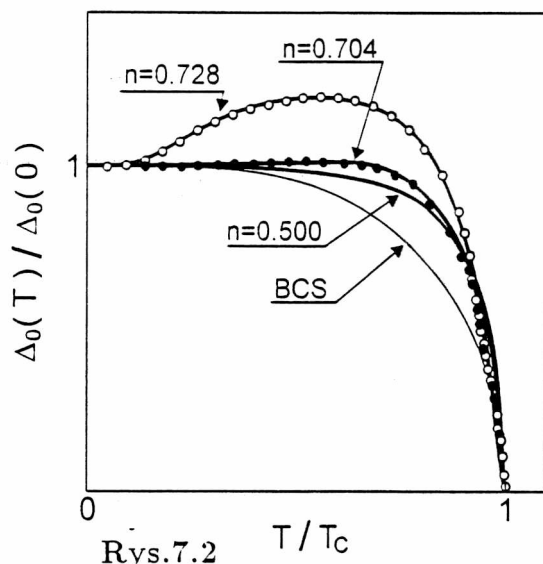
Zauważmy, że przedstawiona w rozdz.(2.3.2) parametryzacja zależności $\Delta(T)$ spełniać może w takiej analizie pomocną rolę, a w pewnych przypadkach może być nawet niezastąpiona, aby efektywnie rozwiązać problem numerycznie.

Podkreślimy raz jeszcze, że jej kluczową zaletą jest fakt, iż opieramy się na odrębnej parametryzacji szczeliny $Y(\tau)$ oraz osobnej parametryzacji temperatury $X(\tau)$. Dodatkowo obie te wielkości oraz τ , posiadają klarowną interpretację geometryczną (rozdz.2.3.3). Wszystko to pozwala na studiowanie nawet bardzo wyszukanych i egzotycznych form $\Delta(T)$, które nie muszą być prawidłowo określonymi funkcjami. W ogólności, do obszerniejszej klasy przebiegów $\Delta(T)$ prowadzą też inne modele uogólniające BCS oraz pewne wyniki eksperymentalne dotyczące anizotropowych próbek kupratów (HTSC), pojawiające się ostatnio w literaturze [47, 48, 44]. Poniżej przedstawiono przykłady takich przebiegów, Rys.7.1, Rys.7.2.

Pierwszy przypadek, bez wdawania się w szczegóły zagadnienia, przedstawiony na Rys.7.1, dotyczy temperaturowej zależności szczeliny energetycznej analizowanej w oparciu o teorię Eliashberga, w której wykorzystana jest gęstość stanów zależna od energii [47]. Autorzy stwierdzają, że gdy sprzężenie elektronowo-fononowe staje się silne, $N(\epsilon)$ ma szczególnie mocny wpływ na $\Delta(T)$.



Rys.7.1



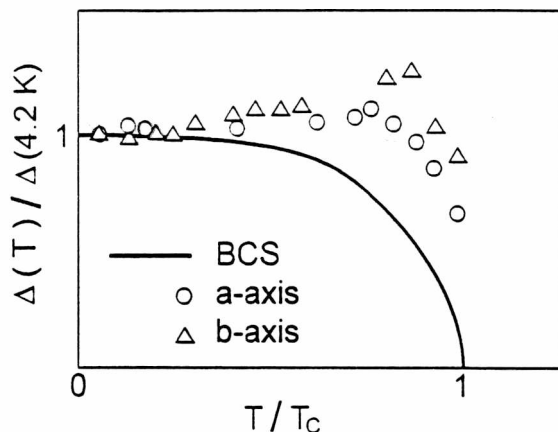
Rys.7.2

Rys.7.1 Przykładowe temperaturowe zależności szczeliny energetycznej $\Delta(T)$, przy gęstości stanów zależnej od energii $N(\epsilon)$ (różnego typu), w modelu silnego sprzężenia Eliashberga. Porównanie z klasycznym modelem *BCS*. Za pracę [47].

Rys.7.2 Przykładowe temperaturowe zależności szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ przy gęstości stanów zależnej od energii $N(\epsilon)$, w modelu silnego sprzężenia Eliashberga, dla różnej liczby obsadzeń n . Porównanie z klasycznym modelem *BCS*. Za pracę [48].

Druga sytuacja (Rys.7.2), dotyczy wpływu zmiennej liczby obsadzeń n na postać $\Delta(T)$, również w zakresie teorii silnego sprzężenia.

Z kolei spektroskopia tunelowa anizotropowej szczeliny w nadprzewodniku wysokotemperaturowym $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+d}$ (*Bi2212*) wykazuje również jej odmienną zależność od temperatury: podnoszenie się krzywej (dodatnia pochodna) i jej ewentualny raptowny spadek, co jest przedmiotem spekulacji. Efekt jest szczególnie silny dla pomiarów próbki wzdłuż osi b (w płaszczyźnie miedziowo – tlenowej), patrz Rys.7.3. Szczelina energetyczna jest znormalizowana przez jej wartość zmierzona w $T = 4.2K$. Linia ciągła odpowiada teoretycznej krzywej *BCS*. Według autorów eksperymentu [44] szczelina energetyczna jest prawie stała poniżej T_c , po czym nagle znika do zera przy $T = T_c$, co istotnie odbiega od modelu klasycznego. Obliczone stosunki $2\Delta/k_B T_c$ odpowiednio dla osi a i b wynoszą 10.2 i 8.5.



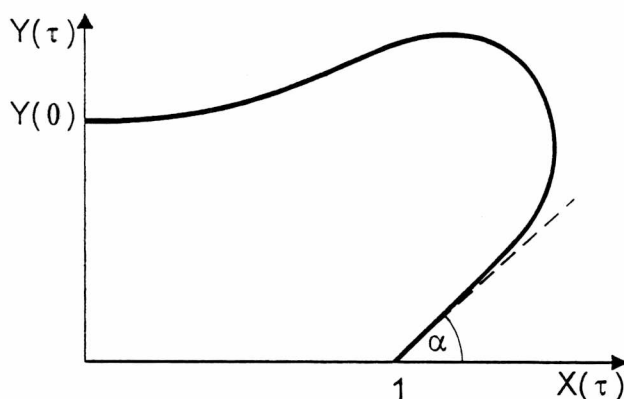
Rys.7.3

Rys.7.3 Temperaturowa zależność anizotropowej szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ w nadprzewodniku wysokotemperaturowym $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+d}$ dla osi a i b , w płaszczyznach miedziowo-tlenowych. Dane eksperymentalne pochodzą ze spektroskopii tunelowej (trójkąty odpowiadają osi b). Energie szczeliny są znormalizowane przez ich wartość zmierzoną w temperaturze $4.2K$, natomiast temperatura zredukowana przez wielkość T_c , zdefiniowana jako temperatura, w której zanika obraz szczeliny w spektrum tunelowym. Linia ciągła odpowiada teoretycznemu modelowi BCS . Za pracę [44].

Wartości te, biorąc pod uwagę zachowanie się $\Delta(T)$, świadczą o wysoce skorelowanej naturze elektronów w $Bi2212$ (patrz powyższe uwagi o silnym sprzężeniu). W dyskusji eksperymentu nie ma jednak mowy o efekcie "dodatniej pochodnej" krzywej (szczególnie dla osi b), co mogłoby potwierdzić eksperymentalnie poprzednie rozważania teoretyczne.

Można także odszukać podobne eksperymenty dotyczące $HTSC$, które świadczą o pojawianiu się zależności $\Delta(T)$ typu Rys.6.3.

W świetle powyższych faktów rozważmy więc w ogólny sposób hipotetyczną krzywą $\Delta(T)$, która wydaje się szczególnie intrygująca i reprezentatywna. Obejmuje ona wszystkie, wyżej dyskutowane przykłady.



Rys.7.4

Rys.7.4 Hipotetyczna zależność sparametryzowanej szczeliny energetycznej $Y(\tau)$ w funkcji zredukowanej temperatury, będąca przedmiotem Lematu.

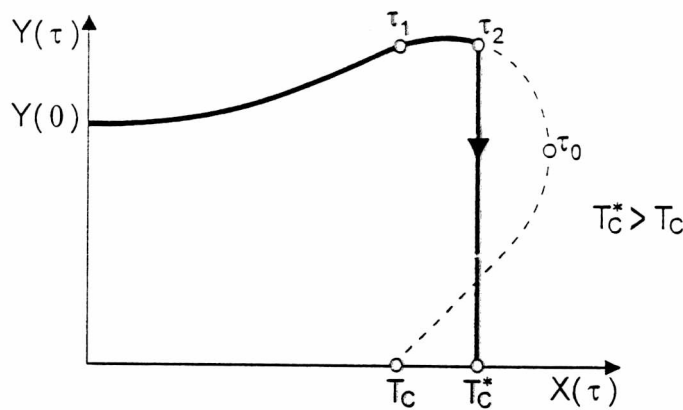
Poniżej sformułowany został Lemat, który jednoznacznie stwierdza, wykorzystując parametryczną formułę na różnicę potencjału termodynamicznego pomiędzy fazą s i n $\Delta\Omega(\tau)$ (3.6), że w przypadku takiej zależności $\Delta(T)$, parametr porządku ($Y(\tau)$) musi doznać skoku do zera, dla pewnej $T_c^* > T_c$, która jest rzeczywistą temperaturą przejścia. Stwierdzamy, że stany sparowane powyżej T_c^* nie są realizowane fizycznie. Lemat definitywnie koryguje kształt $\Delta(T)$.

Reasumując, postulujemy możliwość wystąpienia nieciągłości parametru porządku w układzie fermionów ze sparowaniem typu S . W konsekwencji pojawia się wtedy skok entropii (co obejmuje wzór (3.20)) i skończone ciepło utajone (przejście pierwszego rodzaju).

7.1. Lemat

Jeżeli istnieje parametryczne rozwiązanie równania na szczelinę $\Delta(T)$, takie że szczelina Δ i temperatura T oddzielnie są ciągłymi funkcjami parametru τ , odpowiednio $Y(\tau)$ i $X(\tau)$, gdzie $\tau = \Delta(T)/2T$ zmienia się od 0 ($\Delta = 0$, $T = T_c$) do ∞ ($\Delta = \Delta(0)$, $T = 0$) oraz jeżeli w każdym dowolnie małym otoczeniu T_c , dla $T > T_c$ występują niezerowe (dodatnie) wartości Δ , wówczas parametr porządku (znormalizowana Δ) jest nieciągłą funkcją τ i doznaje skoku dla $T_c^ > T_c$ ($\tau = 0$).*

Powyższy Lemat ilustruje Rys.7.5.



Rys. 7.5

Rys. 7.5 Ilustracja Lematu o możliwości skoku parametru porządku w układach Fermiego ze sparowaniem typu S .

Dowód

Wykorzystujemy symbolikę wprowadzoną w pracy. Dowód jest prosty i klarowny dzięki zastosowaniu parametrycznej formuły $\Delta\Omega(\tau)$ (3.6).

Zgodnie z (3.6) $\Delta\Omega(\tau)$ jest ciągłą funkcją τ .

Gdy $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n < 0$ realizowany jest stan S -sparowany, gdy $\Delta\Omega > 0$ mamy do czynienia ze stanem normalnym.

Konsekwentnie τ , dla którego $\Delta\Omega = 0$ oznacza jednoznacznie punkt przejścia fazowego. Badać będziemy znak wyrażenia (3.6), czyli znak występującej tam całki.

Wprowadzamy charakterystyczne punkty krzywej: τ_0 i τ_1 . Dla τ_0 $X(\tau)$ osiąga wartość maksymalną.

Zawsze też można wyróżnić dodatkowy punkt $\tau_1 > \tau_0$, dla którego ponownie $X(\tau_1) = 1$ ($X(\tau = 0) = 1$ również w T_c).

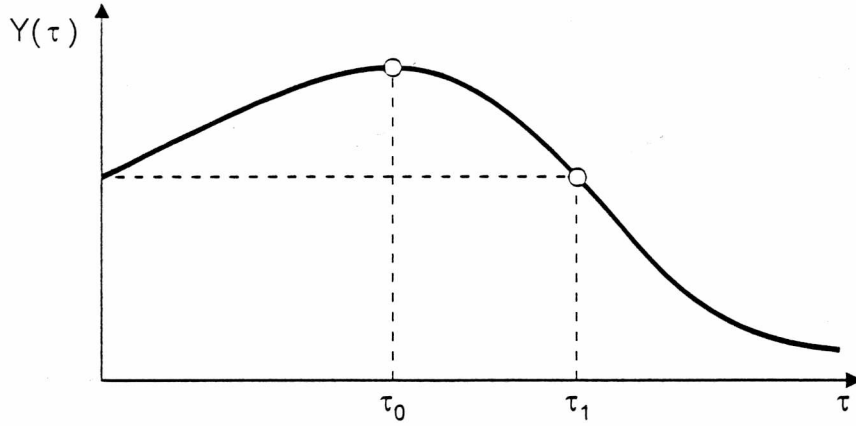
$X(\tau)$ jest przy tym rosnącą funkcją τ dla $0 < \tau < \tau_0$ i malejącą dla $\tau > \tau_0$. Ponadto

$$\text{dla } 0 < \tau < \tau_1 \text{ mamy } X(\tau) > 1$$

oraz

$$\text{dla } \tau_1 < \tau < \infty \text{ mamy } X(\tau) \leq 1 \text{ (i dąży do zera)}. \quad (7.1)$$

Zachowanie $X(\tau)$, pomocne w analizie Lematu, można zilustrować na poniższym Rys. 7.6.



Rys.7.6 Przebieg funkcji $X(\tau)$ (pomocne w analizie dowodu Lematu).

Rozważmy teraz funkcję $\Delta\Omega(\tau)$ (3.6) dla wybranych wartości τ .

W przedziale $0 < \tau \leq \tau_0$ dla bieżącego τ' spełniającego warunek $0 \leq \tau' \leq \tau$

$$\ln \frac{X(\tau')}{X(\tau)} \leq 0 \quad \text{ i } \quad \Delta\Omega(\tau) > 0 \quad (\text{faza normalna}) \quad (7.2)$$

Z kolei w przedziale $0 \leq \tau' \leq \tau_1$

$$\ln \frac{X(\tau')}{X(\tau_1)} \geq 0 \quad \text{ kładziemy } \tau = \tau_1$$

skąd

$$\Delta\Omega(\tau_1) < 0 \quad (\text{faza nadprzewodząca}) \quad (7.3)$$

Ponieważ $\Delta\Omega(\tau)$ jest ciągłą funkcją τ spełniającą warunki $\Delta\Omega(\tau_0) > 0$ oraz $\Delta\Omega(\tau_1) < 0$, musi zatem istnieć punkt τ_2 , taki że $\tau_0 < \tau_2 < \tau_1$ oraz

$$\Delta\Omega(\tau_2) = 0 \quad (7.4)$$

Dla τ_2 , który odpowiada $T_c^* > T_c$ nastąpić musi skok parametru porządku z $\Delta(\tau_2)$ do 0, jak na Rys.7.5. Jest to rzeczywisty punkt przejścia fazowego.

7.2. Wnioski z Lematu. Nowe formuły dla T_c^* .

Zauważmy, że $X(\tau_2) > X(\tau_1) = 1$, stąd rzeczywista temperatura przejścia $T_c^* > T_c$ i można ją zdefiniować jako

$$T_c^* = T_c \cdot X(\tau_2) \quad (7.5)$$

Wprowadzamy przeskalowane względem T_c^* nowe $Y(\tau)$ i $X(\tau)$

$$X^*(\tau) = \frac{T}{T_c^*} = X(\tau) \cdot \frac{T_c}{T_c^*} = \frac{X(\tau)}{X(\tau_2)} \quad \text{oraz} \quad Y^*(\tau) = \frac{Y(\tau)}{X(\tau_2)} \quad (7.6)$$

Z kolei, zgodnie (2.15)

$$\text{dla } 0 \leq \tau \leq \tau_2 \quad X^*(\tau) = 1 \quad \text{i} \quad Y^*(\tau) = 2\tau$$

$$\Delta\Omega(\tau) = 0 \quad (7.7)$$

Jeżeli rozpatrujemy teraz funkcje termodynamiczne ograniczyć się możemy do $\tau \leq \tau_2$.

Rozpatrywane wielkości termodynamiczne ($\Delta\Omega$, ΔS , ΔC) dla nowej postaci parametru porządku (T_c^*) redukują się do następujących form, zgodnie z (3.6), (3.9), (3.16) odpowiednio

$$\begin{aligned} \frac{\Delta\Omega}{N(0)(T_c^*)^2 F_\infty} = & -8[X^*(\tau)]^2 \int_{\tau_2}^{\tau} d\tau' \tau' \ln \frac{X^*(\tau')}{X^*(\tau)} + \\ & + 4 \tau_2^2 [X^*(\tau)]^2 \ln X^*(\tau) \end{aligned} \quad (7.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta S(\tau)}{16 N(0) T_c^* F_\infty} = & X^*(\tau) \int_{\tau_2}^{\tau} d\tau' \tau' \left[\ln \frac{X^*(\tau')}{X^*(\tau)} - \frac{1}{2} \right] - \\ & - \frac{1}{2} \tau_2^2 X^*(\tau) \left[\ln X^*(\tau) + \frac{1}{2} \right] \end{aligned} \quad (7.9)$$

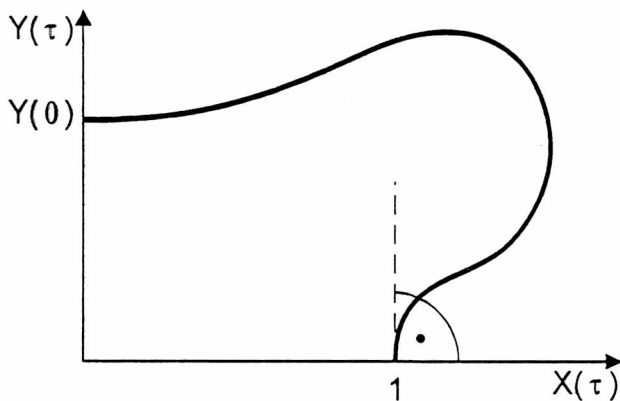
oraz

$$\frac{\Delta C(\tau)}{2N(0)T_c^*F_\infty} = \frac{\Delta S(\tau)}{2N(0)T_c^*F_\infty} - Y^*(\tau) \frac{\partial Y^*(\tau)}{\partial X^*(\tau)} \quad (7.10)$$

Gdy położymy $\tau_2 = 0$ wyrażenia powyższe przechodzą do formuł (3.6), (3.9), (3.16).

Podkreślmy fakt, że ostatni wzór na $\Delta C(\tau)$ (7.10) okazuje się niezmienniczy dla T_c i T_c^* , tzn. jest wspólny dla ciągłego i nieciągłego parametru porządku. Wynika to z bezpośredniego porównania (7.10) i (3.16). Podobną własność ma też zależność na $\Delta S(\tau)$ (7.9). Dowodzi to możliwości **jednoznacznego określania** pojemności cieplnej poprzez parametr porządku w funkcji temperatury.

Zaznaczmy też, że istotnym warunkiem w sformułowaniu teorematu jest, aby w każdym małym otoczeniu T_c , na prawo od T_c ($T > T_c$) występowały niezerowe wartości Δ . Dla uzupełnienia rozważań zauważmy więc, że obejmuje to również klasę przebiegów $\Delta(T)$ o ∞ wartości pochodnej w T_c (prostopadłych do osi temperatur), co poglądowo przedstawiono na poniższym rysunku (Rys.7.7)



Rys.7.7

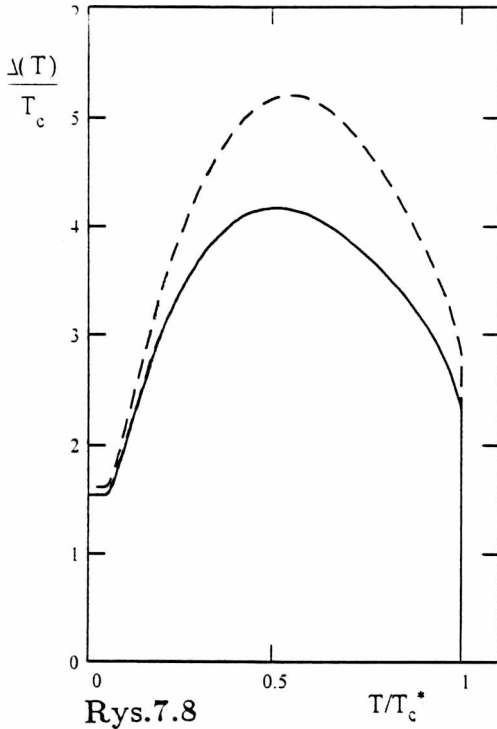
Rys.7.7 Szczegółowy przypadek sparametryzowanej szczeliny energetycznej w funkcji zredukowanej temperatury – krzywa prostopadła do osi temperatury. (porównaj Rys.7.4).

7.3. Egzemplifikacja numeryczna Lematu

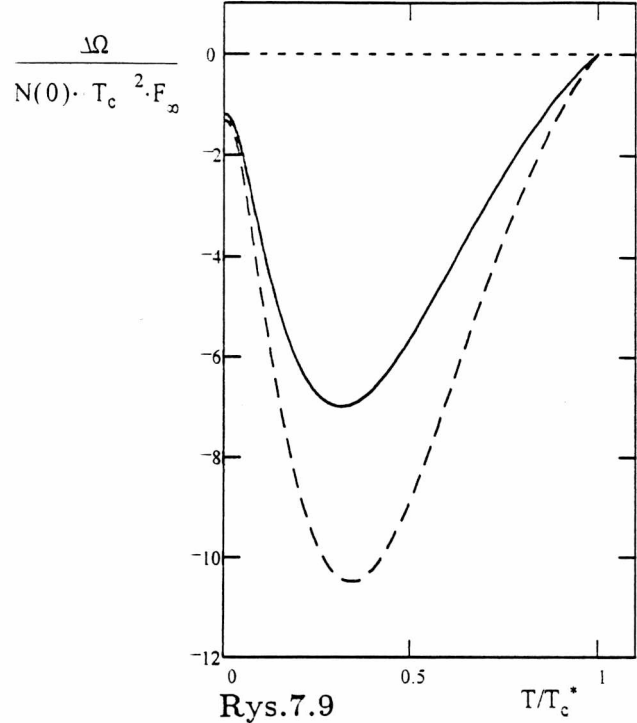
Poniżej interpretujemy ponownie i uzupełniamy, zgodnie z udowodnionym Lematem, uwzględniając nowe formuły z T_c – przedstawione w rozdz.7.2 – rezultaty numeryczne dla modelu statystycznej cieczy spinowej omawiane w rozdz.6.3 (Rys.6.3 i 6.4).

Przejścia fazowe następują w istocie w temperaturze $T_c^* > T_c$, której wartość określona jest na podstawie wyników przedstawionych na Rys.7.9. Jest to temperatura, dla której $\Delta\Omega = 0$ (dla $\alpha = 3$ i $\alpha = 5$).

Na Rys.7.8 (dla $\alpha = 3$ i $\alpha = 5$) przedstawiono odpowiadające tym sytuacjom postacie **nieciągłego parametru porządku**. Zgodnie z przyjętą konwencją po zredefiniowaniu T_c do T_c^* nieciągły parametr porządku, który zastępuje funkcję szczeliny energetycznej, określa rzeczywiste wartości energii wiązania par. Skoki Δ następują dla określonych wartości τ_2 (patrz opisy rysunków). W przypadku ciągłych przejść fazowych parametr porządku jest identyczny z funkcją szczeliny energetycznej.



Rys.7.8



Rys.7.9

Rys.7.8

Nieciągły parametr porządku w funkcji zredukowanej temperatury T/T_c dla dwóch wariantów modelu SCS (patrz wzór (6.1)), tj. dla $\alpha = 3$ (linia ciągła) i $\alpha = 5$ (linia przerywana). Patrz też Rys.6.3. Charakterystyczne i ekstremalne punkty krzywych:

Dla $\alpha = 3$:

$$\left(\frac{T}{T_c^*}; \frac{\Delta(T)}{T_c^*}\right) : (0.00; 1.53), (0.51; 4.17), (1.00; 2.29)$$

Obserwowany nagły skok parametru porządku od $\Delta(\tau_2)$ do 0 w $T = T_c^*$ dla $\tau_2 (= \frac{\Delta(T_c^*)}{2T_c^*}) = 1.15$.

Dla $\alpha = 5$:

$$\left(\frac{T}{T_c^*}; \frac{\Delta(T)}{T_c^*}\right) : (0.00; 1.61), (0.55; 5.20), (1.00; 2.82)$$

Obserwowany nagły skok parametru porządku od $\Delta(\tau_2)$ do 0 w $T = T_c^*$ dla $\tau_2 = 1.41$.

Rys.7.9

Różnica potencjału termodynamicznego $\Delta\Omega$ pomiędzy fazą s i n $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$ w funkcji zredukowanej temperatury dla $\alpha = 3$ (linia ciągła) i $\alpha = 5$ (linia przerywana). Porównaj też Rys.6.4. Charakterystyczne i ekstremalne punkty krzywych:

Dla $\alpha = 3$:

$$\left(\frac{T}{T_c^*}; \frac{\Delta\Omega}{N(0)F_\infty(T_c^*)^2}\right) : (0.00; -1.19), (0.31; -7.00)$$

Dla $\alpha = 5$:

$$\left(\frac{T}{T_c^*}; \frac{\Delta\Omega}{N(0)F_\infty(T_c^*)^2}\right) : (0.00; -1.32), (0.34; -10.49)$$

Z kolei postaci zredukowanej entropii i pojemności cieplnej w funkcji zredukowanej temperatury przedstawiono na Rys.7.10 – 7.13, dla $\alpha = 3$ i $\alpha = 5$. Zostały one obliczone na podstawie wzorów (7.9) i (7.10).

Otrzymane przebiegi Δ , Ω , S , C ujawniają dość intrygujące cechy rozważanych modeli SCS [2, 3]. Układ wykazuje anomalne własności w zakresie temperatur od 0 do 0.31 dla $\alpha = 3$ i do 0.34 dla $\alpha = 5$. $\Delta\Omega$ jest malejącą funkcją temperatury (Rys.7.9), a szczelina odpowiednio rosnącą funkcją temperatury (Rys.7.8). Być może jest to wynikiem dodatkowej kreacji par Coopera, która staje się bardziej intensywna dla niższego prawdopodobieństwa spontanicznego tworzenia się par. Pooglądowo można by to ująć tak, że wzrost temperatury, w rozważanym zakresie, w pewien sposób rafinuje układ kwazicząstek zdolnych do parowania i intensyfikuje ten proces.

Zgodnie z Rys.7.13, w zakresie temperatury od 0.072 do 0.58 dla $\alpha = 3$ oraz od 0.078 do 0.61 dla $\alpha = 5$ pojemność cieplna staje się ujemna. Odpowiada to całkowitej niestabilności układu i sytuacji niefizycznej. Fenomenologicznie można by to tłumaczyć wzrostem liczby par Coopera wraz z temperaturą, obniżaniem się potencjału termodynamicznego układu i emisją nadmiernej energii tj. ciepła, co dodatkowo ogrzewa układ.

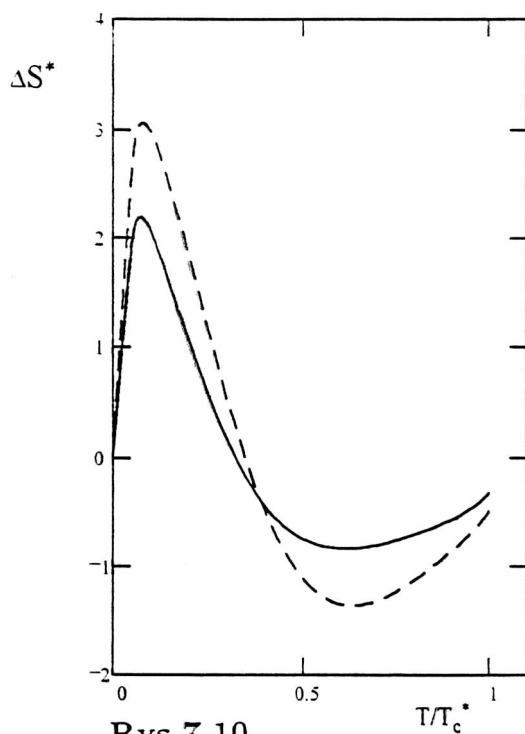
Z kolei, w zakresie temperatur powyżej 0.58 ($\alpha = 3$) i 0.61 ($\alpha = 5$) układ przedstawia zachowanie racjonalne (Rys.7.13).

Pojemność cieplna dla $T = T_c^*$ skacze do wartości, która odpowiada fazie normalnej. Skok ten wynosi 4.50 dla $\alpha = 3$ i 5.74 dla $\alpha = 5$ (patrz 7.15, 7.19). Typ przejścia fazowego jest określony przez zachowanie się parametru porządku. Ponieważ tu spada gwałtownie do 0, przejście fazowe S -sparowanej SCS do fazy normalnej jest przejściem I rodzaju [4].

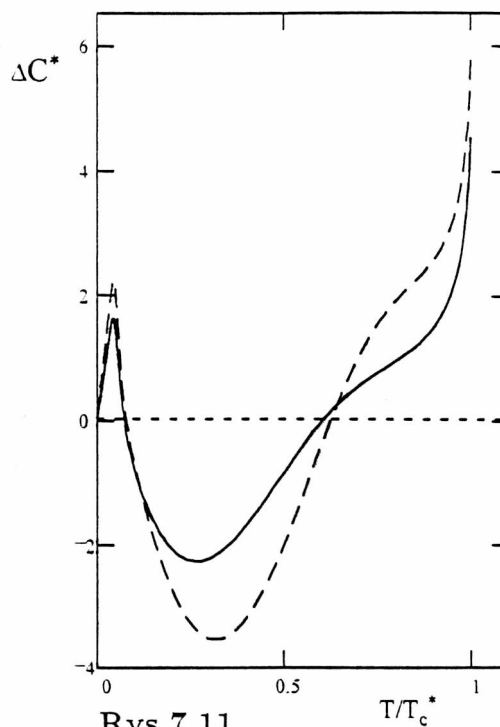
Podkreślmy, że entropia stanu normalnego SCS wynosi

$$S_n = \epsilon_0 N(0) \ln 2 + \frac{2}{3} \pi^2 N(0) T$$

gdzie ϵ_0 jest rzędu ϵ_F . Zapewnia to, że entropia zarówno stanu normalnego jak i S -sparowanego jest zawsze dodatnia.



Rys.7.10



Rys.7.11

Rys.7.10

Zredukowana entropia w funkcji zredukowanej temperatury dla dwóch wariantów modelu SCS (patrz wzór (6.1)) tj. dla $\alpha = 3$ (linia ciągła) i $\alpha = 5$ (linia przerywana). Charakterystyczne i ekstremalne punkty krzywych:

Dla $\alpha = 3$:

$(\frac{T}{T_c^*}; \Delta S^*) : (0.07; 2.19), (0.61; -0.84), (1.00; -0.33)$

Dla $\alpha = 5$:

$(\frac{T}{T_c^*}; \Delta S^*) : (0.08; 3.06), (0.63; -1.37), (1.00; -0.50)$

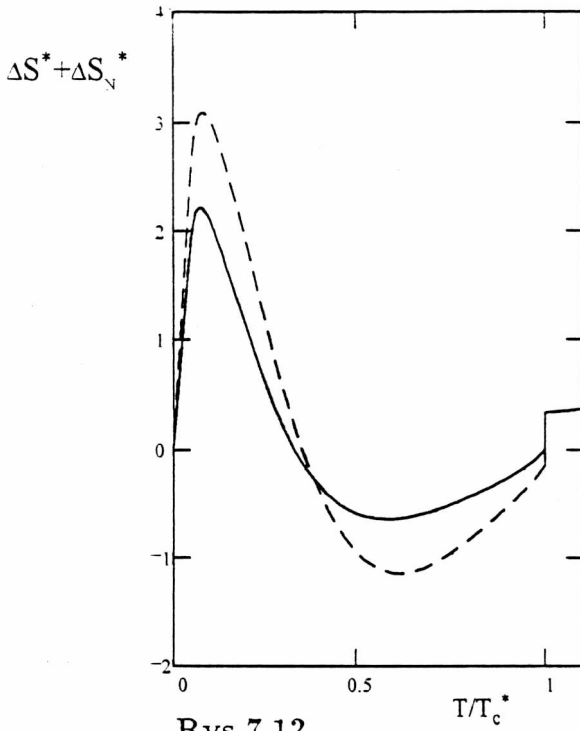
Maksimum i minimum ΔS^* musi odpowiadać punktom gdzie $\Delta C^* = 0$ (porównaj Rys.7.11).

Rys.7.11

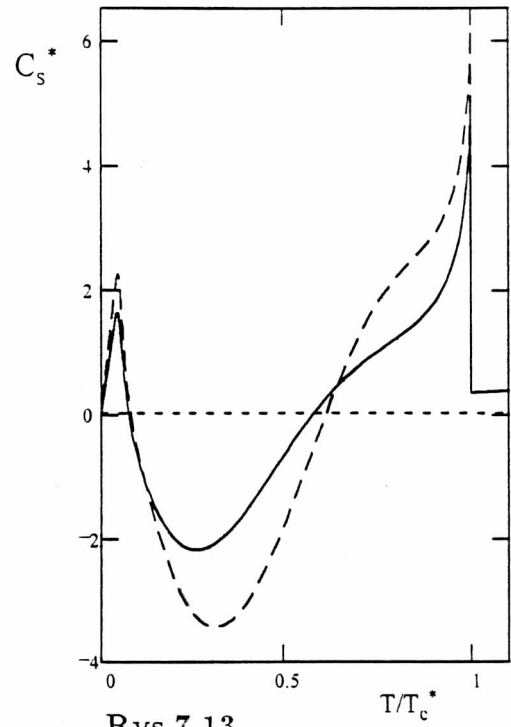
Zredukowana pojemność cieplna w funkcji zredukowanej temperatury dla $\alpha = 3$ (linia ciągła) i $\alpha = 5$ (linia przerywana). Współrzędne punktów ekstremalnych są następujące:

Dla $\alpha = 3$: $(\frac{T}{T_c^*}; \Delta C^*) : (0.04; 1.60), (0.07; 0.00), (0.26; -2.28), (0.61; 0.00), (1.00; 4.50)$

Dla $\alpha = 5$: $(\frac{T}{T_c^*}; \Delta C^*) : (0.04; 2.21), (0.08; 0.00), (0.31; -3.54), (0.63; 0.00), (1.00; 5.74)$



Rys.7.12



Rys.7.13

Rys.7.12

Patrz opis Rys.7.10. Punkty ekstremalne wykresu:

Dla $\alpha = 3$ (linia ciągła):

$(\frac{T}{T_c^*} ; \Delta S^* + \Delta S_N^*) : (0.07; 2.22), (0.31; 0.10), (0.58; -0.65), (1.00; 0.00)$

Dla $\alpha = 5$ (linia przerywana):

$(\frac{T}{T_c^*} ; \Delta S^* + \Delta S_N^*) : (0.08; 3.08), (0.34; 0.12), (0.61; -1.15), (1.00; -0.14)$

Punkty dla których $C_s^* = 0$ odpowiadają ekstremom $\Delta S^* + \Delta S_N^*$.

Rys.7.13

Patrz opis Rys.7.11. Punkty ekstremalne wykresu:

Dla $\alpha = 3$ (linia ciągła):

$(\frac{T}{T_c^*} ; C_s^*) : (0.04; 1.60), (0.07; 0.00), (0.26; -2.20), (0.58; 0.00)$

gdzie C_s^* skacze dla $T = T_c^*$ od 4.83 do 0.33.

Dla $\alpha = 5$:

$(\frac{T}{T_c^*} ; C_s^*) : (0.04; 2.23), (0.08; 0.00), (0.31; -3.43), (0.61; 0.00)$

Tutaj C_s^* doznaje skoku dla $T = T_c^*$ od 6.09 do 0.35.

8. Wykorzystanie parametrycznej formuły $\Delta C(\tau)$ do konwersji danych eksperymentalnych

Zestaw wyrażeń na podstawowe wielkości termodynamiczne (Δ , S , C) wyprowadzonych w formalizmie równań parametrycznych (3.6), (3.9), (3.10), w szczególności jednak formuły (3.18) i (3.19) na ΔS i ΔC , umożliwiają ich bezpośrednie i wygodne numerycznie określenie w oparciu jedynie o postać $\Delta(T)$ (możliwe jest więc przewidywanie własności termodynamicznych układu). Kluczowa jest tu niezmienniczość ΔS i ΔC względem T_c i T_c^* (przejścia ciągłe i nieciągłe), co zapewnia ogólność rozważań.

Ta zaleta może być wykorzystana w praktyce, co poniżej wykazano, bazując na przykładowych danych eksperymentalnych przedstawionych w rozdz.7, (Rys.7.3), dotyczących postaci szczeliny dla anizotropowego HTSC. Wykorzystano punkty pomiarowe dla osi b (patrz opis Rys. 7.3). Przyjętą procedurę określiliśmy mianem konwersji danych eksperymentalnych.

W technice "odzysku informacji" o układzie z punktów pomiarowych $\Delta(T)$ napotykamy na kilka utrudnień numerycznych. Podstawowym jest zdefiniowanie odpowiedniej analitycznej krzywej ciągłej (różniczkowalnej), będącej funkcją $\Delta(T)$ otrzymaną na drodze interpolacji punktów eksperymentalnych.

Problem takiego fitowania nie jest trywialny, nawet dla dużej ilości dostępnych punktów, ponieważ zawsze istnieje szeroki wybór takich krzywych, głównie w wyniku niepewności samych danych źródłowych .

Ponadto w wyniku przekształceń, całkowań i różniczkowań wyrażeń (patrz wzory np. (3.18) i (3.19)) możemy znacznie oddalić się od rzeczywistego przebiegu.

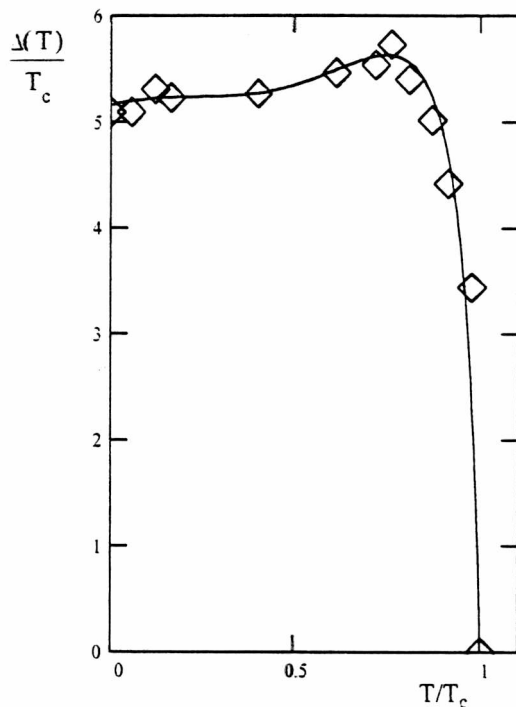
Świadomi tych utrudnień zastosowaliśmy procedurę konwersji danych eksperymentalnych do dwóch fitowanych krzywych, w celu zapewnienia większej pewności rezultatów. Dla jednej skorzystano ze wzorów (3.5), (3.9), (3.10) i (3.13) (METODA A), dla drugiej, bezpośrednio z (3.18) i (3.19) (METODA B).

Wyniki obliczeń przedstawiono na rysunkach Rys.8.1 – 8.5 (METODA A) oraz na Rys.8.6 – 8.8 (tylko C_s) (METODA B). W tym drugim przypadku określono tu tylko C_s po wyseparowaniu z ΔC części normalnej. Otrzymane krzywe są zbliżone

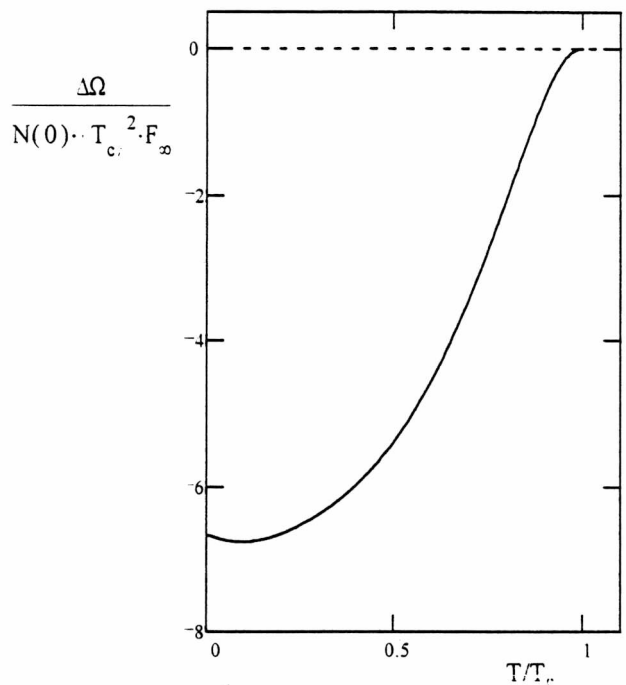
do tych z metody A. Potwierdza to racjonalne fitowanie punktów. Warto porównać Rys.8.7 i 8.8 z 8.5.

Możliwe jest tu również wyprowadzenie formuły na $\Delta(T)$ (tj. $Y(X)$), na podstawie ΔC , przez odwrócenie wzoru (3.19).

F_∞ jest dodatkowym parametrem formalizmu, którego wartość powinna być tak dobrana, by zapewnić stabilność układu ($C_s \geq 0$). W praktyce musi on być odpowiednio mały (patrz Rys.8.8). Jego głębsze związki z formalizmem wymagają dalszych studiów.



Rys.8.1 (METODA A)



Rys.8.2 (METODA A)

Rys.8.1 (METODA A)

Interpolowana postać krzywej temperaturowej zależności szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ dla nadprzewodnika wysokotemperaturowego $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+d}$ ($Bi2212$) (dla osi b , w płaszczyźnie miedziowo-tlenowej), na podstawie punktów eksperymentalnych spektroskopii tunelowej, z pracy [44].

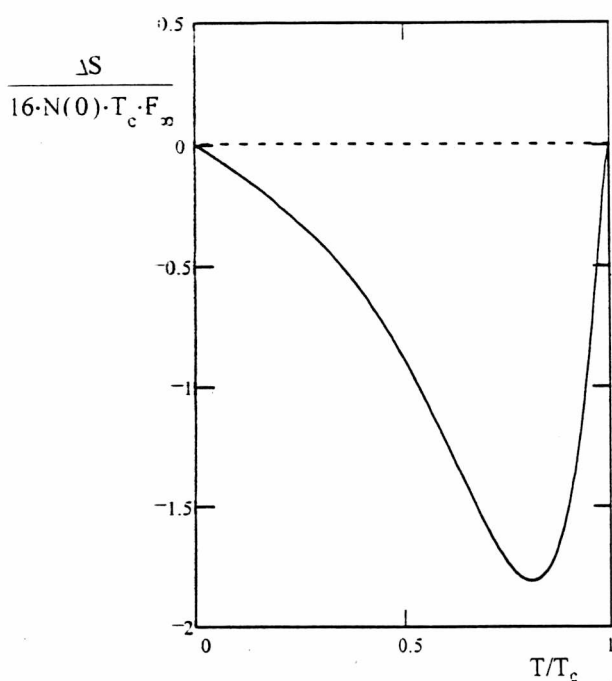
Porównaj Rys.7.3.

Rys.8.2 (METODA A)

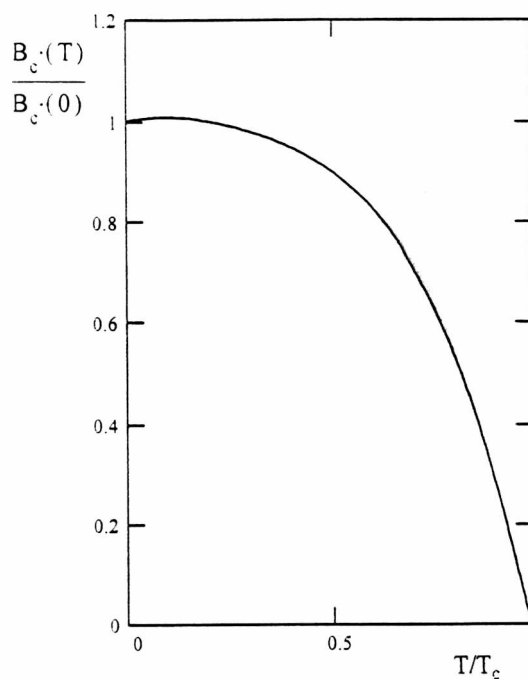
Postać temperaturowej zależności zredukowanej różnicy potencjału termodynamicznego pomiędzy fazą s i n $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$. Otrzymana na podstawie interpolowanej krzywej z Rys.8.1.

Ekstremalne punkty wykresu:

$$\left(\frac{T}{T_c} ; \frac{\Delta\Omega}{N(0)F_\infty T_c^2}\right) : (0.00; -6.67), (0.20; -6.77) \text{ minimum}$$



Rys.8.3 (METODA A)



Rys.8.4 (METODA A)

Rys.8.3 (METODA A)

Postać temperaturowej zależności zredukowanej różnicy entropii pomiędzy fazą s i n $\Delta S = S_s - S_n$. Otrzymana na podstawie interpolowanej krzywej z Rys.8.1.

Minimum w punkcie:

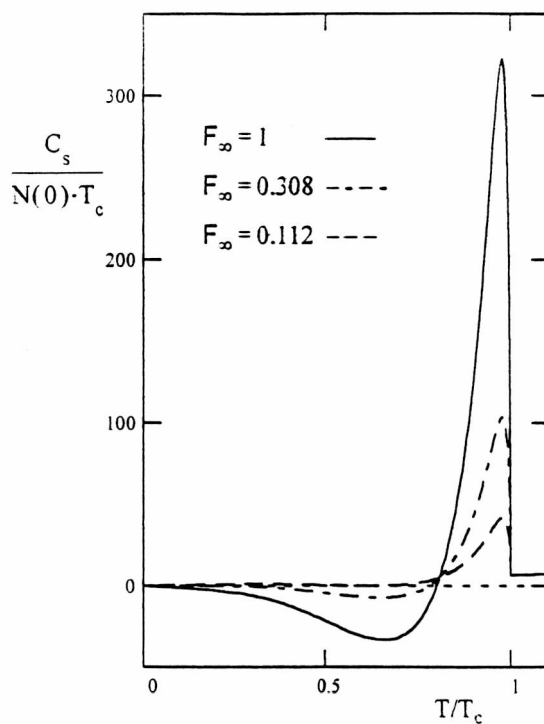
$$\left(\frac{T}{T_c} ; \frac{\Delta S}{16N(0)F_\infty T_c^2} \right) : (0.81; -1.81)$$

Rys.8.4 (METODA A)

Postać temperaturowej zależności zredukowanej krytycznej indukcji magnetycznej otrzymana na podstawie interpolowanej krzywej z Rys.8.1.

Maksimum w punkcie:

$$\left(\frac{T}{T_c} ; \frac{B_c(T)}{B_c(0)} \right) : (0.10; 1.007) \text{ maksimum}$$



Rys.8.5 (METODA A)

Rys.8.5 (METODA A)

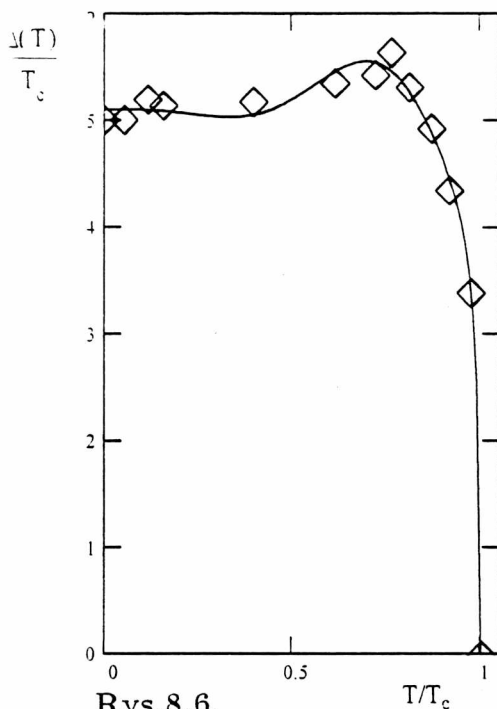
Postać temperaturowej zależności zredukowanej pojemności cieplnej fazy s C_s , otrzymana na podstawie interpolowanej krzywej z Rys.8.1.

Charakterystyczne punkty wynoszą odpowiednio:

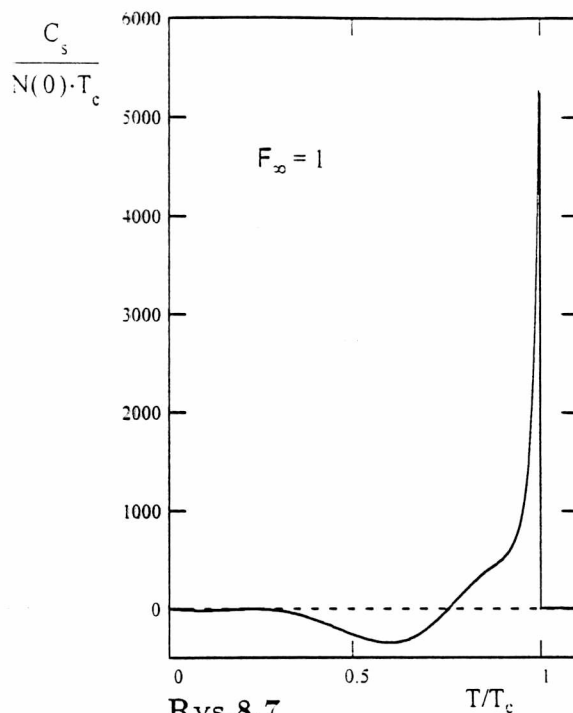
dla ($F_\infty = 1.00$): ($\frac{T}{T_c}$; $\frac{C_s}{N(0)F_\infty T_c}$) : (0.66; -33.20), (0.80;0.00), (0.98;319)

dla ($F_\infty = 0.308$): ($\frac{T}{T_c}$; $\frac{C_s}{N(0)F_\infty T_c}$) : (0.65; -7.27), (0.78;0.00), (0.98;104)

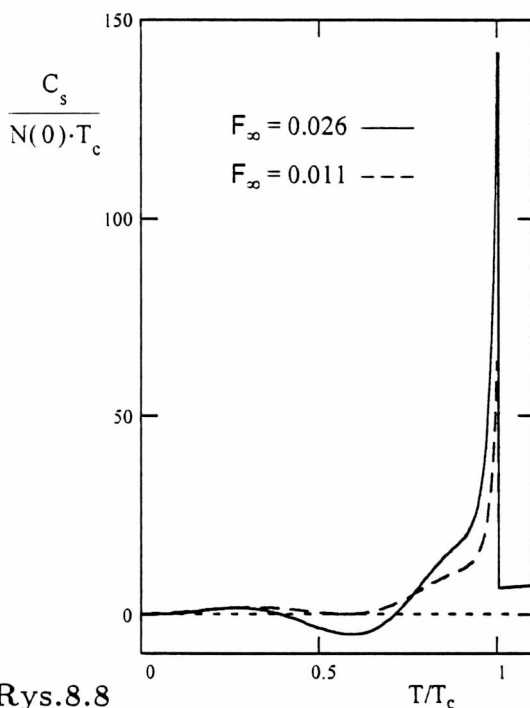
dla ($F_\infty = 0.112$): ($\frac{T}{T_c}$; $\frac{C_s}{N(0)F_\infty T_c}$) : (0.32;1.07), (0.62;0.00), (0.98;42.20)



Rys.8.6.



Rys.8.7



Rys.8.8

Nieco inna, w porównaniu z Rys.8.1, interpolowana postać krzywej temperaturowej zależności szczeliny energetycznej $\Delta(T)$ (Rys.8.6) oraz otrzymane w oparciu o nią, zredukowane pojemności cieplne *vs.* zredukowana temperatura. Odpowiada to Metodzie B. Punkty ekstremalne wykresów dla $F_\infty = 0.011$, $F_\infty = 0.026$ i $F_\infty = 1.00$ są następujące:

$$\left(\frac{T}{T_c} ; \frac{C_s}{N(0)F_\infty T_c}\right) : (0.31; 1.77), (0.56; 0.00), (1.00; 63.80)$$

$$\left(\frac{T}{T_c} ; \frac{C_s}{N(0)F_\infty T_c}\right) : (0.27; 1.56), (0.39; 0.00), (0.58; -5.19), (0.70; 0.00), (1.00; 142)$$

$$\left(\frac{T}{T_c} ; \frac{C_s}{N(0)F_\infty T_c}\right) : (0.59; -348.00), (0.75; 0.00), (1.00; 5250)$$

$$\text{Na Rys.(8.6) } \frac{\Delta(0)}{T_c} = 5.1.$$

9. Podsumowanie rezultatów

W pracy podana została uogólniona, parametryczna forma równania na szczelinę dla obszernej klasy nadprzewodników. Zwarta, symboliczna postać równania umożliwia nieco szerszą interpretację stałej sprzężenia λ , która dopuszcza jej większe wartości. Próbować można znaleźć związki podejścia parametrycznego z teorią silnego sprzężenia Eliashberga.

Zaproponowano parametryczną formułę na różnicę potencjału termodynamicznego pomiędzy fazą s i n , tzn. $\Delta\Omega = \Omega_s - \Omega_n$, która pozwala na analizę dwóch typów parametru porządku: *ciągłego* i *nieciągłego* (patrz $\Delta S(X = 1)$, (3.20)). Skok parametru porządku dopuszcza również do analizy parametryczna formuła dla różnicy entropii $\Delta S = S_s - S_n$.

Parametryzacja uogólnionego równania na szczelinę umożliwia jego rozwikłanie i efektywne numeryczne rozwiązanie (zapewnia szybką zbieżność całek w obliczeniach). Pozwala też na analizę szerokiej klasy przebiegów $\Delta(T)$, również istotnie różnych od standardowego modelu *BCS* (krzywe z dodatnią pochodną).

Formalizm wskazuje na pewne odmienne formy $\Delta(T)$, w których musi wystąpić skok parametru porządku (zrenormalizowanej szczeliny energetycznej), ze skokiem entropii i ciepłem utajonym.

Przedstawiono uogólniony, uniwersalny stosunek teorii *BCS* $\Delta(0)/T_C$, wyrażając go za pomocą dwóch charakterystycznych stałych formalizmu oraz podano udokładnioną, analityczną postać $\Delta(T)$, przy wpływie pól zewnętrznych: magnetycznego i nadprzepływu.

Określono bezpośrednią analityczną zależność pomiędzy $\Delta C = C_s - C_n$, a $\Delta(T)$ oraz, wynikający z niej ogólny, podstawowy warunek na zachowanie się *BCS*-owskiego typu zależności $\Delta(T)$ przy $T \rightarrow 0$, a także przedyskutowano, w granicach $T \rightarrow 0$ i $T \rightarrow T_c$, własności pojemności cieplnej analizowanych modeli układów fermionów ze sparowaniem typu *S*.

Podano przykłady numerycznych zastosowań rozwiniętego formalizmu dla rozszerzonego modelu *BCS* uwzględniającego pole magnetyczne i nadprzepływ oraz dla dwóch wariantów modelu statystycznej cieczy spinowej.

Możliwa jest też rekonstrukcja parametrycznych postaci $\Delta\Omega$, ΔS , ΔC (danych o układzie) na podstawie eksperymentalnej zależności Δ vs. T .

Literatura

- [1] R.Gonczarek, M.Mulak, Acta Phys. Pol. **A86**, (1994), 1007
- [2] M.Mulak, R.Gonczarek, Acta Phys. Pol. **A89**, (1996), 689
- [3] M.Mulak, R.Gonczarek, Preceedings of LT21, Czechoslovak Journal of Physics, **Vol.46** (1996), Part S6, 3379
- [4] M.Mulak, R.Gonczarek, w druku w Acta Phys. Pol.
- [5] A.A. Abrikosov, *Fundamental Theory of Metals*, North-Holland, Amsterdam 1988
- [6] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Kwantowa teoria układów wielu cząstek*, PWN, Warszawa 1988
- [7] J.Czerwono, Physica C **235–240**, (1994), 2307
- [8] J.Czerwono, Mol. Phys. Rep. **12**, (1995), 79
- [9] J.Spalek, W.Wójcik, Phys. Rev. **B37**, (1988), 1532
- [10] J.Spalek, Phys. Rev. **B40**, (1989), 5180
- [11] J.Maćkowiak, P.Tarasewicz, Mol. Phys. Rep. **15/16**, (1996), 61
- [12] M.Cyrot *et.al*, J. Phys. Cond. Mat. **1**, (1989), 4359
- [13] D.Belitz, Phys. Rev. **B35**, (1987), 1636
- [14] K.Hallberg, C.A.Balseiro, Phys. Rev. **B43**, (1991), 10289
- [15] J.Bardeen, L.Cooper, J.R.Schrieffer, Phys. Rev. **108**, (1957), 1175
- [16] R.Gonczarek, Acta. Phys. Pol. **A71**, (1987), 59
- [17] C.C.Tsuei, J.R.Kirtley, C.C.Chi, Lock See Yu-Jahnes, A.Gupta, T.Shaw, J.Z.Sun, M.B.Ketchen, Phys. Rev. Lett **73**, (1994), 593
- [18] S.N.Thorn, R.G.Daniels, M.T.M. Auditor, D.Hilvert, Nature **373**, (1995), 228
- [19] R.Baquero, D.Quesada, C.Trallero-Giner, cond-mat/9503021 (1995)

- [20] P.Udomsamuthirun, S.Ratanaburi, N.Saentalard, S.Yoksan, Journal of Superconductivity, **Vol.9**, No.6, (1996), 603
- [21] R.Grassme, P.Seidel, Journal of Superconductivity, **Vol.9**, No.6, (1996), 619
- [22] B.Barbiellini, M.Peter, M.Weger Journal of Superconductivity, **Vol.9**, (1996), 59
- [23] R.Folk, Yu.Holovatch, Journal of Physical Studies, **Vol.1**, No.2 (1996), 1
- [24] G.M.Eliashberg, Soviet Phys. JETP **11**, (1960), 696
- [25] K.Byczuk, J.Spalek, Phys. Rev. **B50**, (1994), 11403
- [26] K.Byczuk, J.Spalek, Acta. Phys. Pol. **A85**, (1994), 337
- [27] J.Spalek, Acta. Phys. Pol. **A85**, (1994), 39
- [28] J.Spalek, W.Wójcik Acta. Phys. Pol. **A85**, (1994), 357
- [29] J.Spalek, Physica **B163**, (1990), 621
- [30] J.Spalek, W.Wójcik, Sci. Bull. Jagiellonian Univ. **29**, (1990), 87
- [31] K.Byczuk, J.Spalek, W.Wójcik, Physica C **235–240**, (1994), 2347
- [32] K.Byczuk, J.Spalek, Phys. Rev. **B49**, (1994), 1454
- [33] J.Spalek, J. Solid State Chem. **88**, (1990), 70
- [34] M.L.Horbach, F.L.J.Vos, W. van Saarloos, Phys. Rev. **B48**, (1993), 4061
- [35] C.M.Varma, P.B.Littlewood, S.Schmitt–Rink, E.Abrahams, A.E.Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **63**, (1989), 1996
- [36] M.F.Crommie, G.Briceno, A.Zettl, Physica C **162–164**, (1990), 1397
- [37] T.Nishikawa, S.Shamoto, M.Sera, M.Sato, S.Ohsugi, Y.Kitaoka, K.Asayama, Physica C **209**, (1993), 553
- [38] C.G.Olson, R.Liu, A.B.Yang, D.W.Lynch, A.J.Arko, R.S.List, B.W.Veal, Y.C.Chang, P.Z.Jiang, A.P.Paulikas, Science **245**, (1989), 731
- [39] P.W.Anderson, Phys. Rev. Lett. **64**, (1990), 1839
- [40] C.G.Olson *et.al*, Phys. Rev. **B 42**, (1990), 381
- [41] H.Y.Hwang *et.al*, Phys. Rev. Lett. **72**, (1994), 2636
- [42] J.M.Tranquada, in: *Earlier and Recent Aspects of Superconductivity*, Eds. J.G.Bednorz, K.A.Müller, Springer, Berlin 1990, 422
- [43] M.Cyrot, D.Pavuna, *Wstęp do nadprzewodnictwa*, PWN, Warszawa 1996

- [44] H.Enomoto, H.Kokado, I.Matsubara, N.Mori, H.Ozaki, Preceedings of LT21, Czechoslovak Journal of Physics, **Vol.46** (1996), Part S3, 1331
- [45] E.A.Pashitskii, V.I.Pentegov, Preceedings of LT21, Czechoslovak Journal of Physics, **Vol.46** (1996), Part S2, 1053
- [46] T.Herrmannsdörfer, S.Rehmann, F.Pobell, Preceedings of LT21, Czechoslovak Journal of Physics, **Vol.46** (1996), Part S4, 2189
- [47] Yasushi Yokoya, Yoshiko Oi Nakamura, Solid State Comm. **Vol.98**, (1996), 133
- [48] Yasushi Yokoya, Yoshiko Oi Nakamura, Physica C **248**, (1995), 83
- [49] Yasushi Yokoya, Physica C **231**, (1994), 341
- [50] I.M.Ryżyk, I.S.Gradstein, *Tablice całek, sum, szeregów i iloczynów*, PWN, Warszawa 1964
- [51] B.Batlog, Physics Today, **June**, (1991), 44
- [52] S.Juszczuk, M.Gogołowicz, *Własności magnetyczne nadprzewodników wysokotemperaturowych*, Skrypt Uniwersytetu Śląskiego nr **481**, Katowice 1993
- [53] Acta Magnetica **IX**, Institute of Physics, Adam Mickiewicz University, Poznań 1992/1993
- [54] Ryszard Gonczarek, *Qualitative effects generated by Fermi liquid interaction in superconducting and superfluid systems*, Monografie Politechniki Wrocławskiej, **10**, Wrocław 1988

