

**Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej**

**Praca magisterska**

**Rafał Domaradzki**

kierunek studiów: **fizyka techniczna**

**Nadprzewodnictwo w cienkich warstwach metalicznych**

Opiekun: **dr inż. Paweł Wójcik**

**Kraków, wrzesień 2016**

Oświadczam, świadomy odpowiedzialności karnej za poświadczenie nieprawdy, że niniejszą pracę dyplomową wykonałem osobiście i samodzielnie i nie korzystałem ze źródeł innych niż wymienione w pracy.

……………………………………………….

(czytelny podpis)

**Spis treści**

[1. Wprowadzenie 4](#_Toc456996322)

[2. Cel pracy 5](#_Toc456996323)

[3. Zawartość pracy 5](#_Toc456996324)

[4. Informacje teoretyczne 6](#_Toc456996325)

[5. Wykonanie programu 12](#_Toc456996326)

[6. Obliczenia numeryczne 13](#_Toc456996327)

[6.1. Potencjał chemiczny 13](#_Toc456996328)

# Wprowadzenie

W ostatnich latach dokonał się bardzo duży postęp w nanotechnologii, który umożliwia wytwarzanie wysokiej jakości metalicznych nanostruktur takich jak nanowarstwy, nanodruty oraz nanocząstki. W roku 1963 Blatt i Thomson zapoczątkowali badania nad kwantowym efektem rozmiarowym i jego wpływem na fazę nadprzewodzącą w cienkich warstwach metalicznych [1]. Ich praca dowiodła istnieniu oscylacji temperatury krytycznej w funkcji grubości warstwy, które są efektem wynikającym z ograniczenia ruchu elektronu w kierunku prostopadłym do powierzchni warstwy. Gdy rozmiary układu stają się porównywalne do długości fali elektronu na poziomie energii Fermiego w modelu elektronów swobodnych sfera Fermiego zostaje rozszczepiona na układ dyskretnych dwuwymiarowych podpasm parabolicznych, których energia wzrasta wraz ze zmniejszającą się grubością warstwy. Teoria przewiduje, że za każdym razem, gdy dno podpasma przechodzi przez poziom Fermiego następuje znaczny wzrost temperatury krytycznej w postaci piku. Niestety przez długi czas eksperymenty nie były w stanie tego wykazać, a spowodowane to było trudnościami technicznymi w wytwarzaniu jednorodnych warstw, które zwykle były polikrystaliczne i zawierały dużą liczbę defektów. Obecnie wiele trudności w wytwarzaniu warstw o odpowiedniej jakości zostało pokonanych, co ponownie otworzyło tematykę oscylacji temperatury krytycznej w nanowarstwach.

Ostatnio, Guo i in. w artykule [2] opisali wytwarzanie nanowarstw ołowiu na podłożu krzemowym i zaobserwowali wspomniane wyżej oscylacje temperatury krytycznej w funkcji liczby monowarstw ołowiu. Bezpośredni związek tych oscylacji z kwantowym efektem rozmiarowym został potwierdzony niezależnie przez pomiar energii stanów związanych w studni kwantowej przy użyciu spektroskopii fotoemisyjnej. Wyniki pomiarów zaprezentowane w [2] dotyczyły jednak tylko warstw o grubości większej niż 20 ML z powodu występowania problemu stabilności termodynamicznej cieńszych warstw od 20 ML składających się z parzystej liczby monowarstw. Badania nad nanowarstwami ołowiu zostały także rozszerzone przez Eom i in. w artykule [3], w którym oscylacje zostały potwierdzone w warstwach ołowiu o grubości 5 – 18 ML. W eksperymencie tym temperatura krytyczna była mierzona za pomocą skaningowej mikroskopii tunelowej co pozwoliło na uniknięcie niejasności związanych z obecnością warstwy złota, koniecznej w pomiarach transportowych przeprowadzanych w pracy [2]. Odkryto istnienie bezpośredniej zależności pomiędzy oscylacjami gęstości stanów na poziomie Fermiego oraz oscylacjami temperatury krytycznej. Dodatkowo, pomiary temperatury krytycznej dla warstw ołowiu na podłożu krzemowym wykazały istnienie oscylacji z okresem dwóch nanowarstw atomowych (z ang. bilayer lub even-odd oscillations). Jak wykazano, temperatura krytyczna dla warstw o parzystej liczbie monowarstw jest większa niż dla warstw o nieparzystej ich liczbie w odpowiednich zakresach grubości warstw. Ta zależność zmienia się z okresem 7 – 9 ML co zostało zaobserwowane w wielu eksperymentach [4] [5] [6].

Obecnie nadal prowadzi się badania dotyczące tego zjawiska co widać na przykładzie pracy Zhanga i in. [7] (Superconductivity\_in\_one-atomic-layer\_metal\_films\_.pdf) opublikowanej w 2010 r., w której badają oni nadprzewodnictwo nanowarstw ołowiu oraz indu o grubości 1ML na podłożach krzemowych. Podobnie w pracy Navarro-Moratalla i in. [8] z lutego tego roku bada się nadprzewodnictwo w cienkich warstwach, ale już nie metalicznych tylko półprzewodnikowych wykonanych z TaS2 jak i sama niniejsza praca jest przykładem, że temat ten nie został zapomniany i wiele takich badań zostanie jeszcze wykonanych w przyszłości.

(akapit o pracach 1 ML)

(akapit o półprzewodnikach)

# Cel pracy

W niniejszej pracy został zbadany wpływ gęstości elektronów na oscylacje temperatury krytycznej w cienkich warstwach metalicznych. Na początku zostały wykonane obliczenia analityczne przekształcające równanie Bogoliubova-de Gennes do postaci dogodnej dla obliczeń numerycznych, których wyniki zostały następnie porównane z eksperymentami…………

# Zawartość pracy

W 1 rozdziale……

# Informacje teoretyczne

Istnieje wiele modeli teoretycznych wyjaśniających zjawisko nadprzewodnictwa. Jednym z głównych przykładów jest teoria BCS (nazwa pochodzi od inicjałów jej twórców: Johna Bardeena, Leona Coopera i Roberta Shrieffera), która zakłada, że w stanie nadprzewodzącym elektrony przewodnictwa metalu (fermiony) mogą łączyć się w pary (pary Coopera), które są bozonami i podlegają kondensacji Bosego-Einsteina. (<https://pl.wikipedia.org/wiki/Teoria_BCS>)

Na podstawie teorii BCS Bogoliubov oraz de Gennes wprowadzili formalizm matematyczny, który następnie ewoluował w równanie Bogoliubova-de Gennes. Równanie to dobrze nadaje się do opisu nadprzewodzących właściwości układów mikroskopowych, w których występują nieciągłości (takie jak brzegi nanowarstw) dlatego też zostanie tutaj użyte.

Postać równania Bogoliubova-de Gennes jest następująca:

(coś o BCS?) <bogoliub: 9P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* \_W. A.

Benjamin, New York, 1966\_.:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Do badania układów mikroskopowych, w których występują nieciągłości (takie jak brzegi nanowarstw) stosuje się równania Bogoliubova-de Gennes w następującej postaci:

(A mathematical formulation based on the BCS theory was developed by Bogoliubov where he introduced the concept of coherent mixtures of particles and holes to describe a superconductor at finite temperatures. These mixed particle-hole excited states are known as Bogoliubons. The introduction of operators for these Bogoliubons has been generalized and evolved into what is now known as the Bogoliubov-deGennes (BdG) equation [15].) <https://openaccess.leidenuniv.nl/bitstream/handle/1887/14751/02.pdf?sequence=7> str5

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  | (1) |

gdzie jest hamiltonianem dla elektronu, – potencjał chemiczny, – parametr porządku, i – elektronowe i dziurowe funkcje falowe, – energie własne układu.

Równanie Bogoliubova-de Gennes jest bardzo dobrym narzędziem do badania właściwości nadprzewodzących w nanowarstwach metalicznych jednak ma jedną istotną wadę – obliczenia numeryczne są zbyt długotrwałe. Można ją częściowo wyeliminować poprzez zastosowanie pewnych przybliżeń, które zostały przedstawione poniżej.

Zakładamy, że nanowarstwa ma nieskończoną powierzchnię i skończoną grubość *L* jak to zostało przedstawione na Rysunek 1:



**Rysunek 1.** Schemat nanowarstwy

W tym przypadku możemy funkcje falowe zapisać w postaci:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  |  | (2) | |
|  |  | | (3) |

Są to fale płaskie będące rozwiązaniem równania Schrödingera dla cząstki swobodnej.

Zakładając wstawiamy równania (2) i (3) do równania (1) otrzymując:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

gdzie

Dodatkowo w kierunku osi „z” układ ma postać nieskończonej studni potencjału (**Rysunek 2**), a z mechaniki kwantowej wiemy, że funkcje oraz wartości własne nieskończonej studni potencjału są następującej postaci:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |
|  |  |  |



**Rysunek 2.** Funkcje falowe nieskończonej studni potencjału

Następnie zapisując w bazie funkcji własnych nieskończonej studni potencjału otrzymujemy:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Wstawiamy to do równania (xxx) mamy:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Mnożymy obie strony równań przez i całkujemy po :

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Pamiętając, że stany studni są ortogonalne:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

oraz:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

otrzymujemy:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Analogicznie dla drugiego równania:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

gdzie ,

Jest to układ równań , który możemy uprościć przy założeniu (założenie Andersona) otrzymując równań w postaci:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Następnie rozwiążmy problem własny z powyższego równania:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Otrzymujemy wartości własne energii równe:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

– stała sprzężenia elektron-fonon

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Przechodzimy na współrzędne biegunowe:

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Wstawiając ze wzoru (xxx):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Wstawiamy z równania (xxx):

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

Mnożymy obustronnie przez i całkujemy :

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  |  |  |

# Wykonanie programu

Program do wykonywania obliczeń numerycznych został napisany w języku C. Jego głównym zadaniem było numeryczne rozwiązanie równania samozgodnego (xxx). Równanie to rozwiązuje się poprzez zadanie jakiejś początkowych wartości dla przerwy nadprzewodzącej , wstawiamy do równania i otrzymujemy nowe wartości . Robimy to tak długo aż wartości kolejnych przestaną się nam w istotny sposób zmieniać. Całki we wzorze zostały policzone metodą prostokątów.

Wszystkie wykresy w pracy zostały wykonane przy pomocy języka Python z wykorzystaniem biblioteki matplotlib.

# Obliczenia numeryczne

## Potencjał chemiczny

Do obliczeń jak to widać w równaniu (xxx) potrzebujemy wartości potencjału chemicznego. Dla temperatur bliskich zeru (czyli takich z jakimi będziemy mieli do czynienia w tej pracy) potencjał chemiczny można utożsamiać z energią Fermiego, która jest energią graniczną dla stanów fermionowych. Stany o energii niższej są zajęte przez fermiony, a stany o energii wyższej są wolne. (<https://pl.wikipedia.org/wiki/Potencja%C5%82_chemiczny>)

Wartość tego potencjału została otrzymana w następujący sposób:

- najpierw obliczono koncentrację elektronów w modelu trójwymiarowym gazu doskonałego ze wzoru:

i otrzymano wartość

- następnie ze wzoru (xxx) korzystając z metody bisekcji obliczano wartość potencjału chemicznego odpowiadającego danej koncentracji elektronów dla odpowiednich grubości nanowarstw metalicznych. Wyniki zaprezentowano na rys. xxx. Widać, że wraz ze wzrostem grubości nanowarstwy potencjał chemiczny maleje aż do osiągnięcia wartości „bulk” jaką się otrzymuje dla materiałów makroskopowych. Na wykresie widoczne są też małe oscylacje wartości potencjału chemicznego z jakimi będziemy też się spotykać na następnych wykresach.

**Bibliografia**

|  |  |
| --- | --- |
| [1] | T. C. J. Blatt J. M., „Phys. Rev. Lett. 10, 332,” 2006. |
| [2] | Z. Y. F. B. X. Y. H. T. Z. T. Z. Z. L. X. Z. W. G. W. E. G. N. Q. Q. Z. Q. J. F. Z. Z. X. X. Q. K. Guo Y., „Science 306, 1915,” 2004. |
| [3] | Q. S. C. M. Y. S. C. K. Eom D., „Phys. Rev. Lett. 96, 027005,” 2006. |
| [4] | T. Zhang, P. Cheng, W. J. Li, Y. J. Sun, X. G. Wang, G. Zhu, K. He, L. L. Wang, X. C. Ma, X. Chen, Y. Y. Wang, Y. Liu, L. H. Q, J. F. Jia i Q. K. Xue, „Nat. Phys. 6, 104,” 2010. |
| [5] | M. M. Özer, J. R. Thompson i H. H. Weitering, „Nat. Phys. 2, 173,” 2006. |
| [6] | M. M. Özer, Y. Jia, Z. Zhang, J. R. Thompson i H. H. Weitering, „Science 316, 1594,” 2007. |
| [7] | Z. T. i. in., „Superconductivity in one-atomic-layer metal films grown on Si(111),” *Nature Physics 6, 104,* 2010. |

**Spis rysunków**

[**Rysunek 1.** Schemat nanowarstwy 6](#_Toc456996315)

[**Rysunek 2.** Funkcje falowe nieskończonej studni potencjału 8](#_Toc456996316)