

Streszczenie

W rozprawie doktorskiej, analizie teoretycznej poddany został stan nadprzewodzący występujący w wybranych związkach opartych na węglu (B_2C i CaC_6), wodorze (molekularnym i atomowym, odpowiednio pod ciśnieniem 414 GPa i 539 GPa) oraz w bogatym w wodór związku B_2H_6 (pod ciśnieniem 360 GPa). Z uwagi na fakt, że faza nadprzewodząca w wymienionych materiałach indukowana jest przez oddziaływanie elektron-fonon oraz charakteryzuje się wysoką wartością stałej sprzężenia elektron-fonon, obliczenia numeryczne przeprowadzone zostały w ramach formalizmu równań Eliashberga. W zależności od charakteru oddziaływania parującego oraz deparujących korelacji elektronowych, właściwości danego układu opisano w ujęciu izotropowym lub anizotropowym.

W szczególności wykazano, że stan nadprzewodzący w niskowymiarowym układzie B_2C charakteryzowany jest przez następujące wartości temperatury krytycznej: $T_C \in \langle 13; 20,4 \rangle$ K, dla zakresu wartości pseudopotencjału kulombowskiego $\mu^* \in \langle 0,1; 0,2 \rangle$. Ustalono również, że wartość T_C może wzrosnąć ze względu na specyficzną dwuwymiarową postać funkcji Eliashberga lub możliwości pojawienia się osobliwości van Hove'a na poziomie Fermiego. Dodatkowo obliczono wartości bezwymiarowych współczynników termodynamicznych: $R_\Delta \in \langle 3,87; 3,79 \rangle$, $R_H \in \langle 0,155; 0,157 \rangle$ oraz $R_C \in \langle 1,67; 1,62 \rangle$, które nie odbiegają znacznie od przewidywań teorii BCS ($[R_\Delta]_{BCS} = 3,53$, $[R_H]_{BCS} = 0,168$ oraz $[R_C]_{BCS} = 1,43$). W przyjętej notacji R_Δ oznacza stosunek niskotemperaturowego parametru porządku do temperatury krytycznej, R_H odnosi się do termodynamicznego pola krytycznego, natomiast współczynnik R_C związany jest z ciepłem właściwym badanego układu.

W przypadku drugiego materiału opartego na węglu, a mianowicie związku CaC_6 , obliczenia numeryczne zostały przeprowadzone w ramach jedno- oraz trójpasemowego formalizmu równań Eliashberga (pasma oznaczone odpowiednio jako a , b i c). Stwierdzono, że anizotropia oddziaływań bardzo wyraźnie wpływa na wartości parametru porządku. W szczególności dla przypadku izotropowego niskotemperaturowy parametr porządku wynosi 1,855 meV, natomiast w przypadku anizotropowym wartości są równe 1,180 meV, 2,364 meV oraz 1,864 meV. Bezwymiarowy współczynnik termodynamiczny dla niskotemperaturowej wartości parametru porządku wyniósł w przypadku jednopasmowym: $R_\Delta = 3,77$, natomiast w ramach opisu trójpasemowego: $R_\Delta^a = 2,40$, $R_\Delta^b = 4,83$

oraz $R_{\Delta}^c = 3,80$. Jakościowo analogiczny efekt został potwierdzony dla wartości masy efektywnej elektronu (m_e^*), t.j. w podejściu jednopasmowym: $m_e^* = 1,831m_e$, podczas gdy przypadek trójpasmowy przewiduje: $(m_e^*)^a = 1,682(m_e)^a$, $(m_e^*)^b = 2,258(m_e)^b$ oraz $(m_e^*)^c = 1,930(m_e)^c$, gdzie m_e oznacza masę pasmową elektronu. Udowodniono również, że anizotropia oddziaływań zauważalnie obniża niskotemperaturową wartości termodynamicznego pola krytycznego, nie ma jednak wpływu na wartość skoku ciepła właściwego w temperaturze krytycznej.

Obliczenia bazujące na wielopasmowym formalizmie równań Eliashberga zostały przeprowadzone również dla metalicznego molekularnego wodoru pod ciśnieniem $p = 414$ GPa. W ujęciu trójpasmowym stwierdzono, że $T_C = 84$ K. Wartości bezwymiarowego stosunku R_{Δ} wyniosły odpowiednio: 5,55, 3,96 oraz 3,53. Należy zauważyć, że pierwsza wartość znacznie odbiega od wyniku przewidywanego przez model BCS. Uzyskane wyniki potwierdziły, że anizotropia oddziaływania prującego i deparujących korelacji elektronowych istotnie wpływa na całkowitą znormalizowaną funkcję gęstości stanów, termodynamiczne pole krytyczne oraz różnicę ciepła właściwego między stanem nadprzewodzącym a normalnym. Tym samym stwierdzono, że literaturowe wartości tych funkcji, rozpatrywane w ujęciu jednopasmowym, są znacznie niedoszacowane. Ostatecznie wyznaczone maksymalne wartości masy efektywnej elektronu w danym paśmie wyniosły: $(m_e^*)^a = 2,99(m_e)^a$, $(m_e^*)^b = 2,10(m_e)^b$ oraz $(m_e^*)^c = 1,94(m_e)^c$.

Ze względu na brak anizotropii oddziaływania elektron-fonon i elektron-elektron, własności termodynamiczne stanu nadprzewodzącego w atomowym wodorze ($p = 539$ GPa) zostały poddane analizie w ramach jednopasmowego formalizmu Eliashberga. Wykazano, że kondensat nadprzewodzący charakteryzuje się bardzo wysoką wartością temperatury krytycznej ($T_C = 357$ K), znacznie wyższą niż w poprzednio rozpatrywanym przypadku dla $p = 414$ GPa. Dodatkowo wartości odpowiednich stosunków termodynamicznych wyniosły: $R_{\Delta} = 4,95$, $R_H = 0,126$ oraz $R_C = 2,78$. Zwrócono uwagę, że odbiegają one znacznie od przewidywań teorii BCS.

W ostatnim kroku omówiono parametry termodynamiczne stanu nadprzewodzącego indukującego się w związku B_2H_6 pod ciśnieniem 360 GPa. Obliczenia numeryczne zostały przeprowadzone w ramach jednopasmowego formalizmu Eliashberga. Pokazano, że niezależnie od przyjętej wartości pseudopotencjału kulombowskiego temperatura krytyczna jest wysoka i wynosi: $T_C \in \langle 147; 87 \rangle$ K, dla $\mu^* \in \langle 0,1; 0,3 \rangle$. Następnie zwrócono uwagę, że bezwymiarowe parametry termodynamiczne znacznie odbiegają od przewidywań klasycznej teorii BCS, co jest szczególnie widoczne dla niskich wartości pseudopotencjału kulombowskiego: $R_{\Delta} \in \langle 4,24; 3,98 \rangle$, $R_C \in \langle 2,33; 2,17 \rangle$ oraz $R_H \in \langle 0,144; 0,168 \rangle$.

Dnia 2020 Ewa