# L. Skrbek (editor) a kolektiv

Mgr. Tomáš Brauner, Ph.D., ÚJF AV ČR, v.v.i., Řež prof. RNDr. Alexander Feher, DrSc., PF UPJŠ Košice doc. Miroslav Grajcar, DrSc., FMFI KU Bratislava Ing. Jiří Hošek, CSc., ÚJF AV ČR, v.v.i., Řež RNDr. Zdeněk Janů, CSc., FZÚ AV ČR, Praha RNDr. Miloš Jirsa, DrSc., FZÚ AV ČR, Praha RNDr. Jan Kuriplach, CSc., MFF UK Praha
RNDr. Ján Nyeki, CSc., Royal Holloway, University of London doc. RNDr. Miloš Rotter, CSc., MFF UK Praha
prof. RNDr. Peter Samuely, DrSc., ÚEF SAV, Košice prof. RNDr. Bedřich Sedlák, DrSc., MFF UK Praha
prof. RNDr. Ladislav Skrbek, DrSc., MFF UK Praha
RNDr. Peter Skyba, CSc., ÚEF SAV, Košice
Ing. Pavel Středa, DrSc., FZÚ AV ČR, Praha

# Fyzika nízkých teplot

VYDAL MATFYZPRESS PRAHA 2009

# Předmluva

#### L. SKRBEK

Fyziku nízkých teplot jako vědní disciplínu obvykle datujeme od okamžiku prvního zkapalnění helia Heike Kamerlinghem-Onnesem v roce 1908. Po uplynutí sta let její existence dnes není možné jednoznačně vymezit, které problémy zahrnuje, ani jakou teplotou je svrchu omezena - uvidíme v textu, že stejná absolutní teplota může být pro jeden problém považována za velmi nízkou, kdežto pro jiný či dokonce stejný, ale v jiném systému, za velmi vysokou.

Tato publikace navazuje a doplňuje skripta se stejným názvem Fyzika nízkých teplot, která vyšla ve vydavatelství Matfyzpress v roce 1998 a po více než deset let úspěšně plnila a stále plní funkci vysokoškolské učebnice, avšak vědecký pokrok, nové významné objevy a rozvoj oboru obecně si řekly o jejich podstatnou inovaci. Autorský kolektiv byl vzhledem k širšímu záběru problematiky a k daleko většímu rozsahu textu částečně obměněn a rozšířen. Bylo proto z praktického hlediska nutné celý text rozdělit do dvou dílů, ačkoli oba díly patří organicky k sobě a jednotlivé kapitoly jsou vzájemně silně provázané.

Výběr témat následujících kapitol je v poměrně dobré shodě s problémovýni okruhy programu mezinárodních světových konferencí nízkých teplot se zavedenou zkratkou LT. Ty jsou již tradičně pořádány každé tři roky a pravidelně mají kolem 1500 účastníků. Zatím poslední z nich, LT 25, se konala jako jubilejní u příležitosti kulatého výročí zkapalnění helia v Amsterdamu s exkurzí do Leidenu, kde první zkapalnění helia před sto lety proběhlo.

Název a náplň skript *Fyzika nízkých teplot* může vyvolat polemiku ohledně skladby jednotlivých kapitol. Fyziku nízkých teplot lze, podle mého názoru, chápat buď v užším nebo v širším smyslu. V užším smyslu fyzika nízkých teplot zahrnuje jen takové fyzikální jevy, které byly objeveny pouze díky ochlazení systému pod určitou kritickou teplotu, která byla cílevědomě dosažena v důsledku zdokonalování chladících metod. Typickými příklady takových jevů jsou Boseova - Einsteinova kondenzace, supravodivost, supratekutost či spontánní uspořádání jaderných magnetických momentů. Tato kniha však představuje fyziku nízkých teplot v širším smyslu, neboť popisuje a diskutuje i řadu dalších fyzikálních jevů, které mohou při pokojové teplotě existovat a být pozorovatelné, ale při snížení teploty se projevují mnohem výrazněji a lze je snáze studovat. Se snižováním teploty daného systému je zpravidla nutné přejít od klasického fyzikálního popisu ke kvantovému, a to nejen na mikroskopických vzdálenostech, neboť jevy jako supratekutost či supravodivost lze chápat jako projevy kvantové mechaniky v makroskopickém měřítku.

Za sto let své existence se fyzika nízkých teplot ať už přímo či nepřímo podílela na významných fundamentálních experimentálních objevech a teoriích, které hrají nezastupitelnou roli v současném vědeckém světovém názoru. Svědčí o tom i dlouhý seznam Nobelových cen, udělených za tyto práce a objevy mnoha osobnostem světové fyziky jakými jsou Kamerlingh-Onnes, Bardeen, Cooper, Schrieffer, Josephson, Giaver, Kapica, Landau, Osheroff, Richardson, Lee, von Klitzing, Bednorz, Műller, Abrikosov, Ginzburg, Leggett, Chu, Cohen-Tannoudji, Phillips, Cornell, Ketterle, Wieman či Nambu.

Podle obecně přijatého vědeckého světového názoru vznikl vesmír při velkém třesku a od té doby se rozpíná. Uvažujeme-li teplotu systému jako míru kinetické energie jeho konstituentů, byla v počátcích existence vesmíru obrovská, ale při jeho rozpínání se snižuje. V určité rané fázi jeho vývoje došlo ke vzniku záření, jehož pozůstatky, nazývané reliktní záření, můžeme i dnes na Zemi detekovat a odpovídá mu teptota kolem 2,7 K. Protože toto záření je všudypřítomné a doléhá k nám ze všech stran, má se za to, že ve vesmíru nižší teplota nemůže existovat. Dokonce lze vyslovit názor, že nalezení nějaké oblasti s nižší teplotou by byl přímý důkaz existence jiné civilizace (ponechme stranou, že k detekci tohoto faktu bychom zřejmě potřebovali, aby nízkoteplotní oblast byla galaktických rozměrů). Na Zemi v laboratoři a dnes již i na oběžné dráze však člověk dokáže dosáhnout mnohem nižších teplot. Současný teplotní rekord spinového systému jader rhodia (podrobně viz kapitolu o jaderném magnetizmu) je o neuvěřitelných osm řádů nižší. Fyzika nízkch teplot tak dokáže vytvořit podmínky, které (samozřejmě podle našich současných znalostí) nikde jinde než v nízkoteplotních laboratořích neexistují a běžně studuje jevy, které by nikde v přírodě nemohly nastat. Vesmír se ovšem dál rozpíná a v důsledku toho jeho teptota klesá, podle dostupných odhadů asi o 200 pK ročně. Fyzika nízkých teplot již dokázala pro teplotní úroveň jednotek Kelvinů vyvinout teploměry s citlivostí kolem 50 pK, takže lze vážně uvažovat o experimentu, který by velmi přesným měřením teploty potvrdil hypotézu rozpínání vesmíru.

Problémy kosmologie a fyzika nízkých teplot však spolu souvisejí mnohem úžeji, než by se mohlo na první pohled zdát. Ukázalo se, že vzhledem k podobnosti charakteru narušených symetrií a matematickému popisu chování některých kondenzovaných systémů, zejména supratekutého helia, je možné kosmologické procesy úspěšně laboratorně modelovat. Kibbleův - Zurkův mechanismus vzniku kvantovaných vírů v supratekutém heliu je toho dokladem. Proto jsme tomuto perspektivnímu problému věnovali celou kapitolu. Spojení fyziky elementárních částic - kvantové chromodynamiky a idejí fyziky nízkých teplot objasňujících supravodivost a supratekutost pak vyústilo do další netradiční kapitoly o supratekutosti barevných kvarků.

Stranou jsme nemohli nechat ani rychlý rozvoj v oblasti supravodivosti a jejích aplikací. Zde je odražen pokrok ve studiu nových supravodivých materiálů a vysokoteplotní supravodivosti, o níž víme díky cílevědomému výzkumu v mnoha laboratořích velmi mnoho, ačkoli její mechanismus stále není uspokojivě vysvětlen. Pozornost věnujeme i oblasti slabé supravodivosti a jejímu praktickému využití formou dosud nejcitlivějších detektorů - skvidů a uplatnění supravodivých struktur v horkém tématu naší doby - vývoji kvantového počítače.

K fantasticky rychlému rozvoji lidského poznání přispěly experimentální a teoretické studie systémů ultrachladných atomových plynů, ať již bosonových, fermionových nebo jejich směsí. Ani dnes již "klasické" heliové kvantové systémy nezůstávají pozadu - kromě kvantové difůze, vypařování či kavitace zejména nedávný experi-

mentální objev neklasického momentu hybnosti pevného helia, tzv. supersolidity, či nové výsledky v oboru kvantové turbulence a jejich dopad na pochopení otevřeného problému turbulence vazkých tekutin nemohly zůstat stranou pozornosti autorského kolektivu.

Text skript pak završují kapitoly o vlastnostech pevnolátkových systémů při nízkých teplotách. Duální charakter elektronů a dalších kvazičástic vede k dříve netušeným fyzikálním fenomenům jakými jsou Kondův jev, přechody kov-izolátor, lokalizace, Kapicův odpor, Aharonův-Bohmům jev či celočíselný a zlomkový Hallův jev.

K popsaným metám nízkoteplotní fyziky a k pochopení celé dlouhé řady jejích základních principů však vede dlouhá cesta. Ačkoli jsou následující kapitoly jejím pouhým začátkem, jde podle mého názoru o velmi seriozní pokus čtenáře na této cestě provázet a pokud možno rigorózně jej s poměrně rozsáhlým materiálem seznámit. Ačkoli chápu, že pro mnohé nebude následující text jednoduchý ani intelektuálně ani technicky, spolu se svými spoluautory věřím, že si své čtenáře najde.

Fyzika nízkých teplot má u nás velmi dobrou tradici a v bývalém Československu se začala rozvíjet v 50. letech minulého století, helium bylo u nás poprvé zkapalněno v roce 1960. O mezinárodní prestiži naší fyziky nízkých teplot svědčí i to, že pořadatelství mezinárodní konference nízkých teplot LT 21 a satelitu ultranízkých teplot ULT v roce 1996 bylo svěřeno Praze a Košicím.

Nízkoteplotní výzkum v Praze, Košicích, Bratislavě a Brně se vždy vzájemně doplňoval a je tedy jen přirozené, že tento text vznikl po vzájemné spolupráci českých a slovenských odborníků. Jsem také velmi rád, že učebnice je psaná oběma našimi jazyky autory, kteří mají k těmto pracovištím velmi blízký vztah. Podle mého názoru je nespornou předností, že téměř všechny jednotlivé části byly napsány odborníky, kteří se touto problematikou v praxi aktivně zabývají, vědecky publikují a jsou v ní mezinárodně uznávanými odborníky. Samotný fakt, že autorský kolektiv bylo takto možné sestavit, svědčí o dobré úrovni fyziky nízkých teplot v Česku a na Slovensku.

Chtěl bych touto cestou poděkovat všem spoluautorům za jejich příspěvky ke společnému dílu a Mgr. Michaele Blažkové-Král'ové, Ph.D., za neocenitelnou pomoc při technické editaci textu a obrázků.

Věřím, že skripta splní účel, pro který byla napsána a budou nejenom plnit funkci kvalitní vysokoškolské učebnice, ale stanou se i užitečným zdrojem informací pro fyziky a technické pracovníky v oboru kryogeniky.

# 1 Ideální a slabě interagující Boseovy a Fermiho plyny

J. Hošek, L. Skrbek

# 1.1 Úvod

Svět na mikroskopických vzdálenostech je kvantový. Při velmi nízkých teplotách a odpovídajících částicových hustotách je svět kvantový i na makroskopických škálách. Fyzikální jevy jako supratekutost či supravodivost lze charakterizovat jako projevy kvantové mechaniky v makroskopickém měřítku. Zadáním této úvodní kapitoly je teoreticky popsat, hlouběji pochopit a na základě tohoto poznání předpovídat chování jak ideálních (tj. neinteragujících) tak i interagujících systémů mnoha částic při nízkých teplotách, přičemž vymezení pojmu nízká teplota z tohoto popisu přirozeně vyplyne. Omezíme se na popis fyzikálně nejjednodušších systémů sestávajících z mnoha identických částic dvou typů - bosonů a fermionů.

Přesto počítáme s tím, že pro řadu čtenářů se při prvním čtení bude tato úvodní kapitola jak po stránce fyzikální názornosti tak po stránce technické jevit jako poměrně obtížná. Doporučujeme však, aby se jí všichni pokusili prokousat (pomoci mohou i odborné učebnice [1, 2, 3, 4]) a pokračovali ve čtení kapitol následujících, které jsou vesměs konkrétnější a pojednávají o jednotlivých problémech fyziky nízkých teplot, z nichž mnohé tato kapitola souhrnně uvádí a zahrnuje. Domníváme se, že po přečtení některých z následujících kapitol nebude na škodu se k určitým pasážím úvodní kapitoly vrátit a opětovným čtením si uvědomit a ujasnit širší souvislosti, které by mohly při prvním čtení uniknout.

V kvantovém světě nízkých teplot bereme v úvahu vlnové vlastnosti částic popisovaného systému, projevující se jevy, jakými jsou např. interference a difrakce. V mnohočásticovém systému tudíž musíme kvantově mechanický popis používat v případě, že  $\lambda \sim d$ , kde vlnová délka částice  $\lambda = h/p$ ; h je Planckova konstanta a d typická vzdálenost mezi částicemi systému, určená jeho hustotou n vztahem  $d = n^{-1/3}$ . Typická hodnota  $\lambda$  je určena hodnotou hybnosti p, která v tepelné rovnováze odpovídá střední tepelné energii  $k_{\rm B}T$ :

$$p \sim (mk_{\rm B}T)^{1/2}$$
, (1.1)

kde $k_{\rm B}$  je Boltzmannova konstanta <br/>amznačí hmotnost částic systému. Kvantové jevy by tedy měly být v mnoho<br/>částicovém systému důležité, bude-li platit

$$k_{\rm B}T \le n^{2/3}\hbar^2/m$$
 . (1.2)

5

Částicemi pro nás v jednotlivých kapitolách budou atomy, elektrony, nukleony, ale i kvarky. Uvidíme, že v závislosti na vybraném fyzikálním systému se charakteristické teploty a hustoty budou lišit o mnoho řádů. Budeme samozřejmě připraveni na to, že rozhodující pro chování studovaného systému bude charakter interakce mezi jeho konstituenty.

Pro ilustraci uvedeme typické hodnoty částicových hustot a charakteristických teplot mnohočásticových kvantových systémů, které budeme vyšetřovat:

(i) Hustoty atomových plynů, v nichž dochází k makroskopické Bose<br/>ově-Einsteinově kondenzaci v trojrozměrném prostoru hybností jsou typicky<br/>  $(10^{13}-10^{15})~{\rm cm}^{-3}$ a odpovídající charakteristické teploty jsou řád<br/>u $10^{-5}~{\rm K}$ a nižší.

(ii) Hustoty částic kapalného helia či elektronů v kovech jsou řádově (10<sup>21</sup> – 10<sup>22</sup>) cm<sup>-3</sup> a odpovídající teploty řádu jednotek (až desítek) Kelvinů a nižší.

(iii) Hustota nukleonů v jaderné hmotě (srovnatelná s hustotou nukleonů v jádrech) je  $0.17 \times 10^{39} \rm ~cm^{-3}$ . V nitru neutronových hvězd se díky gravitaci neutrony začnou překrývat. Protože jsou složeny z kvarků, kvarková hustota bude vyšší než nukleonová. Odpovídající "nízké" teploty jsou pak řádu  $10^{11} \rm ~K$ i vyšší.

### 1.2 Kvantově mechanický popis mnohočásticových systémů

Podle principů kvantové teorie [1] jsou dvě částice stejného druhu nerozlišitelné. Přirozené zobecnění na případ mnoha identických částic vede ke známému chování mnohočásticové Schrödingerovy vlnové funkce (amplitudy pravděpodobnosti) vůči záměně všech souřadnic libovolných dvou identických částic. V případě částic s celočíselnou hodnotou spinu (bosony) je vlnová funkce invariatní. Kvantový systém mnoha identických bosonů se řídí Boseovou-Einsteinovou statistikou. V případě částic s polocelou hodnotou spinu (fermiony) vlnová funkce mění znaménko. Kvantový systém mnoha identických fermionů se řídí Fermiho-Diracovou statistikou.

Hned v úvodu je třeba zdůraznit fakt, že vztahem pro  $d = n^{-1/3}$  implicitně uvažujeme "náš" standardní třírozměrný prostor. Velmi často přes něj budeme integrovat a výsledky budou tudíž na dimenzi prostoru D záviset. V závislosti na počtu prostorových dimenzí se ale také může měnit charakter transformací v odpovídajících prostorech, např. spojitých rotací a diskrétních zrcadlení. Uvidíme, že kvantová statistika může být v takových případech složitější.

Obecně platí, že známe-li energetické spektrum  $E_j$  uvažovaného systému definovaného svým hamiltoniánem  $\hat{H}$ , můžeme stanovit jeho termodynamické vlastnosti. Fundamentální výsledek kvantové statistické mechaniky toto tvrzení formalizuje. Umíme-li spočítat velkou rozdělovací funkci  $Z_{\rm G}$ , definovanou jako

$$Z_{\rm G} \equiv \sum_{\rm N} \sum_{\rm j} e^{-\beta(\hat{H}_{\rm j} - \mu \hat{N})} = \sum_{\rm N} \sum_{\rm j} \langle Nj | e^{-\beta(E_{\rm j} - \mu N)} | Nj \rangle \equiv Tr(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})}) ,$$
(1.3)

pak všechny termodynamické veličiny rovnovážné termodynamiky odvodíme z termodynamického potenciálu $\Omega$ :

$$\Omega(T, V, \mu) = -k_{\rm B}T \ln Z_{\rm G} . \qquad (1.4)$$

Ve formulích (1.3) a (1.4) mají symboly následující význam: konstanta  $k_{\rm B} = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J/K}$  je Boltzmannova konstanta úměrnosti mezi teplotou a energií a  $\beta \equiv 1/k_{\rm B}T$ . Index *j* čísluje množinu všech stavů se zadaným počtem částic *N*. Jak uvidíme na konkrétních případech, přidání členu  $\mu \hat{N}$  k hamiltoniánu  $\hat{H}$  je technický

 $\mathbf{6}$ 

trik, umožňující pracovat s libovolným počtem částic. Operátor  $\hat{N}$  je operátor počtu částic, který, jak uvidíme z jeho definice (1.13), nalezení spektra hamiltoniánu nekomplikuje. Parametr  $\mu$  se nazývá chemický potenciál a je v souladu s jeho definicí v makroskopické termodynamice: udává změnu energie s počtem částic (1.21).

Střední hodnotu libovolného operátoru $\hat{O}$ spočítáme jako

$$\langle \hat{\boldsymbol{O}} \rangle = \frac{Tr(e^{-\beta(\hat{\boldsymbol{H}} - \beta\hat{\boldsymbol{N}})}\hat{\boldsymbol{O}})}{Tr(e^{-\beta(\hat{\boldsymbol{H}} - \beta\hat{\boldsymbol{N}})})}, \qquad (1.5)$$

kde  $Tr(\mathbf{M})$  značí stopu matice  $\mathbf{M}$ .

Přirozeným aparátem pro popis kvantových mnohočásticových systémů je teorie kvantových polí. Prakticky se její užitečnost opírá o fakt, že systém N částic, popisovaný N - částicovou Schrödingerovou rovnicí

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{x}_{1},...,\boldsymbol{x}_{N};t) = \hat{\boldsymbol{H}}\Psi(\boldsymbol{x}_{1},...,\boldsymbol{x}_{N};t) , \qquad (1.6)$$

kde  $\hat{\boldsymbol{H}}$  je hamiltonián s kinetickou energi<br/>íTa (dvoučásticovým) potenciálem V

$$\hat{\boldsymbol{H}} = \sum_{k=1}^{N} T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} V(x_k, x_l) \ . \tag{1.7}$$

lze přepsat do formalizmu, v němž pracujeme v abstraktním Hilbertově prostoru obsazovacích čísel. V nerelativistické teorii, kterou se budeme zabývat především, je formalizmus, známý také jako druhé kvantování, především praktický. Například automaticky zahrnuje kvantovou statistiku. Tato tématika je součastí základního kurzu kvantové teorie. Připomeneme teď základní kroky.

Veličina  $x_k v (1.7)$  označuje prostorové souřadnice k –té částice, ale také všechny diskrétní souřadnice, jakými mohou být z – komponenta spinu či isospinu v případě nukleonů.

1. Rozvineme *N*-částicovou vlnovou funkci  $\Psi$  do úplného systému časově nezávislých jednočásticových vlnových funkcí  $\psi_{E_k}(x_k)$  s danými okrajovými podmínkami<sup>1</sup>. Nechť  $E_k$  je kompletní soubor jednočásticových kvantových čísel (pro bezspinové bosony v boxu je to hybnost p).

$$\Psi(\mathbf{x}_{1},...,\mathbf{x}_{N};t) = \sum_{E'_{1}...E'_{N}} C(E'_{1}...E'_{N},t)\psi_{E'_{1}}(x_{1})...\psi_{E'_{N}}(x_{N}) .$$
(1.8)

Je jasné, že po dosazení (1.8) do Schrödingerovy rovnice a využití úplnosti jednočásticových vlnových funkcí musí být veškerá fyzikální informace obsažena v koeficientech C.

 $<sup>^1</sup>$ Uvažujeme-li např. velký homogenní systém, budeme přirozeně rozkládat do rovinných vln s periodickými vazbovými podmínkami.

2. Vlastnosti koeficientů C přirozeně vyjadřují statistiku mnohočásticových systémů:  $C(\dots E_1 \dots E_1 \dots) = \pm C(\dots E_1 \dots E_1 \dots)$ , přičemž znaménko + platí pro bosony, znaménko – pro fermiony (pokud je v případě fermionů  $E_i = E_j, C = 0$ ).

3. Číselné koeficienty C je možné předefinovat tak, aby vlnová funkce udávala, že ve stavu 1 je  $n_1$  částic, ve stavu 2  $n_2, ..., n_\infty$  částic. Z uvedené definice je zřejmé, že pro fermiony nabývají "obsazovací" čísla  $n_i$  hodnot 0, 1.

4. Bázi jednočásticových stavů je možné vyjádřit alternativně pomocí kompletní a ortonormální báze  $|n_1n_2...n_{\infty}\rangle$  v Hilbertově (Fockově) prostoru obsazovacích čísel, vytvářené pro každý mód  $n_{\rm k}$  kreačními a anihilačními operátory. Ty v případě bosonů splňují komutační relace  $[b_k, b_{k'}^+] = \delta_{kk'}, [b_k, b_{k'}] = [b_k^+, b_{k'}^+] = 0.$ 

a. Bosonové komutační relace umožňují zkonstruovat stavy  $|n_k\rangle$  a následně

$$\begin{aligned} |n_1 n_2 \dots n_{\infty} \rangle &= |n_1 \rangle |n_2 \rangle \dots |n_{\infty} \rangle ,\\ \text{kde} \quad b_k^+ b_k |n_k \rangle &= n_k |n_k \rangle,\\ n_k &= 0, 1, \dots, \infty ,\\ b_k |n_k \rangle &= (n_k)^{\frac{1}{2}} |n_k - 1 \rangle ,\\ b_k^+ |n_k \rangle &= (n_k + 1)^{\frac{1}{2}} |n_k + 1 \rangle . \end{aligned}$$
(1.9)

b. V případě fermionů konstrukce báze  $|n_1n_2...n_{\infty}\rangle$  využívá antikomutačních relací anihilačních a kreačních operátorů  $\{a_k, a_{k'}^+\} = \delta_{kk'}, \{a_k, a_{k'}\} = \{a_k^+, a_{k'}^+\} = 0.$ Z těchto relací (pro každý mód) platí intuitivně očekávané vlastnosti fermionů: (i)  $a_k^2 = a_k^{+2} = 0$ , takže i  $a_k^+ a_k^+ |0\rangle = 0$ . Dva identické fermiony nemohou obsadit

jeden stav.

(ii) Operátor počtu částic,  $\hat{n} = a_k^+ a_k$  má vlastní hodnoty 0 a 1, protože zřejmě plati  $a_{k}^{+}a_{k}(1-a_{k}^{+}a_{k})=0; a^{+}|0\rangle = |1\rangle; a^{+}|1\rangle = 0; a|1\rangle = |0\rangle; a|0\rangle = 0.$ 

5. Ukazuje se vhodné zavést lineární kombinace anihilačních a kreačních operátorů, jejichž koeficienty jsou neoperátorové (c-číselné) jednočásticové vlnové funkce:

$$\psi(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_{k} \psi_{k}(\boldsymbol{x})c_{k} ;$$
  
$$\psi^{+}(\boldsymbol{x}) \equiv \sum_{k} \psi_{k}(\boldsymbol{x})c_{k}^{+} . \qquad (1.10)$$

Operátory  $c_k \ge c_k^+$  označují souhrnně buď bosonové komutující nebo fermionové antikomutující anihilační a kreační operátory. V rozkladech polních operátorů (1.10) sčítání probíhá přes úplný soubor jednočásticových kvantových čísel (např.  $p, s_z$  pro fermiony v homogenním systému), který není touto konstrukcí specifikován.

Kvantová statistika je přirozeně vyjádřena kanonickými komutačními relacemi mezi dvěma poli v různých bodech prostoru,

$$\begin{bmatrix} \psi_{\sigma}(\boldsymbol{x}), \psi_{\sigma'}^{+}(\boldsymbol{x}') \end{bmatrix}_{\pm} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta^{3}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') ; \\ \begin{bmatrix} \psi_{\sigma}^{+}(\boldsymbol{x}), \psi_{\sigma'}^{+}(\boldsymbol{x}') \end{bmatrix}_{\pm} = 0 ; \\ \begin{bmatrix} \psi_{\sigma}(\boldsymbol{x}), \psi_{\sigma'}(\boldsymbol{x}') \end{bmatrix}_{+} = 0 .$$
 (1.11)

		÷	
1		:	

které vyplývají z kanonických komutačních (antikomutačních) relací operátorůca z úplnosti jednočásticových vlnových funkcí.

Indexy  $\sigma, \sigma'$  jsou indexy spinu s částic ( $\sigma, \sigma' = 1, ..., 2s + 1$ ), které uvažujeme. Pole se vůči spinovým transformacím odpovídajícím způsobem transformují (např. u elektronů se  $\psi_{\sigma}$  transformuje jako spinor).

Hamiltonián je možné pomocí polních operátorů napsat ve tvaru

$$\hat{\boldsymbol{H}} = \int d^3 \boldsymbol{x} \psi^+(\boldsymbol{x}) T(\boldsymbol{x}) \psi(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \int \int d^3 \boldsymbol{x} d^3 \boldsymbol{x'} \psi^+(\boldsymbol{x}) \psi^+(\boldsymbol{x'}) V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x'}) \psi(\boldsymbol{x'}) \psi(\boldsymbol{x}) .$$
(1.12)

Pro jednoduchost jsme napsali hamiltonián pro případ bezspinových bosonů. V případě bosonů se spinem a fermionů mají polní operátory samozřejmě odpovídající spinový index, přičemž interakční potenciál může, ale nemusí na spinu záviset.

Operátor počtu částic  $\hat{N}$  je definován jako

$$\hat{\boldsymbol{N}} = \int d^3 \boldsymbol{x} \hat{\psi}^+(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^+ c_{\mathbf{k}} \,. \tag{1.13}$$

Považujeme za poctivé přidat na tomto místě následující poznámky:

1. Příklady neinteragujících (volných) mnohobosonových a mnohofermionových systémů, popsané přesně řešitelnými hamiltoniány, které budou v této kapitole následovat, použití základů aparátu kvantových polí zcela demystifikují.

2. Obecně je kvantový svět kolem nás řízen nejen kvantovou teorií, ale i speciální teorií relativity. Pro relativistický popis mnohočásticových systémů je formalismus kvantové teorie pole nezbytný. Ten totiž přirozeně obsahuje Einsteinovo diktum o kreaci částic z energie, kdykoliv je to možné. Základy relativistického aparátu upotřebíme v kapitole, popisující "nízkoteplotní" chování barevných relativistických kvarků.

Prostým nahlédnutím na formuli (1.3) dospějeme k závěru, že stanovit termodynamické chování kvantových bosonových i fermionových mnohočásticových systémů bez interakcí mezi konstituenty by neměl být koncepční problém. Spektrum odpovídajících hamiltoniánů je totiž známo.

Ponaučení, které si z následujících poněkud formálních výpočtů závěrem odneseme, bude dvojí: (1) bude fyzikálně cenné, neboť nám poskytne základní pochopení některých zákonitostí v reálných, interagujících systémech; (2) bude cenné psychologicky, neboť ilustruje minimální množství aparátu, nutného pro kvantitativní pochopení problému.

Partiční funkci  $Z_{\rm G}$  budeme počítat ve Fockově prostoru obsazovacích čísel  $n_{\rm i}$ , v

1.4

němž jsou hamiltonián (1.12) bez interakce i operátor počtu částic (1.13) diagonální:

$$Z_{\rm G} = \sum_{n_1...n_{\infty}} \langle n_1, ..., n_{\infty} | e^{-\beta(\hat{H}_0 - \mu \hat{N})} | n_1, ..., n_{\infty} \rangle =$$

$$= \sum_{n_1...n_{\infty}} \langle n_1, ..., n_{\infty} | e^{-\beta(\sum_i \varepsilon_i n_i - \mu \sum_i n_i)} | n_1, ..., n_{\infty} \rangle =$$

$$= \sum_{n_1} \langle n_1 | e^{[-\beta(\varepsilon_1 n_1 - \mu n_1)]} | n_1 \rangle ... \sum_{n_{\infty}} \langle n_{\infty} | e^{[-\beta(\varepsilon_{\infty} n_{\infty} - \mu n_{\infty})]} | n_{\infty} \rangle \equiv$$

$$\equiv \prod_{i=1}^{\infty} Tr \left[ e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu) \hat{n}_i} \right] . \qquad (1.14)$$

**Bosony** obsazují daný kvantový stav bez omezení a ve formuli (1.14) musíme proto sčítat  $n_i$  přes všechna celá čísla:

$$Z_{\rm G} = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \left[ e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \right]^n = \prod_{i=1}^{\infty} \left[ 1 - e^{\beta(\mu-\varepsilon_i)} \right]^{-1}.$$
 (1.15)

Termodynamický potenciál neinteragujících bosonů má tudíž tvar

$$\Omega_0(T, V, \mu) = k_{\rm B} T \sum_{i=1}^{\infty} \ln \left[ 1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)} \right] .$$
 (1.16)

Pozorný čtenář nechť přijme tichou dohodu, která vysvětluje, proč levá strana rovnice (1.16) závisí na objemu, zatímco pravá nikoliv: pracujeme totiž v konečném objemu a v translačně invariantních případech, jako je tento, jsou v něm naskládány rovinné vlny. Jejich sumu nahrazujeme integrálem, t.j. používáme vztah

$$\sum \to g \int d^3n = gV \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} . \tag{1.17}$$

Je důležité si uvědomit, že v případě jiných exaktně řešitelných hamiltoniánů, kde translační invariance neplatí (např. systém neinteragujících bosonů ve vnějším potenciálu), bude potřeba postupovat jinak (viz kapitola ccc). Symbol g udává degeneraci jednočásticových stavů s ostrou hodnotou hybnosti. V případě bosonů se spinem s = 0 je g = 1, pro s = 1 je g = 3 atd.

**Fermiony** splňují Pauliho princip a obsazovací čísla  $n_i \vee (1.14)$  nabývají hodnot 1 a 0. Pro rozdělovací funkci neinteragujících fermionů tedy platí

$$Z_{\rm G} = \prod_{i=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{1} \left[ e^{\beta(\mu-\varepsilon_{\rm i})} \right]^n = \prod_{i=1}^{\infty} \left[ 1 + e^{\beta(\mu-\varepsilon_{\rm i})} \right]$$
(1.18)

a termodynamický potenciál má tudíž tvar

$$\Omega_0(T, V, \mu) = -k_{\rm B}T \ln Z_{\rm G} = -k_{\rm B}T \sum_{i=1}^{\infty} \ln \left[ 1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)} \right] .$$
(1.19)

# 1.3 Nejdůležitější vztahy fenomenologické termodynamiky

Abychom extrahovali a zhodnotili fyzikální informace, obsažené implicitně ve znalosti termodynamického potenciálu  $\Omega(T,V,\mu)$ , připomeňme si nejdůležitější vztahy fenomenologické termodynamiky [1].

Základní termodynamická identita

$$dE = TdS - PdV + \mu dN \tag{1.20}$$

vyjadřuje změnu vnitřní energie systému E = E(S, V, N) s nezávislými změnami entropie S, objemu V a počtu částic N. Teplota T, tlak P a chemický potenciál  $\mu$ jsou pak **definovány** jako parciální derivace vnitřní energie:

$$T = (\partial E/\partial S)_{\rm VN}$$
,  $P = -(\partial E/\partial V)_{\rm SN}$ ,  $\mu = (\partial E/\partial N)_{\rm SV}$ . (1.21)

Protože vnitřní energie Ea všechny její proměnné S,V,Njsou extenzivní proměnné (jejich hodnoty závisejí na skutečném množství uvažované hmoty), platí při jejich přeškálování libovolným faktorem $\lambda$ 

$$\lambda E = E(\lambda S, \lambda V, \lambda N) . \tag{1.22}$$

Derivujeme-li tento vztah podle $\lambda,$ položíme následně $\lambda=1$ a použijeme vztahů (1.21), získáme volnou energii ve tvaru

$$E = TS - PV + \mu N. \tag{1.23}$$

Experimentálně je často výhodné pracovat s některými z intenzivních proměnných  $T, P, \mu$ , jejichž hodnoty na skutečném množství hmoty nezávisejí.

Přechod od proměnných (S, V, N) k proměnným (T, V, N) je dán Legendreovou transformací od vnitřní energie E k Helmholtzově volné energii F(T, V, N):

$$F = E - TS, \ dF = -SdT - PdV + \mu dN.$$
(1.24)

Přechod od proměnných (S, V, N) k proměnným (T, P, N) je dán Legendreovou transformací od vnitřní energie E ke Gibbsově volné energii G(T, P, N):

$$G = E - TS + PV, \ dG = -SdT + VdP + \mu dN.$$
 (1.25)

Další Legendreova transformace vede k termodynamickému potenciálu  $\Omega(T, V, \mu)$  a jeho diferenciálu. Jeho vhodnost je nyní intuitivně zřejmá, neboť umožňuje pracovat se systémy s proměnným počtem částic:

$$\Omega(T, V, \mu) = F - \mu N = E - TS - \mu N, \ d\Omega = -SdT - PdV - Nd\mu.$$
(1.26)

Experimentálně zajímavé fyzikální veličiny jsou zejména entropie, tlak a počet částic:

$$S = -(\partial \Omega / \partial T)_{V\mu}, \ P = -(\partial \Omega / \partial V)_{T\mu}, \ N = -(\partial \Omega / \partial \mu)_{TV}.$$
(1.27)

Nakonec škálovací argument pro extenzivní proměnné vede k nalezení F, G a  $\Omega$ . Využijeme přitom faktu, že proměnné T, P a  $\mu$  jsou zřejmě intenzivní, jak plyne ze vztahů (1.21). Můžeme tedy psát

$$\lambda F = F(T, \lambda V, \lambda N); \quad \lambda G = G(T, P, \lambda N); \quad \lambda \Omega = \Omega(T, \lambda V, \mu). \tag{1.28}$$

Derivováním podle  $\lambda$  a následným položením  $\lambda = 1$  získáme důležité vztahy

$$F = -PV + \mu N; \quad G = \mu N; \quad \Omega = -PV.$$
(1.29)

#### 1.4 Ideální Boseův plyn

Nyní jsme připraveni věnovat se popisu vlastností kvantového systému neinteragujících nerelativistických bosonů. Především využijeme vztah (1.27), abychom získali známé Boseovo-Einsteinovo rozdělení [1]:

$$\langle N \rangle \equiv \sum_{i=1}^{\infty} n_i^0 = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_i - \mu)} - 1} , \qquad (1.30)$$

kde  $n_i^0$  je střední počet částic v *i*-tém stavu. V dalším budeme specifikovat disperzní zákon (závislost energie částic na hybnosti):

$$\varepsilon_{\rm p} = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \,.$$
(1.31)

Pro termodynamický potenciál  $\Omega_0$  tedy z rovnice (1.19) plyne elementární substitucí

$$-\frac{\Omega_0}{k_{\rm B}T} = \frac{PV}{k_{\rm B}T} = gV \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \ln\left[1 - e^{\beta\left(\mu - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right)}\right] = = -\frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{1/2} \ln\left[1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon)}\right] .$$
(1.32)

Po intergraci per partes dostaneme formuli pro tlak P ve tvaru

$$P = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} .$$
(1.33)

Analogicky spočítáme energii E

$$E = \sum n_{i}^{0} \varepsilon_{i} = \frac{gV}{4\pi^{2}} \left(\frac{2m}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \int_{0}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}$$
(1.34)

a hustotu N/V

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} .$$
(1.35)

Porovnáním vztahů pro energii a tlak získáme stavovou rovnici ideálního Boseova plynu:

$$PV = \frac{2}{3}E$$
 . (1.36)

Zvláštní pozornost zasluhuje formule pro hustotu počtu částic (1.35). Za prvé, je implicitní funkcí pro chemický potenciál  $\mu$ . V principu je možné z ní chemický potenciál vypočítat jako funkci N a všechny potřebné termodynamické veličiny vyjádřit jako funkce T, V, N. Za druhé, výraz (1.35) má smysl pouze pro

$$\varepsilon - \mu \ge 0$$
, (1.37)

jinak by byl pro některá  $\varepsilon$  střední počet částic záporný. Protože  $\varepsilon = p^2/2m$  je nezáporné, musí pro chemický potenciál ideálního Boseova plynu platit

$$\mu \le 0 . \tag{1.38}$$

Za druhé, dospěli jsme ve svých výkladech do bodu, kdy je na místě zvažovat klasickou limitu. Pro vysoké teploty  $T \to \infty$  bude jednička v Boseově-Einsteinově i Fermiho-Diracově rozdělení (3.32) zanedbatelně malá a obě rozdělení tak splynou v klasické rozdělení Boltzmannovo:

$$N \to \sum_{i} e^{\beta(\mu - \varepsilon_{i})} .$$
 (1.39)

Termodynamický potenciál je v této limitě  $(T \to \infty)$  roven

$$\Omega_0 = -PV = -k_B T \sum_{i} e^{\beta(\mu - \varepsilon_i)} = -Nk_B T$$
(1.40)

a definuje stavovou rovnici ideálního klasického plynu. Střední počet částic v jednom stavu je v klasické limitě podstatně menší než jedna a kvantové korelace ztrácejí smysl.

Sumu ve vztahu (1.39) spočítáme přibližně jako odpovídající integrál, t.j.

$$\sum_{i} e^{-\beta\varepsilon_{i}} = \frac{gV}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k e^{-\hbar^{2}k^{2}/2mk_{\rm B}T} =$$
$$= gV \frac{1}{(2\pi)^{2}} \left(\frac{2mk_{\rm B}T}{\hbar^{2}}\right)^{3/2} \int_{0}^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = gV \left(\frac{mk_{\rm B}T}{2\pi\hbar^{2}}\right)^{3/2}.$$
(1.41)

Z rovnice (1.39) tudíž vychází chemický potenciál  $\mu_c$  klasického Boseova plynu

$$\frac{\mu_c}{k_{\rm B}T} = \ln\left[\frac{N}{gV} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{\rm B}T}\right)^{3/2}\right] \tag{1.42}$$

záporný a pro $T \to \infty$  je  $\mu_c \to -\infty$ . Z rovnice (1.42) dále vyplývá, že při fixované hustotě částic N/Vexistuje teplota, při níž klasický chemický potenciál  $\mu_c$  prochází nulou. Pod touto teplotou začne být kladný a diverguje proT = 0 k  $+\infty$ .

#### 1.4.1 Boseova-Einsteinova kondenzace

Protože vždy platí vztah (1.38), ideální Boseův plyn se klasickému plynu při nízkých teplotách **nepodobá** ! Budeme předpokládat, že existuje taková nenulová hodnota  $T_{\rm B}$ , při níž chemický potenciál vymizí a pro  $T \leq T_{\rm B}$  je  $\mu = 0^-$ . Z rovnice (1.35) pak získáme implicitní rovnici pro  $T_{\rm B}$ :

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\varepsilon/k_{\rm B}T_{\rm B}} - 1} .$$
(1.43)

1	•
Т	J

Integrál spočítáme² a vyjádříme kritickou teplotu Boseovy-Einsteinovy kondenzace $T_{\rm B}$ jako

$$k_{\rm B}T_{\rm B} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{4\pi^2}{g\Gamma(3/2)\zeta(3/2)}\right)^{2/3} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{3.31}{g^{2/3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} .$$
(1.44)

Rovnice (1.44) vyjadřuje tepelnou energii  $k_{\rm B}T_{\rm B}$  pomocí Planckovy konstanty, zdůrazňující kvantový charakter jevu. Z rozměrových důvodů je tedy pravá strana díky relacím neurčitosti rovna energii nulových kmitů v objemu V/N.  $T_{\rm B}$  je teplota, pod níž je chemický potenciál roven nule.

V oblasti  $T < T_{\rm B}$ , kde chemický potenciál vymizí, je třeba postupovat opatrně. Kdybychom v této oblasti použili pro výpočet částicové hustoty formuli (1.35), dopustili bychom se chyby:

$$e^{\varepsilon/k_{\rm B}T} - 1 > e^{\varepsilon/k_{\rm B}T_{\rm B}} - 1 \tag{1.45}$$

a integrál by vyšel menší než N/V. Formální zdroj chyby je zřejmý. Při nahrazení sumy přes jednočásticové stavy  $\varepsilon_i$  integrálem přes  $\varepsilon$  stav s  $\varepsilon = 0$  díky hustotě stavů  $\varepsilon^{1/2}$  nepřispívá, zatímco v původní sumě je jeho příspěvek libovolně velký. Fyzikálně je vysvětlení též zřejmé a představuje alternativní a zřejmě nejnázornější interpretaci kritické teploty  $T_{\rm B}$ : v neinteragujícím systému začnou bosony při  $T < T_{\rm B}$  bez omezení obsazovat nejnižší jednočásticový stav, t.j. stav s  $\varepsilon = 0$ , zvaný kondenzát. Jsou to právě částice kondenzátu, které představují chybějící příspěvek k N/V. Je tedy oprávněné uvažovat pro  $T \leq T_{\rm B}$  chemický potenciál  $\mu = 0^-$ .

Hustotu částic s  $\varepsilon > 0$  pro  $T < T_{\rm B}$  vypočítáme integrálem (zde je jeho použití oprávněné) a použijeme-li formule (1.43), dostaneme

$$\frac{N_{\varepsilon>0}}{V} = \frac{N}{V} \left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} . \tag{1.46}$$

Hustotu částic s $\varepsilon=0$  pro $T < T_{\rm B}$ dopočítáme jednoduše z definice:

$$\frac{N_{\varepsilon=0}}{V} = \frac{N}{V} \left[ 1 - \left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} \right] . \tag{1.47}$$

Pro  $T < T_{\rm B}$  je energie Boseova plynu dána energií bosonů, které se nenacházejí v kondenzátu:

$$\frac{E}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_{\rm B}T}{\hbar^2}\right)^{3/2} k_{\rm B}T \int_0^\infty dx \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} .$$
(1.48)

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Výsledkem přímého výpočtu je  $\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2mk_{\rm B}T}{\hbar^2}\right)^{3/2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)$ . Integrál je konkrétním případem obecného termodynamického integrálu  $\int_0^\infty dx \frac{x^{n-1}}{e^x - 1} = \Gamma(n)\zeta(n)$ , kde  $\Gamma(n)$  je gamma funkce a  $\zeta(n)$  Riemannova zeta funkce, přičemž  $\Gamma(3/2) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi} \approx 0.8862$ ;  $\zeta(3/2) \approx 2.612$ .

Integrál spočítáme a výsledek upravíme zavedením  $T_{\rm B}$ do tvaru

$$E = \frac{\zeta(\frac{5}{2})\Gamma(\frac{5}{2})}{\zeta(\frac{3}{2})\Gamma(\frac{3}{2})} N k_{\rm B} T \left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} = 0.770 \ N k_{\rm B} T \left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} \ . \tag{1.49}$$

Toto je velmi důležitý vztah (který si budeme dobře pamatovat), umožňující vypočítat jednu ze základních charakteristik všech kvantových kapalin či plynů - měrnou tepelnou kapacitu (měrné teplo). Pro $T \leq T_{\rm B}$ tedy platí

$$C_{\rm V} = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = 1.925 \, N k_{\rm B} \left(\frac{T}{T_B}\right)^{3/2} \,. \tag{1.50}$$

Dalším důležitým výsledkem je vztah pro tlak při velmi nízkých teplotách. Ten snadno získáme přepsáním stavové rovnice, známe-li energii:

$$P = \frac{2}{3} \frac{E}{V} = \frac{2}{3} \frac{2\sqrt{2}}{4\pi^2} g\zeta\left(\frac{5}{2}\right) \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \frac{m^{3/2} (k_{\rm B}T)^{5/2}}{\hbar^3} .$$
(1.51)

Ve shodě s intuicí pro teplotu blížící se nule tlak neinteragujícího Boseova plynu vymizí, protože všechny částice jsou ve stavu s nulovou hybností.

Abychom stanovili chování měrného tepla také v oblasti nad  $T_{\rm B}$  (nezastíráme, že očekáváme nespojitost první derivace, signalizující fázový přechod), musíme nejprve znát charakteristické chování chemického potenciálu v této oblasti, implicitně vyjádřené vztahem (1.35). Za tím účelem zavedeme pomocnou veličinu  $N_0(T)$  pomocí (1.35) jako fiktivní počet částic vypočítaný pro  $\mu = 0$  a  $T > T_{\rm B}$ :

$$N_0(T) = \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\varepsilon/k_{\rm B}T} - 1} . \tag{1.52}$$

Platí pro ni

$$\frac{N_0(T)}{N_0(T_{\rm B})} \equiv \frac{N_0(T)}{N} = \left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} \,. \tag{1.53}$$

Nyní vyšetříme rozdíl $N-N_0(T)$ :

$$N - N_0(T) \equiv \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \varepsilon^{1/2} \left[\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_{\rm B}T} - 1} - \frac{1}{e^{\varepsilon/k_{\rm B}T} - 1}\right] \quad (1.54)$$

v oblasti, kde veličina  $\mu/k_{\rm B}T$  je malá a záporná. Dominantní příspěvek k integrálu ve formuli pro  $N - N_0(T)$  tedy pochází od malých  $\varepsilon$ . Rozvineme proto integrand, ponecháme vždy jen vedoucí člen  $((e^x - 1)^{-1} \approx x^{-1})$ , výsledný integrál spočítáme a dostaneme

$$N - N_0(T) \approx -\frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \pi(k_{\rm B}T)|\mu|^{1/2} .$$
 (1.55)

1	5
т	J

Pomocí (1.44) vyjádříme chemický potenciál v oblasti $T \geq T_{\rm B}$ explicitně přibližnou formulí

$$\mu \approx -\left[\frac{\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)}{\pi}\right]^2 k_{\rm B} T_{\rm B} \left[\left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} - 1\right]^2 . \tag{1.56}$$

Vidíme, že při $T \to T_{\rm B}^+$ se chemický potenciál  $\mu = \mu({\rm T,V,N})$ blíží k nule ze strany záporných hodnot kvadraticky a má tudíž v bodě  $T_{\rm B}$  nespojitou druhou derivaci.

Tohoto chování nyní využijeme pro stanovení měrného tepla  $C_{\rm V} = (\partial E/\partial T)_{\rm V}$  v oblasti  $T \to T_{\rm B}^+$ . Potřebnou (přibližnou) formuli pro energii v této oblasti získáme ze stavové rovnice (1.36):

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \mu}\right)_{\rm TV} = \frac{3}{2} \left(\frac{\partial (PV)}{\partial \mu}\right)_{\rm TV} = \frac{3}{2}N.$$
(1.57)

Pro $T > T_{\rm B}$  (pro $T < T_{\rm B}$  jeE = E(T,V))tedy přibližně platí

$$E = E(T, V) + \frac{3}{2}N\mu , \qquad (1.58)$$

kde  $\mu$  je v proměnných (T, V, N) vyjádřeno formulí (1.56).

Jsme tedy připraveni spočítat skok v náklonu měrného tepla v bodě  $T_{\rm B}$ :

$$\Delta \left[\frac{\partial C_V}{\partial T}\right]_{T_{\rm B}} = -\frac{3}{2} N k_{\rm B} T_{\rm B} \left[\frac{\zeta(\frac{3}{2})\Gamma(\frac{3}{2})}{\pi}\right]^2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} \left[\left(\frac{T}{T_{\rm B}}\right)^{3/2} - 1\right]_{T_{\rm B}}^2 = \\ = -\frac{27}{4} \left[\frac{\zeta(\frac{3}{2})\Gamma(\frac{3}{2})}{\pi}\right]^2 \frac{N k_{\rm B}}{T_{\rm B}} = -3.66 \frac{N k_{\rm B}}{T_{\rm B}} .$$
(1.59)

Teplotní závislost chemického potenciálu je schematicky znázorněna na obr. 1.1 a detailní výpočet měrného tepla neinteragujícího kvantového Boseova plynu ilustruje obr. 1.2. V bodě  $T_{\rm B}$  existuje **fázový přechod**, pod nímž dochází k jevu Boseovy-Einsteinovy kondenzace (BEC). Makroskopická frakce celkového počtu částic začíná obsazovat jediný stav s nulovou hybností. Při teplotě T = 0 jsou všechny částice v kondenzátu, t.j. v základním stavu s nulovou hybností  $\boldsymbol{p} = 0$  a nulovou energií.

#### 1.4.2 Termodynamická limita

Pozorný čtenář by si měl všimnout, že tvrzení posledního odstavce představují extrapolaci, neboť pojmy fázový přechod a makroskopická frakce jsou charakteristické pro systémy s nekonečným počtem částic, zatímco my jsme úzkostlivě pracovali s konečným počtem částic v konečném objemu. Provedení tzv. termodynamické limity,  $N \to \infty$ ,  $V \to \infty$  tak, aby hustota částic n = N/V zůstala konečná a nenulová, je však v případě neinteragujících bosonů intuitivně zřejmé. Základní stav je stav, v němž všechny částice jsou ve stavu s nulovou hybností, přičemž jejich hustota je daná a konečná. Přidáním konečného počtu částic do takového základního stavu se hustota částic ani jeho energie nezmění. To fakticky znamená, že takový stav je vůči počtu částic degenerovaný.

Formálně provedení termodynamické limity vůbec jednoduché není. Rigorózní diskuse této problematiky patří do axiomatické teorie pole a daleko přesahuje rámec skript. Fyzikálně je však následující (nerigorózní) diskuse pro pochopení kvantových kapalin klíčová.

Základní stav N neinteragujících bosonů  $|\Phi_0(N)\rangle$  a jeho vlastnosti můžeme pomocí anihilačních a kreačních operátorů  $a_0, a_0^+$  snadno napsat explicitně:

$$|\Phi_0(N)\rangle = |N, 0, 0, ...\rangle,$$
 (1.60)

ξ

kde (viz 1.9)

$$a_0 |\Phi_0(N)\rangle = N^{\frac{1}{2}} |\Phi_0(N-1)\rangle ;$$
  

$$a_0^+ |\Phi_0(N)\rangle = (N+1)^{\frac{1}{2}} |\Phi_0(N+1)\rangle .$$
(1.61)

plynu (schématicky).

Je důležité si uvědomit, že působením kreačních operátorů  $a_{k}^{+}$ s nenulovou hybností na stav  $|\Phi_0(N)\rangle$  velké číselné faktory  $(N+1)^{\frac{1}{2}}$ , na rozdíl od operátorů  $a_0, a_0^+$ , podle konstrukce nevznikají. Je zřejmé, že při  $N \to \infty$  stav  $|\Phi_0(N)\rangle$  očekávané vlastnosti základního stavu nemá. Fockův prostor prostě stavy s nekonečným počtem částic a konečnou hustotou podle definice neobsahuje. Přechod k nekonečnému počtu stupňů volnosti ve Fockově prostoru je vhodný pro popis "řídkých" systémů (bez kondenzátů). Základní stav  $|0\rangle$  je v takových případech stav bez částic. Také říkáme, že operátor počtu částic anihiluje vakuum:  $\hat{N}|0\rangle = 0$ . Musíme proto připustit, že pro popis systémů s kondenzátem by měl existovat popis v takovém Hilbertově prostoru, který není unitárně ekvivalentní Fockovu.

K pochopení problému přispěl zásadním způsobem v roce 1947 Bogoliubov [7]. Zavedeme operátory

$$_{0} \equiv V^{-\frac{1}{2}}a_{0} ; \quad \hat{\xi}_{0}^{+} \equiv V^{-\frac{1}{2}}a_{0}^{+} , \qquad (1.62)$$

pro které zjevně platí

$$[\hat{\xi}_0, \hat{\xi}_0^+] = V^{-1} \quad ; \tag{1.63}$$

$$\hat{\xi}_0 |\Phi_0(N)\rangle = \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{1}{2}} |\Phi_0(N-1)\rangle; \quad \hat{\xi}_0^+ |\Phi_0(N)\rangle = \left(\frac{N+1}{V}\right)^{\frac{1}{2}} |\Phi_0(N+1)\rangle.$$
(1.64)

S takovými operátory má termodynamická limita rozumný fyzikální smysl, neboť:

(i) Stavy  $|\infty\rangle, |\infty \pm 1\rangle, \dots$  popisují jeden a tentýž základní stav  $|vac\rangle, který$ není vlastním stavem operátoru počtu částic. Přijmeme univerzální definici vakua v hamiltonovských systémech jako stavu s nejnižší energií.

(ii) Operátory  $\hat{\xi}_0$  a  $\hat{\xi}_0^+$  v termodynamické limitě komutují, takže je možné je nahradit *c*-čísly, úměrnými odmocnině z hustoty n = N/V:  $\hat{\xi}_0 \to e^{i\theta} n^{\frac{1}{2}} = \langle \operatorname{vac} | \hat{\xi}_0 | \operatorname{vac} \rangle$ ,





Obr. 1.1: Teplotní závislost chemického potenciálu ideálního Boseova

1.4

kde $\theta$ je libovolný reálný parametr, vyjadřující již zmíněnou degeneraci základního stavu:

$$\langle \operatorname{vac}|\xi_0^+\xi_0|\operatorname{vac}\rangle = n$$
 . (1.65)

V dosavadní diskusi hrál pojem počtu částic nepochybně důležitou roli. Je mu přiřazen operátor, zkonstruovaný pomocí polních operátorů předpisem (1.13). Vyšetříme, jak se kvantově polní systém, definovaný hamiltoniánem (1.12), transformuje vůči transformacím unitárním operátorem

$$U(\alpha) = \exp(i\alpha \hat{N}) , \qquad (1.66)$$

kde  $\alpha$  je libovolný reálný parametr. Snadno se přesvědčíme, že transformace (1.66) tvoří spojitou abelovskou grupu označovanou jako U(1). Její prvky  $U(\alpha), U(\beta)$  vzájemně komutují, násobení prvků je asociativní a grupa má jednotkový a inverzní prvek. Pro praktické aplikace stačí uvažovat infinitesimálně malé transformace  $U(\alpha) \simeq 1 + i\alpha \hat{N}$ .

Polní operátor  $\hat{\psi}(x)$  se při transformaci (1.66) mění na

$$\hat{\psi} \to \hat{\psi}' = U(\alpha)\hat{\psi}U^{-1}(\alpha) \simeq (1 + i\alpha\hat{N})\hat{\psi}(1 - i\alpha\hat{N}) =$$
(1.67)

$$= \hat{\psi} + i\alpha[\hat{N}, \hat{\psi}] = (1 - i\alpha)\hat{\psi} \simeq e^{-i\alpha}\hat{\psi} .$$
(1.68)

Samozřejmě, že platí  $\hat{\psi}^+ \to e^{i\alpha}\hat{\psi}^+$ . Říkáme proto, že **operátor počtu částic je generátorem fázových transformací**. Je zřejmé, že při uvedené transformaci polních operátorů se hamiltonián nezmění, neboť je vůči vynásobení všech polních operátorů jedinou společnou fází invariantní, protože je hermitovský.

Transformace (16.47) a jí odpovídající invariance či abelovská symetrie hamiltoniánu nemění prostoročasové souřadnice a je příkladem tzv. vnitřních globálních symetrií. Jiným známým příkladem tohoto typu je invariance hamiltoniánu silných interakcí vůči symetrii typu SU(2), tj. rotacím v prostoru isotopického spinu. Připo-mínáme, že je to příklad neabelovské spojité symetrie - tři generátory grupy nekomutují.

Ukázali jsme, že základní stav ideálního Boseova plynu v termodynamické limitě není vlastním stavem operátoru počtu částic a je vůči fázové transformaci, generované tímto operátorem, degenerovaný. Ukázali jsme však také, že hamiltonián vůči symetrii generované tímto operátorem současně invariantní je. Tento fyzikálně průhledný příklad je ilustrací **spontánně narušené spojité globální symetrie**. Obecně říkáme, že spojitá globální symetrie je v dané teorii spontánně narušena, jsou-li vůči ní invariantní pohybové rovnice, ale jejich řešení ne. Obecně je přijato teorii definovat její akcí, jejíž variací se pohybové rovnice odvozují. Prakticky vždy vystačíme s invariancí hamiltoniánu. Obecně mluvíme o neinvarianci řešení pohybových rovnic, prakticky vždy vystačíme s neinvariancí vakua.

#### 1.4.3 Goldstoneův teorém

Za velmi rozumných předpokladů platí v kvantově polních teoriích slavný Goldstoneův teorém: **je-li spojitá globální symetrie spontánně narušena, existují** 

# v enegetickém spektru excitační módy, jejíž energie v limitě nulové hybnosti vymizí.

Pro důkaz (který nebudeme provádět a zvídavější čtenáře odkážeme na podrobný přehledový článek [5]) jsou klíčové dva předpoklady: translační invariance vakua a interakce mezi částicemi, které dostatečně rychle ubývají se vzdáleností. Slavný je Goldstoneův teorém proto, že excitace, jejichž existenci za velmi obecných předpokladů předpovídá, jsou v mnoha fyzikálně zajímavých systémech experimentálně potvrzeny a pro chování těchto systémů mají klíčový význam. K problematice spontánního narušení symetrie zásadním způsobem přispěl Nambu a za své průkopnické práce byl v roce 2008 oceněn Nobelovou cenou. Bezmezerovým excitacím, které Goldstoneův teorém předpovídá, říkáme také Nambuovy-Goldstoneovy (NG) bosony. Z důkazu Goldstoneova teorému totiž plyne nejenom uvedené omezení na tvar disperzního zákona, ale i kvantová čísla NG exitací. Ve všech situacích, s nimiž se setkáme, mají bosonový charakter.

V lorentzovsky invariantních teoriích díky Einsteinovu vztahu mezi energií a hybností teorém implikuje existenci nehmotné částice, odpovídající každému generátoru spontánně narušené symetrie. Disperzní zákon NG bosonů je v tomto případě samozřejmě lineární, přičemž koeficient je roven rychlosti světla. Pro zapálené čtenáře uvedeme bez definování pojmů (s těmi se sami obeznámí) dva důležité příklady z fyziky elementárních částic.

(i) Ve standardním modelu silných interakcí, známém pod jménem kvantová chromodynamika (QCD) mají goldstoneovský původ nejlehčí hadrony, pseudoskalární piony. Jsou totiž důsledkem spontánního narušení (přibližné) globální spojité chirální symetrie QCD.

(ii) V teorii elektroslabých interakcí mají NG bosony zajímavý osud. Stanou se podélnými polarizačními stavy hmotných částic se spinem 1 a z energetického spektra beze zbytku zmizí. Tento mechanismus "zhmotnění" původně nehmotných částic se spinem 1 se nazývá Higgsův. V kapitolách o supravodivosti se s jeho projevem setkáme v podobě tzv. Meissnerova jevu.

Ideální Boseův plyn v termodynamické limitě předpoklady Goldstoneova teorému samozřejmě splňuje. Předpověď je však triviální: v systému existují excitace s disperzním zákonem  $E_p = p^2/(2m)$ .

(iii) Velmi známým a důležitým netriviálním příkladem je Heisenbergův feromagnet. Pod Curieovou teplotou díky krátkodosahové interakci vytvoří elektronové spiny spontánní magnetizaci. Heisenbergův hamiltonián je invariantní vůči grupě SU(2) spinových rotací. Základní stav je degenerovaný, protože všechny spiny míří jedním, libovolným směrem a není invariantní vůči všem spinovým rotacím (pouze vůči podgrupě rotací kolem makroskopické magnetizace). Ve shodě s Goldstoneovým teorémem existují ve spektru Heisenberova feromagnetu "měkké" módy, zvané magnony.

(iv) V lorentzovsky neinvariantních systémech se spontánně narušenou symetrií není tvar disperzního zákona NG exitací jednoznačně fixován. Budeme si pamatovat, že "normální" je, je-li lineární.

Jevy, charakteristické makroskopickým obsazováním kvantových stavů a dopro-

vázené spontánním narušením spojitých symetrií, které systémy identických *interagujících* částic charakterizují, se nazývají a chovají různě. Právě jim je věnována podstatná část těchto skript. Jsou-li splněny předpoklady Goldstoneova teorému, mají všechny systémy jako jsou supratekutost či supravodivost jedno společné: ve spektru jejich hamiltoniánů se objeví specifické excitace se zcela specifickými fyzikálními projevy – Nambuovy-Goldstoneovy bosony. Přejdeme nyní k první názorné a netriviální ilustraci a popíšeme fyzikální chování systému slabě interagujících identických bezspinových bosonů při velmi nízkých teplotách.

#### 1.5 Slabě interagující Boseův plyn

Intuitivně je rozumné přepokládat, že pokud v řídkém systému identických bosonů řízeném hamiltoniánem (1.12) existuje pouze odpudivá dvoučásticová interakce s malou (nulovou) předanou hybností, jev BEC zůstane zachován, ovšem s nezbytnými důsledky této interakce. Základem takové úvahy je kvantově mechanický vztah mezi dvoučásticovým potenciálem a amplitudou rozptylu ve vakuu, tj. bez přítomnosti ostatních částic. Odvodíme a použijeme jej, takže nahrazením dvoučásticového potenciálu v mnohočásticovém problému rozptylovou amplitudou (v s-stavu) budou naše výsledky (přibližně) vyjádřeny pomocí experimentálně pozorovatelné veličiny, tzv. s-vlnové rozptylové délky (angl. s-wave scattering length).

Schrödingerova rovnice pro dvě částice s hmotností m, interagující potenciálem V(x) má v těžištovém systému tvar

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\boldsymbol{x}) = v(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) , \qquad (1.69)$$

kde x je vzdálenost mezi částicemi,

$$v(\boldsymbol{x}) \equiv \frac{2m_{\rm red}V(\boldsymbol{x})}{\hbar^2} \tag{1.70}$$

a  $m_{\rm red}$  je redukovaná hmotnost. Rozptylovou úlohu formálně vyřešíme zavedením Greenovy funkce  $G^+$ , splňující rovnici

$$(\nabla_{\mathbf{x}}^2 + k^2)G^+(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) = -\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})$$
(1.71)

a mající tvar

$$G^{+}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}) = \int \frac{d^{3}p}{(2\pi)^{3}} \frac{e^{i\boldsymbol{p}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}}{p^{2} - k^{2} - i\eta} = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{i\boldsymbol{p}|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|}}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}|} .$$
(1.72)

Rozptylová vlnová funkce splňuje rovnici

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{+}(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}} - \int d^{3}y G^{+}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})v(\boldsymbol{y})\psi_{\boldsymbol{k}}^{+}(\boldsymbol{y}) , \qquad (1.73)$$

jejíž asymptotika pro  $x \to \infty$ ,  $\psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{x}) \sim e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}}/x$  definuje srážkovou amplitudu přechodu z počátečního vlnového vektoru  $\mathbf{k}$  do koncového vlnového vektoru  $\mathbf{k}'$ :

$$f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3 y \ e^{-i\mathbf{k}' \mathbf{y}} v(\mathbf{y}) \psi_{\mathbf{k}}^+(\mathbf{y}) \ . \tag{1.74}$$

V impulsové representaci, tj.  $\psi_k(\mathbf{p}) = \int d^3x \exp\{-i\mathbf{p}\mathbf{x}\}\psi_k^+(\mathbf{x})$ a analogicky pro  $v(\mathbf{p})$ , má integrální rovnice (1.73) pro rozptylovou vlnovou funkci tvar

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p}) = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - \frac{1}{p^2 - k^2 - i\eta} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(\mathbf{q}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{p} - \mathbf{q}) .$$
(1.75)

Zavedením modifikované srážkové amplitudy

$$\tilde{f}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \equiv -4\pi f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q \ v(\mathbf{q})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}' - \mathbf{q})$$
(1.76)

přejde na tvar

$$\psi_{k}(p) = (2\pi)^{3}\delta(x-y) + \frac{\tilde{f}(p,k)}{k^{2} - p^{2} + i\eta} .$$
(1.77)

Po úpravě získáme hledanou integrální rovnici pro srážkovou amplitudu v termínech potenciálu:

$$\tilde{f}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{k}) = v(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{k}) + \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} \, \frac{v(\boldsymbol{p} - \boldsymbol{q})\tilde{f}(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})}{k^2 - q^2 + i\eta} \,.$$
(1.78)

Nahradíme-li skutečný potenciál  $V(\mathbf{k})$  v (1.12) konstantním pseudopotenciálem g, mnohočásticová úloha se nesporně podstatně zjednoduší. V našem přiblížení to znamená  $v(\mathbf{k}) \rightarrow mg/\hbar^2$ , v němž srážková amplituda (levá strana rovnice (1.78)) je rovna  $4\pi a$ , kde a je s-vlnová rozptylová délka. Máme tedy

$$\frac{4\pi a\hbar^2}{m} = g - \frac{mg^2}{\hbar^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{q^2} + \dots$$
(1.79)

Budeme uvažovat modelový hamiltonián

$$\hat{H} = \sum_{k} \varepsilon_{k}^{0} a_{k}^{+} a_{k} + \frac{g}{2V} \sum_{k_{1}, k_{2}, k_{3}, k_{4}} a_{k_{1}}^{+} a_{k_{2}}^{+} a_{k_{3}} a_{k_{4}} \delta_{k_{1}+k_{2}, k_{3}+k_{4}} .$$
(1.80)

Nahrazení reálného potenciálu konstantním pseudopotenciálem má za následek, že srážková amplituda v druhém řádu formálně diverguje a integrál je přijato při velké hodnotě vlnového vektoru  $\Lambda$  obřezat<sup>3</sup>. Za zdůraznění stojí, že hamiltonián (1.80) je U(1) invariantní vůči fázové transformaci  $a_{\mathbf{k}} \to \exp\{i\alpha a_{\mathbf{k}}\}$ .

Následující kroky neporuchové aproximativní metody, veden geniální intuicí, navrhl Bogoliubov [7].

1. V interakčním hamiltoniánu (1.80) zanedbáme interakce částic, pokud jsou všechny mimo kondenzát ( $\mathbf{k} \neq 0$ ):  $\hat{\mathbf{H}}_{int} \rightarrow$ 

$$\rightarrow \frac{g}{2V} \{ a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 + \sum_{\mathbf{k}} [2(a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} a_0^+ a_0 + a_{-\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}} a_0^+ a_0) + a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ a_0 a_0 + a_0^+ a_0^+ a_0^+ a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}] \}.$$

 $<sup>^3\</sup>mathrm{Ve}$ výpočtech vyšších řádů, které však provádět nebudeme, se divergence vyruší.

Apostrof znamená, že ve sčítání neuvažujeme  $\mathbf{k} = 0$ .

2. V případě hledání základního stavu je zavádění chemického potenciálu zbytečný luxus. Budeme považovat počet částic za fixovaný a pomocí vztahu

$$\hat{N} \equiv a_0^+ a_0 + \frac{1}{2} \sum_{k}^{\prime} (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k})$$
(1.81)

vyloučíme  $a_0^+a_0$  z hamiltoniánu, přičemž opět zanedbáme interakce částic mimo kondenzát:

$$\hat{\boldsymbol{H}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{H}}_{app} = \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}}^{'} \varepsilon_{\mathbf{k}}^{0} (a_{\boldsymbol{k}}^{+} a_{\boldsymbol{k}} + a_{-\boldsymbol{k}}^{+} a_{-\boldsymbol{k}}) + \\ + \frac{g}{2V} \left\{ N^{2} - N \sum_{\boldsymbol{k}}^{'} (a_{\boldsymbol{k}}^{+} a_{\boldsymbol{k}} + a_{-\boldsymbol{k}}^{+} a_{-\boldsymbol{k}}) \right\} + \\ \frac{g}{2V} \left\{ 2 \sum_{\boldsymbol{k}}^{'} \left[ a_{\boldsymbol{k}}^{+} a_{\boldsymbol{k}} N + a_{-\boldsymbol{k}}^{+} a_{-\boldsymbol{k}} N + a_{\boldsymbol{k}}^{+} a_{-\boldsymbol{k}}^{+} a_{0} a_{0} + a_{0}^{+} a_{0}^{+} a_{0} a_{\boldsymbol{k}} a_{-\boldsymbol{k}} \right] \right\} .$$
(1.82)

Aproximace zřejmě zachovává fázovou invarianci hamiltoniánu.

3. Stejně jako v případě neinteragujícího Boseova plynu nahradíme operátory  $a_0$  a  $a_0^+$ c-čísly a zavedeme pojem hustoty částicn=N/V:  $a_0=N^{1/2}e^{i\theta},\,a_0^+=N^{1/2}e^{-i\theta}$ . Výsledný hamiltonián má tvar:

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{app} = \frac{Vgn^2}{2} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}' \left[ (\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + ng)(a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{\boldsymbol{k}} + a_{-\boldsymbol{k}}^+ a_{-\boldsymbol{k}}) + ng(a_{\boldsymbol{k}}^+ a_{-\boldsymbol{k}}^+ e^{2i\theta} + a_{\boldsymbol{k}}a_{-\boldsymbol{k}}e^{-2i\theta}) \right]$$

4. Protože je tento hamiltonián bilineární v polních operátorech, je možné jeho spektrum nalézt přesně kanonickou transformací. Pro jednoduchost formulí položíme  $\theta = 0$  (projděte si odvození s nenulovým  $\theta$ ) a zavedeme nové anihilační a kreační operátory předpisem

$$a_{\boldsymbol{k}} = u_{\mathbf{k}}b_{\boldsymbol{k}} - v_{\mathbf{k}}b_{-\boldsymbol{k}}^{+} ,$$
  

$$a_{\boldsymbol{k}}^{+} = u_{\mathbf{k}}b_{\boldsymbol{k}}^{+} - v_{\mathbf{k}}b_{-\boldsymbol{k}} . \qquad (1.83)$$

Transformace je kanonická, zachovává-li komutační relace. Z podmínek  $[b_{k}, b_{k'}^+] = \delta_{kk'}$  a  $[b_{k}, b_{k'}] = [b_{k}^+, b_{k'}^+] = 0$  plyne pro všechna k

$$u_{\rm k}^2 - v_{\rm k}^2 = 1 \ . \tag{1.84}$$

22

+

Tento vztah také umožňuje kanonické transformace obrátit. Hamiltonián  $\hat{H}_{app}(\theta)$ , vyjádřený pomocí operátorů b a  $b^+$  má tvar

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{app} = \frac{1}{2} V g n^{2} + \sum' [(\varepsilon_{k}^{0} + ng) v_{k}^{2} - ng u_{k} v_{k}] + \frac{1}{2} \sum' \{ [(\varepsilon_{k}^{0} + ng) (u_{k}^{2} + v_{k}^{2}) - 2u_{k} v_{k} ng] (b_{\boldsymbol{k}}^{+} b_{\boldsymbol{k}} + b_{-\boldsymbol{k}}^{+} b_{-\boldsymbol{k}}) \} + \frac{1}{2} \sum' \{ [ng (u_{k}^{2} + v_{k}^{2}) - 2u_{k} v_{k} (\varepsilon_{k}^{0} + ng)] (b_{\boldsymbol{k}}^{+} b_{-\boldsymbol{k}}^{+} + b_{\boldsymbol{k}} b_{-\boldsymbol{k}}) \}$$

$$(1.85)$$

Využijeme faktu, že vztah (1.84) nefixuje parametry kanonické transformace úplně a naložíme na ně podmínku, která z (1.85) eliminuje "nepříjemné" členy typu 'bb':  $ng(u_k^2 + v_k^2) = 2u_k v_k(\varepsilon_k^0 + ng)$ . Ta převede  $\hat{H}_{app}$  do tvaru diagonálního v operátorech počtu "kvazičástic"  $b_k^+ b_k$ . Koeficienty kanonické transformace nyní vyjádříme pomocí parametrů hamiltoniánu. Položíme  $u_k = \cosh \phi_k, v_k = \sinh \phi_k$  identicky spňující (1.84), takže

$$\tanh 2\phi_{\mathbf{k}} = \frac{ng}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + ng} \quad . \tag{1.86}$$

Protože funkce na levé straně rovnice (1.86) nabývá hodnot mezi -1 a 1, může být rovnice splněna pro všechna k pouze pro g > 0. To fyzikálně znamená odpudivou interakci.

Vyjádříme

$$v_{k}^{2} = u_{k}^{2} - 1 = \frac{1}{2} \left[ E_{k}^{-1} (\varepsilon_{k}^{0} + ng) - 1 \right] , \quad \text{kde}$$
$$E_{k} = \left[ (\varepsilon_{k}^{0} + ng)^{2} - (ng)^{2} \right]^{1/2}$$
(1.87)

a přepíšeme hamiltonián do konečného stavu

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{app} = \frac{1}{2} V g n^2 - \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}}^{\prime} (\varepsilon_{\mathbf{k}}^0 + ng - E_{\mathbf{k}}) + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}}^{\prime} E_{\mathbf{k}} (b_{\boldsymbol{k}}^+ b_{\boldsymbol{k}} + b_{-\boldsymbol{k}}^+ b_{-\boldsymbol{k}}) .$$
(1.88)

Výsledek rozhodně stojí za slovní přeformulování. Za rozumných předpokladů jsme převedli systém interagujících bosonů a s disperzním zákonem  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{0}$  na systém neinteragujících kvazibosonů s disperzním zákonem  $E_{\mathbf{k}}$ . Protože operátor  $b_{\mathbf{k}}^{+}b_{\mathbf{k}}$  má vlastní hodnoty 0, 1, 2, ..., je základní stav  $|\text{vac}\rangle$  hamiltoniánu (1.88) Fockovým vakuem kvazičástic:

$$b_{\boldsymbol{k}}|\mathrm{vac}\rangle = 0 \quad \mathrm{pro} \quad \boldsymbol{k} \neq 0 \;. \tag{1.89}$$

Protože obrácením kanonické transformace dostaneme vztah  $b_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}a_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}}a^+_{-\mathbf{k}}$ , je zřejmé že vakuum  $|vac\rangle$  není vlastním stavem operátoru počtu částic *a* ! Podle naší definice je tedy fázová symetrie spontánně narušena. Protože navíc je nalezené vakuum translačně invariantní (má nulovou hybnost) a interakce mezi částicemi

ubývá dostatečně rychle se vzdáleností (je nenulová pouze v jednom bodě), jsou splněny předpoklady Goldstoneova teorému a je na místě otázka, kde~jsou~NG excitace ?

Disperzní zákon kvazičástic  $E_k$ , (1.87) je pro  $k \to 0$  ve skutečnosti disperzním zákonem Nambuových-Goldstoneových bosonů. Skutečně

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \approx \left(\frac{ng}{m}\right)^{1/2} \hbar k \quad .$$
(1.90)

Takovým excitacím se ale v literatuře běžně říká zvukové vlny nebo fonony a v kapitole 5 uvidíme, že jsou běžné i v supratekutém heliu. Zde je jejich rychlost daná výrazem (1.90) a tudíž rovna  $v = (ng/m)^{1/2}$  (interakce musí být odpudivá).

Z hamiltoniánu (1.88) můžeme vypočítat energii základního stavu:

$$E \equiv \langle \operatorname{vac} | \hat{\boldsymbol{H}}_{\operatorname{app}} | \operatorname{vac} \rangle = \frac{1}{2} V n^2 g + \frac{1}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} (E_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}^0 - ng).$$
(1.91)

Fyzikálně zajímavější je ptát se, co dělá interakce s částicemi v kondenzátu s nulovou hybností. Distribuční funkci částic v základním stavu totiž známe:

$$n_{\mathbf{k}} = \langle \operatorname{vac} | a_{\boldsymbol{k}}^{+} a_{\boldsymbol{k}} | \operatorname{vac} \rangle = v_{\mathbf{k}}^{2} \langle \operatorname{vac} | b_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}}^{+} | \operatorname{vac} \rangle = v_{\mathbf{k}}^{2} .$$
(1.92)

Z formule pro  $v_k$  vidíme, že pro  $k \to 0$   $v_k^2 \sim k^{-1}$ , zatímco pro  $k \to \infty$  je  $v_k^2 \sim k^{-4}$ . Celkový počet částic nad kondenzátem tedy bude konečný. Interakce způsobuje ochuzení (angl. *depletion*) kondenzátu, které definujeme jako

$$\frac{N-N_0}{N} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{n} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{m^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} \left(ng^3\right)^{1/2} .$$
(1.93)

Pro vyšetření nejdůležitějších vlastností slabě interagujícího Boseova plynu **při nízkých teplotách** se vrátíme k obecnému tvaru hamiltoniánu 1.12, do něhož zavedeme chemický potenciál:

$$\hat{H} = \int d^3x \hat{\psi}^+(x) [T(x) - \mu] \hat{\psi}(x) + \frac{1}{2} \int \int d^3x d^3x' \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}^+(x') V(x - x') \hat{\psi}(x') \hat{\psi}(x)$$
(1.94)

Zobecníme pojem kondenzátu v translačně invariantním základním stavu  $(\langle vac | \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) | vac \rangle = \xi_0)$  a rozdělíme polní operátor  $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$  na 'velkou' c-číselnou část  $\Psi(\boldsymbol{x})$  a 'malé' operátorové pole  $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$ 

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \equiv \Psi(\boldsymbol{x}) + \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) . \tag{1.95}$$

Funkci  $\Psi(\boldsymbol{x})$  se říká **kondenzátová vlnová funkce**, brzy uvidíme proč. Veličiny  $\Psi(\boldsymbol{x})$  a  $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$  jsou definovány pomocí středních hodnot při konečné teplotě pomocí hamiltoniánu, který selfkonsistentně zavedeme:

$$\Psi(\boldsymbol{x}) = \langle \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \rangle ; \qquad (1.96)$$

$$\hat{\phi}(\boldsymbol{x}) = \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) - \langle \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \rangle$$
 (1.97)

Při dosazení (1.97) do hamiltoniánu využijeme předpokladu o malosti  $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$  a podržíme pouze členy lineární a kvadratické ve  $\hat{\phi}(\boldsymbol{x})$ :  $\hat{\boldsymbol{H}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{H}}_0 + \hat{\boldsymbol{H}}_1 + \hat{\boldsymbol{H}}_2$  kde  $\hat{\boldsymbol{H}}_0$  je c-číselný hamiltonián

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{0} = \int d^{3}x \Psi^{*}(\boldsymbol{x}) [T(\boldsymbol{x}) - \mu] \Psi(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \int d^{3}x d^{3}x' V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}' |\Psi(\boldsymbol{x})|^{2} |\Psi(\boldsymbol{x}')|^{2} .$$
(1.98)

Hamiltonián  $\hat{H}_1$  obsahuje operátory  $\hat{\phi}$  a  $\hat{\phi}^+$  v nežádoucí první mocnině. Budeme proto požadovat, aby  $\Psi(\boldsymbol{x})$  splňovala nelineární rovnici

$$[T(\boldsymbol{x}) - \mu] \Psi(\boldsymbol{x}) + \int d^{3}x' V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') |\Psi(\boldsymbol{x}')|^{2} \Psi(\boldsymbol{x}) = 0.$$
 (1.99)

Formálně splnění rovnice (1.99), zaručující vymizení hamiltoniánu  $\hat{H}_1$  je podmínkou selfkonsistence, garantující vlastnost  $\langle \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) \rangle = 0$ , plynoucí z (1.97).

Právě jsme odvodili Grossovu-Pitajevského (GP) rovnici [10], která se stala zcela zásadní pro numerické simulace supratekutých systémů (jejich základních fyzikálních vlastností, kritických rychlostí, dynamiky kvantovaných vírů atd., s nimiž se postupně seznámíme v následujících kapitolách). Její podobnost se Schrödingerovou rovnicí dala veličině  $\Psi(\boldsymbol{x})$  její jméno: kondenzátová vlnová funkce.

Hamiltonián  $\hat{H}_2$ , bilineární v operátorech  $\hat{\phi}$  a  $\hat{\phi}^+$  má tvar

$$\hat{H}_{2} = \int d^{3}x \hat{\phi}^{+}(\boldsymbol{x}) [T(\boldsymbol{x}) - \mu] \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) + \\ + \int d^{3}x d^{3}x' V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') |\Psi(\boldsymbol{x}')|^{2} \hat{\phi}^{+}(\boldsymbol{x}) \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) + \Psi^{*}(\boldsymbol{x}) \Psi(\boldsymbol{x}') \hat{\phi}^{+}(\boldsymbol{x}') \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) + \\ + \frac{1}{2} \Psi^{*}(\boldsymbol{x}) \Psi^{*}(\boldsymbol{x}') \hat{\phi}(\boldsymbol{x}') \hat{\phi}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \Psi(\boldsymbol{x}) \Psi(\boldsymbol{x}') \hat{\phi}^{+}(\boldsymbol{x}') \hat{\phi}^{+}(\boldsymbol{x}) , \quad (1.100)$$

který zjevně nekomutuje s operátorem počtu částic. Výsledný aproximativní hamiltonián

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}_0 + \hat{H}_2 ,$$
 (1.101)

který se podobá hamiltoniánu neinteragujících bosonů, je používán pro výpočet středních hodnot operátorů při konečné teplotě  $\langle ... \rangle = \text{Tr} \,\hat{\rho}_{\text{eff}}...$  pomocí statistického operátoru  $\hat{\rho}_{\text{eff}}$  a  $\beta = (k_{\text{B}}T)^{-1}$ :

$$\hat{\rho}_{\text{eff}} \equiv \frac{e^{-\beta \hat{H}_{\text{eff}}}}{\text{Tr}(e^{-\beta \hat{H}_{\text{eff}}})} .$$
(1.102)

Omezíme-li se na systém interagujících bosonů s kondenzátovou funkcí, nezávislou na souřadnicích, odvodíme nejdůležitější fyzikální vlastnosti při nízkých teplotách heuristicky. V uvažovaném případě bude totiž kondenzátová vlnová funkce jen jiným vyjádřením hustoty:

$$\Psi(\boldsymbol{x}) \equiv \sqrt{n_0(T)} \ . \tag{1.103}$$

0	Б
4	0

Dosazením do GP rovnice dostaneme její řešení v závislosti na interakci (Fourierově obrazu potenciálu)  $\mu = n_0(T)V(0)$ . Snadno se přesvědčíme, že v tomto případě mají hamiltoniány (1.101) a (1.83) stejnou strukturu a tudíž formálně identické spektrum, neboť jsou diagonalizovány kanonickou transformací (1.83). Musíme pouze provést ve formulích pro  $u_k$ ,  $v_k$  a  $E_k$  nahrazení  $g \to V(k)$ ,  $n_0 \to n_0(T)$ . Nahrazení má hluboký fyzikální důsledek, protože parametry kanonické tranformace  $u_k$ ,  $v_k$  a energetické spektrum kvazičástic  $E_k$  závisejí prostřednictvím  $n_0(T)$  na teplotě. Např. v disperzním zákonu fononů (1.90) je změna minimální:

$$E_{\rm k} \approx \hbar \left[ n_0(T) V(0) m^{-1} \right]^{\frac{1}{2}} k$$
 (1.104)

Nakonec odvodíme teplotní závislost hustoty částic nad kondenzátem výpočtem střední hodnoty operátoru  $a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}}$  pomocí operátoru (1.102). Výpočet je analogický tomu, který jsme provedli v (1.92) :

$$n'(T) = \langle a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} \rangle = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left[ \frac{u_{\mathbf{k}}^2}{e^{\beta E_{\mathbf{k}}} - 1} + \frac{v_{\mathbf{k}}^2}{1 - e^{-\beta E_{\mathbf{k}}}} \right] .$$
(1.105)

V tomto výrazu v souladu s našimi předpoklady (velmi nízké teploty a slabá interakce) aproximujeme  $n_0(T) \approx n_0$ , použijeme definici (1.92) a získáme vztah

$$n'(T) \approx \int \frac{d^{3}k}{(2\pi)^{3}} \frac{(u_{\rm k}^{2} + v_{\rm k}^{2})|_{T=0}}{e^{\varepsilon_{\rm k}/k_{\rm B}} - 1} + n'(0) .$$
(1.106)

Pro nízké teploty použijeme disperzní zákon fononů a podržíme při výpočtu integrálu ve výrazu pro  $(u_k^2 + v_k^2)|_{T=0}$  pouze člen  $n_0V(0)$ . Pro  $T \to 0$  tedy platí

$$n'(T) - n'(0) \approx \frac{m}{12\hbar^3 c} (k_{\rm B}T)^2$$
 (1.107)

Celková hustota n na teplotě nezávisí, takže  $n = n_0(T) + n'(T)$ . Odtud vidíme, jak se hustota kondenzátu při velmi nízkých teplotách v závislosti na interakci ochuzuje s rostoucí teplotou:

$$n_0(T) = n_0(0) - \frac{m}{12\hbar^3 c} (k_{\rm B}T)^2 . \qquad (1.108)$$

Nakonec přepíšeme tento experimentálně důležitý vztah (1.108) pomocí kondenzátové vlnové funkce:

$$1 - \frac{\Psi(T)}{\Psi(0)} = \frac{m(k_{\rm B}T)^2}{24\hbar^3 c n_0(0)} .$$
 (1.109)

# 1.6 Boseův plyn – shrnutí

Dobrým důvodem, proč jsme absolvovali poměrně složité teoretické výpočty, vedoucí ke znalosti termodynamického chování systému neinteragujících a slabě interagujících bosonů a k vysvětlení jevu Boseovy-Einsteinovy kondenzace je, že je

to v analytické formě možné. Naše výpočty byly provedeny v předpokladu třírozměrného (3D) prostoru. Pro čtenáře by nemělo být technickým problémem zopakovat příslušné výpočty a explicitně prokázat velmi důležitý poznatek, že ve 2D prostoru hybností k Boseově-Einsteinově kondenzaci bosonů nedochází. Dalším dobrým důvodem je to, že fenomenologický popis interagujících mnohočásticových systémů velmi často používá pojem 'kvazičástice'. Intuitivně je to efektivní excitace systému, která detailně neurčeným způsobem zahrnuje značnou část interakce. Systém je pak možné v dobré víře vhodně aproximovat systémem neinteragujících kvazičástic, jejichž počet může záviset na teplotě či jiných fyzikálních parametrech. Cena, kterou za zavedení takového pojmu platíme, je rozumná. Energii kvazičástice jako funkci hybnosti a priori neznáme ( $\varepsilon_{\rm p} = p^2/2m$  se nemusí nehodit) a jako volný parametr má smysl uvažovat i efektivní počet prostorových dimenzí, v nichž kvazičástice žijí. Z tohoto pohledu je užitečné projít si ještě jednou předcházející výpočty a uvědomit si, že všechny je možné technicky zopakovat (s jinými výsledky) pro jiné smysluplné funkcionální tvary  $\varepsilon_{\rm p}$  i pro  $d \neq 3$ . Otázkou pro hloubavější čtenáře je, jaké by muselo být v neinteragujícím mnohobosonovém systému $\varepsilon_{\rm p},$ aby měrné teplo bylo $C_{\rm V}\sim T^3$ ?

Odvození měrného tepla neinteragujícího fononového plynu, známe-li jeho disperzní zákon, představuje zopakovat odvození měrného tepla neinteragujících bosonů, ale s novým disperzním zákonem [11]. V takovém odvození je potřeba položit chemický potenciál nule. Je tomu tak proto, že počet fononů se nezachovává a operátor počtu fononů není definován<sup>4</sup>. Na tomto místě je vhodné připomenout si širší fyzikální souvislosti a uvědomit si, že stejný formalismus lze s úspěchem použít pro výpočet mřížkového měrného tepla pevných látek, konkrétně příspěvku longitudinárních a příčných akustických fononů v oblasti pod Debyeovou teplotou. I těmito otázkami se budeme v příslušné kapitole přirozeně zabývat.

Je nesporným faktem, že stanovení základních fyzikálních charakteristik modelu slabě interagujícího Boseova plynu je teoreticky přesvědčivé. Nezodpovězena však zatím zůstává otázka, jaký fyzikální systém takový model popisuje. Jak jsme ovšem již naznačili, je znalost vlastností Boseova plynu klíčová pro pochopení velmi zajímavého fyzikálního jevu – supratekutosti.

#### 1.7 Boseova-Einsteinova kondenzace a supratekutost

Při podrobnějším pohledu na obr. 1.2 nemůže překvapit, že jev Boseovy-Einsteinovy kondenzace se stal lákavým vysvětlením supratekutosti <sup>4</sup>He. Je tomu tak díky překvapivé numerické shodě kritické teploty Boseovy-Einsteinovy kondenzace ideálního Boseova plynu a přechodu do supratekutého stavu u kapalného izotopu <sup>4</sup>He [1] a kvalitativní shody tvaru teplotní závislosti měrného tepla tohoto mnohobosonového systému [15, 6, 7]. Vzhledem k silné interakci mezi atomy v supratekutém heliu však přímá aplikace našich výsledků na tento konkrétní fyzikální systém není možná [15] a pro podrobnější dikusi odkazujeme čtenáře k příslušné kapitole.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Je dobré si výpočet detailně provést a výsledek  $C_{\rm V}^{\rm phonon} \sim T^3$ , který je zároveň odpovědí na předchozí otázku, si pamatovat. Budeme se na něj v dalších kapitolách odvolávat, konkrétně pak analogický výpočet v rámci Landauovy teorie supratekutosti v kapitole 5 provedeme.

Nemůžeme však nechat naše formální výsledky bez jasné fyzikální interpretace. A. Povinná otázka je: jaká je funkcionální závislost měrného tepla  $C_V$  v supratekutém <sup>4</sup>He při  $T \rightarrow 0$ ? Experimentální fyzici přesvědčivě naměřili, že při dostatečně nízkých teplotách (kde, jak budeme podrobně diskutovat později, lze zanedbat vliv rotonů) jde o závislost  $C_V \sim T^3$ . Významný teoretický fyzik Landau výsledek měření přesvědčivě interpretoval [8, 9]: (1) Jev supravodivosti není BEC, protože  $T^3$  není  $T^{3/2}$  (viz formule (1.50). (2) Při  $T \rightarrow 0$  se supratekuté helium chová jako plyn neinteragujících fononů, t.j. excitací s lineární závislostí jejich energie na hybnosti, jak si pilný čtenář sám odvodil. Takový závěr je naprosto legitimní a tvoří základ fenomenologického popisu jevu supratekutosti, který existenci takových efektivních stupňů volnosti postuluje.

B. My už ale víme něco, co ani jasnozřivý Landau nevěděl, a sice že je možné existenci fononů v mnohobosonovém systému zaručit jediným předpokladem o základním stavu, který není vlastním stavem operátoru počtu částic. Pozor ! My jsme existenci fononů doložili v jednom konkrétním modelu slabě interagujícího Boseova plynu, charakteristického mimo jiné existencí "velkého" kondenzátu.

C. Samotná existence fononů pro kvantitativní popis supratekutosti helia nestačí a je nezbytné dodat o systému další nezávislé experimentální informace. Netriviální informaci nese fakt, že Landau v kontextu supratekutosti helia pojem BEC kondenzát nikdy nepoužil. To je v souhlasu s teoretickou možností spontánního narušení fázové symetrie v interagujícím mnohobosonovém systému, t.j. existencí fononů, bez BEC kondenzátu.

D. Mluvíme o supratekutosti a je na čase tento pojem alespoň kvalitativně definovat. Systém budeme považovat za supratekutý tehdy, nebude-li za určitých podmínek při jeho proudění nebo při pohybu hmotného makroskopického tělesa v něm docházet k disipaci energie. Z klasického hlediska takovému požadavku vyhovuje ideální kapalina, jejíž hydrodynamiku popisuje Eulerova rovnice. Na těleso pohybující se rovnoměrně a přímočaře v



Obr. 1.2: Teplotní závislost měrného tepla kapalného <sup>4</sup>He (plná čára) a ideálního Boseova plynu (čárkovaně).

nekonečném objemu<br/> $^5$ ideální kapaliny nepůsobí žádná síla odporu prostředí - j<br/>de o tak zvaný d'Alambertův paradox.

Z hlediska našeho kvantově mechanického popisu musíme vyšetřit, zda se při

 $<sup>^5 {\</sup>rm Pokud}$  by např. ideální kapalina ve které se těleso pohybuje měla volný povrch a případně i nenulové povrchové napětí, mohou se na něm pohybem tělesa generovat vlny, tzv. ripplony, které odnášejí energii pohybujícího se tělesa a způsobují tak disipaci jeho energie.

pohybu makroskopického tělesa naším systémem budou či nebudou generovat kvazičástice. Generování kvazičástic v souladu s disperzním zákonem systému je právě tím disipativním mechanismem, který působí jako efektivní odpor prostředí, který v klasickém případě vyplývá z hydrodynamického popisu proudění vazkých tekutin pomocí Navierovy-Stokesovy rovnice.

V kapitole 5 o supratekutosti <sup>4</sup>He odvodíme<sup>6</sup> tzv. Landauovo kritérium supratekutosti. Landau byl první, kdo na základě své fenomenologické teorie supratekutosti zformuloval kvantitativní podmínku pro maximální rychlost jeho proudění (vzhledem k nepohyblivé stěně nádoby nebo povrchu tělesa, který supratekuté <sup>4</sup>He obtéká), při překročení které dojde k destrukci supratekutosti právě ve smyslu, že bude energeticky výhodné generovat kvazičástice. Platnost Landauova kriteria supratekutosti je však mnohem obecnější (např. v kapitole 6 o supratekutosti <sup>3</sup>He uvidíme, že zde definuje tzv. rychlost rozpárování - angl. *pair-breaking velocity*). Kvazičástice budou generovány v případě, přesáhne-li rychlost pohybujícího se tělesa (nebo rychlost proudění tekutiny vůči pevné stěně) Landauovu kritickou rychlost, danou vztahem

$$v_{\rm L} = \left[\frac{\varepsilon(p)}{p}\right]_{\rm min}.$$
 (1.110)

Protože v ideálním Boseově plynu platí  $\varepsilon(p) = p^2/2m$  vidíme, že Landauovo kriterium není pro žádnou konečnou rychlost splněno a přestože v něm v 3D dochází k Boseově-Einsteinově kondenzaci, supratekutost nemůže vykazovat.

Situace se však změní, zapneme-li libovolně slabou odpudivou interakci. Jak jsme rigorózně ukázali pro slabě interagující Boseův plyn, interakce vede ke zcela zásadní modifikaci disperzního zákona, kerý lze pro malé hybnosti zapsat ve tvaru  $\varepsilon(p) = cp$  – srovnej s výrazy (1.87) a (1.90). Již jsme zmínili, že v případě kapalného <sup>4</sup>He takovým kvazičásticím říkáme zvukové fonony a c je rychlost, kterou se zvuk šíří. Pro slabě interagující Boseův plyn tedy Landauovo kriterium supratekutosti říká, že supratekutost existuje, ale překročí-li rychlost proudění rychlost zvuku, dojde ke generaci zvukových kvant - fononů a k destrukci supratekutosti. Budeme si tedy dobře pamatovat zcela zásadní fakt, že **bez interakce není supratekutosti**. Nezbytnost fononů je tedy potvrditelná další experimentáně měřitelnou veličinou, kritickou rychlostí.

E. Na základě našich výpočtů jsme už nyní připraveni navrhnout další experimentální test(y) teoretického popisu supratekutosti. Zjevně se nabízí měřit velikost kondenzátu v základním stavu a závislosti ochuzení kondenzátu na teplotě.

Na tomto místě ještě jednou zdůrazníme, že právě uvedené úvahy platí i pro fermionové systémy. Jak uvidíme v následujícím, ideální mnohofermionový systém nevykazuje některé specifické vlastnosti, pozorované při velmi nízkých teplotách ve fermionových systémech s vhodnou přitažlivou interakcí. Bude užitečné, když si čtenář začne uvědomovat obecnost a fyzikální důležitost koncepce spontánního narušení spojitých symetrií a jejich fyzikálního důsledku, existence Nambuových-Goldstoneových excitací.

 $<sup>^6 {\</sup>rm Samotné}$ odvození ponecháváme v kapitole 5 o supratekutosti $^4 {\rm He},$  protože bylo Landauem historicky dáno právě v tomto kontextu.

### 1.8 Ideální Fermiho plyn

Díky Pauliho principu je kvantové chování neinteragujících fermionů diametrálně odlišné od chování neinteragujících bosonů. Neuškodí citát [11]: "*Tím jsou fermiony* vyděleny jako částice řekněme "nesnášenlivé" či "individualistické". Jsou to částice, které mají "lokty" a dovedou si kolem sebe udělat místo. Této skutečnosti, že si elektrony jako fermiony vyžadují svůj "životní prostor", vděčíme vlastně za svoji existenci, stabilitu atomů, molekul, organizaci elektronů kolem jádra atomu, za celou chemii atd. Naše základní životní a vesmírné struktury, makroskopické objekty jsou tak vlastně kvantověmechanicky "nafouknuty" a jejich zhroucení zabraňuje kvantový tlak elektronů."

Začneme jako v případě bosonů a ze vztahu (1.27) získáme známé Fermiho-Diracovo rozdělení:

$$n_{\rm i}^0 = \left[ e^{\beta(\varepsilon_{\rm i} - \mu)} + 1 \right]^{-1} . \tag{1.111}$$

Budeme opět předpokládat, že $\varepsilon_{\rm i}=p^2/2m=\hbar^2k^2/2m,$ takže

$$PV = \frac{2}{3}E = \frac{2}{3}\frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} ; \qquad (1.112)$$

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} .$$
(1.113)

Pro fermiony se spinem s je g = 2s + 1. Z distribuční funkce (3.32) vyplývá, že (i)  $n^0 \leq 1$  pro všechna  $\mu$  a T; (ii)  $n^0 = 1/2$  pro  $\varepsilon = \mu$ ; (iii) v klasické limitě  $T \to \infty$  opět platí Boltzmannovo rozdělení; (iv) pro  $T \to 0$  přejde Fermiho-Diracovo rozdělení na skokovou funkci  $\theta(\mu - \varepsilon)$ , tj.

$$\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}+1} \to 0 \quad (\varepsilon > \mu); \quad \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}+1} \to 1 \quad (\varepsilon < \mu) \ . \tag{1.114}$$

Toto chování neinteragujícího Fermiho plynu při nulové teplotě je velmi názorné. Stav s nejnižší energií (základní stav, někdy mu budeme říkat fyzikální vakuum nebo prostě jenom vakuum) je ten, v němž jsou jednočásticové stavy obsazeny až do energie  $\varepsilon = \mu$ . Rovnou konstatujme, že díky Pauliho principu vystoupení za rámec Fockovy reprezentace v termodynamické limitě v tomto případě nehrozí.

Pro T = 0 tedy platí

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\mu d\varepsilon \varepsilon^{1/2} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3} \mu^{3/2} .$$
(1.115)

Odtud spočítáme Fermiho energii  $\varepsilon_{\rm F} \equiv \mu(T=0)$ :

$$\varepsilon_{\rm F} = \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} \equiv \frac{\hbar^2 k_{\rm F}^2}{2m} ; \qquad (1.116)$$

$$k_{\rm F} = \left(\frac{6\pi^2 N}{gV}\right)^{1/3} \,. \tag{1.117}$$

Analogicky vypočítáme hustotu energie

$$\frac{E}{V} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_0^\mu d\varepsilon \varepsilon^{3/2} = \frac{g}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{5} \ \mu^{5/2} \ . \tag{1.118}$$

Kombinací sN/Vzískáme vztah $E/N=3\mu/5=3\varepsilon_{\rm F}/5,$ takže stavová rovnice je

$$PV = \frac{2}{3}E = \frac{2}{5}N\varepsilon_{\rm F} \tag{1.119}$$

a tlak ideálního Fermiho plynu je přiT=0,na rozdíl od Boseova plynu, konečný (vzpomeňte na citát):

$$P = \frac{2}{5} \left(\frac{6\pi^2}{g}\right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} .$$
 (1.120)

Na rozdíl od základního stavu Boseova plynu jsou v základním stavu Fermiho plynu částice s nenulovou hybností (až do Fermiho meze) a ty vykazují nenulový tlak.

Abychom určili chování ideálního Fermiho plynu při nízkých teplotách, potřebujeme znát PV (1.112) explicitně jako funkci  $(T, V, \mu)$ . Nejprve integrál přepíšeme jako

$$PV = \frac{2}{3}E = \frac{2}{3}\frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \int_{-\mu)/k_{\rm B}T}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} ; \qquad (1.121)$$

přičemž zavádíme vhodné proměnné  $x \equiv (\varepsilon - \mu)/k_{\rm B}T$  a  $\alpha \equiv \mu/k_{\rm B}T$ . Stanovíme přibližně hodnotu integrálu ve výrazu pro PV pro velké hodnoty  $\alpha$ :

$$I(\alpha) \equiv \int_{-\alpha}^{\infty} dx \frac{(x+\alpha)^{3/2}}{e^x+1} = \int_{-\alpha}^{0} dx \frac{(x+\alpha)^{3/2}}{e^x+1} + \int_{0}^{\infty} dx \frac{(x+\alpha)^{3/2}}{e^x+1} .$$
(1.122)

V prvním integrálu zaměním<br/>e $x \to -x,$  použijeme identitu  $(e^{-x}+1)^{-1} \equiv 1-(e^x+1)^{-1}$ a dostaneme

$$I(\alpha) = \int_0^\alpha dx (\alpha - x)^{3/2} + \int_0^\infty dx \frac{(\alpha + x)^{3/2} - (\alpha - x)^{3/2}}{e^x + 1} + \int_\alpha^\infty dx \frac{(\alpha - x)^{3/2}}{e^x + 1}$$

Poslední integrál zanedbáme, v druhém aproximujeme čitatele pro velká  $\alpha$ ,  $(\alpha + x)^{3/2} - (\alpha - x)^{3/2} \approx 3x\alpha^{1/2} + O(\alpha^{-3/2})$  a integrály spočítáme. Výsledkem je

$$I(\alpha) = \frac{2}{5}\alpha^{5/2} + \frac{\pi^2}{4}\alpha^{1/2} + \dots = \left(\frac{1}{k_{\rm B}T}\right)^{5/2} \left[\frac{2}{5}\mu^{5/2} + (k_{\rm B}T)^2 \frac{\pi^2}{4}\mu^{1/2} + \dots\right].$$

Pro nízké teploty  $T \rightarrow 0$  tedy platí

$$PV = -\Omega = \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3} \left[\frac{2}{5}\mu^{5/2} + (k_{\rm B}T)^2 \frac{\pi^2}{4}\mu^{1/2} + \dots\right] \,.$$

Z termodynamického potenciálu  $\Omega = -PV$  nyní spočítáme všechny důležité fyzikální charakteristiky systému neinteragujících fermionů při nízkých teplotách.

Pro počet částic dostaneme vztah:

$$N = \left[\frac{\partial(PV)}{\partial\mu}\right]_{TV} = \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3} \left[\mu^{3/2} + (k_{\rm B}T)^2 \frac{\pi^2}{8\mu^{1/2}} + \dots\right] .$$
(1.123)

Odtud proN/Vpomocí (1.116) odvodíme implicitní výraz pro chemický potenciál $\mu,$ který umíme rozvojem v $T^2$ vyřešit, takže

$$\mu = \varepsilon_{\rm F} \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{k_{\rm B}T}{\varepsilon_{\rm F}} \right)^2 + \dots \right] \,. \tag{1.124}$$

Z (1.123) spočteme entropii:

$$S(T, V, \mu) = \left[\frac{\partial(PV)}{\partial T}\right]_{V\mu} = \frac{gV}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \frac{2}{3} \left[\frac{2\pi^2}{4}k_{\rm B}^2 T \mu^{1/2} + \dots\right] , \qquad (1.125)$$

kterou můžeme pomocí (1.124) vyjádřit ve tvaru

$$S(T, V, N) = Nk_{\rm B} \frac{k_{\rm B}T}{\varepsilon_{\rm F}} \frac{\pi^2}{2} . \qquad (1.126)$$

Nakonec odvodíme formuli pro měrné teplo neinteragujícího Fermiho plynu při $T \rightarrow 0:$ 

$$C_V = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{VN} = \frac{\pi^2}{2} N k_{\rm B} \frac{k_{\rm B}T}{\varepsilon_{\rm F}} = \frac{m k_{\rm B}^2}{\hbar^2} \left(\frac{g\pi}{6}\right)^{2/3} NT\left(\frac{V}{N}\right)^{2/3} .$$
(1.127)

Budeme si pamatovat, že měrné teplo volného Fermiho plynu jde k nule lineárně s teplotou a nevykazuje žádné nespojitosti. Pro úplnost dodejme, že v případě  $T \to \infty$ , kdy platí Boltzmannova statistika, jde měrné teplo ke konstantě:  $C_V \to 3/2 Nk_{\rm B}$ .

#### 1.8.1 Ideální Fermiho plyn - shrnutí

Opět jsme absolvovali poměrně náročné analytické teoretické výpočty, vedoucí tentokrát ke znalosti termodynamického chování systému neinteragujících fermionů. Naše výpočty byly opět provedeny v předpokladu třírozměrného (3D) prostoru, ale

není problém je zopakovat např. pro 2D prostor<sup>7</sup>. Přesný výpočet nízkoteplotního chování systému identických fermionů stojí za práci, neboť díky Pauliho principu má v případě fermionů intuitivně zřejmý pojem kvazičástice široké praktické uplatnění. V mnoha případech **interagujících** mnohofermionových systémů (o nichž se krátce zmíníme v následujícím) se totiž interakce spotřebuje na předefinování hmotnosti fermionu, eventuelně na předefinování vazbových konstant s vnějšími poli. V takových případech je teorie neinteragujících (kvazi)fermionů velmi užitečným prvním přiblížením.

Přiblížení ideálního Fermiho plynu překvapivě dobře popisuje chování elektronového plynu v kovech. Protože Fermiho teplota  $T_{\rm F} = \varepsilon_{\rm F}/k_{\rm B}$  je zde řádově 10<sup>4</sup> K, je kvantově mechanický popis již při pokojové teplotě nezbytný a měrné teplo 3D elektronového plynu se tedy chová ve shodě s formulí 1.127. Konkrétněji tyto otázky prostudujeme v kapitole 18 o nízkoteplotních vlastnostech pevných látek. Přiblížení ideálního Fermiho plynu dokonce dobře popisuje chování niter neutronových hvězd (blíže viz kapitola 12 o barevné supratekutosti) a kvalitativně i kapalného <sup>3</sup>He (zde je však lépe využít přesnější popis interagující Fermiho kapaliny, se kterým přišel Landau a s nímž se v kapitole 3 blíže seznámíme).

# 1.9 Poznámky k slabě neideálnímu Fermiho plynu

Dobrá otázka je, *proč* je přiblížení ideálního Fermiho plynu pro mnoho fermionových systémů (viz např. kapitola 9 o chladných plynech) s často i silnou interakcí tak dobré. Přesvědčivá odpověď není známa dlouho. V dobře definovaném technickém smyslu, jehož vysvětlení vychází zcela za rámec skript, jsou téměř všechny interakce v mnohofermionových systémech, v nichž je definována Fermiho plocha, nepodstatné.

Vzácnou výjímku tvoří přitažlivá (libovolně slabá) interakce mezi fermiony s opačnými hybnostmi blízko Fermiho plochy. Výsledné termodynamické chování systému se genericky liší od termodynamického chování neinteragujícího systému, definované svým neinteragujícím hamiltoniánem

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{0} = \int d^{3}x \hat{\psi}_{\alpha}^{+}(\mathbf{x}) \left[ -\frac{\hbar^{2} \nabla^{2}}{2m} - \mu \right] \hat{\psi}_{\alpha}(\mathbf{x}) . \qquad (1.128)$$

Později budeme toto chování se znalostí věci nazývat supratekutostí (v případě elektricky neutrálních fermionů, viz kapitola 6 o supratekutosti <sup>3</sup>He) či supravodivostí (v případě fermionů elektricky nabitých, viz kapitola 13).

V těchto úvodních poznámkách se omezíme na otázky, které se podle názoru autorů této kapitoly na základě právě nabytých zkušeností nabízejí a jsou prakticky povinné. Nabízíme čtenáři, aby následující kapitoly o supravodivosti a supratekutosti četl následující optikou:

 $<sup>^7</sup>$ Tento přístup je široce uplatňován např. pro popis 2D elektronového plynu v polovodivých strukturách typu FET tranzistorů či GaAS-GaAlAs heterostruktur, vede ke Coulombické blokádě či kvantovému Hallovu jevu a budeme se mu podrobně věnovat v poslední kapitole 20.

A. Jaký lokální bilineární fermionový hamiltonián, který se genericky liší od (1.128), lze vymyslet? Proč klademe právě tuto otázku by mělo být zřejmé: pokud existuje mnohofermionový systém, v němž fermionové měrné teplo nezávisí při velmi nízkých teplotách na teplotě lineárně, je naděje, že změnou disperzního zákona fermionových kvazičástic naměřenou závislost vysvětlíme.

Díky antikomutačním relacím fermionových polí je výběr velmi omezený. K hamiltoniánu (1.128) můžeme přidat jediný lokální operátor

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\Delta} = \Delta e^{2i\theta} \hat{\psi}^{+}_{\uparrow}(\mathbf{x}) \hat{\psi}^{+}_{\downarrow}(\mathbf{x}) + \text{H.C.} , \qquad (1.129)$$

kde H.C. označuje hermitovsky sdružený člen. Ponecháváme stranou otázku, jakou (linearizující) aproximací je možné takový hamiltonián získat z interagujícího hamiltoniánu. Jako kvalitní cvičení může pilný čtenář najít spektrum hamiltoniánu

$$\hat{\boldsymbol{H}}_s = \hat{\boldsymbol{H}}_0 + \hat{\boldsymbol{H}}_\Delta \tag{1.130}$$

kanonickou transformací, která převádí systém interagujících fermionů a s disperzním zákonem  $\varepsilon_p = p^2/2m$  na systém neinteragujících kvazičástic (opět fermionů s kanonickými antikomutačními relacemi) b a disperzním zákonem

$$E_{\rm k} = \sqrt{(\varepsilon - \mu)^2 + |\Delta|^2}$$
 (1.131)

Lenivější čtenář odvození najde v kapitole 13 o supravodivosti. Tam se také dočte, že odpovídající měrné teplo při velmi nízkých teplotách závisí na teplotě exponenciálně, v souhlasu s experimentem.

B. Právě jsme jinými slovy řekli, že základní stav uvažovaného mnohofermionového systému fermionů a je Fockovým vakuem kvazičástic b. Snadno se přesvědčíme (nejsnadněji nahlédnutím do kapitoly 13 o supravodivosti), že takový základní stav není vlastním stavem operátoru počtu částic. Otázka zní: Kde jsou NG excitace? Odpověď evidentně závisí pouze na interakci, neboť základní stav, o němž je řeč, translačně invariantní je. O osudu NG excitací v různých mnohofermionových systémech, lišících se právě typem interakce mezi fermiony, bude řeč v příslušných kapitolách. V modelech, jejichž hamiltonián obsahuje pouze fermionové polní operátory, jsou NG bosony typem exitací, kterým se říká kolektivní. Jsou totiž kreovány typicky bilineárními kombinacemi fermionových polních operátorů. Jejich teoretický popis vyžaduje další rozvinutí kvantově polního aparátu. Je však zřejmé, že jejich existence z definice významně ovlivňuje termodynamické chování uvažovaného systému při nízkých teplotách.

C. V bodě A jsme pro potřeby robustnosti argumentu učinili dva tiché předpoklady. Předpokládali jsme, že existuje jeden typ nerelativistického fermionu  $\psi_{\sigma}(\mathbf{x})$ , kde  $\sigma$  je index spinu. Pak je skutečně součin dvou fermionových operátorů v jednom bodě prostoru nenulový jen pokud se operátory liší projekcí spinu (antisymetrická kombinace). Připustíme-li existenci více typů fermionů (např. nukleony lišící se isospinem), existuje takových lokálních bilineárních kombinací víc. Například, fermiony mohou kondenzovat v párech s jednotkovým spinem (symetrická kombinace). Takové možnosti budeme detailněji studovat v kapitole 12 o barevných supravodičích. Tam budou navíc fermiony relativistické. Předpokládali jsme dále, že operátor je lokální. Opuštění tohoto předpokladu znamená umožnit vzájemný nenulový orbitální moment dvou fermionů. Odpovídající typ základního stavu se spontánně narušenou symetrií je charakteristický pro supratekutost fermionového <sup>3</sup>He, kterým se budeme detailně zabývat v samostatné kapitole 6.

D. Existují mnohofermionové systémy, které se při nízkých teplotách *nechovají* jako přibližně neinteragující Fermiho plyn, a které se při dalším ochlazení *nechovají* ani jako standardní supravodiče. V takových případech je pro rozumný popis takového systému každá rada drahá. Nepřekvapí proto, že obecná, všeobecně přijatá teorie pro popis takových systémů zatím neexistuje.

# 1.10 Závěr

V této úvodní kapitole jsme se pokusili o vcelku rigorózní kvantově mechanický popis systémů neinteragujících či slabě interagujících identických částic - bosonů a fermionů. Tento přístup je zcela zásadní a jako červená niť nás bude implicitně provázet celou knihou jako memento pro popis a pochopení fyzikálních jevů, které jsou fyzice nízkých teplot vlastní, zejména Boseovou-Einsteinovou kondenzací v reálných systémech atomů alkalických kovů či atomárního vodíku ochlazených metodou laserového chlazení a kvantového vypařování v magnetické pasti, supravodivostí a supratekutostí v celé řadě běžných látek a materiálů i dalších exotických systémů jakými jsou neutronové hvězdy. Věříme, že si čtenář tuto skutečnost při čtení následujících kapitol uvědomí.

Zdůrazněme, že takový obecný přítup je umožněn teprve díky značnému posunu poznání v posledním desetiletí. Ačkoli se např. po dlouhou dobu mlčky předpokládalo, že kvantově mechanický popis a Boseova-Einsteinova kondenzace jsou pro supratekutost běžného izotopu <sup>4</sup>He relevantní, vzhledem k silným interakcím v kapalině popis pomocí slabě interagujícího plynu nebyl nijak přesvědčivý. Díky experimentální realizaci Boseovy-Einsteinovy kondenzace atomárního vodíku a zejména atomů alkalických kovů (a to jak bosonů, tak prostřednictvím Cooperova párování i fermionů) v magnetických pastech, kde lze sílu interakce experimentálně jednoduše "ladit", lze nyní názorně prokázat, jak síla interakce spojitě ovlivňuje jejich fyzikální vlastnosti (tomuto problému je věnována samostatná kapitola 9). Tyto systémy podstatným způsobem přispěly k hlubšímu pochopení jevů supratekutosti a supravodivosti, tedy těm, které jsou fyzice nízkých teplot vlastní.

### 1.11 Literatura

- [1] L.D. Landau and E. M. Lifshitz, Teoretičskaja Fizika, Nauka, Moskva (1973).
- [2] A.L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-Particle Systems, Mc Graw-Hill, (1971).
- [3] L.I. Schiff, Quantum Mechanics, Mc Graw-Hill (1968).
- [4] A. Zee, Quantum field theory in a nutshell, Princeton University Press (2003).

- [5] G.S. Guralnik, C.R. Hagen a T.W.B. Kibble, Spontaneous symmetry breaking and the Goldstone theorem, in 'Particle Physics' (R.L. Cool and R. E. Marshak, eds.), Wiley (1968).
- [6] D.R. Tilley, J. Tilley, Superfluidity and Superconductivity, Adam Hilger (1986).
- [7] N.N. Bogoliubov J. Phys. USSR 11, 23(1947).
- [8] P. Kapitza, Nature **141**, 74 (1938).
- [9] F. London, Nature 141, 643 (1938).
- [10] F. London, Nature 141, 913 (1938).
- [11] L.D. Landau, J. Phys. USSR 5, 356 (1941).
- [12] L.D. Landau, J. Phys. USSR **11**, 91 (1947).
- [13] I.E. Dzyaloshinskii, E.M. Lifshic, L.P. Pitaevskii, Adv. Phys. 10, 165 (1961).
- [14] M. Odehnal, Supravodivost a jiné kvantové jevy, Academia, Praha (1992).
- [15] I.M. Chalatnikov, Teorija svěrchtěkučesti, Nauka, Moskva (1971).
# 2 Dosahování a měření nízkých teplot

#### M. Rotter, L. Skrbek

Teplota patří mezi základní fyzikální veličiny ve všech soustavách jednotek. Zatímco přesnost stanovení hmotnosti a délky se s pokrokem ve fyzice neustále zvyšuje, teplotu můžeme určit výrazně méně přesně. Pro teplotu jako intenzivní veličinu nelze vytvořit etalon jako pro hmotnost či délku. Vytvářejí se proto teplotní stupnice se soustavou pevných bodů a teploměrných čidel, která stupnici mezi těmito body udržují.

Klasická termodynamika nabízí jediný proces k určení termodynamické teploty. Je jím cyklický děj popsaný Carnotovým cyklem. Poměr teploty studené lázně  $T_2$ a teplé lázně  $T_1$  je jednoznačně určen účinností Carnotova cyklu $\eta$ 

$$\frac{T_2}{T_1} = 1 - \eta \ . \tag{2.1}$$

Carnotův cyklus představuje idealizaci cyklicky pracujícího tepelného stroje. Při jeho realizaci nelze prakticky zajistit, aby jednotlivé větve cyklu byly přesně izotermické či adiabatické. Účinnost stroje je také obtížné měřit s dostatečnou přesností.

Ve statistické termodynamice lze termodynamickou teplotou T charakterizovat pravděpodobnost obsazení energetických hladin vícehladinového systému. Pravděpodobnost p(E)d(E) nalezení kanonického souboru v tepelné rovnováze v intervalu energií (E, E + dE) je dána vztahem

$$p(E)dE = \Omega(E)\exp(-E/k_{\rm B}T)dE , \qquad (2.2)$$

kde $k_{\rm B}=1,3807\times 10^{-23}~{\rm J/K}$  je Boltzmannova konstanta. Výraz $\Omega EdE$ udává počet možných stavů souboru v daném intervalu energií. Statistická termodynamika umožňuje vytvořit absolutní teploměry (o nichž v této kapitole pojednáme), jejichž údaj je dán fyzikálními zákony v principu nezávisle na pracovní látce.

K absolutnímu stanovení vysokých teplot se osvědčilo využití metod kvantové statistiky k popisu záření absolutně černého tělesa pomocí Planckova vyzařovacího zákona [1]. V oblasti nízkých teplot bylo možné tento přístup použít pro bolometrické ověření platnosti termodynamické teploty pouze pro teploty vyšší než  $T = -130^{\circ}$ C [2]. Podle Stefanova - Boltzmannova zákona je energie vyzařovaná černým tělesem úměrná čtvrté mocnině teploty a vlnová délka oblasti největší hustoty energie je nepřímo úměrná teplotě. Podle Wienova posunovacího zákona pak teplotě T = 10 K odpovídá vlnová délka maxima záření  $\lambda_{(max)} = 0, 29 \times 10^{-3}$  m – tedy v oblasti, jejíž detekce je velmi obtížná.

#### 2.1 Teplotní stupnice

Pro účely praktické termometrie se stanovují teplotní stupnice, které jsou přijímány na zasedáních Generální konference měr a vah (CGPM) po dohodě zástupců všech

37



Obr. 2.1: Použití platinového odporového teploměru je ve stupnici ITS-90 rozděleno do pěti podintervalů.

členských zemí konvence. Stupnice jsou tedy výsledkem práce fyziků i metrologů a mají charakter zákonného nařízení.

Hodnoty pevných bodů i výběr teploměrných čidel se vyvíjejí zásluhou dlouhodobého porovnávání výsledků mezi metrologickými i fyzikálními laboratořemi. V současné době platí stupnice ITS-90, deklarovaná v roce 1990, která nahradila často stále ještě používanou stupnici IPTS-68. Teplotní stupnice (ITS-27, IPTS-48 a ITPS-68) přijaté do roku 1990 byly vytvořeny z termodynamických pevných bodů (body tání a tuhnutí, trojné body a body varu), jejichž hodnoty se systematickým srovnáváním zpřesňovaly a jejichž nejistoty se snižovaly. Mezi těmito body se teplota určovala pomocí doporučených teploměrných čidel, jímiž byly zpravidla platinový odporový teploměr nebo termočlánek Pt-Pt+Rh. Pro teplotní závislost těchto udržujících čidel volili uživatelé zpravidla mocninné rozvoje, kubické spliny nebo jiné aproximační funkce.

Zcela novým přístupem odstraňuje tuto libovůli poslední (v pořadí již pátá) přijatá mezinárodní teplotní stupnice ITS-90 [3]. Hlavní část stupnice ITS-90 v intervalu od 13,8033 K (trojný bod rovnovážného vodíku) do 961,78 °C (bod tuhnutí stříbra) je definovaná pomocí platinového odporového teploměru kalibrovaného v souboru pevných bodů vybraných podle zvoleného podintervalu teplot, přičemž je udána interpolační procedura. Pro realizaci stupnice je vhodný pouze teploměr vyrobený z velmi čisté platiny. V současné době takové teploměry poskytují jen dva světoví výrobci (Tinsley a Hart Scientific). Na obr. 2.1 je znázorněno rozdělení oblasti použití platinového odporového teploměru do pěti podintervalů s předepsanými pevnými body a korekční funkcí.

V oblasti vyšších teplot je stupnice ITS-90 definována pomocí dalších pevných bodů a Planckova vyzařovacího zákona. V intervalu teplot 3 K až 24,5561 K (trojný bod neonu) je stupnice definována pomocí plynového teploměru plněného <sup>3</sup>He nebo <sup>4</sup>He a tří pevných bodů. Místo stavové rovnice pro ideální plyn je předepsána rovnice s druhým viriálovým koeficientem, jehož teplotní závislost je udána mocninným rozvojem s předepsanými koeficienty. Pro oblast nejnižších teplot 0,65 - 5 K využívá stupnice teplotní závislosti tenze par <sup>3</sup>He a <sup>4</sup>He stanovené mnohaletým měřením v předních metrologických laboratořích [4].

V roce 1976 komise CIPM (akronym francouzského názvu *Comité Internationale des Poids et Mesures*) přijala Provizorní teplotní stupnici EPT-76 pro teploty od 0,5 K do 30 K, v níž je kromě termodynamických pevných bodů využito i přechodů do supravodivého stavu pěti čistých kovů [5]. Teploty supravodivých přechodů jsou udány pouze přibližně, k realizaci stupnice je třeba použít soubor SRM 767 vyrobený v americkém National Bureau of Standarts (NBS), nynějším National Institute of Science and Technology (NIST). Každý soubor je individuálně kalibrovaný a tak neumožňuje základní metrologickou praxi v navazování, tedy v přímém porovnávání standardů mezi národními metrologickými laboratořemi.

Úsilí řady evropských metrologických laboratoří a NIST o rozšíření teplotní stupnice pod 0,65 K vyústilo v přijetí Provizorní nízkoteplotní stupnice PLTS-2000 [8] (z angl. *Provisional Low Temperature Scale*). Stupnice využívá anomálního průběhu<sup>1</sup> křivky tání <sup>3</sup>He a pokrývá oblast velmi nízkých teplot od 0,9 mK do 1 K. Sdružení evropských metrologických laboratoří vyvinulo a testuje pro komerční rozšíření přípravek SRD1000, který obsahuje 10 materiálů se supravodivými přechody od 15 mK do 1,18 K [9]. Měl by nahradit přípravky SRM a především poskytnout soustavu spolehlivých pevných bodů v oblasti pod 1 K.

Při ověřování konzistence ITS-90 a provizorní stupnice PLTS-2000 byla zjištěna závažná systematická odchylka (1,5 mK) údajů ITS-90 od termodynamické teploty. Na základě podrobné analýzy byla navržena nová stupnice PTB-2006 [16] s novou kalibrací parního teploměru <sup>3</sup>He, která tuto diskrepanci odstraňuje.

#### 2.2 Plynový teploměr

Plynový teploměr, schématicky znázorněný na obr. 2.2, patří mezi nejstarší teploměry a je součástí aktuální stupnice ITS – 90. Řada nezbytných korekcí způsobuje, že jej nemůžeme zařadit mezi absolutní teploměry. Závislost tlaku plynu na teplotě nelze dostatečně přesně popsat stavovou rovnicí ideálního plynu. Zejména v oblasti nízkých teplot je třeba modifikovat stavovou rovnici pro N molů plynu pomocí rozvoje v mocninách hustoty N/V. Často se užívá rozvoje v mocninách tlaku p s odvozenými viriálovými koeficienty  $B_p(T)$  a  $C_p(T)$ :

 $<sup>^1 {\</sup>rm Jde}$ o Pomerančukův jev, o němž se podrobněji zmíníme v oddíle věnovaném absolutním teploměrům a dále v kapitole 4 o pevném heliu.

$$pV = NRT(1 + B(T)p + C(T)p^{2} + ...) , \qquad (2.3)$$

kde  $B_{\rm p}(T)$  a  $C_{\rm p}(T)$  jsou s viriálovými koeficienty B(T) a C(T) spojeny vztahy

$$B_{\rm p}(T) = \frac{B(T)}{RT}$$
;  $C_{\rm p}(T) = \frac{C(T) - B(T)^2}{(RT)^2}$ . (2.4)

Vystačíme zpravidla s druhým viriálových koeficientem B(T), který je možno odvodit z modelu srážek dvojic atomů plynu s využitím Lennardova - Jonesova potenciálu (viz kapitoly 3 a 4 o pevném He a normálním <sup>3</sup>He).

Při praktickém použití plynového teploměru je třeba uvážit i další korekce. Tlak v soustavě měřicí baňka - spojovací kapilára - manometr je ovlivněn i malým množstvím plynu, který se nachází v kapiláře a manometru s jinou teplotou, než je měřená teplota a musí být tedy korigován. Dále je třeba zavést korekci na rozdílnou hustotu plynu v systému v důsledku rozdílné výškové polohy teploměrné baňky a manometru. Při nízkých tlacích plynu se střední volná dráha atomů stane srovnatelnou s průměrem spojovací kapiláry a tlak v systému se vyrovnává molekulárním přenosem. Může tak vzniknout nezanedbatelný rozdíl tlaku mezi teploměrnou baňkou a manometrem. Dlouho byla zanedbávána významná korekce na množství plynu zachyceného na stěnách teploměrné baňky a částečně i na zbytku systému. Atomy nebo molekuly plynu mohou být na stěnách baňky zachyceny van der Waalsovými mezimolekulárními silami nebo i chemickou vazbou. Zachycené množství plynu závisí na povrchu stěny a mění se s teplotou. Započtení



Obr. 2.2: Schéma plynového teploměru.

této korekce vedlo k významnému rozdílu mezi stupnicí ITS-90 a předešlou stupnicí IPTS-68. obr. 2.3, který je součástí deklarace stupnice ITS-90.

Při revizi teplotní stupnice v roce 1968 bylo uzákoněna identita mezi termodynamickými a praktickými jednotkami teploty a jednotka teploty Kelvin byla definována jako 1/273,16 teploty trojného bodu vody (přesně). **Teplota varu vody za normálního tlaku je ve stupnici ITS-90 o 26 mK nižší než 100** °C, tedy 99,974 °C (373,134 K). Obdobné problémy provázejí i použití parních teploměrů s náplní <sup>3</sup>He nebo <sup>4</sup>He, které jsou rovněž součástí stupnice ITS-90.

# 2.3 Primární teploměry

Primární teploměry umožňují přímo určit termodynamickou teplotu bez použití korekcí závislých na použité pracovní látce, přístroji či metodice. Omezíme se těmi, které se v oblasti nízkých teplot běžně používaji nebo jejichž využití je perspektivní.

Některé primární teploměry jsou popsány v jiných kapitolách, protože princip jejich funkce úzce souvisí s diskutovanou fyzikální tématikou. V kapitole 19 o jaderném magnetizmu je uveden způsob měření teploty pomocí magnetické rezonance



Obr. 2.3: Teplotní rozdíly mezi stupnicemi IPT-90 a IPTS-68 [3].

jader <sup>195</sup>Pt, či <sup>63</sup>Cu a <sup>65</sup>Cu, kdy se využívá Curieova zákona pro teplotní závislost jaderné susceptibility a Korringova vztahu pro spin-mřížkovou relaxační dobu  $T_1$  a v kapitole 4 věnované pevnému heliu je podrobně popsán krystalizační teploměr <sup>3</sup>He.

#### 2.3.1 Šumový teploměr

Výraz pro střední hodnotu druhé mocniny šumového napětí  $\langle V^2\rangle$ vznikajícího při teplotěTna rezistoru s odporemR

$$\langle V^2 \rangle = 4kTR\delta\nu \tag{2.5}$$

odvodil již v roce 1928 Nyquist [10] na základě měření šumu (později nazvaného Johnsonův šum), který studoval v různých rezistorech v závislosti na jejich odporu a teplotě [11]. Šumové napětí je výsledkem Brownova proudu v rezistoru vyvolaného tepelným pohybem vodivostních elektronů. Šířka pásma detekce šumu je označena  $\delta \nu$ . Tento principiálně jednoduchý vztah by měl umožnit stanovit libovolnou termodynamickou teplotu při znalosti odporu R rezistoru a šířky pásma  $\delta \nu$  detekce šumového napětí.

Realizace šumového teploměru přímým měřením šumového napětí však naráží na řadu problémů. Je obtížné přesně vymezit a reprodukovat šířku pásma detekce  $\delta\nu$ . Odlišit Johnsonův šum od dalších zdrojů šumu zesilovacího traktu lze pouze s omezenou přesností. Šumové napětí je vždy velmi slabé a je třeba jej zesilovat. Pro rezistor s odporem  $R = 1 \ k\Omega$  a šířku pásma  $\delta\nu = 1 \ kHz$  je při teplotě 1 K

41

د.2

rovno  $\sqrt{\langle V^2 \rangle} = 10^{-8}$  V, při teplotě 10 mK ještě o dva řády menší. Johnsonův šum vzniká v důsledku neuspořádaného Brownova pohybu elektrických nábojů v rezistorech a má tedy statistický charakter. Je-li doba t střádání čtverce šumového napětí dostatečně dlouhá, aby  $t\delta\nu \gg 1$ , pak je standardní odchylka  $\Delta T$  měření šumovým teploměrem dána vztahem

$$\frac{\Delta T}{T} = (2t\delta\nu)^{-1/2} . \qquad (2.6)$$

Při šířce pásma detekce  $\delta \nu = 1$  kHz by mělo k dosažení relativní přesnosti měření teploty 0,1 % stačit střádání čtverce šumového napětí po dobu delší než 500 s nezávisle na měřené teplotě. V praxi se obvykle akumulace šumového napětí provádí po několik hodin.

K zesílení šumového napětí řádu pikovoltů již nestačí ani speciální nízkošumové polovodičové zesilovače. Využívá se vysoce citlivých kvantových detektorů - skvidů (viz kapitola 16 o Josephsonových jevech). Vlastní šum skvidu se podařilo snížit až na úroveň šumové teploty  $T_{\text{noise}} = 0.05 \text{ mK}.$ Rezistor s odporem typicky  $R \sim$  $0,1 \text{ m}\Omega$  může být součástí supravodivého prstence skvidu, který pak slouží jako teplotní čidlo. Supravodivý proud skvidu modulovaný šumovým proudem je snímán induktivně navázaným rezonančním obvodem a po fázové detekci a zesílení akumulován k vyhodnocení. Standardně se používá zapo-



Obr. 2.4: Spektrální hustota šumu tunelového přechodu v závislosti na přiloženém stejnosměrném napětí.

jení, v němž šumový rezistor použitý jako teplotní čidlo napájí primární cívku supravodivého transformátoru skvidu. Kvůli impedančnímu přizpůsobení je odpor rezistoru volen opět menší než 1 m $\Omega$  [25, 13].

Nový přístup k měření Johnsonova šumu představuje metoda MFFT přímé detekce fluktuace magnetického pole skvidem (z angl. Magnetic Field Fluctuation Thermometer) [14] ,vyvinutá v berlínském ústavu PTB. Plochá supravodivá cívka o průměru několika milimetrů, vytvořená technologií mikroskopických tištěných spojů na společném čipu spolu se skvidem na nějž je navázána, snímá ze vzdálenosti desítek mikrometrů fluktuující magnetické pole vyvolané Johnsonovými proudy v měděném bloku, jehož teplota je určována. Výpočet šumového indukčního toku je obtížný i za předpokladu nekonečných rozměrů měděné desky, proto je třeba teploměr kalibrovat a patří tedy spíše mezi sekundární teploměry. Šumová teplota čidla je menší než 10  $\mu$ K, teploměr je použitelný až do 7 mK.

Pokrok v nanotechnologii vytváření tunelových struktur umožnil konstrukci nového typu šumového teploměru [31]. V tunelových přechodech vzniká tzv. výstřelový šum (angl. *shot noise*) spojený s průletem jednotlivých elektronů, který se vyskytuje např. i ve vakuových diodách. Tunelový přechod se zároveň chová jako rezistor a vzniká na něm Johnsonův šum, jehož spektrální hustota je dána výrazem

$$S_{\rm n} = 2eI \coth(eV/2k_{\rm B}T) , \qquad (2.7)$$

který v limitě  $V \to 0$  vede k Johnsonovu šumu a pro vyšší napětí  $eV \gg k_{\rm B}T$  k výrazu pro výstřelový šum  $S_{\rm sh} = 2eI$ , kde I je proud tekoucí strukturou. V minimu spektrální hustoty šumu lze odečíst (viz obr. 2.4) napěťový interval

$$\Delta V = 4k_{\rm B}T/e \ . \tag{2.8}$$

Realizace tohoto absolutního teploměru však vyžaduje kvalitní nízkošumové zesilovače chlazené na nízké teploty (nejlépe s využitím širokopásmových skvidů). Chlazení samotné tunelové struktury z hliníku s bariérou z  $Al_2O_3$  je možné pouze prostřednictvím podložky a při nízkých teplotách je proto velmi obtížné.

#### 2.3.2 Jaderný orientační teploměr

Měření četnosti částic jaderného záření  $\gamma$ vhodných radionuklidů může být použito k absolutnímu měření teploty v oboru jednotek a desítek milikelvinů. Anizotropie prostorového rozdělení záření  $\gamma$ radioaktivních jader, na něž při teplotě T působí efektivní magnetické pole $B_{\rm ef}$ , je popsána vztahem

$$W(\theta, T) = \sum_{k=0}^{k_{\text{max}}} B_k(I, B_{\text{ef}}, T) U_k A_k Q_k P_k(\cos \theta) , \qquad (2.9)$$

jehož členy je možné dovodit ze známých charakteristik jaderných mezistavů nebo je lze získat výpočtem. Při použití radionuklidů, jejichž parametry jsou dobře známé, může nízkoteplotní jaderná orientace (LTNO, z angl. Low Temperature Nuclear Orientation) sloužit jako metoda absolutní termometrie. Základy LTNO jsou zevrubně popsány v [1]. Výraz (2.9) určuje relativní pravděpodobnost detekce kvanta  $\gamma$  ve směru, který svírá úhel  $\theta$  se směrem efektivního magnetického pole  $B_{\rm ef}$  působícího na jádro. Koeficienty  $U_k$  a faktory úhlového rozdělení záření  $A_k$  jsou určeny rozpadovým schématem radionuklidu,  $Q_k$  představují korekce na prostorový úhel detektoru,  $P_k$  jsou Legendrovy polynomy příslušné úhlu  $\theta$ . Parametry orientace  $B_k$ lze spočítat ze znalosti magnetického momentu jaderného stavu, pole  $B_{\rm ef}$  působícího na jádro a teploty T jader v rovnováze s mřížkou. K dosažení měřitelné anizotropie záření je třeba, aby magnetická energie jaderného momentu byla srovnatelná nebo vyšší než tepelná energie jader. Metoda LTNO může tedy sloužit k měření teploty jen v dostatečně nízkých teplotách a při využití velkého hyperjemného pole, které na jádra působí ve feromagnetických matricích. Možnosti jaderné orientační teploměrie ilustruje závislost anizotropie záření  $\gamma$  izotopu <sup>54</sup>Mn v niklové matrici, viz obr. 2.5. Kvůli možnosti zanedbání tvarové anizotropie se orientační teploměry zhotovují ve tvaru tenkých fólií tloušťky několika mikrometrů a magnetické pole k nasycení elektronové magnetizace působí v rovině vzorku. Používají se relativně



Obr. 2.5: Anizotropie záření  $\gamma$ ,  $W(\theta = 0)$ , jaderného orientačního teploměru s využitím izotopu <sup>54</sup>Mn v niklové matrici.

malé aktivity radionuklidů řádově 50 kBq, což odpovídá koncentraci radionuklidu řádu jednotek ppm, aby vlastní ohřev teploměru působený radioaktivním rozpadem ( $\dot{Q} = 3 \times 10^{-11}$  W pro <sup>54</sup>Mn,  $\dot{Q} = 7 \times 10^{-10}$  W pro <sup>60</sup>Co) bylo možné zanedbat.

Nejčastěji se užívá orientační teploměr <sup>60</sup>CoCo ve tvaru hranolu cca r(10 × 1 × 1) mm<sup>3</sup>, vyříznutý z hexagonálního monokrystalu Co podél osy c, která je osou snadné magnetizace. Tento teploměr nepotřebuje žádné vnější polarizační pole, hyperjemné pole působí (téměř) na všechna jádra ve směru osy c. Teploměr <sup>60</sup>CoCo je nejpřesnější kolem 7 mK a může sloužit v intervalu (1,5 - 50) mK.

Jako jaderného orientačního teploměru lze v praxi též využít izotopu  ${}^{54}$ Mn v niklové matrici. Jak je zřejmé z obr. 2.5, nejcitlivější je teploměr  ${}^{54}$ MnNi v okolí 10 mK a s citlivostí lepší než 5 % je možno měřit teplotu v intervalu (2,5 - 75) mK.

Pro použití jaderných orientačních teploměrů je třeba mít k dispozici detektor záření  $\gamma$ , nejlépe z čistého germania chlazený kapalným dusíkem (pro některá jádra postačí scintilační detektor) a příslušnou spektroskopickou elektroniku pro vyhodnocení a záznam vybraných přechodů ve spektrech  $\gamma$ .

#### 2.3.3 Teploměry s coulombickou blokací

Rozvoj technologie přípravy nanostruktur spolu s výzkumem tunelových jevů při přenosu náboje vedl ke vzniku nové kategorie teploměrů [36]. Teploměry s coulombiokou blokací (CBT, z angl. *Coulomb Blocade Thermometer*) využívají vlastností tunelových jevů provázejících přenos jednotlivých elektronů mezi ostrůvky kovů na nevodivém substrátu. Bariéru charakterizuje energie nabití ostrůvku jako izolovaného vodiče s kapacitou C jedním elektronem s nábojem e podle klasického výrazu  $E_C = e^2/2C$ . V oboru slabé blokace, při teplotě T, pro kterou platí  $k_{\rm B}T \gg E_{\rm C}$ , má diferenciální vodivost přechodu G symetrický zvonovitý tvar odpovídající vztahu

$$G/G_{\rm T} = 1 - (E_{\rm C}/k_{\rm B}T)g(eV/Nk_{\rm B}T)$$
, (2.10)

kde $G_{\rm T}$ je asymptotická vodivost série přechodů při vyšších napětích V, charakteristická Coulombova energie nabíjení N přechodů v sérii je $E_{\rm C} = [(N-1)/N](e^2/2C)$ a funkce  $g(x) = [x\sinh(x) - 4\sinh^2(x/2)]/[8\sinh^4(x/2)]$ , viz graf na obr. 2.6.

Z grafu lze odečíst relativní hloubku <br/>  $\Delta G$ minima křivky

$$\Delta G/G_{\rm T} = E_C/6k_{\rm B}T , \qquad (2.11)$$

což představuje údaj sekundárního teploměru, poněvadž vyžaduje znalost energie  $E_{\rm C}$ a tedy kapacity série ostrůvků, která je dána geometrií jejich struktury. Šířka křivky vodivosti v poloviční výšce  $V_{1/2}$  je z teorie tunelových přechodů

1,00

$$V_{1/2} = 5,439Nk_{\rm B}T\tag{2.12}$$

a představuje tedy údaj primárního teploměru. Tento teploměr nejeví závislost na magnetickém poli. Horní mez použití těchto teploměrů je asi 30 K, což odpovídá současným možnostem technologie nejhustších nanostruktur. Snadněji lze připravit struktury s většími vzdálenostmi, které v principu mohou sloužit až k 20 mK. Teploměrná čidla vytvořená z hliníkových struktur elektronovou litografií na podložce z oxidovaného nebo nitridovaného křemíku mají rozměry 1  $\times$  1  $\,$  mm² včetně kontaktů. Vlastní tunelové přechody se nacházejí na ploše od 0,1 do 1,5  $(\mu m)^2$ . Termalizace těchto čipů je v teplotách pod 100 mK opět velmi obtížná.

#### 2.4 Sekundární teploměry

Jako sekundární teploměr může být použito jakékoli čidlo, jehož dobře měřitelná fyzikální vlastnost jednoznačně a výrazně závisí na teplotě, pokud možno podle jednoduchého vztahu. Čidlo by mělo mít malý rozměr, malou tepelnou kapacitu, teploměrná vlastnost by měla být dobře reprodukovatelná a časově stálá. Měl by být



Obr. 2.6: Závislost relativní diferen-

ciální vodivosti série dvaceti tunelových

přechodů při teplotě 4,2 K [36].

45

zajištěn dokonalý tepelný kontakt čidla s měřeným objektem a sám proces měření by neměl zvyšovat teplotu čidla. Pro experimenty prováděné v magnetickém poli je vhodné, aby údaj čidla byl na poli co nejméně závislý. Všem těmto požadavkům je těžké vyhovět a proto je volba sekundárního teploměru vždy jistým kompromisem. Nejběžnější čidla jsou elektrická, především odporová (kovová či polovodičová), diodová polovodičová, termoelektrická a kapacitní.

## 2.4.1 Kovové rezistivní teploměry

Odpor kovových materiálů je určen interakcí vodivostních elektronů s mřížkou reprezentovanou fonony, interakcemi elektronů mezi sebou a dále s nepravidelnostmi mřížky (příměsovými atomy, bodovými či čarovými poruchami, hranicemi zrn a podobně). V kapitole 18 o nízkoteplotních vlastnostech pevných látek uvidíme, že ve shodě s Matthiessenovým pravidlem lze výsledný měrný odpor  $\rho$  kovu vyjádřit jako součet měrného odporu  $\rho_i(T)$  vyvolaného teplotně závislým rozptylem elektronů na fononech a na ostatních elektronech a ze zbytkového měrného odporu  $\rho_0$ , který je v principu teplotně nezávislý  $\rho = \rho_i(T) + \rho_0$ . Pro účely měření nízkých teplot je třeba, aby použitý kovový materiál dosahoval co nejvyšší hodnoty faktoru RRR  $=\rho_{(300K)}/\rho_{(4,2K)}$  (z angl. *Residual Resistivity Ratio*), aby zbytkový odpor omezoval teplotní závislost odporu až při co nejnižší teplotě.

Nejužívanějším materiálem je platina. Se špičkovým provedením platinového teploměru jsme se seznámili již v sekci o Mezinárodní teplotní stupnici ITS-90. Předepsaný velký poměr odporů se dosahuje vysokou čistotou materiálu a konstrukcí, která vylučuje vznik mechanických pnutí v tenkém drátku stočeném do spirály. I v tomto provedení teplotní závislost odporu platiny (viz. obr. 2.7) vymizí pod asi 13 K. Teplotní závislot praktických platinových teploměrů příliš neodpovídá formulím stupnice ITS-90, a proto se používají různé mocninné rozvoje v omezené oblasti teplot.

U nás běžně dostupné teploměry PT-100 nejsou určeny pro



Obr. 2.7: Teplotní závislost odporu praktického platinového odporového teploměru [26].

oblast nízkých teplot. Ačkoli je v nich použit kvalitní platinový drát ve formě tenké spirály, uložení v kanálcích keramického tělíska znemožňuje dostatečný tepelný kontakt při teplotách pod 100 K. Lepších zkušeností se dosahuje s miniaturními tenkovrstvými platinovými teploměry Hayashi Denko, pokud je zajištěn dobrý tepelný

kontakt měřeného objektu s kovovou vrstvou teploměru překrytou izolačním lakem. Při použití nízkoúrovňového střídavého můstku poskytují věrohodné údaje až ke 20 K. Pro přesná měření je však nutné je kalibrovat.

V literatuře uváděné použití mědi nebo niklu pro měření nízkých teplot [25] je omezeno malou časovou stálostí hodnot odporu tenkých drátků z těchto kovů.



Obr. 2.8: Teplotní závislost odporu teploměru ze slitiny Rh+ 0,5 % Fe [26].

Využívá se dále i komerčně dostupný odporový teploměr ze slitiny Rh s malou příměsí Fe, zpravidla 0,5 %, viz obr. 2.8. Na teplotní závislosti tohoto odporu se však projevuje Kondův jev<sup>2</sup>.

# 2.4.2 Polovodičové teploměry

Elektrický odpor polovodičů je určen zejména koncentrací nositelů náboje, která je teplotně závislá. Teplotně aktivační odpor čistého polovodiče lze popsat vztahem  $\rho \sim e^{\Delta/k_{\rm B}T}$ . Místo šířky energetické mezery  $\Delta$  homogenního polovodiče se v běžně užívaných příměsových polovodičích uplatní energetická vzdálenost lokalizovaných hladin příměsi od vrcholu valenčního nebo ode dna vodi-

vostního pásu. Volbou příměsi akceptorů nebo donorů a jejich koncentrace lze zvolit závislost odporu na teplotě, která nejlépe odpovídá požadované oblasti měření teplot.

Nejčastěji se užívají monokrystaly germania umístěné v kovovém hermeticky uzavřeném pouzdře, do něhož je pro lepší termalizaci jako výměnný plyn napuštěno plynné <sup>4</sup>He nebo <sup>3</sup>He. Za podmínky dokonalého tepelného kontaktu pouzdra teploměru a přívodů lze připravit germaniové teploměry použítelné až do 50 mK, viz obr. 2.9. Teplotní závislost odporu germaniových teploměrů se zpravidla vyjadřuje pomocí rozvoje v Čebyševových polynomech v porovnání s etalonovým teploměrem nebo přímo v pevných bodech v souladu s Mezinárodní stupnicí ITS-90. Nevýhodou Ge odporových teploměrů je značná závislost jejich odporu na magnetickém poli.

V minulých desetiletích se jako nízkoteplotní teploměry hojně užívaly hmotové uhlíkové radiotechnické rezistory. Teplotní závislost rezistorů Allen - Bradley vyhovuje dobře pro měření nad 1 K, pro nižší teploty se lépe hodí rezistory Speer

 $<sup>^2 \</sup>rm Kondův jev způsobí, že odpor vzrůstá s klesající teplotou v teplotní oblasti, kde by již převládal teplotně nezávislý zbytkový odpor, viz kapitola 18 o nízkoteplotních vlastnostech pevných látek.$ 

Carbon nebo Matsushita. Jejich odpor roste s klesající teplotou podobně jako u dalších polovodičů. Dnes se již tento typ rezistorů nevyrábí, v malém množství a za příslušně zvýšenou cenu je nabízejí některé firmy dodávající kryogenní materiál. Pro dobrý tepelný kontakt je třeba odstranit epoxidovou ochrannou vrstvu rezistoru, zbrousit uhlíkovou tyčinku a vzniklou plošku přes co nejtenčí elektrickou izolaci (mylar, cigaretový papírek nebo pouze přes velmi tenkou vrstvu téhož lepidla) přilepit<sup>3</sup> k povrchu měřeného objektu. Optimální je umístění do měděného pouzdra, které pomůže odstínit parazitní ohřev radiovlnami i infračerveným zářením.

Tyto hmotové uhlíkové teploměry je po popsané přípravě nejprve třeba tepelně cyklovat. Jejich odpor se totiž následkem tepelného šoku (např. po vnoření do kapalného dusíku i následovném vyjmutí) mění. Opakováním takového tepelného cyklu (cca  $100\times$ ) se však hodnota odporu stabilizuje.

Uhlíkové odpory projevují dlouhodobou hysterezi logaritmického charakteru [15]. Pro velmi přesná měření je třeba opakovat kalibraci po každém ochlazení z pokojové teploty. Komerčně jsou nabízeny tzv. sklouhlíkové odporové teploměry, které se připravují difúzí uhlíkových mikročástic do meziatomových prostor vzniklých



Obr. 2.9: Teplotní závislost odporu germaniových teploměrů přizpůsobených pro různé obory teplot [26].

v odleptaném borosilikátovém skle. Nařezané trámečky jsou opatřeny proudovými a napěťovými kontakty podobně jako monokrystaly germaniových teploměrů a jsou stejným způsobem zapouzdřeny.

Výrazně menší závislosti odporu na magnetickém poli se dosahuje v rezistorech ve tvaru tenkých vrstev oxinitridů prvků vzácných zemin, např. ceru, nanesených na safírové podložce. Volbou složení rezistivní vrstvy lze nastavit charakteristiku teploměrů označovaných jako Cernox pro příslušnou oblast teplot od 300 K až k 300 mK, viz obr. 2.10.

Termistory připravené ze směsi oxidů niklu a manganu, které projevují velkou teplotní závislost polovodičového charakteru, jsou nabízeny rovněž v zapouzdření

 $<sup>^{3}</sup>$ Vhodná jsou lepidla označovaná GE 7031 (ředí se acetonem nebo směsí lihu a toluenu), obyčejná obuvnická rezinoxová lepidla používaná v Rusku a na Ukrajině označovaná jako BF (ředí se lihem) nebo Stycast 1266 či epoxy, ale zde je obtížné v případě potřeby lepený spoj odstranit.

jako jiné polovodičové teploměry. Nedosahují však zpravidla dobré reprodukovatelnosti a tak se využívají jen k regulaci teploty nebo jako indikátory hladiny kryogenních kapalin.

S ohledem na obdobnou geometrii všech polovodivých rezistivních teploměrů platí obecná doporučení k maximální disipaci příkonu provázejícího měření odporu čidel. Nutností je přinejmenším tříbodová<sup>4</sup>, pravidlem je však čtyřbodová metoda měření elektrického odporu. Pro oblast 4,2 K se doporučuje nepřekračovat příkon  $10^{-7}$  W a pod 100 mK úroveň  $(10^{-12} - 10^{-13})$  W, aby nedocházelo k přehřívání čidla a chybě měření teploty vyšší než 1 %. Pro dodržení těchto podmínek je třeba používat speciálních nízkofrekvenčních můstků s velmi nízkou úrovní excitace. Střídavá měřící metoda eliminuje vliv termosíly na přívodech, kterou automaticky vystředuje. Při stejmosměrném měření je třeba komutovat směr měřícího proudu a termosílu eliminovat výpočtem. Důsledně je též třeba dbát na elektrické stínění čidel a přívodních drátků. Základní podmínkou jsou kroucené dvojice přívodů, neboť se automaticky eliminuje vliv vzdálenějších rušivých zdrojů.

Napětí na p-n přechodu polovodičových diod, prochází-li jimi malý proud (zpravidla  $I_{\rm p} = 10 \mu {\rm A}$ ) v propustném směru, roste s klesající teplotou téměř lineárně od 450 K až ke40 K. Jako teploměry se dají použít standardní křemíkové diody zapouzdřené ve skle. Komerčně jsou k dispozici upravené křemíkové diody v kovových pouzdrech pro různé typy montáží, jsou nabízeny i speciální diody z GaAs dopované hliníkem s možností kalibrace až k 1,4 K. Vliv magnetického pole se obtížně koriguje pod 60 K. V teplotách vyšších než 50 K představují polovodičové diody jednoduché, rychlé a levné teploměrné



Obr. 2.10: Teplotní závislost odporu polovodičových teploměrů typu CERNOX [26].

čidlo s dobrou reprodukovatelností. Teplotní závislost napětí by bylo možno využít i v teplotách pod 1 K, nezbytný příkon vyšší než 10  $\mu$ W je však obtížné odvést tak, aby teplota čidla nebyla systematicky vyšší než teplota měřeného objektu.

 $<sup>^4</sup>$ Tříbodová metoda vyhoví tam, kde odpor čidla výrazně převyšuje odpor přívodů, který se navíc v průběhu experimentu příliš nemění, neboť její přesnost je dána rozdílem odporu jednotlivých přívodů.

V oboru teplot pod 100 mK se výborně osvědčily miniaturní rezistory s odporovými vrstvami vyráběné pro povrchovou montáž plošných spojů (SMD) elektronických zařízení. Rezistivní pasty z nanoskopických zrn RuO<sub>2</sub> s pojidly se nanášejí v silné vrstvě na podložku ze sintrovaného korundu tloušťky 0,5 mm (typické rozměry jsou od 1,5 × 0,8 do 3,2 × 1,6 mm<sup>2</sup>), vypékají se a opatří ochranným lakem a kontakty z SnPb s niklovou mezivrstvou. Při optimálním tepelném kontaktu rezistivní vrstvy s měděným držákem lze tyto rezistory použít jako teploměry až do 10 mK [17]. S ohledem na granulární charakter těchto rezistorů lze na mechanismus jejich elektrické vodivosti uplatnit Mottův - Andersonův model náhodných přeskoků elektronů s proměnnou délkou VRH (z angl. *Variable Range Hoping*), který platí zejména v neuspořádaných amorfních systémech. Pro teplotní závislost odporu se užívá vztah

$$\lg R = AT^{-\alpha} , \qquad (2.13)$$

v němž teorie předpokládá  $\alpha = 1/4$  pro 3D systém a  $\alpha = 1/3$  pro 2D rozdělení elektronové hustoty. Výraz (2.13) je dobrou aproximací pro experimentální data v oboru teplot 10 - 50 mK, s přesností několika procent. Koeficient  $\alpha$  se nachází v intervalu (0,2 - 0,35). Pro vyšší teploty je zpravidla potřeba volit jinou aproximaci. Odpor rezistorů RuO<sub>2</sub> slabě závisí na magnetickém poli. Tato závislost může být kladná i záporná podle koncentrace výchozí pasty, případně technologie přípravy.

#### 2.4.3 Kapacitní teploměry



Obr. 2.11: Typická teplotní závislost kapacity dielektrického teploměru [26].

50

Význam kapacitních teploměrů tvořených keramickými kondenzátory tkví v tom, že jsou prakticky nezávislé na magnetickém poli až do nejvyšších dosahovaných hodnot řádu desítek tesla. Využívá se v nich teplotní závislosti reálné složky permitivity feroelektrik. Zanedbatelné dielektrické ztráty umožňují měření střídavými můstky prakticky bez parazitního ohřevu. Teplotní průběh kapacity neodpovídá žádnému jednoduchém fyzikálnímu mechanismu polarizace a je proto možné jej matematicky popsat jen po částech, viz obr. 2.11. Kapacitní teploměry projevují značnou hysterezi a je třeba je často kalibrovat. Tato nepříjemná vlastnost je však bohatě vyvážena jejich imunitou k magnetickému poli.

#### 2.4.4 Termočlánky

Termočlánky využívají Seebekova jevu, kdy na spojení dvou různých kovů vzniká termoelektrické napětí. Běžně se používají k měření pokojových a vyšších teplot, ale lze je dobře použít i pro měření nízkých teplot, ačkoli obecně se jejich citlivost s klesající teplotou velmi silně zmenšuje. Pro oblast nízkých teplot byly připraveny speciální termočlánky v kombinaci slitin chromel - AuFe (0,07 %), jejichž citlivost se s teplotou mění jen relativně málo a klesá až v teplotách pod 4 K, viz obr. 2.12.

Je obtížné připravit dostatečně homogenní slitinové dráty tak, aby na nich nevznikala parazitní termoelektrická napětí při průchodu částmi kryogenního zařízení na různých teplotách. Vysoká tepelná vodivost drátů termočlánků dále vyžaduje jejich důslednou termalizaci tak, aby nezpůsobovaly výrazný parazitní přítok tepla k měřenému objektu.

#### 2.5 Z historie dosahování kryogenních teplot

Do této chvíle jsme popisovali, jak nízké teploty na různých úrovních a v různých systémech měřit, ale dosud jsme se nezabývali způsoby, jakými lze v praxi těchto teplot dosáhnout. Začneme krátkým historickým přehledem o tom, jak se fyzikům postupně dařilo zkapalnit téměř všechny tehdy známé plyny.



Obr. 2.12: Teplotní závislost termoelektrického napětí termočlánků (typ E = chromel - konstantan, K = chromel - alumel, T = měď - konstantan, chromel - AuFe(0,07%)) [26].

potřeba účinnějších způsobů chlazení, nezávislých na rozmarech počasí. V druhé po-

51

Potřeba chladit potraviny nebo obytné prostory

v období vysokých letních

teplot se projevovala po sta-

letí. Od počátku 19. století

se s rozvojem průmyslové výroby a s rostoucími ná-

roky na kvalitu života požadavky na chlazení zvyšo-

valy. Jediným zdrojem chladu byl tehdy bez výjimky

přírodní led, který se v zimním období těžil ze zamrzlých rybníků a řek a skla-

doval se v podzemních prostorách s jednouchou tepel-

nou izolací (sláma, dřevěné

hobliny). U nás byly nej-

většími spotřebiteli ledu pivovary. Chladit bylo třeba

také maso, mléko a mléčné

výrobky. Chlazení ledem tak

již nemohlo vyhovět rostou-

címu zámořskému importu masa a ryb, a proto vznikala lovině 19. století vznikaly postupně termomechanické systémy, v nichž se využívalo chladicího efektu obrácených cyklů tepelných strojů nebo Jouleova-Thomsonova jevu. Řada fyziků a chemiků se částečně pod vlivem těchto průmyslových potřeb zabývala studiem fázových přechodů mezi plynným a kapalným stavem látek. Získávali tak kapaliny vroucí za normálního tlaku při teplotě nižší než O° C.

O výrazný pokrok ve zkapalňování plynů se zasloužil geniální anglický fyzik a chemik Faraday. Zkapalnil většinu známých plynů způsobem prosté destilace, kdy plyn uzavřený pod tlakem v zahnuté skleněné trubici se na jednom konci zahříval a na druhé konci chladil v lázni ledu a vody. Plyny, které nebylo možné tímto způsobem ochladit, označil prostě za *permanentní plyny*. Byly to dusík, kyslík a vodík. Inertní plyny nebyly v té době ještě známy.



Obr. 2.13: Aparatura, kterou Cailletet zkonstruoval pro zkapalnění kyslíku [27].

Na závěr zasedání pařížské Akademie přírodních věd 24. prosince 1877 otevřel stálý sekretář zapečetěný dopis, ve kterém soukromý badatel Cailletet oznamoval, že se mu podařilo zkapalnit kyslík. Do trubice uzavřel směs kyslíku a oxidu uhelnatého, směs ochladil na -29 °C pomocí kapalného oxidu siřičitého a stlačil ji na 300 atm. Po otevření ventilu plyn expandoval a ochladil se tak, že vytvořil oblak kapaliny, viz obr. 2.13. Cailletet tak využil Jouleova-Thomsonova jevu, objeveného v roce 1852, který provází izoental-

pickou expanzi reálného plynu. Plyn z výchozí teploty nižší, než je tzv. inverzní teplota, se při expanzi ochladí v důsledku konání práce proti vnitřním silám mezi molekulami reálného plynu. Někteří členové Akademie dosvědčili, že byli opakovaným úspěšným pokusům Cailleteta v laboratořích Ecole Normale Supérière v Paříži přítomni. Ještě větší vzrušení vyvolal telegram, v němž průmyslník z Ženevy Pictet sděloval, že zkapalnil kyslík po stlačení na 500 atm a ochlazení čerpaným kapalným oxidem siřičitým o teplotě -65 °C a pevným oxidem uhličitým, který byl rovněž čerpáním par ochlazen na -130 °C. To mělo podle autora stačit k přeměně plynného kyslíku na kapalný. Po otevření ventilu vytryskly z trubice kapky kapalného kyslíku. Poněvadž popsané procedury byly seznány rozdílnými, bylo pr

venství přiznáno oběma autorům. Z pozdějšího rozboru Pictetova procesu je však zřejmé, že ke zkapalnění došlo rovněž díky Jouleovu-Thomsonovu jevu. Vzhledem k malé tepelné vodivosti pevného oxidu uhličitého totiž nemohl být kyslík v trubici dostatečně ochlazen.

K dalšímu pokroku v získávání nízkých teplot došlo v roce 1883 na Jagellonské univerzitě v polském Krakově. Zasloužil se o to mladý fyzik Wróblewski, který se na své studijní cestě po evropských laboratořích seznámil s prací Cailleteta, zakoupil zařízení ke zkapalňování kyslíku a přivezl jej do Krakova. Na univerzitě se spojil s mladým chemikem Olszewskim, který měl zkušenosti s vysokotlakými zařízeními. Zařízení zprovoznili a zdokonalili tak, že se jim podařilo zkapalnit kyslík v použitelném množství a posléze i dusík, dodnes nejužívanější zkapalněný plyn. Spolupráce obou mladých vědců však kvůli jejich rozdílným charakterům trvala jen šest měsíců a poté pokračovali ve výzkumu každý zvlášť. Wróblewski tragicky zemřel při práci v laboratoři v roce 1888. Olszewski pokračoval ve zdokonalování své aparatury a podařilo se mu zkapalnit argon, který mu v roce 1895 zaslal Ramsay. Jeho pokusy o zkapalnění vodíku a helia však byly neúspěšné.

Další etapa cesty k nízkým teplotám se odehrála v Londýně, kde Dewar v roce 1895 při svých slavných Pátečních večerních rozpravách na Royal Institution předvedl publiku zkapalnění vodíku na zdokanalené Cailletetově aparatuře. Tohoto úspěchu dosáhl zejména využítím vakua jako tepelné izolace. Již v roce 1893 předvedl vlastnosti dvouplášťové skleněné nádoby, z jejíhož prostoru mezi plášti byl vyčerpán vzduch. K omezení přítoku tepla zářením byly stěny nádoby postříbřeny. Tento způsob tepelné izolace se používá dodnes: jako *termosky* dosáhly tyto nádoby praktického využití v denním životě.

Nejvýznamnější mezníkem na cestě k nízkým teplotám bylo bezesporu zkapalnění helia, které uskutečnil v roce 1908 Kamerlingh Onnes (obr. 2.14) v holandském Leidenu. Vyvrcholilo jím jeho pětadvacetileté úsilí o vybudování moderní fyzikální laboratoře vybavené nejlepší dostupnou technikou a otevřenou všem, kteří se chtěli podílet na společné práci. Založil časopis, v němž bezprostředně publikoval všechny výsledky dosažené v laboratoři i použité postupy. V prostorách univerzity založil sklářskou školu a školu jemných mechaniků, aby získal co nejkvalitnější technické spolupracovníky. Motivací pro jeho úsilí o zkapalňování plynu byla snaha ověřit obecnou platnost zákona korespondenčních stavů v oblasti fázových přechodů mezi plynným a kapalným skupenstvím, jak jej formuloval jeho učitel van der Waals. Při práci s kapalným heliem získal Kamerlingh Onnes teploty až pod 1 K ve snaze (dnes víme, že marné, viz kapitola 5 o supratekutosti <sup>4</sup>He) dosáhnout trojného bodu helia.



Obr. 2.14: Heike Kamerlingh Onnes, (1853-1926).

53

# 2.6 Dosahování dusíkových a heliových teplot

Nejrozšířenější kryogenní kapalinou je i dnes kapalný dusík. Protože je podstatnou součástí vzduchu, vyrábí se ve velkém jeho zkapalňováním, rozváží se ve speciálních autocisternách a přečerpává se do stacionárních zásobníků obvykle o objemu jednotek až desítek kubických metrů kapaliny. Odtud se stáčí do přenosných dusíkových nádob o objemu typicky 30 litrů, ve kterých jej většina fyzikálních či dnes chemických, biologických a dalších vědeckých pracovišť ve velkém používá.



Obr. 2.15: Skleněný dusíkový kryostat.

Teplotu kapalného dusíku (kolem 78 - 80 K) bez nezávislého měření neznáme nikdy příliš přesně, protože téměř vždy obsahuje příměs kapalného kyslíku. Ten má při normálním tlaku vyšší teplotu varu, cca 90 K, do kapalného dusíku proto ze vzduchu kondenzuje a jeho podíl v kapalině se zvyšuje. Při vyšší koncenraci kapalného kyslíku začne mít kapalina charakteristickou namodralou barvu (kapalný dusík je bezbarvý) a práce s ní je nebezpečná, protože kapalný kyslík je samozřejmě velmi efektivní okysličovadlo. Proto je potřebné dbát na to, aby v zařízeních, která jsou trvale na dusíkové teplotě a do nichž se kapalný dusík pravidelně dolévá (jako germaniové detektory  $\gamma$ -záření či dusíkové vymrazovačky), byla čas od času vyměněna kompletně celá dusíková náplň.

Pro mnoho fyzikálních aplikací postačí ponořit experiment přímo do lázně kapalného dusíku. Jed-

noduché experimenty např. s vysokoteplotními supravodiči je možné provádět i v nádobách z pěnového polystyrenu. Lepší je použít jednoduché skleněné nebo kovové termosky s dvojitými stěnami, z prostoru mezi nimiž je podle sto let starého Dewarova receptu vyčerpán vzduch (viz obr. 2.15). Tímto jednoduchým způsobem snadno získáme teplotu varu kapalného dusíku, avšak nemůžeme ji dále snižovat či regulovat. K tomu je zapotřebí mít takový jednoduchý skleněný kryostat hermeticky uzavřený, s možností odčerpávat dusíkové páry, čímž se teplota dusíkové lázně bude v souladu s rovnovážným fázovým diagramem dusíku se snižujícím se tlakem par snižovat. Odčerpávaním par se můžeme snadno dostat až na teplotu trojného bodu dusíku kolem 63 K, kdy dusíková lázeň zamrzne. V principu lze teplotu snižovat dál, odčerpáváním par nad pevným dusíkem, ale tento způsob není vzhledem ke špatné tepelné vodivosti pevného dusíku efektivní.

I přes rychlý rozvoj alternativních "suchých" metod chlazení bez použití kryokapalin, které popíšeme na konci této kapitoly, je využití kapalného helia stále nejrozšířenější a nejjednodušší motodou pro dosahování a regulaci teplot pod trojným bodem dusíku. Existují sice i další kryokapaliny s bodem varu nižším než dusík - neon (27,2 K) a vodík (20,4 K), ale jejich použití je omezené. Kapalný vodík je sice levnější než helium a jeho trojný bod je teploměrným pevným bodem, ale při práci s ním je nutné dodržovat přísná bezpečnostní pravidla, aby nedošlo k výbuchu. I když je helium inertní plyn a i v kapalném stavu velmi dobrý elektrický izolátor, práce s ním a s kryokapalinami obecně vyžaduje dodržování bezpečnostních zásad, které nejsou součástí tohoto textu a se kterými je třeba se detailně seznámit. Doporučujeme skripta [6] či knihu [7].



Obr. 2.16: Typický skleněný heliový kryostat pro experimenty v oblasti heliových teplot.

Kapalné helium lze ve větších dodávkách objednat u komerčních firem a některé laboratoře (zejména v USA, kde je levnější) jej po použití prostě vypouštějí do vzduchu. Většina evropských nebo japonských laboratoří však používá uzavřený heliový systém, kde odpařené helium z experimentu je vedeno potrubím, jímáno do zásobníků a tlakových nádob a následně opět na místě zkapalňováno. Již v bývalém Československu měla heliová kryogenika velmi dobrou úroveň a pracovala zde celá řada heliových zkapalňovačů domácí výroby (Ferox Děčín) či zahraničních. Dnes na tomto teritoriu pro vědecké účely slouží čtyři zkapalňovače helia v Praze (MFF UK Trója), Brně (UPT AVČR), Bratislavě (FU SAV) a Košicích (UEF SAV).

Kapalné <sup>4</sup>He při normálním tlaku vře při 4,2 K. Mnohé fyzikální experimenty lze při této teplotě opět provést přímo v lázni kapalného helia v jednoduchém kryostatu. Historicky se nejvíce používaly skleněné kryostaty. Ukázka takového jednoduchého skleněného

lázňového kryostatu je na obr. 2.16. Heliová lázeň je ve vnitřním kryostatu, který je hermeticky utěsněn a opatřen výstupem par, kterým je plynné helium buď odváděno přímo do rozvodu nebo je odčepáváno hermeticky těsnou vývěvou. Tlak plynného helia v rozvodu je obvykle udržován na hodnotě o zhruba 20 mbar vyšší než je atmosférický tlak, čímž se předejde znečištění systému vzduchem při manipulaci s ventily. Dochází tím sice ke ztrátám plynu při manipulaci s Dewarovými nádobami a kryostaty, ale tyto ztráty jsou obvykle nepatrné ve srovnání s náklady, které by musely být vynaloženy na čištění plynu kontaminovaného vzduchem nebo jinými nečistotami. Je důležité si pamatovat, že výstup lázňového kryostatu (pokud není čerpán) musí být vždy otevřen do rozvodu plynného helia, jinak by v důsledku parazitního přítoku tepla do kryostatu došlo k jeho natlakování. Protože odpařený litr kapalného helia při 4,2 K představuje více než 700 litrů plynu za pokojové teploty, došlo by při uzavření lázňového kryostatu zcela jistě k jeho poškození vysokým tlakem a k ohrožení obsluhy při jeho možném roztržení. Proto jsou všechna kryogenní zařízení (včetně dusíkových), obvykle chráněna nějakým typem přetlakového ventilu, který se při překročení určitého mezního přetlaku otevře a zabrání poškození zařízení.

55

Heliový lázňový kryostat na obr. 2.16 představuje vlastně dva skleněné kryostat před nadměrným přítokem parazitního tepla zvnějšku. Jde hlavně o přenos tepla vyzařováním, kdy v jednoduché geometrii teplejší plocha o teplotě  $T_1$  vyzařuje tepelnou energii úměrnou  $T_1^4 - T_2^4$  k chladnější ploše na teplotě  $T_2$ . Lze lehce nahlédnout, že zařazením dusíkové teplotní úrovně omezíme radiační přítok tepla do heliové lázně zhruba o dva řády. Kromě toho se ještě skleněné plochy ze strany vakua úplně nebo částečně stříbří (obvykle se nechává svislý nepostříbřený průzor, aby do kryostatu bylo vidět), čímž se ještě více sníží radiační přítok tepla.

Popišme ještě v krátkosti, jak takový jednoduchý experiment z kryogenního hlediska probíhá. Vnitřní kryostat a experiment v něm umístěný je nutné nejdříve předchladit na zhruba dusíkovou teplotu, protože jak entalpie par tak skupenské výparné teplo helia je nízké a zalévání kryostatu z pokojové teploty by bylo zdlouhavé a neekonomické. Obvykle postačí zalít kapalný dusík do vnějšího kryostatu a počkat (řádově hodinu), až se vnitřní kryostat a jeho obsah částečně prochladí. Stane se tak proto, že vnitřní kryostat je obvykle "měkký", tj. mezi jeho skleněnými stěnami není příliš vysoké vakuum a zbytkový plyn slouží k rozumné rychlosti prochlazení na dusíkovou teplotu. Pod dusíkovou teplotou zbytkový plyn vymrzne na stěnách a při heliových teplotách (tam, kde to potřebujeme) tak kryostat mnohem lépe izoluje. Vnější dusíkový kryostat je obvykle odčerpán na "tvrdé" vakuum. Po prochlazení vnitřního kryostatu do něj přes zalévací otvor těsněný gumovým o-kroužkem pomocí zalévacího sifonu (jeho stěny jsou tvořeny dvěma tenkostěnnými nerezovými trubičkami, z prostoru mezi nimi je odčerpán vzduch a helium teče vnitřní trubičkou) můžeme z transportní Dewarovy nádoby začít pomalu zalévat kapalné helium. Vzhledem k malé hustotě a extrémně nízké viskozitě helia k tomu postačí nepatrný tlakový spád, který lehce získáme mírným natlakováním transportní Dewarovy nádoby gumovým balónkem nebo odporovým topením.

Po zalití kryostatu sifon vyjmeme a můžeme provádět experimenty při konstantní teplotě 4,2 K. Čerpáním par jednoduchou rotační vývěvou můžeme snadno snížit teplotu lázně do cca 1,5 K, při použití výkonného čerpacího agregátu až k 1 K. Teplotu lázně při pomalém odčerpávání určíme nejjednodušeji pomocí měření tlaku par manometrem, který je též na obr. 2.16 znázorněn. Pro přesnější měření je třeba, abychom eliminovali tlakový spád, který vzniká uvnitř kryostatu prouděním plynného helia směrem vzhůru při jeho čerpání. Toho snadno docílíme tak, že trubice přívodu manometru (ve které helium při čerpání neproudí) dosahuje až těsně nad hladinu heliové lázně v kryostatu.

V dnešní době se skleněné kryostaty využívají hlavně pro pedagogiké účely či jednoduché testovací experimenty a byly do značné míry vytěsněny kryostaty kovovými nebo plastovými. Ani vnější dusíková vana se již příliš nepoužívá, není to nutné vzhledem k pokroku při vývoji stále efektivnějších tepelných izolací. Zmíníme zde tzv. superizolaci, spočívající v tom, že vnitřní heliová (obvykle nerezová) vana se volně omotá mnoha vrstvami velmi tenké pokovené plastové fólie. Tyto vrstvy vytvoří efektivní teplotní gradient a kovové vrstvičky dobře odrážejí tepelné záření. Odpadá tak nutnost dolévání kapalného dusíku během experimentu za cenu o něco většího odparu helia.

Teploty mezi cca 1,3 K a 4,2 K tedy můžeme snadno získat i měřit pomocí čerpání lázně kapalného helia. Získávání, stabilizace a měření teplot nad 4,2 K je technicky náročnější. Nejčastěji se k tomu využívá různých konstrukcí průtokových kryostatů. Jejich princip spočívá v tom, že uvnitř lázně kapalného helia umístíme izolovaný objem (často ve formě kovové tenkostěnné trubice, kterou lze do kryostatu svrchu zasunout přes o-kroužek na přírubě kryostatu), který je s lázní kapalného helia propojen jenom kapilárou, opatřenou ve vhodném místě odporovým topením. Při čerpání této vestavby jí bude zvolna protékat chladný heliový plyn (odtud název průtokový kryostat), jehož teplotu nastavíme výkonem topení a můžeme dále jemněji regulovat škrtícím ventilem na výstupu z kryostatu a dalšími přídavnými topeními, např. namotanými odporovým drátkem na tepelně dobře vodivém držáku vzorku. Teplotu vzorku většinou měříme vhodnými sekundárními teploměry.



Obr. 2.17: Fázový diagram směsi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He v osách teplota - koncentrace. Oblasti I (normální kapalina) a II (<sup>4</sup>He v supratekutém stavu) jsou odděleny  $\lambda$  čárou, oblast II+I je zakázaná, C je trikritický bod. Čárkovaně je vyznačena závislost Fermiho energie roztoku na koncentraci. Další podrobnosti jsou uvedeny v textu.

Některé typy průtokových kryostatů nemají vlastní heliovou lázeň, ale využívají heliové lázně transportní Dewarovy nádoby a chladný heliový plyn se do průtokového kryostatu dostává přes dobře izolovaný sifon.

Ceny kryokapalin se v průběhu let samozřejmě mění a v různých místech na světě se liší, i když nepříliš významně. Pro orientaci uvedeme dlouhodobou zkušenost, podle které vždy byly a jsou všude na světě ceny kapalného dusíku zhruba na místní úrovni ceny mléka, kapalného <sup>4</sup>He na úrovni kvalitního tvrdého alkoholu, stejně jako cena <sup>3</sup>He, ovšem v plynném stavu za pokojové teploty a normálního tlaku.

Účelem tohoto textu je poskytnout pouze elementární informaci o principu a možnostech realizace fyzikálních experimentů při heliových teplotách. Designem, vývojem a výrobou kryostatů a dalších zařízení pro nízké teploty se zabývá celá široká oblast aplikovaného výzkumu - kryogenika, která vyvinula širokou škálu komerčně dostupných heli-

ových lázňových či průtokových kryostatů s nejrůznějšími speciálními vestavbami, vhodných pro různé aspekty nízkoteplotního experimentu.

2.0

# **2.7** Směsi ${}^{3}$ He – ${}^{4}$ He

Směs <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He je fyzikálně neobyčejně zajímavá soustava, komplikovanější a bohatší než systémy identických bosonů či fermionů diskutovaných v úvodní kapitole, protože její konstituenty se podřizují rozdílným kvantovým statistikám. To se však v plné míře projeví teprve v oblasti nízkých teplot. Při pokojových teplotách je chování směsi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He, stejně jako čistých plynů <sup>3</sup>He a <sup>4</sup>He, blízké chování ideálního plynu.

Pro popis chování směsí <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He se zavádí bezrozměrný parametr koncentrace  $x = N_3/(N_3 + N_4)$ , kde  $N_3$  a  $N_4$  jsou počty atomů <sup>3</sup>He a <sup>4</sup>He ve směsi. Budeme se zabývat převážně kapalnými směsmi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He. K jejich základní charakteristice patří to, že se zvyšujícím se x při daném tlaku spojitě klesá jejich bod varu (při normálním tlaku od cca 4, 2 K pro x = 0k cca 3, 2 K pro x = 1).

V kapitole 3 o vlastnostech normálního kapalného <sup>3</sup>He uvidíme, že jeho fyzikální vlastnosti lze dobře popsat pomocí Landauovy teorie Fermiho kapaliny. <sup>3</sup>He rozpuštěné v supratekutém <sup>4</sup>He lze opět chápat jako Fermiho kapalinu, ale o nižší koncentraci částic <sup>3</sup>He a odlišnou efektivní hmotou atomů <sup>3</sup>He  $m^*$ . Pro Fermiho energii roztoku tedy lze napsat přibližný vztah

$$\varepsilon_{\rm F} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(2\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{2/3} x^{2/3} , \qquad (2.14)$$

kde  $N = N_3 + N_4$ . Na obr. 2.17 je závislost  $\varepsilon_{\rm F}/k_{\rm B}$  vyznačena v závislosti na x čárkovaně. Supratekuté <sup>4</sup>He tedy hraje pouze roli fyzikálního vakua<sup>5</sup>.



Obr. 2.18: Schématický diagram rozpouštěcího refrigerátoru.

Z fázového diagramu na obr. 2.17 vyplývá, že nad trikritickou teplotou  $T_{\rm tri} = 0,86$  K může existovat kapalný roztok <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He libovolné koncentrace. Pod  $T_{\rm tri}$  (bod C na obr. 2.17) je na fázovém diagramu zakázaná oblast - při těchto teplo-

 $<sup>^5 \</sup>mathrm{Podrobněji}$ o těchto otázkách pojednáme v kapitole 11.

tách roztoky sxdo ní spadajícími nemohou z fundamentálních fyzikálních důvodů existovat.

Jako příklad rozeberme situaci, kdy roztok sx=0,2 budeme nějakým dosud blíže neurčeným způsobem ochlazovat z výchozí teploty kolem 2 K, kterou bychom snadno získali pomocí lázňového kryostatu <sup>4</sup>He. Při teplotě kolem 1,8 K překročíme  $\lambda$ -čáru a <sup>4</sup>He v roztoku přejde do supratekutého stavu<sup>6</sup>. Povšimněme si, že k tomu dojde při teplotě značně nižší než v čistém <sup>4</sup>He - je to způsobeno změnou interakce mezi atomy <sup>4</sup>He díky přítomnosti atomů <sup>3</sup>He.

Při dalším ochlazování našeho vzorku (tj. při pohybu svisle dolů na fázovém diagramu, jak je naznačeno tečkovaně) se dostaneme k hranici zakázané oblasti. Do této doby homogenní vzorek se spontánně rozdělí na dvě fáze, kterým říkáme koncentrovaná fáze (z angl. <sup>3</sup>He concentrated phase) a zředěná fáze (z angl.  ${}^{3}He \ diluted \ phase$ ), podle koncentrace  ${}^{3}He$ . Koncentrovaná fáze obsahuje více lehčího izotopu <sup>3</sup>He, proto v gravitačním poli díky Archimédovu zákonu plave na zředěné fázi, podobně jako olej na vodě. Při dalším pomalém ochlazování se budou koncentrace fází spontánně nastavovat tak, aby odpovídaly rovnovážným koncentracím dosažené teploty ve směru šipek na hranicích zakázané oblasti se zředěnou a koncentrovanou fází. V limitě nulové teploty bude naprosto čisté kapalné <sup>3</sup>He plavat na zředěné fázi <sup>4</sup>He, v níž je rozpuštěno  $x_{\rm C} \sim 6,6\%$  <sup>3</sup>He. Jak ukážeme, právě konečná rozpustnost ${}^{3}\mathrm{He}$ v limitě nulové teploty je klíčovou vlastností směsí <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He pro konstrukci rozpouštěcího refrigerátoru. Dodejme ještě, že $x_{\rm C}$ závisí na tlaku a dosahuje maxima kolem 9,5% při tlacích kolem 10 MPa.

Pokusme se zodpovědět otázku, co je příčinou spontánního rozdělení fází a existence zakázané oblasti. V limitě  $T \rightarrow 0$  atomy <sup>4</sup>He interagují silněji samy se sebou a s atomy jiných látek - např. s materiálem stěn experimentální nádoby (viz též kapitola 5.3 – existence supratekutého filmu <sup>4</sup>He, smáčejícího téměř libovolný povrch) než s atomy <sup>3</sup>He. Proto v koncentrované fázi nezůstanou a ta v těchto podmínkách představuje vůbec nejčistší substanci, jakou příroda zná. Dále je experimentálním faktem, že atomy <sup>3</sup>He interagují silněji s atomy <sup>4</sup>He. Důsledkem Pauliho vylučovacího principu, kdy atom <sup>3</sup>He nechce mít ve svém okolí



Obr. 2.19: Komerční rozpouštěcí refrigerátor Oxford Instruments.

žádný jiný svého druhu, ale nevadí mu fyzikální vakuum v podobě sousedů – bosonů  ${}^{4}$ He, je konečná rozpustnost  ${}^{3}$ He v  ${}^{4}$ He. Je-li Fermiho energie, která závisí na

 $<sup>^6{\</sup>rm O}$ možnosti přechodu atomů  $^3{\rm He}$ ve směsi do supratekutého stavu se zmíníme později.



koncentraci podle vztahu (2.14), vyšší než latentní teplo (což je interakční energie na jeden atom <sup>3</sup>He), nebude se ve zředěné fázi již další <sup>3</sup>He rozpouštět.

# 2.8 Rozpouštěcí refrigerátory

Princip snižování teploty u rouzpouštěcího refrigerátoru je fyzikálně velmi podobný odčerpávání par nad hladinou vřícího kapalného helia, kdy atomy z kapaliny musejí projít hladinou – fázovým rozhraním – do plynné fáze a tento průchod spotřebuje latentní teplo vypařování, takže teplota čerpané lázně se snižuje. U rozdělené směsi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He je situace podobná, ale vertikálně prohozená (jde tedy o jakési vypařování vzhůru nohama). Lehčí koncentrovaná fáze hraje roli kapaliny a těžší zředěná fáze roli heliové páry. Je třeba přinutit atomy <sup>3</sup>He, aby procházely z koncentrované do zředěné fáze a tím spotřebovávaly latentní teplo fázového přechodu, čímž dojde k velmi efektivnímu snižování teploty.

Že tomu tak opravdu bude, je zřejmé, uvědomíme-li si, že entropie zředěné fáze je podstatně větší než entropie fáze koncentrované. Vzpomeňme na úvodní kapitolu, vztah (1.118), kdy entropie Fermiho plynu je úměrná teplotě a nepřímo úměrná Fermiho energii  $\varepsilon_{\rm F}$ , která podle (2.14) strmě roste s koncentrací jako  $x^{2/3}$ .

Nyní zbývá praktická maličkost - jak to zařídit, aby atomy <sup>3</sup>He z koncentrované do zředěné fáze rozhraním opravdu prostupovaly a celé zařízení - rozpouštěcí refrigerátor - fungoval.

K silně zjednodušenému výkladu (zvídavější čtenáře odkazujeme na literaturu [24, 25]) použijeme schéma znázorněné na obr. 2.18. Z předchozího textu již víme, že <sup>3</sup>He je poměrně nákladná položka a že je s ním třeba pracovat opatrně, v uzavřeném cyklu samotného za-



Obr. 2.20: Výkonná rozpouštěcí aparatura MiniGrail sloužící k ochlazení 1400 kg těžké antény pro detekci gravitačních vln.

řízení. Proto je i směs <sup>3</sup>He - <sup>4</sup>He, namíchaná v žádoucím poměru podle potřeb konkrétního refrigerátoru (typicky  $x \simeq 0, 2$ ) držena při tlaku nižším než atmosférický (při havárii nebo neopatrném otevření ventilu tak většinou hned neunikne do vzduchu) a před vlastním experimentem pečlivě čištěna v tzv. dusíkové vymrazovačce (angl. *Nitrogen cold trap*) pomalým cyklickým přepouštěním přes aktivní uhlí při teplotě kapalného dusíku, kde prakticky všechny příměsi jako vodní páry či složky vzduchu (kromě vodíku) vymrznou.

Vlastní rozpouštěcí refrigerátor je ve většině případů umístěn ve vakuovém prostoru (angl. vacuum can) helioveho kryostatu<sup>7</sup>. Uvnitř tohoto prostoru obvykle bývá na špatně tepelně vodivém držáku umístěna jednoduchá uhlíková kryovývěva s odporovým topením, která zjednodušuje start celého zařízení. Při pokojové teplotě lze do tohoto prostoru napustit malé množství plynného <sup>3</sup>He. Zapneme-li topení kryovývěvy, příliš se při zalití kapalného helia do vnějšího kryostatu neochladí a <sup>3</sup>He poslouží jako výměnný plyn pro ochlazení celého vnitřku - vlastního refrigerátoru - na heliovou teplotu. To by jinak byl technický problém, protože konstrukce vlastního refrigerátoru je nutně provedena tak, aby k němu v pracovním stavu zvenku přitékalo co nejmenší množství parazitního tepla a aby jeho jednotlivé části byly od sebe tepelně co nejlépe izolované. Po ochlazení vlastního refrigerátoru na heliovou teplotu kolem 4, 2 K se vypne odporové topení kryovývěvy, ta se přes držák od vnější heliové vany ochladí a vyčerpá všechen výměnný plyn <sup>3</sup>He. Tím máme vlastní refrigerátor ochlazen na heliovou teplotu a tepelně velmi dobře izolován od okolí.

Kapalné <sup>4</sup>He z heliové vany pak ještě použijeme k ochlazení refrigerátoru na úroveň těsně nad 1 K. V principu by bylo možné čerpat celou heliovou vanu, ale našel se lepší způsob s využitím tzv. jednokelvinové vany (angl. *1 K pot*). Nejvýhodnější je konstrukce s kontinuálním plněním, kdy je jednokelvinová vana umístěna uvnitř vakuového prostoru (viz obr. 2.18), na horním konci vlastního rozpouštěcího refrigerátoru. Je spojena s heliovou vanou kryostatu jen tenkou kapilárou. Ta je dimenzována tak, aby průběžně doplňovala kapalné <sup>4</sup>He v jednokelvinové vaně, která je čerpána obvykle výkonnou rotační vývěvou. Nutné ochlazení vlastního refrigerátoru pod teplotu kapalného <sup>4</sup>He je pak dosaženo cirkulací pracovní směsi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He, protože její přívodní kapilára je v dobrém tepelném kontaktu s čerpaným <sup>4</sup>He v jednokelvinové vaně. Teplota ostaních částí vlastního refrigerátoru se tak cirkulací pracovní směsi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He postupně snižuje, až směs začne v prostorách refrigerátoru kondenzovat. Postupně je zaplní až do stavu, kdy její hladina bude ve výparníku (angl. výraz *still* má původ v tom, že směs je tam destilována, angl. *di-still-ed*).

Výparník je čerpán buď výkonnou olejovou difúzní vývěvou (angl. *booster*) nebo turbomolekulární vývěvou, takže jeho teplota rychle klesne pod trikritickou teplotu a v refrigerátoru dojde ke spontánnímu rozdělení směsi. Celkový objem a poměr <sup>3</sup>He a <sup>4</sup>He v pracovní směsi musí být nastaven tak, aby hladina kapaliny byla ve výparníku a fázové rozhraní mezi zředěnou a koncentrovanou fází v rozpouštěcí komůrce refrigerátoru, která se stane nejchladnějším místem celého zařízení.

Jak je patrno ze schématu na obr. 2.18, konstrukce je uzpůsobena tak, že ve výparníku čerpáme zředěnou fázi. Ačkoli obsahuje pouze cca do deseti procent <sup>3</sup>He (podle teploty), je tenze par <sup>3</sup>He ve výparníku řádově vyšší než pro <sup>4</sup>He a odčerpáváme tak v podstatě čisté <sup>3</sup>He. Tím se jeho podíl ve zředěné fázi snižuje a další <sup>3</sup>He

61

 $<sup>^7</sup>$ Současná tendence je využít možností předchlazování refrigerátoru tzv. suchou, bezheliovou kryogenní technologií (z angl. dryogenics), avšak většina existujících zařízení dosud funguje v heliových kryostatech, jak je popsáno v textu.

je nuceno prostupovat fázovým rozhraním v rozpouštěcí komůrce. Jak jsme popsali výše, tento proces je endotermický a vede k velmi intenzivnímu snižování teploty.



Obr. 2.21: Schéma <sup>3</sup>He kryostatu pro experimenty do 0, 3 K.

Kdybychom v rozpouštěcím refrigerátoru zkondenzovali veškerou směs a začali výparník čerpat, aniž bychom vyčerpané <sup>3</sup>He vraceli zpět, bude zařízení pracovat v tzv. jednorázovém režimu (angl. single-shot regime). Tím sice můžeme krátkodobě dosáhnout velmi nízké teploty, ale po odčerpání veškerého <sup>3</sup>He ochlazovací proces nemůže pokračovat. Z praktického hlediska je proto výhodnější provozovat zařízení v kontinuálním režimu, kdy je odčepávané <sup>3</sup>He vraceno zpět do refrigerátoru. Po cestě dolů kryostatem se nejprve ochladí na heliovou teplotu a průtokem přes jednokelvinovou vanu a výparník, se kterými je přívodní kapilára v těsném tepelném kontaktu, na teplotu ještě nižší. <sup>3</sup>He vstupuje do vlastního refrigerátoru velmi tenkou škrtící kapilárou (angl. main impedance), která zajišťuje potřebný tlakový spád od cca 1 baru na výstupu vývěvy k tlaku blízkému tlaku

nasycených par ve výparníku. Při nižších teplotách v milikelvinové oblasti je největším problémem tepelný přenos. Vstupující <sup>3</sup>He musí být při postupu směrem dolů k rozpouštěcí komůrce chlazeno nejprve v kontinuálním výměníku (většinou typu trubka v trubce či spirála v trubce) a dále soustavou diskrétních tepelných výměníků. Velmi efektivní jsou výměníky s obrovskou teplozměnnou plochou plochou<sup>8</sup> vytvořenou sintrovaným velmi jemným stříbrným práškem. Jeho slisováním na plnění kolem 50% hustoty stříbra získáme kompaktní pórovité prostředí, kterým kapalina může snadno prostupovat a které zároveň velmi dobře vede teplo. Na kvalitě tepelných výměníků závisí výkon a nejnižší dosažitelná teplota celého zařízení.

Současný teplotní rekord kolem 1,8 mK v kontinuálním režimu drží rozpouštěcí aparatura Pickettovy skupiny v Lancasteru ve Velké Británii. Je používána jako předchlazovací stupeň pro jadernou demagnetizaci, kterou popíšeme níže.

Rozpouštěcí refrigerátory různých konstrukcí a určení $^9$ jsou komerčně dostupné

 $<sup>^8</sup>$ Takový výměník o objemu několika cm $^3$ má teplozměnnou plochu srovnatelnou s velikostí fotbalového hřiště, což je nutné kvůli tepelnému Kapicově odporu diskutovanému v kapitole 18 o nízkoteplotních vlastnostech pevných látek.

 $<sup>^9 \</sup>rm Kromě popsaného typu nejběžnější konstrukce existují rozpouštěcí refrigerátory s cirkulací <math display="inline">^4 \rm He,$  bez jednokelvinové vany, s jednou či dvěma kryovývěvami pro čerpání  $^3 \rm He$  z výparníku či plastové refrigerátory pro použití ve velmi silných magnetických polích.

od řady výrobců (viz obr. 2.19), avšak nejkvalitnější speciální aparatury byly navrženy a vyrobeny samotnými fyziky nízkých teplot. Na obr. 2.20 je velmi výkonná rozpouštěcí aparatura Frossatiho konstrukce sloužící k ochlazení velmi hmotné (1400 kg) CuAl antény ve tvaru koule o průměru 0,68 m na teplotu 20 mK pro zcela unikátní experiment detekce gravitačních vln, o kterém bude zmínka v kapitole 16 o Josephsonových jevech a aplikaci skvidů.

Zde se ještě zmíníme o možnostech dosahování teplot pod 1 K pomocí kryostatu s cirkulací <sup>3</sup>He, schématicky znázorněného na obr. 2.21. Jeho konstrukce je jednodušší než konstrukce rozpouštěcích refrigerátorů a pro řadu aplikací teploty do 0,3 K postačují. Pracovní plyn - <sup>3</sup>He - je opět cirkulován v samostatném okruhu. Pro jeho kondenzaci (pamatujeme si, že <sup>3</sup>He se při normálním tlaku vaří při 3,2 K) lze využít metodu kontinuálně plněné jednokelvinové vany a odčerpáváním par nad lázní kapalného <sup>3</sup>He pak můžeme chladit libovolný experiment, který je s ní v tepelném kontaktu.

#### 2.9 Adiabatická demagnetizace



Obr. 2.22: K metodě adiabatické demagnetizace.

Magnetické metody chlazení se ve fyzice nízkých teplot používají již od konce 20. let minulého století, kdy první experiment tohoto typu předložili Debye a Giauque [20]. Tyto metody spočívají v tom, že pracovní látku předchladíme na teplotu  $T_{\rm i}$  v silném magnetickém poli  $B_i$ , tepelně ji izolujeme a při následné demagnetizaci pak dochází k podstatnému snížení teploty. Tento proces lze nejjednodušeji popsat a pochopit pomocí modelu ideálního paramagnetického plynu, kdy ve vnějším magnetickém poli B při zadané teplotě Tje jeho entropie S funkcí pouze jejich podílu, tj. S = S(B/T) (viz kapitola 19 o jaderném magnetizmu). Je-li demagnetizace striktně adiabatická a zastavíme-li ji v poli $B_{\rm f},$ musí platit

$$\frac{B}{T} = \frac{B_{\rm i}}{T_{\rm i}} = \frac{B_{\rm f}}{T_{\rm f}} = konst. \qquad (2.15)$$

Kdybychom demagnetizovali až do nulového vnějšího pole, vztah (2.15) by v rozporu se třetí termodynamickou větou předpovídal jednorázové dosažení absolutní nuly. To proto, že jsme uvažovali ideální paramagnetický plyn a zanedbali interakce. Ve skutečnosti se každý atom takového plynu (nebo magnetické momenty v příslušných uzlech krystalické mřížky pracovní látky) nacházejí v efektivním poli vytvořeném v jeho místě všemi ostatními. Přesný výpočet tohoto efektivního pole se zřetelem na všechny přítomné interakce je velmi složitý, ale obvykle postačí nahradit tyto interakce vnitřním efektivním polem  $B_{\rm eff}$ , které se vektorově skládá s vnějším přiloženým polem, takže pro konečnou teplotu demagnetizace dostaneme

$$T_{\rm f} = \left(\frac{B_{\rm f}^2 + B_{\rm eff}^2}{B_{\rm i}^2}\right)^{1/2} T_{\rm i} , \qquad (2.16)$$

kde jsme předpokládali  $B_{\rm eff} \ll B_{\rm i}$ .

Adiabatická demagnetizace je jednorázová chladící metoda, jejíž aplikace je patrná z obr. 2.22. Pracovní látku předchladíme na teplotu  $T_i$  (bod 1), ale abychom se dostali do startovního bodu demagnetizace 2, musíme odvést magnetizační teplo  $Q_1$ . Pracovní látku izolujeme a proces vlastní demagnetizace probíhá ve směru šipky z bodu 2 do bodu 3. Nesplníme-li striktně podmínku adiabatičnosti, dostaneme se na křivku  $S(B_f, T)$  nad bodem 3 a dosažená teplota bude vyšší. Po skončení demagnetizace se pracovní látka bude ohřívat tepelným příkonem experimentu nebo alespoň parazitním přítokem tepla, což na obr. 2.22 odpovídá pohybu po křivce  $S(B_f, T)$ . Po absorbování tepla  $Q_2$  bude soustava znovu v bodě 1 a celý cyklus je třeba opakovat.

#### 2.9.1 Adiabatická demagnetizace paramagnetických solí

Metoda adiabatické demagnetizace byla nejprve aplikována na elektronové momenty v pracovních látkách typu paramagnetických solí. Nejznámějším materiálem byl krystalický dusičnan ceritohořečnatý 2Ce(N0<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·3Mg(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>·24H<sub>2</sub>O, označovaný v literatuře jako CMN. Demagnetizaci CMN lze úspěšně provádět z výchozích podmínek  $T_i \simeq 1$  K,  $B_i \simeq 2$  T s dosažitelnou teplotou 1,8 mK, omezenou magnetickými interakcemi vedoucími k  $B_{\rm eff}$ . Na prvním domácím nízkoteplotním pracovišti v Řeži u Prahy se záměnou 95% magnetických iontů Ce<sup>3+</sup> za nemagnetické ionty La<sup>3+</sup> a deuterizací krystalové vody podařilo vnitřní efektivní pole výrazně snížit (za cenu snížení chladící schopnosti) a dosáhnout rekordně nízké teploty 0,42 mK [18]. Deuterizovaný dusičnan ceritolanthanohořečnatý (CLMN) lze také používat pro teploměrné účely pro měření milikelvinových teplot - měřením jeho magnetické susceptibility s využitím Curieova zákona.

#### 2.9.2 Jaderná adiabatická demagnetizace

Metoda jaderné adiabatické demagnetizace, v kontrastu s právě popsanou demagnetizací paramagnetických solí využívajících elektronových magnetických momentů, využívá mnohem menších magnetických momentů atomových jader. Zdrojem chladu je zde jaderný spinový systém, který (jak je detailně popsáno v kapitole 19 o jaderném magnetizmu) je při nízkých teplotách jen volně vázán na mřížku. Spinmřížková relaxační doba charakterizující rychlost ustavení tepelné rovnováhy mezi jaderným systémem a mřížkou (sem zařazujeme i vodivostní elektrony, jejichž tepelná kapacita je při velmi nízkých teplotách dominantní) je v kovech s mřížkovou teplotou obvykle vázána Korringovým vztahem  $T_1T = \kappa_{\rm K}$ , přičemž velká hodnota Korringovy konstanty  $\kappa_{\rm K}$  a malá hodnota vnitřního pole  $\boldsymbol{B}_{\rm eff}$  umožňuje dosáhnout

rekordně nízkých teplot spinového systému, je ale omezujícím faktorem pro chlazení mřížky či jiných vzorků.

Nejpoužívanější pracovní látkou pro jadernou demagnetizaci je měď. Umožňuje získat spinové teploty řádu  $10^{-8}$  K a studovat při nich projevy projevy jaderného magnetizmu. Co se týče mřížkové teploty či možností ochlazení jiných vzorků, lze je pomocí jaderné demagnetizace mědi poměrně snadno ochladit na submilikelvinovou teplotu. Velkou výhodou této chladicí metody je, že po demagnetizaci na hodnotu vnějšího pole  $B_{\rm f}$  a získání požadované teploty vzorku pro experiment můžeme pomalým snižováním či zvyšováním pole  $B_{\rm f}$  teplotu vzorku velmi citlivě regulovat.



Obr. 2.23: Schéma experimentu jaderné demagnetizace. Ve vnitřním vakuovém plášti je umístěna rozpouštěcí komůrka refrigerátoru (1), tepelně spojená přes tepelný klíč (2) s jaderným demagnetizačním stupněm (3), nacházejícím se uvnitř supravodivého solenoidu (4) umístěném v heliové lázni kryostatu.

Výchozí podmínky pro jadernou demagnetizaci mědi jsou však mnohem náročnější než pro paramagnetické soli, typicky  $T_{\rm i} \simeq 10-20 \,\mathrm{mK}$  a  $B_{\rm i} \simeq 8 \,\mathrm{T}$ a pro předchlazení je nutné využít výkonný rozpouštěcí refrigerátor a speciální supravodivý solenoid. Ten musí být uzpůsoben tak, aby v podstatné části jeho objemu bylo vysoké pole, nutné pro demagnetizaci, ale zároveň v dostatečně krátké vzdálenosti po ose kompenzováno na nízkou hodnotu, která se v průběhu demagnetizace příliš nemění a neovlivňuje tak zamýšlené experimenty. Takové solenoidy jsou většinou navrhovány a vyráběny z mnohažilového kabelu ze supravodiče NbTi stabilizovaného mědí, někdy dokonce s odpojitelnými proudovými přívody (které lze z kryostatu vyjmout a omezit tak parazitní přítok tepla, které by jimi přitékalo i po dobu, kdy nejsou pro experiment potřebné) a mohou být provozovány v perzistentním módu, kdy supravodivý proud solenoidem protéká díky supravodivému zkratu mezi oběma přívody. Tento supravodivý zkrat je konstruován jako tzv. supravodivý klíč – lze jej odporovým topením přehřát a uvádět tak podle potřeby do normálního či supravodivého stavu. Chceme-li tedy takový supravodivý solenoid nabudit, připojíme jeho odpojitelné proudové přívody a pomocí odporového topení ohřejeme supratekutý zkrat do normálního stavu s nenulovým elektrickým odporem. Přívody připojíme k proudovému zdroji a pomalu zvyšujeme proud solenoidem až do požadované hodnoty magnetické indukce v jeho dutině. Vypneme topení supravodivého zkratu a ten přejde do supravodivého stavu. Poté začneme

snižovat proud dodávaný vnějším zdrojem. Proud cirkulující solenoidem se ale nezmění, neboť stále větší část proudu poteče zkratem. Pokračujeme se snižováním proudu vnějšího zdroje až na nulu, pak přívody už nepoteče žádný proud, neboť bude všechen cirkulovat přes supravodivý zkrat. Přívody proto můžeme odpojit od zdroje a z kryostatu vyjmout na celou dobu, po kterou nebudeme muset měnit pole solenoidu. Odbuzení magnetu proběhne tak, že připojíme přívody a zdroj a najedeme proudem na zdroji přesně na tu hodnotu, kterou jsme v solenoidu uzamkli (protože solenoid je supravodivý, tato hodnota se mezitím nijak významně nezměnila; v praxi je časová konstanta takových solenoidů řádově roky). Tím přes zkrat neteče proud a můžeme jej bez obav topením ohřát a převést do normálního stavu. Snižováním hodnoty proudu na vnějším zdroji pak solenoid odbudíme či nastavíme jinou požadovanou hodnotu pole.

Zmínili jsme, že solenoid je nutné nabuzovat i odbuzovat pomalu, s časovou konstantou řádově hodina. To má dva důvody. Prvním je to, že solenoid má obvykle velkou indukci řádu jednotek H a při rychlé změně by nezanedbatelná část proudu díky induktivnímu odporu tekla i přes ohmický odpor – zkrat přehřátý do normálního stavu. Druhý důvod je ten, že rychlá časová změna magnetické indukce by vyvolala značné Foucaltovy vířivé proudy ve všech elektricky vodivých částech aparatury a jejím důsledkem by byl parazitní přítok Jouleova tepla. Abychom tento přítok tepla minimalizovali, vyrábíme jaderné měděné demagnetizační stupně ne z objemového měděného materiálu, ale buď z měděných drátů nebo v poslední době sice z objemové mědi, ale profrézované nebo projiskřené tak, aby ve směru kolmém k indukci magnetického pole měly možné proudové smyčky co nejmenší plochu a ohřev Foucaltovými proudy byl co nejvíce omezen. Za zmínku stojí i použití malých měděných vloček (používaných v praxi jako plnidlo do metalických autolaků), které velmi efektivně fungují jako pracovní látka pro chlazení např. kapalného <sup>3</sup>He, protože zároveň podobně jako měděný sintr poskytují obrovskou teplozměnnou plochu nutnou k ochlazení vzorku kvůli existenci Kapicova odporu (viz kapitola 18).

Poslední podstanou součástí každé demagnetizační aparatury (schématicky znázorněné na obr 2.23), kterou jsme dosud nezmínili, je tepelný klíč. Před vlastní demagnetizací musíme pracovní látku v v silném magnetickém poli  $B_i$  předchladit na  $T_i$  a k tomu potřebujeme dobrý tepelný kontakt např. s rozpouštěcí komůrkou refrigerátoru. Vlastní demagnetizacie však vyžaduje, aby pracovní látka byla pokud možno dokonale tepelně izolována. To je možné zajistit např. pomocí mechanického tepelného kontaktu prostřednictvím kovových čelistí, které paracovní látku při předchlazování pevně stisknou a pro demagnetizaci pak čelisti pomocí táhla z příruby kryostatu rozevřeme. Jinou možností je tepelný kontakt pomocí výměnného plynu, který po předchlazení odčerpáme, např. kryovývěvou.

Pro jadernou demagnetizaci se však v praxi nejčastěji používá supravodivý tepelný klíč. Je založen na tom, že tepelná vodivost čistých kovových supravodičů (viz kapitoly 13 a 14) v normálním a supravodivém stavu se při teplotách výrazně nižších než  $T_c$  liší i o několik řádů. Důvod je v tom, že teplo v normálním kovu přenášenjí zejména vodivostní elektrony, které však v supravodivém stavu vytvářejí Cooperovy páry, jenž teplo nevedou. Pro tento účel se obyčejně používá klíč z čistého Al (supravodič prvního druhu, viz kapitola 13) s teplotou přechodu cca 1 K, který lze pomocí malé kompaktní supravodivé cívečky snadno převést do normálního stavu, kdy velmi dobře vede teplo a jaderný stupeň tak může být pomocí

rozpouštěcího refrigerátoru dobře předchlazen na teplotu kolem 10 mK, tedy o dva řády nižší než  $T_c$  hliníku. V supravodivém stavu tedy klíč již prakticky teplo nevede a jaderný stupeň je tak od rozpouštěcí komůrky refrigerátoru tepelně velmi dobře izolován.

Přestože jde o jednorázovou metodu chlazení, parazitní přítoky tepla v takových aparaturách jsou natolik potlačeny, že po jedné demagnetizaci lze při submilikelvinových teplotách provádět experimenty v časové škále dosahující řady dnů či dokonce týdnů. K tomu je ale nutné potlačit mechanické vibrace aparatury (např. montáží kryostatu na mnohatunový betonový blok usazený na pryži či pružinách s vlastní frekvencí v milehertzové oblasti a utlumením vibrací čerpacích systémů) a umístěním do elektromagneticky stíněné místnosti - Faradayovy klece, která odstíní elektromagnetické poruchy.

Pro studium jaderného magnetizmu a uspořádání jaderných magnetických momentů v oblasti subnanokelvinových teplot (fyzika těchto jevů je podrobně diskutována v kapitole 19 o jaderném magnetizmu) bylo použito ještě sofistikovanější metody, tzv. dvojité jaderné demagnetizace.

Schéma takové aparatury je na obr. 2.24. Číslicemi jsou označeny její jednotlivé části: 1) heliová lázeň, 2) jednokelvinová vana, 3) výparník o teplotě cca 0,7 K, 4) tepelné výměníky, 5) studovaný vzorek ochlazený na extrémně nízkou teplotu T < 1 nK, 6) supravodivý solenoid 7,5 T, 7) tepelně dobře vodivý držák vzorku, 8) rozpouštěcí komůrka refrigerátoru, 9) chladná příruba na rozpouštěcí komůrce, 10) supravodivý hliníkový tepelný klíč, 11) platinový pulzní NMR teploměr (viz kapitola 19), 12) horní příruba jaderného stupňe, 13) jaderný demagnetizační stupeň ochlazený na teplotu nižší než cca 0,1 mK, 14) supravodivý solenoid 9 T. Metoda jaderné demagnetizace měděného jaderného stupně zde slouží jako další mezistupeň pro ještě hlubší předchlazení zkoumaného vzorku - např. velmi čisté Cu, Pt, či Rh. Vzorek sám slouží jako druhý demagnetizační stupeň a měření jeho jaderné sus-



Obr. 2.24: Schéma aparatury pro dvojitou jadernou demagnetizaci.

ceptibility lze na základě Curieova zákona využít jako teploměr pro určení jeho jaderné teploty. Jak jsme již diskutovali, může se o mnoho řádů lišit od teploty mřížky a vodivostních elektronů, kterou bychom mohli měřit např. <sup>195</sup>Pt teplo-

měrem NMR, jehož čidlo by bylo zhotoveno z tenkých izolovaných drátků z velmi čisté platiny (podrobněji viz kapitola 19).

Pro jadernou adiabatickou demagnetizaci lze jako vhodné pracovní látky využít také van Vleckova paramagnetika typu PrNi<sub>5</sub>, tedy materiály, jejichž fyzikální vlastnosti jsou podrobně diskutovány v kapitole 19 o jaderném magnetizmu. Zjednodušeně řečeno jde o to, že pro demagnetizaci sice používáme jaderné magnetické momenty, ty ale cítí vnější magnetické pole (1 + K)-krát zesílené díky polarizaci vnitřních elektronových slupek. Symbol K označuje Knightův posuv, dosahující v těchto materiálech hodnot 10-100. Hodnota Korringovy konstanty je obvykle malá, takže spolu s jaderným systémem se zároveň velmi efektivně chladí i mřížka a vodivostní elektrony. Pro podrobnější informace čtenáře odkazujeme na první vydání skript a na literaturu, např. [24, 19].

#### 2.9.3 Adiabatické tavení pevného <sup>4</sup>He v kapalném <sup>3</sup>He

Jak jsme již zmínili, v kapalné směsi <sup>3</sup>He – <sup>4</sup>He je experimentálně prokazatelně pozorována supratekutost <sup>4</sup>He v souladu s fázovým diagramem na obr. 2.17. Je však všeobecně očekáváno, že za dostatečně nízkých teplot nastane Cooperovo párování atomů <sup>3</sup>He (podrobně popsané v kapitole 6) a experimentální potvrzení supratekutého <sup>3</sup>He ve směsi <sup>3</sup>He – <sup>4</sup>He tak představuje velkou výzvu fyziky kvantových kapalin. Důvodem je to, že by bylo možné experimentálně studovat unikátní substanci – směs supratekutých <sup>3</sup>He (fermionová supratekutost) a <sup>4</sup>He (bosonová supratekutost) s dosud neznámými fyzikální vlastnostmi. Mezi teoretiky panuje poměrně dobrá shoda [22] o tom, že pro <sup>3</sup>He ve směsi malé koncentrace  $x = N_3/(N_3 + N_4) = 0, 1...0, 2$  by mělo nastat s-párování podobně jako v klasických supravodičích (viz kapitola 13 o základech supravodivosti), kdežto pro vyšší koncentrace až k  $x \cong 6.6\%$ , vzhledem k silnějším interakcím, by mělo být pravděpodobnější p-párování podobně jako bude diskutováno v kapitole 6 o supratekutých fázích čistého <sup>3</sup>He. Existuje dokonce realistická předpověď tvaru fázového diagramu v závislosti na x, ovšem v relativních teplotách. Problém je v tom, že teoretické předpovědi absolutní prahové teploty párování jsou exponenciálně závislé na amplitudách kulových funkcí pro přitažlivou interakci, takže dodnes není jasné, bude-li dosažení kritické teploty v možnostech existujících chladících metod.

Zdá se, že možnosti chlazení vzorku roztoků <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He metodou jaderné adiabatické demagnetizace jsou již vyčerpány. Je sice možné dosáhnout velmi nízkých spinových teplot, ale k hlubšímu ochlazení vzorku pod cca 100  $\mu$ K [23] brání Kapicův odpor (viz kapitola 18), který strmě roste s klesající teplotou. Nejnadějnější se proto v tomto směru zdá nově vyvinutá metoda adiabatického tavení pevného <sup>4</sup>He přímo v roztoku <sup>3</sup>He – <sup>4</sup>He. Podstatným rozdílem je, že chladíme přímo studovaný vzorek a odstraníme problémy s tepelným přenosem. Chladící efekt má podobnou příčinu jako v rozpouštěcím refrigerátoru, kde atomy <sup>3</sup>He procházejí fázovým rozhraním z koncentrované fáze do zředěné, která má vyšší entropii. Zde se roztavením krystalu <sup>4</sup>He vytvoří kapalná směs <sup>3</sup>He – <sup>4</sup>He, která má mnohem vyšší entropii než čisté kapalné <sup>3</sup>He. Princip metody je dobře patrný z obr. 2.25. Čárkovaná přímka je teplotní závislost entropie homogenní kapalné směsi <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He, která je při  $T \ll T_{\rm F}$ úměrná teplotě, tedy i podílu teplot  $T/T_{\rm c3}$ , kde  $T_{\rm c3}$  je kritická teplota přechodu <sup>3</sup>He do supratekutého stavu. Plná čára je teplotní závislost entropie soustavy čistého krystalu <sup>4</sup>He a čistého kapalného <sup>3</sup>He. Jde v podstatě pouze o entropii čistého kapalného <sup>3</sup>He, neboť při takto nízkých teplotách je entropie bosonového systému čistého kapalného i pevného <sup>4</sup>He zanedbatelně malá (viz kapitola 1). Z diskuze o rozpouštěcích refrigerátorech plyne, že entropie čistého <sup>3</sup>He je nižší než entropie směsi. Navíc při snižování teploty přejde čisté <sup>3</sup>He při  $T_{c3}$  do supratekutého stavu a díky Cooperovskému párování bude další pokles entropie se snižující se teplotou exponenciální. Na obr. 2.25 jsou třemi vodorovnými šipkami znázorněny ideální procesy adiabatického tavení z různých výchozích podmínek. Vidíme, že chladící efekt záleží velmi strmě na startovní teplotě a může dosáhnout dvou i více řádů, podaří-li se startovat z teploty hluboko pod kritickou teplotou přechodu čistého <sup>3</sup>He do supratekutého stavu.

Princip metody je tedy jednoduchý, ale praktická realizace velmi složitá. Lze vyjít z velmi chladné homogenní směsi  ${}^{3}\text{He} - {}^{4}\text{He},$ na kterou aplikujeme vnější tlak přesahující 2,5 MPa, takže začne vymrzat <sup>4</sup>He (utváří se jeho krystal - viz kapitola 4, ve kterém se <sup>3</sup>He téměř nerozpouští), ale <sup>3</sup>He zůstane v kapalném stavu. Tím se dostaneme na plnou čáru na obr. 2.25 a pomocí jaderné demagnetizace (např. měděného jaderného stupně tepelně navázaného přes supravodivý tepelný klíč) tuto soustavu prochladíme na co možná nejnižší startovní teplotu.



Obr. 2.25: K chladící metodě adiabatického tavení.

Naší soustavu tepelně izolujeme a poté vhodným způsobem snížíme tlak, takže dojde k adiabatickému procesu tavení a ke snížení teploty. Nebudeme zde podrobně diskutovat konstrukci experimentální cely, kde je třeba řešit podobné problémy jako při Pomerančukově metodě chlazení, dikutované v kapitole 4 o pevném heliu (je třeba omezit vnější tepelný přítok na minimum, předejít možnosti drcení krystalu, vazkému proudění normální složky <sup>3</sup>He či plastické deformaci cely, neboť všechny tyto procesy vedou k parazitnímu přítoku tepla atd.). Omezíme se konstatováním, že v době vzniku tohoto textu již bylo úspěšně demonstrováno, že metoda funguje pod teplotou 1 mK [24] a cesta k možnému vytvoření bosonové a fermionové supratekuté směsi se zdá být otevřená.

# 2.10 Dosahování nízkých teplot bez použití kryokapalin

S rostoucím použitím supravodivých magnetů pro NMR pro chemickou analýzu a zejména pro magnetickou rezonanční tomografii narůstá spotřeba kapalného helia. Často je technicky i ekonomicky nevýhodné odpařené helium jímat a znovu zkapalňovat. Uvědomíme-li si, že zdrojem helia jsou výhradně zemní plyny, jejichž zásoby se odhadují pouze na desetiletí, je třeba systematicky studovat alternativní možnosti chlazení do nízkých teplot bez použití zkapalněných plynů. Pro mnohé aplikace představují vhodnou náhradu tepelné stroje nazývané kryogenerátory.

#### 2.10.1 Kryogenerátory

Z řady zkonstruovaných a vyzkoušených mechanických chladících zařízení popíšeme pouze kryogenerátory se Stirlingovým - Philipsovým cyklem a s Giffordovým - Mc-Mahonovým cyklem. Oba tyto systémy pracují s omezeným množstvím plynu v uzavřeném okruhu, používají přídavný přesuvný píst (angl. *displacer*) a k předchlazení plynu využívají regenerátory.

V roce 1816 zkonstruoval skotský reverend Stirling tepelný stroj, který měl být alternativou k parnímu stroji. Měl být bezpečnější a nenáročný na výběr paliva. Stirlingův motor se však neuplatil v konkurenci s nastupujícím benzinovým motorem kvůli výrazně větší hmotnosti na jednotkový výkon. Stirlingův tepelný stroj pracující v obráceném cyklu jako kryogenerátor poprvé použil Kirk v roce 1864. Od 30. let dvacátého století vyráběla holandská firma Philips zkapalňovače vzduchu a posléze i zkapalňovače kyslíku, dusíku, argonu a zemního plynu s pomocí zdokonaleného převráceného Stirlingova cyklu.

Diagram p-V ideálního Philipsova cyklu se skládá ze dvou izoterm a dvou izochor a probíhá proti směru hodinových ručiček. Na obr.2.26 jsou znázorněny čtyři fáze cyklu. Tlakový píst zajišťuje kompresi a expanzi plynu. Přesuvný píst pracující v rovnotlakém režimu přemísťuje plyn z teplé části válce, v níž docházi ke kompresi, do chladné části, ve které probíhá expanze a zpět. Zahřátý plyn se ochladí vodním chladičem s protékající vodou a dále se předchladí v regenerátoru, jenž byl ochlazen studeným plynem po expanzi v předchozím cyklu.

V první fázi probíhá komprese plynu v teplé části válce, přesuvný píst je v horní úvrati a vyplňuje chladnou část válce. Ve druhé fázi píst převádí stlačený ohřátý plyn přes chladič a regenerátor do chladné části válce. Ve třetí fázi dojde k expanzi plynu a tím k jeho ochlazení v



Obr. 2.26: Fáze Philipsova (převráceného Stirlingova) chladicího cyklu [32].

chladné části válce. Ve čtvrté fázi přetlačuje přesuvný píst plyn se zbytky chladu regenerátorem do teplé části válce. Kryogenerátor chladí buď na vnějším povrchu chladné části válce nebo uvnitř prostřednictvím výměníku.

Účinnost Philipsova cyklu odpovídá účinnosti Carnotova cyklu, chladicí výkon je úměrný tlaku pracovního plynu (2-3) MPa, frekvenci cyklů a účinnosti regenerátoru. Vzhledem k relativně velkému prostoru vyplněnému regenerátorem a chladičem dosahuje kompresní poměr pouze hodnoty cca 2. Výběru materiálu regenerátoru se věnuje velká pozornost. Musí mít velkou tepelnou kapacitu v pracovním oboru teplot, malou podélnou tepelnou vodivost, aby byl omezen tepelný tok mezi teplou a chladnou částí válce a musí být porézní, aby proudícímu plynu nekladl nadměrný odpor. Používají se kovové drátky nebo hobliny nejčastěji z mědi nebo olova. Philipsův cyklus byl kromě přímého zkapalňování plynů využit i v refrigerátorovém režimu a k předchlazování helia ve zkapalňovači v podobné roli jako detandéry.

V roce 1960 Gifford a McMahon zkonstruovali kryogenerátor, který obsahuje pouze přesuvný píst. Plyn koná práci proti tlaku na vstupu kompresoru, který je ke kryogenerátoru připojen přes výstupní a vstupní ventil, viz obr. 2.27.

Pohyb přesuvného pístu zajišťuje malý elektromotor nebo je ovládán pomocným

pístem. Vstupní a výstupní ventil se otevírají s frekvencí asi 2 Hz. Plyn je stlačován v horní části válce, která je z vnějšku ochlazována vzduchem, poté je přesuvným pístem přetlačen přes regenerátor do spodní části válce, kde se při expanzi ochladí. V praktické realizaci je regenerátor umístěn

přímo do přesuvného pístu. Konstruují se

většinou dvoustupňové kryogenerátory, v nichž je teplý konec druhého stupně v tepelném kontaktu se studeným koncem prvního stupně. S klasickými regenerátory dosahovaly Giffordovy-McMahonovy kryogenerátoty dusíkové teploty v jednom stupni a teploty 8 - 10 K ve druhém stupni. V osmdesátých letech 20. století došlo k

výraznému pokroku ve výběru materiálů

pro regenerátory. Sloučeniny vzácných zemin (např. Er<sub>3</sub>Ni) mají výrazné maximum

tepelné kapacity v heliových teplotách a



Obr. 2.27: Schéma Giffordova-McMahonova kryogenerátoru [33].

mohou tak lépe absorbovat teplo a zvýšit efektivnost chladícího cyklu. Současné kryogenerátory dosahují chladícího výkonu až 50 W při 50 K v prvním stupni nebo v dvoustupňovém provedení až několik wattů při teplotě 4, 2 K. S minimální tepelnou zátěží mohou chladit až na 3,5 K. Kryogenerátor je připojen k hermeticky uzavřenému kompresoru o příkonu několika kilowattů, který je zpravidla potřeba chladit protékající vodou. Pohyb přesuvného

71

#### 2.10.2 Pulzní trubice



Obr. 2.28: Schéma jednostupňové pulzní trubice.

Největšího pokroku bylo v posledním desetiletí dosaženo ve vývoji pulzních trubic. Tyto kryogenerátory již neobsahují žádný pohyblivý element. Schéma jednostupňové pulzní trubice je na obr. 2.28. Připojují se obvykle ke stejnému typu kompresoru jako

Giffordovy-McMahonovy kryogenerátory pomocí tlakových flexibilních hadic, vstupní a výstupní ventily se ovádají zpravidla rotačním šoupátkem s podobnou frekvencí kolem 2 Hz. Ke kompresi dochází na uzavřeném konci trubice, který je zvnějšku chlazen vzduchem  $(Q_h)$ . Na vstupním konci trubice dochází ke chlazení  $(Q_c)$  při expanzi. Plyn před vstupem do trubice prochází nejprve regenerátorem, kde se předchlazuje. Regenerátory z vybraných granulárních sloučenin a slitin vzácných zemin umožnily dosáhnout vynikajících parametrů těchto pulzních trubic.

Dvoustupňová trubice spojená s vodou chlazeným kompresorem s příkonem 5 kW může chladit na prvním stupni výkonem 25 W při 25 K, případně při nezatíženém prvním stupni poskytuje chladící výkon 0,5 W při teplotě 4,2 K. Minimální teplotu 2,8 K bez tepelného zatížení dosáhne tato pulzní trubice asi za 60 min [34]. Výrobce zaručuje maximální úroveň vibrací na chladící ploše nižší než  $10^{-2}$ g, což může vyhovět i pro řadu citlivých experimentů. V poslední době se konstruují i rozpouštěcí refrigerátory, které pracují bez kryogenních kapalin, v nichž chlazení z pokojové teploty



Obr. 2.29: Teplota vodivostních elektronů v Cu v tunelové struktuře SINIS v závislosti na přiloženém napětí [36].

zprostředkují právě pulzní trubice. Jsou nabízeny i supravodivé solenoidy bez použití kryogenních kapalin (angl. *cryogen free*), které jsou chlazené pulzními trubicemi. Jejich počáteční ochlazení trvá asi 24 hodin [35].
#### 2.10.3 Pevnolátkové chladiče

Rozvoj nanolitografie tunelových struktur v posledních letech umožnil konstrukci mikrorefrigerátorů pracujících při nízkých teplotách pod 1 K. Je-li na tunelový přechod mezi normálním kovem N a supravodičem S oddělený izolátorem I (struktura NIS, viz kapitoly 13, 16 a 20) přiloženo napětí V menší než odpovídá šířce  $\Delta$  zakázaného pásu supravodiče, z normálního kovu budou přecházet pouze "horké" elektrony (angl. *hot electrons*). Poněvadž jsou vodivostní elektrony velmi slabě vázané s fonony, lze elektrony v kovu ochladit pod teplotu mřížky. Maximální chladící výkon tunelového přechodu  $\dot{Q}_{max}$  je dán výrazem [36]:

$$\dot{Q}_{\rm max} \approx 0.6 \; \frac{\Delta^{1/2}}{e^2 R_{\rm T}} \; (k_{\rm B} T_{\rm e})^{3/2} \; ,$$
 (2.17)

kde  $R_{\rm T}$  je odpor tunelového přechodu v normálním stavu,  $T_{\rm e}$  je teplota elektronů v normálním kovu. V symetrické tunelové struktuře SINIS (viz kapitola 16), kde měď byla použita jako normální kov a jako supravodič hliník ( $\Delta \sim 180 \ \mu {\rm eV}$ ), bylo možné dosáhnout ochlazení elektronů z 300 mK na 100 mK, viz obr. 2.17. Střední normální prodlouženou elektrodou N, která je izolovaná dielektrickou membránou, lze na mikrometrové vzdálenosti chladit další elektronické struktury. Chladící jev byl prokázán také na tunelové struktuře SIS (dvou různých supravodičů oddělených izolantem) a SmS, kde dochází k tunelování nositelů náboje mezi polovodičem a supravodičem, oddělených Schottkyho bariérou.

### 2.11 Literatura

- [1] A. Beiser, Úvod do moderní fyziky, Academia Praha (1978).
- [2] T. J. Quinn, Temperature, Academic Press London (1990).
- [3] CIPM, Procès verbaux du Comité international des Poids et Mesures 78<sup>e</sup> session (1989).
- [4] CCT 90 Supplementary information for the ITS-90, BIPM Sèvres (1990).
- [5] M. Durieux, D. N. Astrov, W. R. G. Kemp, C. A. Swenson, *Metrologia* 19, 57 (1979).
- [6] M. Rotter, Fyzikální základy a technika nízkoteplotního experimentu, SPN Praha (1982).
- [7] J. Jelínek, Z. Málek, Kryogenní technika, SNTL Praha (1982).
- [8] R. L. Rusby, M. Durieux, A. L. Reesink, R. P. Hudson, G. Schuster, M. Kühne, W. E. Fogle, R. J. Soulen, E. D. Adams, J. Low Temp. Phys. 126, 633 (2002).
- [9] S. Schöttl, R. Rusby, H. Godfrin, M. Meschke, V. Goudon, S. Triqueneaux et al., J. Low Temp. Phys. 138, 941 (2005).
- [10] H. Nyquist, Phys. Rev. 32, 110 (1928).
- [11] J. B. Johnson, Phys. Rev. 32, 97 (1928).
- [12] F. Pobell, Matter and Methods at Low Temperatures, Springer Verlag Berlin (1992).
- [13] R. J. Soulen, W. E. Fogle, J.H. Colwell, Temperature Vol. 6, 983 (1992).
- [14] A. Kirste, D. Drung, J. Beyer, T. Shurig, J. of Physics, Conf. Series 97, 1 (2008).
- [15] L. Skrbek, J. Sebek, J. Stehno, J. Low Temp. Phys. 103, 209 (1996).
- [16] J. Engert, B. Fellmuth, K. Jousten, Metrologia 44,40 (2007).

- Q. Li, C. H. Watson, R. G. Goodrich, D. G. Haase, H. Lukefahr, *Cryogenics* 26, 467 (1986);
   R. Sahul, V. Tasovski, T. S. Sadurshan, *Sensors and Actuators* A125, 358 (2006).
- [18] R.S. Šafrata, M. Koláč, J. Matas, M. Odehnal, K. Švec, J. Low Temp. Phys. 41, 405 (1980).
- [19] K. Andres, O.V. Lounasmaa, Progress in Low Temp. Phys., vol. VIII, North Holland, Amsterdam (1982).
- [20] P. Debye Ann. Phys. 81 1154 (1926); W.F. Giauque J. Am. Chem. Soc. 49 1864 (1927).
- [21] O.V.Lounasmaa, Experimental principles and methods below 1 K, Academic Press, London, New York (1974).
- [22] W. Hsu, D. Pines, J. Stat. Phys. 38, 273 (1985); D.O. Edwards, M.S. Pettersen, J. Low Temp. Phys. 87, 473 (1992); S. Yorozu et al., Phys. Rev. B 45, 12942 (1992).
- [23] G.-H. Oh et al., J. Low Temp. Phys. 95, 525 (1994).
- [24] E. Pentti, Dilute helium mixtures at low temperatures: properties and cooling methods, PhD Thesis, Helsinki University of Technology, Finland (2009).
- [25] J. Vepřek, Elektrická měření nízkých teplot, SNTL, Praha (1977).
- [26] http://www.lakeshore.com/.
- [27] J. Matricon, G. Waysand, La guerre du froid, Editions du Seuil, Paris (1994).
- [28] D. van Delft, Heike Kamerlingh Onnes and the quest for cold, KNAW, Amsterdam (2007).
- [29] J. P. Kauppinen, J. P. Pekola, Microel. Eng. 41/42, 503 (1998); E. Isosaari, T. Holmqvist et al., Eur. Phys. J. Special Topics 172, 323 (2009).
- [30] R. S. Šafrata a kol., Fyzika nízkých teplot, Mafyzpress, Praha (1998).
- [31] L. Spietz, K. W. Lehnert, I. Siddiqi, R. J. Schoelkopf, Science 300, 1929 (2003); L. Spietz,
   R. J. Schoelkopf, P. Pari, Appl. Phys. Lett. 89, 183123 (2006).
- [32] T. M. Flynn, Cryogenic Engineering, CRC Press, Boca Raton (2005).
- [33] A. J. Croft, Cryogenic laboratory equipment, Plenum Press, New York (1970).
- [34] http://www.cryomech.com/ .
- [35] http://www.cryogenic.co.uk .
- [36] M. M. Leivo, A. J. Manninen, J. P. Pekola, *Appl. Supercond.* 5, 227 (1998); A. V. Timofeev,
   M. Helle, M. Meschke, M. Möttönen, J. P. Pekola, *Phys. Rev. Lett.* 102, 200801 (2009).

# 3 Vlastnosti normálneho kvapalného <sup>3</sup>He

P. Skyba

Hélium je po vodíku druhým najľahším prvkom. Základne fyzikálne vlastnosti [1, 2] jeho bežného izotopu <sup>4</sup>He sme čiastočne opísali v kapitole 2, keďže sme ich potrebovali pre vysvetlenie metód dosahovania nízkych teplôt. Supratekutosť <sup>4</sup>He bude diskutovaná v kapitole 5. Párny počet nukleónov v jadre a párny počet elektrónov v elektrónovom obale vedie k celočíslenému spinu atómu a súbor atómov <sup>4</sup>He je preto bozonovým plynom. Okrem <sup>4</sup>He však v prirode existuje ešte vzácnejší izotop hélia : <sup>3</sup>He [3] – na 10 000 atómov <sup>4</sup>He pripadá jeden atóm <sup>3</sup>He. Chýbajúci neutrón v jadre atómu znamená narušenie symetrie a atóm <sup>3</sup>He je časticou s poločíselným spinom - fermiónom. Súbor atómov <sup>3</sup>He tak podlieha Fermiho-Diracovej štatistike.

 ${}^{3}$ He sa produkuje ako vedľajší produkt v jadrových reaktoroch: izotop líthia  ${}^{6}_{3}$ Li bombardovaním neutrónmi sa rozpadne na trícium a  ${}^{4}$ He:

$${}^{6}_{3}\mathrm{Li} + {}^{1}_{0}n \longrightarrow {}^{3}_{1}\mathrm{H} + {}^{4}_{2}\mathrm{He} .$$

$$(3.1)$$

Plynné trícium sa potom odseparuje od <sup>4</sup>He ohrevom zmesi plynov v paládiovej trubici, ktorá je priechodzia pre atómy trícia a nie pre atómy <sup>4</sup>He. Nakoniec sa trícium  $\beta$ -rozpadom s poločasom 12.5 roka rozpadá na <sup>3</sup>He podľa reakcie:

$${}^{3}_{1}\mathrm{H} \longrightarrow {}^{3}_{2}\mathrm{He} + {}^{0}_{-1}e + \nu .$$
 (3.2)

<sup>3</sup>He je najľahším z inertných plynov a jeho atómy sú charakterizované sférickou symetriou, medzi ktorými pôsobia slabé van der Waalsove sily. Potenciálnu energiu pôsobiacu medzi atómami <sup>3</sup>He možno v dobrej aproximacií vyjadriť v tvare Lennardovho-Jonesovho potenciálu:

$$\phi(r) \approx \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$
(3.3)

kde  $\sigma$  je rozmer atómu a  $\epsilon$  je väzbová energia pri T = 0 K. Keď súbor atómov <sup>3</sup>He chladne, van der Waalsove sily pôsobiace medzi atómami zmenšujú vzdialenosť medzi týmito atómami, kým nevytvoria viazaný stav. Na základe odchyliek od Boyleovho zákona sa dajú experimentálne odhadnúť hodnoty  $\sigma$  a  $\epsilon$  a pomocou týchto hodnôt je potom možno spočítať molárny objem. Molárne objemy ťažších inertných plynov sú v dobrom súhlase s teoretickými predoveďami (napríklad pre argón je molárny objem 24 cm<sup>3</sup>). Na základe takto získaných hodnôt  $\sigma$  a  $\epsilon$  pre hélium jeho molárny objem vychádza asi 12 cm<sup>3</sup>, čiže objem menší ako molárny objem argónu, keďže atómy hélia sú menšie. Avšak opak je pravdou.

Či už <sup>4</sup>He alebo <sup>3</sup>He sa za normálneho tlaku skvapalnia pri najnižších teplotách vôbec: 4.21 K (<sup>4</sup>He) a 3.19 K (<sup>3</sup>He) a zostávajú kvapalnými až do najnižšie dosiahnuteľných teplôt. Na vytvorenie tuhej fázy, v obidvoch prípadoch, je potrebné

aplikovať tlak: 2.5 MPa pre <sup>4</sup>He a 3.45 MPa pre <sup>3</sup>He, pričom molárne objemy týchto tuhých fáz sú oveľa väčšie než vychádza z vyššie zmienenej teoretickej predpovede: 21 cm<sup>3</sup> pre <sup>4</sup>He a 25 cm<sup>3</sup> pre <sup>3</sup>He. Aby molárny objem tuhých fáz hélia bol rovnaký ako teóriou predpovedaný objem (t.j. 12 cm<sup>3</sup>), je potrebné aplikovať tlak 110 MPa v prípade <sup>4</sup>He a 140 MPa v prípade <sup>3</sup>He.

Z nezhody medzi klasickou teóriou predpovedanými hodnotami a experimentálne určenými hodnotami je zrejmé, že klasická teória nepostihuje všetky fyzikálne vlastnosti <sup>3</sup>He a <sup>4</sup>He. Podľa klasickej teórie pri nenulovej teplote každý atóm vykonáva malé kmity okolo svojej rovnovážnej polohy, amplitúda ktorých klesá s klesajúcou teplotu. Pri teplote blízkej absolútnej nule tieto kmity nakoniec vymiznú, následkom čoho by všetky látky mali byť v tuhom skupenstve. Kvantovo-mechanické riešenie malých kmitov - kmitov harmonického oscilátora plynúce z riešenia Schrödingerovej rovnice ukazuje, že energia základného stavu tohto oscilátora (energia nulových kmitov) bude nezávislá na teplote a nadobúda hodnotu  $\frac{1}{2}h\nu_0$ , kde h je Planckova konštanta a  $\nu_0$  je základná frekvencia kmitov. Keďže  $\nu_0 \sim (1/m)^{1/2}$ , kde m je hmotnosť oscilujúceho atómu, je zrejmé, že najväčšiu energiu nulových kmitov budú mať najľahšie atómy, pričom veľkosť molárneho objemu týchto atómov bude závisieť na pomere veľkosti energie nulových kmitov a väzbovej energii pôsobiacej medzi týmito atómami.



Obr. 3.1: Molárne objemy kryštálov v de Boerom redukovaných jednotkách  $V_0^*$  ako funkcia Brogleiho vlnovej dĺžky  $\lambda^*$ . Závislosť jasne dokazuje nárast molárneho objemu u ľahších kryštálov inertných plynov v dôsledku kvantovej expanzie.

hadli, že molárny objem <sup>3</sup>He by mal byť okolo 27 cm<sup>3</sup>, čo bola hodnota veľmi blízka

3

Iný spôsob určenia molárného objemu hélia, ktorý demonštruje kvantové vlastnosti týchto atómov, bol urobený de Boerom a Lunbeckom už v roku 1948 (dokonca pred tým, než bol tento objem experimentálne zmeraný). Použili parametre Lennardovho-Jonesovho potenciálu pre dovtedy známe inertné plyny a vodík (viď. rovnica (3.3)) s tým, že pomocou týchto parametrov modifikovali de Broglieho vlnovú dĺžku pohybujúceho sa atómu  $\lambda = h/p$ , kde p je hybnosť atómu. Redukovaný molárny objem skondenzovaného plynu bol vyjadrený ako:

$$V_0^* = \frac{V_0}{N_A \sigma^3} , \qquad (3.4)$$

kde  $N_A$  je Avogadrovo číslo. Potom vykreslením závislosti tohto redukovaného molárneho objemu na redukovanej de Broglieho vlnovej dĺžke vyjadrenej ako  $\lambda^* = \lambda/\sigma = h/(\sigma\sqrt{m\epsilon})$  odexperimentálne zistenej hodnote 25 cm<sup>3</sup>. Je zrejmé, že kvantová energia nulových kmitov atómov hélia je zodpovedná za výrazné (až dvojnásobné) zvýšenie molárneho objemu, či už kvapalnej alebo tuhej fázy v porovnaní s klasickou predpoveďou. Ako dôsledok, tuhé a kvapalné fázy izotopov hélia sú označované ako kvantové kryštály, respektíve kvantové kvapaliny.

Pod teplotou 3.3 K slabé priťažlivé Van der Waalsove sily začnú medzi sebou viazať atómy <sup>3</sup>He a hélium-3 prejde pri atmosferickom tlaku a teplote 3.19 K do kvapalného stavu. Pri teplotách o niečo nižších ako je Fermiho teplota <sup>3</sup>He ( $T_{\rm F} \sim 1$  K) je kvapalné <sup>3</sup>He svojimi vlastnosťami podobné normálnemu degenerovanému Fermiho plynu. Pri teplotách  $T \ll T_{\rm F}$  sa kvapalné <sup>3</sup>He chová ako silne interagujúci plyn, v ktorom sa prejavuje Fermiho-Diracova štatistika v makroskopickej mierke. V úvodnej kapitole sme ukázali, že aj systém silne interagujúcich fermionov zvyčajne možno prekvapujúco dobre opísať pomocou aproximácie ideálneho Fermiho plynu. Pozrime teraz, kam až nás takýto zjednodušený popis dovedie v konkrétnom prípade kvapalného <sup>3</sup>He.

## 3.1 Kvapalné <sup>3</sup>He ako ideálny degenerovaný Fermiho plyn ?

Predpokladajme, že kvapalné <sup>3</sup>He máme uzavreté v objeme  $V = L^3$  v tvare kocky s hranou L, a že sa chová ako ideálny Fermiho plyn, čiže s disperznou reláciou  $\varepsilon_{\rm k} = \hbar^2 k^2/2m$ . Takýto systém častíc, každá s hmotnosťou m je v štacionárnom stave opísaný Schrödingerovou rovnicou

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\boldsymbol{r}) = \varepsilon\Psi(\boldsymbol{r}) , \qquad (3.5)$$

s riešením v tvare planárnych vĺ<br/>n $\Psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{V}}\exp^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$ . Vzhľadom na okrajové podmienky častice <sup>3</sup>He môžu mať vlnové čísla (a teda energie), ktoré sú limitované počtom častíc N a rozmermi objemu<br/> $k_{\rm x}=\frac{\pi}{L}\,n_{\rm x}$ ,  $k_{\rm y}=\frac{\pi}{L}\,n_{\rm y}$ ,  $k_{\rm z}=\frac{\pi}{L}\,n_{\rm z}$ , kde<br/> $n_{\rm x},\,n_{\rm y},\,n_{\rm z}$ sú celé čísla. Na obrázku 6.6 sú schématicky znázornené stavy v reze<br/> $k_{\rm x}-k_{\rm y}$ vk–priestore. Každý bod reprezentuje jeden energetický stav, ktorý môže byť obsadený dvoma Fermiho časticami s opačnou orientáciou spinu.

Ak je N celkový počet častíc, potom tieto častice musia obsadiť energetické stavy v 1/8 objemu gule definovanom vektorom k:

$$N = 2\frac{1}{8}\frac{4}{3}\pi k^3 \left(\frac{L}{\pi}\right)^3 = \frac{k^3}{3\pi^2} V , \qquad (3.6)$$

z čoho vyplýva, že maximálna (alebo Fermiho) hodnota vlnového vektora  $k_{\rm F}$ môže byť vyjadrená ako:

$$k_{\rm F} = \sqrt[3]{\frac{3\pi^2 N}{V}} \,. \tag{3.7}$$

Táto hodnota súčasne definuje aj hodnotu Fermiho hybnosti  $p_{\rm F} = \hbar k_{\rm F}$ , hodnotu Fermiho energie  $\varepsilon_{\rm F} = p_{\rm F}^2/(2m)$  a hodnotu Fermiho teploty  $T_{\rm F} = \varepsilon_{\rm F}/k_{\rm B}$ .

Ako je zrejmé zo vzťahu (3.6), celkový počet častíc N a objem V, v ktorom sa tieto častice nachádzajú, určujú hustotu možných stavov v k-priestore. Túto hustotu energetických stavov je možno vyjadriť ako:

$$D(k)dk = \frac{dN}{dk} = V \frac{k^2}{\pi^2} dk$$
, (3.8)

Použitím disperzného vzťahu je možno vyjadriť hustotu stavov (3.8) prostredníctvom energie:

$$D(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3} V \sqrt{\varepsilon}d\varepsilon . \qquad (3.9)$$

Celková vnútorná energia súboru častíc závisí od toho, ako sú jednotlivé energetické hladiny obsadené. Pravdepodobnosť obsadenia energetickej hladiny  $\varepsilon$  pri teplote T je daná Fermi-Diracovou rozdeľovacou funkciou

$$f(\varepsilon, T) = \frac{1}{\exp[(\varepsilon - \mu)/k_{\rm B}T] + 1} , \quad (3.10)$$

kde  $\mu$  je chemický potenciál, ktorý priT = 0 K je  $\mu = \varepsilon_{\rm F}$ . Častice obsadzujú energetické hladiny s rôznou pravdepodobnosťou, pričom pri zachovani celkového počtu častícNmusí platiť:

$$N = \int_0^\infty D(\varepsilon) f(\varepsilon, T) d\varepsilon .$$
(3.11)

Pri T=0K je  $f(\varepsilon, 0) = 1$  pre všetky  $\varepsilon < \varepsilon_{\rm F}$ , na druhej strane pre  $\varepsilon > \varepsilon_{\rm F}$  je  $f(\varepsilon, 0) = 0$ , čo znamená, že pri teplote T = 0K sú všetky energetické stavy do energie  $\varepsilon_{\rm F}$  obsadené, kým stavy s $\varepsilon > \varepsilon_{\rm F}$  sú prázdne. Potom pomocou (3.11) možno vypočítať hodnotu  $\varepsilon_{\rm F}$ :

$$N = \int_0^{\varepsilon_{\rm F}} D(\varepsilon) f(\varepsilon, T) d\varepsilon \quad \to \quad \varepsilon_{\rm F} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{3\pi^2 N}{V} \right]^{2/3} . \tag{3.12}$$

Dosadením vzťahu (3.12) za enegiu vo vzťahu (3.9) dostaneme hustotu stavov na Fermiho ploche (Fermiho energii  $\varepsilon_{\rm F}$ ) v tvare

$$D(\varepsilon_{\rm F}) = \frac{m V p_{\rm F}}{\pi^2 \hbar^3} . \qquad (3.13)$$

78



nie stavov v reze  $k_{\rm x} - k_{\rm y} k$  priestoru. Každý bod reprezentuje

energetický stav s daným vlno-

vým číslom. Pás znázorňuje prí-

ratsok energetických stavov pri

rozšírení k priestoru o dk.



Obr. 3.3: Hustota stavov pre Fermiho degenerovaný plyn pri T = 0 K (vľavo) a T > 0 K (vpravo). Pri T = 0 K sú všetky stavy s energiou  $\varepsilon < \varepsilon_{\rm F}$  obsadené, kým pri teplotách T > 0 K v dôsledku tepelnej energie  $k_{\rm B}T$  vznikajú excitácie a stavy tesne pod hodnotou  $\varepsilon_{\rm F}$ sú prázdne.

všetky možné energetické stavy:

 $u = \frac{U}{V} = \int_0^\infty \varepsilon D(\varepsilon) f(\varepsilon, T) d\varepsilon = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty \varepsilon^{3/2} f(\varepsilon, T) d\varepsilon .$ (3.14)

Tento integrál nie je možné riešiť obecne analyticky, avšak v aproximácií nízkych teplôt t.j.  $T \ll T_{\rm F}$  riešenie integrálu (3.14) možno vyjadriť v tvare:

$$u = \frac{3}{5}n k_{\rm B} T_{\rm F} + \frac{\pi^2 n}{4\varepsilon_{\rm F}} (k_{\rm B} T)^2 . \qquad (3.15)$$

Použitím výrazu (3.15) je možno ľahko určiť teplotnú závislosť tepelnej kapacity:

$$C_{\rm V} = \frac{\partial u}{\partial T} = \frac{\pi^2 n}{2\varepsilon_{\rm F}} k_{\rm B} T = \gamma T . \qquad (3.16)$$

Merná tepelná kapacita je lineárnou funkciou teploty. Táto závislosť nie je prekvapujúca: hustota tepelne generovaných excitácií je úmerná teplote, keďže iba častice v rozmedzí tepelnej energie  $k_{\rm B} T$  okolo Fermiho energie  $\varepsilon_{\rm F}$  môžu byť excitované nad túto energiu a každá z týchto excitácií má energiu úmernú práve  $k_{\rm B} T$ , teda celková energia je úmerna  $T^2$ . Experimentálne meraná závislosť tepelnej kapacity <sup>3</sup>He na teplote je uvedená na obr. 3.4. Je lineárna iba v teplotnej oblasti pod 150 mK, pričom model neinteragujúcich, voľných fermionov predpokladá lineárnu závislosť od

79

Pri teplotách rôznych od nuly,

pravdepodobnosť obsadenia energetických hladín vyšších ako  $\varepsilon_{\rm F}$  rastie v dôsledku tepelnej energie  $k_{\rm B} T$  ("rozmazanie" Fermiho-Diracovej rozdeľovacej funkcie v okolí  $\varepsilon_{\rm F}$ ). Tým sa uvoľnia energetické hladiny tesne pod hodnotu  $\varepsilon_{\rm F}$  v rozmedzí  $k_{\rm B} T$  (viď. obr. 3.3). Excitácie,

teda častice majúce vyššiu ener-

giu ako je Fermiho energia  $\varepsilon_{\rm F}$ zvyšujú vnútornú energiu systému. Túto vnútornú energiu

systému atómov <sup>3</sup>He, na jed-

notku objemu, v rámci tohto

zjednodušeného priblíženia mo-

žno vypočítať vynásobiac hus-

totu obsadenia stavov a prav-

depodobnosť obsadenia tohto

stavu energiou daného stavu a preintegrovať tento výraz cez

najnižších teplôt až do  $T\approx 0.1\,T_{\rm F}\approx 0.5\,{\rm K}$ . Musíme preto zahrnúť fakt, že atómy  $^3{\rm He}$  v kvapalnej fáze budú medzi sebou interagovať. Ako sme ukázali v úvodnej kapitole, interakcia vo fermionovom plyne vedie v prvom priblížení k renomalizácii hmotnosti častíc. Interakcia medzi atómami  $^3{\rm He}$  v kvapalnej fáze "zvýši" ich hmotnosť a naviac, nenulový magnetický moment atómov $^3{\rm He}$  vedie k vzniku spinových fluktuácií pri veľmi nízkych teplotách, ktoré sa prejavia magnetickým príspevkom k tepelnej kapacite. Uvidíme, že nakoniec sú to práve spinové fluktuácie, ktoré vedú k vzniku supratekutosti  $^3{\rm He}$ .

## 3.2 Pauliho paramagnetizmus kvapalného <sup>3</sup>He

Pri dostatočne nízkych teplotách, kedy teplná energia častíc  $k_{\rm B}T$  je porovnateľná s energiou magnetickej interakcie medzi spinmi, majú tieto tendenciu k usporiadaniu. Keďže atómy <sup>3</sup>He podliehajú Fermiho-Diracovej štatistike, je pre nich energetický výhodné mať antiparalelnú orientáciu spinov t.j. odsadiť všetky základné energetické stavy (Pauliho vylučovací princíp), pretože neobsadený stav s nižšou energiou zvyšuje celkovú energiu systému. To vedie k vzájomnému priblíženiu sa interagujúcich častíc <sup>3</sup>He na veľmi malé vzdialenosti medzi nimi, čo na druhej strane zvýšuje odpudivú interakciu medzi týmito časticami (Lennardov-Jonesonov poten-



Obr. 3.4: Závislosť mernej tepelnej kapacity <sup>3</sup>He na teplote.

ciál). Pre taký interagujúci systém je energeticky výhodne "nastaviť" paralelnú orientáciu spinov s antisymetrickou orbitálnou vlnovou funkciou. Hovoríme tu o výmene tzv. virtuálneho paramagnónu. So znižujúcou sa teplotou hustota "magneticky fluktujúcich spinov" narastá, čím prispievajú k entrópii systému a tepelnej kapacite nromálneho <sup>3</sup>He. Dá sa ukázať, že teplotnu závislosť tepelnej kapacity pod 0.2 K možno vyjadriť v tvare

$$C_{\rm V} = \gamma T + \Gamma T^3 \ln \left(\frac{T}{\Theta_C}\right), \qquad (3.17)$$

kde druhý člen charakterizuje práve príspevok k tepelnej kapacite od spinových fluktuácii a  $\Theta_C$  je Curieho teplota  $\Theta_C \sim 0.46 K$ . Magnetický príspevok k tepelnej kapacite je asi 20% pri teplote 0.1 K a s klesajúcou teplotou rastie.

Veľkosť magnetického momentu  $\mu_{\rm m}$  spojeného s jadrovým spinom <sup>3</sup>He častíc je vyjadrená ako  $\mu_{\rm m} = \hbar \gamma_{\rm P}/2$ , kde  $\gamma_{\rm P}$  je gyromagnetický pomer. Nenulovosť spinu <sup>3</sup>He častíc je dôvodom, že táto kvapalina sa bude vyznačovať aj magnetickými vlastnosťami. Priebeh teplotnej závislosti susceptibility je znázornený na obr. 3.5. Ako je

Paulino paramagnetizmus	kvapaineno ° He	5.2
-------------------------	-----------------	-----

vidieť, pri vyšších teplotách sa susceptibilita kvapalného <sup>3</sup>He spĺňa Curieho zákon (~  $T^{-1}$ ), avšak pri nízkych teplotách je teplotne nezávislá. Táto vlastnosť Fermiho plynu nezávislosť susceptibility na teplote súvisí ako (analogicky s chovaním sa <sup>3</sup>He častíc aj elektrónov v kovoch) je vo fyzike je známa ako Pauliho susceptibilita.



Obr. 3.5: Susceptibilita <sup>3</sup>He normalizovaná na jej hodnotu  $\chi_0$ pri nízkych teplotách meraná pri tlaku 0.5 bar.

Fyzikálny princíp Pauliho susceptibility je znázornený na obr. 3.6. Podstata teplotnej nezávislosti susceptibility pre častice <sup>3</sup>He pri nízkych teplotách spočíva v Pauliho vylučovacom princípe, ktorý hovorí, že častice s poločíselným spinom môžu obsadzovať ten istý energetický stav, avšak s opačnou orientáciou spinu. Takto sa na rozdelenie (rozdeľovaciu funkciu) <sup>3</sup>He častíc v k-priestore možno dívať ako na dvojkomponentný systém: jeden so spinom +1/2 a druhý so spinom -1/2 (pozri obr. 3.6). Ak aplikujeme vonkajšie magnetické pole (obr. 3.6), zmeníme tým energetický stav jednotlivých podsystémov o  $\pm \mu_{\rm m} B$ . Týmto sa zmení obsadenosť: kým v dôsledku minimalizácie energie obsadenosť podsystému so spinom 1/2 vzrastie, obsadenosť podsystému so spinom -1/2 sa zníži. Pretože systém <sup>3</sup>He častíc si zachováva

rovnakú Fermiho energi<br/>u $\varepsilon_{\rm F}$ , výsledkom je generácia nenulového magnetického momentu od "prebytku" častíc, ktoré obsadili voľné stavy v blízkosti<br/> Fermiho energie vytvorené posunutím celkovej energie systému aplikovaným magnetickým poľom. Takto počet častíc obsadzujúci tieto voľné stavy nebude ovplyvňovaný tepelnými flukutáciami a ako dôsledok, Pauliho susceptibilit<br/>a $\chi_{\rm P}$  bude prakticky teplotne nezávislá. Z matematického hľadiska je magnetizáciu možno vyjadriť ako

$$M = \chi_{\rm P} B = \mu_{\rm m} \int_{-\infty}^{\infty} f(\varepsilon, T) \left[ D(\varepsilon + \mu_{\rm m} B) - D(\varepsilon - \mu_{\rm m} B) \right] d\varepsilon , \qquad (3.18)$$

kde  $D(\varepsilon \pm \mu_{\rm m}B)$  predstavuje hustotu stavov pre podsystém so spinom +1/2 respektíve -1/2. Vzhľadom na vlastnosti Fermiho-Diracovej rozdeľovacej funkcie, ktorú v limite  $T \to 0$  môžme nahradiť jednotkou ( $f(\varepsilon, 0) = 1$ ), integráciu možno previesť len cez energie od 0 po energie  $\varepsilon_{\rm F} \pm \mu_{\rm m}B$  a za rozdeľovaciu funkciu dosadiť výraz (3.9). Takto dostaneme

$$M = \mu_{\rm m} \Gamma \int_0^{\varepsilon_{\rm F} + \mu_{\rm m} B} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon - \mu_{\rm m} \Gamma \int_0^{\varepsilon_{\rm F} - \mu_{\rm m} B} \varepsilon^{1/2} d\varepsilon , \qquad (3.19)$$

kde hodnota  $\Gamma$  je zrejmá z výrazu (3.9). Po integrácii

$$M = \mu_{\rm m} \Gamma \left( (\varepsilon_{\rm F} + \mu_{\rm m} B)^{3/2} - (\varepsilon_{\rm F} - \mu_{\rm m} B)^{3/2} \right) .$$
 (3.20)

Pretože $\mu_{\rm m}B\ll\varepsilon_{\rm F}$ , výraz upravíme vybratím $\varepsilon_{\rm F}$  pred zátvorky a obidva mocninové členy  $(1\pm\mu_{\rm m}\,B/\varepsilon_{\rm F})^{3/2}$ rozvinieme do radu. Po krátkej úprave pre magnetický moment dostaneme

$$M = 2\,\mu_{\rm m}^2 \Gamma \sqrt{\varepsilon_{\rm F}} B \ . \tag{3.21}$$

Takto Pauliho susceptibilitu možno vyjadriť ako

$$\chi_{\rm P} = 2\,\mu_{\rm m}^2 \Gamma \sqrt{\varepsilon_{\rm F}} = 2\,\mu_{\rm m}^2 D(\varepsilon_{\rm F}) \,. \tag{3.22}$$

### 3.3 Tranšportné vlastnosti kvapalného <sup>3</sup>He

Tranšportné vlastnosti <sup>3</sup>He ako viskozita, difúzia a tepelná vodivosť sú zviazané s rýchlosťou šírenia sa (pozdĺžného) zvuku v tejto kvapaline. Zvuková vlna je prostredím šíriaca sa zmena tlaku (alebo zmena hustoty energie), pričom budeme predpokladať, že entrópia S sa nemení, zostáva



Obr. 3.6: Fyzikálny princíp Pauliho paramagnetizmu.

konštantná. Potom tlak P bude iba funkciou hustoty $\rho.$ Dá sa ukázať, že rýchlosť zvuku $c_{\rm S}$ možno vyjadriť v tvare

$$c_{\rm S}^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_{\rm S} = \frac{V}{m} \left(\frac{\partial P}{\partial N}\right)_{\rm S,V} , \qquad (3.23)$$

kde za $\rho$ sme dosadili <br/> mN/V. Hodnotu $\partial P/\partial N$ obdržíme z rovnice termodynamickej rovnováh<br/>y $d\varepsilon = T \, dS - P \, dV + \mu \, dN$ , ktorá je totálnym diferenciálom. Keďže entrópi<br/>aSsa zachováva, potom

$$\frac{\partial P}{\partial N} = -\frac{\partial \mu}{\partial V} \,. \tag{3.24}$$

Chemický potenciál  $\mu$  je funkciou pomer<br/>uN/V, potom po malej matematickej úprave máme

$$\frac{\partial \mu}{\partial V} = -\frac{N}{V} \frac{\partial \mu}{\partial N} . \tag{3.25}$$

Dosadením vzťahu (3.25) do vzťahu (3.24) a následne do vzťahu (3.23) pre rýchlosť zvuku  $c_{\rm S}$ dostaneme

$$c_{\rm S}^2 = \frac{N}{m} \frac{\partial \mu}{\partial N} \ . \tag{3.26}$$

Na Fermiho ploche, chemický potenciál  $\mu = \varepsilon_{\rm F}$ , kde  $\varepsilon_{\rm F} = \hbar^2 k_{\rm F}^2 / (2m)$  a  $k_{\rm F}$  je dané vzťahom (3.7). Derivovaním  $\varepsilon_{\rm F}$  podľa N pre rýchlosť zvuku máme

$$c_{\rm S}^2 = \frac{p_{\rm F}^2}{3m} \,.$$
 (3.27)

Zvuk sa šíri prostredníctvom zrážok jednotlivých častíc <sup>3</sup>He. Počet častíc (alebo excitácií), ktoré sa podieľajú na zrážkach je úmerný tepelnej energii  $k_{\rm B}T$ . Počet voľných stavov je daný tiež veľkosťou tepelnej energie  $k_{\rm B}T$ . Frekvencia zrážok bude tým väčšia, čím väčší počet excitácií sa bude na nich podielať a čím väčšia bude hustota voľných stavov t.j.  $(k_{\rm B}T)^2$ . Ak zadefinujeme relaxačný čas  $\tau$  ako čas, ktorý je nepriamo úmerný frekvencii zrážok dostaneme  $\tau \sim T^{-2}$ . Tento relaxačný čas vystupuje vo všetkých parametroch charaktrizujúcich transportné vlastnosti <sup>3</sup>He ako sú viskozita, tepelná vodivosť či difúzia. Pretože rýchlosť pohybu excitácií v je v podstate rovná Fermiho rýchlosti  $v_{\rm F}$ , ktorá je teplotne nezávislá, tak napríklad pre viskozitu môžme, na základe jednoduchej teórie transportu ( $\eta \sim \rho \tau v^2$ ) obdržať vzťah

$$\eta \sim T^{-2} . \tag{3.28}$$

Podobne pre tepelnú vodivosť

$$\lambda = \frac{1}{3}\rho\tau v^2 C \approx T^{-1} , \qquad (3.29)$$

keďžeCje tepelná kapacita daná vzťahom <br/>  $C=\gamma T($ pozri vzťah(3.15)).Nakoniec pre koeficient spinovej difúzie

$$\lambda = \frac{1}{3}\tau v^2 \propto T^{-2} . \tag{3.30}$$

Záverom tejto časti je potrebné poznamenať, že vyššie uvedené fyzikálne závery platia pre degenerovaný Fermiho plyn a pre <sup>3</sup>He sú aplikovateľné len pri vyšších teplotách. Ak kvapalné <sup>3</sup>He ochladíme na teploty pod 50 mK, s klesajúcou teplotou magnetická interakcia medzi <sup>3</sup>He časticami sa zosiluje a z teoretického hľadiska je tento silne interagujúci plyn veľmi dobre opísaný fenomenologickou teóriou Landaua.

## **3.4** Landauova teória kvapalného <sup>3</sup>He

V Landauovej teorii [4, 5] je tento silne intragujúci fermionový plyn (Fermiho kvapalina) nahradený slabo interagujúcim plynom a interakcie medzi atómami <sup>3</sup>He sú započítané ako ich zvýšená, efektívna hmotnosť týchto atómov, tzv. kvázičastíc, pričom počet kvázičastíc je totožný s počtom atómov <sup>3</sup>He v objeme V. Ďalším predpokladom tejto teórie je, že medzi pôvodným energetickým spektrom excitácií degenerovaného ideálneho Fermiho plynu a silne interagujúcim plynom je jednoznačná súvislosť: počet energetických hladín bude rovnaký, avšak obsadenie (pravdepodobnosť obsadenia)  $n_i$  každej z energetických hladín  $\varepsilon_i$  bude závisieť od obsadenia

ostatných hladín. Celkovú energiu kvázičastíc ${}^{3}\mathrm{He}$ potom nebude možno vyjadriť ako

$$\varepsilon = \sum_{i} n_i \varepsilon_i , \qquad (3.31)$$

ale bude nahradená zložitejšou distribučnou (rozdeľovacou) funkciou  $n_{\rm P}$ . Na tomto mieste je potrebné poznamenať, že aj v prípade Fermiho kvapaliny bude touto distribučnou funkciou Fermiho-Diracova funkcia, avšak na rozdiel od vyššie používanej Fermiho-Diracovej funkcie  $f(\varepsilon, T)$  (vzťah (6.14)), kde energia  $\varepsilon$  bola nezávislou veličinou, v prípade Fermiho kvapalín energia  $\varepsilon$  bude funkciou obsadenia  $n_{\rm P}$ . Túto Fermiho-Diracovu funkciu budeme v ďalšom označovať ako

$$n_{\rm P}(\varepsilon_{\rm P}) = \frac{1}{\exp\left[(\varepsilon_{\rm P} - \mu)/k_{\rm B}T\right] + 1} , \qquad (3.32)$$

pričom energia kvázičastice s hybnosťou (disperzný zákon) $p, \varepsilon_{\rm P} = \varepsilon_{\rm P}(n_1, n_2...).$ 

V súbore N Fermiho častíc, pri teplote T = 0 K sú všetky stavy s  $p < p_{\rm F}$  obsadené, kým stavy s p > $p_{\rm F}$  sú prázdne. Hodnota Fermiho hybnosti  $p_{\rm F}$  závisí od hustoty častíc N/V ako:

$$p_{\rm F} = \hbar \sqrt[1/3]{\frac{3\pi^2 N}{V}} \; .$$

Chemický potenciál je energiou, ktorú je treba vynaložiť aby sme zvýšili počet častíc v systéme o +1, a pre základný stav s energiou  $\varepsilon_0$  daný ako:



Obr. 3.7: Energetické spektrum degenerovaného Fermiho plynu a Fermiho kvapaliny.

$$\mu = \frac{\partial \varepsilon}{\partial N} = \varepsilon_0 (N+1) - \varepsilon_0 (N) . \qquad (3.33)$$

Keďže  $\varepsilon_0(N + 1)$  závisí od  $\varepsilon_0(N)$ , pridaním ďalšej častice, táto častica musí mať energiu  $\varepsilon_{\rm F}$  a hybnosť  $p_{\rm F}$  (dodáme ju na Fermiho plochu), a tak chemický potenciál  $\mu$  bude:

$$\mu = \frac{p_{\rm F}^2}{2m} = \varepsilon_{\rm F} \ . \tag{3.34}$$

Generácia excitácií zo základného stavu, či už pri nulovej teplote alebo pri nízkych teplotách, znamená vytvorenie istého počtu neobsadených energetických hladín (stavov) s hybnosťou | p |<|  $p_{\rm F}$  | a toho istého počtu excitovaných častíc s | p >|  $p_{\rm F}$ . Ak  $n_{\rm P}(0)$  vyjadruje rovnovážnu distribúciu (rozdelenie) častíc t.j. Fermi-Diracovu rozdeľovaciu funkciu, potom rozdeľovacia funkcia excitovaného stavu je

$$n_{\rm P}(T) = n_{\rm P}(0) + \delta n_{\rm P}$$
 (3.35)

a energiu tohto stavu môžno vyjadriť ako

$$\varepsilon - \varepsilon_0 = \sum_{\mathrm{P}} \frac{p^2}{2m} \delta n_{\mathrm{P}} , \qquad (3.36)$$

kde sumačný index p obsahuje aj spinovú premennú  $\sigma$ . Pre nenulovú teplotu  $\varepsilon_0$  označuje vnútornú energiu súboru častíc v rovnovážnom stave. Pretože celkový počet častíc N v súbore zostane konštantný:

$$\delta N = \sum_{\mathcal{P}} \delta n_{\mathcal{P}} = 0 , \qquad (3.37)$$

potom je výhodnejšie pracovať s konštantným chemickým potenciálom  $\mu$  než s fixným počtom častíc a excitovanie častíc potom možno vyjadriť prostredníctvom voľnej energie  $F = \varepsilon - \mu N$ . Pomocou voľnej energie možno rovnicu (3.36) prepísať ako:

$$F - F_0 = \sum_{\rm P} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu\right) \delta n_{\rm P}$$
 (3.38)

V Landauovej teórii je Fermiho kvapalina vytvorená z neinteragujúceho Fermiho plynu, tak že interakcia medzi časticami sa "adiabaticky zapne". Dôsledkom tohto predpokladu je, že rozdeľovacia funkcia rovnovážneho stavu  $n_{\rm P}$  pre Fermiho plyn a Fermi kvapalinu bude identická, avšak v dôsledku interakcie voľná energia týchto systémov bude rozdielna. Landauova teória opisuje excitácie a teda rozdiel voľných energií excitovaného a základného stavu  $F - F_0$ . Pretože tento rozdiel závisí na zmenách v obsadenosti jednotlivých energetických hladín  $\delta n_{\rm P}$ , Landau predpokladal, že tento rozdiel energií môže byť rozvinutý do Taylorovho radu, pričom v lineárnom približení sa budú brať do úvahy iba prvé dva členy:

$$F - F_0 = \sum_{\mathbf{P}} \left( \varepsilon_{\mathbf{P}}^0 - \mu \right) \delta n_{\mathbf{P}} + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{p}'} f_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta n_{\mathbf{P}} \delta n_{\mathbf{p}'} , \qquad (3.39)$$

kde $\varepsilon_{\rm P}^0$  <br/>a $f_{\rm pp'}$  sú formálne rozvojové koeficienty radu. Energia kvázič<br/>astice je potom definovaná ako

$$\delta F = \sum_{\mathbf{P}} \left( \varepsilon_{\mathbf{P}} - \mu \right) \delta n_{\mathbf{p}} . \qquad (3.40)$$

Porovnaním rovnice (3.40) s rovnicou (3.38) je energia kvázičastice:

$$\varepsilon_{\rm P} = \varepsilon_{\rm P}^0 + \sum_{\rm P} f_{p \, p'} \, \delta n_{\rm P} \, . \tag{3.41}$$

Pretože energia kvázičastice  $\varepsilon_{\rm P}$  určuje pravdepodobnosť obsadenia tohto energetického stavu prostredníctvom Fermiho-Diracovej rozdeľovacej funkcie (3.32), pričom  $\delta n_{\rm p} = n_{\rm P}(T) - n_{\rm P}(0)$ , ide o navzájom viazané rovnice pre určenie  $\varepsilon_{\rm P}$  a  $n_{\rm P}(T)$ . Prefaktor 1/2 z rovnice (3.39) sa vykráti, pretože daná zmena distribúcie  $\delta n_{\rm P}$  môže nastať pri "sumácii" cez p alebo cez p'. Výraz pre energiu kvázičastice (3.41) vyjadruje, že akákoľvek zmena v rozdelení (distribúcii)  $\delta n_{\rm P}$  je spojená so zmenou energie kvázičastice. Táto zmena energie je v dôsledku prítomnosti intrakcie medzi časticami, ktorá je vyjadrená prostredníctvom funkcie  $f_{\rm pp'}$ . Naviac, vzťah (3.41) vyjadruje, že ak je excitovaná iba jedna kvázičastica, tak táto kvázičastica má energiu  $\varepsilon_{\rm P}^0$ . Hodnota tejto energie môže byť použitá na definovanie efektívnej hmotnosti kvázičastice (excitácie) na Fermiho ploche

$$\varepsilon_{\rm P}^0 = \frac{p^2}{2m^*} \,.$$
(3.42)

Hustota stavov na Ferniho ploche pre fermionovú kvapalinu je daná známym vzťahom (pozri vzťah (3.13)), pričom hmotnosť m bude nahradená efektívnou hmotnosťou  $m^*$ 

$$D(\varepsilon_{\rm F}) = \frac{m^* p_{\rm F}}{\pi^2 \hbar^3} . \qquad (3.43)$$

Použitím vzťahu (3.43) pre tepelnú kapacitu kvázičastíc možno odvodiť závislosť

$$C = \frac{m^* p_{\rm F} V}{3\hbar^3} k_{\rm B}^2 T . aga{3.44}$$

Ako je zrejmé zo vzťahu (3.44), meraním závislosti merného tepla na teplote je možno experimentálne určiť hodnotu efektívnej hmotnosti  $m^*$ .

Ďalej je zrejmé zo vzťahu (3.41), že interakcia medzi kvázičasticami je vyjadrená členom  $f_{pp'}$ . S vyjadrením aj spinových premenných tento člen možno vyjadriť ako:

$$f_{\mathbf{p}\sigma,\mathbf{p}'\sigma'} = f^s_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} + \frac{1}{2}f^a_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}\sigma\cdot\sigma' . \qquad (3.45)$$

kde  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  je vektor Pauliho matíc. Vzťah (3.45) je zovšeobecneným výrazom pre interakciu medzi spinmi, ktorá závisí od ich vzájomnej orientácie vyjadrenej maticami  $\sigma$  a  $\sigma'$ , avšak nezávislej na ich vzájomnej orientácii vzhľadom k  $\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p'}$ . Pretože normálne hélium-3 je izotrópnou kvapalinou a teória uvažuje len kvázičastice - excitácie s hybnosťami  $\boldsymbol{p}$  a  $\boldsymbol{p'}$  blízkymi k Fermiho hybnosti  $p_{\rm F}$ , funkcie  $f_{\rm pp'}^s$  a  $f_{\rm pp'}^a$  sú funkciami uhla  $\theta$  medzi  $\boldsymbol{p}$  a  $\boldsymbol{p'}$ . Funkcie  $f_{\rm pp'}^s$  a  $f_{\rm pp'}^a$  môžu byť rozvinuté do radu pomocou Legendrových polynómov  $P_{\rm l}(\cos \theta)$ . Vynásobením funkcií  $f_{\rm pp'}^s$  a  $f_{\rm pp'}^a$ 

hustotou stavov $D(\varepsilon_{\rm F})$ na Fermiho ploche koeficienty v Legendrových polynómoch budú bezrozmerné

$$D(\varepsilon_{\rm F})f^s_{\rm pp'} = \sum_{\rm l} F_{\rm l}P_{\rm l}(\cos\theta) ,$$
  
$$D(\varepsilon_{\rm F})f^a_{\rm pp'} = \sum_{\rm l} Z_{\rm l}P_{\rm l}(\cos\theta) . \qquad (3.46)$$

Väčšinu fyzikálnych parametrov v normálnom kvapalnom <sup>3</sup>He možno získať použitím troch základných Landauových koeficientov  $F_0, F_1$  a  $Z_0$ , pričom prvé dva koeficienty sa vzťahujú ku kvázičasticovej dynamike a posledný k spinovej a vo svojej podstate vyjadrujú či reprezentujú účinky molekulárnych polí, ktorými sú vyjadrené vzájomné interakcie medzi časticami.

Energiu kvázičastice  $^{3}\mathrm{He}$ v Landau<br/>ovej teórii možno, v zjednodušenom tvare, vyjadriť ako

$$\varepsilon_{\rm P} = p^2 / 2m^* + \sum_{\rm p'} f_{\rm S}(p,p') \,\delta n_{p'} + \mu_{\rm m} \sum_{\rm p'} f_{\rm a}(p,p') \mu_{\rm p'} \,. \tag{3.47}$$

Ak predpokladáme, že iba prvý Landau<br/>ov parameter  $Z_0$ , parameter opisujúci spinovú interakciu ovplyvňuje energiu kváziča<br/>stice, potom túto energiu možno vyjadriť ako

$$\varepsilon_{\rm P} = p^2 / 2m^* + \mu_{\rm n} \sum_{\rm p'} \frac{Z_0}{D(\varepsilon_{\rm F})} \mu_{\rm p'} = p^2 / 2m^* + \mu_{\rm m} \frac{Z_0}{D(\varepsilon_{\rm F})} M , \qquad (3.48)$$

kde $\boldsymbol{M}$ je celkový magnetický moment systému. Aplikujúc model molekulárneho poľa, výraz (3.48) možno vyjadriť ako

$$\varepsilon_{\rm P} = p^2 / 2m^* - \boldsymbol{\mu}_{\rm m} \, \boldsymbol{B}_{\rm mol} \,, \qquad (3.49)$$

kde  $\boldsymbol{B}_{mol} = -Z_0 \boldsymbol{M}/D(\varepsilon_{\rm F})$ . Celkový magnetický moment systému  $\boldsymbol{M}$ , ktorý je umiestnený vo vonkajšom magnetickom poli o indukci<br/>i  $\boldsymbol{B}$  je možno vyjadriť ako

$$\boldsymbol{M} = \chi \boldsymbol{B} = \chi_0 \left( \boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}_{\text{mol}} \right) \,. \tag{3.50}$$

Dosadením za $B_{\rm mol},$ po krátkej úprave pre susceptibilitu korigovanú na efekty Fermiho kvapaliny potom dostávame

$$\chi = \frac{\chi_0}{1 + Z_0/4} \,. \tag{3.51}$$

Člen obsahujúci koeficient  $F_0$  reprezentuje pole Hartreeho typu, ktoré je úmerné hustote častíc a tak charakterizuje kompresibilitu a rýchlosť šírenia sa zvuku. Jeho hodnota sa pohybuje medzi 10 až 100, v závislosti na tlaku v kvapaline. Preto kvapalné <sup>3</sup>He je omnoho tuhšie než odpovedajúci ideálny Fermiho plyn.

Koeficient  $F_1$  charakterizuje molekulárne pole  $A_{\text{mol}}$ , ktoré ovplyvňuje kvázičasticovú dynamiku, keďže  $P_1(\cos \theta) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}'/p_F^2$ . Ak uvažujeme iba tento člen, dostaneme:

$$\varepsilon(\boldsymbol{p}) = p^2 / 2m^* - \boldsymbol{p}\boldsymbol{A}_{\text{mol}} , \qquad (3.52)$$

$$\boldsymbol{A}_{\rm mol} = -\frac{F_1}{D(\varepsilon_{\rm F})p_{\rm F}^2} \boldsymbol{P} , \qquad (3.53)$$

kde  $P = \sum_{\mathbf{P}} p$  je celková hybnosť kvapaliny na jednotku objemu. Energia kvázičastíc však musí spĺňať Galileiho transformácie.

Uvažujme stacionárny objem kvapalného <sup>3</sup>He, ktorý obsahuje kvázičastice pohybujúce sa rýchlosťami  $v_{\rm g}(p) = p/m^*$ . Pozorovateľ pohybujúci sa rýchlosťou bude pozorovať tieto kvázičastice s rýchlosťami  $v_{\rm g} - v$  a priradí im energiu:

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = m^* (\mathbf{v}_{\rm g} - \mathbf{v})^2 / 2 = p^2 / 2m^* - p\mathbf{v} ,$$
 (3.54)

v prvom ráde v rozvoji podľa rýchlosti.

Teraz naopak, nech stacionárny pozorovateľ pozoruje kvapalinu, ktorá tečie rýchlosťou  $-\boldsymbol{v}$ . Každá kvázičastica pritom bude prenášať hmotnosť m a nie  $m^*$ , pretože kvázičastica je totožná s atómom <sup>3</sup>He. Takto každá kvázičastica má v dôsledku tečenia prídavnú hybnosť  $-m\boldsymbol{v}$  odpovedajúci toku a celková hustota toku hybnosti kvázičastíc na jednotku objemu je  $\boldsymbol{P} = Nm\boldsymbol{v}$ . Potom kvázičastica s hybnosťou  $\mathbf{p}$ , v referenčnej sústave spojenej s kvapalinou, má hybnosť  $\boldsymbol{p} - m\boldsymbol{v}$  a energiu

$$\varepsilon \left( \boldsymbol{p} \right) = \frac{\left( \boldsymbol{p} - m \boldsymbol{v} \right)^2}{2m} - \left( \boldsymbol{p} - m \boldsymbol{v} \right) \boldsymbol{A}_{\text{mol}} , \ (3.55)$$

kde

$$\boldsymbol{A}_{\rm mol} = -\frac{F_1}{D(\varepsilon_{\rm F})p_{\rm F}^2} N \, m\boldsymbol{p} \;. \tag{3.56}$$

Fermiho plocha

Obr. 3.8: Schématické znázornenie nulového zvuku - oscilácií Fermiho plochy.

dosadením za hustotu stavov (3.43) a ponechaním lineárnych členov vzhľadom k $\boldsymbol{v}$ dostaneme:

$$\varepsilon(\boldsymbol{p}) = \frac{p^2}{2m^*} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}\left(1 + \frac{F_1}{3}\right)\frac{m}{m^*} .$$
(3.57)

Je zrejmé, že ľubovoľná kvázičastica v laminárnom toku s rýchlosťou v, ktorú jej priradí stacionárny pozorovateľ, musí mať tú istú energiu ako kvázičastica v

88



stacionárnej kvapaline pozorovaná pozorovateľom, ktorý sa pohybuje rýchlosťou v. Z rovnosti výrazov (3.54) a (3.55) pre energie dostaneme:

$$\frac{m^*}{m} = 1 + \frac{F_1}{3} , \qquad (3.58)$$

čo je veľmi dobre známy vzťah pre efektívnu hmotnosť.

Je treba poznamenať, že doteraz nebola vypracovaná žiadna mikroskopická teória <sup>3</sup>He, a Landauova teória, je teóriou fenomenologickou. Napriek tomu veľmi dobre vystihuje fyzikálne vlastnosti kvapalného <sup>3</sup>He. No nie len to. Táto teória predpovedala aj excistenciu tzv. nulového zvuku pri veľmi nízkých teplotách, kedy je stredná voľná dráha kvazičastíc väčšia ako je vlnová dĺžka zvuku. V ideálnom Fermiho plyne by sa za týchto podmienok zvuk nemohol šíriť. Keďže kvapalné <sup>3</sup>He je ako Fermiho kvapalina silne interagujúcim systémom, na malú zmenu hustoty energie, systém bude reagovať kolektívne. Nulový zvuk si je možno predstaviť ako kolektívne oscilácie všetkých častíc systému, ktoré vedú k deformácií Fermiho plochy (viď. obrázok 3.8) [1].

## 3.5 Literatúra

- Ch. Enns a S. Hunklinger, Low-Temperature Physics, Springer Verlag Berlin Heidelberg (2005).
- [2] D.R. Tiley a J. Tiley, Superfluidity and Supercoductivity, Institute of Physics Publishing, 3rd Ed. (2001).
- [3] E.R. Dobbs, Helium-Three, Oxford Science Publishing (2001).
- [4] L.D. Landau, ZHETF **30**, 1058 (1956).
- [5] I. M. Chalatnikov, Teorija svěrchtěkučesti, Nauka, Moskva (1971).

# 4 Tuhé hélium

J. Nyeki

## 4.1 Kvantový kryštál

Klasický kryštál je charakterizovaný harmonickým kmitavým pohybom jeho stavebných prvkov (atómov, iónov, molekúl, atď.) okolo rovnovážnych polôh kryštálovej mriežky. Amplitúda takýchto kmitov u je malá v porovnaní so vzdialenosťou stavebných častíc  $a \gg u$  a nezávislá od kmitov najbližších susedov v kryštálovej mriežke. Klasický trojrozmerný kryštál pozostávajúci z N častíc možno preto matematicky modelovať ako súbor 3N harmonických oscilátorov. Takýto predpoklad napríklad úspešne použili Debye i Einstein pri formulácii teorií merného tepla. Pri kvantovomechanickom prístupe je predpoklad nezávislosti a malosti kmitov základom pre zavedenie kvázičastíc - fonónov.

V tejto kapitole, ktorá je venovaná tuhým fázam oboch izotopov hélia, si musíme vyššie uvedenú predstavu o kryštále výrazne upraviť a mať ju neustále na pamäti. **Amplitúda kmitov atómov hélia v kryštálovej mriežke je rádovo porov-**nateľná s ich vzdialenosťou. Vlnové funkcie jednotlivých atómov sa čiastočne prekrývajú, čo otvára možnosti prejavu kvantových vlastností na makroskopickej škále. **Hélium tvorí kvantové kryštály.** Spoločným menovateľom pre prívlastok *kvantový* je, tak ako to aj bolo v prípade kvantových kvapalín, vzájomný pomer medzi energiou kvantových nulových kmitov a energiou vzájomnej interakcie medzi atómami hélia, ktoré ako inertný plyn nevytvára žiadne chemické väzby. Na obr. 4.1 je graficky znázornený priebeh tzv. Lennardovho-Jonesovho (LJ) potenciálu opisujúceho interakciu medzi dvoma atómami inertného plynu

$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] .$$
(4.1)

Prvý, silne odpudivý člen, vyplýva z Pauliho princípu a zabraňuje vzájomnému prekryvu elektrónových obálok atómov. Druhý, tzv. van der Waalsov člen, pochádza z príťažlivej interakcie indukovaných elektrických dipólov, ktoré vznikajú zásluhou priestorovej deformácie elektrónových obálok pri približovaní sa atómov. De Boerov kvantový parameter  $\Lambda$  [17] v podstate vyjadruje pre atóm inertného plynu s hmotnostou m a energiou  $\epsilon$  pomer de Broglieho vlnovej dĺžky  $\lambda$  a parametru  $\sigma$ .

$$\Lambda \equiv \frac{\lambda}{\sigma} = \frac{\hbar}{\sigma \sqrt{m\epsilon}} . \tag{4.2}$$

Pre klasický kryštál  $\Lambda \to 0$ . Nasledujúca tabuľka názorne ilustruje ako "kvantovosť" kryštálu či kvapaliny závisí hlavne od hmotnosti atómu, t.j. od amplitúdy nulových kmitov<sup>1</sup>.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Pri tomto výklade sme použili historicky prvú de Boerovu definiciu  $\Lambda$  a ním používaný LJ potenciál. V novšej odbornej literatúre sa môžeme stretnúť s tzv. Azizovým potenciálom, ktorý je v okolí minima kvalitatívne podobný LJ potenciálu, zhoduje sa však lepšie s experimentom. Taktiež definície  $\Lambda$  sa môžu odlišovat o násobok  $\pi$  alebo  $\sqrt{\pi}$ .

# TABULKA

Prirodzene sa natíska otázka či má vôbec význam požívať pri opise tuhého hélia pojmy kryštálová mriežka, fonón, atď? Experimenty študujúce rozptyl neutrónov a röntgenových lúčov potvrdzujú, že v tuhom héliu existuje priestorovo modulovaná hustota a definovaná kryštálová mriežka. Mikroskopické teórie, ktoré úspešne opisujú tuhé hélium, predpokladajú korelovaný pohyb atómov na blízku vzdialenosť (v klasickom kryštále susediace atómy kmitajú nezávisle od seba). Formalizmus fonónov sa naďalej používa na opísanie malých excitácií kryštálu, ich spektrum je však renormalizované pod vplyvom krátkodosahových korelácií.



Obr. 4.1: Lennardov-Jonesov potenciál. Priestorová závislosť príťažlivej interakcie je charakterizovaná pomocou parametru  $\sigma$ . Dva atómy sa priťahujú (t.j.  $V(r) \leq 0$ ) v intervale vzdialeností  $\sigma \leq r \leq 3\sigma$ . Z rovnice (4.1) zároveň vyplýva, že potenciálne minimum  $V(r) = -\epsilon$  sa nachádza pri $r_0 = 1.09 \sigma$ .

Fázové diagramy tuhého <sup>3</sup>He i <sup>4</sup>He sú na obr.4.2. Obidva izotopy sa vyskytujú v troch rôznych kryštalických štruktúrach: tesne usporiadanej hexagonálnej (hcp), stredovo centrovanej kubickej (bcc) a plošne centrovanej kubickej (fcc). Príroda nám tak poskytuje šesť rôznych kvantových kryštálov. Štrukturálne rozdiely pri danej teplote a tlaku sú dôsledkom rozdielov v amplitúde nulových kmitov (hmotnosť)<sup>2</sup>. V blízkosti absolútnej nuly tuhé <sup>4</sup>He existuje len pri tlakoch vyšších ako 2,52 MPa; pre stabilizáciu tuhého <sup>3</sup>He je potrebné aplikovať tlak vyšší než 2,92 MPa. Pre tlaky nižšie než 10,0 MPa je bcc jediná stabilná fáza v tuhom <sup>3</sup>He. Vo fázovom diagrame tuhého <sup>4</sup>He dominuje v tejto oblasti tlakov hcp fáza, zatiaľ čo bcc fáza sa vyskytuje len v úzkej oblasti tlakov (~ 2, 6 - 3, 0 MPa) a teplôt (~ 1, 4 - 1, 7 K). Pre stabilizáciu fcc fáz sú potrebné veľmi vysoké tlaky P > 110 MPa <sup>3</sup>.

V nasledujúcich kapitolách sa zameriame na niektoré vybrané vlastnosti tuhého hélia, ktoré názorne ilustrujú kvantový charakter takýchto kryštálov a ktoré nemajú obdobu v klasických kryštáloch. Budeme sa orientovať hlavne na experimentálnu stránku javov, nakoľko korešpondujúce teórie sú buďto veľmi komplikované a presahujú rámec týchto skrípt, alebo ešte jednoducho neexistujú.

 $<sup>^2 \</sup>rm Rozdiely medzi vlastnosťami nízkoteplotných kvapalných fáz sú dôsledkom rozdielnej štatistiky atómov hélia (Fermiho kvapalina vs supratekuté HeII).$ 

 $<sup>^3</sup>$ Štúdium tuhého hélia pri vysokých tlakoch a pri izbovej teplote je predmetom záujmu astrofyziky. <sup>4</sup>He prechádza do tuhej (hcp) fázy pri teplote 398 K a tlaku 11,6 GPa.



Obr. 4.2: Fázové diagramy tuhého <sup>4</sup>He a <sup>3</sup>He [18]. Tieto fázové diagramy nám nielen umožňujú navzájom porovnať pri akých tlakoch a teplotách sa jednotlivá fáza nachádza, ale zároveň poskytujú aj zaujímavý pohľad na stav vedy pred 40 rokmi. Malá šrafovaná nízkoteplotná oblasť na fázovom diagrame pre <sup>3</sup>He neznamená inú kryštalografickú štruktúru, ale jednoducho oblasť, o ktorej nebol k dispozícii dostatok informácií.

## 4.2 Tuhé <sup>3</sup>He

## 4.2.1 Môže mať kryštál vyššiu entropiu než kvapalina? Pomerančukova predpoveď a chladiaca metóda.

Na obr. 4.3 je zobrazená nízkoteplotná časť rovnovážneho fázového diagramu <sup>3</sup>He. Na krivke topenia pozorujeme výrazné minimum pri teplote  $T_{\rm min} = 315$  mK a tlaku  $P_{\rm min} = 2,931$  MPa. Existencia tohto minima bola kvalitatívne predpovedaná Pomerančukom v roku 1949, skôr než bolo prvé <sup>3</sup>He sprístupnené experimentátorom<sup>4</sup>.

Pomerančukova predpoveď [13] bola založená na porovnaní entropie tuhej a kvapalnej fázy <sup>3</sup>He. V jeho jednoduchom modele boli atómy <sup>3</sup>He v tuhej fáze považované za dipóly s magnetickým momentom  $\mu_{\rm N}$ . Z odhadu energie dipól-dopólovej interakcie dvoch jadrových spinov na medziatómovej vzdialenosti *a* Pomerančuk odhadol, že jadrové spiny v tuhom <sup>3</sup>He sa začnú spontánne usporiadavať pri teplote

 $<sup>^4</sup>$ Pomerančuk sa v tom čase venoval prísne utajovanej teórii neutrónových processov v jadrových reaktoroch. Práce o héliu patrili medzi jeho "hobby" problematiky, výsledky ktorých mohol otvorene publikovať vo vedeckých časopisoch.

$$T_{\rm M} \sim \frac{\mu_{\rm N}^2}{ka^3} \sim 10^{-7} {\rm K} \;.$$
 (4.3)

Pri teplotách vyšších než teplota usporiadania  $T \gg T_{\rm M}$ , entropia tuhej fázy pozostáva z dvoch príspevkov, entropie neusporiadaných spinov  $S_{\rm s} = R \ln (2I + 1) =$  $R \ln 2$  a entropie fonónov, ktorá je však zanedbateľná pre T < 1 K. Kvapalná fáza je Fermiho kvapalina a pre T < 100 mK jej entropia klesá lineárne s teplotou  $S_1 \sim T$ . V teplotnej oblasti  $10^{-7}$ K  $\sim T_{\rm M} \ll T \sim 1$  K Pomerančuk predpovedal zdanlivo kurióznu situáciu, kedy je entropia tuhej fázy vyššia ako entropia kvapalnej fázy  $S_{\rm s} > S_1$ <sup>5</sup>. Pri vyšších teplotách, T > 1K, Pomerančuk očakával návrat k "normálnej" situácii, kedy je  $S_{\rm s} < S_1$ .

<sup>3</sup>He ako kvantová kvapalina a tiež aj kvantový kryštál sú výborne stlačiteľné. Molárny objem kvapalnej fázy  $V_{\rm l}$ je stále väčší než molárny objem tuhej fázy  $V_s$ . Rozdiel molárnych objemov <sup>3</sup>He  $V_{\rm l} - V_{\rm s}$ sa v teplotnej oblasti 40 – 350 mK pohybuje mezi 1, 20 – 1, 31 cm<sup>3</sup>/mol a pre T <40 mK je takmer konštantný a rovná sa 1, 31 cm<sup>3</sup>/mol. Použitím Classiusovej-Clapeyronovej rovnice (4.4) pre teplotnú závislosť tlaku topenia  $P_{\rm M}$ 

$$\frac{dP_{\rm M}}{dT} = \frac{S_{\rm l} - S_{\rm s}}{V_{\rm l} - V_{\rm s}} , \qquad (4.4)$$

nachádzame, že minimum krivky topenia (t.j. dP/dT = 0) nastáva práve pre prípad  $S_s = S_l$ . Negatívny sklon krivky topenia dP/dT < 0 (t.j. inverzia entropie  $S_s > S_l$ ) sa zachováva až do teplôt  $T \sim T_M$ , kde nastáva výrazný pokles  $S_s$  v dôsledku



Obr. 4.3: Horný obrázok znázorňuje teplotnú závislosť entropie tuhej a kvapalnej fázy na krivke topenia. Na dolnom obrázku je znázornená teplotná závislosť tlaku topenia hélia-3 [7]. Čiarkované čiary a body A,B a C ilustrujú jednotlivé fázy Pomerančukovej chladiacej metódy spomínané v texte.

usporiadania spinov. PreT=0 bude zas<br/>adP/dT=0 pretože $S_{\rm s}(0)=S_{\rm l}(0)=0.$  Pomerančuk upozornil na ďalšie zaujímavé dôsledky inverzie molárnych entropií tuhej a kvapalnej fázy:

 $<sup>^5</sup>$ t.j. tuh<br/>é $^3{\rm He}$  je menej usporiadané než kvapalina pri tej istej teplote a tlaku, ak považujeme entropiu za mieru neu<br/>sporiadanosti.

a) latentné teplo prechodu kvapalina - tuhá fáza  $L = T(S_l - S_s) = -RT \ln 2$  je negatívne, čo znamená, že *pri izotermickom tuhnutí sa bude pohlcovať teplo*! b) počas adiabatického stláčania ( $\Delta S = 0$ ) zmes tuhého a kvapalného <sup>3</sup>He chladne a takýto proces by mal poskytnút možnosť ochladiť tuhé <sup>3</sup>He pod teplotu 1  $\mu$ K.

Princíp Pomerančukovej chladiacej metódy je znázornený na obr. 4.3. Na začiatku procesu sa uzavretá komôrka s pružnými stenami (Pomerančukov refrigerátor) naplní *n* mólmi kvapalného <sup>3</sup>He, ochladí na štartovaciu teplotu  $T_{\rm i} < T_{\rm min}$  a adiabaticky izoluje od okolia (bod A). Tlak v komôrke sa začne zvyšovať stláčaním pružných stien. Pri dosiahnutí bodu B sa začnú vytvárať prvé zárodky tuhého <sup>3</sup>He. Ďalším adiabatickým zvyšovaním tlaku sa komôrka postupne zaplňuje tuhým <sup>3</sup>He a ochladzuje pozdlž krivky BC. Počas tohto procesu je možné zo zákona zachovania entropie určiť pri ľubovoľnej teplote T na úsečke BC (obr.4.3a) počet mólov  $n_{\rm s}$ tuhého <sup>3</sup>He v komôrke

$$n_{\rm s} = n \; \frac{[S_{\rm l}(T_i) - (S_{\rm l}(T)]]}{[S_{\rm s}(T) - (S_{\rm l}(T)]]} \;, \tag{4.5}$$

kde  $n = n_s + n_l$  a  $n_l$  je počet mólov kvapalného <sup>3</sup>He. Chladiaci výkon pri konštantnej teplote je úmerný rýchlosti tuhnutia  $\dot{n_s} = dn_s/dt$ 

$$Q_{\rm Pom} = T(S_{\rm s} - S_{\rm l}) \dot{n}_{\rm s} .$$
 (4.6)

Určitou nevýhodou tejto chladiacej metódy je, že poskytuje len jednorázové ochladenie. V bode C sa celá komôrka zaplní tuhým <sup>3</sup>He, dosiahne sa konečná teplota  $T_{\rm f}$  a chladiaci výkon je nulový, pretože  $\dot{n}_{\rm s} = 0$ . Pri nasledovnom ohriatí a dekompresii sa všetka tuhá fáza roztopí a celý proces je možné opakovať z bodu A.

Po prvýkrát bola Pomerančukova chladiaca metóda úspešne experimentálne zrealizovaná o 15 rokov neskôr, kedy Anufriev [14] ochladil <sup>3</sup>He z teploty 50 mK na teplotu asi 18 mK. Experimentálne zariadenia, ktoré používali túto metódu chladenia sa začali nazývať Pomerančukove refrigerátory. Metóda bola veľmi efektívna hlavne pri štúdiu samotného <sup>3</sup>He, kedy chladiace médium bolo zároveň aj vzorkou a nebolo potrené prekonávať Kapicov odpor (viď kapitola o nízkoteplotných vlastnosťach tuhých látok) chladiacim stupňom a samotným <sup>3</sup>He. Pomerančukov refrigerátor bol použitý aj v experimentoch, ktoré viedli k objavu supratekutého <sup>3</sup>He [15], ako je podrobne diskutované v samostanej kapitole. Užitočný prehľad praktických realizácií Pomerančukových experimentálnych komôrok s odkazmi na pôvodnú literatúru je uvedený v [19].

#### 4.2.2 Kryštalizačný teplomer

Vedci študujúci nízkoteplotné vlastnosti izotopov hélia sa často stretávajú so skeptickými otázkami typu: "Všetko čo opisujete je úchvatné, ale aké je praktické použitie Vášho výskumu?". Donedávna bola najčastejšie používaná odpoveď: "Vývoj a výroba <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He rozpúšťacieho refrigerátora". Dnes však možno jedným dychom dodať: "... a zavedenie celosvetovej nízkoteplotnej stupnice!".

V minulom storočí sa pre oblasť najnižších teplôt používala medzinárodná stupnica ITS-90 (podrobnosti viď kapitola o meraní a dosiahovaní nízkych teplôt). Táto



Obr. 4.4: Krivka topenia <sup>3</sup>He (plná čiara) a absolútna hodnota jej sklonu dP/dT (prerušovaná čiara).  $T_{\rm A}$ ,  $T_{\rm B}$  a  $T_{\rm N}$  sú teploty fixných bodov zodpovedajúcich fázovým prechodom v kvapalnej alebo tuhej fáze <sup>3</sup>He. V ľavej časti obrázku sa nachádzajú koeficienty  $a_i$  definujúce teplotnú stupnicu PLTS-2000 (4.7).

bola založená na tlaku nasýtených pár <sup>3</sup>He a <sup>4</sup>He a pokrývala teplotný interval 0,65 K < T < 5 K. Termometria pre nižšie teploty, T < 0,65 K, nebola medzinárodne zjednotená. Používali sa rôzne "lokálne" teplotné stupnice, takže pri publikovaní teplotnej závislosti nameraných veličín bolo potrebné uviesť aj definíciu teplotnej stupnice, ktorá bola použitá.

Od októbra 2000 sa situácia zmenila. Medzinárodný ústav pre miery a váhy v Paríži zaviedol pre teplotnú oblasť 0,9 mK < T < 1 K ako teplotný štandard závislosť tlaku od teploty pozdĺž krivky topenia <sup>3</sup>He. Táto teplotná stupnica sa nazýva PLTS-2000 (akronym angl. *Provisional Low-Temperature Scale*) [1].

Krivka topenia <sup>3</sup>He bola zvolená z viacerých dôvodov: pokrýva veľmi široký teplotný interval (viac ako tri rády teploty), <sup>3</sup>He je dostupné vo veľmi čistej forme a experimentálne meranie krivky topenia sa dá relatívne jednoducho zaviesť v níz-koteplotných laboratóriách na celom svete.

Pre používanie PLTS-2000 je potrebné vedieť ako s vysokou presnostou odmerať tlak v kryštalizačnom teplomere, t.j. v uzavretej komôrke zaplnenej zmesou tuhého a kvapalného <sup>3</sup>He. Teplota sa následne určí pomocou polynómu

$$P = \sum_{i=-2}^{+9} a_i T^i , \qquad (4.7)$$

kde tlak P sa udáva v MPa, teplota T v K a koeficient<br/>y $a_{\rm i}$  sú uvedené na obr. 4.4.

Veľkou výhodou PLTS-2000 je, že zároveň udáva štyri fixné body na krivke topenia (obr. 4.6), ktoré umožňujú samokalibráciu kryštalizačného teplomera priamo

Point	$p_{\rm m}/{ m MPa}$	$T_{2000}/\mathrm{mK}$	$\Delta T / \mu K$	$\delta T_{ m r}$ / $\mu { m K}$
Minimum	2.93113	315.24	360	10
А	3.43407	2.444	48	0.7
A-B	3.43609	1.896	38	2.8
Néel	3.43934	0.902	18	1.1

Obr. 4.6: Fixné body na krivke topenia <sup>3</sup>He definované v PLTS-2000.

v mieste jeho použí<br/>tai. Minimum na krivke topenia je dosiahnuteľné v laboratóriách, ktoré používajú na získavanie nízkych teplôt <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He refrigerátory alebo demagnetizáciu paramagnetických solí. Ďalšie tri fixné body sú spojené s fázovým prechodom v kvapalnej alebo tuhej fáze <sup>3</sup>He. Nachádzajú sa pri oveľa nižších teplotách, ktoré sa zvyčajne dosahujú metódou jadrovej adiabatickej demagnetizácie.<br/>Bod A zodpovedá fázovému prechodu kvapalnej fázy z normálnej Fermiho kvapaliny do supratekutej A-fázy pri teplote  $T_{\rm A}$  (obr. 4.4). Bod A-B zodpovedá prechodu zo supratekutej A-fázy do supratekutej B-fázy pri teplote  $T_{\rm B}$ . Sú to v podstate tie isté fázové prechody, ktoré boli pozorované pri objave supratekutého hélia-3 [15].



Obr. 4.5: Senzor pre kryštalizačný teplomer [20].

Pri používaní kalibračného bodu A-B je na mieste určitá opatrnosť. Tento fázový prechod je totiž fázovým prechodom prvého druhu a pri prvom prechode z A-fázy do Bfázy sa pozoruje enormne veľké podchladenie (angl. *supercooling*). Presnejšie je používať bod A-B pri prechode z B-fázy do A-fázy (pri ohreve); za týchto podmienok B-A prechod sa stále pozoruje pri správnej teplote  $T_{\rm B}$ . Najnižšiu teplotu  $T_{\rm N}$  má kalibračný bod Néel, ktorý zodpovedá fázovému prechodu tuhej fázy z paramagnetickej do magneticky usporiadanej fázy. Viac detailov o tomto fázovom prechode sa nachádza v kapitole 19 o jadrovom magnetizme.

Od stupnice ITS-90 sa PLTS-2000 líši o  $0,3~{\rm mK}$  pri 1K, tento rozdiel narastá až do

 $\sim 1,5$  mK pri 0,65 K. PLTS-2000 je však považovaná za presnejšiu stupnicu a je jednoznačne odporúčaná pre teplotyT<1 K [2].

Samotný senzor pre kryštalizačný teplomer sa komerčne nevyrába, väčšina nízkoteplotných pracovísk si ho vie zhotoviť na mieru sama. V podstate sa jedná o vysokocitlivý kapacitný snímač tlaku, ktorý zaručuje dobrý tepelný kontakt pracovného média (<sup>3</sup>He) s objektom, ktorého teplotu meria.

Na obr. 4.5 je znázornený typický kryštalizačný teplomer. Zmes tuhého a kva-

palného <sup>3</sup>He je umiestnená v uzavretom objeme (A). Zvyčajne polovica objemu komôrky je vyplnená strieborným sintrom (C), ktorý zaručuje dobrý tepelný kontakt <sup>3</sup>He s bázou komôrky (D). Strieborný sinter je dôležitá súčasť dizajnu slúžiaca na prekonanie Kapicovho odporu (pozri kap.18.4.). Báza komôrky a jej dve vertikálne steny sú majú dostatočnú hrúbku a pevnosť, aby sa minimálne deformovali pri zmenách tlaku. Komôrka je uzavretá tenkou a pružnou membránou (E) (zvyčajne sa používa vytvrdená Be-Cu zliatina). K membráne je pripojená jedna z elektród doskového kondenzátora (F) s prívodnými koaxiálmi (G). Druhá elektróda je nepohyblivá. Pri zmene tlaku v komôrke deformácia membrány spôsobuje vertikálny pohyb spodnej elektródy, čo má za následok zmenu vzdialenosti medzi doskami kondenzátora. Kapacita kondenzátora sa väčšinou meria citlivou môstikovou metódou.



Obr. 4.7: Experimentálny fázový diagram tuhého <sup>3</sup>He v magnetickom poli [6].  $P \neq const$  nakoľko merania boli uskutočnené pri tlakoch zodpovedajúcich krivke topenia v danej teplotnej oblasti.

Komôrka kryštalizačného teplomera sa zvyčajne pri teplote T >1 K natlakuje kvapalným <sup>3</sup>He v rozmedzí tlakov 3.5 - 3.6 kPa. Plniaca kapilára, ktorá ústi do komôrky v mieste (B), musí byť dobre tepelne kotvená na všetkých stupňoch refrigerátora. Proces plnenia komôrky sa zvyčajne vyžíva aj na kalibráciu kapacitného sensora pomocou presného tlakomeru umiestneného pri izbovej teplote. Po počiatočnom zaplnení komôrky sa aparatúra začne schladzovať. Pri dosiahnutí vhodných podmienok (tlak a teplota zodpovedajúca krivke topenia) sa v kapiláre vytvorí "zátka" z tuhého <sup>3</sup>He, ktorá otdelí komôrku od vonkajšieho rezervoáru stlačeného <sup>3</sup>He, ktorý bol použitý na počiatočné plnenie komôrky. Pri ďalšom schladzovaní sa už bude tuhá fáza vytvárať aj v komôrke a tlak bude zodpovedať teplote podľa krivky topenia<sup>6</sup>. Kapacita

doskového kondenzátora sa začne meniť. Na základe kalibračnej krivky P = f(C), odmeranej v čase plnenia komôrky, možno vypočítať tlak a použitím PLTS-2000 priradiť danému tlaku teplotu. Na jemné doladenie pôvodnej kalibrácie sú vhodné fixné body definované ako súčasť PLTS-2000 (obr. 4.6).

Kryštalizačný teplomer je vysokotlakou aplikáciou kryogénneho kapacitného

 $<sup>^6</sup>$ Najvyšší pomer tuhej fázy bude v komôrke v oblasti minima krivky topenia. Nevhodne vysoký počiatočný tlak môže mať za následok stratu citlivosti teplomeru v oblasti minima. Celá komôrka sa totiž ešte pred dosiahnutím minima zaplní tuhým héliom a odpúta sa od krivky topenia. Zníženie tlaku plnenia pomôže odstrániť tento problém.



snímača tlaku. Ten istý princíp sa dá požiť aj na *in situ* meranie veľmi nízkych tlakov. Čitateľom zaujímajúcim sa o konštrukciu takýchto snímačov odporúčame prehľadový článok [21].

## 4.2.3 Jadrový magnetizmus <sup>3</sup>He

V kryštáloch čistého <sup>3</sup>He sú všetky častice identické, môžu sa však odlišovať orientáciou spinu. Pri vysokých teplotách sú spiny neusporiadané a majú entropiu  $S_{\rm s} = R \ln (2I + 1) = R \ln 2$ . Pri znižovaní teploty nastáva usporiadanie spinov. Fázový diagram tuhého <sup>3</sup>He v magnetickom poli a pri tlakoch zodpovedajúcich krivke topenia je na obr. 4.7.

Pri nízkych teplotách a v nízkych poliach  $B_0 \leq 450 \text{ mT}$  sa nachádza tzv. U2D2 fáza - obr. 4.8a. Je to antiferomagnetická fáza, v ktorej magnetická elementárna bunka obsahuje v sebe dve kryštalografické elementárne bunky. Pravidelne sa striedajú dve roviny so spinmi *up* a dve roviny so spinmi *down*. Pri vyšších poliach U2D2 fáza prechádza do tzv. CNAF fázy (akronym z angl. *Canted Normal Anti-Ferromagnetic*) obr. 4.8b. V tejto fáze spiny v jednotlivých rovinách sú vychýlené (angl. *canted*); ich priemety do vybraného smeru sú však nadalej v usporiadaní typu U2D2. Prechod z paramagnetickej fázy do U2D2 v nulovom vonkajšom magnetickom poli sa uskutočňuje pri teplote  $T_N$ , ktorá sa používa pri definícii teplotnej stupnice PLTS-2000 (obr. 4.4 and 4.6).



Obr. 4.8: Magetická štruktúra usporiadaných fáz [6]. (a) U2D2 fáza (b)CNAF fáza. V oboch fázach magnetická elementárna bunka zahrňuje dve kryštalografické elementárne bunky.

Pozorný čitateľ si už určite všimol, že teplota magnetického usporiadania  $T_{\rm N}$  je o niekoľko rádov vyššia než teplota  $T_{\rm M}$ , odvodená z čisto dipól-dipólovej interakcie medzi spinmi atómov <sup>3</sup>He (pozri 4.3).Tento rozdiel je spôsobený tunelovaním atómov, ktoré Pome-

rančuk kvôli jednoduchosti vynechal zo svojho modelu. Tunelovanie atómov <sup>3</sup>He je ekvivalentné priamej výmennej interakcii jadrových spinov vedúcej k magnetickému usporiadaniu pri vyšších teplotách. Heisenbergov model bol jeden z prvých teoretických modelov na opis jadrového magnetizmu tuhého <sup>3</sup>He.

Hamiltonián, ktorý zahrňuje iba dvojčasticové výmeny medzi najbližšími susedmi so spinmi ${\pmb I}_{\rm i}$ a ${\pmb I}_{\rm j},$ má tvar

$$H = -2J \sum_{i < j} \mathbf{I}_i \mathbf{I}_j , \qquad (4.8)$$

kde J je výmenný integrál. Znamienko výmenného integrálu J určuje typ usporiadania: J < 0 zodpovedá antiferomagnetizmu a J > 0 zodpovedá feromagnetizmu. Veľkosť J zároveň umožňuje určiť teplotu usporiadania  $T_c \approx 3J/k_B$ . Takýto jednoduchý Heisenbergov model rádovo správne predpovedal teplotu usporiadania  $T_N$ , nedokázal však vysvetliť všetky vlastnosti tuhého <sup>3</sup>He (napr. teoretická závislosť krivky topenia v magnetickom poli sa odlišovala až o 50% od nameraných hodnôt [4]).

Významným prelomom v teoretickom opise tuhého <sup>3</sup>He bolo zavedenie modelu viacnásobných cyklických výmen (angl. multiple exchange model), ktorý zahrňoval okrem interakcií dvoch najbližších susedov aj cyklické výmeny troch a štyroch atómov. [3]. Vzájomná výmena miest dvoch susediacich atómov v tesne usporiadaných kryštáloch je totiž limitovaná nedostatkom voľného objemu. Susediace atómy, ktoré sa nezúčastňujú dvojčasticovej výmeny by museli byť vytlačené z ich rovnovážnych polôh, alebo tunelujúci pár atómov by sa musel priblížiť natoľko k sebe, že by sa začali uplatňovať odpudivé (angl. hard core) sily obr. 4.9. Súčasná cyklická zámena troch alebo štyroch atómov oveľa menej vytláča susediace atómy z rovnovážnych plôh, resp. značne redukuje vzájomný (hard core) prekryv tunelujúcich atómov<sup>7</sup>.



Obr. 4.9: Cyklická výmena v bcc mriežke [3]. a) Štyri atómy hélia zúčastňujúce sa vo výmene a ich osem najbližších susedov v rovine 110. b) Schématické znázornenie cyklickej výmeny štyroch atómov. c) a d) ilustruje cyklickú výmenu dvoch resp. troch atómov pri tej istej hustote. Všimnime si mieru *hard core* prekryvu v jednotlivých prípadoch.

Hamiltonián zahrňujúci viacnásobné cyklické výmeny atómov <sup>3</sup>He má tvar

$$H = -2J\sum_{\mathbf{n},\alpha} J_{\mathbf{n},\alpha}(-1)^P P_{\mathbf{n}}$$

kde  $P_n$  je operátor opisujúci permutáciu n atómov,  $J_{n,\alpha}$  je efektívny výmenný integrál pre n atómov v konfigurácii  $\alpha$ . Faktor  $(-1)^P$  zohľadňuje antisymetriu vlnovej

 $<sup>^7{\</sup>rm Priekopník teórie cyklickej výmeny Roger s obľubou používa analógiu preplneného vagóna v metre. Kto si ľahšie vymení navzájom miesta - dvaja alebo traja cestujúci?$ 

funkcie pre fermióny. Nadobúda hodnoty +1 pre párny počet atómov v cykle a –1 pre nepárny počet atómov vo výmennom cykle. Všetky permutačné operátory  $P_n$  sa dajú vyjadriť pomocou Pauliho spinových matíc [6].

Model viacnásobných cyklických výmen dosiahol veľmi dobrý súhlas s experimentálnymi dátami. Pre  $J_3 \simeq 0, 13$  mK a  $J_4 \simeq -0, 385$  mK dokázal úspešne vysvetliť štruktúru U2D2 fázy, jej teplotu usporiadania  $T_N$ , namerané hodnoty rýchlosti spinových vĺn a merného tepla. Zároveň dokázal predpovedať existenciu CNAF fázy v magnetických poliach B > 0.4 T.

## 4.3 Tunelovanie atómov v kryštáloch hélia

V kvantových kryštáloch existujú principiálne dva odlišné druhy kvantových efektov: nulové kmity atómov okolo rovnovážnych polôh v kryštále (referencia) a tunelovanie celých atómov z jednej rovnovážnej polohy do druhej. V nasledujúcich kapitolách sa budeme venovať fundamentálne novým stavom látky, ktoré majú svoju podstatu v tunelovaní bodových porúch kryštálovej mriežky: vakancií a prímesí.

Proces tunelovania umožňuje bodovej poruche nachádazať sa v ľubovoľnom uzle kryštálovej mriežky. Celková energia kryštálu pritom nezávisí od toho, v ktorom uzle kryštálovej mriežky sa porucha nachádza. Kvantové efekty tak vedú k delokalizácii bodových defektov a súradnice prímesi alebo vakancie prestávajú byť dobre definovanou veličinou. Bodové defekty sa správajú ako kvázičastice, ktoré sú definované pomocou kváziimpulzu  $\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}$  a disperzným zákonom, t.j. závislosťou energie kvázičastice  $\epsilon(\boldsymbol{k})$  na vlnovom vektore  $\boldsymbol{k}$ .

Disperzný zákon pre bodovú poruchu sa môže určiť pomocou metódy tesnej väzby, ktorú poznáme z teórie elektrónov v kovoch. Uvedieme príklad pre jednoduchú kubickú mriežku s elementárnymi vektormi  $a_1, a_2, a_3$ . Disperzný zákon má pre túto symetriu tvar

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_1 - \epsilon_2(\cos \mathbf{k}\mathbf{a}_1 + \cos \mathbf{k}\mathbf{a}_2 + \cos \mathbf{k}\mathbf{a}_3) , \qquad (4.9)$$

kde  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  sú konštanty, veličina  $|\epsilon_2|$  je úmerná pravdepodobnosti tunelovania. Rozdiel medzi maximálnou a minimálnou hodnotou energie definuje šírku energetického pásma  $\Delta \epsilon$  (obr. 4.10 a). Pre jednoduchú kubickú mriežku (4.9) je  $\Delta \epsilon = 6|\epsilon_2|$ .

V oblasti minima energetického pásma ( $|{\bf k}|\simeq 0,\,\mathrm{d}\epsilon/\mathrm{d}\mathbf{k}=0)$  nadobúda disperzný zákon jednoduchý tvar

$$\epsilon(\boldsymbol{k}) = \epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*} , \qquad (4.10)$$

kde $M^*$ je efektívna hmotnosť kvázičastice. Rádovo platí $\hbar/M^* \sim a^2 \Delta \epsilon$ , z čoho vyplýva všeobecné kvantitatívne pravidlo, že malá pravdepodobnosť tunelovania kvázičastice má za následok úzke energetické pásmo a veľkú efektívnu hmotnosť kvázičastice.

Pre minimálnu hodnotu energie kvázičastice dostávame  $\epsilon_0 = \epsilon_1 - 3\epsilon_2$ .

Štatistika kvázičastíc závisí od štatistiky a počtu častíc (atómov) ktoré je potrebné vytvoriť alebo anihilovať v ideálnom kvantovom kryštále, aby sa daná kvázičastica vytvorila. V prípade kryštálov dvoch izotopov hélia sa naskytuje niekoľko zaujímavých kombinácií:



Obr. 4.10: Schématické znázornenie závislosti energie kvázičastice od kváziimpulzu [9]. (a) Minimum energetického pásma  $\epsilon_0 > 0$ . (b)  $\epsilon_0 < 0$ . Prítomnosť kvázičastice v okolí minima energetického pásu je energeticky výhodná a podporuje možnosť spontánneho vzniku kvázičastíc.

- Vakancia v kryštále <sup>3</sup>He je fermión (vytvorená anihiláciou fermiónu)
- Vakancia v kryštále ${}^{4}\mathrm{He}$  je bozón
- $\bullet~^3\mathrm{He}$ v intersticiálnej polohe v kryštál<br/>e $^4\mathrm{He}$  je fermión
- <sup>3</sup>He nahradzujúce atóm <sup>4</sup>He v kryštále <sup>4</sup>He je taktiež fermión
- <sup>4</sup>He v intersticiálnej polohe v kryštále <sup>3</sup>He je bozón
- $\bullet~^4\mathrm{He}$ nahradzujúce atóm $^3\mathrm{He}$ v kryštále $^3\mathrm{He}$  je však fermión

V odbornej literatúre sa stretávame s rôznorodým pomenovaním takýchto kvázičastíc. Andreev a Lifšic [5] zaviedli pre kvázičastice spojené s poruchami v kvantovom kryštále anglický termín *defecton*. Neskôr sa začal požívať pre kvázičastice spojené s prímesami špecifický termín *impuriton*<sup>8</sup>.

Experimentálne je veľmi ťažké pozorovať tunelovacie procesy v kvantových kryštáloch, ktoré pozostávajú z častíc jedného druhu (napr. iba atómy <sup>4</sup>He). Ak sa však tunelujúce častice odlišujú, ich delokalizácia môže viesť k novým javom, ktoré sú unikátne pre kvantové kryštály. Uvedieme zopár príkladov ilustrujúcich ako mikroskopický kvantový jav - tunelovanie atómov v héliových kryštáloch - môže vyústiť do nezvyčajných, makroskopicky pozorovateľných vlastností.

### 4.3.1 Kvantová difúzia.

Héliové kryštály sú extrémne čisté, pretože všetky možné prímesy nachádzajúce sa v Mendelejevovej tabuľke prvkov aj jejich zlúčaniny vymrznú (tuhnú) pri vyšších teplotách než hélium. Jediné možné prímesy sú samotné izotopy hélia, ich prítomnosť sa však dá v experimentoch kontrolovať s vysokou presnosťou.

 $<sup>^8\</sup>mathrm{V}$ domácej slovenskej literatúre sa zvyknú požívať termíny defektón a prímesón.

Krásnym príkladom modelového systému, ktorý spája teóriu s experimentom, je kryštál <sup>4</sup>He obsahujúci malú koncentráciu atómov <sup>3</sup>He. Pre zostavenie teoretického modelu sú známe všetky potrebné ingredienty: stavebné častice, štruktúra a elementárne excitácie (fonóny a defektóny). Experimentálne je možné študovať tunelovanie defektónov v kryštále <sup>4</sup>He pomocou jadrovej magnetickej rezonancie (defektón je v tomto prípade tvorený atómom <sup>3</sup>He s jadrovým spinom 1/2).

Andreev a Lifšic (AL) vo svojej priekopníckej teoretickej práci [5] predpovedali, že so zvyšovaním teploty sa charakter defektónu v kvantovom kryštále bude postupne meniť z delokalizovanej kvázičastice vlnového charakteru na kvázičasticu lokalizovanú v uzle kryštálovej mriežky. Takáto "zmena z vlny na guličku" by sa mala prejaviť na mobilite defektónu v kvantovom kryštále. Na obr. 4.11 sú schématicky znázornené tri regióny s dramaticky odlišnou teplotnou závislosťou difúzie prímesí D(T).

I. Teplotne nezávislá (klasická) difúzia defektónov. Prímesy <sup>3</sup>He sú v kryštále <sup>4</sup>He delokalizované a správajú sa ako zriedený plyn kvázičastíc - defektónov. AL vychádzali z predpokladu, že podobne ako v kinetickej teórii plynov, je difúzia Dúmerná strednej voľnej dráhe defektónu  $l, D \sim vl$ , kde v je rýchlosť defek-



Obr. 4.11: Schématické znázornenie teplotnej závislosť koeficientu difúzie prímesí v kvantovom kryštále [7].

tónu. Pri veľmi nízkych teplotách je hlavný mechanizmus ovplyvňujúci l vzájomná interakcia defektónov, ktoré interagujú medzi sebou prostredníctvom slabej deformácie kryštálovej mriežky v ich okolí. Dá sa ukázať [8], že difúzia preto závisí iba od koncentrácie kvázičastíc x a ich vlastností, t.j. šírky vodivostného pásu  $\Delta$  a energie vzájomnej interakcie  $V_0$  nasledovne:

$$D \sim \frac{a^2 \Delta}{\hbar x} \left(\frac{\Delta}{V_0}\right)^{2/3}$$
 (4.11)

Pre koncetrácie prímesí  $x < 10^{-3}$  je vzdialenosť medzi defektónmi väčšia než dosah ich vzájomnej interakcie. Pre koncentrácie  $10^{-3} < x < 10^{-2}$  je interakcia medzi defektónmi ~  $V_0$  silnejšia. Zmena pomeru  $\Delta/V_0$  tak určuje závislosť kvantovej difúzie od koncentrácie. Na obr. 4.11 sú v oblasti I naznačené závislosti koeficientu difúzie pre tri rôzne koncentrácie prímesí  $x_1 < x_2 < x_3$ . Žiadna z veličín vo vzťahu (4.11) nezávisí od teploty, čo vysvetľuje teplotnú nezávislosť D.

II. Oblasť kvantovej difúzie. Pri nízkych teplotách, na rozhraní oblastí I a II, má defektón ešte vlnový charakter (delokalizovaná kvázičastica). Zvyšovaním teploty sa začínaju v kryštále <sup>4</sup>He generovať fonóny. Interakcia defektónov s fonónmi zmenšuje strednú voľnú dráhu defektónu. Na rozhraní oblastí II a III je stredná voľná dráha impuritónu porovnateľná s medziatómovou vzdialenosťou a v kryštále. Koeficient difúzie nadobúda minimálnu hodnotu; defektón je lokalizovaný. Všimnime si dramatickú závislosť difúzie od teploty ~  $(1/T)^{-9}$  v oblasti II :

$$D \sim \frac{a^2 \Delta^2}{\hbar \Theta} \left(\frac{\Theta}{T}\right)^9 ,$$
 (4.12)

kde  $\Theta$  je Debyeova teplota.

Práve táto teplotná závislosť je zodpovedná za pomenovanie *kvantová difúzia*. Kvantové efekty (tunelovanie) sú tak zodpovedné za zdanlivý paradox: so znižovaním teploty sa prímesi v kryštále stávajú pohyblivejšie!

III. Oblasť tepelne aktivovanej difúzie. S rastom teploty sa lokalizované defektóny opäť dávajú do pohybu zásluhou nového mechanizmu. V tejto oblasti sa v kryštále <sup>4</sup>He začínaju vytvárať tepelne aktivované vakancie, ktoré sú, vďaka tunelovacím procesom, taktiež delokalizované kvázičastice. Šírka vodivostného pásu tepelne aktivovaných vakancíí  $\Delta_{\rm v}$  je rádovo 1 – 10 K a ich objemová koncentrácia  $n_{\rm v}$  rastie exponenciálne s teplotou  $n_{\rm v} \sim \exp(-\epsilon_{0\rm v}/T)$ , kde  $\epsilon_{0\rm v} \sim 10$  K je energia potrebná na vytvorenie vakancie v kryštále <sup>4</sup>He. Tunelovanie vakancií jedným smerom umožňuje pohyb atómov hélia, vrátane prímesí, v smere opačnom<sup>9</sup>. Pre koeficient difúzie v tejto oblasti platí

$$D \sim \frac{\Delta_{\rm v} \sigma_{\rm in}}{\hbar \Theta} \exp\left\{-\frac{\epsilon_{0\rm v}}{T}\right\} ,$$
 (4.13)

kde $\sigma_{\rm in}$ je koeficient neelastického rozptylu vakancie na prímesi. Všimnime si, že difúzia závisí len od aktivačnej energie vakancí<br/>í $\epsilon_{0\rm v}$ v danom kryštále a nezávisí od druhu prímesi. Experimentálne bol tento fakt potvr<br/>dený meraním teplotnej závislosti difúzneho koeficientu pre dve výrazne odlišné prímesy: atómy <sup>3</sup>He a <br/>ióny <sup>4</sup>He.

Predpovedané závislosti D(T) boli potvrdené o niekoľko rokov neskôr. Na obr. 4.12 sú zhrnuté merania teplotnej závislosti koeficientu spinovej difúzie<sup>10</sup> prímesí <sup>3</sup>He v hcp kryštále <sup>4</sup>He pre tri rôzne koncentácie <sup>3</sup>He. V oblasti nízkych teplôt  $T^{-1} \ge 1.4 \text{ K}^{-1}$  všetky kryštály vykazujú v súlade s (4.11) teplotne nezávislý koeficient difúzie; výrazne sa však prejavuje vplyv koncentrácie prímesí ( oblasť I). Optimálna koncetrácia prímesí pre overenie teoretického modelu je zrejme v kryštále 3, ktorý vykazuje všetky tri režimy difúzie defektónov. V kryštále 2 je koncentrácia prímesí <sup>3</sup>He veľmi vysoká na to, aby sa pozorovala kvantová difúzia (t.j. vplyv fonónov) v oblasti II.

 $<sup>^9 {\</sup>rm Tunelovanie}$ vakancia-atom hélia vedie k prenosu hmoty, podobne ako tunelovanie elektrondiera vedie k toku elektrického náboja.

 $<sup>^{10}{\</sup>rm Spinová}$ difúzia je proces prenosu magnetického momentu v priestore bez zmeny celkovej magnetizácie.



Obr. 4.12: Závislosť koeficientu difúzie prímesí <sup>3</sup>He v kryštále <sup>4</sup>He pre rôzne koncentrácie <sup>3</sup>He: • -  $6 \times 10^{-5}$ ; • - 7,5 × 10<sup>-3</sup> [10]; plné kosočverce  $-5 \times 10^{-4}$  [11] na inverznej teplote  $T^{-1}$ .

my fermión.

## 4.3.2 Nulové vakancie

V predchádzjúcej kapitole sme ukázali, že tepelne excitované prímesy <sup>3</sup>He v kryštále <sup>4</sup>He majú veľmi úzky vodivostný pás, zatiaľ čo vakancie majú šírku vodivostného pásu i aktivačnú energiu v Kelvinovej oblasti. Všeobecne platí, že šírka vodivostného pásu je úmerná amplitúde tunelovania. Pri zvýšení amplitúdy tunelovania (napr. pri znížení tlaku v kryštále <sup>4</sup>He) bude šírka vodivostného pásu vakancií rásť symetricky okolo  $\epsilon_1$  a dno vodivostného pásma  $\epsilon_0$  bude klesať. Andreev a Lifšic [5] poukázali, že pre T=0 môže teoreticky nastať prípad, kedy  $\epsilon_0 < 0$  (obr. 4.10b). To znamená, že vytvorenie vakncie v kryštále zníži jeho celkovú energiu! Základným stavom kvantového kryštálu tak nie je ideálny kryštál bez vakancií, ale kryštál so spontánne vznikajucími delokalizovanými vakanciami pri  $T \rightarrow 0$ .

Vznik nulových vakancií by mal mať ešte jeden zaujímavý dôsledok. Nulové vakancie s vlnovým vektorom  $\mathbf{k}=0$  (minimum vodivostného pásma) nenarušujú periodicitu kryštálu. Pretože počet atómov <sup>4</sup>He sa zachováva, musí sa spontánne zvýšiť počet uzlov kryštálovej mriežky o toľko, koľko vzniká nulových vakancií. Kryštál sa tak stáva v základnom stave nesúmerateľný (t.j. počet atómov  $\neq$  počet uzlov kryštálovej mriežky) a jeho objem sa zväčšuje. Tento jav sa nazýva kvantová dilatácia.

Teoretická rovnovážna objemová koncentrácia nulových vakancií  $N_0 = N/V$  je malá a závisí od ich štatistiky. V kryštále <sup>4</sup>He, kde nulové vakancie sú bozóny, sa môže viacero vakancií nachádzať v tom istom stave. Pre ich koncentráciu platí [8]

Vo vzťahoch (4.11) až (4.13) sa kládol dôraz na kvalitatívne správnu predpoveď teplotnej závislosti koeficientu difúzie defektónov. V neskorších teoretických prácach<sup>11</sup> sa podarilo upresniť aj chýbajúce numerické faktory a určiť dôležité parametre pre prímesi <sup>3</sup>He v krvštále <sup>4</sup>He. Šírka vodivostného pásu defektónov je  $\Delta \sim 10^{-4}$ K, charakteristicá rýchlosť je  $v \sim \partial E/\partial k \sim$  $10^{-1}$  cm/s a efektívna hmotnosť  $M^* \sim 10^4 m_{\rm He}$ . Takýto defektón je zrejme zatial "najťažší" zná-

 $<sup>^{11}\</sup>mathrm{Historický}$  prehľad s množ<br/>stvom citácií je možné nájsť v [12].

$$N_{0\mathrm{b}} = \frac{M \mid \epsilon_0 \mid}{4\pi\hbar^2 f} , \qquad (4.14)$$

kde f > 0 je parameter s rozmerom dľžky, charakterizujúci vzájomne odpudivú interakciu dvoch nulových vakancií. (Interakcia je odpudivá, pretože jednému uzlu kryštálovej mriežky nemôžu byť priradené dve vakancie.)

Nulové vakancie v <sup>3</sup>He kryštále sú fermióny. Zaplnia všetky stavy s  $|p| < |p_0| = (2M |\epsilon_0|)^{1/2}$ . Pre ich koncentráciu platí [8]

$$N_{0f} = \frac{(2M \mid \epsilon_0 \mid)^{3/2}}{6\pi\hbar^3} .$$
(4.15)

Existencia nulových vakancií môže byť príčinou podstatných termodynamických a kinetických zmien v kryštále. Nulové vakancie, podobne ako nulové kmity, nenarušujú periodickosť kryštálu. V takomto kryštále je možný prenos hmoty pri nepohyblivých uzloch mriežky. Andreev a Lifšic [5] po prvýkrát predpovedali, že héliový kryštál s nulovými vakanciami môže byť supratekutý a vytvoriť tak nový stav hmoty, pre ktorý sa neskôr ujal anglický názov *supersolid*.

#### 4.3.3 Supersolid

Supersolid (voľne preložené ako supratekutý kryštál) predstavuje na prvý pohľad veľmi protirečivý koncept. Vieme si predstaviť kryštál, cez ktorý môžu **bez odporu** a disipácie energie pretekať tie isté stavebné častice (atómy), ktoré súčasne vytvárajú kryštalickú štruktúru a ktorých vzájomné interakcie sú zodpovedné za modul pružnosti daného kryštálu<sup>12</sup>?

Supersolid zodpovedá fáze hmoty, v ktorej súčasne existujú usporiadanie v reálnom priestore ( kryštalická štruktúra) a v impulznom priestore<sup>13</sup>. Tieto dva druhy usporiadania sú dôsledkom spontánneho narušenia dvoch symetrií: translačnej symetrie a kalibračnej invariancie. Z teoretického pohľadu nič nebráni takémuto stavu pri splnení podmienky, že amplitúda kmitov mriežky je rádovo porovnateľná s medziatómovou vzdialenosťou. Tuhé hélium túto podmienku spĺňa; to už vieme z predchádzajúcich kapitol.

Prvé teoretické predpovede supersolidity v kvantových kryštáloch sa objavili pred štyridsiatimi rokmi [5], [22], [23]. Boli založené na prítomnosti nulových vakancií, ktore za určitých podmienok podstúpia BEC a stanú sa supratekuté. Supratekutý pohyb vakancií v jednom smere však súčasne znamená prenos hmoty (pohyb atómov hélia) v smere opačnom.

Leggett [24] poukázal na to, že pri rovnomernej rotácii supersolidu v tvare tenkého prstenca (s polomerom R a hrúbkou  $d, d \ll R$ ) sa nebudú všetky jeho stavebné častice zúčastňovať rotácie, čo sa prejaví znížením momentu zotrvačnosti

 $<sup>^{12}</sup>$ Supravodič nie je supersolid. V supravodič<br/>och je sitácia kvalitatívne iná: kryštalickú štruktúru vytvárajú kladné i<br/>óny a za bezdisipatívny prenos náboja sú zodpovedné elektróny.

 $<sup>^{13}\</sup>mathrm{V}$ anglickej literatúre sa používa termín *off-diagonal long-range order* (ODLRO). Prítomnosť ODLRO (zjdnodušene) znamená, že atóm na jednom konci tuhej látky je vo fáze s atómom na druhom konci tuhej látky.

$$I(T) = I_{\rm cl}[1 - f_{\rm s}(T)] , \qquad (4.16)$$

kde $I_{\rm cl}=NmR^2$ je klasický moment zotrvačnostiNatómov s hmotnosťou mv tenkom prstenci a $f_{\rm s}(T)$ je teplotne závislá "supratekutá zložka" s limitnými hodnotami $f_{\rm s}(T_{\rm c})=1$  a  $f_{\rm s}(0)=0.$ 

Leggett pre tento jav zaviedol pojem nonclassical rotational inertia (NCRI). Legettova predpoveď sa môže - klamlivo - na prvý pohľad zdať "triviálnou". V skutočnosti však bola odvodená na kvantovo-mechanických základoch a NCRI patrí do rodiny makroskopických kvantových javov. Leggett zároveň odhadol hornú hranicu hustoty supratekutej zložky  $\rho_s/\rho \sim 3 \times 10^{-4}$  a navrhol ako experimentálne určiť NCRI.

Experimentátori sa ďalších 20 rokov neúspešne pokúšali potvrdiť existenciu supersolidu. Požívali sa rôzne experimentálne metódy: pohyb mikroskopicky malých objektov cez kryštály hélia, pretláčanie kryštálu hélia cez kapiláru, merania momentu zotrvačnosti torzným oscilátorom, presné merania teplotnej závislosti tlaku pri konštantnom objeme a šírenie ultrazvuku. Supersolid sa však jednoznačne nepodarilo pozorovať v žiadnom z týchto experimentov; jedine experimenty so šírením ultrazvuku [25] poukazovali na možnosť fázového prechodu pri  $T_{\rm c} = 117$  mK. Prehľad teoretických i experimentálnych prác z tohto pionierskeho obdobia s množstvom citácií možno nájsť v [26].



Obr. 4.13: Schématické znázornenie torzného oscilátora použitého na meranie NCRI v tuhom  ${}^{4}\text{He}$  [28].

Nová éra pre štúdium problematiky supersolid vlastností kryštálov <sup>4</sup>He nastala v roku 2004 po publikovaní dvoch experimentálnych prác skupiny vedenej Chanom [27, 28]. Autori týchto prác skúmali teplotnú závislosť momentu zotrvačnosti kryštálov <sup>4</sup>He pomocou torzného oscilátora<sup>14</sup>.

V práci [28] malo tuhé <sup>4</sup>He tvar tenkého cylindrického prstenca (priemer 10 mm, hrúbka 0.63 mm, výška 5 mm) umiestneného medzi vonkajším Al plášťom a vnútorným Mg jadrom experimentálnej komôrky (obr. 4.13).

 $<sup>^{14}</sup>$ Základné údaje o tejto experimentálnej metóde sú uvedené v nasledujúcej kapitole. Podrobnejšia rozprava je sa nachádza v [30].



Obr. 4.14: Teplotná závislosť rezonančnej periódy (os vľavo0 a amplitúdy oscilácií (os vpravo) torného oscilátora. (A)- komôrka bez priehradky v štrbine; (B)- komôrka s prehradenou štrbinou.  $\tau^*$  je perióda oscilácií pri 300mK. Všimnime si, že teplotná os je v logaritmická. [28]

Autori uskutočnili sériu meraní teplotnej závislosti momentu zotrvačnosti, pri ktorých menili maximálnu obvodovú rýchlosť kmitov  $v_{\max}$  a tlak, pri ktorom sa <sup>4</sup>He nachádzalo. Pri teplotách  $T~\leq~315$ mK pozorovali redukciu periódy kmitov (t.j. momentu zotrvačnosti). Pozorovaný efekt bol závislý od amplitúdy obvodovej rýchlosti  $v_{\rm max}$ , ktorou sa prstenec tuhého hélia pohyboval: pre rýchlosti 4  $\mu$ m/s a 6  $\mu m/s$  sa efekt nemenil, kdežto pri rýchlosti 420  $\mu m/s$  už bol nepozorovateľný (obr. 4.14A). Na tom istom obrázku vidíme, že relatívna amplitúda kmitov prechádza cez minimum (t.j. v experimentálnej komôrke nastáva disipácia energie) práve v teplotnej oblasti, kde sa začína redukovať perióda kmitov. Na základe nameraných dát autori odhadli hornú hranicu hustoty supratekutej zložky  $\rho_s/\rho \leq$ 0.018 a kritickú rýchlosť  $v_{\rm c}$   $\sim$  $20 \ \mu m/s$ . Kim a Chan navrhli aj nový fázový diagram tuhého

 $^{4}\mathrm{He},$ v ktorom vyznačili fázové rozhranie medzi supersolid a "normálnym" tuhým héliom (obr. 4.15).

Pre konečnú interpretáciu nameraných dát ako NCRI bol dôležitý kontrolný experiment uskutočnčný v experimentálnej komôrke s takou istou geometriou. Do prstencovej štrbiny, v ktorej sa nachádzalo tuhé <sup>4</sup>He, bola vložená Mg priehradka, ktorá mala zabrániť súvislému supratekutému toku po obvode prstenca (pozri obr. 4.13). Očakávanie autorov bolo potvrdené. Na obr. 4.14B sú uvedené experimentálne dáta z takto prehradenej komôrky. Zmena periódy oscilácií interpretovaná ako NCRI ako aj sprevádzajúca zmena amplitúdy oscilácií chýbali. QED?

Otáznik na konci predchádzajúceho paragrafu nie je preklep. Správna odpoveď znie "Nie!". Nasledujúce experimenty čoskoro ukázali, že zlá kvalita kryštálu <sup>4</sup>He (napr. rýchlo ochladený či nevyžíhaný kryštál) napomáha zvýšiť pomer  $\rho_s/\rho$ . Taktiež prítomnosť prímesí <sup>3</sup>He na úrovni ppm zvyšovala  $\rho_s/\rho$  a pri určitých koncentráciách aj  $T_c$ . Na prvý pohľad je to dostatočná zbierka nejasností a protirečení,

aby sa vyššie uvedené výsledky brali ako dôkaz existencie supersolidu s veľkou dávkou opatrnosti.



Obr. 4.15: Fázový diagram tuhého <sup>4</sup>He navrhnutý v práci [28]. V súčasnosti už neplatí; uvádzame ho len ako dokument doby.

Do výskumu sa zapojili ďalšie nízkoteplotné výskumné tímy, ktoré mali zvládnutú experimentálnu techniku torzného oscilátora. Všade experimentálne pozorovali redukciu momentu zotrvačnosti a silnú závislosť efektu od kvality a spôsobu prípravy kryštálov <sup>4</sup>He. Situácia pripomína obdobie po objavení vysokoteplotnej supravodivosti. Pribúdajú nové experimenty a teórie študujúce štruktúrne, mechanické a termodynamické vlastnosti tuhého hélia v milikelvinovej teplotnej oblasti, organizujú sa konferencie venované iba problematike supersolidu.

V čase písania tejto kapitoly (jeseň 2009) neexistuje v nízkoteplotnej vedeckej komunite jednoznačný názor na existenciu supersolidu v tuhom <sup>4</sup>He , čo silne podporuje ďalší výskum. Čitateľ s hlbším záujmom o vývoj tejto problematiky za posledné štyri roky nájde užitočné pre-

hľady s odkazmi na pôvodné práce v prehľadových článkoch [31], [32] a [33]. Uveďme niektoré hlavné smery výskumu a interpretácií supersolidu v tuhom  ${}^{4}\text{He} {}^{15}$ :

- Experimentálne pozorované hodnoty NCRI sa pohybujú až v rozpätí troch rádov. Teplota, pri ktorej sa NCRI začína pozorovať sa pohybuje medzi 60 200 mK. V ultračistých a starostlivo vyžíhaných kryštáloch sa tento interval zužuje na 60 80 mK.
- Merania elastických vlastností kryštálov hélia ukázali, že v oblasti teplôt, kde sa pozoruje NCRI dochádza k "tvrdnutiu" kryštálu <sup>4</sup>He (modul šmyku rastie až o 10%). Jednoznačnú súvislosť s NCRI sa zatiaľ nepodarilo preukáť, naopak, zdá sa nepravdepodobné aby bezdisipatívny prenos hmoty – supratekutosť – bola spojená s nárastom tuhosti kryštálu. Hcp kryštály <sup>3</sup>He <sup>16</sup> vykazujú podobný nárast tuhosti [34], no NCRI sa v nich zatiaľ experimentálne nepozorovala.
- V experimentoch študujúcich pretláčanie kryštálov cez kapiláry pod vplyvom mechanického tlaku sa nepozoroval žiaden bezdisipatívny prenos hmoty. Na-

 $<sup>^{15}</sup>$ Detailné citácie uvádzame iba na najnovšie práce, ktoré nie sú zahrnuté v prehľadových článkoch [31] - [33].

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Porovnajme fázové diagramy na obr. 4.2.
opak, v nedávnych experimentoch, v ktorých sa atómy <sup>4</sup>He "vstrelovali" zo supratekutej kvapaliny do kryštálu <sup>4</sup>He sa pozoroval pri $T<400~{\rm mK}$  prenos hmoty cez kryštál [35]. Súvis tohto javu s NCRI ešte nie je preukázaný.

- Z termodynamických vlastností sa znovu premeralo merné teplo v snahe nájsť maximum zodpovedajúce fázovému prechodu. S vysokou presnosťou bola odmeraná krivka topenia <sup>4</sup>He. V týchto experimentoch sa našiel príspevok k entropii s nezvyčajnou teplotnou závislosťou ~  $T^7$ .
- V experimentoch s rozptylom neutrónov bola objavená nová vetva excitácií interpretovaná ako pár vakancia-intersticiál (podobná rotónovému spektru). Kryštalografické štúdie pomocou Röntgenových lúčov ukázali dynamiku procesu rastu a žíhania kryštálov [36]. Zároveň bolo potvrdené, ze je extrémne ťažko vypestovať monokryštál <sup>4</sup>He.
- Počiatočné experimenty boli zrejme uskutočnené na polykryštáloch. Silná závislosť NCRI od spôsobu prípravy a žíhania naznačuje možnosť, že za supratekutosť (NCRI) sú "zodpovedné" kryštalografické poruchy ( napr. hranice zín v polykryštále , prechodová vrstva medzi kryštálom a stenou komôrky, dislokácie). Teoreticky bolo navrhnuté, že v jadre dislokácií môže nastať jednorozmerná supratekutosť a že supratekutý prenos hmoty može nastať prostredníctvom siete vzájomne interagujúcich supratekutých dislokácií.
- Teoretici sa zhodujú na tom, že súmerateľný základný stav (t.j. počet častíc sa rovná počto uzlov kryštálovej mriežky) nemôže byť supratekutý. Uskutočnili sa rozsiahle Monte-Carlo simulácie základného stavu kryštálu <sup>4</sup>He, výsledky ktorých sa zatiaľ rozchádzajú v práve v otázke súmerateľnosti. Nositeľ Nobelovej ceny Anderson zasa zastáva názor, že všetky silno korelované kryštály pozostávajúce z bozónov budú v základnom stave nesúmerateľné a teda v stave supersolid [37].
- Existujú experimenty a teórie, ktoré interpretujú pozorovanie NCRI ako prechod kryštálu do supratekutého amorfného stavu (angl. *superglass*)[38].
- K problematike supersolidu sa vrátil po takmer 40 rokoch od svojej prvej predpovede aj Andrejev [39]. Vo svojej novej teórii vysvetľuje experimentálne pozorovaný úbytok momentu hybnosti prítomnosťou dvojúrovňových stavov v kryštále: časť momentu zotrvačnosti zodpovedajúca NCRI sa "spotrebuje" pri tunelovaní častíc na vyššie energetické úrovne.

### 4.3.4 Torzný oscilátor a supratekutosť

V experimentoch zameraných na štúdium supratekutosti tuhého hélia (NCRI) je tuhé hélium umiestnené vo vnútri experimentálnej komôrky nachádzajúcej sa na konci dutej torznej tyče, ktorá zároveň slúži aj na plnenie komôrky.

Pre periódu kmitov netlmeného oscilátora platí

$$\tau(T) = 2\pi \sqrt{(I_{\text{cell}} + I_{\text{He}})/K(T)}$$
, (4.17)

kde  $I_{\text{cell}}$  je moment zotrvačnosti prázdnej komôrky,  $I_{\text{He}}$  je moment zotrvačnosti tuhého hélia v komôrke a K(T) je koeficient závisiaci na rozmeroch a mechanických vlastnostiach torznej tyče. Teplotná závislosť K(T) je určená hlavne teplotnou závislosťou modulu šmyku materiálu, z krorého je vyrobená torzná tyč. Ku komôrke sú zvyčajne pripojené dve kapacitné elektródy: jedna sa používa na excitáciu torzných kmitov a druhá na meranie amplitúdy a rezonančnej frekvencie  $f_0$  oscilátora (obr. 4.13).

Používané torzné oscilátory majú vysoký faktor kvality  $Q \sim \frac{\Delta f}{f_0} \sim 10^6$  pri pracovných frekvenciách  $10^2 - 10^3$  Hz. Z merania zmien faktoru kvality  $\Delta Q$  (zmena amplitúdy kmitov oscilátora) sa dá určiť disipácia energie v tuhom héliu vykonávajúcom kmitavý pohyb. Vysoká stabilita rezonančnej frekvencie  $\sim 10^{-5}$  Hz zasa umožňuje merať zmeny momentu zotrvačnosti zodpovedajúce zmene hmotnosti  $10^{-7}g$ . Z meraní teplotných závislostí rezonančnej periódy torzného oscilátora s prázdnou a plnou experimentálnou komôrkou možno pomocou vzťahov (4.16) a (4.17) určiť teplotnú závislosť momentu zotrvačnosti tuhého hélia a NCRI.

Používanie torzných oscilátorov zohralo historicky významnú úlohu pri výskume supratekutosti. V Andronikašviliho experimentoch bol torzný oscilátor ponorený v kvapalnom héliu a požíval sa ako viskozimeter (pozri kap.5.2). Pomocou tejto metódy sa podarilo po prvýkrát odmerať teplotnú závislosť pomeru supratekutej a normálnej zložky v He II.

Veľmi tenké héliové filmy vykazujú dvojrozmernú, tzv. Kosterlitzovu-Thoulessovu supratekutosť. Je to exotický druh supratekutosti, pri ktorej dochádza k usporiadaniu na veľkú vzdialenosť aj bez prítomnosti Boseovho-Einsteinovho kondenzátu v systéme (pozri kap. 1.6). Experimentálne potvrdenie tohto javu sa taktiež poprvýkrát realizovalo v experimentoch s torzným oscilátorom. Detaily dvojrozmernej supratekutosti presahujú rámec tejto kapitoly; dobrý úvod do problematiky s množstvom citácií poskytuje prehľadová práca [29].

#### 4.4 Literatúra

- R.L. Rusby, B. Fellmuth, J. Engert, W.E. Fogle, E.D. Adams, L. Pitre, M. Durieux, J. Low Temp. Phys. 149, 156 (2007).
- $[2] Supplementary Information for the Realization of the PLTS-2000, www.bipm.org \,.$
- [3] M. Roger, J.H. Hetherington, J.M. Delrieu, Rev. Mod. Phys. 55, 1 (1983).
- [4] W.P. Kirk, E.D. Adams, Phys. Rev. Lett. 27, 329 (1971).
- [5] A. F. Andreev, I. M. Lifshitz, Sov. Phys. JETP 29, 1107 (1969); ŽETF 56, 2057 (1969).
- [6] H. Godfrin, D. D. Osheroff, Phys. Rev. B 38, 4492 (1988).
- [7] A. F. Andreev, Usp. Fiz. Nauk 118, 251 (1976).
- [8] A. F. Andreev, Progress in Low Temperature Physics, Volume VIII, Edited by D.F.Brewer, North-Holland (1982).
- [9] A.M. Kosevich, The Crystal Lattice: Phonons, Solitons, Dislocations, Superlattices, Second Ed., WILEY-VCH (2005).
- [10] V.A. Mikheev, V.N. Esel'son, V.N. Grigor'ev a N.P. Mikhin, Fiz. Nizk. Temp. 3, 385 (1977).
- [11] A.R. Allen, M.G. Richards a J. Schratter, J. Low Temp. Phys. 47, 289 (1982).

- [12] D.I. Pushkarov, Central European Journal of Physics 2(3), 156 (2004).
- [13] I. Pomerančuk, ŽETF 20, 919 (1950).
- [14] J.D. Anufriev, ŽETF, Pisma 1, 61 (1965).
- [15] D. D. Osheroff, R.C. Richardson, D.M. Lee, Phys. Rev. Lett. 28, 885 (1972).
- [16] S.B. Trickey, W.P. Kirk, E.D. Adams, Rev. Mod. Phys. 44, 668 (1972).
- [17] J. de Boer, Physica 14, 139 a 149 (1948).
- [18] R.A. Guyer, Solid State Physics, Volume 23, Editors F.Seitz, D.Turnbull and H.Ehrenreich, Academic Press (1969).
- [19] O.V. Lounasmaa, Experimental Principles and Methods below 1K, Academic Press (1974).
- [20] D.S. Greywall and P.A. Busch, J. Low Temp. Phys. 46, 451 (1982).
- [21] E.D. Adams, Rev. Sci. Instrum. 64, 601 (1993).
- [22] L. Reatto, *Phys.Rev.* **183**, 334 (1969).
- [23] G.V. Chester, *Phys. Rev. A* 2, 256 (1970).
- [24] A.J. Leggett, Phys. Rev. Lett. 25, 1543 (1970).
- [25] G.A. Lengua, J.M. Goodkind, J. Low Temp. Phys. 79, 251 (1990).
- [26] M.W. Meisel, *Physica B* **178**, 121 (1992).
- [27] E. Kim, M.H.W. Chan, Nature **427**, 225 (2004).
- [28] E. Kim, M.H.W. Chan, Science **305**, 1941 (2004).
- [29] G. Agnolet, D.F. McQueeney, J.D. Reppy Phys. Rev. B 39, 8934 (1989).
- [30] G.K. Wong, Frontiers in Physics, Volume 67, Experimental Techniques in Condensed Matter physics at Low Temperatures, Edited by R. C. Richardson and E. N. Smith, Adison-Wesley (1998).
- [31] S. Balibar, Contemporary Physics 48, 31 (2007).
- [32] N. Prokof'ev, Advances in Physics 56, 381 (2007).
- [33] D.E. Galli, L. Reatto, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 111010 (2008).
- [34] J.T. West, O. Syshchenko, J. Beamish, M.H.W. Chan, Nature Physics 5, 598 (2009).
- [35] M.W. Ray, R.B. Hallock, Phys. Rev. Lett. 100, 235301 (2008).
- [36] C.A. Burns, N. Mulders, L. Lurio, M.H.W. Chan, A. Said, C.N. Kodituwakku, P.M. Platzman, Phys. Rev. B 780, 224305 (2008).
- [37] P.W. Anderson, Science **324**, 631 (2009).
- [38] B. Hunt, E. Pratt, V. Gadagkar, M. Yamashita, A.V. Balatsky, J.C. Davis, Science 324, 632 (2004).
- [39] A. F. Andreev, JETP Lett. 85, 585 (2007); ŽETF 136, 118 (2009).

# 5 Supratekuté <sup>4</sup>He

## L. SKRBEK

Helium bylo objeveno ve slunečním spektru při pozorování slunečního zatmění Lockyerem v roce 1868, odkud pochází i jeho název. Na Zemi jej izoloval z uranových minerálů Ramsay v roce 1895 a poprvé jej zkapalnil 10. 7. 1908 v Leidenu holandský fyzik Heike Kamerlingh Onnes. Toto památné datum uvádíme přesně, neboť zkapalnění helia je obecně považováno za počátek fyziky nízkých teplot.

V přírodě existují dva stabilní izotopy helia - <sup>4</sup>He a <sup>3</sup>He, které se liší pouze počtem neutronů v jádře. Mají ze všech známých látek nejnižší body varu (při normálním tlaku 4,215 K pro <sup>4</sup>He a 3,19 K pro <sup>3</sup>He). Kapalné <sup>4</sup>He a <sup>3</sup>He jsou typickými představiteli tzv. kvantových kapalin, protože jejich vlastnosti při nízkých teplotách je nutné popisovat nikoli klasicky, ale pomocí kvantové mechaniky, která se zde projevuje v makroskopickém měřítku. Protože atomy <sup>4</sup>He jsou bosony, kdežto atomy <sup>3</sup>He fermiony, jsou nízkoteplotní vlastnosti obou izotopů velmi odlišné. Základní vlastnosti volných a slabě interagujících plynů fermionů a bosonů jsou podrobně popsány v úvodní kapitole, na níž navážeme a budeme se dále věnovat pouze běžnému izotopu <sup>4</sup>He, jehož přírodním zdrojem jsou zejména ložiska zemního plynu.



Obr. 5.1: Fázový diagram dusíku a <sup>4</sup>He.

## 5.1 Rovnovážný fázový diagram

Jádro atomu <sup>4</sup>He tvořené částicí  $\alpha$  má nulový spin a dva elektrony s opačným spinem tvoří uzavřenou kulově symetrickou slupku *s*, takže atomy <sup>4</sup>He jsou bosony. Interagují mezi sebou jen velmi slabě prostřednictvím van der Waalsových sil. Proto

se  $^{4}\mathrm{He}$ za pokojových teplot chová téměř jako ideální plyn a jeho teplota varu je velmi nízká.

Na obr. 5.1 vlevo je schématicky znázorněn typický rovnovážný fázový diagram. Šipkou je označen kritický bod, z něhož vychází křivka nasycených par, která končí v trojném bodě. Z trojného bodu pak vychází křivky koexistence pevné/kapalné a pevné/plynné fáze. Takový fázový diagram je platný i pro nejběžnější technickou kryogenní látku - dusík, který za normálního tlaku vře kolem 78 K. Budeme-li pomalu odčerpávat lázeň kapalného dusíku, bude se teplota snižovat podle křivky nasycených par, až dojdeme do trojného bodu ( $T_c \approx 63$  K,  $p_c \approx 66$  bar), kdy lázeň zamrzne. Neznamená to ovšem, jak je často mylně uvažováno, že  $T_c$  je nejnižší teplota, kterou lze odčerpávaním lázně kapalného dusíku získat. K dalšímu snížení dojde při pomalém čerpání kryostatu s pevným dusíkem, ovšem vzhledem ke špatné tepelné vodivosti pevného dusíku je tato chladící procedura neefektivní.



Obr. 5.2: Schéma Kapicova experimentu proudění <sup>4</sup>He: 1 - hladina kapalného He II vně a uvnitř skleněné vestavby, 2 - opticky zabroušené plochy, H - topení, T1 a T2 teploměry.

Na obr. 5.1 vpravo je fázový diagram <sup>4</sup>He. Zdůrazněme, že jde o rovnovážný fázový diagram (protože fázové přechody kapalina-plyn a kapalinapevná fáze jsou fázovými přechody prvního druhu, mohou být za určitých okolností hranice oblastí existence plynné, kapalné a pevné fáze výrazně posunuty, jak bude diskutováno v kapitole 7). Při snižování teploty podél křivky nasycených par (kritický bod  $T_{\rm crit} \cong 5,2$  K,  $p_{\rm crit} \cong 0,226$  MPa) nedojde k fázovému přechodu do pevného stavu a helium zůstává v kapalném stavu až do teploty absolutní nuly. Fázový diagram tedy nemá trojný bod. Pevná fáze helia existuje pouze za zvýšeného tlaku, mluvíme o kvantových krystalech, jejichž vlastnosti jsou diskutovány v kapitole 3.

Oblasti existence normálního kapalného He I a supratekutého He II (označení He I pro normální a He II pro supratekutou fázi kapalného <sup>4</sup>He vzniklo historicky ještě před objevem supratekutosti prostě proto, že vlastnosti obou těchto kapalných fází se významně liší) jsou odděleny tzv.  $\lambda$  čarou, při jejímž překročení dojde k fázovému přechodu druhého druhu. Při pohledu do skleněného kryostatu s lázní kapalného helia, jejíž teplota je podél křivky nasycených par postupně snižována odčerpáváním plynu vnější vývěvou, je přechod do supratekutého stavu dobře patrný. V He I dochází podobně jako ve vroucí vodě k bublinovému varu v celém objemu kapaliny. Při přechodu do He II vzroste tepelná vodivost kapaliny zhruba  $3 \times 10^6$  krát, bublinový var náhle ustane a kapalina se odpařuje pouze z povr-

chu, který tak tvoří v přírodě nejdokonalejší atomárně hladkou plochu. Mohou však na ní existovat povrchové vlny nazývané ripplony.

Fázové přechody kapalina-plyn a kapalina-pevná látka (pod kapalinou chápeme jak He I tak i He II) jsou fázovými přechody prvního druhu, charakteristické existencí skupenského (latentního) tepla. Normální kapalné He I a chladný heliový plyn jsou klasické Newtonovské tekutiny s nejnižší kinematickou vazkostí ze všech známých látek a lze je proto dobře využít jako pracovní látku pro experimenty dynamiky tekutin (viz kapitola 10).

## 5.2 Vybrané fyzikální vlastnosti supratekutého <sup>4</sup>He



Obr. 5.3: Fontánový jev v supratekutém  ${}^{4}$ He.

V řadě experimentů, které v průběhu let následovaly úspěšné zkapalnění helia, se ukázalo, že He II má, bez nadsázky, podivuhodné vlastnosti, které nebylo možné vysvětlit pomocí klasické fyziky. Popíšeme nyní některé z nich.

Teplotní závislost měrného tepla měřil již Kamerligh-Onnes, ale své výsledky nepublikoval, neboť se mu zdály nedostatečně reprodukovatelné. Kolem roku 1930 si jeho kolega z Leidenu Keesom a další uvědomovali, že v kapalném heliu se kolem teploty 2,2 K děje něco neobvykle zajímavého, neboť něrné teplo (viz obr. 1.2 v úvodní kapitole) při snižování teploty vykazuje ostrý pík. Tvar tohoto píku připomíná řecké písmeno  $\lambda$ , proto se ustálily názvy  $\lambda$  přechod či  $\lambda$  čára na fázovém diagramu.

Vysvětlit fyzikální příčinu tohoto píku se však dlouho nedařilo, ačkoli bylo zřejmé, že vlastnosti kapaliny nad a pod  $\lambda$  čarou se liší a již tehdy vzniklo označení He I a He II.

Keesom a jeho spolupracovníci již v roce 1930 objevili, že He II je schopné protékat v podstatě bez tření materiálem obsahujícím nepatrné póry. Oproti tomu, výsledky dosažené v Torontu pomocí torzního oscilátoru vykazovaly prudký, avšak konečný pokles vazkosti při ochlazení pod  $\lambda$  bod. Zdálo se,

že He II může v určitých případech proudit bez vnitřního tření, avšak jindy se může chovat jako běžná vazká tekutina.

Za přelomové z hlediska experimentu lze považovat dva krátké články, které vyšly ve stejném čísle časopisu Nature v roce 1938. Autorem prvního je Kapica [1], který provedl hydrodynamické experimenty s kapalným heliem v Moskvě. Pomocí zařízení znázorněného na obr. 5.2 prokázal, že ačkoli proudění He I úzkou štěrbinou mezi opticky zabroušenými disky bylo sotva detekovatelné, při snížení teploty pod  $T_{\lambda}$  jí může He II protékat bez obtíží a jako první nazval tento jev supratekutostí, v analogii se supravodivostí elektronů v kovech.

Allen a Misener v následném článku [2] věnovaném studiu proudění He II kapilárami došli k obdobnému závěru, tzn. že vlastnosti proudění He II nelze klasickým přístupem vysvětlit. Ačkoli Nobelovu cenu za experimentální objev supratekutosti obdržel po dlouhých letech pouze Kapica, je možné argumentovat, že mohla být sdílená právě s Allenem.

V únoru 1938 publikovali Allen a Jones [3] experimentální objev tzv. fontánového jevu, který přesvědčivě dokládá neobvyklé hydrodynamické chování He II. Schéma experimentu je na obr. 5.3. Skleněná baňka s dvojitými stěnami je hutně naplněna jemným práškem a utěsněna vatou. Jeden její konec je otevřen do lázně He II, od druhého vede kapilára nad hladinu He II v kryostatu. Jemný prášek v baňce vytváří labyrint velmi úzkých kanálků, kterými běžné tekutiny díky konečné vazkosti mohou jen velmi obtížně proudit. Supratekuté He II však v tomto experimentu přesvědčivě prokázalo, že může takovou supratekutou dírou proudit bez problémů, přičemž toto proudění může být generováno prostým zahřátím, např. intenzívním světelným zdrojem. Zahřátím, tj. změnou teploty lze tedy v He II vyvolat změnu tlaku! Existuje i opačný, tzv. mechano-kalorický efekt, který objevili Daunt a Mendelsohn [4] - viz obr. 5.4. V supratekutém heliu tedy gradient tlaku vyvolává gradient teploty a naopak.

Důležitým nástrojem studia hydrodynamiky He II se staly experimenty s torzními kyvadly tvaru koule, disku či svazku disků, zavěšených na tenkém torzním závěsu. Na obr. 5.5 je schématicky znázorněn svazek disků zavěšený na torzním vláknu z fosforové bronzi o průměru 340  $\mu$ m cca 100 cm dlouhém, jaký ve svém experimentu použil na Kapicův návrh Andronikašvili [5]. Ve skutečnosti šlo o 100 kusů 0,013 mm silných hliníkových fólií, prokládaných 0,21 mm tlustými hliníkovými podložkami, navlečených na hliníkovém trnu. Fólie byly střídavě na dvou průměrech blízko okraje na hloubku podložek perforované, aby



Obr. 5.4: Mechanokalorický jev v supratekutém $^4\mathrm{He}.$ 

byla zachována jejich maximální rovnoběžnost v rovině kolmé k torznímu závěsu. Idea experimentu je v tom, že je-li taková soustava disků ponořena v kapalině a vzdálenost mezi disky je menší než tzv. vazká hloubka vniku  $\delta = \sqrt{2\eta/\Omega\rho}$ , kde  $\eta$  je dynamická vazkost tekutiny o hustotě  $\rho$ , bude kapalina při torzních oscilacích o úhlové frekvenci  $\Omega$  unášena spolu s fóliemi. Provedeme-li tento experiment ve vakuu, bude doba kmitu takového torzního kyvadla dána tuhostí torzního závěsu a momentem setrvačnosti soustavy. Ve vazké tekutině se doba kmitu prodlouží, neboť moment setrvačnosti torzního kyvadla se díky unášené kapalině zvětší. Tomu odpovídá i výsledek experimentu v normálním kapalném heliu. Při ochlazení pod teplotu supratekutého přechodu však doba kmitu výrazně rostla, což by v případě vazké tekutiny unášené torzně kmitajícími fóliemi odpovídalo značnému ubývání hustoty He II. Z nezávislých experimentů však bylo známo, že hustota He II se s teplotou mění jen nepatrně. Experiment tedy lze interpretovat tak, že He II se chová jako směs dvou nezávislých složek - normální a supratekuté, přičemž pro hustoty jednotlivých složek platí:  $\rho = \rho_n + \rho_s$ . Normální složka je jako každá běžná tekutina díky své vazkosti fóliemi unášena a supratekutá složka zůstává v Andronikašviliho experimentu v klidu, přičemž jak ukazuje obr. 5.5 poměr hustot $\rho_n/\rho_s$  se snižováním teploty rychle klesá.

#### 5.3 Supratekutý film kapalného helia

Popsané neobvyklé vlastnosti supratekutého helia ještě dále umocňuje existence supratekutého filmu. Adsorpce k povrchu pevných látek, který je v kontaktu s kapalinou nebo plynem je sice běžný fyzikální jev, ale v případě supratekutého helia se na povrchu téměř všech<sup>1</sup> pevných povrchů, které jsou s ním v kontaktu, vytváří film o neobvykle velké tloušťce kolem 100 atomových vrstev, tj. typicky kolem 30 nm.

Vlastnosti supratekutého filmu jsou kvalitativně dobře patrné z obr. 5.6. Zkumavka jen částečně ponořená do supratekutého helia se po čase sama naplní až do výšky, která odpovídá hladině okolní kapaliny v lázni. Vyzvedneme-li ji částečně nad hladinu, začne z ní kapalina přetékat zpět do lázně, vyzvedneme-li ji nad



Obr. 5.5: K Andronikašviliho experimentu v supratekutem  ${}^{4}\text{He}$ .

hladinu zcela, uvidíme tvorbu a odkapávání malých kapiček helia do lázně a zkumavka se sama po čase vyprázdní.

Ačkoli z hlediska klasické fyziky je tloušťka adsorbovaného filmu neobvykle silná, je film stále ještě velmi tenký na to, aby umožňoval významné proudění normální složky a představuje tak v podstatě jinou formu "supratekuté díry" a za přenos hmoty je tudíž odpovědná pouze supratekutá složka.

Tloušťka filmu d na svislé hladké ploše vystupující z lázně He II se v izobarických a izotermických podmínkách s výškou h nad hladinou mění přibližně podle vztahu  $d \cong (\sigma/gh)^{-n}$ , kde  $3 \le n \le 4$ , kde  $\sigma$  je povrchové napětí He II, v souladu s teoretickým popisem Dzalošinského, Lifšice a Pitajevského [10] v přiblížení, kdy jak film tak povrch pevné látky jsou popisovány jako kontinuum.

 $<sup>^1</sup>$ Jediným dosud známým povrchem, který supratekuté helium nesmáčí je povrch silně reaktivního kovového cesia.



odpořuje nejen z plochy hladiny lázně, ale i z celé plochy supratekutého filmu, který smáčí veškeré povrchy, které jsou s ní v kontaktu a dochází k přenosu hmoty He filmem směrem vzhůru, kde se film vypařuje. Efektivně se tedy He daleko sil-

Obr. 5.6: Demonstrace vlastností supratekutého filmu $^4\mathrm{He}.$ 

plochy než je plocha hladiny lázně a v kryostatu tak díky tomu vzniká tlakový a tudíž i teplotní gradient, který brání dalšímu snižování teploty lázně. Tento jev je možné omezit "přetržením" filmu, ke kterému dochází díky použití zúžení kryostatu nad hladinou helia s velmi ostrou vnitřní hranou (angl. *film breaker*).

## 5.4 Základní teoretické představy o supratekutosti <sup>4</sup>He

Popsané fyzikální vlastnosti He II jasně ukazovaly na to, že nejde o běžnou kapalinu a že k úspěšnému teoretickému popisu He II bude třeba zvolit zcela nový přístup. Již v roce 1938 přišel London [6] s převratnou ideou, že supratekutost He II úzce souvisí s Boseovou-Einsteinovou kondenzací, tedy s fyzikálním jevem, který jsme podrobně popsali v úvodní kapitole. Jak již bylo zmíněno, po dosazení experimentálně zjištěné hustoty He II do vzorce pro výpočet kritické teploty dostaneme  $T_{\rm B} \simeq 3, 1$  K, tedy hodnotu velmi blízkou teplotě  $T_{\lambda}$ , ačkoli teorie neuvažuje interakce a popisuje ideální plyn bosonů, kterými v této chvíli jsou atomy <sup>4</sup>He. O měsíc později Tizsa [7], veden Londonovou ideou, přišel jako první s dvousložkovým modelem, který kvalitativně dobře vysvětloval záhadné chování He II, především fontánový jev, i další vlastnosti He II, které byly v té době známy<sup>2</sup>. Tizsův dvousložkový model identifikuje přechod do supratekutého stavu s Boseovou-Einsteinovou kondenzací, kdy pod kritickou teplotou jednu složku tvoří kondenzát a druhou nadkondenzátní bosony atomy <sup>4</sup>He.

Na základě Kapicových experimentů v Moskvě přišel Landau díky své fenomenální intuici se zcela novým fenomenologickým teoretickým přístupem [8, 9], který popisuje chování He II nejenom kvalitativně, ale ve velmi dobrém přiblížení i kvantitativně a který podrobně popíšeme níže. Na tomto místě zmíníme pouze to, že ačkoli i v tomto případě jde o dvousložkový model, Landau zcela zavrhl přístup Londona a Tizsy. Jako důvod uvedl, že nic nemůže zabránit interakci atomů kon-

Z praktického hlediska se existence filmu ukazuje jako nepříjemná překážka při dosahování co možná nejnižší teploty pomocí odčerpávání par helia v lázňovém kryostatu. He se totiž

něji vypařuje, z mnohem větší

 $<sup>^2{\</sup>rm Z}$  Tizsova dvousložkového modelu dokonce vyplývá i existence druhého zvuku, který podrobně popisujeme v dalším.

denzátu s nadkondenzátními, což povede ke konečné vazkosti a supratekutost tak nemůže existovat. Landau dokonce Londona v žádné své práci nikdy necitoval.

Z dnešního pohledu je zřejmé, že z jedné strany London s Tizsou a z druhé Landau přišli se vzájemně se doplňujícími částmi teoretického popisu He II a že úplná teorie popisu He II vyžaduje kombinaci obou. Vyplývá to z nových poznatků o Boseově-Einsteinově kondenzaci v systémech alkalických kovů, které jsou podrobně popsány v kapitole 9 o chladných atomových plynech.

## 5.5 Úvod do Landauovy teorie supratekutosti <sup>4</sup>He



Obr. 5.7: Tvar disperzního zákona v supratekutém <sup>4</sup>He při tlaku nasycených par a zvýšeném tlaku 20 atm.

dau pro He II intuitivně postuloval<sup>3</sup> (viz obr. 5.7). Kvazičástice odpovídající lineární počáteční části spektra jsou dlouhovlnné fonony a platí pro ně

$$\varepsilon = u_1 p ,$$
 (5.1)

kde $u_1$  je rychlost zvuku. Kvazičástice odpovídající oblasti kolem lokálního minima jsou krátkovlnné rotony $^4$ s disperzním vztahem

$$\varepsilon = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{\mu} , \qquad (5.2)$$

kde  $\Delta$  je rotonová energetická mezera a  $\mu$  efektivní hmotnost rotonu. Jak je patrné z obr. 5.7, tvar disperzního zákona se mění s teplotou a tlakem, při teplotě 1,1 K a tlaku nasycených par jsou experimentálně zjištěné parametry následující:

$$u_1 = 239 \,\mathrm{m/s}; \ p_0/\hbar = 19, 1 \,\mathrm{nm}^{-1}; \ \Delta/k_{\mathrm{B}} = 8,65 \,\mathrm{K}; \ \mu = 0,16 \,m_4.$$
 (5.3)

Landau publikoval základy své teorie supratekutosti v roce 1941 [8] a v podstatě jí dopracoval v roce 1947 [9]. Vychází z kvantování hydrodynamiky kvantových kapalin, z postulátu, že slabě excitovaný stav kapaliny je možné popsat pomocí modelu ideálního plynu elementárních excitací. Tyto excitace - kvazičástice - se mohou pohybovat v objemu kapaliny a mají určitou energii  $\varepsilon$ a hybnost  $\boldsymbol{p} = h\boldsymbol{k}$ , kde  $\boldsymbol{k}$  je vlnový vektor.

Hlavní charakteristikou elementárních excitací je závislost jejich energie na hybnosti - tzv. disperzní zákon, jehož tvar Lan-

$$(p - p_0)^2$$

 $<sup>^3</sup>$ Tento tvar Landau postuloval až ve své poválečné práci z roku 1947 [9], v jeho článku z roku 1941 [8] rotonové minimum odpovídá nulové hybnosti.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Tento název pro ně navrhl Landaův kolega, nositel Nobelovy ceny Tamm.

Fyzikální smysl dlouhovlnných fononů není třeba nijak podrobně diskutovat, protože je v podstatě analogický s fonony v pevných látkách (viz kapitola 18). Zdůrazněme jenom fakt, že v pevných látkách existují příčné a podélné fonony, ale v He II pouze podélné, neboť jde o kapalinu s nulovým smykovým modulem pružnosti (přesněji s nulovu reálnou částí smykového modulu).

Co se týče rotonů, je situace podstatně složitější. Není pochyb o tom, že rotony skutečně existují, jak vyplývá z experimentů rozptylu neutronů. Otázkou zůstává fyzikální interpretace rotonu. Landau nejprve uvažoval rotony jako elementární víry atomových rozměrů (na dlouhou dobu se i s přispěním Feynmana roton dokonce označoval jako "duch kvantovaného víru") a později je považoval za kvazičástice podstatné pro existenci supratekutosti, odpovídající příslušné části energetického spektra v okolí lokálního minima. Z dnešního pohledu se zdá, že rotony jsou v podstatě fonony s vlnovou délkou odpovídající střední vzdálenosti mezi atomy He II. Existence lokálního energetického minima je důsledkem lokálního prostorového uspořádání kapaliny, které lze popsat tzv. strukturním faktorem. Rotony existují i v normálním kapalném He I, jsou jakousi předzvěstí krystalického uspořádání, takže roton by bylo spíše možné pojmenovat "duch Braggova píku". Rotony tudíž nejsou pro přechod k supratekutosti podstatné, naopak, jejich existence je faktorem supratekutost omezujícím.

Z obr. 5.7 vyplývá, že existují dvě větve rotonů, odpovídající oběma stranám rotonového minima. Pro rotony  $R^+$  jsou vektory hybnosti a grupové rychlosti paralelní, kdežto pro  $R^-$  antiparalelní. Tento rozdíl se jasně projeví v experimentech kvantového vypařování, diskutovaných v samostatné kapitole 7 o kvantové kavitaci a kvantovém vypařování.

Tvar spekter na obr. 5.7 je možné experimentálně určit metodou neutronového rozptylu. Princip metody spočívá v tom, že tepelný neutron o energii  $E_0$  typicky kolem 0,04 eV a vlnovým vektorem  $\mathbf{k}_0$  se nepružně rozptýlí v He II. Protože takové neutrony mají de Brogliovu vlnovou délku srovnatelnou se střední meziatomovou vzdáleností atomů v He II, jsou velmi užitečné při studiu jeho struktury. Po srážce má neutron energii E' a hybnost  $\mathbf{k}'$  a díky zákonům zachování energie a hybnosti musí platit  $E_0 - E' = \hbar \omega$  a  $\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ , kde energie  $\hbar \omega$  a hybnost  $\hbar \mathbf{q}$  jsou předány kapalině. Měřením charakteristik dopadajících a rozptýlených neutronů lze proto pro různé tlaky zjistit  $\mathbf{q}$  a  $\omega$ , tedy body disperzního zákonu He II. Spektra na obr. 5.7 byla měřena právě tímto způsobem.

## 5.6 Landauovo kritérium supratekutosti

Na základě znalosti energetického spektra kvazičástic tvořících normální složku He II lze jednoduše demonstrovat existenci kritických rychlostí proudění - tzv. Landauovo kriterium supratekutosti. Uvažujme těleso o relativně velké hmotnosti Mpohybující se rychlostí V v He II. Pro jednoduchost předpokládáme, že teplota je velmi nízká a podíl normální složky zanedbatelně malý. Předpokládejme generaci kvazičástice - fononu nebo rotonu - o hybnosti p a energii  $\varepsilon(p)$ . Ze zákona zachování hybnosti a zákona zachování energie plyne

$$\frac{MV^2}{2} = \frac{MV_{\rm f}^2}{2} + \varepsilon(p) \; ; \; M\boldsymbol{V} = M\boldsymbol{V}_{\rm f} + \boldsymbol{p} \; . \tag{5.4}$$

Vyloučení konečné rychlosti těles<br/>a $V_{\rm f}$ po vzniku kvazičástice z obou rovnic vede k

$$\varepsilon(p) - \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{V} + \frac{p^2}{2M} = 0 , \qquad (5.5)$$

což za předpokladu dostatečně hmotného tělesa<sup>5</sup> vede ke vztahu  $pV\cos\Theta = \varepsilon(p)$ , kde  $\Theta$  je úhel mezi trajektoriemi kvazičástice a tělesa. Kvazičástice budou generovány pouze v případě, je-li to energeticky výhodné, tj. je-li splněno  $V \geq \varepsilon(p)/p$ , neboli přesáhne-li rychlost pohybujícího se tělesa Landauovu kritickou rychlost

$$v_{\rm L} = \left[\frac{\varepsilon(p)}{p}\right]_{\rm min}.$$
(5.6)

Dokud je rychlost tělesa pohybujícího se v He II v limitě nulové teploty nižší než kritická<sup>6</sup>, nebude na těleso působit síla odporu prostředí - jde o tzv. d´Alambertův paradox. Jakmile však rychlost přesáhne hodnotu  $v_{\rm L}$ , dojde ke vzniku excitací a pohybující se těleso předá část své energie kapalině, čímž se zvýší podíl normální složky a tudíž dochází ke zvýšení teploty. Z makroskopického pohledu tak na těleso začne působit třecí síla odporu prostředí podobně jako v běžné vazké tekutině.

Podmínka  $d[\varepsilon(p)/p]/dp = 0$ , tj.  $d\varepsilon(p)/dp = \varepsilon(p)/p$  může být splněna jak pro fonony (odpovídá tak rychlosti zvuku), tak pro rotony (pro ně je při tlaku nasycených par  $v_{\rm L} \cong 58$  m/s a se zvyšujícím se tlakem klesá), odpovídající různým částem energetického spektra (disperzního zákona) na obr. 5.7. Jak jsme již diskutovali v úvodní kapitole, Landauovo kritérium supratekutosti pro ideální bosonový plyn s klasickým disperzním vztahem  $\varepsilon(p) = p^2/(2m)$  vede k  $v_{\rm L} = 0$ . Situace se však změní zapnutím interakce, která tento disperzní vztah modifikuje a následně vede k supratekutosti, např. v BEC systémech par alkalických kovů či atomárního vodíku (viz kapitola 9).

Popíšeme ještě alternativní názornou interpretaci existence Landauovy kritické rychlosti. Představme si spektrum z obr. 5.7 symetricky vzhledem k vertikální ose energie - jeho pravá část tak bude odpovídat kvazičásticím pohybujícím se vpravo, kdežto levá část těm z nich pohybujícím se vlevo. Aplikací Galileovy transformace jednoduše získáme tvar takového spektra v pohybující se inerciální souřadné soustavě (tj. pro pozorovatele pohybujícího se He II spolu s tělesem) - spektrum se jako celek nakloní na jednu či druhou stranu v závislosti na tom, kam se těleso pohybuje.

 $<sup>^{5}</sup>$ To je dobře splněno pro makroskopická tělesa, ale např. pro pohybující se heliové ionty však již třetí člen zanedbatelně malý nebude, viz kapitola 7.

 $<sup>^6</sup>$ Platí při zanedbání detailního výpočtu obtokové rychlosti s přihlédnutím na tvar obtékaného tělesa, např. pro kouli bude obtoková rychlost na "rovníku" 1,5 krát větší než rychlost pohybu koule.

Kritická rychlost $v_{\rm L}$  pro rotony pak odpovídá takové rychlosti pozorovatele (tělesa), při níž se rotonové minimum dotkne osy x. Pro fonony se tak přirozeně stane při dosažení rychlosti zvuku. Z obr. 5.7 také hned vyplývá, proč se rotonová kritická rychlost s tlakem snižuje.

Experimentálně se platnost Landauova kritéria supratekutosti (vzhledem k excitacím v He II ve formě kvantovaných vírů) podařilo prokázat teprve mnohem později, jak je popsáno v kapitole 8 o iontech. Prokázání platnosti kritéria supratekutosti je bezesporu klíčovým úspěchem Landauovy teorie supratekutosti. Na něj navazuje kvantitativně velmi přesný popis termodynamických vlastností a hydrodynamiky He II, který následuje.

Všimněme si ještě, že při odvození Landauova kritéria supratekutosti jsme nikde nevyužili faktu, že by v He II nebyly již nějaké kvazičástice přítomny - jejich přítomnost tudíž nemůže tyto úvahy ovlivnit a Landauovo kritérium bude platné i při konečné teplotě, které odpovídá nenulová hustota normální složky. V He II tedy (v limitě malých rychlosí proudění, pokud nejsou přítomny kvantované víry, které budeme diskutovat později) mohou existovat dvě nezávislá rychlostní pole,  $v_s$  pro supratekutou složku a  $v_n$  pro normální složku, jako důsledek kvantově mechanické superpozice stavů. Představa, že by část atomů helia tvořila supratekutou a část normální složku je zcestná, stejně jako otázka zda heliový atom vytržený z He II náležel té či oné složce.

## 5.7 Termodynamika He II

Znalost energetického spektra elementárních excitací dovoluje kvantitavní odvození termodynamiky He II, alespoň pokud je kvazičástic nepříliš mnoho a lze je považovat za ideální plyn (tj. dostatečně hluboko pod teplotou  $T_{\lambda}$ ). Specifickou vlastností He II je fakt, že počet kvazičástic není pevně dán, ale určuje se (stejně jako tomu bylo u ideálního Boseova plynu v úvodní kapitole) z podmínky tepelné rovnováhy, vyjádřené nulovou hodnotou chemického potenciálu. Ačkoli jsou následná odvození formálně shodná, termodynamiky Boseova plynu a He II jsou díky rozdílu v energetických spektrech odlišné nejen kvantitativně, ale i kvalitativně (např. vlastnosti Boseova plynu nezávisejí na hustotě, kdežto u He II ano).

Výpočet termodynamických funkcí je metodicky analogický s tím, který byl proveden v úvodní kapitole pro volný Boseův plyn, ovšem s tím rozdílem, že všechny termodynamické funkce He II jsou součtem fononových a rotonových příspěvků, které lze v dobrém přiblížení považovat za nezávislé.

Naznačíme nyní ještě obecnější metodiku výpočtu, který se hodí i pro pohybující se He II, kde, jak jsme již zmínili, mohou existovat dvě nezávislá rychlostní pole proudění: normální složka o hustotě  $\rho_n$  a supratekutá složka o hustotě  $\rho_s$ , přičemž pro hustotu He II platí

$$\rho = \rho_{\rm n} + \rho_{\rm s} \ . \tag{5.7}$$

Hybnost jednotkového objemu He II tedy bude

$$\boldsymbol{j} = \rho_{\rm n} \boldsymbol{v}_{\rm n} + \rho_{\rm s} \boldsymbol{v}_{\rm s} \ . \tag{5.8}$$

Nechť tedy existují dva typy postupného pohybu s rychlostmi  $\boldsymbol{v}_{\rm s}$  a  $\boldsymbol{v}_{\rm n}$ . Energie elementární excitace v laboratorní souřadné soustavě E(p) vyjádříme přes energii  $\varepsilon(p)$  v souřadné soustavě, ve které je supratekutá složka v klidu, tj.  $E(p) = \varepsilon(p) + \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\rm s}$ . Rychlost normální složky  $\boldsymbol{v}_{\rm n}$  (opět v laboratorní soustavě) je postupný pohyb plynu elementárních excitací. Rozdělovací funkce závisí na energii vzájemného pohybu  $E'(p) = E(p) - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\rm n} = \varepsilon(p) + \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\rm s} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\rm n}$ . Proto je pro výpočet termodynamických funkcí proudícího He II třeba použít zobecněného Planckova rozdělení (srovnej se vztahem 1.18)

$$n = \frac{1}{e^{\beta[\varepsilon(p) + \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\rm s} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\rm n}]} - 1}, \qquad (5.9)$$

kde  $\beta = (k_{\rm B}T)^{-1}$ . Nyní je oproti úvodní kapitole pouze třeba zaměnit výraz pro energii volných bosonů  $\varepsilon(p) = p^2/(2m)$  za $\varepsilon_{\rm f}(p) = u_1 p$  pro fonony a $\varepsilon_{\rm r}(p) = \Delta + (p - p_0)^2/\mu$  pro rotony. Pro ně však platí, že  $\Delta \gg k_{\rm B}T$  a pro výpočty termodynamických funkcí lze Planckovo rozdělení redukovat na Bolzmannovo ve tvaru

$$n = e^{-\beta[\varepsilon(p) + \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}]} .$$
(5.10)

Uvedeme nejprve výsledky naznačených výpočtů pro He II v klidu. Pro počet fononů a rotonů v závislosti na teplotě dostaneme

$$N_{\rm f} = 2\zeta(3)4\pi \left(\frac{k_{\rm B}T}{2\pi\hbar u_1}\right)^3 ; \ N_{\rm r} = \frac{2p_0^2(\mu k_{\rm B}T)^{3/2}}{(2\pi)^{3/2}\hbar^3} \ e^{-\Delta/k_{\rm B}T} \ , \tag{5.11}$$

kde  $\zeta(x)$  je Riemanova zeta funkce. Vidíme, že se snižující se teplotou počet rotonů exponenciálně klesá (tzv. "vymrzání" rotonů), takže při milikelvinovch teplotách lze jejich příspěvek k termodynamice He II zanedbat.

Pro entropii S a měrné teplo c objemové jednotky He II dostaneme vztahy

$$S = S_{\rm f} + S_{\rm r} = \frac{16\pi^5 k_{\rm B}}{45} \left(\frac{k_{\rm B}T}{2\pi\hbar u_1}\right)^3 + k_{\rm B}N_{\rm r} \left(\frac{\Delta}{k_{\rm B}T} + \frac{3}{2}\right) \quad ; \tag{5.12}$$

$$c = c_{\rm f} + c_{\rm r} = \frac{16\pi^5 k_{\rm B}}{15} \left(\frac{k_{\rm B}T}{2\pi\hbar u_1}\right)^3 + k_{\rm B}N_{\rm r} \left(\frac{\Delta^2}{k_{\rm B}^2 T^2} + \frac{\Delta}{k_{\rm B}T} + \frac{3}{4}\right) , \qquad (5.13)$$

které platí, je-li He II v klidu. Pro proudící He II platí zobecněné vztahy

$$\overline{S} = \frac{S_{\rm f}}{1 - (u_{\rm cf}/u_1)^2} + S_{\rm r} \frac{k_{\rm B}T}{p_0 u_{\rm cf}} \sinh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B}T} - k_{\rm B} N_{\rm r} \left(\frac{k_{\rm B}T}{p_0 u_{\rm cf}} \sinh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B}T} - \cosh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B}T}\right) ;$$
(5.14)

$$\overline{c} = \frac{c_{\rm f}}{1 - (u_{\rm cf}/u_1)^2} + c_{\rm r} \frac{k_{\rm B}T}{p_0 u_{\rm cf}} \sinh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B}T} - k_{\rm B} N_{\rm r} \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B}T} \sinh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B}T}, \qquad (5.15)$$

kde  $u_{\rm cf} = |\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s}|$  je vzájemná rychlost proudění normální a supratekuté složky, označovaná obvykle jako rychlost protiproudu (angl. *counterflow velocity*).

Pro hustotu normální složky proudícího He II pak platí obecný výraz

$$\rho_{\rm n} = \rho_{\rm f} + \rho_{\rm r} = \frac{\pi^4 k_{\rm B} T}{27 u_1^2} \frac{N_{\rm f}}{1 - (u_{\rm cf}/u_1)^3} + \frac{k_{\rm B} T N_{\rm r}}{u_1^2} \left( \cosh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B} T} - \frac{k_{\rm B} T}{p_0 u_{\rm cf}} \sinh \frac{p_0 u_{\rm cf}}{k_{\rm B} T} \right) ,$$
(5.16)

který se pro klidovou hustotu normální složky redukuje na

$$\rho_{\rm n} = \frac{\pi^4 k_{\rm B} T}{27 u_1^2} N_{\rm f} + \frac{p_0^2}{3 k_{\rm B} T} N_{\rm r} \,. \tag{5.17}$$

Tento výraz je pro oblast nízkých teplot (kde je možné omezit se na přiblížení neinteragujících kvazičástic) ve velmi dobré shodě s experimentálními daty (např. s Andronikašviliho experimentem). Zvídavější čtenáře odkazujeme na učebnice teoretického kursu Landau-Lifšic nebo na Chalatnikovovu monografii [11].

#### 5.8 Hydrodynamika He II

Hydrodynamika He II je vytvořena na základě představy, že při nenulové teplotě v něm současně existují dva typy pohybu a He II se chová jako směs dvou složek - normální a supratekuté. Proto je hydrodynamiku He II možné popsat v rámci dvousložkového modelu. Zdůrazněme však ještě jednou, že dvousložkový model (tak jak jej navrhl Landau a dále rozpracoval Chalatnikov [11]) není víc než vhodná fenomenologická forma popisu proudění kvantových kapalin, která však velmi dobře souhlasí s experimentem.

Odvození hydrodynamických rovnic dvousložkového modelu je poměrně komplexní a čtenář jej nalezne např. v kursu Landau-Lifšic nebo v Chalatnikovově knize [11]. V zobecněném tvaru vypadají rovnice (pro nestlačitelné přiblížení, tj. div $\boldsymbol{v}_{\rm s} = {\rm div} \, \boldsymbol{v}_{\rm n} = 0$ ) následovně:

$$\rho_{\rm s} \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\rm s}}{\partial t} + \rho_{\rm s}(\boldsymbol{v}_{\rm s} \nabla) \boldsymbol{v}_{\rm s} = -\frac{\rho_{\rm s}}{\rho} \nabla p + \rho_{\rm s} S \nabla T + \frac{\rho_{\rm n} \rho_{\rm s}}{2\rho} \nabla (\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s})^2 - \boldsymbol{F}_{\rm ns} , \qquad (5.18)$$

$$\rho_{\rm n} \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\rm n}}{\partial t} + \rho_{\rm n} (\boldsymbol{v}_{\rm n} \nabla) \boldsymbol{v}_{\rm n} = -\frac{\rho_{\rm n}}{\rho} \nabla p - \rho_{\rm s} S \nabla T - \frac{\rho_{\rm n} \rho_{\rm s}}{2\rho} \nabla (\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s})^2 + \boldsymbol{F}_{\rm ns} + \eta \nabla^2 \boldsymbol{v}_{\rm n} , \quad (5.19)$$

kde  $\eta$  je dynamická vazkost normální složky. Rozebereme nyní fyzikální smysl jednotlivých členů. Člen  $F_{\rm ns}$  je síla vnitřního tření, která váže rychlostní pole normální a supratekuté složky, jsou-li přítomny kvantované víry. K této otázce se vrátíme později a budeme ji podrobně diskutovat v kapitole 10 o kvantové turbulenci. Zatím předpokládejme, že kvantované víry v kapalině nejsou a tento člen zanedbáme, stejně jako členy kvadratické, které se při dostatečně pomalém proudění He II neprojeví. Zanedbáme-li ještě i disipaci energie a proudění budeme považovat za izotermické (jak se běžně dělá při popisu proudění klasických tekutin), zmizí i členy s gradientem teploty. Zbydou tak v nejjednodušším případě dvě rovnice:

$$\rho_{\rm s} \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\rm s}}{\partial t} + \rho_{\rm s}(\boldsymbol{v}_{\rm s} \nabla) \boldsymbol{v}_{\rm s} = -\frac{\rho_{\rm s}}{\rho} \nabla p \; ; \; \rho_{\rm n} \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\rm n}}{\partial t} + \rho_{\rm n}(\boldsymbol{v}_{\rm n} \nabla) \boldsymbol{v}_{\rm n} = -\frac{\rho_{\rm n}}{\rho} \nabla p + \eta \nabla^2 \boldsymbol{v}_{\rm n} \; . \; (5.20)$$

1	റ	റ
T	4	J

První z nich je Eulerova rovnice pro supratekutou složku (proto je její proudění potenciální a platí rot  $v_s = 0$ ) a druhá je Navierova-Stokesova rovnice pro normální vazkou složku. Tyto rovnice nejsou vázané, proto jsou rychlostní pole obou složek v tomto nejjednodušším případě nezávislá.

Ubezpečíme se nyní, že rovnice (5.18) je v souladu s experimenty vykazujícími fontánový [3] a mechanokalorický [4] jev. Zanedbáme kvantované víry a pro pomalé proudění i kvadratický člen na pravé straně, a uvažujeme-li stacionární řešení, bude i levá strana rovnice rovna nule. Dostáváme tak známý vztah pro fontánový jev:

$$\frac{\Delta p}{\Delta T} = \rho S , \qquad (5.21)$$

který odvodil jiným způsobem London již v roce 1939. Platnost tohoto vztahu byla ověřena mnoha experimenty a měření fontánového tlaku je spolehlivým způsobem měření entropie He II.

Podrobněji se hydrodynamikou He II a zejména kvantovou turbulencí se budeme dále zabývat v samostatné kapitole 10.

## 5.9 Vlnové procesy v He II

Díky tomu, že v supratekutém He II jsou díky superpozici stavů možné dva druhy pohybu popsané pomocí dvousložkového modelu, mohou se v tomto prostředí šířit neobvyklé vlny, nazývané analogicky s vlnami hustoty v pružném prostředí zvuky. Odvodíme jejich existenci na základě dvoukapalinového popisu He II.

Vyjdeme z rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \boldsymbol{j} = -\nabla (\rho_{\rm s} \boldsymbol{v}_{\rm s} + \rho_{\rm n} \boldsymbol{v}_{\rm n})$$
(5.22)

a zanedbáme disipaci, takže můžeme zapsat rovnici zachování entropie ve tvaru

$$\frac{\partial(\rho S)}{\partial t} = -\nabla(\rho S \boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}) , \qquad (5.23)$$

protože supratekutá složka entropii nenese. Dále vyjdeme ze zjednodušeného tvaru pohybových rovnic dvojsložkového modelu (5.18) (ve zvukové vlně předpokládáme malé rychlosti, takže zanedbáme disipaci, vnitřní tření a nelineární rychlostní členy)

$$\rho_{\rm s} \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\rm s}}{\partial t} = -\frac{\rho_{\rm s}}{\rho} \nabla p + \rho_{\rm s} S \nabla T , \qquad (5.24)$$

$$\rho_{\rm n} \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\rm n}}{\partial t} = -\frac{\rho_{\rm n}}{\rho} \nabla p - \rho_{\rm s} S \nabla T . \qquad (5.25)$$

Sečtením rovnic (5.24) a (5.25) dostaneme vztah

$$\frac{\partial \boldsymbol{j}}{\partial t} = -\nabla p \ , \tag{5.26}$$

kde jsme zanedbali členy druhého řádu typu  $v_s(\partial \rho_s/\partial t)$ . Tento vztah v kombinaci s rovnicí kontinuity (5.22) dává

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \triangle p \,. \tag{5.27}$$

Další potřebný vztah dostaneme tak, že nejprve vyloučíme  $\nabla p$ z rovnic (5.24) a (5.26):

$$\rho_{\rm n} \frac{\partial}{\partial t} (\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s}) = -\rho S \nabla T . \qquad (5.28)$$

(povšimněme si, že jde o potvrzení výše diskutovaného faktu, že teplotní gradient vede k relativnímu pohybu normální a supratekuté složky, tj. fontánovému jevu) a z rovnic kontinuity (5.22) a zachování entropie (5.23) vyjádříme

$$\nabla(\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s}) = -\frac{\rho}{\rho_{\rm s}S} \frac{\partial S}{\partial t} . \qquad (5.29)$$

Kombinací posledních dvou vztahů dostaneme

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = \frac{\rho_{\rm s}}{\rho_{\rm n}} S^2 \triangle T \,. \tag{5.30}$$

Budeme nyní řešit soustavu rovnic (5.27) a (5.30), ale přepíšeme ji tak, že vyjádříme tlak a teplotu jako funkce hustoty a entropie:  $p = p(\rho, S); T = T(\rho, S)$ , tj.

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial t^2} = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{\rm S} \triangle \rho + \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_{\rho} \triangle S \,; \tag{5.31}$$

$$\frac{\partial^2 S}{\partial t^2} = \frac{\rho_{\rm s}}{\rho_{\rm n}} S^2 \left[ \left( \frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_{\rm S} \bigtriangleup \rho + \left( \frac{\partial T}{\partial S} \right)_{\rho} \bigtriangleup S \right] \,. \tag{5.32}$$

Budeme hledat řešení této soustavy rovnic ve formě rovinných vln o úhlové frekvenci $\omega$ šířících se rychlostí u ve směru osyxza předpokladu, že entropie a hustota se jen nepatrně mění, tj. ve formě

$$\rho = \rho_0 + \rho' \exp\left[i\omega(t - x/u)\right]; \ S = S_0 + S' \exp\left[i\omega(t - x/u)\right].$$
(5.33)

Dosazením do rovnic dostaneme vztahy

$$\left[\left(\frac{u}{u_1}\right)^2 - 1\right]\rho' - \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_\rho \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_{\rm S} S' = 0\,; \tag{5.34}$$

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_{\rm S} \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\rho} S' - \left[\left(\frac{u}{u_2}\right)^2 - 1\right] \rho' = 0, \qquad (5.35)$$

kde jsme zavedli

$$u_1^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_{\rm S} \; ; \; u_2^2 = \frac{\rho_{\rm s}}{\rho_{\rm n}} S^2 \left(\frac{\partial T}{\partial S}\right)_{\rho} \; .$$
 (5.36)

Podmínkou pro to, aby rovnice (5.34) a (5.35) platily současně, je rovnost nule jejich determinantu, odkud plyne

$$\left[\left(\frac{u}{u_1}\right)^2 - 1\right] \left[\left(\frac{u}{u_2}\right)^2 - 1\right] = \left(\frac{\partial p}{\partial S}\right)_{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p}\right)_{\rm S} \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_{\rm S} \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\rho} = \frac{c_{\rm p} - c_{\rm V}}{c_{\rm p}} \cong 0.$$
(5.37)

Protože koeficient tepelné roztažnosti  $(\partial \rho / \partial T)_{\rm p}$  je pro He II extrémně nízký, lze pravou stranu tohoto výrazu s dobrou přesností zanedbat. Dostaneme tak dvě řešení.

#### 5.9.1 První zvuk

Termín "první zvuk" používáme pro řešení typu  $u = u_1$ . Z rovnice (5.34) okamžitě plyne S' = 0. Jde o běžný zvukový mód, jaký se šíří i v He I nad teplotou supratekutého přechodu nebo v jiných kapalinách či plynech, tedy podélné vlny hustoty  $\rho' \neq 0$  - protože reálná část smykového modulu pružnosti v kapalinách a plynech je nulová, ani v He II se nemůže šířit příčný zvuk (který běžně existuje v pevných látkách). První zvuk je tedy vlnění, při kterém normální a supratekutá složka oscilují společně ( $v_{\rm n} = v_{\rm s}$ ) a jejich podíl a tudíž i teplota zůstává konstantní. To je samozřejmě za předpokladu, že zanedbáme disipaci, což jsme v zájmu zjednodušení učinili na začátku našeho odvození. Tlumení prvního zvuku, stejně jako tlumení zvuku ve vzduchu či vodě při pokojových teplotách, je způsobeno klasickými faktory spojenými s konečnými hodnotami kinematické vazkosti a tepelné vodivosti a nebudeme se jím zde podrobněji zabývat. Zvídavější čtenáře odkážeme na Chalatnikovovu knihu [11]. Experimentálně je možné rychlost (viz obr.5.8) a tlumení prvního zvuku měřit např. pomocí kmitajících křemenných krystalů ponořených do kapalného helia a použitých jako zdroj a přijímač zvukových vln typicky v megahertzové oblasti frekvencí [12].

#### 5.9.2 Druhý zvuk

Termín "druhý zvuk" používáme pro řešení typu  $u = u_2$ . Z rovnice (5.35) plyne  $\rho' = 0$ . Nejde tedy o běžný zvukový mód ve smyslu podélných oscilací celkové hustoty  $\rho = \rho_n + \rho_s$ , ale o oscilace hustot normální a supratekuté složky v protifázi. Protože supratekutá složka nenese entropii, jde o oscilace entropie. Poměr hustot  $\rho_n/\rho_s$  osciluje, osciluje tedy i teplota. Proto je druhý zvuk možné chápat jako vlny teploty či entropie, které nemají klasickou analogii. Druhý zvuk je možné experimentálně sledovat např. v rezonátoru, kdy je jeho jedna stěna tvořena plochým odporovým topením a protilehlou stěnu tvoří citlivý odporový teploměr. Budeme-li do topení pouštět střídavý proud  $I_0 \cos(\omega t)$ , bude teploměr detekovat druhý zvuk na dvojnásobné frekvenci, protože výkon topení bude úměrný  $\cos^2(\omega t)$ .

Jak jsme se již zmínili, samotnou existenci druhého zvuku lze předpovědět už na základě původního Tizsova modelu, vycházejícího z modelu ideálního Boseova plynu. Landauova fenomenologická dvoukapalinová teorie však umožňuje výpočet



Obr. 5.8: Teplotní závislost rychlosti prvního a druhého zvuku v $^4\mathrm{He}$  při tlaku nasycených par.

teplotní závislosti rychlosti druhého zvuku (viz obr.5.8). Lze např. odvodit [11], že při snižování teploty by se  $u_2$  měla limitně blížit  $u_2/\sqrt{3}$ . Experimentální potvrzení této předpovědi posloužilo jako jeden z opěrných bodů prověrky Landauovy teorie.



Obr. 5.9: Třetí zvuk je komplexní zvukový mód, který lze generovat na povrchu supratekutého filmu. Je znázorněno vypařování a opětovná kondenzace par.

váním v oblastech mezi hřebeny a opětovnou kondenzací par na vrcholech vln

### 5.9.3 Třetí zvuk

Dalším známým zvukovým módem je tzv. třetí zvuk na supratekutém filmu. Film je natolik tenký, že se v jeho objemu normální složka může díky konečné viskozitě jen velmi omezeně pohybovat a jde tedy téměř výhradní o oscilace supratekuté složky. Protože ale oscilace supratekuté složky vyvolávají periodické změny teploty, jsou doprovázeny zvýšeným vypařo-

5.9

třetího zvuku. Pro rychlost třetího zvuku platí přibližný vztah

$$u_3^2 = \left(\frac{f\lambda}{2\pi} + \frac{2\pi\sigma}{\rho\lambda}\right) \tanh\frac{2\pi d}{\lambda} , \qquad (5.38)$$

kde  $\sigma$  je povrchové napětí a f van der Waalsova síla působící ze strany podložky na jednotku objemu. Tento vztah lze dovodit (úplnou teorii třetího zvuku čtenář najde v knize [13]) z analogie s povrchovými vlnami o vlnové délce  $\lambda$  na mělké vodě o hloubce d. Pro dlouhé vlny, kdy je dominujícím první člen a při zanedbání pohybu normální složky lze rychlost třetího zvuku (řádově 10-100 cm/s) vyjádřit zjednodušeně jako

$$u_3 \cong \sqrt{\frac{\rho_{\rm s} f d}{\rho}} \ . \tag{5.39}$$

Třetí zvuk lze generovat pomocí modulovaného infračerveného záření a detekovat pomocí polarizovaného světla. Této techniky lze využít k měření tloušťky tekoucího filmu a také k určení hustoty supratekuté složky v něm.

#### 5.9.4 Čtvrtý zvuk

Existenci zvukových módů označovaných jako třetí a čtvrtý zvuk předpověděl v roce 1959 Atkins [14]. Čtvrtý zvuk jsou tlakové vlny v He II uvnitř pórovitého prostředí - supratekuté díry. V takovém prostředí je normální složka díky konečné vazkosti "přibita" ke stěně a pohybovat se může pouze supratekutá složka.

Při odvození rychlosti čtvrtého zvuku lze opět vyjít z hydrodynamických rovnic dvousložkového modelu, ale k pravé straně rovnice (5.25) je třeba přidat laminární sílu odporu pórovitého prostředí na normální složku ve tvaru  $R\boldsymbol{v}_n$ . Řešení vlnových rovnic je opět možné hledat ve formě rovinných vln o úhlové frekvenci  $\omega$ , a v limitě  $R/\omega \to \infty$  získáme rychlost čtvrtého zvuku ve tvaru

$$u_4 = \sqrt{\frac{\rho_{\rm s}}{\rho} u_1^2 + \frac{\rho_{\rm n}}{\rho} u_2^2} \,. \tag{5.40}$$

Čtvrtý zvuk se samozřejmě šíří pouze při  $T < T_{\lambda}$  a jeho detekce je přesvědčivým důkazem supratekutosti. Při snižování teploty pod bodem  $\lambda$  rychlost čtvrtého zvuku rychle stoupá a postupně se stává shodnou s rychlostí šíření prvního zvuku  $u_1$ .

#### 5.10 Kvantově mechanický popis He II

V úvodu této kapitoly jsme již diskutovali, že London jako první přišel s názorem, že pro vysvětlení supratekutosti He II hraje podstatnou roli jev Boseovy-Einsteinovy kondenzace. Experimenty s neutronovým rozptylem existenci kondenzátu v He II potvrzují. V návaznosti na úvodní kapitolu zahrnující fyziku volného a slabě interagujícího Boseova plynu proto zavedeme makroskopickou kondenzátovou vlnovou funkci

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \Psi_0(\boldsymbol{r},t)e^{\mathrm{i}\phi(\mathbf{r},t)}, \qquad (5.41)$$

kde jak amplituda  $\Psi_0({\bm r},t)$ tak makroskopická fáz<br/>e $\phi({\bm r},t)$ mohou být funkcemi prostorových souřadnic a času.

Při kvantově mechanickém popisu problémů zahrnujícím jedinou částici je veličina  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)$  interpretována jako pravděpodobnost nalezení této částice v  $(\mathbf{r}, t)$ . Jaká však může být interpretace veličiny  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)$ , jde-li o makroskopickou kondenzátovou vlnovou funkci?

V úvodní kapitole jsme ukázali, že zapnutí interakce v Boseově plynu vede k ochuzení kondenzátu, a experimenty s neutronovým rozptylem vedou k závěru, že v He II je v kondenzátu, díky silné intereakci v kapalině, jen něco kolem 10% heliových atomů. Z Andronikašviliho pokusu však plyne, že pod 1 K je He II tvořeno téměř výhradně supratekutou složkou. Musíme proto předpokládat, že supratekutá složka je tvořena nejen samotným kondenzátem, ale i těmi atomy, o něž je díky silným interakcím kondenzát ochuzen. Abychom při nízkých teplotách ve shodě s experimentem měli  $\rho_{\rm s} \rightarrow \rho$ , budeme předpokládat, že

$$\Psi^*(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi_0^2 = \rho_{\rm s}/m_4.$$
(5.42)

Dále budeme postulovat, že ve stacionárních podmínkách můžeme makroskopickou vlnovou funkci zapsat ve tvaru

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \Psi_0 e^{\mathbf{i}\phi(\mathbf{r})}, \qquad (5.43)$$

tj. že makroskopická fáze je reálnou funkcí v 3D prostoru<sup>7</sup>.

Ukažme si nyní, jaké z tohoto popisu plynou zákonitosti pro proudění supratekuté složky. Aplikujme na vlnovou funkci (5.43) operátor hybrosti

$$\hat{p}\Psi = -i\hbar\nabla\Psi = \boldsymbol{p}\Psi, \qquad (5.44)$$

odkud plyne  $p = \hbar \nabla \phi$ . Definujeme-li hybnost jednoho atomu helia v supratekuté složce jako  $p = m_4 v_s$  vidíme, že rychlost supratekuté složky je dána vztahem

$$\boldsymbol{v}_{\rm s} = \frac{\hbar}{m_4} \nabla \phi \,. \tag{5.45}$$

Tento vztah velmi názorně ukazuje hluboký fyzikální smysl makroskopické fáze - její prostorový gradient určuje velikost a směr proudění supratekuté složky. Aplikujemeli na tento vztah operaci rotace zjistíme (protože rot $\nabla \phi = 0$ ),

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = 0. \tag{5.46}$$

Tato podmínka znamená, že proudění supratekuté složky musí být potenciální (makroskopická fáze  $\phi$  hraje roli rychlostního potenciálu), čili bezvírové. Připomeňme si, že v klasické dynamice tekutin se veličina definovaná jako rotace rychlostního pole, rot v, nazývá vířivost.

 $<sup>^7{\</sup>rm V}$ některých případech je třeba uvažovat, že amplituda makroskopické vlnové funkce je závislá na r,např. v jádrech kvantovaných vírů nebo při jevech analogických Josephsonovým jevům slabé supravodivosti, viz kapitola 16.

Je zajímavé a podnětné dále rozvíjet kvantově mechanický popis supratekuté složky. Budeme předpokládat, že makroskopická vlnová funce  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  je obecně řešením časově závislé Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_4}\nabla^2\Psi + \overline{V(r)}\Psi. \qquad (5.47)$$

kde  $\overline{V(r)}$  je střední potenciální energie. Lze poměrně jednoduše ukázat, že její roli hraje chemický potenciál, tedy energie, o kterou se zvýší energie celého systému přidáním jedné částice. Dosazením  $\Psi$  ve tvaru (5.43) do rovnice (5.47) dostaneme dvě rovnice, odpovídající reálné a imaginární části, z čehož např. plyne rovnice kontinuity pro supratekutou složku. Pro hlubší pohled na věc odkazujeme hloubavější čtenáře na knihu [15].

## 5.11 Kvantování cirkulace v He II

Makroskopická vlnová funkce musí být v každém bodě jednoznačně definovaná. Vzhledem k tomu, že  $\Psi \propto \exp\{i\phi\}$ , může se fáze lišit o celočíselný násobek  $2\pi n$ , aniž by se hodnota vlnové funkce změnila. Tento fakt vede ke kvantování cirkulace v supratekuté složce He II a objasňuje existenci kvantovaných vírů.

Fyzikální veličina cirkulace je definována jako drahový integrál supratekuté rychlosti po uzavřené smyčce v objemu He II

$$\Gamma = \oint_L \boldsymbol{v}_{\rm s} d\ell = \frac{\hbar}{m_4} \oint_L \nabla \phi d\ell \,. \tag{5.48}$$

Představme si (obr. 5.10 A) kvantovací osu protínající jed-

noznačně souvislou oblast He II v nějakém bodě O uvnitř smyčky L. Obejdeme-li smyčku, nesmí se hodnota vlnové funkce změnit. To bude splněno i tehdy, bude-li se po obejití smyčky fáze lišit o  $2\pi n$ , kde  $n \neq 0$  je celé číslo. Budeme-li však smy-

čku L stahovat až k vybranému



Obr. 5.10: K definici cirkulace v jednoznačně (A) a nejednoznačně (B) souvislé oblasti.

(A) a nejednoznačné (B) souvisle oblasti. bodu O, kromě případu n = 0dostáváme singularitu a fáze (a tím i makroskopická vlnová funkce) přestane být definována. V jednoznačně souvislé oblasti proto musí platit  $\Gamma = 0$ .

V nejednoznačně souvislé oblasti (viz obr. 5.10 B) pro naznačený tvar smyčky k tomuto problému nedojde, neboť smyčku nelze do bodu O vybraného tak, že opět leží uvnitř smyčky L, ale ve stěně (tedy vně objemu He II) stáhnout. V takovém případě je cirkulace kvantována a platí

$$\Gamma = n \frac{\hbar}{m_4} = n\kappa \ , \tag{5.49}$$

kde $\kappa=9,997\times10^{-8}~{\rm m}^2/{\rm s}$ je cirkulační kvantum. Analogický pohled na kvantování cirkulace je, že se kvantuje moment hybnosti připadající na jeden heliový atom v jednotkách  $\hbar.$ 

Podmínkám nejednoznačně souvislé oblasti vyhovuje např. nádoba ve formě toroidu. Pro nenulovou cirkulaci v ní mohou (podobně jako v supravodiči elektrické stínící supraproudy) díky gradientu fáze existovat tzv. persistentní hmotové supraproudy. Jejich existence byla prokázána v experimentech [16] s rotujícím torzním rezonátorem, ve kterém se He II nacházelo v porézním prostředí (normální složka je opět díky konečné viskozitě "přibita" ke stěně) tvaru toroidu, který zároveň sloužil jako rezonátor čtvrtého zvuku. Supraproudy byly identifikovány na základě Dopplerova jevu pro čtvrtý zvuk. Při rotaci rezonátoru, jeho zastavení, rotaci opačným směrem atd., byla pozorována hysterzní smyčka podobně jako při magnetizaci feromagnetika. Roli magnetického pole zde hraje úhlová rychlost rotace a roli magnetizace přebírají persistentní supraproudy. O této hydrodynamicko-magnetické analogii se zmíníme podrobněji v kapitole 10 o kvantové turbulenci.

#### 5.11.1 Kvantovaný vír v He II



Obr. 5.11: Struktura kvantovaného víru a profily rychlosti a hustoty supratekuté složky.

K přeměně jednoznačně souvislé oblasti na mnohoznačně souvislou může v objemu He II dojít spontánně. Lze si to zjednodušeně představit tak, že supratekutá složka sama do sebe "vyvrtá díry" Angströmových rozměrů - jádra kvantovaných vírů, kolem nichž pak cirkuluje. V případě jednoho přímého n krát kvantovaného víru v nekonečném objemu He II je rychlost supratekuté složky v závislosti na vzdálenosti r od osy víru dána vztahem

 $v_{\rm s} = \hbar n/(m_4 r) = \kappa n/(2\pi r)$ . Snadno nahlédneme, že je pro libovolnou kruhovou smyčku splněna podmínka kvantování cirkulace v jednotkách  $\kappa$ . Jádro víru má rozměr koherenční délky (angl. *healing lenghth*), která je charakteristickou délkou, na níž může dojít k podstatné změně amplitudy vlnové funkce  $\Psi$ . Jak vidíme z obr. 5.11, hustota supratekuté složky je na ose víru nulová a rychle stoupá se vzdáleností od osy víru, takže na rozměru jádra víru již zhruba odpovídá  $\rho_{\rm s}$  v objemu He II.

Ukážeme, že v He II jsou energeticky výhodné jedenkrát kvantované víry. Energie jednotkové délky kvantovaného víru je v podstatě energie cirkulující supratekuté složky

$$\varepsilon_{\rm v} = \int_{\rm a_0}^{\rm b} \pi \rho_{\rm s} v_{\rm s}^2 r dr = \frac{n^2 \rho_{\rm s} \kappa^2}{4\pi} \ln\left(\frac{b}{a_0}\right) , \qquad (5.50)$$

kde  $a_0$  je poloměr jádra víru a b je buď rozměr nádoby nebo charakteristická vzdá-

lenost mezi kvantovanými víry v případě, že je jich více. Protože  $\varepsilon_v \propto n^2$ , je energeticky výhodné, aby se *n*-krát kvantovaný vír rozpadl na *n* jedenkrát kvantovaných vírů<sup>8</sup>.

Pro kvantované víry platí tzv. Kelvinův teorém - cirkulace podél víru je konstantní<sup>9</sup>- z něhož vyplývá, že kvantované víry mohou začínat či končit pouze na stěnách nádoby nebo na volném povrchu He II. Uvnitř kapaliny mohou existovat v podobě uzavřených vírových smyček.

#### 5.11.2 Experimentální důkaz kvantování cirkulace v He II



Obr. 5.12: K vysvětlení Magnusovy síly.

#### objemu He II.

Pokud ovšem v He II např. díky rotaci vznikne kvantovaný vír a bude strunou zachycen (tj. jeho jádro se bude nacházet uvnitř struny, což je energeticky výhodné), situace se změní. Při pohybu struny rychlostí v (což je analogické případu, budeli struna touto rychlostí obtékána) na ni bude působit Magnusova síla  $f_{\rm M} = \rho_{\rm s} \boldsymbol{\kappa} \times \boldsymbol{v}$  kolmo ke směru po-

Za první experimentální důkaz kvantování cirkulace v He II lze považovat Vinenův experiment z roku 1961 s vibrující strunou [17]. Ta byla natažena v kryostatu svisle a v horizontálním magnetickém poli, takže mohla být v He II rozkmitána na jedné ze svých rezonančních frekvencí Lorentzovou silou vznikající díky střídavému elektrickéhmu proudu, který jí protékal. Ve vakuu nebo v He II v klidu lze vibrace struny popsat pomocí dvou normálních vibračních módů, které jsou na sebe kolmé a degenerované. Vlastní frekvence těchto módů však jsou v He II nižší, protože efektivní hmotnost jednotkové délky struny  $m_{\rm H}$  bude hydrodynamicky obohacená, v případě kruhového průřezu struny o hmotnost vytlačeného



Obr. 5.13: K Vinenovu experimentu o kvantování cirkulace v He II.

hybu struny při vibraci. Její původ je zřejmý z obr. 5.12 - na jedné straně víru se podélná rychlost struny a rychlost cirkulující supratekuté složky kolem jádra kvantovaného víru sčítají, na druhé straně naopak odečítají, což podle Bernoulliovy rovnice vede k rozdílu tlaku (tj. síly na jednotku plochy). Působením Magnusovy síly dojde k tomu, že roviny normálních vibračních módů struny začnou precedovat, normální módy struny se stanou kruhově polarizovanými a jejich frekvence se

 $<sup>^8</sup>$ Toto pravidlo obecně neplatí v supratekutých fázích  $^3{\rm He}$ díky komplexnější struktuře kondenzátové vlnové funkce, jak ukážeme v následující kapitole.

<sup>&</sup>lt;sup>9</sup>Lord Kelvin jej zformuloval pro víry o libovolné cirkulaci v ideální tekutině.

budou lišit o  $\Delta f = \rho_{\rm s} \kappa / (2\pi m_{\rm H})$ . Tento rozdíl se v experimentu projeví jako frekvence rázů měřeného napětí, indukovaného na struně a metoda tak vede k přímému měření cirkulačního kvanta  $\kappa$ .

Histogram na obr. 5.13 ilustruje, že ne všechny případy odpovídaly buď n = 0 (struna je volná, bez víru) nebo n = 1 (zachycen je právě jeden kvantovaný vír). Objevily se i případy, kdy n zdánlivě není celé, což lze vysvětlit tím, že kvantovaný vír nebyl zachycen strunou po celé délce, ale jen částečně, jak je znázorněno v levé části obr. 5.13. Pozdější experimenty také ukázaly, že v závislosti na průměru může kmitající struna zachytit i více vírů než jeden.

## 5.12 Rotující He II

Velmi zajímavá situace nastává při rotaci nádoby obsahující He II úhlovou rychlostí  $\Omega$ . Podle původního Landauova dvoukapalinového modelu (bez síly vnitřního tření) by ve stacionárním stavu měla být normální složka, stejně jako jakákoli jiná vazká tekutina, unášena stěnami nádoby, takže pro její vířivost platí  $\boldsymbol{\omega} = \operatorname{rot} \boldsymbol{v}_n = 2\boldsymbol{\Omega}$ .



Obr. 5.14: Tvar menisku hladiny rotujícího He II makroskopicky odpovídá tvaru menisku rotující vazké kapaliny díky vzniku mřížky kvantovaných vírů.

Podle Landauova kritéria supratekutosti by se supratekutá složka až do překročení kritické rychlosti pro rotony (cca 60 m/s) neměla rotace účastnit, protože pro ni platí podmínka potenciálního (bezvírového) proudění rot  $v_s = 0$ .

Očekávali bychom tedy, že hloubka paraboloidu - menisku, který se při rotaci na hladině vytvoří, bude pro rotující He I a He II různá. V experimentu Osborna [18], provedeného již v roce 1950, se však ukázalo, že tvar menisku vytvořeného při rotaci válcové nádoby s He II je na první pohled stejný jako pro libovolnou vazkou kapalinu. Jednoduchým vysvětlením by bylo, že rotace zruší supratekutost, ale experiment Andronikašviliho s Kaverkinem [19] prokázal existenci fontánového jevu v rotujícím He II.

Osbornův experiment můžeme

přesvědčivě vysvětlit, budeme-li předpokládat, že v rotujícím He II se vytvoří mřížka jedenkrát kvantovaných vírů. Supratekutá složka může imitovat rotaci tuhého tělesa (pro niž platí  $\boldsymbol{\omega} = \operatorname{rot} \boldsymbol{v} = 2\boldsymbol{\Omega}$ , bude-li plošná hustota kvantovaných vírů  $n_{\rm v} = \omega/\kappa = 2\Omega/\kappa$ . Pro charakteristické délkové měřítko převyšující vzdálenost mezi kvantovanými víry tak bude v průměru platit  $\langle \omega_{\rm s} \rangle = \langle \operatorname{rot} \boldsymbol{v}_{\rm s} \rangle = 2\Omega$ .

Bez mřížky kvantovaných vírů by byl meniskus hladiny He II plošší. Prohloubí

se tím, že s každým kvantovaným vírem je spojeno napětí, číselně rovné energii jednotkové délky kvantovaného víru, které působí na hladinu He II a meniskus tak prohlubuje.

Lze ukázat, že podobně jako pro mřížku vírů v supravodiči je energeticky nejvýhodnější, aby kvantované víry v rotujícím He II (kromě oblasti blízko stěn) vytvořily dvojrozměrnou hexagonální mřížku. Tato mřížka je stacionární v souřadnicích rotujících spolu s nádobou.

Ukážeme nyní, za jakých podmínek bude energeticky výhodné, aby mřížka kvantovaných vírů v rotujícím He II vznikla. Z mechaniky víme, že podmínkou stability je nalezení minima pro  $F' = F - L\Omega$ , kde F je volná energie a L moment hybnosti rotujícího He II. Z této podmínky nalezneme kritickou úhlovou rychlost  $\Omega_c^1$ , která musí být překročena, aby byl vznik kvantovaného víru ve válcové nádobě o poloměru R energeticky výhodný. To nastane tehdy, bude-li záporný výraz  $\varepsilon_v(R) - \ell_v\Omega$ , kde energii jednotkové délky již známe: výraz (5.50) a moment hybnosti jednotkové délky víru vypočítáme:

$$\ell_{\rm v} = \int_{\rm a_0}^{\rm R} \rho_{\rm s} r v_{\rm s}(2\pi r) dr = \frac{1}{2} \rho_{\rm s} \kappa R^2 , \qquad (5.51)$$

takže

$$\mathbf{\Omega}_{\rm c}^1 = \frac{\kappa}{R^2} \ln\left(\frac{R}{a_0}\right) \ . \tag{5.52}$$

Neznamená to ovšem, že při překročení této kritické úhlové rychlosti opravdu ke vzniku kvantovaného víru dojde, jak budeme hlouběji diskutovat v dalším.

Na možnou existenci kvantovaných vírů poprvé upozornil v diskusi na konferenci Onsager [20] a ve vztahu k He II byla tato idea dále rozpracována Feynmanem [11]. Ten je mimo jiné také autorem tzv. Feynmanova kritéria, podle kterého by v proudění He II měl vzniknout vírový kroužek o poloměru R při překročení Feynmanovy kritické rychlosti

$$v_{\rm F} = \frac{\kappa}{R} \ln\left(\frac{R}{a_0}\right) \ . \tag{5.53}$$

Lehce nahlédneme, že tento vztah je analogický výrazu (5.52), ve krerém budeme uvažovat jako Feynmanovu obvodovou rychlost válcové nádoby.

Podobně jako je tomu v supravodičích druhého druhu, kdy při překročení horního kritického magnetického pole je supravodivost zrušena, protože jádra magnetických vírů se dotknou, i pro rotující He II lze stejným způsobem ocenit horní kritickou úhlovou rychlost otáčení, při níž supratekutost zanikne. Stalo by se tak pro

$$\mathbf{\Omega}_{\rm c}^2 = \frac{\hbar}{m_4 a_0^2} , \qquad (5.54)$$

ovšem tato kritická úhlová rychlost je řádu $10^{12}~{\rm s}^{-1},$ takže je v praxi nedosažitelná.

## 5.13 Vnitřní tření

V diskuzi o kvantovaných vírech jsme dosud ignorovali přítomnost normální složky He II, která s kvantovanými víry interaguje. Fyzikální příčinou této interakce - síly vnitřního tření - je rozptyl normální složky, tj. plynu fononů a rotonů, na jádrech kvantovaných vírů.

Fenomenologická teorie vnitřního tření vychází z experimentů Halla a Vinena [22], kteří využili existence dobře definované mřížky kvantovaných vírů v rotujícím kryostatu a jako nástroj pro měření interakce s normální složkou použili druhý zvuk. Připomemňme si, že druhý zvuk je oscilační mód, ve kterém normální a suprate-kutá složka kmitají v protifázi a oscilující normální složka tak může interagovat s kvantovanými víry. Hall a Vinen použili dva typy rezonátorů druhého zvuku - axiální, v němž se druhý zvuk šířil paralelně s jádry kvantovaných vírů mřížky a radiální, v němž byl směr šíření druhého zvuku kolmý na směr jader kvantovaných vírů.

Experiment ukázal, že rychlost šíření druhého zvuku se v přítomnosti kvantovaných vírů v prvním přiblížení nemění. Ze závislosti měřené amplitudy druhého zvuku na rychlosti rotace bylo zjištěno, že ve směru jader se druhý zvuk téměř netlumí, kdežto ve směru kolmém na jádra je tlumení úměrné rychlosti rotace  $\Omega$  a tedy i hustotě kvantovaných vírů. S přihlédnutím k měřeným teplotním závislostem tlumení je možné sílu vnitřního tření vyjádřit ve tvaru

$$F_{\rm sn} = B \frac{\rho_{\rm s} \rho_{\rm n}}{\rho} \,\,\widehat{\mathbf{\Omega}} \times \left[\mathbf{\Omega} \times \left(\overline{\boldsymbol{v}}_{\rm s} - \overline{\boldsymbol{v}}_{\rm n}\right)\right] + B' \frac{\rho_{\rm s} \rho_{\rm n}}{\rho} \,\,\mathbf{\Omega} \times \left(\overline{\boldsymbol{v}}_{\rm s} - \overline{\boldsymbol{v}}_{\rm n}\right) \,, \tag{5.55}$$

kde  $\overline{v}_s$  a  $\overline{v}_n$  jsou hodnoty rychlosti supratekuté a normální složky středované přes oblast obsahující dostatečný počet kvantovaných vírů a experimentálně zjištěné koeficienty *B* a *B'* slabě závisejí na frekvenci druhého zvuku a jsou tabelované [23]. Koeficient *B* je mírou disipace energie, kdežto *B'* je bezdisipační a vyjadřuje frekvenční posuv druhého zvuku. Kromě teplot blíko pod přechodem do supratekutého stavu je pro praktické účely často možné člen s *B'* zanedbat. Hodnoty koeficientů *B* a *B'* dobře souhlasí s výsledky Schwarzových počítačových simulací dynamiky kvantovaných vírů [14], kde jsou výsledky dané ve formě koeficientů  $\alpha$  a  $\alpha'$ , které do sebe již zahrnují teplotní závislost  $\rho_s \rho_n / \rho$ .

Vnitřní tření hraje velmi důležitou roli v proudění He II. Z výrazu (5.55) vidíme, že síla vnitřního tření závisí na rozdílu mezi rychlostmi supratekuté a normální složky. Bez přítomnosti kvantovaných vírů jsou pro izotermická proudění jejich rychlostní pole nezávislá, avšak přítomnost kvantovaných vírů vede k tomu, že se síla vnitřního tření snaží jejich rychlostní pole sjednotit. Proto se silně turbulentní proudění He II (ve kterém je velká hustota kvantovaných vírů, což by ve výrazu (5.55) formálně odpovídalo velké rychlosti rotace) chová kvaziklasicky a proudění He II s vysokým Reynoldsovým číslem lze popsat jako proudění jednosložkové tekutiny o určité efektivní kinematické vazkosti. K problematice vnitřního tření se vrátíme v samostané kapitole 10 o kvantové turbulenci.

## 5.14 Nukleace a interakce kvantovaných vírů v He II

Dosud jsme diskutovali kvantované víry v He II a nezabývali se podmínkami, za jakých mohou ve vzorku He II vůbec vzniknout. Odvodili jsme také dolní kritickou úhlovou rychlost rotace nádoby a zmínili obecnější Feynmanovo kritérium, při jejichž překročení je existence kvantovaných vírů energeticky výhodná. Neznamená to však, že při překročení těchto podmínek kvantované víry nutně vzniknou, neboť He II se může nacházet v metastabilním, tzv. Landauově stavu, kdy se supratekutá složka neúčastní rotace a platí pro ni vztah rot $\boldsymbol{v}_{\rm s}=0.$ 

#### 5.14.1 Nukleace kvantovaných vírů

Kvantované víry vznikají spontánně při ochlazení vzorku přes kritickou teplotu. Z pohledu Ginzburgovy-Landauovy teorie to lze chápat tak, že rozměr jádra víru (koherenční délka) při přiblížení zdola k  $T_{\lambda}$  diverguje a jádra se dotýkají, takže situace v He II za rotace je podobná jako je tomu v supravodiči druhého druhu v oblasti horního kritického magnetického pole. He II je z tohoto úhlu pohledu analogické supravodiči druhého druhu s velmi nízkým prvním kritickým polem. Obecnější pohled dává tzv. Kibbleův-Zurkův mechnismus vzniku čarových defektů při fázových přechodech druhého druhu, probíhajících konečnou rychlostí, který budeme diskutovat v kapitole 11. Víry, které vzniknou ve vzorku při ochlazení přes  $T_{\lambda}$  následně relaxují a pro ideální nádobu např. kulového tvaru by měly v inerciální vztažné soustavě vymizet<sup>10</sup>. Topologie původního vírového klubka sice hraje při jeho rozpadu důležitou roli, ale není překážkou úplného rozpadu klubka, protože přiblíží-li se dva kvantované víry svými jádry dostatečně blízko, může dojít k jejich přepojení.

Vzhledem k rozměru jader vírů je však libovolnou stěnu nádoby obsahující He II nutné považovat za velmi hrubou. Nerovnosti povrchu způsobují zachycení vírů (angl. *pinning*) podobně jako nečistoty v supravodičích. Někdy se v literatuře mluví o tzv. pasti na kraby (angl. *lobster pots*), kterou si můžeme představit jako otvor ve stěně nebo jako dva výčnělky, mezi nimiž je natažen kvantovaný vír. Protože musí končit na stěně nádoby, nelze jej odstranit bez toho, abychom nejprve zvětšili jeho délku. Takové tzv. remanentní víry proto v nádobě zůstanou. Obecně je velmi obtížné připravit vzorek nebo jeho část, která by byla prosta remanentních vírů. Tyto víry pak slouží jako zárodky pro tzv. extrinsickou generaci dalších. Kritické rychlosti pro extrinsickou generaci kvantovaných vírů jsou nízké, typicky několik cm/s. Jedním z důsledků extrinsické generace kvantovaných vírů bylo, že se dlouho experimentálně nedařilo prověřit Landauovo kritérium supratekutosti.

Situace je jiná, budeme-li uvažovat, že máme k dispozici čistý vzorek (nebo jeho část) He II ve smyslu, že v něm nejsou remanentní víry. Kvantovaný vír tak musí vzniknout intrinsicky. Díky Heisenbergovu principu neurčitosti existují kvantově mechanické fluktuace, které vytvářejí zárodečné vírové smyčky. Je-li vzorek v klidu, tyto zárodky opět zanikají. V dostatečně silném proudění, řádově 10 m/s, však může dojít k jejich expanzi, tj. k intrinsickému vzniku kvantovaných vírů. Nejpříznivější

 $<sup>^{10}</sup>$  Je dobré si uvědomit, že pouhá rotace Země odpovídá rovnovážnému stavu s mřížkou o plošné hustotě cca 200 vírů/m².

situace nastává při obtékání ostré hrany, kdy je rychlost proudění hydrodynamicky významně zvýšena. Experimentálně lze intrinsickou generaci kvantovaných vírů pozorovat v proudění He II submikronovými otvory v tenkých membránách nebo při pohybu nabitých iontů v He II.

#### 5.14.2 Interakce mezi víry

zrcadlový vír

Obr. 5.16: Ilustrace

zrcadlového víru.

Budeme nyní uvažovat nejjednodušší konfigurace kvantovaných vírů a diskutovat jejich dynamiku. Začneme naše úvahy v limitě velmi nízkých teplot, kdy je možné zanedbat vliv normální složky He II.

Chování izolovaného páru rovnoběžných vírů vzdálených od sebe d závisí na tom, zda jsou jejich cirkulace shodné nebo opačné. Podstatné je uvědomit si, že jeden z nich se nachází v rychlostním poli druhého. Proto se ve stacionárním stavu dvojice vírů s paralelní cirkulací (viz obr. 5.15 dole) bude otáčet kolem společného těžiště úhlovou rychlostí  $\Omega = \kappa/(\pi d^2)$  a jejich kinetická energie na jednotku délky bude  $\varepsilon_{\rm v}^{++} =$  $\rho_{\rm s}\kappa^2/(2\pi)\ln(R^2/ad)$ , kde R je opět rozměr systému. V opačném případě antiparalelní cirkulace (viz obr. 5.15 nahoře) se vírový pár bude pohybovat rovnoměrně přímočaře rychlostí  $v_{\rm i} = \kappa/(2\pi d)$  ve směru kolmém k rovině vírů a kinetická energie na jednotku délky páru bude  $\varepsilon_{\rm v}^{+-} = \rho_{\rm s} \kappa^2 / (2\pi) \ln(d/a)$ . Povšimněme si, že  $\varepsilon_{\rm v}^{+-}$ je menší než  $\varepsilon_v^{++}$ , neboť na velkých vzdálenostech se rychlostní pole vírů antiparalelního páru ruší.



Obr. 5.15: Chování dvojice rovnoběžných vírů s paralelní (dole) a antiparalelní (nahoře) cirkulací.

Jako speciální případ páru s antiparalelní cirkulací je možné chápat situaci, kdy je jediný přímý vír umístěn rovnoběžně se stěnou náboby. Těsně u jádra víru nejsou proudnice supratekuté složky stěnou znatelně ovlivněny, ale je zřejmé, že stěna způsobí deformaci proudového pole supratekuté složky - proudnice budou ve směru ke stěně zploštělé a supratekutá složka tam musí proudit rychleji. Lze ukázat, že stěnu lze nahradit tzv. zrcadlovým vírem (angl. *image voxtex*) s opačnou cirkulací, aniž by se proudové pole změnilo. Je proto zřejmé, že kvantovaný vír se bude pohybovat rovnoběžně se stěnou nádoby.

Uvažovali jsme pouze nejjednodušší případ v geometrii jediného přímého víru rovnoběžného se stěnou nádoby. Aniž bychom rozebírali složitější konfigurace a např. formu zrcadlového víru pro zakřivené stěny nádoby je zřejmé, že tvar nádoby bude mít podstatný vliv na dynamiku kvantovaných vírů.

Za další speciální připad můžeme považovat kruhový vírový kroužek. Protože se každý jeho segment nachází v rychlostním poli protilehlého segmentu vzdáleného



o průměr kroužku d = 2R, bude se kroužek pohybovat rovnoměrně přímočaře ve směru kolmém k jeho rovině rychlostí (angl. *self-induced velocity*)

$$v_{\rm si} = \frac{\kappa}{4\pi R} \ln\left(\frac{8R}{a} - \frac{1}{4}\right) \,. \tag{5.56}$$

Pro hrubé ocenění rychlosti pohybu vírových kroužků je možné použít zjednodušené kritérium  $v_{\rm si} \approx \kappa/d$ , neboť díky malému rozměru jádra víru se ve většině praktických případů hodnota logaritmu velmi jen málo mění.

V případě konečné teploty se situace podstatným způsobem změní, díky interakci vírového kroužku s normální složkou prostřednictvím síly vnitřního tření. Kroužek se bude pohybovat ve stejném směru jako při nulové teplotě, ale jeho energie bude následkem disipativních rozptylových procesů klesat, takže se bude zmenšovat jeho průměr a zároveň poroste jeho rychlost, až kroužek zanikne. Jeho energie se v konečném důsledku jako v klasickém případě přemění na teplo.

#### 5.15 Vizualizace kvantovaných vírů v He II

Ačkoli existenci kvantovaných vírů v He II bylo možné po dlouhou dobu považovat za experimentálně prokázanou, jejich přímá vizualizace se ukázala jako velmi obtížný úkol. Poprvé se to podařilo v experimentech Yarmchuka a Packarda pomocí heliových iontů, se kterými se seznámíme v kapitole 8 a tuto metodu tam budeme diskutovat.

V klasické dynamice tekutin je velmi rozšířenou a názornou metodou studia proudění jeho vizulalizace, např. pomocí vhodných malých pevných částic, které jsou proudem kapaliny unášeny a jejich trajektorie opticky zaznamenávány. Jelikož He II je čirá kapalina o velmi malé viskozitě (cca 100 krát menší než pro vodu) a je zhruba 7 krát lehčí než voda, jsou zde na částice použitelné k vizualizaci proudění nebo zobrazení rozložení kvantovaných vírů kladeny vysoké nároky. Úspěšná vizualizace proudění He II se podařila teprve nedávno [25], s částicemi ve formě zmrzlých vloček směsi vodíku a deuteria, které se v He II volně vznáší, neboť jejich hustota je dána poměrem



Obr. 5.17: Kvantované víry v He II.

směsi vodíku a deuteria a dobře odpovídá hustotě He II.

Experimentálně se směs plvnného vodíku a deuteria přimíchá k plynnému heliu a tato výsledná směs se vpustí do normálního kapalného He I, tedy nad teplotou přechodu do supratekutého stavu<sup>11</sup>. Vodík s deuteriem zmrzne (teplota tuhnutí je kolem 20 K) v podobě malých vloček, jejichž velikost, řádově 1  $\mu$ m, je dána poměrem objemu helia ku směsi vodíku s deuteriem. Teprve pak se odčerpáním par helia kryostat ochladí a tím v něm kapalné helium přejde do supratekutého stavu. Kryostat je opatřen optickými okénky, takže je možné použít laser a osvětlit jím svislou



Obr. 5.18: Vizualizace mřížky kvantovaných vírů rotujícího He II.

tenkou (méně než 1 mm) vrstvu He II a částice jiným okénkem v osvětlené vrstvě fotografovat.

Na obr. 5.17 vidíme ukázku kvantovaných vírů v He II, které spontánně vznikly při přechodu kapalného helia do supratekutého stavu. Víry jsou dekorovány vločkami zmrzlé směsi vodíku a deuteria, neboť na ně v blízkosti víru působí Magnusova síla, která je lokalizuje do jejich jader.

Jak ukazuje obr. 5.18, při rotaci kryostatu vznikne mřížka kvantovaných vírů, kterou je touto metodou možné vyfotografovat.

#### 5.16 Literatura

- [1] P. Kapitza, Nature 141, 74 (1938).
- [2] J. F. Allen, A. D. Misener, Nature 141, 75 (1938).
- [3] J. F. Allen, H. Jones, Nature 141, 243 (1938).
- [4] J. G. Daunt, K. Mendelssohn, Nature 143, 719 (1939).
- [5] E. L. Andronikashvili, Journal of Physics, (Moscow) 10, 201 (1946).
- [6] F. London, Nature 141, 643 (1938).
- [7] L. Tizsa, Nature 141, 913 (1938).
- [8] L. D. Landau, J. Phys. USSR 5, 356 (1941).
- [9] L. D. Landau, J. Phys. USSR 11, 91 (1947).
- [10] I. E. Dzyaloshinskii, E. M. Lifshic, L. P. Pitaevskii, Adv. Phys. 10, 165 (1961).
- [11] I. M. Chalatnikov, Teorija svěrchtěkučesti, Nauka, Moskva (1971).
- [12] C. E. Chase, Proc. R. Soc. A 220, 116 (1953).

 $<sup>^{11}\</sup>mathrm{P}$ ři vpuštění směsi vodíku a deuteria přímo do supratekutého helia totiž dochází ke konglomeraci vloček.

- [13] D. J. Bergmann, *Physical Acoustic* vol. XI, Chapter 1 (ed. W. P. Mason and R. P. Thurston), Academic press, New York (1975).
- [14] K. R. Atkins, Phys. Rev. 113, 962 (1959).
- [15] D. R. Tilley, J. Tilley, Superfluidity and Superconductivity, Adam Hilger (1986).
- [16] H. Kojima, W. Veith, S. J. Putterman, E. Guyon, I. Rudnick, *Phys. Rev. Lett.* 27, 714 (1971); H. Kojima, W. Veith, E. Guyon, I. Rudnick, *J. Low Temp. Phys.* 8, 187 (1972).
- [17] W. F. Vinen, Proc. Roy. Soc. A 260, 218 (1961).
- [18] D. V. Osborne Proc. Phys. Soc. A 63, 909 (1950).
- [19] E. L. Andronikashvili, I. P. Kaverkin, Zh. Exp. Teor. Fiz. 28, 126 (1955).
- [20] L. Onsager, Nuovo Cimento 6, suppl. 2, 249 (1949).
- [21] R. P. Feynman, Progress in Low Temperature Physics, vol. 1, Chapter 2, North-Holland, Amsterdam (1955).
- [22] H. E. Hall, W. F. Vinen, Proc. Roy. Soc. A 238 204, 215 (1956).
- [23] R. J. Donnelly, C. F. Barenghi, J. Phys. Chem. Data 27, 1217 (1998).
- [24] K. W. Schwarz, Phys. Rev. B 18, 245 (1978); 31, 5782 (1985); 38, 2398 (1988); Phys. Rev. Lett. 50, 364 (1983).
- [25] G. P. Bewley, D. Lathrop, K. Sreenivasan, Nature 441, 588 (2006).

## 6 Supratekuté fázy hélia-3

P. Skyba, L. Skrbek

## 6.1 Základné vlastnosti supratekutých fáz <sup>3</sup>He

Pri teplotách vyšších ako 3.2 K plynné <sup>3</sup>He a pod touto teplotou, v dôsledku van der Waalsových síl, kvapalné <sup>3</sup>He má všetky symetrie, ktoré kondenzovaná látka môže mať: translančnú symetriu, kalibračnú symetriu U(1) a dve symetrie SO(3)pre spinovú a orbitálnu rotáciu. Pri teplotách nižších ako 100 mK sa kvapalné <sup>3</sup>He chová ako silno interagujúca Fermiho kvapalina a jeho fyzikálne vlastnosti sú veľmi dobre opísané Landauovou teóriou. Kvázičastice <sup>3</sup>He, t.j. atómy <sup>3</sup>He oblečené do interakcií, majú spin rovný 1/2, a podobne ako elektróny v kovoch môžu vytvárať Cooperove páry (CP). Na rozdiel od elektrónov v kovoch, v prípade kvapalného <sup>3</sup>He nie je k dispozícii mriežka a tým elektrón-fononová interakcia, ktorá by viedla k vytvoreniu Cooperových párov. Keďže kvázičastice <sup>3</sup>He majú nenulový vlastný magnetický moment - spin - je to práve magnetická interakcia medzi týmito spinmi, ktorá umožní tvorbu Cooperových párov. Takto pri postupnom ochladzovaní kvapalného <sup>3</sup>He, pri teplotách nižších ako 1 mK (v závislosti od tlaku sa táto teplota mení v intervale od 0.93 mK do 2.7 mK), kedy kinetická energia kvázičastíc  ${}^{3}$ He je porovnateľná s energiou tejto slabej magnetickej interakcie medzi kvázičasticami, nastáva fázový prechod <sup>3</sup>He do supratekutého stavu. Supratekutosť <sup>3</sup>He bola predpovedaná Pitajevským [1] a experimentálne pozorovaná Leem, Osheroffom a Richardsonom v roku 1973 [2].

Fyzikálny obraz supratekutého <sup>3</sup>He je zložitejší než v prípade elektrónových párov: kvázičastice <sup>3</sup>He sú hmotné objekty a tie, vytvoriac pár, budú krúžiť okolo spoločného ťažiska, pričom energia Cooperovho páru bude nižšia o hodnotu energie energetickej medzery  $\Delta$ , ako energia nespárovaných kvázičastíc. Rotáciou kvázičastíc okolo spoločného ťažiska vzniká orbitálny moment páru L = 1 (podobne ako u rotujúceho zotrvačníka) a naviac výsledný spin páru je rovný jednej, takže supratekuté <sup>3</sup>He sa vyznačuje aj magnetickými vlastnosťami. Aj tu, pri tomto fázovom prechode sa spontánne narušuje symetria: (i) symetria orbitálna SO<sup>L</sup>(3) - Cooperov pár kvázičastíc <sup>3</sup>He rotuje okolo spoločného ťažiska, (ii) symetria spinová SO<sup>S</sup>(3)-Cooperov pár má spin rovný 1, kým nespárované atómy <sup>3</sup>He majú spin rovný 1/2 a nakoniec (iii) symetria kalibračná (U(1)), ktorá sa prejavuje spontánnym nastavením fázy parametra usporiadania.

Dipól-dipólová interakcia medzi kvázičasticami <sup>3</sup>He tvoriacimi Cooperov pár vedie k slabej, avšak priestorovo veľmi silne anizotrópnej väzbe. Väzbová konštanta charakterizujúca intenzitu tejto interakcie môže byť vyjadrená v tvare [4, 5]:

$$g_{\rm D}(T) \approx \frac{\mu_{\rm m}^2}{a^3} \left(\frac{\Delta(T)}{E_F}\right)^2 n,$$
 (6.1)

1	- 1	1
1	-4	1
_		_

kde  $\mu_m^2/a^3$  je priemerná hodnota dipólovej energie medzi dvoma kvázičasticami s jadrovým magnetickým momentom  $\mu_m$  a Fermiho energiou  $\varepsilon_F$ , ktoré sú od seba vzdialené *a*. Druhý člen vyjadruje pravdepodobnosť, že tieto dve kvázičastice vytvoria CP a *n* je celková hustota kvázičastíc. Hoci dipól-dipólová interakcia je veľmi slabá a v normálnych systémoch je zvyčajne úplne potlačená tepelnými fluktuáciami takže makroskopicky sa skoro vôbec neprejavuje. Avšak, táto interakcia sa v supratekutých systémoch stáva dominantnou, pretože zavádza gradienty parametra usporiadania, ktoré nastavia supratekutý systém do stavu s takou orientáciou parametra usporiadania, pre ktorý je hodnota energie dipól-dipólovej interakcie minimálna. Inými slovami, supratekutosť <sup>3</sup>He, ako makroskopický kvantový jav, zosilní mikroskopickú dipól-dipólovú interakciu prostredníctvom kvantovej koherencie supratekutého kondenzátu. Fázový prechod <sup>3</sup>He do supratekutého stavu je spojený s narušením troch symetrií SO<sup>L</sup>(3)xSO<sup>S</sup>(3)xU(1).

Supratekuté <sup>3</sup>He teda pozostáva z Cooperových párov (CP)- spárovaných kvázičastíc, ktoré predstavujú supratekutú zložku a nespárovaných kvázičastíc, predstavujúcich normálnu zložku. Znižovaním teploty hustota normálnej zložky klesá a pri teplotách nižších ako 200  $\mu K$  je hustota nespárovaných kvázičastíc tak malá, že ich možno považovať za neinteragujúci plyn. Pri týchto teplotách je supratekuté <sup>3</sup>He prakticky v základnom stave, ktorý je z pohľadu kvázičastíc v podstate vákuovým stavom. Supratekuté <sup>3</sup>He sa pri týchto teplotách chová ako kvantové vákuum.



Obr. 6.1: Schématické znázornenie Cooperovho páru s L = 1 a S=1. Pár pozostáva z dvoch kvázičastíc <sup>3</sup>He so spinom 1/2 rotujúcich okolo spoločného ťažiska.

Supratekuté <sup>3</sup>He tvoria CP, ktoré majú ako spinový (S = 1), tak aj orbitálny moment (L=1). V dôsledku párovania do spinovo tripletného stavu s orbitálnou p-vlnou je parameter usporiadania (alebo vlnová funkcia) zložitejší než pre klasické párovanie eletrónov do singletného stavu alebo v prípade supratekutého <sup>4</sup>He. Parameter usporiadania je opísaný v dvoch priestoroch: orbitálnom a spinovom a môže byť vyjadrený ako:

$$\Psi(\mathbf{k}) = \Psi_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k})|\uparrow\uparrow\rangle + \Psi_{\downarrow\downarrow}(\mathbf{k})|\downarrow\downarrow\rangle + \sqrt{2}\Psi_{\uparrow\downarrow}(\mathbf{k})(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) , \qquad (6.2)$$

kde  $\boldsymbol{k}$  je jednotkový vektor v  $\boldsymbol{k}$ -priestore definujúci polohu na Fermiho ploche,  $\Psi_{\uparrow\uparrow}(\boldsymbol{k}), \Psi_{\downarrow\downarrow}(\boldsymbol{k})$  a  $\Psi_{\uparrow\downarrow}(\boldsymbol{k})$  sú vlastné hodnoty jednotlivých spinových podstavov, určených hodnotami projekcie operátora spinu  $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$  a  $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$  na vybranú os kvantovania (os z).

Parameter usporiadania tripletného párovania v spinovom priestore možno v

maticovom tvare vyjadriť ako

$$\Psi(\hat{k}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow\uparrow} & \Psi_{\uparrow\downarrow} \\ \Psi_{\downarrow\uparrow} & \Psi_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} .$$
(6.3)

Pre porovnanie, parameter usporiadania singletného párovania elektrónov v supravodičoch je možno vyjadriť maticou

$$\Psi_{\rm BCS}(\hat{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \Psi_{\uparrow\downarrow} \\ \Psi_{\downarrow\uparrow} & 0 \end{pmatrix} .$$
(6.4)

V prípade singletného párovania je parameter usporiadania komplexným skalárom. Tripletné párovaniae v <sup>3</sup>He vedie k rozmrazeniu spinových a orbitálnych stupňov voľnosti, keďže L=1 a S=1, kým v singletnom párovaní elektrónov je S=0 a L=0.

Parameter usporiadania supratekutých fáz <sup>3</sup>He sa oveľa častejšie vyjadruje vo vektorovej reprezentácii ako vektor  $d(\mathbf{k})$  v spinovom priestore. Pre ľubovoľnú orientáciu vektora  $\mathbf{k}$  na Fermiho ploche, vektor  $d(\mathbf{k})$  je orientovaný do smeru, v ktorom CP majú nulovú hodnotu projekcie spinu. Naviac, amplitúda supratekutého kondenzátu v tom istom bode je definovaná ako  $|d(\mathbf{k})|^2 = 1/2Tr(\Psi\Psi^H)$ . Vektorová forma parametra usporiadania pre jeho jednotlivé zložky (komponenty) môže byť vyjadrená v tvare:

$$\boldsymbol{d}_i(\boldsymbol{k}) = \sum_{\rho} A_{i\rho} k_{\rho} , \qquad (6.5)$$

kde *i* (1,2,3) a  $\rho$  (x,y,z) sú navzájom kolmé smery v spinovom, respektíve orbitálnom priestore. Maticové komponenty  $A_{i\rho}$  sú komplexné a teoreticky každá z nich môže reprezentovať jednu zo supratekutých fáz, avšak eprimentálne boli potvrdené iba tri stabilné supratekuté fázy.

Fázový diagram <sup>3</sup>He, uvedený na obr.6.2, poukazuje na prítomnosť štyroch kvapalných fáz <sup>3</sup>He: normálnu Fermiho kvapalinu alebo N-fázu, supratekutú A-fázu, ktorá je označovaná ako aj ABM fáza, kedže bola teoreticky predpove-



Obr. 6.2: Fázový diagram <sup>3</sup>He.

daná Andersonom, Morelom a neskôr doplnená aj teoretickými prácami Brinkmana, supratekutú B-fázu, označovanú tiež BW fáza, na základe teoretickej predpovede Baliana a Werthamera. Kým B-fáza obsahuje všetky tri komponenty projekcie spinu, v A-fáze nie je prítomná zložka s  $S_z = 0$ , t.j. zložka  $|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle$ . Nakoniec je tu ešte úzka oblasť supratekutej fázy A1, ktorá je stabilná len v magnetickom poli a vyznačuje sa prítomnosťou iba jednej zložky projekcie spinu  $|\uparrow\uparrow\rangle$ . Fázový prechod z N-fázy do spuratekutej A (A1) alebo B fázy je fázovým prechodom druhého druhu, kým fázový prechod medzi a a B fázou je fázovým prechodom prvého druhu.



Obr. 6.3: Schématické znázornenie narušenia symetrie pri fázovom prechode <sup>3</sup>He z N-fázy do supratekutej A-fázy (hore) a Bfázy (dole).

možno vyjadriť v tvare

Fázovým prechodom <sup>3</sup>He z N-fázy do supratekutej A či B fázy sa spontánne narušuje symetria. Rozdiel v spontánnom narušení symetrie v týchto fázach je ukázaný na obrázku 6.3. Na obrázku plná šipka reprezentuje spin S a prázdna orbitálny moment L. Kým v A-fáze je vzájomná orientácia týchto vektorov rovnaká, čo predstavuje narušenie symetrie podobné ako je prechod z para do feromagnetického stavu v magnetikách (A-fáze je v podstate feromagnetickou kvapalinou), v B-fáze je narušená vzájomná symetria medzi L a S, pričom ich orientácia navzájom je náhodná.

Ako je zrejmé z fázového diagramu, Afáza existuje len pri vyšších tlakoch a teplotách. Pri veľmi nízkych teplotách A-fáza môže byť taktiež generovaná pomocou magnetického poľa, ktoré je väčšie ako tzv. kritické pole fázového prechodu  $B_{AB}$ , pričom jeho veľkosť sa s teplotou mení (s klesajúcou teplotou rastie). Keďže A-fáza obsahuje spinové komponenty s projekciami spinu na os kvantovania  $|\downarrow\downarrow\rangle > a |\uparrow\uparrow>$  je to kvapalina s feromagnetickými vlastnosťami. Parameter usporiadania vo vektorovom tvare pre A-fázu

$$\Psi_{\rm B}(\hat{k}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow\uparrow} & \Psi_{\uparrow\downarrow} \\ \Psi_{\downarrow\uparrow} & \Psi_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -d_x(\hat{k}) + id_y(\hat{k}) & d_z(\hat{k}) \\ d_z(\hat{k}) & d_x(\hat{k}) + id_y(\hat{k}) \end{pmatrix} .$$
(6.6)

Zložky vektora d môžme vyjadriť použitím matice  $A_{i\rho}$ 

$$d_{i}(\hat{k}) = \sum_{\rho=1}^{3} A_{i\rho} \hat{k}_{\rho} = \Delta \exp(i\varphi) \sum_{\rho=1}^{3} R_{i\rho} \hat{k}_{\rho} , \qquad (6.7)$$

kde  $R_{i\rho}$  sú prvky matice rotácie spinových súradníc voči orbitálnym súradniciam. Parameter usporiadania môžme vo vektorovom tvare prepísať ako

$$\boldsymbol{d}(\hat{k}) = \Delta R(\Theta, \boldsymbol{n}) \exp(i\varphi)\hat{k} , \qquad (6.8)$$
kde  $\Delta$  je energetická medzera,  $\varphi$  je fáza,  $R(\Theta, \mathbf{n})$  je matica rotácie opisujúca rotáciu spinového priestoru voči orbitálnemu okolo rotačnej osi  $\mathbf{n}$  o uhol  $\Theta$  a  $\hat{\mathbf{k}}$  je jednot-kový vektor. Prítomnosť dipól-dipólovej interakcie bude preferovať istú vzájomnú orientáciu medzi vektormi  $\mathbf{d}$  a  $\hat{\mathbf{k}}$  tak, aby energia dipól-dipólovej interakcie bola minimálna. Pre B-fázu je energia tejto interakcie vyjadrená ako

$$E_{\rm D} = \frac{4}{5} g_{\rm D}(T) \left( \cos(\Theta) + \frac{1}{4} \right)^2 , \qquad (6.9)$$

kde  $g_{\rm D}(T)$  je vyjadrený vzťahom (11.5). Hodnota energie dipól-dipólovej interakcie dosiahne minimálnu hodnotu pre uhol rotácie  $\Theta_{\rm L} = \arccos(-1/4) \approx 104^{\circ}$  (nazývaný tiež ako Leggettov uhol). Bez prítomnosti ďalších vonkajších síl vektor d bude voči vektoru  $\hat{k}$  v každom bode Fermiho plochy pootočený o uhol  $\Theta_{\rm L}$ , pričom orientácia osi rotácie n v k-priestore bude náhodná. Hovoríme, že v B-fáze je narušená vzájomná symetria. Prítomnosť iných vonkajších síl, ako napríklad magnetického poľa alebo povrchu (steny) budú orientovať os rotácie n tak, aby hodnota dipóldipólovej energie bola minimálna. Niekedy je výhodné vyjadriť uhlovú závislosť dipól-dipólovej energie pomocou Eulerových uhlov rotácie  $\alpha, \beta, \gamma$  známych z mechaniky. Potom namiesto jednej rotácie o uhol  $\Theta$  okolo osi n, následne použijeme tri rotácie okolo troch osí pootočených súradných koordinát. Takto vyjadrená uhlová závislosť dipól-dipólovej energie má tvar

$$E_{\rm D} \approx g_{\rm D}(T) \left[ (1 + \cos \Phi)(1 + \cos \beta) - \frac{3}{2} \right]^2 ,$$
 (6.10)

kde  $\Phi = \alpha + \gamma$ .

Ako je zrejmé z fázového diagramu, A-fáza existuje len pri vyšších tlakoch a teplotách. Pri veľmi nízkych teplotách A-fáza môže byť taktiež generovaná pomocou magnetického poľa, ktoré je väčšie ako tzv. kritické pole fázového prechodu  $B_{AB}$ , pričom jeho veľkosť sa s teplotou mení (s klesajúcou teplotou rastie). Keďže A-fáza obsahuje spinové komponenty s projekciami spinu na os kvantovania |  $\downarrow \downarrow >$  a |  $\uparrow \uparrow >$ , je to kvapalina s feromagnetickými vlastnosťami. Parameter usporiadania vo vektorovom tvare pre A-fázu možno vyjadriť v tvare

$$A_{i\rho} = \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta \hat{d}_i (\hat{n}_1 + i\hat{n}_2)_\rho , \qquad (6.11)$$

kde  $\Delta = \Delta(T)$  je podobne ako pre B-fázu teplotne závislá energetická medzera,  $\hat{n}_1$  a  $\hat{n}_2$  sú ortogonálne jednotkové vektory v k-priestore,  $\hat{d}$  je jednotkový vektor v spinovom priestore. Pre A-fázu je charaktristické to, že vektor  $\hat{d}$  je nasmerovaný (mieri) do to istého smeru pre všetky vektory k. Zavedenie vektorov  $\hat{n}_1$  a  $\hat{n}_2$  nie je náhodné. Je možné ukázať, že smer jednotkového vektora  $l = \hat{n}_1 \times \hat{n}_2$  odpovedá smeru orbitálneho momentu hybnosti CP a matica  $A_{i\rho}$  naozaj reprezentuje opis A-fázy, t.j. fázy s dvoma komponentami projekcie spinu. Ak v spinovom priestore zvolíme  $\boldsymbol{d} = (d_x, 0, 0)$ , t.j.  $\hat{\boldsymbol{d}} = \hat{\boldsymbol{d}}_x$  a v orbitálnom priestore jednotkové vektory  $\hat{\boldsymbol{n}}_1$ a  $\hat{\boldsymbol{n}}_2$  v smeroch osí 1 a 2, potom matica  $A_{i\rho}$  bude mať nenulové iba dva prvky

$$A = \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta \begin{pmatrix} 1 & i & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$
 (6.12)

Dosadením do vzťahu (6.5) pre zložky vektora d dostaneme

$$d_x = \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta(k_1 + ik_2), \qquad (6.13)$$
$$d_y = d_z = 0.$$

Ak tieto jednotlivé zložky vektora  $\boldsymbol{d}$ dosadíme do vzťahu (6.4) pre parameter usporiadania dostaneme

$$\Psi(\hat{k}) = \sqrt{\frac{3}{2}} \Delta \begin{pmatrix} -k_1 - ik_2 & 0\\ 0 & k_1 + k_2 \end{pmatrix}.$$
 (6.14)

Ako je vidno zo vzťahu (6.14), parameter usporiadania má nenulové iba členy  $|\downarrow\downarrow\rangle$  a  $|\uparrow\uparrow\rangle$  a teda A-fáza je supratekutou kvapalinou obsahujúcou dva spinové kondenzáty s projekciami +1 a -1 na os kvantovania.

Rozoberieme ešte prípad, kedy je vektor d kolmý na rovinu určenú vektormi  $\hat{n}_1$  a  $\hat{n}_2$ , t.j. keď  $d \parallel l$ . Ak zvolíme  $d = (0, d_y, 0)$ , pre maticu  $A_{i\rho}$  dostaneme analogické vyjadrenie

$$A_{i\rho} = \sqrt{\frac{3}{2}} \,\Delta(\hat{n}_z + i\hat{n}_y)_\rho \,\,\delta_{iy} \,\,, \tag{6.15}$$

kde Kroneckerov symbol  $\delta_{iy}$  vyjadruje to, že d má smer y a indexy z a x sú vybrané tak, aby  $d \parallel l$ . Takáto konfigurácia minimalizuje dipól-dipólovú energiu, ktorej veľkosť je úmerná skalárnemu súčinu dl a teda vedie k nastaveniu vzájomnej orientácie týchto vektorov. Je možné ukázať, ze vo A-fáze veľkosť energetickej medzery možno vyjadriť ako

$$|\boldsymbol{d}(\hat{k})|^2 = \frac{3}{2} \,\Delta^2 \sin^2 \Theta \;, \tag{6.16}$$

kde $\Theta$ je uhol medzida $\hat{k}$ na Fermiho sfére. Energetická medzera $\Delta$ je anizotropná a pri pôsobení spin-orbitálnej interakcie je os $\hat{l}$  súčasne aj jej osou symetrie.

Vektorová reprezentácia parametra usporiadania opisuje A-fázu pomocou vektorov d a l, ktoré charakterizujú spinové a orbitálne stupne voľnosti. Tieto vektory sú navzájom viazané spin-orbitálnou (dipól-dipólovou) interakciou, čím dochádza k narušeniu symetrie (podobne ako v prípade supratekutej B-fázy). Naviac môžu učinkovať aj ďalšie orietujúce sily ako napríklad:

1. Interakcia s vonkajším magnetickým poľom bude orientovať výsledný spinový vektor S do smeru magnetického poľa tak, aby  $S \parallel B$ . Keďže dipól-dipólová energia orientuje  $d \parallel l$ , aj smer orbitálneho momentu CP l bude kolmý na B.

- 2. Interakcia so stenami experimentálnej nádoby. Kvázičastice v Cooperovom páre rotujú okolo spoločného ťažiska, preto v blízkosti stien je vektor  $\hat{l}$  rovnobežný s normálou k tomuto povrchu, inak by vplyvom zrážok rotujúcich kvázičastíc tvoriacich pár so stenou dochádzalo k robíjaniu párov v kondenzáte.
- 3. Proti sebe tečúca normálna a supratekutá zložka vedie k paralelnej orientácii vektoru  $\hat{l}$  a  $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}_s \boldsymbol{v}_n$ . Fáza A tečie tak, že v smere vektora  $\boldsymbol{u}$  sa nachádzajú Fermiho body t.j. energetická medzera je nulová.

V reálnom prípade vždy dochádza k vytvoreniu textúr, t.j. istých systémov priestorových orientácií vektorov d a l.

Ako je možno vidieť z obr. 6.2., B-fáza je stabilná v malých magnetických poliach až do najnižšie dosiahnuteľných teplôt. Keďže supratekutý kondenzát obsahuje všetky tri zložky, energetická medzera separujúca základný stav od excitovaných stavov je izotrópna v k-priestore. Takto B-fáza, v nulovom vonkajšom magnetickom poli je príkladom čistej p-vlnovej supratekutej kvapaliny. Parameter usporiadania tejto fázy je možno vo vektorovom tvare vyjadriť ako

$$\Psi_B(\hat{k}) = \begin{pmatrix} \Psi_{\uparrow\uparrow} & \Psi_{\uparrow\downarrow} \\ \Psi_{\downarrow\uparrow} & \Psi_{\downarrow\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -d_x(\hat{k}) + id_y(\hat{k}) & d_z(\hat{k}) \\ d_z(\hat{k}) & d_x(\hat{k}) + id_y(\hat{k}) \end{pmatrix}.$$
(6.17)

Zložky vektora d môžme vyjadriť použitím matice  $A_{i\rho}$ 

$$d_{i}(\hat{k}) = \sum_{\rho=1}^{3} A_{i\rho} \hat{k}_{\rho} = \Delta \exp(i\varphi) \sum_{\rho=1}^{3} R_{i\rho} \hat{k}_{\rho} , \qquad (6.18)$$

kde  $R_{i\rho}$  sú prvky matice rotácie spinových súradníc voči orbitálnym súradniciam. Parameter usporiadania môžme vo vektorovom tvare prepísať ako

$$\boldsymbol{d}(\hat{k}) = \Delta R(\Theta, \boldsymbol{n}) \exp(i\varphi) \hat{k} , \qquad (6.19)$$

kde  $\Delta$  je energetická medzera,  $\varphi$  je fáza,  $R(\Theta, \boldsymbol{n})$  je matica rotácie opisujúca rotáciu spinového priestoru voči orbitálnemu okolo rotačnej osi  $\boldsymbol{n}$  o uhol  $\Theta$  a  $\hat{\boldsymbol{k}}$  je jednotkový vektor. Prítomnosť dipól-dipólovej interakcie bude preferovať istú vzájomnú orientáciu medzi vektormi  $\boldsymbol{d}$  a  $\hat{\boldsymbol{k}}$  tak, aby energia dipól-dipólovej interakcie bola minimálna. Pre B-fázu je energia tejto interakcie vyjadrená ako

$$E_{\rm D} = \frac{4}{5} g_{\rm D}(T) \left( \cos(\Theta) + \frac{1}{4} \right)^2, \tag{6.20}$$

kde  $g_{\rm D}(T)$  je vyjadrený vzťahom (11.5). Hodnota energie dipól-dipólovej interakcie dosiahne minimálnu hodnotu pre uhol rotácie  $\Theta_{\rm L} = \arccos(-1/4) \approx 104^{\circ}$  (nazývaný tiež ako Leggettov uhol [3]). Bez prítomnosti ďalších vonkajších síl vektor d bude voči vektoru  $\hat{k}$  v každom bode Fermiho plochy pootočený o uhol  $\Theta_L$ , pričom orientácia osi rotácie n v k-priestore bude náhodná. Hovoríme, že v B-fáze je narušená

1	4	17

vzájomná symetria. Prítomnosť iných vonkajších síl, ako napríklad magnetického poľa alebo povrchu (steny) budú orientovať os rotácie  $\boldsymbol{n}$  tak, aby hodnota dipóldipólovej energie bola minimálna. Niekedy je výhodné vyjadriť uholvú závislosť dipól-dipólovej energie pomocou Eulerových uholov rotácie  $\alpha, \beta, \gamma$  známych z mechaniky. Potom namiesto jednej rotácie o uhol $\Theta$ okolo osi $\boldsymbol{n}$ , následne použijeme tri rotácie okolo troch osí pootočených súradných koordinát. Takto vyjadrená uhlová závislosť dipól-dipólovej energie má tvar

$$E_D \approx g_D(T) \left[ (1 + \cos \Phi)(1 + \cos \beta) - \frac{3}{2} \right]^2,$$
 (6.21)

kde  $\Phi = \alpha + \gamma$ .

## 6.2 Spekrum excitácií v supratekutých fázach <sup>3</sup>He



Pri prechode <sup>3</sup>He do supratekutého stavu sa v spektre excitácií objaví energetická medzera, ktorá oddelí Boseov-Einsteinov (B-E) kondenzát CP od excitácií (pozri obrázok 11.9). Energia CP v B-E kondenzáte, ktoré možno najľahšie excitovať je v podstate rovná Fermiho energii  $\varepsilon_{\rm F}$ , keďže  $\Delta \simeq 10^{-3}\varepsilon_{\rm F}$ . Takto na generáciu excitácie potrebujeme dodať minimálne energiu energetickej medzery  $\Delta$ . Energia excitácie E s hybnosťou p je daná vzťahom

$$E = \sqrt{\varepsilon^2(\boldsymbol{p}) + \Delta^2}, \qquad (6.22)$$

Obr. 6.4: Schématické znázornenie hustoty stavov v supratekutom  $^3\mathrm{He}.$  kde $\varepsilon(\pmb{p})$ je energia excitácie vzhľadom k Fermiho energi<br/>i $\varepsilon_{\rm F}$ 

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p^2}{2m^*} + \varepsilon_{\rm F}$$
 (6.23)

a  $m^*$  je efektívna hmotnosť excitácie. Z tohto vzťahu možno vyjadriť hybnosť p ako

$$p = \sqrt{2m^*} \left(\varepsilon(\boldsymbol{p}) + \varepsilon_{\rm F}\right)^{1/2}.$$
 (6.24)

Nakoniec, ak pre energiu  $\varepsilon(\mathbf{p})$  dosadíme zo vzťahu (6.22), pre hybnosť kvázičasticovej excitácie  $p_{qp}$  dostaneme

$$p_{\rm qp} = \sqrt{2m^*} \left(\varepsilon_{\rm F} + \sqrt{E^2 + \Delta^2}\right)^{1/2}, \qquad (6.25)$$

ako aj pre hybnosť kvázi<br/>dierovej excitácie  $p_{\rm qh}$ 

$$p_{\rm qh} = \sqrt{2m^*} \left(\varepsilon_{\rm F} - \sqrt{E^2 + \Delta^2}\right)^{1/2}.$$
 (6.26)



Obr. 6.5: Disperzný zákon v supratekutom <sup>3</sup>He.

povrch pri zrážke, tak kvázidierová excitácie ho "ťahá". Disperzná závislosť excitácií t.j. závislosť ich energie na hybnosti je znázornená na obrázku 8.4. Excitáciami sú nespárované atómy <sup>3</sup>He, čím na druhej strane takto existujú neobsadené - "dierové" stavy tesne pod Fermiho hybrosťou  $p_{\rm F}$  (pozri inset v obrázku 8.4). S ochladzovaním <sup>3</sup>He jednotlivé kvázičastice atómov <sup>3</sup>He vytvárajú Cooperove páry a kondenzujú do B-E kondenzátu a obsadzujúc nezaplnené dierové stavy znižujú hustotu kvázičasticových a kvazidierových excitácií.

Podstatný rozdiel medzi A a B fázou sa dá ilustrovať na spektre excitácii. V B-fáze je energetická medzera izotrópna, kým v Afáze spektrum excitácií obsahuje dva Fermiho body - body s nulovou hodnotou energetickej medzery. Rozdiel v spektre excitácii týchto dvoch fáz vedie k rozdielnym termodynamickým vlastnostiam týchto fáz v limite  $T \rightarrow 0$  K. Hustota excitácií v B-fáze klesá s teplotou ako  $\exp(-\Delta/k_{\rm B}T)$ . Pri



Obr. 6.6: Energetické spektrum excitácií v A a B fáze <sup>3</sup>He. Kým B - fáza má energetickú medzeru izotrópnu, v spektre excitácii A - fázy sa nachádzajú dva Fermiho body - body s nulovou hodnotou energetickej medzery.

veľmi nízkych teplotách je hustota excitácii tak malá, že túto fázu je možno považovať za kvantové vákuum a svojimi vlastnosťami sa podobá tzv. Diracovmu vákuu. Na druhej strane, Fermiho body v A-fáze, aj pre  $T \rightarrow 0$  K, sú obsadené excitáciami a tým hustota excitácii (a entrópia) závisia na teplote ako T<sup>3</sup>. Takto A-fáza môže slúžiť ako modelový systém pre vákuový stav štandartného modelu. Ak sa na sup-

V supratekutom <sup>3</sup>He

(<sup>3</sup>He-B) máme takto dva typy excitácií: kvázičas-

ticové a kvázidierové excitácie. Kým kvázičasticové excitácie majú smer

hybnosti  $p_{\rm qp}$  rovnako orientovaný ako smer gru-

povej rýchlosti  $v_{\rm g}$ , v prípade kvázidierovej exci-

tácie je smer grupovej

rýchlosti tejto excitácie

opačný k smeru jej hyb-

nosti  $p_{\text{qh}}$ . Kým kvázičasticová excitácia tlačí ratekuté <sup>3</sup>He aplikuje magnetické pole s vhodným profilom, je možné vytvoriť také experimentálne podmienky, že tieto dve supratekuté fázy - dva rôzne kvantové vákuové stavy jednej a tej istej kvapaliny - budú v kontakte, čo umožňuje študovať ich unikátne fyzikálne vlastnosti. Supratekuté <sup>3</sup>He je doposiaľ jediným fyzikálnym systémom, ktorý toto umožňuje.

# 6.3 Dynamika excitácii a andrejevovská reflexia v supratekutom <sup>3</sup>He-B

Dynamiku excitácii v supratekutom <sup>3</sup>He-B je možné študovať pomocou vibrujúcich objektov - mechanických rezonátorov. Najjednoduchším typom rezonátora je vibrujúci drôtik. Princíp činnosti je jednoduchý: vibrujúci drôtik o priemere D - tenké supravodivé vlákno - ohnuté do tvaru slučky, ktorá sa nachádza v magnetickom poli s indukciou  $\boldsymbol{B}$  (viď obr. 6.7), je pretekaný striedavým prúdom. Ak frekvencia striedavého prúdu s amplitúdou  $I_0$  sa rovná vlastnej rezonančnej frekvencii mechanických kmitov drôtika, vplyvom Lorentzovej sily,

drôtik začne vykonávať vynútené kmity. Pohyb drôtika v magnetickom poli indukuje napätie  $U_i = Blv$ , kde l je rozteč drôtika a v je rýchlosť jeho pohybu. Toto indukované napätie je merané fázovo citlivým detektorom v závislosti na frekvencii budenia s typickým lorentzovským tvarom amplitúdovo-frekvenčnej charakteristiky. Pološírka  $\Delta f_2$  tejto charakteristiky nesie informáciu o tlmení pohybu drôtika. Matematicky je pohyb drôtika opísaný nasledujúcou rovnicou, ktorá vyjadruje rovnováhu síl na jednotku hmotnosti a dĺžky

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \frac{\gamma dx}{dt} + \frac{\omega_0^2 x}{\omega_0^2} = f \exp(i\omega t) , \quad (6.27)$$

kde parameter  $f = I_0 B/m$  charakterizuje budiacu silu,  $m = \pi r^2 \rho_{\rm w}$  je hmotnosť drôtika na jednotku dĺžky, r je polomer ohnutia drôtika a

Obr. 6.7: Typické geometrické usporiadanie vibrujúceho supravodivého drôtika (D) v magnetickom poli B.

 $\rho_{\rm w}$  je jeho hustota. Druhý člen v rovnici (6.27) opisuje tlmenie pohybu drôtika v dôsledku jeho interakcie s kvapalinou. Táto interakcia je vyjadrená prostredníctvom koeficientu tlmenia  $\gamma$  ( $\gamma = \gamma_2 + i\gamma_1$ ). Kým  $\gamma_2$  charakterizuje disipatívnu, tak  $\gamma_1$ reprezentuje jej reaktívnu zložku spojenú s obtekaním kvapaliny okolo drôtika, čo efektívne zvyšuje jeho hmotnosť. Posledný člen v rovnici (6.27) reprezentuje vratnú silu s vlastnou vákuovou rezonančnou frekvenciou  $\omega_0$ . Riešenie rovnice (6.27) je všeobecne známe, má vyššie spomenutý lorentzovský tvar absorpčnej a disperznej krivky, pričom pološírka absorpčnej krivky priamo charakterizuje veľkosť tlmiacej sily, ktorá učinkje na drôtik

$$F = 2\pi\Delta f_2 v . (6.28)$$



Drôtik pri svojom pohybe interaguje s excitáciami, ktoré doň narážajú, čím tlmia jeho pohyb. Predstavme jednoduchý model, v ktorom drôtik bude reprezentovaný obdlžníkovou plochou s prierezom S pohybujúci sa v smere osi x rýchlosťou v. Excitácie s hybnosťou  $p_{\rm F}$  si pre jednoduchosť predstavíme ako jednorozmerný plyn s objemovou hustotu $\rho,$  pohybujúci sa v smere a proti smeru pohybu drôtika, pričom pre grupovú rýchlosť excitácii  $v_{\rm g}$  budeme predpokladať, že je väčšia ako rýchlosť drôtika v t.j.  $v_{\rm g} \gg v.$ 

Excitácie pohybujúce sa v smere pohybu drôtika narazia do neho rýchlosťou  $v_{\rm g} - v$ , kým excitácie pohybujúce sa proti smeru, narazia doň rýchlosťou  $v_{\rm g} + v$ . Predpokladajúc pružné zrážky, excitácie po zrážke reverzujú smer svojho phybu a celková zmena hybnosti excitácií v dôsledku zrážok je  $\delta p = 2p_{\rm F}$ . Pohyb objektu, drôtika je brzdený silou

$$F \sim p_{\rm F} \rho(v_{\rm g} - v) - p_{\rm F} \rho(v_{\rm g} + v) = 2\rho p_{\rm F} v = \gamma v .$$
(6.29)

Tento model je však veľmi zjednodušený pretože neuvažu-

je energetické rozdelenie excitácíí, ktoré v konečnom dôsledku, spolu s obtekaním supratekutého <sup>3</sup>He okolo drôtika vedie k andrejevovskej reflexii a tým aj výraznému tlmeniu pohybu makroskopických ob-

jektov v supratekutom <sup>3</sup>He-B. Kým kvapalné <sup>3</sup>He, nachádza-

júce sa ďalej od pohybujúceho sa objektu je stacionárne (nepohybujúce sa), supratekutá kvapalina v jeho tesnej blizkosti bude tento objekt (drôtik) obtekať. Rýchlosť obtekania sa bude meniť a dosiahne maximálnu

hodnotu 2v na jeho vrchnej a spodnej časti (pre válcový tvar

drôtika). Pre pozorovateľa spo-

jeného s pohybujúcim sa drô-



Obr. 6.8: Schématické znázornenie procesu andrejevovskej reflexie.

tikom je energetické spektrum excitácií posunuté o  $\pm p_{\rm F} v$ . Znamienko závisí od smeru pohybujúcej sa excitácie.

Predstavme si excitáciu - kvázičasticu, ktorá sa približuje k objektu zo zadnej strany t.j. v smere jeho pohybu s grupovou rýchlosťou  $v_{\rm g}$ . Z pohľadu pozorovateľa spojeného s touto kvázičasticou, sa táto kvázičastica pohybuje v smere rastúcej potenciálnej energie (pozri obrázok 6.8). Keďže energia tejto kvázičastice zostáva konštantná, ako prekonáva rastúcu potenciálnu energiu (dôsledkom obtekania supratekutej zložky) jej grupová rýchlosť klesá  $v_{\rm g} = d\omega/dk = d\varepsilon/dp$ . Ak  $v_{\rm g}$  dosiahne

nulovú hodnotu, vtedy táto kvázičastica vytvorí Cooperov pár s niektorou z "okolitých kvázičastíc", čím sa v spektre excitácií vytvorí kvázičasticová diera. Táto kvázičasticová diera bude mať opačnú grupovú rýchlosť avšak smer hybnosti sa nezmení. Teda táto kvázičasticová diera sa vráti v tom istom smere, z ktorého "priletela" kvázičastica. Tento proces bol po prvýkrát opísaný ruským fyzikom Andrejevom a volá sa andrejevovská reflexia. Pri tomto procese sa zmení hybnosť o hodnotu

$$\Delta p = \frac{\Delta}{\varepsilon_{\rm F}} p_{\rm F} \sim 10^{-3} p_{\rm F} \ . \tag{6.30}$$

Takto excitácie, ktoré sú rozptýlené andrejevovským procesom v podstate neprispievajú k tlmeniu pohybu objektu v supratekutom <sup>3</sup>He-B. Na druhej strane, excitácie (či kvázičastice alebo kvázidiery) majúce dostatočne veľkú energiu pre interakciu s pohybujúcim sa objektom, budú s ním interagovať, pričom zmena hybnosti pri tejto interakcii bude  $2p_{\rm F}$ . Naviac, kým kvázičastice budú objekt "tlačiť" kvázidiery ho budú "ťahať". To spôsobuje veľké tlmenie pohybu objektu.



Obr. 6.9: Schématické znázornenie energetického spektra excitácií v supratekutom <sup>3</sup>He-B v referenčnej sústave spojenej s pohybujúcim sa objektom. Objekt sa v laboratórnej sústave pohybuje z ľava do prava.

cií môže byť vyjadrená ako

$$F_{1,2} = p_{\rm F} \int_{\Delta}^{\infty} (v_{\rm g}(\varepsilon) + v) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon + p_{\rm F} \int_{\Delta}^{\infty} (v_{\rm g}(\varepsilon) - v) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon , \quad (6.31)$$

152

Fyzikálny opis andrejevovskej reflexie je nasledovný. Ako je vidieť z obrázka 6.9, ktorý schématicky znázorňuje energiu excitácií (kvázičastíc a kvázidier) z pohľadu referenčnej sústavy pevne spojejnej s pohybujúcim sa objektom, kvázičastice pohybujúce sa proti objektu majú dostatok energie aby interagovali s týmto objektom. Podobne je to aj z kvázidierami. Pri vyšších teplotách a malých rýchlostiach aj niektoré kvázičastice a kvázidiery, ktoré "doháňajú" objekt budú mať dostatok energie, aby s ním interagovali. Tieto budú tlmiacu silu zmenšovať, kedže pôsobia v smere pohybu objektu (v laboratórnej sústave). Preto celková tlmiaca sila o týchto excitákde  $D(\varepsilon)$  je hustota stavov kvázičastíc a kvázidier s energiou  $\varepsilon$  meraná od Fermiho energie  $\varepsilon_{\rm F}$ . Výsledná tlmiaca sila je

$$F_{1,2} = 2p_{\rm F} \int_{\Delta}^{\infty} v_{\rm g}(\varepsilon) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = 2p_{\rm F} < nv_{\rm g} > .$$
(6.32)

kde $< n v_{\,\rm g} >$ je vyjadrené ako

$$\langle nv_{\rm g} \rangle = \int_{\Delta}^{\infty} v_{\rm g}(\varepsilon) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$
 (6.33)

Integrál reprezentuje celkový tok excitácií, čo predstavuje počet excitácií (kvázičastíc a kvázidier), ktoré prejdú cez jednotkovú plochu za jednotku času.

Uvažujme teraz excitácie z vetiev 3 a 4. Excitácie s energiou nižšou ako  $\Delta + p_F v$  nikdy nebudú interagovať s vibrujúcim objektom, kým tie, ktoré majú energiu vyššiu ako  $\Delta + p_F v$  prispejú k tlmiacej sile hodnotou s opačným znamienkom, keďže pôsobia v opačnom smere ako excitácie z vetiev 1 a 2:

$$F_{3,4} = -2p_{\rm F} \int_{\Delta + p_{\rm F}v}^{\infty} v_{\rm g}(\varepsilon) D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon . \qquad (6.34)$$

Výraz  $D(\varepsilon)v_{\rm g}(\varepsilon)$  predstavuje hustotu stavov v momentovom priestore a excitácie majú moment hybnosti p stále blízky hodnote  $p_{\rm F}$ , potom

$$D(\varepsilon) v_{\rm g}(\varepsilon) \sim D(p_{\rm F})$$
 . (6.35)

Použijúc tento výraz do rovnice (6.34) dostaneme

$$F_{3,4} = -2p_{\rm F} D(p_{\rm F}) \int_{\Delta + p_{\rm F} v}^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon . \qquad (6.36)$$

Pri teplotách nižších ako 0.25  $T_{\rm c}$ t.j. v balistickom režime Fermiho-Diracova distribučná funkcia môže byť nahradená Maxwellovou-Boltzmannovou rozdeľovacou funkciou exp $(-\Delta/k_B T)$ , potom pre výraz (6.36) máme

$$F_{3,4} = -2p_{\rm F}D(p_{\rm F})\int_{\Delta+p_{\rm F}v}^{\infty} \exp(-\varepsilon/k_{\rm B}T)d\varepsilon , \qquad (6.37)$$

a po integrácii dostaneme

$$F_{3,4} = -2p_{\rm F}D(p_{\rm F})k_BT\exp(-\Delta/k_{\rm B}T)\exp(-p_{\rm F}v/k_BT) . \qquad (6.38)$$

Použijúc výraz (6.33) pre tok excitácií <  $nv_{\rm g}>,$ tento tok môže byť vyjadrený v tvare:

$$\langle nv_{\rm g} \rangle = D(p_{\rm F}) \int_{\Delta + p_{\rm F}v}^{\infty} \exp(-\varepsilon/k_{\rm B}T) d\varepsilon = D(p_{\rm F})k_BT \exp(-\Delta/k_{\rm B}T) . \quad (6.39)$$

Celková tlmiaca sila Fpôsobiaca na objekt, ktorý sa pohybuje v supratekutom <sup>3</sup>He-B rýchlosťou v je daná súčtom síl $F_{1,2}+F_{3,4}$ 

$$F = 2p_{\rm F} < nv_{\rm g} > [1 - \exp(-p_F v/k_{\rm B}T)] . \qquad (6.40)$$

Z výrazu vyplýva, že pre nízke rýchlosti  $(p\,{}_{\rm F} v \ll k\,{}_{\rm B} T)$ je tlmiaca sila lineárna s rýchlosťou objektu v

$$F = 2p_{\rm F} < nv_{\rm g} > \frac{p_{\rm F}v}{k_{\rm B}T} , \qquad (6.41)$$

avšak pri vysokých rýchlostiach  $(p\,{}_{\rm F}v\gg k\,{}_{\rm B}T)$ v tl<br/>miaca sila bude

$$F = 2p_{\rm F} < nv_{\rm g} > , \qquad (6.42)$$

t.j. dominantne k tlmiacej sile prispievajú zrážky od kvázičastíc a kvázidier zo spektra energií 1 a 2.

V reálnom experimente však rýchlosť pohybu supratekutej zložky okolo objektu nie je tá istá ako rýchlosť pohybu samotného objektu. Preto sa zavádza koeficient  $\lambda$ , ktorý charakterizuje profil poľa rýchlosti okolo pohybujúceho sa objektu. Potom veľkosť sily, ktorá tlmí pohyb objektu, môže byť vyjadrená ako

$$F_T = 2 p_{\rm F} < n v_{\rm g} > \left[ 1 - \exp\left(\frac{-\lambda p_{\rm F}}{kT}v\right) \right] . \tag{6.43}$$

Pri malých rýchlostiach t.j.  $(p_{\rm F}v \gg k_{\rm B}T)$  možno exponenciálnu funkciu rozvinúť to Taylorovho radu a vezmúc iba prvé dva členy dostaneme

$$F_T = 2 p_F^2 D(p_F) \lambda \exp\left(\frac{-\Delta}{k_B T}\right) v = \gamma v.$$
(6.44)

Tlmiaca sila lineárne rastie s rýchlosťou v, pričom koeficient tlmenia  $\gamma$  je exponenciálnou funkciou teploty. Táto závislosť sa v supratekutom <sup>3</sup>He-B veľmi často využíva na meranie teploty v teplotnom intervale pod 0.25  $T_{\rm c}$ , v tzv. balistickom režime.

Na obr. 6.10 je znázornená typická experimentálna závislosť tlmiacej sily na rýchlosti vibrujúceho drôtika meraná pre dve teploty 210  $\mu$ K a 225  $\mu$ K. Pri malých rýchlostiach pohybu drôtika je zrejmá lineárna závislosť tlmiacej sily, ktorá má tendenciu saturácie tak, ako rýchlosť pohybu drôtika narastá. Avšak pri dosiahnutí istej kritickej rýchlosti, pohyb drôtika začína generovať samotné excitácie, ktoré spätne výrazne tlmia jeho pohyb. Naviac, ak takto generované excitácie budú zachytené supravodivými tokmi - vznikajúce kvantové víry vytvoria kvantovú turbulenciu. Kritckú rýchlosť, kedy nastáva narušenie Cooperových párov je možno jednoducho odvodiť použitím obrázka 6.9.



Obr. 6.10: Závislosť tlmicej sily na rýchlosti pohybu vibrujúceho drôtika meraná pre dve teploty 210  $\mu$ K a 225  $\mu \mathrm{K}.$ 

cií. Túto kritickú rýchlosť možno vyjadriť ako

$$v_{\rm c} = \frac{\Delta}{3p_{\rm F}} = \frac{1}{3}v_{\rm L},\tag{6.45}$$

kde  $v_{\rm L}$  je Landauova rýchlosť ( $v_{\rm L} = \Delta/p_{\rm F}$ ). Supratekutá zložka je nútená obtekať vibrujúci drôtik, pričom meniaca sa rýchlosť obtekania vedie k zvýšeniu energie tejto zložky. Ako sa bude mentiť rýchlosť obtekania závisí na geometrii objektu, ktorý sa bude pohybovať v supratekutom <sup>3</sup>He-B. Výraz, ktorý sme odvodili vyššie platí pre válcový drôtik.

Na tomto mieste je potrebné ešte spomenúť, že andrejevovská reflexia je nie len pozorovateľná pri pohybe mechanických objektov v supratekutom <sup>3</sup>He-B, ale taktiež je pozorovateľná pri kvantovej turbulencii v tejto fáze, ktorej sa budeme podrobnejšie venovať v kapitole 10). Jadrá kvantovaných vírov v <sup>3</sup>He-B, podobne ako sme v kapitole 5 dikutovali kvantované víry v supratekutom <sup>4</sup>He, sú obtekané supratekutými tokmi, pričom ich rýchlosť klesá so vzdialenosťou od jadra víru ako  $v_{\rm s} = \kappa/(2\pi r)$ , kde r je vzdialenosť od jadra víru a  $\kappa$  je kvantum cirkulácie

$$\kappa = \frac{\hbar}{2m_3} , \qquad (6.46)$$

kde  $m_3$  je hmotnosť atómov <sup>3</sup>He. Všimnime si rozdielu oproti <sup>4</sup>He, lebo supratekutými čiasticami sú tu Cooperove páry. Supravodivý tok vzniká v dôsledku fázového posunu vlnovej funkcie okolo jadra víru o  $2\pi$ .

155

V dôsledku obtekania supratekutej komponenty okolo vibrujúceho objektu (drôtika) energia

tejto supratekutej zložky narastá ako  $2p_{\rm F}v$ . Na druhej strane, energia

excitácií pohybujúcich sa

rovnakým smerom ako objekt, z pohľadu re-

ferenčnej sústavy pevne

spojejnej s drôtikom sa

mení, klesá ako  $\Delta$  –

 $p_{\rm F} v$ . Pri istej, kritickej

rýchlosti  $v_c$  budú tieto energie rovnaké a sup-

ratekutá zložka interak-

ciou s povrchom drôtika

je rozptýlená do voľných stavov v spektre excitá-



Obr. 6.11: Schématické znázornenie mechanizmu andrejevovskej reflexie na kvantovanom víre, ktorý je obtekaný supratokom.

Vvtvorením turbulentného stavu t.j. generáciou kvantovaných vírov v supratekutom <sup>3</sup>He-B, napríklad rotáciou celého kryostatu alebo pomocou nejakého mechanického rezonátora, získame topologicky stabilné objekty, ktoré medzi sebou interagujú a pohybujú sa v priestore experimentálneho objemu. Dráhy voľne pohybujúcich sa excitácii môžu pretínať oblasti supravodivých tokov generovaných v zóne kvantových vírov. Ako sa excitácia približuje v jadru víru, v dôsledku rastúcej rýchlosti supravodivého toku je vystavovaná rastúcemu potenciálu. Približujúca sa kvázičasticová excitácia je v istom bode andrejevovským rozptylovým procesom vrátená naspäť a vracia sa v tom istom smere, avšak ako kvázidiera (pozri obrázok 6.11). Ten istý scénar platí aj pre kvázidiery, ktoré sú po andrejevovskom rozptyle "vrátené" ako kvázičastice. Takto rozvinutá turbulencia odtieni, napríklad mechanický re-

Supratekute lazy nena-S

zonátor od excitácií v experimentálnom objeme. Excitácie budú andrejevovským rozptylom reverzované naspäť do objemu, pričom nikdy nebudú interagovať s týmto rezonátorom.

# 6.4 Spinová dynamika v supratekutom <sup>3</sup>He-B

Pretože supratekuté fázy hélia-3 vykazujú magnetické vlastnosti je zrejmé, že metóda jadrovej magnetickej rezonancie bude veľmi užitočnou metódou pre štúdium magnetických vlastností týchto fáz. V prípade klasickej jadrovej magnetickej rezonancie je pohyb spinu (magnetizácie) opísaný Blochovou rovnicou:

$$\frac{d\boldsymbol{S}}{dt} = \gamma \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{B}(t) , \qquad (6.47)$$

kde S reprezentuje celkový spin a B(t) vyjadruje časovo premenné magnetické pole, ktoré je možné vyjadriť v tvare  $B = (B_{\rm rf} \cos \omega t, B_{\rm rf} \sin \omega t, B_0)$ . Zahrniac disipáciu energie do rovnice (6.48) pre jednotlivé zložky spinu v tvare  $(S_x/T_2, S_y/T_2, S_z/T_1)$ , za predpokladu pomalého prechodu cez rezonanciu, riešenie tejto rovnice sú známe lorentzovské závislosti absorpcie a disperzie energie v závislosti na frekvencii (viď. kapitolu o JMR). Supratekutosť hélia-3, ako makroskopický kvantový jav, výrazne ovplyvní samotnú jadrovú magnetickú rezonanciu v týchto fázach. Predovšetkým je to prítomnosť dipól-dipólovej interakcie, ktorá je zosilnená kvantovou koherenciou supratekutého stavu a samotná tzv. magnetická supratekutosť. Leggetove rovnice opisujúce spinovú dynamiku v supratekutých fázach hélia-3 majú tvar [3]

$$\frac{d\boldsymbol{S}}{dt} = \gamma \boldsymbol{S} \times \boldsymbol{B}(t) + \boldsymbol{R}_{\rm D} , \qquad (6.48)$$

$$\frac{d\boldsymbol{d}}{dt} = \boldsymbol{d} \times \boldsymbol{B}_{\text{eff}} , \qquad (6.49)$$

kde  $\gamma$  je gyromagnetický pomer <sup>3</sup>He,  $\mathbf{R}_{\rm D}$  je dipól-dipólový moment. Prvá rovnica (6.49) má ten istý tvar ako Blochova rovnica až na člen  $\mathbf{R}_{\rm D}$  a vyjadruje moment síl pôsobiaci na celkový spin S od všetkých magnetických polí a od dipól-dipólového momentu  $\mathbf{R}_{\rm D}$ . Tento moment minimalizuje dipól-dipólovú energiu po vychýlení dmagnetickým poľom  $\mathbf{B}(t)$ . Druhá rovnica opisuje pohyb vektora d, ktorý rotuje okolo efektívneho poľa  $\mathbf{B}_{\rm eff}$ 

$$\boldsymbol{B}_{\text{eff}} = \boldsymbol{B}(t) - \gamma \boldsymbol{S} / \chi_0 , \qquad (6.50)$$

kde $\chi_0$  je statická susceptibilita. V dôsledku rôznych parametrov usporiadania, supratekuté fázy majú aj rôzne závislosti dipól-dipólových momentov, ktoré odrážajú rôzne závislosti dipól-dipólových energií. Kým pre supratekutú A-fázu  $R_{\rm D}$ môže byť vyjadrené v tvare

$$\boldsymbol{R}_{\rm D} \sim g_{\rm D}(T)(\boldsymbol{d} \times \boldsymbol{l})(\boldsymbol{d}.\boldsymbol{l}) , \qquad (6.51)$$

tak  $\mathbf{R}_{\mathrm{D}}$  pre B-fázu možno vyjadriť ako

$$\boldsymbol{R}_{\rm D} \sim g_{\rm D}(T) \sin \theta (1 + 4 \cos(\theta)) \boldsymbol{n}$$
, (6.52)

kde všetky parametre v rovinách (6.51) a (6.52) boli definované už vyššie. Riešenie Leggettových rovníc spinovej dynamiky je nad rámec preberaného učiva. Avšak JMR a vplyv dipól-dipólového momentu na JMR ozrejmíme pre obidve hlavné supratekuté fázy.

## 6.5 Pozdĺžna jadrová magnetická rezonancia

Riešením Legettových rovníc dostaneme nie len klasickú priečnu jadrovú magnetickú rezonanciu (viď. ďalej), ale predovšetkým aj pozdĺžnu rezonanciu. Pri pozdĺžnej rezonancii, ako napovedá samotný výraz, je vysokofrekvenčné magnetické pole  $B_{\rm rf}$  orientované paralelne so statickým magnetickým poľom  $B_0$ . Takáto konfigurácia vedie k amplitúdovej modulácii magnetického poľa v smere z. Táto modulácia nevedie k odkloneniu spinu S (magnetizácie) zo smeru z, avšak robí ju nerovnovážnou. V normálnom kvapalnom <sup>3</sup>He spôsobuje iba relaxáciu, nie však rezonančnú absorpciu.

Iná situácia je v supratekutých fázach <sup>3</sup>He. V supratekutej A-fáze <sup>3</sup>He variácia magnetického poľa v z smere vedie k osciláciam vektora d (pozri vzťah (??), vektor d je odklonený a pôsobí na neho moment sily. Pretože  $B_0$  a  $B_{\rm rf}$  sú paralelne orientované, máme ( $S \times B$ )<sub>z</sub> = 0 a prvá Leggettova rovnica má tvar

$$\frac{d\boldsymbol{S}_{z}}{dt} = \boldsymbol{R}_{D,z} \ . \tag{6.53}$$

V klasických systémoch by  $R_{\rm D}=0$ , čo znamená statický, neprecesujúci magnetický moment. V <sup>3</sup>He-A je však  $R_{\rm D} \neq 0$ , a riešenie rovnice (6.53) možno nájsť v tvare

$$\Delta S_{\rm z} = \frac{\chi}{\mu_0 \gamma} \Delta B_0 \left[ 1 - \cos(\Omega_{\rm A} t) \right] \,. \tag{6.54}$$



Obr. 6.12: Závislosť  $\Omega_A$  a  $\Omega_B$  na redukovanej teplote  $T/T_c$ . Závislosť v podstate kopíruje teplotnú závislosť energetickej medzery.

Longitudinálnu rezonanciu možno fyzikálne interpretovať ako prechody medzi spinovými konfiguráciami  $|\downarrow\downarrow>a|\uparrow\uparrow>$ , ktoré sú viazané prostredníctvom magnetickej dipól-dipólovej interakcie. Pozdĺžna JMR bola Leggettom predpovedaná aj experimentálne pozorovaná v supratekutom <sup>3</sup>He-B. Vďaka prítomnosti supratekutej komponenty  $(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$ v tejto fáze nie je prítomný posuv rezonančnej frekvencie s teplotou, avšak práve v dôsledku prítomnosti tejto komponenty amplitúda absorbčného signálu JMR s klesajúcou teplotou klesá. Ak predpokladáme, že pri danom tlaku je stredná hodnota oboch energetických medzier v A-fáze a B-fáze rovnaká, potom frekvenciu pozdĺžnej rezonancie v B-fáze možno vyjadriť ako

$$\Omega_{\rm B}^2(T) = \Omega_{\rm A}^2(T) \frac{5\chi_{\rm B}(T)}{2\chi_{\rm A}} , \quad (6.55)$$

kde  $\chi_{\rm B}(T)$  a  $\chi_{\rm A}$  sú susceptibility B a A fázy, pričom, ako sme vyššie spomenuli, susceptibilita B-fázy  $\chi_{\rm B}(T)$  s klesajúcou teplotou klesá. Na obrázku 6.12 je znázornená experimentálna závislosť  $\Omega_{\rm A}$  na teplote vzťahovanej k  $T_{\rm c}$ , kde teplotná závislosť  $\Omega_{\rm A}(T)$ , v podstate kopíruje teplotnú závislosť energetickej medzery  $\Delta(T)$ . Poznamenávame, že amplitúda JMR signálu sa s klesajúcou teplotou prakticky nemení keďže susceptibilta A-fázy je prakticky totožná so susceptibilitou N-fázy  $\chi_{\rm N}$ .

# 6.6 Frekvenčný posuv a priečna JMR v supratekutých fázach <sup>3</sup>He

V supratekutej A-fáze je dipól-dipólová energia daná výrazom (6.51). Jadrová magnetická rezonancia v A-fáze predstavuje príklad zosilnenia dipól-dipólovej interakcie vďaka kvantovej koherencii systému. Leggett ukázal, že riešenim rovníc (6.48) a (6.49) s použitím výrazu (6.51) pre dipól-dpólovú interakciu, pre rezonančnu frekvenciu, pri malých uhloch odklonenia dostaneme:

$$\omega_{\rm L}^2 = (\gamma B_0)^2 + \Omega_{\rm A}^2(T) , \qquad (6.56)$$



Obr. 6.13: Závislosť frekvencie precesie spinov v A-fáze od uhla odklonenia.

kde prvý výraz  $\gamma B_0$  je rovný larmorovskej frekvencii a druhý výraz je "príspevkom" dipól-diólovej interakcie k rezonančnej frekvencii, pričom hodnota  $\Omega_A \sim g_D(T)$  (pozri vzťah (11.5)). Zo vzťahu (6.56) je teda zrejmé, že rezonančná frekvencia signálu JMR sa bude s teplotou meniť, čo umožňuje nie len veľmi ľahkú identifikáciu samotnej A-fázy, ale, na základe merania teplotnej závislosti rezonančnej frekvencie, aj experimentálne určenie  $\Omega_A(T)$  a tým aj určenie teplotnej závislosti  $g_D(T)$ .

Ako je zrejmé zo vzťahov (6.51) a (6.52) uhol odklonenia spinu Sbude ovplyvňovať rezonančnú frekvenciu precesujúcich spinov, avšak tento vplyv vďaka rôznej symetrii týchto dvoch fáz bude rôzny. Vplyv uhla odklonenia spinu S a tým vplyv  $R_{\rm D}$  na

frekvenciu precesie spinu v A-fáze je prezentovaný na obr. 6.13. Závislosť vyjadruje anizotrópne vlastnosti A-fázy, predovšetkým anizotrópiu energetickej medzery  $\Delta$ .

V prípade supratekutej B-fázy, ktorá predstavuje izotrópny supratekutý systém s izotrópnou energetickou medzerou  $\Delta$ , so spontánne narušenou vzájomnou symetriou medzi L a S, je vplyv dipólového momentu  $R_{\rm D}$  (pozri vzťah (6.52)) na jadrovú magnetickú rezonanciu iný. Uvažujme supratekuté <sup>3</sup>He-B v manetickom poli  $B_0$ . Aplikáciou rf-poľa $\boldsymbol{B}_{\rm rf}$ dochádza k odkláňaniu spinu $\boldsymbol{S}$ zo smeru magnetického poľa  $B_0$ . Kým uhol odklonenia S od smeru magnetického poľa  $B_0$  nie je väčší ako  $\Theta_L$  (v prípade pôsobenia iných energií ako napríklad povrchovej energie tento uhol odklonenia spinu bude iný) dipól-dipólová energia  $E_D$  bude minimalizovaná a  $R_D=0$ . Inými slovami tiež povedané: odklaňanie spinu S je spojené s odkláňaním osi rotácie n a kým os rotácie n "nájde" takú orientáciu v k-priestore, ktorá umožní rotáciu spinových súradníc (alebo spinu S) okolo tejto osi n o uhol  $\Theta_L$  a "dôjde" k stotožneniu s orbitálnymi súradnicami (alebo orbitálnym momentom L), vtedy bude dipól-dipólová energia minimalizovaná a  $\mathbf{R}_D = 0$ . Ak sa spin  $\mathbf{S}$  odkloní od smeru  $B_0$  na uhol väčší ako  $\Theta_L$ , potom už nie je možné nájsť takú orientáciu osi  $\boldsymbol{n}$ , aby podmienka rotácie o uhol $\Theta_L$ bola splnená. Dipól-dipólová energia  $E_D$  už nebude minimálna a nenulový dipólový moment  $R_D$  ovplyvní, zrýchli frekvenciu precesie spinu okolo magnetického poľa  $B_0$ . Takto dipól-dipólová interakcia výrazne ovplyvňuje precesiu spinov v supratekutom <sup>3</sup>He-B a v konečnom dôsledku, ako ukážeme neskôr, je zodpovedná za vznik stavov s koherentne precesujúcimi spinmi. Tieto stavy sú považované za Boseov-Einsteinov kondenzát magnónov. Prv než vysvetlíme čo je to Boseov-Einsteinov kondenzát magnónov, vysvetlíme, iný

fundamentálny fyzikálny jav a tým je spinová alebo aj magnetická supratekutosť.

# 6.7 Magnetická supratekutost a stavy s koherentnou precesiou spinov

Fundamentálnou vlastnosťou ľubovoľného supratekutého (supravodivého) systému je prítomnosť supratokov, ak sa tento systém nenachádza v homogénom (koherentnom) stave. Parameter usporiadania v supratekutom <sup>3</sup>He je komplexný a spája orbitálny a spinový priestor. Dôsledkom toho, prítomnosť nehomogenít (tj. gradientov) v spinovej časti parametra usporiadania vedie ku vzniku spinových supratokov. Nehomogenity v spinovej časti parametra usporiadania, a tým spinové toky, je možné jednoducho a kontrolovane generovať a študovať aplikáciou techniky JMR v nehomogénnom magnetickom poli na vzorke supratekutého <sup>3</sup>He. Amplitúda týchto spinových tokov je úmerná tenzoru  $\Omega_{j\beta}$ , ktorý charakterizuje nehomogenity v spinovem priestore [3]:

$$J_{i\alpha} = \frac{\hbar}{2m} \rho_{ij\alpha\beta} \Omega_{j\beta}, \qquad (6.57)$$

kde  $\rho_{ij\alpha\beta}$  je tenzor spinovej hustoty.

Spinové toky redistribujú magnetizáciu vo vzorke oveľa rýchlejšie ako procesy magnetickej relaxácie a takýmto spôsobom ich maskujú. Preto pri počiatočných experimentoch v supratekutých fázach <sup>3</sup>He nebolo možné rozlíšiť, či zmena orientácie spinov bola zapríčinená v dôsledku relaxácie, alebo spinovými supratokmi. Až objavenie stavov s koherentnou precesiou spinov, najmä však homogénne precesujúcej domény, umožnilo štúdium procesov magnetickej relaxácie v supratekutom <sup>3</sup>He-B. Stavy s koherentnou precesiou spinu vznikajú vďaka spinovým tokom za súčasného pôsobenia dipól-dipólovej interakcie, ktorá pracuje ako negatívna spätná väzba. V supratekutej B-fáze, energia dipól-dipólovej interakcie môže byť vyjadrená v tvare [6]:

$$E_D = \frac{2}{15} \Omega_B^2 \left[ (1 + \cos \Phi) (1 + \cos \beta) - \frac{3}{2} \right]^2, \tag{6.58}$$

kde  $\Omega_B$  je známa Leggettova frekvencia, ktorá charakterizuje teplotnú závislosť tejto energie,  $\beta$  a  $\Phi = \alpha + \gamma$  sú Eulerove uhly, pričom  $\alpha$  je fázový uhol a  $\beta$  je uhol odklonenia spinu od smeru, ktorý je definovaný napríklad orientáciou vonkajšieho magnetického poľa **B**.

Homogénne precesujúca doména (HPD) bola objavená moskovskou skupinou v roku 1984 [9], pričom ruka v ruke s realizáciou experimentov Fomin vybudoval teóriu HPD [6]. HPD (viď obr. 6.14) je v podstate prvou experimentálnou realizáciou, či potvrdením javu magnetickej (spinovej) supratekutosti v <sup>3</sup>He-B. Ak na vzorku supratekutého <sup>3</sup>He-B, umiestnenú v homogénnom magnetickom poli  $B_0$  s lineárnym gradientom  $\nabla$ B, aplikujeme impluznú alebo kontinuálnu jadrovú magnetickú rezonanciu (JMR) s dostatočným výkonom, tak objem vzorky sa spontánne rozdelí na dve časti. V časti nachádzajúcej sa v menšom magnetickom poli budú spiny odklonené na uhol 104° a budú koherentne precesovať okolo smeru vonkajšieho magnetického poľa B ( $B = B_0 + \nabla B$ ), napriek prítomnosti gradientu magnetického

 $\omega_L = \gamma(B_0 - z_0 \nabla B),$ kde  $\gamma$  je gyromagnetický pomer. Fyzikálny mecha-

nizmus vzniku HPD je

veľmi jednoduchý. Prece-

sia spinov v nehomogén-

nom magnetickom poli

vedie k vzniku spinových supratokov. Spinové sup-

ratoky menia orientáciu

spinov takým spôsobom,

tickom poli sú odklá-

ňané, kým spiny nachá-

dzajúce sa vo väčšom poli sú orientované do

smeru vonkajšieho mag-

netického poľa. Odklon spinov v menšom magne-

že

 $\mathbf{sa}$ 

spiny nachádzajúce

v menšom magne-



Obr. 6.14: Schématické znázornenie generácie HPD v supratekutom $\,^3\mathrm{He-B.}$ 

poľa. Precesujúce spiny tvoria homogénne precesujúcu doménu. Kým v druhej časti, nachádzajúcej sa vo väčšom magnetickom poli budú spiny statické, orientované do smeru magnetického poľa  $\boldsymbol{B}$ , vytvárajúc tak neprecesujúcu alebo tiež statickú doménu (SD). Medzi týmito doménami sa nachádza doménová stena, ktorej poloha  $z_0$  je definovaná tam, kde je splnená larmorovská rezonančná podmienka



Obr. 6.15: Typické signály generovaný HPD počas lineárneho rozmietania magnetického poľa.

tickom poli sa zastaví pri dosiahnutí uhlu odklonenia, ktorý sa rovná tzv. Leggettovmu uhlu  $\Theta_L \sim 104^\circ$ . Pri tejto hodnote, dipól-dipólová energia už nebude minimalizovaná a vznikajúci dipólový moment zvýši frekvenciu precesie spinov. To vytvorí spinový supratok, ktorý je orientovaný proti spinovému supratoku v dôsledku

prítomnosti nehomogénneho poľa. Výsledkom je dynamická rovnováha spinových tokov, kde výsledný spinový tok osciluje okolo nulovej hodnoty a objem supratekutého <sup>3</sup>He sa spontánne rozdelí na dve domény: precesujúcu, v ktorej spiny budú koherentne precesovať napriek prítomnosti nehomogénneho poľa a stacionárnu doménu. Keďže v HPD je výsledný spinový tok rovný nule - v HPD procesy magnetickej relaxácie už nebudú tokmi maskované a HPD môže slúžiť ako experimentálny nástroj k štúdiu týchto procesov. Prítomnosť HPD v experimentálnej komôrke sa prejavuje výrazným a silno nelineárnym signálom JMR (viď. obr. 6.15.).



# 6.8 Procesy magnetickej relaxácie v supratekutom <sup>3</sup>He-B

Obr. 6.16: Závislosť  $\Omega_{\rm A}$ na redukovanej teplot<br/>e $T/T_{\rm c}.$ Závislosť v podstate kopíruje teplotnú závislosť energetickej medzery.

Vo všeobecnosti primárnou fyzikálnou príčinou existencie magnetických relaxačných procesov v supratekých fázach <sup>3</sup>He-B je prítomnosť kvázičasticových excitácií a ich kondenzácia/kreácia do/z mora Cooperových párov, t.j. vzájomné prechody <sup>3</sup>He kvázičastíc medzi normálnou a supratekutou zložkou. Nepružné zrážky kvázičasticových excitácii vedú k disipácii energie, ktorá je kompenzovaná z energie supratekutej zložky (prípadne z budiaceho vf magnetického poľa). V princípe existujú tri me-

chanizmy relaxačných procesov vedúcich k disipácii energie v HPD. Pre HPD dĺžky L, ktorá sa nachádza v experimentálnej komôrke valcového tvaru s polomerom R, možno celkový disipovaný výkon vyjadriť ako súčet príspevkov od jednotlivých mechanizmov [10]:

$$\dot{W} = \sigma \frac{\chi(T)}{\gamma^2} \frac{D_\perp \omega_{\rm L}^2}{\lambda_{\rm F}} \cdot S + 2\pi w_{\rm s} R \cdot L + \frac{5}{16} \chi(T) \tilde{\tau}_{\rm LT} S \frac{\omega_{\rm L}^2 (\nabla \omega)^2}{\gamma^2} \cdot L^3.$$
(6.59)

Prvý člen opisuje relaxáciu dvojdoménovej štruktúry mechanizmom spinovej difúzie cez doménovú stenu prierezu S a hrúbky  $\lambda_{\rm F}$ , kde  $D_{\perp}$  je transverzálna zložka tenzora spinovej difúzie,  $\sigma$  je geometrický faktor blízky 1, závisiaci od tvaru doménovej steny a  $\chi(T)$  je susceptibilita B - fázy s korekciami na Fermiho kvapalinu. Druhý člen reprezentuje relaxačný proces zapríčinený distorziou parametra

usporiadania v blízkosti stien experimentálnej komôrky a je charakterizovaný konštantou rýchlosti povrchovej relaxácie  $w_s$  [11]. Posledný, tretí člen vyjadruje príspevok od Leggettovho-Takagiho procesu relaxácie [12], ktorý je charakterizovaný Leggettovou-Takagiho efektívnou časovou konštantou  $\tilde{\tau}_{\rm LT}$ , pričom  $\nabla \omega = \gamma \nabla B$ .

Na obrázku 6.16 je znázornená závislosť absorpcie v HPD na magnetickom poli s lineárnym gradientom t.<br/>j $B=B_0+\nabla Bz.$ Nech na začiatku je hodnota magnetického poľa B väčšia ako  $B_{\rm a}$  a toto magnetické pole postupne klesá znižovaním hodnoty  $B_0$ , pričom  $\nabla B$  zostáva konštantné. V magnetickom poli  $B_a$  je splnená larmorovská rezonančná podmienka na vrchu experimentálnej komôrky (pozri obrázok 6.14), dochádza k absorpcii energie, ktorá sa spotrebuje na formovanie a udržiavanie doménovej steny HPD (prvý člen výrazu (6.59)). Postupným znižovaním hodnoty magnetického poľa posúvame doménovú stenu pozdĺž experimentálnej komôrky. Disipácia energie mechanizmom spinovej difúzie cez doménovú stenu zostáva konštantná pretože plocha doménovej steny S sa nemení. Avšak, ako rastie dĺžka HPD, pomaly narastá príspevok k disipácii energie od Leggettovej-Takagiho relaxácie. Keď poloha doménovej steny prenikne do plniaceho kanálika (v poli  $B_{\rm b}$ ), zmenší sa jej plocha a tým poklesne aj disipácia. Ďalším znižovaním hodnoty magnetického poľa sa doménová stena posúva v kanáliku a s rástúcou dĺžkou HPD sa dominantným mechanizmom relaxácie stáva Leggettova-Takagiho relaxácia, vyjadrená tretím členom výrazu (6.59). V objeme HPD spiny supratekutej komponenty precesujú na larmorovskej frekvencii, kým spiny normálnej komponenty precesujú s frekvenciou odpovedajúcou lokálnej hodnote magnetického poľa, ktora je nižšia ako larmorovská frekvencia. Keď následne takéto kvázičastice vytvoria CP, na nastavenie frekvencie precesie supratekutej komponenty t.j. larmorovskej frekvencie potrebujú energiu. Túto získajú z budiaceho vysokofrekvenčného poľa.

Doménová stena nachádzajúca sa v kanáliku môže byť v tomto kanáliku zachytená a tak nebude sledovať polohu larmorovskej rezonančnej podmienky. Dôvodom zachytenia doménovej steny v kanáliku je tzv. magnetické nezmáčanie, vznikajúce v dôsledku vplyvu povrchovej energie  $E_{\rm S} \sim (\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{\nu})^2$ , kde  $\boldsymbol{\nu}$  je jednotkový normálový vektor [19]. Doménová stena má svoje magnetické povrchové napätie ako dôsledok rozdielu rôznych povrchových energií v HPD a stacionárnej doméne. Toto magnetické povrchové napätie je analogické s povrchovým napätím tak, ako ho poznáme z teórie kvapalín. To znamená, že doménová stená nie je stále rovinná, ale môže nadobúdnuť tvar menisku. Takto sa stena môže zachytiť v zúžených častiach komôrky, kde povrchová energia zvyšuje svoj príspevok do celkovej energetickej bilancie. Uvoľnenie doménovej steny v kanáliku sa prejaví náhlim skokom v absorpcii (v poli  $B_c$ ) a tento jav vykazuje hysteréziu (v poli  $B_{c'}$ ).

Povrchová energia  $E_{\rm S} \sim (\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{\nu})^2$  a s ňou spojená disipácia energie vyjadrená druhým členom vvýrazu (6.59) sa stáva dominantnou pri teplotách pod 0,3  $T_{\rm c}$ . Jej účinok sa prejavuje tým, že odtláča precesujúce spiny od stien experimentálnej komôrky, čo vedie k destabilizácii precesie spinov v HPD. Precesujúce spiny budú takto lokalizované v strede experimetálnej komôrky. Pre precesujúce spiny bude energeticky výhodnejšie "zmeniť" konfiguráciu. V HPD dipól-dipólová energia zafixovala uhol odklonenia  $\beta = \Theta_{\rm L}$  a nenulová hodnota  $\Phi$  viedla k vzniku

spinových tokov, ktoré "nastavovali" stav s koherentnou precesiou spinov. Zdá sa, že pri ultranízkych teplotách dipól-dipólová energia bude fixovať uhol $\Phi = \Theta_{\rm L}$ a nenulová hodnota  $\beta$  povedie k vzniku spinových supratokov, ktoré nastavia stav s koherentnou precesiou spinov. Keďže tieto stavy s koherentne precesujúcimi spinmi sú generované v limite  $T \rightarrow 0$ , kde hustota kvázičasticových excitácii exponenciálne klesá s klesajúcou teplotou, dá sa očakávať, že pôjde o "dlhožijúce" stavy s unikátnymi vlastnosťami. Prv než opíšeme vlastnosti týchto tzv. perzistentne precesujúcich domén, ukážeme dynamiku spinovo precesujúcich vĺn, ktoré sú analogické ako dynamika kmitov (oscilácií) vznikajúcich na povrchu kvapalín v gravitačnom poli.

## 6.9 Spinovo precesujúce vlny



Obr. 6.17: Schématické znázornenie spinovo-precesujúcich vĺn v HPD: rovnovážny stav HPD (A), prvý (B) a druhý (C) axiálny povrchový mód HPD.

Homogénne precesujúca doména je dynamickým stavom s koherentnou precesiou spinov, ktorému zodpovedá minimum celkovej energie. Ak na takýto koherentne precesujúci systém spinov aplikujeme ľubovoľnú poruchu, táto porucha vychýli systém spinov zo stavu minima energie (t.j. zo základného stavu). Vychýlením systému zo stavu minima

energie sa naruší rovnováha síl (energií), vzniká gradient fázy spinovej časti parametra usporiadania, ktorý generuje spinové toky majúce tendenciu obnoviť stav s minimom energie. Proces obnovenia stavu s minimom energie je spojený s generáciou spinovo precesujúcich vĺn - osciláciami distribúcie spinov okolo rovnovážnej polohy. Ak je spinovo precesujúca vlna excitovaná, tak dve JMR koexistujú súčasne: vf-rezonancia pre generáciu HPD, a druhá nf-rezonancia odpovedajúceho kolektívneho oscilačného módu spinovo precesujúcej vlny.

V princípe existujú dva základné typy týchto módov. Prvým módom je tzv. torzný mód a druhý mód je reprezentovaný rôznymi typmi povrchových nízkofrekvenčných oscilácií: planárnych a axiálnych (viď. obr. 6.17.), atď [21]. Tieto módy sú podobné oscilačným módom pozorovaným na povrchu kvapalín v gravitačnom poli. Podľa teórie, pre frekvenciu týchto módov je možno odvodiť vzťah [20]

$$\Omega_{\rm Sm}^2 = Q_{\rm im} \frac{c_1 c_2}{RB} \tanh\left(Q_{\rm im} L \frac{c_2}{R2c_1}\right) \nabla B, \qquad (6.60)$$

kde R je polomer komôrky, B je rezonančné magnetické pole,  $Q_{im}$  sú m-té nenulové korene Besselovej  $J'_i(x) = 0$  (kde  $J_i(x)$  je Besselova funkcia pre i, i = 0 pre axiálne a

i=1 pre planárne módy), L je dĺžka HPD ,  $c_1^2=(5c_\perp^2-c_\parallel^2)/4$  a  $c_2^2=(5c_\perp^2+3c_\parallel^2)/4$ , pričom  $c_\perp$  a  $c_\parallel$  sú rýchlosti spinových vĺn s rešpektovaním orientácie magnetického poľa.



Obr. 6.18: Závislosť rezonančnej frekvencie oscilačného módu doménovej steny na veľkosti výchylky spinu z rovnovážnej polohy (dole) respektíve prepočítanej výchylky oscilácií doménovej steny (hore). Inset zobrazuje meranú rezonančnú charakteristiku oscilačného módu.

Spinovo precesujúce vlny sú excitované pomocou malého prídavného striedavého magnetického poľa s axiálnou symetktoré je generoriou. pozdĺžnými cievvané kami. Odozva HPD na túto poruchu je meraná pomocou demodulačnej techniky t.j. predzosilňovačom zosilnený signál je demodulovaný pomocou vf-detektora a výstupný signál z tohoto detektora je meraný nízkofrekvenčným fázovo citlivým detektorom. Generátor harmonického napätia napájajúci pozdĺžne cievky súčasne slúži ako zdroj referenčného signálu pre fázovo citlivý detektor. Typická meraná rezonančná odozva HPD excitovaného oscilačného módu doménovej steny v HPD je zobrazená v insete obrázku 6.18.

0.9

Analýza rezonačnej frekvencie módov v závislosti na veľkosti excitácie (amplitúde výchylky spinu) ukázala (viď. obr. 6.18), že kmity doménovej steny sú nelineárne, pričom z pohľadu referenčnej sústavy rotujúcej na larmorovskej frekvencii, prídavné oscilácie spinov sú analogické s kmitmi matematického kyvadla. Ak na HPD nie je aplikované prídavné longitudinálne magnetické pole, pozorovateľ spojený s touto referenčnou sústavou "vidí" statické, neoscilujúce spiny v doménovej stene. V prípade ak je toto pole aplikované, pozorovateľ uvidí spiny vykonávať vynútený kmitavý pohyb okolo rovnovážnej polohy v rovine x-y, presne tak isto ako kmitá kyvadlo. Riešením pohybových rovníc v aproximácii malých kmitov sa dá ukázať, že vratná sila  $F_V$  vznikájúca v dôsledku vychýlenia spinu z minima celkovej energie sa dá vyjadriť v tvare  $F_V \sim A(T) \sin \alpha$ , kde  $\alpha$  je uhol vychýlenia spinu z

rovnovážnej polohy v rovine x-y <br/>aA(T)je koeficient úmernosti. Pohybová rovnice opisujúca oscilácie uhl<br/>a $\alpha$ má tvar

$$\frac{d^2\alpha}{dt^2} + 2\alpha \frac{d\alpha}{dt} + \omega_0^2 \sin(\alpha) \simeq \exp(i\omega t)$$
(6.61)

a až na tlmiaci člen je identická s pohybovou rovnicou pre kyvadlo. Dôsledkom prítomnosti nelineárnej vratnej sily je závislosť rezonančnej frekvencie na výchýlke a prítomnosť vyšších, nepárnych harmonických frekvencií v signále odozvy. Experimentálne potvrdená závislosť rezonančnej frekvencie axiálneho módu na uhle odklonenia spinov je zobrazená na obr. 6.18. Čiara reprezentuje fit experimentálných dát teoretickým vzťahom  $\omega_0(1 - k\alpha^2)$ . Taktiež bola experimentálne potvrdená prítomnosť vyšších harmonických frekvencií [26].

Záverom poznamenajme, že v supratekutom <sup>3</sup>He-B tieto spinovo precesujúce vlny predstavujú kolektívne spinové módy parametra usporiadania. Sú považované za bezmedzerové excitácie základného stavu HPD (tzv. Goldstonove módy, viď úvodná kapitola) a môžu slúžiť ako nástroj k štúdiu rôznych analógií.

# 6.10 Perzistentne precesujúca doména v <sup>3</sup>He-B

Znižovaním teploty hustota excitácii  $\rho$  v supratekutom <sup>3</sup>He-B klesá exponenciálne ako  $\exp(-\Delta(T)/k_{\rm B}T)$  a pri teplotách nižších ako 200  $\mu {\rm K}$  excitácie predstavujú veľmi zriedený plyn. Pretože s excitáciami sú spojené disipačné procesy, ktoré sú pri týchto teplotách veľmi slabé, dôsledkom čoho sa koherentné vlastnosti magnetickej supratekutosti môžu prejaviť omnoho dlhšie. Znižovaním teploty naviac ďalšie formy energií zvyšujú svoj príspevok na ovplyvňovaní stavu spinového systému v supratekutom <sup>3</sup>He-B. Ako bolo už vyššie uvedené, jednou z takýchto energií je povrchová energia (energia textúry), ktorá odtláča spinovo precesujúce domény od stien experimentálnej komôrky a súčasne vytvára podmienky na prenos energie spinovými tokmi. V roku 1992 bol skupinou v Lancasteri objavený nový stav koherentne precesujúcicc spinov, korý bol neskôr nazvaný ako perzistentne precesujúca doména (PPD) [17]. Perzistentne preto, pretože doba života týchto domén môže byť až niekoľko tisíc sekúnd. Vlastnosti PPD sa diametrálne líšia od vlastností HPD. Frekvencie signálu voľnej precesie v PPD s časom rastie, kým v HPD je to naopak. PPD nie je možno excitovať na larmorovskej frekvencii, ale len na frekvencii vyššej, než je larmorovská (tzv. off resonant excitation) [22] a taktiež ju je možno excitovať pomocou šumu. Experimentálne sa taktiež zistilo, že pre reprodukovanú generáciu PPD je potrebné vytvoriť lokálne minimum v priebehu magnetického poľa v smere osi z.

Presná fyzikálna príčina a spôsob formovania PPD dodnes nie je známa. Predpokladá sa, že pri ultra nízkych teplotách, pri ktorých PPD je možno generovať, by mohli rozmízať orbitálne stupne vľnosti. Takto orbitálny moment L by mohol, prostredníctvom spin-orbitálnej väzby, participovať na rotácii spolu so spinom S. Vyklonenie spinu S a jeho následná precesia by bola spojená s vyklonením orbitálneho momentu L a jeho precesiou. Precesia orbitálneho momentu musí viesť k jeho relaxácii prostredníctvom orbitálnej viskozity. Leggettova teória (vrátane Fominovej a ďalších teoretických prác) uvažuje iba spinovú dynamiku, pričom predpokladá, že orbitálne stupne voľnosti sú zamrznuté t.j. orbitálny moment L je nemenný, zafixovaný v dôsledku častých vzájomných prechodov <sup>3</sup>He kvázičastíc medzi normálnou a supratekutou zložkou. To však nemusí platiť v balistickom režime. Fisher a Suramlishvilli riešenim Leggettových rovníc s orbitálnou dynamikou spočítali orbitálnu viskozitu ako v hydrodynamickom, tak aj v balistickom režime [27]. Ukázali, že orbitálna viskozita v <sup>3</sup>He-B, v limite  $T \rightarrow 0$  bude veľmi malá a precesia orbitálneho momentu L môže byť indukovaná prostredníctvom spin-orbitálnej väzby. Taktiež spočítali teplotnú závislosť orbitálnej viskozity a z nej určili relaxačný čas PPD ako

$$au \sim \frac{D}{\pi v_{\rm F}} \sqrt{\frac{k_{\rm B}T}{\Delta}} \exp\left(\Delta/k_{\rm B}T\right) , ag{6.62}$$

kde D je priemer experimentálnej komôrky, keďže stredná voľná dráha excitácii je pri týchto teplotách oveľa väčšia ako rozmer komôrky.



Obr. 6.19: Závislosť trvania signálu voľnej precesie (doby života PPD) na redukovanej teplote  $T/T_c$ .

Na obr. 6.19 je pre ilustráciu zobrazená teplotná závislosť doby života (alebo relaxačný čas) PPD spolu s relaxačným časom HPD. Čiara predstavuje fit experimentálných dát závislosťou (6.62); kvalitatívne zhoduje s namera- $\mathbf{sa}$ nou závislosťou. Nesúlad je v parametri D reprezentujúcom strednú voľnú dráhu excitácii. Pri ultranízkych teplotách je doba života HPD veľmi krátka. Je to dôsledkom už vyššie zmienenej povrchovej energie, ktorá sa stáva dominantnou pri

teplotách pod  $0.3T_c$ . Jej účinok sa prejavuje odtáčaním precesujúcich spinov od stien experimentálnej komôrky, čo vedie k destabilizácii precesie spinov v HPD a následne ich krátkej dobe života. Aj účinok povrchovej energie na samotnú PPD je katastrofálny. Inset obrázku 6.19 zobrazuje závislosť doby života PPD ako funkciu gradientu magnetické poľa, pričom gradientom magnetického poľa bola kontrolovaná poloha lokálneho minima v magnetickom poli. Keď sa toto lokálne minimum v priebehu magnetického poľa blíži k vertikálnemu povrchu komôrky, doba života PPD sa náhle začne skracovať, pričom sa skráti o štyri rády. Aký fyzikálny proces je príčinou tohto náhleho skrátenia nie je dodnes presne známe. Tak, ako sú otvorené

aj odpovede na otázky o aký typ spinovej štrukúry v prípade PPD vlastne ide, ako presne vzniká, prečo frekvencia signálu voľnej precesie spinov s časom rastie a aké sú fyzikálne mechanizmy disipácie energie.

# 6.11 Boseova-Einsteinova kondenzácia magnónov v supratekutom <sup>3</sup>He

Teória Boseovej-Einsteinovej kondenzácie bola vysvetlená pre bozóny - častice majúce celočíselný spin - v úvodnej kapitole a bude ďalej rozpracovaná v kapitole 9. Je však potrebné povedať, že teória B-E kondenzácie už bola rozšírená aj na excitácie. Ide o také excitácie, ktorých doba života je dostatočne dlhá na to, aby s pomocou nejakej vzájomnej interakcie mohli zaujať koheretný stav s minimom energie. Inými slovami povedané, pokiaľ B-E kondenzáciu zadefinujeme ako stav s minimom energie, v ktorom súbor častíc alebo excitácií sa správa koherentne, t.j. je opísaný jedinou vlnovou funkciou, tak takejto definícii B-E kondenzácie vyhovujú stavy s koheretnou precesiou spinov v supratekutých fázach <sup>3</sup>He. Hovoríme tu o B-E kondenzácii magnónov [28].

Magnóny definujeme ako elementárne excitácie magnetického momentu - vychýlenie magnetického momentu (alebo spinu) z rovnovážnej polohy. Aplikujme na objem supratekutého <sup>3</sup>He-B statické magnetické pole a následným rádiofrekvenčným impulzom  $B_{\rm rf}$  vychýlime celkový spin  $\mathbf{S} = \chi_{\rm B} \mathbf{B}_0 / \gamma$  na uhol  $\beta$ . Vychýlený spin precesuje okolo poľa  $\mathbf{B}_0$ . Stav spinu možno vyjadriť ako

$$S_x + iS_y = S_\perp e^{i(\omega t + \alpha)}, \quad S_z = \frac{\chi_B}{\gamma} B_0 \cos\beta, \tag{6.63}$$

kde  $S_{\perp} = \frac{\chi_B}{\gamma} B_0 \sin \beta$  je projekcia spinu do roviny x - y. Koncentráciu magnónov možno definovať ako veľkosť vychýlky spinu z rovnovážnej polohy t.j.

$$n_{\rm M} = \frac{S - S_{\rm z}}{\hbar} \ . \tag{6.64}$$

Pretože spin precesuje, je výhodnejšie prejsť do rotujúcej súradnej sústavy spojenej s poľom  $B_{\rm rf}$ . V tejto súradnej sústave, ktorá rotuje s uhlovou frekvenciou je spin stacionárny, pokiaľ zanedbáme relaxačné procesy. Voľná energia v tejto súradnej sústave je vyjadrená ako

$$E(\beta) = (\omega_{\rm L} - \omega)S_{\rm z} + E_{\rm D}(\beta) , \qquad (6.65)$$

kde  $E_{\rm D}$  je energia dipól-dipólovej interakcie, pričom

$$E_{\rm D} = \frac{8}{15} \frac{\chi_B \Omega_B^2}{\gamma^2} \left( \cos\beta + \frac{1}{4} \right)^2, \text{ pre } \cos\beta < -\frac{1}{4} , \qquad (6.66)$$

$$E_{\rm D} = 0$$
, pre  $\cos \beta > -\frac{1}{4}$ . (6.67)

Lokálna larmorovská frekvencia  $\omega_{\rm L}$  je v podstate definuje potenciál učinkujúci na precesujúce spiny, kým frekvencia precesie spinov môže byť stotožnená s chemickým potenciálom magnónov  $\mu = \omega$ .

Hmotnosť magnónov v supratekutom <sup>3</sup>He-B je anizotrópna, t.j. závisí od smeru v ktorom sa šíria. V limite malej spin-orbitálnej interakcie disperzný vzťah pre magnóny (priečne spinové vlny) možno vyjadriť ako

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega_{\rm L} + \frac{\hbar k_{\perp}^2}{2m_{\rm M}^{\parallel}(\beta)} + \frac{\hbar k_{\rm z}^2}{2m_{\rm M}^{\parallel}(\beta)} .$$
(6.68)

Priečna a pozdĺžna hmotnosť magnónov závisia na uhle odklonenia spinu $\beta$ 

$$\frac{1}{m_{\rm M}^{\perp}(\beta)} = \frac{1}{\hbar\omega_{\rm L}} \left[ c_{\parallel}^2 (1 + \cos\beta) + c_{\perp}^2 (1 - \cos\beta) \right] , \qquad (6.69)$$

$$\frac{1}{m_{\rm M}^{\parallel}(\beta)} = \frac{2}{\hbar\omega_{\rm L}} \left[ c_{\parallel}^2 \cos\beta + c_{\perp}^2 (1 - \cos\beta) \right] . \tag{6.70}$$

Pozdĺžna a priečna rýchlosť spinových vĺn $c_{\parallel}$  a  $c_{\perp}$ sú rádu Fermiho rýchlosti  $v_{\rm F}$ . Ak zanedbáme anizotrópiu t.j. predpokladáme malé uhly odklonenia, takže $\cos\beta \sim 1$  potom sa disperzný vzťah zjednoduší a bude mať tvar

$$\omega(\mathbf{k}) = \omega_{\rm L} + \frac{\hbar k^2}{2m_{\rm M}} \tag{6.71}$$

s izotrópnou hmotnosťou magnónov

$$m_{\rm M} = \frac{\hbar\omega_{\rm L}}{2c^2} . \tag{6.72}$$

Keďže $c \sim v_F$ a hmotnosť atómov $^3{\rm He}~m \sim E_{\rm F}/v_{\rm F}^2$ potom hmotnosť magnónov bude

$$m_{\rm M} \sim m \frac{\hbar \omega_{\rm L}}{E_{\rm F}}$$
 (6.73)

Zo vzťahu (6.73) vyplýva, že magnóny budú ľahké v porovnaní s hmotnosťou atómov <sup>3</sup>He, keďže  $\hbar\omega_{\rm L}\sim 100~\mu{\rm K}$  a $E_{\rm F}\sim 1\,{\rm K}.$ Z hmotnosti magnónov a ich počtu je možno odhadnúť kritickú teplotu kondenzácie magnónov

$$T_{\rm M} \sim \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{m_{\rm M}} \sim \frac{E_{\rm F}^{4/3}}{(\hbar\omega_{\rm L})^{1/3}} \sim 10 E_{\rm F} ,$$
 (6.74)

kde Fermiho energia $E_{\rm F}$ vyjadrená v teplote je $\sim 1$ K. Pretože experimenty v supratekutom <sup>3</sup>He sa realizujú pri teplote pod 1 mK, B-E kondenzácia magnónov je pri týchto teplotách úplná.

169

0.11

# 6.12 Rozhranie medzi A a B fázami supratekutého <sup>3</sup>He

Rozhranie medzi A a B fázami supratekutého <sup>3</sup>He (alebo tiež A-B hranica) predstavuje oblasť spájajúcu dva rôzne supratekuté systémy, dva rôzne typy vákuových stavov. Kým A-fáza predstavuje model pre základný stav štandardného modelu, B-fáza je modelovým systémom pre Diracovo vákuum. Ako je vidno z fázového diagramu supratekutého <sup>3</sup>He, pri teplotách  $T \rightarrow 0$  aplikáciou magnetického poľa s vhodným profilom je možno definovane kontrolovať polohu A-B rozhrania. To dovoľuje realizovať rôzne typy experimentov s cieľom študovať kinetiku A-B rozhrania, jej termodynamické a magnetické vlastnosti. Avšak jedným zo základných a stále otvorených problémov supratekutého <sup>3</sup>He je nukleačný problém.

## 6.12.1 Nukleačný problém

Fázový prechod prvého druhu medzi A a B fázou (a naopak) supratekutého <sup>3</sup>He je stále predmetom diskusie medzi teoretickými a experimentálnymi fyzikmi [23]. Klasický fyzikálny obraz nukleácie zárodku B-fázy s kritickým polomerom  $r_c$  je založený na konkurencii povrchovej ( $E_s = 4\pi\sigma_{AB}r^2$ ) a objemovej ( $E_v = 4\pi \Delta G_{AB}r^3/3$ ) energie<sup>1</sup>. Kým povrchová energia má tendenciu zmenšovať objem novo vzniknutej fázy, objemová energia učinkuje presne opačne - jej tendencia je objem tejto novo vzniknutej fázy zväčšovať. Kritický polomer, ktorý novovzniknutá fáza musí minimálne dosiahnuť, aby nezanikla, sa dá vypočítať z rovnosti týchto energií:

$$r_{\rm c} = \frac{3\sigma_{\rm AB}}{\Delta G_{\rm AB}},\tag{6.75}$$

kde  $\sigma_{AB}$  je povrchové napätie medzi A a B-fázou a  $\Delta G_{AB}$  je hustota objemovej energie. Pravdepodobnosť, že pri teplote T, zárodok novej B-fázy dosiahne kritický polomer je úmerná  $\exp(-F_{\rm c}/k_{\rm B}T)$ , kde  $F_{\rm c} = E_{\rm s}(r_{\rm c}) + E_{\rm v}(r_{\rm c})$ . Po dosadení hodnôt pravdepodobnosť nukleácie B - fázy v časovej škále je porovnateľná s dobou "života" vesmíru. Preto bolo navrhnutých niekoľko alternatívnych mechanizmov, ako vysvetliť tento nesúlad. Leggett navrhol mechanizmus nukleácie v anglickej literatúre nazvaný "baked Alaska", v ktorom spúšťacím mechanizmom nukleácie je zrážka vysokonergetickej častice spojená s lokálnym prehriatím supratekutej fázy a následným ochladením so vznikom novej fázy [24]. Bunkov a Timofeevskava [25] navrhli mechanizmus nukleácie, ktorý je taktiež spúšťaný vysokoenergetickými časticami, avšak nová fáza vzniká pomocou Kibbleova-Zurekovho mechanizmu [14, 15], ktorý bol experimentálne študovaný<sup>2</sup> [31, 32]. Autori práce [33] ukázali, že aj povrch experimentálnej komôrky ovplyvňuje proces nukleácie, či už narušením homogenity supratekutosti alebo prítomnosťou "nepravej" fázy v mikrokavitách povrchu, ako navrhli Leggett a Yip [34]. Vzhľadom na to, že problém nukleácie (či už primárnej, alebo sekundárnej) je stále otvoreným problémom s minimálnym množstvom experimentálnych dát, jedným z cieľov štúdia vlastností A-B hranice bolo aj experimentálne štúdium procesu nukleácie.

 $<sup>^1{\</sup>rm Tento}$  problém sa fyzikálne veľmi podobá kvantovej kavitácii, ktorou sa budeme podrobne zaoberať v nasledujúcej kapitole 7.

 $<sup>^2 {\</sup>rm Tento}$ mechanizmus bude opísaný v kapitole 11.

## 6.13 Rotující supratekuté <sup>3</sup>He

## 6.13.1 Hladina rotujícího vzorku

V předchozí kapitole jsme diskutovali případ rotující válcové nádoby (úhlová rychlost rotace  $\mathbf{\Omega} = \Omega \hat{\mathbf{z}}$ ) obsahující supratekuté <sup>4</sup>He a popsali vznik menisku na hladině rotujícího vzorku He II a mřížky kvantovaných vírů, která imituje rotaci tuhého tělesa. Ukázali jsme, že je energeticky výhodné, aby vznikaly jedenkrát kvantované víry. Náš popis vycházel z Landauova dvousložkového modelu, ve kterém je celková hustota kapaliny součtem hustot normální a supratekuté složky,  $\rho = \rho_n + \rho_s$  a pro přenos hmoty musíme uvažovat obě složky, tj.  $\mathbf{j} = \rho_n \mathbf{v}_n + \rho_s \mathbf{v}_s$ .

Landauův dvousložkový model se dobře hodí i pro fenomelologický popis supratekutých fází <sup>3</sup>He. Musíme si ovšem ozřejmit několik důležitých faktů. Situace je pro <sup>3</sup>He komplexnější, neboť hydrodynamické vlastnosti obou supratekutých fází jsou obecně anizotropní. To platí především pro fázi A, fázi B (v nulovém či slabém vnějším magnetickém poli) lze považovat za přibližně izotropní. Landauův model pro He II vycházel ze zcela specifického tvaru energetického spektra kvazičástic fononů a rotonů, viz. obr. 5.7, kdežto pro <sup>3</sup>He jsme tvar ener-



Obr. 6.20: Interferogramy - tj. "snímky" válcové nádoby s <sup>3</sup>He-B s mírně sešikmeným dnem (jak je znázorněno v rozích) v klidu (a) a při rotaci 1,55 rad/s (b).

getického spektra diskutovali v této kapitole. Podstatná je zejména existence energetické mezery (viz obr. 8.4), z čehož plyne přibližně exponenciální úbytek kvazičástic se snižující se teplotou (podobně jako pro rotony v He-II). Při teplotách kolem 0,2  $T_{\rm c}$  a nižších je kvazičástic jen velmi málo, jejich střední volná dráha rychle roste a hydrodynamický popis není možné použít, jak diskutujeme v jiné části této kapitoly. V kapitole 3 jsme popsali vlastnosti normálního <sup>3</sup>He a ukázali, že ve shodě s Landauovou teorií Fermiho kapaliny jde těsně nad  $T_{\rm c}$  o velmi vazkou tekutinu. V rámci dvojsložkového modelu proto bude velmi vazkou kapalinou i normální složka supratekutého <sup>3</sup>He a v experimentech s rotujícími supratekutými fázemi <sup>3</sup>He ji obvykle můžeme v souřadné soustavě spojené se stěnami nádoby v dobrém přiblížení považovat za nehybnou.

Experimentální výzkum rotujících supratekutých fází <sup>3</sup>He je náročný, neboť vyžaduje nejenom aparaturu schopnou dlouhodobě dosahovat submilikelvinových teplot, ale zároveň rotovat. Ve světě existuje jen několik takových aparatur (Manchester, UK, Cornellova univerzita, USA, ISSP Tokyo), první z nich známá jako ROTA byla uvedena do provozu na Helsinské technické univerzitě v roce 1982. V

této nízkoteplotní laboratoři byl (na aparatuře ROTA 2) proveden experiment analogický Osbornovu experimentu diskutovanému v předchozí kapitole. Z fázového diagramu <sup>3</sup>He na obr. 6.2 je zřejmé, že (aniž bychom aplikovali silné magnetické pole) volnou hladinu - fázové rozhraní kapalina/plyn - můžeme pozorovat ve válcové nádobě částečně zaplněné supratekutou fází <sup>3</sup>He-B. Přímé vizuální pozorování tvaru menisku na hladině rotujícího vzorku jako v Osbornově experimentu s He II není pro <sup>3</sup>He-B v důsledku parazitního přítoku tepla, proto autoři práce [36] zvolili interferometrickou techniku. Z interferogramu na obr. 6.20 je patrné, že meniskus na hladině rotujícího vzorku <sup>3</sup>He-B vzniká.



Obr. 6.21: Změna hloubky <sup>3</sup>He-B v ose nádobky vynesená v závislosti na úhlovérychlosti rotace. Teoretické závislosti pro vazkou tekutinu (plná čára) a pro případ supratekuté složky v klidu (čárkovaně) jsou odvozeny v textu.

Pro kvantitativní analýzu nyní odvodíme tvar menisku na nestlačitelné (divv = 0) rotující kapalině. Vyjdeme z Eulerovy rovnice  $\partial \boldsymbol{v} / \partial t + (\boldsymbol{v} \nabla) \boldsymbol{v} =$  $-(1/\rho)\nabla P + q$ , a předpokládáme rotaci tuhého tělesa, takže do ní dosadíme  $v_{\rm x} = -\Omega y$ ,  $v_{\mathrm{y}} = \Omega x; v_{\mathrm{z}} = 0.$  Jednoduchou integrací získáme podmínku  $2P/\rho = \Omega^2(x^2 + y^2) -$ 2gz + konst. Protože na povrchu kapaliny musí být tlak P konstantní, snadno nahlédneme, že povrch rotující kapaliny musí mít tvar rotačního paraboloidu:  $z = \Omega^2 R^2 / (2g)$ , kde  $R^2 = x^2 + y^2.$ 

Tuto analýzu je nyní třeba zobecnit na dvojsložkový mo-

del. Uvažujeme-li válcovou nádobu, ve které se objem kapaliny nemění, zůstane při rotaci výška hladiny na poloměru  $\sqrt{2R}$  na stejné výšce. Oproti ní klesne hladina ve středu nádoby o hodnotu  $\delta$ , která ale závisí na tom, zda se rotace účastní jenom normální složka a supratekutá zůstaává v klidu (viz čárkovaná závislost v obr. 6.20) nebo supratekutá složka nějakým způsobem imituje rotaci tuhého tělesa a rotace se tak z makroskopického pohledu účastní obě složky (viz plná čára v obr. 6.20). Experiment [36] prokázal, že supratekutá složka imituje rotaci tuhého tělesa až při překročení určité kritické rychlosti, v tomto konkrétním případě kolem 0,2 rad/s.

## 6.13.2 Kvantované víry nebo vírové listy?

V minulé kapitole jsme ukázali, že supratekuté <sup>4</sup>He dokáže imitovat rotaci tuhého tělesa pomocí mřížky jedenkrát kvantovaných vírů. Je to ale jediná možnost? Pro jednoduchou supratekutou kapalinu He II, jejíž parametr uspořádání je komplexní skalár  $\Psi = \sqrt{\rho_s} \exp\{i\phi\}$ , zřejmě ano. V rámci dvousložkového modelu se musíme

nějakým způsobem vyrovnat s tím, že normální složka si vede jako obyčejná vazká tekutina, proto v rotujícím válcovém kontejneru platí  $\boldsymbol{v}_n = \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{r}$ , avšak vyjdemeli z klidového stavu kdy  $\boldsymbol{v}_s = 0$ , podmínka rot $\boldsymbol{v}_s = 0$  vyžaduje, aby supratekutá kapalina zůstala v klidu i při uvedení kontejneru do rotace<sup>3</sup>. Jde o tzv. rotační paradox (angl. *rotating paradox*), protože jde stav s větší energií. Jak jsme již diskutovali v předchozí kapitole, minimalizovat musíme veličinu  $F' = F - \boldsymbol{L}\boldsymbol{\Omega}$ , kde F je volná energie a  $\boldsymbol{L}$  moment hybnosti rotující kapaliny v laboratorní souřadné soustavě. Odsud plyne, že kinetická enegie je určena rychlostí protiproudu normální a supratekuté složky  $\boldsymbol{v}_n - \boldsymbol{v}_s$  jako

$$F_{\rm kin} = \frac{1}{2} \int \rho_{\rm s} (\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s})^2 d^3 r . \qquad (6.76)$$

Historicky byly i pro supratekuté <sup>4</sup>He navrženy různé cesty k dosažení minimalizace  $F_{\rm kin}$ . Hlavní ideou je zde narušit podmínku rot  $v_{\rm s} = 0$  pouze v malých oblastech a v podstatné části objemu ji dodržet. Jak jsme uvedli, Onsager a Feynman šli cestou vzniku kvantovaných vírů; ale již v roce 1955 přišli Landau a Lifshic [38] s alternativní možností. Uvažovali systém soustředných válcových ploch - vírových listů (angl. vortex sheets). V oblasti mezi nimi zůstává rot  $v_{\rm s} = 0$  zachováno, ale při radiálním přechodu přes list dojde ke skoku v supratekuté rychlosti.

Do energetické bilance však musíme zahrnout i energii spojenou s povrchovým napětím  $\sigma$  na vírových listech, takže minimalizovat je třeba veličinu  $F_{\rm kin} + \sigma A$ , kde A je celková plocha vírových listů v rotující nádobě. Minimalizace (kterou zvídavější čtenář může provést jako cvičení nebo najde v práci [39]) vede k optimální vzdá-



velocity

lenosti mezi vírovými listy  $b = (3\sigma/\rho_{\rm s}\Omega^2)^{1/3}$ . Protože plocha vírových listů je  $A \approx V/b$ , vidíme, že  $A \propto \Omega^{2/3}$  a tento výsledek si zapamatujeme pro pozdější diskuzi experimentálních výsledků.

Ukázali jsme, že zavedení vírových listů (není-li  $\sigma$  příliš vysoké) vede ke zmenšení energie. Neznamená to však, že jde o absolutní minimum energie a ani to, že by takový stav měl být stabilní. To je případ supratekutého <sup>4</sup>He, kdy je vírový list vždy nestabilní a rozpadne se na jednotlivé kvantované víry. V supratekutém <sup>3</sup>He-A však vírový list existovat může a byl již experimentálně prokázán (viz níže). Jeho existence je možná díky komplexnější struktuře parametru uspořádání, který jsme zapsali ve tvaru 6.15. Anizotropie fáze A je dána směry jednotkových vektorů

 $<sup>^3{\</sup>rm V}$ rotujícím kontejneru jiného tvaru to obecně neplatí, protože dojde k potenciálnímu proudění, viz např. učebnice [37].



 $= \Omega \times \mathbf{r}$ 

radius

 $\hat{l}$  a  $\hat{d}$ ; tyto směry jsou dány slabými interakcemi. Leggett ukázal, že v nulovém magnetickém poli jde o interakci typu  $(\hat{l}\hat{d})^2$ , tedy její minimum nastává pro paralelní nebo antiparalelní orientaci  $\hat{l}$  a  $\hat{d}$ . Tato dvojitá degenerace je příčinou vzniku doménových stěn (s podobnou strukturou jako jsou např. doménové stěny ve feromagnetiku), takže z jedné strany stěny máme  $\hat{l} = \hat{d}$ , kdežto z druhé  $\hat{l} = -\hat{d}$ . Tyto doménové stěny dostaly název solitony. Jejich tloušťka (stejně jako ve foromagnetiku)je určena poměrem energie typu  $(\hat{l}\hat{d})^2$  ku gradientní energii, která se snaží držet  $\hat{l}$  a  $\hat{d}$  rovnoběžné. Tloušťka solitonu v <sup>3</sup>He-A je tudíž konečná, řádově 10  $\mu$ m. Jsou to právě solitony, které slouží jako jakási páteř vírového listu a za určitých podmínek vedou k jeho stabilitě.

## 6.13.3 Vírové struktury v rotujícím <sup>3</sup>He-A

Přejděme nyní k obecnější diskuzi supratekuté hydrodynamiky ve fázi <sup>3</sup>He-A. Jak již víme, supratekutá rychlost je obecně definována gradientem fáze makroskopické vlnové funkce,  $v_{\rm s} = \kappa/(2\pi)\nabla\phi$ , kde  $\kappa$  je cirkulační kvantum, rovné Planckově konstantě dělené hmotností supratekuté částice. Pro <sup>4</sup>He proto máme  $\kappa = h/m_4 = 9,97 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ , kdežto pro <sup>3</sup>He díky Cooperovu párování  $\kappa = h/2m_3 = 6,62 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ . Díky komplexní struktuře parametru uspořádání fáze A ve tvaru 6.15 je násobení fázovým faktorem ekvivalentní rotaci os  $\hat{n}_1$  a  $\hat{n}_2$  kolem osy orbitálního momentu  $\hat{l} = \hat{n}_1 \times \hat{n}_2$ .

Fyzikální veličinu cirkulace jsme v předchozí kapitole o supratekutém $^4{\rm He}$ definovali jako drahový integrál supratekuté rychlosti po uzavřené smyčce

$$\Gamma = \oint_{L} \boldsymbol{v}_{\rm s} d\ell = \frac{\hbar}{m_4} \oint_{L} \nabla \phi d\ell \tag{6.77}$$

a pro jednoznačně souvislou oblast uvnitř kapaliny ukázali, že je nulová. Pro $^3{\rm He-A}$ však Mermin a Ho[40]odvodili vztah

$$\Gamma = \oint_{L} \boldsymbol{v}_{s} d\ell = \frac{\kappa}{2\pi} \int \hat{\boldsymbol{l}} \left( \frac{\partial \hat{\boldsymbol{l}}}{\partial x} \times \frac{\partial \hat{\boldsymbol{l}}}{\partial y} \right) dx dy , \qquad (6.78)$$

který znamená, že proudění nemusí být nutně potenciální, ale je řízeno prostorovou strukturou vektoru  $\hat{l}$  !! V souvislosti s naší diskuzí tak může vzorek <sup>3</sup>He-A imitovat rotaci tuhého tělesa pouhým vhodným prostorovým uspořádáním vektoru  $\hat{l}$ . Integrál na pravé straně je číselně roven ploše jednotkové kulové plochy  $\hat{l}\hat{l} = 1$ , kterou při integraci proskenuje konec vektoru  $\hat{l}$ .

Z naší dosavadní diskuze je jasně patrné, že v rotujícím <sup>3</sup>He-A mohou vznikat různé vírové struktury. Na základě vztahu 6.78 to mohou být tzv. spojité víry. Nemají tzv. tvrdé jádro (angl. *hard core*) rozměrů koherenční délky  $\xi$ , ve kterém by byla supratekutost zrušena, ale parametr uspořádání se dokonce nikde v objemu vzorku neodchyluje od formy fáze A, dané výrazem 6.15. To je příčinou faktu, že mohou při rotaci vznikat přímo v objemu vzorku. Spojité víry představují jakési buňky výše popsané textury ve formě včelí plástve. Obejdeme-li kolem jedné buňky,



Obr. 6.23: Různé typy kvantovaných vírů v supratekuté fázi <sup>3</sup>He-A.

změní se cirkulace o  $\pm 2\kappa,$  spojité víry jsou tudíž ne jedenkrát (jako víry v He II), ale dvakrát kvantované.

Na obr. 6.23 jsou znázorněny čtyři dosud experimentálně pozorované typy vírových struktur v supratekutém <sup>3</sup>He-A. Nejprve byly objeveny tzv. spojité CUV víry (angl. Continual Unlocked Vortex). Směr vektoru d je nastaven díky interakci s vnějším magnetickým polem a ani uvnitř tzv. měkkého jádra (angl. soft core, na obr. 6.23 je to šedivá oblast) víru se nemění. Vnější magnetické pole bylo v experimentu přítomno kvůli detekci technikou NMR, viz níže. Měkké jádro je rozměru dipólové délky, na níž dochází k ohybu textury vektoru l. Konce vektoru l v měkkém jádře dvakrát oskenují povrch jednotkové koule. CUV vír má cirkulaci  $2\kappa$ , ale pouze tehdy, povede-li smyčka, po které je obcházen, po hranici mezi sousedními víry. Začneme-li smyčku stahovat na rozměr měkkého jádra a menší, cirkulace se bude snižovat, protože konce vektoru l uvnitř smyčky již dvakrát neoskenují celý povrch jednotkové koule, ale pouze jeho příslušnou část. Při stahování smyčky do bodu cirkulace spojitě vymizí, odtud název spojité víry. Vektor  $\hat{l}$  vně měkkého jádra je díky dipólové interakci rovnoběžný se směrem vektoru d, který je určen silnější interakcí s vnějším magnetickým polem B. V experimentu NMR je obvykle  $B \parallel \Omega$ , takže vně měkkého jádra leží  $\hat{d}$  i  $\hat{l}$  v horizontální rovině.

V nulovém nebo velmi slabém vnějším poli B směr vektoru  $\hat{d}$  sleduje všude prostorovou texturu vektoru  $\hat{l}$  a mluvíme o tzv. LV spojitých vírech (angl. *Locked Vortex*). Nemají ani tvrdé ani měkké jádro a mohou teoreticky vytvářet dva typy vírových mřížek - buď trojúhelníkové nebo čvercové. Poslední typ je označován jako LV1 a na obr. 6.23 jej vidíme vpravo dole.

Strukturu vektorů  $\hat{d}$  a  $\hat{l}$  ve vírovém listu vidíme vpravo nahoře. Oblast "měkkého jádra", tj. solitonu, který jsme dikutovali výše, je opět zvýrazněna.

V <sup>3</sup>He-A mohou existovat i tzv. singulární víry (angl. Singular Vortex). Jsou jedenkrát kvantované a mají tvrdé jádro, v němž se parametr uspořádání liší od

objemové fáze A. Ačkoli to není topologicky nutné, mají i měkké jádro, neboť se tím snižuje jejich energie. Ze všech dikutovaných vírových struktur ve fázi A se nejvíce podobají kvantovaným vírům v He II, diskutovaným v předchozí kapitole.



Obr. 6.24: Tvar absorpčních spekter NMR pro různé vírové struktury v rotujícím <sup>3</sup>He-A. Podrobnosti jsou v textu.

Všechny tyto vírové struktury již byly v rotujícím <sup>3</sup>He-A experimentálně prokázány. Byly použity metody tlumení ultrazvuku, negativních iontů (viz kapitola 8) a zejména jaderná magnetická rezonance. Popíšeme nyní, jak jsou tyto vírové struktury pomocí NMR detekovány.

Z předchozí diskuze víme, že absorpční maximum sejmuté ze vzorku <sup>3</sup>He-A v klidu se nebude nacházet na Larmorově frekvenci (kde bychom jej našli ve vzorku normálního kapalného <sup>3</sup>He), ale z Leggettových rovnic plyne, že je díky dipólovému členu  $\mathbf{R}_{\rm D} \sim g_{\rm D}(T)(\mathbf{d} \times \mathbf{l})(\mathbf{d}.\mathbf{l})$  frekvenčně posunuto. To platí za předpokladu, že směry vektorů  $\hat{\mathbf{d}}$  a  $\hat{\mathbf{l}}$  se uvnitř vzorku nemění a hodnota

 $R_{\rm D}$  je konstantní. Této situaci by odpovídal jediný intenzivní pík NMR. Vzniknouli však v rotujícím <sup>3</sup>He-A vírové struktury, směry vektorů  $\hat{d}$  a  $\hat{l}$  se uvnitř vzorku mění a v těchto místech vzorku vzniknou potenciálová minima, ve kterých může existovat jeden i více vázaných stavů. Jejich energie je nižší než energie v objemu vzorku. V experimentu se existence takového vázaného stavu projeví jako satelitní pík na frekvenci bližší Larmorově, jak je patrné z obr. 6.24. Protože se vznikající potenciálová minima pro jednotlivé vírové struktury liší (jak je zřejmé z předchozí diskuze), je možné signál odpovídající různým typům vírů dobře odlišit a porovnat s detailní teoretickou analýzou, která však daleko přesahuje rámec tohoto textu. Na obr. 6.24 jsou příklady tvaru a polohy statelitních píků pro singulární víry (SV), spojité víry typu LV, pro vírové listy a pro soliton, který může za určitých okolností existovat i ve stacionárním vzorku jako doménová stěna ve feromagnetiku. Povšimněme si, že pro vírový list jsou patrná dvě satelitní maxima, odpovídající dvěma vázaným stavům v potenciálové jámě.



Obr. 6.25: Topologie vírového listu v rotujícím <sup>3</sup>He-A a odpovídající profil normální a supratekuté rychlosti.

Obr.6.26 znázorňuje pohled shora na rotační experiment, naznačeny jsou i signální cívky (angl. pick-up coils) NMR. Hlavní solenoid, který vytváří konstantní magnetické pole  $B \parallel \Omega$ zobrazen není. Pravý panel ukazuje hystrezní smyčku měřené absorpce (plochy satelitního píku). Vidíme, že při akceleraci válcové nádoby z klidu se víry v rotujícím vzorku až do dosažení určité kritické

Kromě polohy satelitního píku je dobrým rozlišovacím kritériem i závislost velikosti (plochy) satelitního absorpčního píku na úhlové rychlosti rotace  $\Omega$ . Z předchozí kapitoly víme, že pro imitaci rotace tuhého tělesa musí počet kvantovaných vírů a tedy i plocha satelitního píku úměrná Ω. Pro vírový list je úměrná celkové ploše listu a již jsme ukázali, že tomu bude odpovídat jiná závislost na rychlosti rotace, a sice  $\propto \Omega^{2/3}$ , což bylo experimentálně potvrzeno. Detailní teoretická analýza a numerické simulace ukázaly, že topologie vírového listu se liší od předpovědi Landaua a Lifshice [38] v tom, že nejde o soustřednou geometrii, ale list je na dvou místech spojen se stěnou nádoby, takže jeho délka může s rychlostí rotace spojitě narůstat.



Obr. 6.26: Geometrie rotačního experimentu se znázorněnými cívkami NMR a rychlostí protiproudu na stěně nádoby. Vpravo je hysterzní smyčka signálu absorpce s vyznačením kritických rychlostí rotace.

rychlosti u stěny nádoby netvoří. Budeme-li rychlost rotace pomalu zvyšovat, víry, vytvořené na nějaké nerovnosti stěny nádoby (viz níže) jako zárodečné smyčky se

budou zvětšovat a přesunou se (jak je naznačeno šipkou) k ose rorace do centrálního klastru, kde vytvoří výše zmiňovanou mřížku. Ve vzorku však zůstane oblast formy mezikruží, kterou víry nebudou zaplňovat ani tehdy, když akceleraci zastavíme a vzorek bude rovnoměrně rotovat. Je to způsobeno nukleační bariérou pro vznik zárodečné smyčky, jak jsme diskutovali v souvislosti s He II v předešlé kapitole.

V <sup>3</sup>He je ovšem tento jev možné experimentálně studovat do detailu díky velké hodnotě koeficientu vnitřního tření  $\alpha,$ takže nedochází k multiplikaci vírových smyček a vzniku kvantové turbulence, jak budeme dikutovat v kapitole 10. Při snižování rychlosti rotace se velikost signálu nejdříve po nějakou dobu nemění, protože víry tvořící centrální klastr postupně zaplňují oblast vzorku směrem ke stěně. Teprve až bude celý vzorek rovnoměrně víry zaplněn, přivede další snižování rychlosti rotace k jejich anihilaci na stěnách nádoby. V nádobě s velmi hladkými (křemennými) stěnami po uvedení do klidu všechny víry postupně anihilují, v nádobě s drsnějšími stěnami může dojít k



Obr. 6.27: Stavový diagram <sup>3</sup>He s vyznačeným fázovm přechodem v jádrech kvantovaných vírů ve fázi B.

jejich upnutí na nerovnostech (angl. *pinninig*) a v objemu vzorku tak mohou zůstat (ačkoli v mnohem menší míře) remanentní víry, podobně jako v He II.

### 6.13.4 Kvantované víry v rotujícím <sup>3</sup>He-B



Obr. 6.28: K intrinsické nukleaci singulárního kvantovaného víru.

V rotujícím supratekutém <sup>3</sup>He-B spojité víry existovat nemohou, všechny dosud známé typy vírů (zatím byly identifikovány tři různé typy) mají tvrdé jádro rozměru řádu koherenční délky. Ve srovnání s He II (jádro víru rozměru řádu Å) je však jádro kvantovaného víru v <sup>3</sup>He-B zhruba o dva řády větší ( $\xi$  se v závislosti na tlaku mění v rozsahu (10-70)  $\mu$ m) a představuje tak makroskopický objekt. Jádro může být tvořeno nejen normální složkou, ale i jinými supratekutými fázemi, které dokonce nemohou existovat ve formě objemového vzorku. V jádrech vírů <sup>3</sup>He-B byl dokonce experimentálně objeven fázový přechod Na obr. 6.27 je uvnitř oblasti existence fáze B vidět jeho poloha na fázovém P-T diagramu. Jde o fázový přechod prvního druhu, protože při chlazení a ohřevu rotujícího vzorku byla zaznamenána hystereze. Tento fázový přechod byl zaregistrován dokonce dvěma nezávislými experimentálními technikami [41]- metodou NMR a pomocí techniky torzního gyroskopu, ovšem podrobnosti vycházejí za rámec tohoto textu.

V předchozí kapitole jsme rozlišili možnosti intrinsické a extrinsické nukleace kvantovaných vírů. Protože kritická rychlost pro intrinsický vznik vírů v  ${}^{3}\text{He-B}$ je mnohem nižší než v He II, je na místě, abychom se zde tomuto problému detailně věnovali. Zkusme nejprve alespoň kvalitativně zodpovědět otázku, proč je v <sup>3</sup>He intrinsická kritická rychlost  $v_c$  nižší než v He II. Na obr. 6.28 vpravo nahoře je schématicky znázorněna zárodečná smyčka, ze které při překročení  $v_{\rm c}$  vznikne kvantovaný vír. K tomu je třeba, aby energie proudící supratekuté kapaliny o objemu zhruba  $a^3$ , kde a je charakteristický rozměr jádra víru, tedy energie řádově  $\rho_{\rm s} v_c^2 a^3$ byla rovna energii vírového kroužku (viz předchozí kapitola o energii jednotkové délky kvantovaného víru)  $\rho_{\rm s} \nu^2 \kappa^2 a$ , kde předpokládáme, že vír je  $\nu$ -krát kvantovaný. Porovnáním těchto energií zjistíme, že intrinsická kritická rychlost  $v_{\rm c} \propto \nu \kappa/a$ , tedy klesá s rozměrem jádra víru. Na obr. 6.28 je vynesena závislost veličiny  $v_{\rm c}/(\nu\kappa)$ na rozměru jader vírů pro tři dosud známé kvantové kapaliny: He-II, <sup>3</sup>He-B (zde je několik bodů odpovídajících různým tlakům, protože rozměr víru stejně jako koherenční délka  $\xi$  na tlaku závisí) a <sup>3</sup>He-A, kde jde o dvakrát kvantované (tj.  $\nu = 2$ ) spojité víry. V He-II a <sup>3</sup>He-B jde o singulární jedenkrát kvantované víry, tedy  $\nu = 1$ . Vidíme, že nepřímá úměrnost  $v_c \propto 1/a$  (plná čára) této jednoduché úvaze kvalitativně odpovídá.

V praxi je situace taková, že zárodečné smyčky vznikají na stěnách nádoby, kde je rychlost supratekutého proudění maximální, a to v místě nějaké nerovnosti, kde je ještě díky jejímu obtékání hydrodynamicky zvýšena. Aby se zárodečná smyčka přibližně formy půloblouku, která vznikla díky kvantově mechanickým fluktuacím, začala zvětšovat a nedošlo k jejímu opětovnému kolapsu do stěny, musí být rychlost  $v_s$  v místě smyčky větší než kritická. Na smyčku pak působí Magnusova síla směrem dovnitř kapaliny, smyčka se zvětšuje a postupně se přesune do osy rotace nádoby. Tím se sníží obvodová rychlost  $v_s$  na stěně nádoby (v souřadném systému spojeném s nádobou) a celý proces se při dalším zvyšování rychlosti rotace při opětovných překročeních kritické rychlosti periodicky opakuje.

Pro experimentální studium nukleace kvantovaných vírů v rotujícím <sup>3</sup>He-B je mocným nástrojem opět NMR, která dokáže detekovat i jednotlivé kvantované víry. Situace je zde však odlišná od detekce vírových struktur v <sup>3</sup>He-A, jak jsme ji diskutovali výše. V pseudoizotropní fázi B jsou orientující síly působící na směr vektoru  $\hat{n}$  parametru uspořádání (tj. směru kolem kterého jsou spinové souřadnice pootočeny vůči orbitálním o Leggettův úhel, viz začátek kapitoly) slabé a charakterictické rozměry textury vektoru  $\hat{n}$  srovnatelné s velikostí studovaného vzorku. Např. ve válcové komůrce vede rovnováha mezi orientujícími efekty válcové stěny a svislého magnetického pole k tzv. otevřené textuře (angl. flare-out texture) vektoru  $\hat{n}$  popsané ve válcových souřadnicích  $r, \phi, z$  vztahem

$$\hat{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{z}\cos\beta + \sin\beta(\boldsymbol{\phi}\sin\alpha - \boldsymbol{r}\cos\alpha) , \qquad (6.79)$$



Obr. 6.29: Tvary klidových a rotačních spekter NMR válcového vzorku <sup>3</sup>He-B. Podrobnosti jsou uvedeny v textu.

kde  $\alpha$  a  $\beta$  jsou závislé na r a jsou = 60°, rovny  $\alpha$  $63, 4^{\circ}$  u stěn β = a směrem k ose se zmenšují. Vektor  $\hat{n}$ tedy na ose vzorku míří vzhůru a s rostoucím poloměrem se spirálovitě stáčí. Z Leggettových rovnic (viz výše) popisujících spinovou dynamiku ve fázi <sup>3</sup>He-B vyplývá, že rezonanční podmínka závisí na úhlu mezi vektory B a  $\hat{n}$ . Pro otevřenou texturu vektoru  $\hat{\boldsymbol{n}}$ bude většina NMR absopce (z centrální části vzorku, kde je  $\hat{n}$ jen málo odkloněn od svislého směru) soustředěna blízko Lar-

morovy frekvence, avšak okrajové části vzorku přispívají k absorpci na rezonančních frekvencích vyšších než Larmorova. Proto je klidové NMR spektrum vzorku <sup>3</sup>He-B válcového tvaru poměrně široké, viz obr. 6.29. Na tomto obrázku je na ose x vynesena ne frekvence, ale indukce magnetické pole  $\boldsymbol{B} \parallel \Omega$ , které se v experimentu kontinuální NMR pomalu skanuje. Vyšší rezonanční frekvence odpovídá nižšímu poli.

Uvedeme-li nádobu pomalu do rotace a nepřekročíme-li kritickou rychlost, bude normální složka rotovat spolu s nádobou, kdežto supratekutá zůstane v klidu. Říkáme, že vzorek je v Landauově bezvírovém stavu. Vznikne proto protiproud normální a supratekuté složky, který má výrazný orientující efekt na texturu vektoru  $\hat{n}$ , který bude téměř v celém objemu (ne v blízkosti stěn) nádoby orientován v horizontální rovině. Měřené absorpční spektrum NMR se podstaně změní: sestává z výrazného tzv. protiproudového píku (angl. *counterflow peak*) a protáhlého zbytku signálu až do frekvence (pole) dané rezonanční podmínkou bezprostředně u válcové stěny.
Rotujici supratekute °ne



Obr. 6.30: Klasická (nahoře) a supratekutá (dole) Kelvinova - Helmholtzova nestabilita na rozhraní dvou prostředí.

víry jako takové, ale jejich vliv na texturu vektoru  $\hat{n}$ , lze sledování hodnoty signálu buď na Larmorově frekvenci či na frekvenci protiproudového píku pozorovat skoky absorpce odpoídající průchodu jednotlivých kvantovaných vírů objemem mezi signálními cívkami NMR.

#### 6.13.5 Supratekutá Kelvinova-Helmholtzova nestabilita

Typickým příkladem uplatnění klasické Kelvinovy-Helmholtzovy nestability je zodpovědět zdánlivě jednoduchou dětskou otázku: jak silně musí zafoukat vítr, aby se klidná hladina rybníka zvlnila. Tento problém stability fázového rozhraní (jehož povrchové napětí je  $\sigma_{AB}$ ) mezi dvěma nemísícími se tekutinami v gravitačním poli zformuloval a řešil již lord Kelvin [42]. Pokud jsou tekutiny v klidu, plave ta lehčí o hustotě  $\rho_{B}$  vlivem Archimédova vztlaku na té těžší o hustotě  $\rho_{A}$ -viz obr. 6.30 vlevo nahoře. Rozhraní mezi nimi zůstane rovinné, stabilizované povrchovým napětím a gravitací, dokud rozdíl rychlostí proudění  $v_{B} - v_{A}$  nepřekročí určitou kritickou mez  $v_{c}$ , danou vztahem

$$\frac{1}{2} \frac{\rho_{\rm A} \rho_{\rm B}}{\rho_{\rm A} + \rho_{\rm B}} (v_{\rm B} - v_{\rm A})^2 = \sqrt{\sigma_{\rm AB} F_{\rm R}} , \qquad (6.80)$$

kde  $F_{\rm R} = (\rho_{\rm A} + \rho_{\rm B})g$  je gravitační vracející síla (angl. restoring force), působící na jednotku plochy rozhraní. Při překročení ktitické rychlosti na rozhraní dojde ke generaci vln o vlnovém vektoru  $k = \sqrt{F_{\rm R}/\sigma_{\rm AB}}$  - viz obr. 6.30 vpravo nahoře.

Problém je, že takto je pro vazké tekutiny úloha zadaná nekorektně, neboť rychlost proudění ve směru přes rozhraní se musí diky konečné viskozitě měnit (v tloušťce tzv. mezní vrstvy) spojitě. Proto také prosté dosazení příslušných veličin pro rozhraní voda-vzduch vede ke kritické rychlosti cca 6 m/s, ačkoli každodenní

181

V situaci, kdy supratekutá složka imituje rotaci pomocí mřížky kvantovaných vírů v nádobě téměř vymizí protiproud a spektrum tedy příliš neodlišuje od klidového spektra. V teplotní oblasti blízko poměrně blízko pod  $T_{\rm c}$ , kde byly zmiňované experimenty v Helsinkách provedeny, je dynamika pohybu kvantovaných vírů určena vnitřním třením ( $\alpha > 1$ ) a je proto možné kvantované víry generovat a detekovat prakticky po jednom a vytvořit např. vzorek, ve kterém supratekutá složka imituje rotaci jen částečně, prostřednictvím centrálního klastru kvantovaných vírů. Této situaci pak odpovídá spektrum NMR, jehož tvar je mezi oběma popsanými extrémy. Ačkoli tedy NMR nedetekuje kvantované zkušenost nám říká, že vodní hladina je zčeřena již při slabém vánku. Pokud by ovšem tekutiny byly čistě supratekuté, mohli bychom podmínku 6.80 experimentálně ověit.



Obr. 6.31: Experimentální uspořádání pro prověrku kritéria supratekuté Kelvinovy-Helmholtzovy nestability. Fáze B je ve spodní části válcové komůrky, neboť jejím proniknutí vzhůru brání přiložené magnetické pole B (v mT), které stabilizuje AB rozhraní. Existence dvou supratekutých fází <sup>3</sup>He takový experiment [43] umožnila. Jeho schéma - v rotačním uspořádání - je znázorněno na obr. 6.30 dole. Roli vracející gravitační síly zde však hraje síla magnetická, vznikající v přiloženém magnetickém poli intenzity *H* díky rozdílu magnetických susceptibilit fází A a B:

$$F_{\rm R} = \frac{1}{2} \left( \chi_{\rm A} - \chi_{\rm B} \right) \nabla(H^2) , \quad (6.81)$$

kde  $\chi_A$  a  $\chi_B$  jsou magnetické susceptibility obou fází.

V praxi experiment na rotační demagnetizační aparatuře ROTA v Helsinkách probíhal v křemenné experimentální komůrce s velmi hladkými stěnami (aby byla vyloučena možnost upínání vírů na nerovnostech) protáhlého válcového tvaru, zobrazené na obr. 6.31. Komůrka byla chazena odspodu pomocí jaderného demagnetizačního stupně. Při jejím ochlazování nejprve normální kapalné <sup>3</sup>He přejde so supratekutého stavu a při tlaku P > 21 bar fáze A zaplní celý experimentální objem. Při dalším snižování

teploty dojde ve spodní části komůrky k fázovému přechodu do fáze B, ale ta do horní části komůrky nepronikne díky bariéře vnějšího magnetického pole, která tak stabilizuje potřebné AB rozhraní. Pokusme se popsat co se stane, když aparaturu uvedeme do rotace při teplotě nepříliš hluboko pod $T_{\rm c}.$ 

V rámci dvousložkového modelu obě fáze sestávají ze supratekuté a normální složky. Normální složka A i B fáze je silně vazká tekutina, takže za všech okolností zůstává v klidu v souřadném systému spojeném s rotující komůrkou, tj rotují spolu s ní. Supratekuté složky ovšem při uvádění komůrky do rotace zůstanou v klidu až do dosažení příslušných kritických rychlostí rotace. Ve fázi A je kritická rychlost nízká, takže ji v dobrém přiblížení můžeme pro jednoduchost zanedbat a uvažovat rotující fázi A jako stav, kdy i její supratekutá složka imituje rotaci pomocí rovnovážného počtu (mřížky) dvakrát kvantovaných vírů. Ty však nemohou z topologických důvodů končit na rozhraní, ale těsně nad ním dochází k jejich ohybu směrem k válcové stěně nádoby, viz obr. 6.32 vlevo. Protože kritická rychlost pro intrinsický vznik kvantovaných vírů v <sup>3</sup>He-B je podstatně vyšší, zůstane spodní část komůrky v Landauově bezvírovém stavu. Supratekutá složka fáze A tedy proudí (tj. rotuje) po nehybné supratekuté složce fáze B.

Tento stav je potvrzen tvarem absorpčních spekter NMR. Ve fázi A (nahoře) je jasně patrný satelitní pík signalizující kvantované víry, kdežto tvar spektra NMR ve fázi B indikuje texturu vektoru  $\hat{n}$  ovlivněnou protiproudem normální a supratekuté složky. Tento stav se se zvyšováním úhlové rychlosti rotace kvalitativně nemění až do doby, kdy na obvodu nádoby přesáhne rychlost protiproudu kritickou pro Kelvinovu-Helmholtzovu nestabilitu. Rozhrani AB přestane být stabilní a zvlní se, což umožní průnik několika kvantovaným vírů do fáze B, viz obr. 6.32 vpravo. Tím se sníží rychlost protiproudu ve fázi B a rozhraní AB je opět stabilní. Při dalším zvyšování úhlové rychlosti otáčení však budeme periodicky překračovat podmínku pro nestabilitu a do fáze B budou pronikat další kvantované víry, což je zřejmé ze změny tvaru absorpčního spektra NMR.



Obr. 6.32: Supratekutá Kelvinova - Helmholtzova nestabilita na rozhraní mezi $^3{\rm He-A}$ a $^3{\rm He-B}$ v rotující válcové nádobě. Podrobnosti jsou uvedeny v textu.

AB rozhraní a průniku kvantovaných vírů do fáze B. Podmínku 6.80 je proto třeba

Můžeme na celou situaci uplatnit zobecněnou Kelvinovu podmínku 6.80, s vracející silou ve formě 6.81? Ukazuje se, že odpověď vyžaduje vzít do úvahy ještě rotující normální složku. Ta totiž vymezuje pouze jedinou vydělenou souřadnou soustavu, spojenou s rotující komůrkou, ve které je její rychlost nulová a problém tedy není Galileovsky invariantní, jak jsme mlčky předpokládali pro klasický případ.

Podmínku pro kritickou rychlost je v tomto případě názornější odvodit na základě stejné úvahy, kterou jsme v předchozí kapitole využili pro odvození Landauovy kritické rychlosti v rotující soustavě se musí volná energie stát zápornou. V případě He II to vedlo k excitaci fononů či rotonů, v tomto případě k nestabilitě

modifikovat na tvar

$$\frac{1}{2}\rho_{\rm sA}(v_{\rm A} - v_{\rm n})^2 + \frac{1}{2}\rho_{\rm sB}(v_{\rm B} - v_{\rm n})^2 = \sqrt{\sigma_{\rm AB}F_{\rm R}} .$$
(6.82)

Není těžké si ověřit (např. pro případ  $v_n = 0$ ) že tato podmínka vede ke kritické rychlosti, která je poloviční než v klasické případě. Dodejme, že všechny potřebné veličiny byly v experimentu [43] známy a bez jakýchkoli fitovacích parametrů byla nalezena dobrá shoda experimentálních dat s podmínkou 6.82.

## 6.14 Literatúra

- [1] L.P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP 37, 1754 (1959).
- [2] D.D. Osheroff, R.C. Richardson, D.M. Lee, Phys. Rev. Lett 28, 885 (1972); D.D. Osheroff et al., Phys. Rev. Lett 29, 920 (1972).
- [3] A. J. Leggett, Rev. Mod. Phys. 47, 331 (1975).
- [4] D. Vollhardt and P. Wölfle: The Superlfuid Phases of Helium 3, Taylor and Francis (1992).
- [5] E. R. Dobbs: Helium Three, Oxford Science Publications (2000).
- [6] I. A. Fomin, in Helium three, p. 609, edited by W. P. Halperin and L. P. Pitaevskii, Elsevier Science Publishers, Amsterdam (1990).
- [7] S.N. Fisher et al., Phys. Rev. Lett. 63, 2566 (1989).
- [8] R. Blaauwgeers et al., J. Low Temp. Phys. 146, 537 (2007).
- [9] Yu. M. Bunkov, in *Progress Low Temp. Physics* Vol. 14, p. 69., edited by W. P. Halperin (Elsevier Science Publisher, Amsterdam (1995).
- [10] A. S. Borovik Romanov et al., Sov. Phys. JETP 96, 956 (1989).
- [11] T. Ohmi et al., Jpn. J. Appl. Phys. 26, 169 (1990).
- [12] A. J. Leggett and S. Takagi, Ann. of Phys. 106, 79 (1976).
- [13] Yu. M. Bunkov et al., Phys. Rev. Lett. 65, 867 (1990).
- [14] A. V. Markelov, Europhys. Lett. **12**, 519 (1990).
- [15] Yu. M. Bunkov et al., Europhys. Lett. 8, 519 (1989).
- [16] Yu. M. Bunkov, private communication.
- [17] Yu. M. Bunkov et al., Phys. Rev. Lett. 69, 3092 (1992).
- [18] Yu. M. Bunkov et al., Phys. Rev. Lett. 68, 600 (1992).
- [19] Yu. M. Bunkov et al., Phys. Rev. Lett. 73, 1817 (1994).
- [20] I. A. Fomin, JETP Lett. 43, 171 (1986).
- [21] Yu. M. Bunkov et al., Physica B 178, 196 (1992).
- [22] D. J. Cousins et al., Phys. Rev. Lett. 82, 4484 (1999).
- [23] P. Schiffer et al., Prog. Low Temp. Phys., XIV, 159 (1995).
- [24] A. J. Leggett, J. Low Temp. Phys. 87, 571 (1992).
- [25] Yu. M. Bunkov, O.D. Timofeevskaya, Phys. Rev. Lett. 80, 4927 (1998).
- [26] E. Gažo et al., Phys. Rev. Lett. 91 055301 (2003).
- [27] S. N. Fisher and N. Suramlishvilli, J. Low Temp. Phys. 138, 771 (2005).

- [28] G. E. Volovik, J. Low Temp. Phys. 153, 266 (2008).
- [29] T. W. B. Kibble, J. Phys. A 9, 1387 (1976).
- [30] W. H. Zurek, Nature **317**, 505 (1985).
- [31] V.M.H. Ruutu et al., Nature 382, 334 (1996).
- [32] C. Bäuerle et al., Nature **382**, 322 (1996).
- [33] M. O'Keefe et al., Czech. J. Phys. 46, 163 (1996).
- [34] A. J. Leggett and S. K. Yip, in: Helium Three, W.P. Halperin and L.P. Pitaevskii (eds.), Elsevier Science Publisher B.V., (1990).
- [35] M. C. Cross, in: Quantum Fluids and Solids, S.B.Trickey et. al. (eds.), Plenum Press, New York, (1977).
- [36] H. Alles, J.P. Ruutu, A.V. Babkin, P.J. Hakonen, O.V. Lounasmaa, E.B. Sonin, *Phys. Rev. Lett.* 74, 2744 (1995).
- [37] Milne Thompson Theoretical Hydrodynamics, (1996).
- [38] L.D. Landau, E.M. Lifshic, Doklady Akad. Nauk 100, 669 (1955).
- [39] E.V. Thuneberg, *Physica B* **210**, 287 (1995).
- [40] N.D. Mermin, T.-L. Ho, Phys. Rev. Lett. 36, 594 (1976).
- [41] J.P. Pekola et al., Phys. Rev. Lett. 53, 584 (1984).
- [42] Lord Kelvin (Sir William Thomson), Hydrodynamics and General Dynamics, Mathematical and Physical Papers Vol. 4 Cambridge University Press, Cambridge, England, (1910).
- [43] R. Blaauwgeers, V. B. Eltsov, G. Eska, A. P. Finne, R. P. Haley, M. Krusius, J. J. Ruohio, L. Skrbek, G. E. Volovik, *Phys. Rev. Lett.* 89, 155301 (2002).

# 7 Kvantová kavitace a kvantové vypařování

## L. SKRBEK

V této kapitole se budeme zabývat fázovým přechodem helia kapalina-plyn. Pojem kavitace obecně znamená vznik bublin plynné fáze uvnitř kapaliny. Díky tomu, že fázový přechod mezi kapalinou a plynem je fázovým přechodem prvního druhu, může kapalina po časově omezenou dobu existovat v metastabilním stavu vně oblasti stability dané rovnovážným fázovým diagramem. Je známo, že kapaliny mohou existovat dokonce v oblasti záporných tlaků.

Záporný tlak není nic jiného než kladné napětí. Představme si gumovou kuličku ve válci s kapalinou uzavřenou pístem, jak je znázorněno na obr. 7.1. Zatlačíme-li na píst, zvýšíme tlak a kulička se jeho půso-



Obr. 7.1: K definici záporného tlaku.

bením smrští, naopak zatáhneme-li za něj, kulička se působením kladného napětí (tj. záporného tlaku) roztáhne, ovšem pokud nedojde ke kavitaci, tj. vzniku plynné fáze uvnitř válce.

Nejběžnější kapalina - voda - může za speciálních příznivých podmínek existovat v kapalném stavu až do tlaku -1400 barů. Je tomu tak proto, že ke vzniku stabilnější plynné fáze je třeba vytvořit zárodečnou bublinu a tudíž fázové rozhraní, které má konečnou povrchovou energii a jejíž vznik vyžaduje překonání energetické bariéry. V běžných kapalinách je nukleace bublin ve značné míře ovlivněna přítomností nejrůznějších příměsí, nečistot či rozpuštěných plynů - tyto faktory kavitaci silně napomáhají, takže probíhá relativně snadno a mluvíme o tzv. heterogenní kavitaci. Homogenní kavitace nastává v čistém systému jako jeho intrinsická vlastnost.

Vznik bublin uvnitř kapaliny nazýváme varem, pokud plynná fáze vzniká díky změně teploty, o kavitaci mluvíme tehdy, pokud k nukleaci bublin dochází vlivem změny tlaku. Oba tyto procesy však spolu úzce souvisejí, ve většině případů probíhají souběžně a jak ukážeme níže, v kapalném heliu je většinou potřebné diskutovat je společně. Plynná fáze též vzniká odpařováním kapaliny z jejího volného povrchu. V supratekutém <sup>4</sup>He však existuje také tzv. kvantové vypařování (angl. *quantum evaporation*), kdy jsou atomy z povrchu kapaliny vyráženy dostatečně energetickými balistickými excitacemi – fonony a rotony.

## 7.1 Standardní teoretický popis kavitace

Kavitaci v klasické kapalině lze poměrně dobře pop<br/>sat pomocí tzv. standardního modelu. Vyjádřeme volnou energii kulové bubliny o poloměr<br/>uRv metastabilní kapalině:

$$F(R) = 4\pi R^2 \sigma - \frac{4}{3}\pi R^3 \Delta G , \qquad (7.1)$$



Obr. 7.2: Volná energie bublinky v kapalném  ${}^{4}\text{He}$  pro dvě hodnoty záporného tlaku.

Na obr. 7.2 je vynesena

volná energie bublinky plynného <sup>4</sup>He v kapalném <sup>4</sup>He, jejíž maximum tvoří energetickou bariéru pro kavitaci. Jestliže se díky fluktuacím vytvoří zárodečná bublinka o poloměru menším než  $R_{\rm c}$ , bude mít tendenci zaniknout. Naopak větší bublinka poroste a vytvoří se z ní makroskopický objem plynné fáze.

V rámci tzv. standardní teorie nukleace vyjádříme nukleační rychlost (angl. *nucleation rate*) v jednotkovém objemu za jednotku času jako

$$\Gamma = \Gamma_0 \exp\left\{-\frac{F}{k_{\rm B}T}\right\} \,, \tag{7.2}$$

kde součinitel  $\Gamma_0$  je součinem frekvence pokusů (angl. *attempt frequency*) a hustoty nezávislých stavů (angl. *density of independent states*)<sup>1</sup>. Počítáme tedy, v kolika nezávislých místech a s jakou frekvencí se systém o nukleaci pokouší.

Můžeme nyní zapsat, s jakou pravděpodobností k nukle<br/>aci dojde v systému o objemu Vza ča<br/>s $\tau:$ 

$$\Sigma = 1 - \exp\left[-\Gamma_0 V \tau \exp\left\{-\frac{F}{k_{\rm B}T}\right\}\right],\tag{7.3}$$

protože je to jedna minus pravděpodobnost, že ke kavitaci nedojde, která je sama o sobě exponenciálně závislá na V a  $\tau$ . Vidíme, že pravděpodobnost kavitace tak exponenciálně závisí na vzdálenosti od rovnovážného stavu a v úzkém intervalu tlaku nebo teploty se rychle mění od téměř nuly po téměř jednotku. Můžeme tak definovat kavitační práh (angl. *cavitation threshold*), kdy pravděpodobnost kavitace

kde  $\sigma$  je povrchové napětí a  $\Delta G$  značí rozdíl Gibbsovy volné energie objemové jednotky mezi kapalnou a plynnou fází. Volná energie nabývá své maximální hodnoty  $F_{\rm max} = 16\pi\sigma^3/(3\Delta G^2)$ při kritickém poloměru  $R_{\rm c} = 2\sigma/\Delta G$ . Za předpokladu, že bublinka je v rovnovážném stavu se svým okolím můžeme psát G = (1 - $(\rho_{\rm v}/\rho_{\rm l})(p_{\rm eq}-p_{\rm l})$ , kde  $\rho_{\rm v}$  je hustota plynu a  $p_{\rm eq}$  je rovnovážný tlak a  $p_{\rm l}$  je tlak v kapalině. S výjimkou blízkosti kritického bodu se lze obvykle omezit na  $\Delta G = |p_{\rm l}|.$ 

 $<sup>^1 {\</sup>rm Teoretický}$ výpočet součinitele $\Gamma_0$  je obtížný a vychází za rámec této kapitoly, proto odkazujeme na literaturu [1].

dosahuje 1/2 (tímto kavitačním prahem může být např. kritický tlak nebo kritická teplota). Lze ukázat, že absolutní veličina záporného kavitačního tlaku (odpovídající kavitačnímu prahu) v tomto standardním modelu se snižující se teplotou neomezeně roste jako  $p_{\rm cav} \propto \sqrt{1/T}$ . Jinými slovy to znamená, že by v limitě absolutní nuly nemělo v kapalném heliu ke kavitaci vůbec docházet a kvantové kapaliny – jak <sup>4</sup>He tak i <sup>3</sup>He – by měly zůstat v metastabilním kapalném stavu i při aplikaci libovolně vysokých záporných tlaků. Ukážeme později, že tento závěr není platný, neboť při velmi nízkých teplotách se dominantním mechanismem stane ne teplotně aktivovaná, ale tzv. kvantová kavitace.

#### 7.2 Stavová rovnice a spinodální limit

Podobně jako pevnou látku, ani kapalinu nelze neomezeně roztáhnout, aniž by došlo k její destrukci. Mluvíme o spinodálním limitu, jehož existence je patrná již z van der Waalsovy stavové rovnice pro tekutiny, která je dobře popisuje v okolí kritického bodu ( $p_c = a/27b^2$ ;  $k_BT_c = 8a/27b; V_c = 3Nb$ ):

$$\left(p+a\frac{N^2}{V^2}\right)(V-bN) = Nk_{\rm B}T .$$
(7.4)

Zde *a* popisuje přitažlivou interekci mezi částicemi tekutiny a *bN* je objem, do kterého lze vtěstnat všechny částice. Normalizujeme-li teplotu, tlak a hustotu  $\rho = 1/V$  jejich hodnotami v kritickém bodě, dostaneme Van der Waalsovu rovnici v bezrozměrném tvaru:  $\tilde{p} = 8\tilde{T}\tilde{\rho}/(3-\tilde{\rho}) - 3\tilde{\rho}^2$ .



Obr. 7.3: Van der Waalsovy izotermy v okolí kritického bodu tekutiny. Na spinodální čáře (čárkovaně) je stlačitelnost  $d\rho/dp$  nekonečně velká.

okolí kriizotermy v tického bodu tekutiny jsou pro různé hodnoty teploty znázorněny na obr. 7.3. Vidíme, že každá má jedno lokální maximum a jedno lokální minimum, které  $T_{\rm c}$  splýpři T= vají do jednoho inflexního bodu. V těchto extrémech, nazývaných spinodální body, je stlačitelnost  $d\rho/dp$  nekonečně velká. Znamená to, že pokud "roztáhneme" kapalinu tak silně, že její hustota dosáhne (pravého) spinodálního limitu, stane se nestabilní

Van der Waalsovy

a dojde k její přeměně na plyn. Symetricky, plynnou fázi nelze stlačit více než povoluje levý spinodální limit. Spinodální body  $p_{\rm sp}(T)$  obecně tvoří dvě křivky na fázovém diagramu. Protože se v této kapitole zajímáme o kavitaci, na fázových diagramech helia uvádíme pouze jednu, která odpovídá přechodu kapalina – plyn.

Protože stlačitelnost ve spinodálním bodu je nekonečně velká, je zde rychlost zvuku, úměrná odmocnině z  $dp/d\rho$ , nulová. Teoreticky lze ukázat [2], že rychlost zvuku v blízkosti spinodálního tlaku by měla být úměrná  $c \propto (p - p_{\rm sp})^{1/3}$  a experimentální data [3] to potvrzují. Tato experimentální data vedou ke stavové rovnici pro <sup>4</sup>He ve tvaru

$$p - p_{\rm sp} = \frac{b^2}{27} \ (\rho - \rho_{\rm sp})^3 \ , \tag{7.5}$$

kde $b=1,4030\times 10^6~{\rm g}^{-1}{\rm cm}^4{\rm s}^{-1},~p_{\rm sp}=-9,6435$ bar <br/>a $\rho_{\rm sp}=0,094175~{\rm g\,cm}^{-3}.$ Stavovou rovnice v tomto tvaru byla odvozena i pomocí metody funkcionálu hustoty a simulacemi typu Monte Carlo.

Protože stlačitelnost na spinodální křivce diverguje, mizí potenciální bariéra, kterou jsme zavedli na začátku této kapitoly a kapalina je nestabilní. Mluvíme o spinodální dekompozici kapaliny s fraktální strukturou. Experimentálně však tento případ nenastává, protože pracujeme s konečným objemem kapaliny, teplota není rovna absolutní nule a nemůžeme snížit tlak na hodnotu  $p_{\rm sp}(T)$  skokem. Teplotní fluktuace způsobí vznik zárodečné bublinky nadkritického průměru dojde ke vzniku stabilní plynné fáze. Existence spinodální křivky je však velmi důležitá, protože již při přiblížení k ní dojde k výraznému potlačení energetické bariéry a podstatnému nárůstu pravděpodobnosti kavitace.

#### 7.3 Experimentální studium kavitace v kapalném heliu

Protože kapalné helium, jak <sup>4</sup>He tak i <sup>3</sup>He, lze připravit jako velmi čisté kapaliny (všechny příměsi vymrznou a je možné je jednoduše odfiltrovat), které navíc velmi dobře smáčí pevné povrchy, slouži kapalné helium jako ideální modelová kapalina pro studium kavitace. Proto bylo za posledních zhruba 50 let provedeno značné množství experimentů s cílem vyjasnit zákonitosti klasické a kvantové kavitace. V této krátké kapitole není možné věnovat se podrobnému přehledu všech provedených experimentů, jejichž popis a odkazy na originální literaturu čtenář nalezne v přehledovém článku Balibara [1].

Zmiňme se krátce o tom, že ke studiu kavitace v kapalném <sup>4</sup>He byly úspěšně používány piezoelektrické materiály. Příkladem je použití dvou válcových "tablet" o průměru přes 1 cm vyrobených z piezoelektrické keramiky Clevite PZT-4, umístěných v lázni kapalného helia rovnoběžně 4,5 cm od sebe. Na jejich plochých stěnách byly naprášeny kovové elektrody. Na elektrody jedné z nich byl přiváděn budící signál o frekvenci 91,5 kHz jehož účinkem díky piezoelektrickému jevu tableta kmitala a sloužila jako vysílač, druhá tableta sloužila jako přijímač. Kavitace byla detekována prostřednictvím akustické emise (projevující se jako šum), vznikající při kolapsu bublin plynného He, které vznikají v kmitnách stojaté zvukové vlny díky konstruktivní akustické interferenci v rezonátoru tvořeném prostorem mezi tabletami. Při vyšším budícím signálu bylo možné vznikající bublinky pozorovat i

vizuálně. Autoři práce[4] proto dokonce rozlišují dva kavitační prahy – akustický a optický.



Obr. 7.4: Fotografie hodinového krystalu kmitajícího v kapalném <sup>4</sup>He. Na levém obrázku je jasně patrná kavitační bublinka, vzniklá při T = 2,14 K při překročení kavitačního prahu [5].

palného helia. Díky Bernoulliho rovnici dojde v místech nejintenzívnějšího proudění k výraznému lokálnímu snížení tlaku (v supratekuté fázi lze takto snadno vytvořit záporný tlak) a následnému vzniku kavitace. Dodejme ještě, že kavitaci je možné registrovat nejenom opticky (optické pozorování je poměrně složité a vyžaduje splnění speciálních experimentálních podmínek), ale i poměrně jednoduše elektricky, protože vznik kavitace významně ovlivní elektrickou odezvu ladičky.



Obr. 7.5: Sférický piezoelektrický vysílač akustických vln pro studium kvantové kavitace.

nové délce  $\lambda$ směrem do svého středu, kde v objemu řádu  $(\lambda/2)^3$ dochází k silným pulsacím tlaku a lze snadno dosáhnout záporných tlaků řádu -10 barů potřebných ke stimulaci kavitace. Detekce je prováděna pomocí laserového paprsku, který je v případě vzniku bubliny rozptýlen, takže kavitační procesy je možné spolehlivě

190

Jako názorný příklad kavitace v He II těsně pod teplotou přechodu do supratekutého stavu uvádíme fotografii kavitační bublinky, vznikající v mezeře kmitající piezoelektrické ladičky – hodinového krystalu [5]. Nohy ladičky mohou kmitat na frekvenci 32 kHz velkou rvchlostí řádově m/s a vyvolávají proudění okolního ka-

Uvedené experimenty jsou příkladem heterogenní kavitace v kapalném heliu. I když tento typ kavitace v přírodě výrazně převažuje, z fyzikálního hlediska je nejzajímavější studium homogenní kavitace, neovlivněné přítomností stěn či příměsemi. Proto bylo třeba vyvinout techniku, kdy je kavitace vyvolána daleko od stěn a v malém objemu izotopicky čistého <sup>4</sup>He. Zatím nejúspěšnější se jeví použití piezoelektrického vysílače akustických vln ve tvaru duté polokoule, znázorněného na obr. 7.5. Vlivem rf střídavého signálu se periodicky smršťuje a vysílá akustickou vlnu o vlmonitorovat.

Kavitační data získaná v popsaných experimentech jsou znázorněna spolu s teoretickými křivkami na obr. 7.6. Všimněme si nejprve spodní části obrázku, kde je vynesen kavitační tlak (pravá svislá osa) vypočítaný z Bernoulliho rovnice na základě experimentů s kmitající piezoelektrickou ladičkou. Vidíme, že v supratekutém He II kavitace nastává při záporných tlacích, avšak v normálním kapalném He I jde o kladný tlak, jen nepatrně menší než je rovnovážný tlak na stavovém diagramu helia. Skok nastává těsně pod supratekutým přechodem a je způsobem rozdílem v efektivitě tepelného přenosu v normální a supratekuté kapalině. V prvním přiblížení supratekuté helium v podstatě nelze přehřát, takže zde dochází k izotermické heterogenní kavitaci, ovlivněné přítomností "stěny", tj křemenné ladičky. Ve špatně vodivém normálním kapalném He I dochází díky odporu prostředí ke znatelnému přehřátí okolí kmitajícího krystalu a kavitace probíhá za značně vyšší teploty než je měřena v objemu heliové vany.



Obr. 7.6: Kavitační data získaná v experimentech spolu s teoretickými křivkami.

Věnujme se nyní horní části obr. 7.6, které přísluší levá svislá osa. Plná čára je rovnovážná křivka nasycených par, jak ji známe z běžného fázového diagramu. Oblast mezi ní a experimentálními body různých autorů je oblastí, kde kapalné <sup>4</sup>He existuje v metastabilním stavu. Čárkovaně je vyznačena předpověď standardního teoretického modelu kavitace, jak jsme jej popsali v úvodu této kapitoly. Vidíme, že velmi dobře odpovídá experimentu v oblasti vyšších teplot, kde lze kavitaci považovat za klasickou, tj. tepelně generovanou, ale při velmi nízkých teplotách pod 1 K se významně odchyluje od experimentu a v li-

mitě nulové teploty naprosto selhává. Je tomu tak proto, že tepelná energie  $k_{\rm B}T$  se snižující se teplotou klesá a její roli přejímá kvantově mechanická energie nulových kmitů. Ta na teplotě nezávisí, proto je i kavitační tlak při nízkých teplotách teplotně nezávislý. Teoretická spinodální čára vypočítaná z teorie funkcionálu hustoty je čerchovaně. Jak jsme se již zmínili, při spinodálním tlaku musí nutně dojít k "destrukci" kapaliny, i kdybychom jej dosáhli skokově. Ve skutečnosti tomu tak nikdy není, takže ke kavitaci dojde dříve (mechanismus jsme popsali na začátku kapitoly), teoreticky na kavitační křivce, která je znázorněna tečkovaně.

Rovnovážný fázový diagram z kapitoly o supratekutém He II je tedy možné

rozšířit i o oblast záporných tlaků. Ačkoli ještě není vymezen s velkou přesností, lze jeho tvar odhadnout zhruba tak, jak je znázorněno na obr. 7.7. Oblast režimu čistě kvantové kavitace při záporných tlacích je zakroužkována. Není dosud zcela zřejmé, kudy přesně v oblasti záporných tlaků probíhá  $\lambda$  - čára, je zakreslena pouze odhadem za předpokladu, že kritická teplota pro přechod do supratekutého stavu na tlaku závisí jen nevýrazně.



Obr. 7.7: Fázový diagram <sup>4</sup>He rozšířený o oblast záporných tlaků.

Řadou kružnic je v oblasti záporných tlaků naznačena čára exploze elektronových bublin (angl. line of electron bubble explosion) - negativních iontů, které dikutujeme v samostané kapitole 8. Protože tyto elektronové bubliny s přispěním kvantového tlaku elektronu v důsledku Pauliho vylučovacího principu jsou již samy o sobě zárodky kavitačních bublin, dochází ke kavitaci (tj. "explozi" bublin) již za výrazně nižší absolutní hodnoty záporného tlaku.

Pro úplnost ještě uveďme, že podobné kavitační experimenty byly prováděny i s kapalným <sup>3</sup>He. Výsledky jsou kvalitativně podobné [1] a v limitě velmi nízkých teplot zde ke kvantové kavitaci dochází rovněž (za zhruba třikrát nižší čí-

selné hodnoty kavitačního prahu kolem -3,1 bar), ačkoli tyto experimenty byly provedeny při teplotách, kdy <sup>3</sup>He není supratekuté - supratekutost není podmínkou existence kvantové kavitace.

## 7.4 Kvantové vypařování

Kvantové vypařování je analogií známého vnějšího fotoelektrického jevu, kdy jsou z pevné látky (nejčastěji z kovu) emitovány elektrony v důsledku absorpce elektromagnetického záření. Tento jev vysvětlil Einstein, který napsal rovnici fotoelektrického jevu ve tvaru

$$\hbar\omega = \hbar\omega_0 + E_{\max} \,, \tag{7.6}$$

kde  $E = \hbar \omega$  je energie kvanta dopadajícího elektromagnetického záření,  $E_0 = \hbar \omega_0$  je výstupní práce potřebná k uvolnění elektronu z látky a  $E_{\text{max}}$  je maximální možná energie uvolněného elektronu.

Uvažujme nyní supratekuté <sup>4</sup>He při velmi nízkých teplotách hluboko pod 1 K. Budeme-li excitovat (např. pomocí tepelného pulsu) kvazičástice - tj. fonony a rotony, budou se při těchto nízkých teplotách pohybovat balisticky, protože pravděpodobnost kolize s jinou kvazičásticí je velmi malá. Balistické fonony a rotony tedy můžeme považovat podobně jako fotony v kovu za energetická kvanta, která v případě, že jejich energie je dostatečně velká, mohou vyrazit heliový atom z povrchu kapaliny. Roli výstupní práce elektronu v kovu zde hraje známá hodnota



vazební energie (angl. binding energy) heliového atomu v kapalině  $E_{\rm B} = 7,61$  K. Jestliže se tedy dostatečně energetický fonon nebo roton pohybuje balisticky směrem k hladině supratekutého helia, může anihilovat a vyrazit jeden heliový atom do prostoru nad kapalinou. Rovnici (7.6) lze přepsat ve tvaru

$$\hbar\omega = E_{\rm B} + \frac{1}{2}m_{\rm He}v^2$$
, (7.7)

kde  $m_{\text{He}}$  a v je hmotnost a rychlost vyraženého heliového atomu. Kvantové vypařování teoreticky předpověděl v roce 1969 Anderson [25] a experi-2 [7] a Wyatta [8]

Obr. 7.8: Disperzní relace pro fonony, P, a rotony  $R^-$  a  $R^+$ . Jsou naznačeny typické úhly pro kvantové vypařování.

mentálně se mu věnovaly zejména skupiny Balibara [7] a Wyatta [8].

Jako velmi průkazné potvrzení platnosti rovnice (7.7) lze považovat zejména experimenty s rotony. Protože hodnota energetické mezery pro rotony je  $\Delta = 8,65$  K, po odečtení vazebné energie  $E_{\rm B}$  dostaneme kinetickou energii emitovaného heliového atomu 1,5 K, čemuž odpovídá rychlost 79 m/s. Všechny atomy vyražené rotony tedy musejí mít nejméně tuto rychlost, protože jsme uvažovali roton odpovídající lokálnímu minimu na disperzní relaci.

Jestliže excitace (fonon nebo roton) dopadá kolmo k hladině, bude i atom z hladiny vyražen kolmo k ní. Dopadá-li však excitace na hladinu pod určitým úhlem, musí být zachována podélná hybnost, tedy musí platit  $q_{\parallel} = k_{\parallel}$ , kde  $q_{\parallel}$  je podélná složka vlnového vektoru excitace a  $k_{\parallel}$  vyraženého atomu. Ze zákonů zachování energie a hybnosti pak jednoduše plyne, že pro danou energii rotonů R<sup>-</sup> a R<sup>+</sup> odpovídajícím pozici na disperzní relaci vlevo a vpravo od lokálního minima (viz obr. 7.8) existuje mezní úhel, při jehož překročení kvantové vypařování nenastane a dojde k úplnému vnitřnímu odrazu. Úhel, pod kterým emitovaný heliový atom vyletí, lze experimentálně zjistit směrově citlivým bolometrem. Rychlost emitovaného atomu nelze určit přímo, ale lze měřit časové rozpětí  $\Delta t$  od tepelného pulsu k registraci vyraženého atomu bolometrem, které sestává ze dvou složek:

$$\Delta t = \frac{L_{\rm in}}{v_{\rm g}} + \frac{L_{\rm out}}{v}, \qquad (7.8)$$

1	9	3
-	~	~

kde  $L_{\rm in}$  je dráha ecitace uvnitř kapaliny k hladině,  $L_{\rm out}$  je dráha vyraženého atomu od hladiny k bolometru a  $v_{\rm g}$  je grupová rychlost excitace, kterou lze určit z disperzní relace na obr. 7.8.

Kvantové vypařování, prokázané celou řadou experimentů, otevřelo možnost detekovat vysokoenergetické excitace v kapalném heliu. Ukázalo se také, že rotony typu R<sup>-</sup> mohou vznikat kondenzací heliových atomů na hladině, což je opačný proces vzhledem ke kvantovému vypařování. Hladina He byla bombardována svazkem He atomů o vhodné energii, od ní se dovnitř kapaliny šířily rotony typu R<sup>-</sup>, odrážely se uvnitř kapaliny od povrchu vhodného krystalu zpět k hladině, kde vyrážely heliové atomy následně detekované bolometrem. Ukázalo se, že při velmi nízkých teplotách v dostatečně čistém vzorku supratekutého helia se mohou vysokoenergetické fonony a rotony pohybovat balisticky na velké vzdálenosti - v popsaných experimentech jde o vzdálenosti řádově cm - a jsou tudíž velmi stabilní.

## 7.5 Literatura

- [1] S. Balibar, J. Low Temp. Phys. 129, 363 (2002).
- [2] H.J. Marees, Phys. Rev. Lett. 66, 45 (1991).
- [3] F. Coupin, S. Balibar, Phys. Rev. B 64, 064507 (2001).
- [4] R.D. Finch and T.G.J. Wang, J. Acoust. Soc. Am. **39**, 511 (1966).
- [5] M. Blazkova, D. Schmoranzer, L. Skrbek, Low Temp. Phys. 34, 380 (2008).
- [6] P.W. Anderson, Phys. Lett. A 29, 563 (1969).
- [7] S. Balibar et al, Phys. Rev. B 18, 3096 (1978).
- [8] A.F.G. Wyatt, Physica B 169, 130 (1991).

# 8 lonty v supratekutém heliu

## L. SKRBEK

V kapalném heliu (jak v <sup>4</sup>He, tak i v <sup>3</sup>He či směsích <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He) mohou existovat elektricky kladně i záporně nabité částice s poměrně komplexní strukturou, které jednoduše nazýváme kladné a záporné ionty. Oba typy iontů lze v kapalném heliu vytvořit přivedením vysokého napětí řádu 1000 voltů příslušné porarity na velmi ostrý wolframový hrot, případně lze použít vhodný radioaktivní  $\beta$  – zářič. Ionty lze velmi dobře využít ke studiu fyzikálních vlastností kvantových kapalin - zejména excitací v nich – rotonů, fononů či kvantovaných vírů, ale díky možnosti jejich dvojrozměrné lokalizace a Coulombově interakci mezi nimi i ke studiu kolektivních jevů jako dvojrozměrná krystalizace. V této kapitole se seznámíme s jejich strukturou a některými aplikacemi.

#### 8.1 Struktura iontů

Záporný ion je v podstatě bublinka v kapalném heliu, v níž je lokalizován volný elektron. Interakce elektronu s povrchem helia je na velkých vzdálenostech díky polarizaci helia přitažlivá, avšak na krátkých vzdálenostech díky Pauliho vylučovacímu principu odpudivá. Vlnová funkce elektronu je proto v kapalině lokalizována v prázdné bublině o poloměru  $R_-$ , který lze určit pomocí zjednodušeného kontinuálního modelu, vyvinutého Carerim [1]. Předpokládáme, že bublina je prázdná (tj.  $\rho = 0$  pro  $r < R_-$ ), má nekonečně tenkou stěnu o povrchovém napětí  $\sigma$  a hustota helia  $\rho$  se nemění ani v jejím bezprostředním okolí. V tomto kontinuálním přiblížení můžeme napsat energii systému jako [2]

$$E_{-} = E_{\rm e}(R_{-}) + 4\pi\sigma R_{-}^2 + \frac{4}{3}\pi p R_{-}^3 - \frac{(\epsilon - 1)e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon R_{-}} \,. \tag{8.1}$$

 $E_{\rm e}(R_-)$ je energie lokalizovaného elektronu, člen $4\pi\sigma R_-^2$ je povrchová energie, člen $\frac{4}{3}\pi pR_-^3$ je objemová energie, kdepznačí tlak, tj. energii objemové jednotky kapaliny a poslední člen, kde $\epsilon_0$ značí permitivitu vakua a $\epsilon$ relativní permitivitu helia je energie elektrostrikce. Tento člen je malý a můžeme jej v prvním přiblížení zanedbat. Energii lokalizovaného elektronu  $E_e=\hbar^2\pi^2/(2m_{\rm e}R_-^2)$ lze získat na základě představy, že elektron se nachází v nekonečně hluboké potenciální jámě, takže jeho vlnová funkce při $r=R_-$ nabývá nulové hodnoty. Poloměr bubliny - záporného iontu -  $R_-$ získáme minimalizací výrazu (8.1). Pro $^4{\rm He}$ při nulovém tlaku je $R_-\simeq 1,9$ nm, se zvyšujícím se tlakem poloměr iontu klesá až do 1,25 nm. Hmotnost záporného iontu je v podstatě pouze přidaná hydrodynamická hmotnost koule, tedy polovina vytěsněného množství kapaliny:  $m_-^*=2\pi\rho R_-^3/3$ , protože hmotnost samotného elektronu  $m_{\rm e}$  je zanedbatelně malá.

Teoretický model kladného iontu, tzv. model sněhové koule, navrhl Atkins [3]. Odtrhneme-li atomu helia elektron, vznikne kladný molekulární ion  $\binom{4}{2}$ He)<sup>+</sup><sub>2</sub>, který

polarizuje své okolí. V jeho bezprostřední blízkosti působí na atomy helia silné nehomogenní elektrické pole, takže okolní atomy jsou k iontu přitahovány. Výsledkem této elektrostrikce je výrazné zvýšení tlaku v jeho okolí, který v oblasti zhruba do 0,6 nm převyšuje krystalizační tlak a kladný ion si lze představit jako sněhovou kouli pevného helia s elektrickým nábojem +e a efektivní hmotností zhruba 30  $m_{\rm He}$  v limitě velmi nízkých teplot. Efektivní hmotnost kladného iontu je součtem hmotností atomů helia ve sněhové kouli a přidané hydrodynamické hmotnosti (jako tomu bylo u záporného iontu) a s teplotou rychle roste (kolem 40  $m_{\rm He}$  při 400 mK).



Obr. 8.1: Schéma válcové experimentální komůrky do poloviny zaplněné supratekutým heliem pro studium dvojrozměrných iontových systémů. Písmeny A, B, C a D jsou označeny pozlacené měděné elektrody, na něž je přiváděno stenosměrné napětí pro stabilizaci 2D systému a střídavý signál pro excitaci kmitavých módů systému.

V případě <sup>3</sup>He a směsí <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He jsou kladné i záporné ionty svou strukturou analogické a liší se v podstatě jen kvantitativně, svými poloměry a efektivními hmotnostmi, především díky rozdílným hodnotám povrchového napětí a hustoty.

Experimentální i teoretické studium detailní struktury obou typů iontů bylo prováděno mnoha autory v rozmezí několika desetiletí a nelze je považovat za uzavřené. Např. teplotní závislost efektivní hmotnosti kladného iontu dosud není uspokojivě teoreticky vysvětlena. Pro naše potřeby však postačí, budeme-li si oba typy iontů představovat jako pevné nabité koule o určité efektivní hmotnosti a poloměru. Budeme se

nejprve zabývat i<br/>onty ve vztahu k $^4\mathrm{He},$ na konci kapitoly se zminíme o jejich aplikacích pro<br/> výzkum $^3\mathrm{He}.$ 

## 8.2 Lokalizace nabitých částic u hladiny He

Díky extrémně vysoké konvektivní tepelné vodivosti nedochází v He II k bublinovému varu a odpařuje se pouze z povrchu, který tak vytváří (při zanedbání kapilárních jevů s atomární přesností) téměř ideálně vodorovnou rovinu. Při teplotách pod 1 K je tlak nasycených par nad He II velmi nízký a hladinu tak můžeme uvažovat jako rozhraní dvou prostředí – helia s relativní permitivitou  $\epsilon_{\rm He} = 1,057$  a vakua s  $\epsilon_{\rm vac} = 1$ . Nachází-li se v blízkosti rozhraní elektricky nabitá částice, bude

ze strany vakua k rozhraní přitahována, naopak kladně nebo záporně nabitý ion bude v heliu od rozhraní odpuzován. Tuto elektrostatickou úlohu lze elegantně řešit zavedením pomocného, tzv. zrcadlového náboje (angl. *image charge*) na opačné straně rozhraní, jehož znaménko a velikost je vybrána tak, že na částici silově působí právě tak jako rozhraní dvou poloprostorů s různou permitivitou. Elektron ze strany vakua bude tedy k hladině přitahován, ale díky Pauliho principu a existenci potenciální bariéry kolem 1 eV pod ní nemůže proniknout a bude tak ve svislém směru lokalizován těsně nad ní (ve vzdálenosti do 100 Å) - může se ale volně pohybovat ve vodorovném směru.

Pro ionty pod hladinou je situace odlišná. Přiložíme-li vnější elekrické pole  $E = E_0 z$  vhodné polarity, bude jím ion tlačen směrem k hladině, přičemž oba typy iontů budou zrcadlovým nábojem od hladiny odpuzovány směrem dolů. Vznikne tak potenciální jáma tvaru

$$V(z) = eE_0 z + \frac{(\epsilon_{\rm He} - 1)e^2}{16\pi\epsilon_0\epsilon_{\rm He}(\epsilon_{\rm He} + 1)z}, \qquad (8.2)$$

kdezznačí hloubku pod povrchem. I<br/>onty tak budou lokalizovány na úrovni potenciálního minima v hloubce

$$z_0^2 = \frac{(\epsilon_{\rm He} - 1)e}{16\pi\epsilon_0\epsilon_{\rm He}(\epsilon_{\rm He} + 1)zE_0} .$$

$$(8.3)$$

Pro typickou experimentální hodnotu  $E_0 = 5 \text{ kV/m}$  je  $z_0 = 43 \text{ nm}$ . Stejně jaky elektrony nad hladinou, ionty lokalizované pod hladinou He II se mohou volně pohybovat rovnoběžně s povrchem. Jejich pohyb do stran je možné omezit pomocí horizontálního elektrického pole, vytvořeného např. přivedením vhodného napětí na kruhovou elektrodu experimentální komůrky (viz obr. 8.1) válcového tvaru, do poloviny výšky zaplněné kapalným He II. V ní je možné vytvořit (typicky kruhový) dvojrozměrný elektronový nebo iontový systém, jehož plošná hustota  $n_0$  je v dobrém přiblížení konstantní.

Detekce takových systémů je prováděna bezkontaktně. Statickou detekci je možné provádět měřením kapacity mezi dnem a víkem komůrky, která se vlivem přítomnosti nabitých částic mění. Daleko efektivnější je však dynamická detekce. Na nějakou z elektrod se přivede kromě statického ještě harmonický signál, který excituje plazmatické oscilace systému. Proud, který je indukován na vnitřní elektrodě víka (obr. 8.1) horizontálně se pohybujícími náboji se detekuje pomocí fázově citlivého zesilovače.

Pro horizontální plazmatické oscilace lze v přítomnosti vnějšího vertikálního magnetického pole o indukci B odvodit disperzní vztah mezi úhlovou frekvencí  $\omega$  a vlnovým vektorem k [4]:

$$\omega^2 = \omega_c^2 + \frac{n_0 e^2 k F(k)}{2\epsilon_0 m_{\text{eff}}} , \qquad (8.4)$$

kde  $\omega_c = eB/m_{\text{eff}}$  je cyklotronová frekvence,  $m_{\text{eff}}$  je efektivní hmotnost nositelů náboje a funkce F(k) závisí na geometrii komůrky: je-li válcová komůrka o výšce

2dzaplněna heliem do poloviny výšky, platí  $F(k)= {\rm th}(kd/2).$ Normální módy jsou dány okrajovými podmínkami - v dobrém přiblížení platí, že radiální složka rychlosti pohybu částic na okraji systému musí být nulová. Pro kruhový systém o poloměru Rlze tuto podmínku matematicky vyjádřit jako

$$\omega - \omega_{\rm c} m J_{\rm m}(kR) - \omega k R J_{\rm m+1}(kR) = 0 , \qquad (8.5)$$

kde  $J_{\rm m}(kR)$  je Besselova funkce. Pro B = 0 lze podmínku (8.5) zjednodušit na tvar  $dJ_{\rm m}(kR)/dr \mid_{\rm r=R} = 0$ , odkud plyne, že módy  $(\pm m, n)$  jsou degenerované. Lze nahlédnout, že funkce popisující profil excitované iontové hustoty mají kromě nulové hodnoty na okraji ještě m - 1 nul v radiálním směru uvnitř systému a n maxim ve směru po obvodu systému. Základní plazmatický mód kruhového systému si tedy lze představit jako osově souměrnou stojatou vlnu nábojové hustoty, jejíž profil je dán Besselovou funkcí  $J_0$ .



Obr. 8.2: Rezonanční frekvence uvedených plazmatických módů v závislosti na magnetickém poli.

Ve vnějším magnetickém poli B kolmém k rovině iontů se degenerace módů  $(\pm m, n)$  snímá a dochází k jejich rozštěpení, viz obr. (8.2). Zajímavé je, že s rostoucím B rezonanční frekvence módů (-m,1) klesá a v dostatečně silném magnetickém poli je menší než cyklotronová frekvence, která je zobrazená přímkou procházející počátkem. Vlnový vektor se stává komplexním a tento tzv. hranový mód či hranový stav (angl. edge state) je lokalizován u okraje 2D systému. Všimněme si analogie s 2D systémy elektronů v polovodičových heterostrukturách, diskutovaných v kapitole 20, kdy existence hranových módů vede ke kvantovému Hallovu jevu.

Horizontální plazmatické oscilace je možné detekovat přímo, jako odezvu systému na střídavý signál podávaný na některou z elektrod (obyčejně na vnější válcovou elektrodu D, viz obr. 8.1). Frekvence tohoto střídavého signálu se skanuje a výsledkem je experimentální spektrum čar, jejichž frekvence dobře odpovídají nastíněnému teoretickému popisu<sup>1</sup>, viz obr. 8.2. Jednotlivé rezonance mají v lineárním režimu lorentzovský charakter a lze měřit např. jejich rezonanční frekvence a šířku čáry v závislosti na teplotě a vnějším magnetickém poli. Zvyšujeme-li excitační amplitudu, odezva systému v podobě magnetoplazmatických vln přestane být lineární - tvar čar už nebude lorentzovského typu. Projeví se navíc i nelineární interakce mezi jednotlivými módy a situace připomíná systém slabě vázaných oscilátorů. Toho lze využít k tzv. nepřímé detekci, s využitím dvojí excitace.

Představme si, že nalezneme např. základní plazmatický mód (0,1) a naladíme první excitační signál na jeho rezonanční frekvenci. Kromě toho však budeme aplikovat ještě jeden silný excitační signál, jehož frekvenci budeme pomalu skanovat přes frekvenční pásmo, kde očekáváme jiné oscilační módy systému. Jakmile tento silný excitační signál vybudí nějaký jiný rezonanční mód, dojde k nelineární interakci s konstantně buzeným módem a experimentálně se to projeví jako změna měřené amplitudy na naladěné frekvenci (0,1). Vzhledem k čistotě supratekutého helia a následně vysokému koeficientu jakosti rezonančních módů lze tímto způsobem pohodlně detekovat velké množství (až stovky) jiných plazmatických módů.

Pomocí uspořádání s dvojí excitací lze detekovat i další typy rezonance 2D iontových systémů, např vertikální rezonance iontů v potenciální jámě (dané vztahem 8.2). K této metodě se vrátíme v souvislosti se studiem dvojrozměrné krystalizace iontových systémů.

## 8.3 Pohyblivost iontů

Působením slabého vnějšího elektrického pole (v lineárním režimu) se budou ionty v He II pohybovat driftovou rychlostí  $\mathbf{v}_{d} = \mu \mathbf{E}$ . Pohyblivost  $\mu$  je determinována rozptylem na excitacích a příměsích. Protože při nízkých teplotách je střední volná dráha excitací mnohem větší než rozměry iontů, lze rozptylové procesy uvažovat odděleně a psát

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{\rm rot}} + \frac{1}{\mu_{\rm ph}} + \frac{1}{\mu_3} + \frac{1}{\mu_{\rm rip}} , \qquad (8.6)$$

kde jednotlivé příspěvky odpovídají rozptylu na rotonech, fononech, příměsích <sup>3</sup>He a vlnách na povrchu supratekutého helia - ripplonech. Uvažujme nejprve izotopicky čistý vzorek He II. Při teplotách kolem 1 K je phyblivost iontů omezena především rozptylem na rotonech. Ty se snižující se teplotou rychle vymrzají (jejich koncentrace je exponenciální funkcí teploty), takže se snižující se teplotou  $\mu(T)$ velmi strmě roste, až při teplotě kolem 0,7 K začne dominovat fononový rozptyl. Při teplotách kolem 0,5 K a níž se v běžném přírodním vzorku již začne projevovat příspěvek rozptylu na příměsových atomech <sup>3</sup>He, proto je pro experimentální studium helium třeba speciálně čistit<sup>2</sup>. Až do teplot pod 0,3 K byla pohyblivost

 $<sup>^{1}</sup>$ K přesné kvantitavní shodě je potřebné uvedený teoretický popis ještě zpřesnit tím, že se vezme do úvahy úbytek iontové hustoty na okraji systému.

 $<sup>^2 \</sup>rm Využívá se k tomu rektifikační zařízení, kdy jsou příměsové atomy <sup>3</sup>He tepelně "vymývány" protiproudem vazké normální složky (agl.$ *heat flush effect*). Zbytková koncentrace <sup>3</sup>He v nejčistčích vzorcích není známa, protože neexistuje způsob, jak ji směrodatně zjistit.

experimentálně zjišťována pomocí měření doby průletu i<br/>ontů ve slabém elektrickém poli v objemu kapaliny mezi dvěma jemnými mřížkami. V dalším ukážeme, že tato metoda je nutně omezena generací kvantovaných vírů. Při nižších teplotách je proto výhodnější využít měření plazmatických oscilací 2D iontových systémů. Šířky čar na poloviční výšce jsou dány vztahem  $\Delta\omega=e/(m_{\rm eff}\mu)$ , který umožňuje měření pohyblivosti za předpokladu, že efektivní hmotnost iontů je dobře známa. Tu lze získat měřením cyklotronové frekvence  $\omega_{\rm c}=eB/m_{\rm eff}$ v magnetickém poli. Šířka čar však s klesající teplotou rychle klesá a pod 100 mK je její přímé měření obtížné. K měření je možné využít relaxační metody, kdy plazmatická oscilace je vybuzena krátkým pulsem a měří se její časový rozpad, tedy na podobném principu jako jako je měření signálu volné precese v pulsní technikou jaderné magnetické rezonance (viz kapitola 19).

Měření pohyblivosti iontů v čistých vzorcích He II s využitím 2D iontových systémů má ještě tu výhodu, že umožňuje studovat příspěvek rozptylu na kapilárních vlnách na povrchu supratekutého helia - ripplonech. Při velmi nízkých teplotách v milikelvinové oblasti, kdy je díky vymrznutí fononů ripplonový příspěvek již dominantní, závisí pohyblivost na hloubce systému pod povrchem jako  $\mu \propto z_0^{7/2}$ , v dobrém kvalitativním souladu s teoretickým popisem na základě kontinuálního přiblížení a aproximace iontu pevnou nabitou koulí. Pohyblivost iontů při milikelvinových teplotách je velmi vysoká (řádově  $10^5 \text{ m}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ ) a koeficient jakosti iontového 2D systému srovnatelný s Q-faktorem křemenného krystalu.

## 8.4 Dvojrozměrná krystalizace

Většina pevných látek tvoří krystaly, které vykazují pravidelné trojrozměrné uspořádání na dlouhou vzdálenost. Naproti tomu jednorozměrné systémy uspořádání na dlouhou vzdálenost nevykazují, což lze interpretovat jako nestabilitu systému vzhledem k dlouhovlnným excitacím. Lze to ukázat na jednoduchém Peierlsově modelu [5], kdy částice interagují pouze se svými nejbližšími sousedy prostřednictvím harmonického potenciálu. Uvažujme ideální mřížku a excitaci s amplitudou a o vlnové délce rovné rozměru systému X. Takovou excitací může být fonon, plazmon nebo vlna spinové hustoty – magnon. Relativní změna vzdálenosti mezi sousedními částicemi je úměrná prostorové derivaci, tedy a/X. Střední energie připadající na jednu částici bude úměrná  $(a/X)^2$ . V systému o dimenzi D je celkový počet částic úměrný  $L^{\rm D}$ , takže celková energie dlouhovlnné excitace bude úměrná  $a^2 X^{({\rm D}-2)}$ . Všechny ostaní krátkovlnnější excitace systému budou mít větší energii. Vidíme, že v trojrozměrném případě volná energie nejnižšího módu o rozměru systému neomezeně roste. Konečná amplituda libovolné excitace tedy není termodynamicky možná. Naopak v jednorozměrném případě energie nejnižšího módu s rozměrem soustavy klesá. Tepelná generace dlouhovlnných nestabilit tedy uspořádání na dlouhou vzdálenost ve velkých jednorozměrných systémech nedovoluje.

2D případ je limitní a uvažovaný jednoduchý model nedává odpověď na otázku, může-li v něm uspořádání na dlouhou vzdálenost nastat. Teoreticky k této otázce významně přispěl Mermin [6], který ukázal, že pro široké spektrum excitací (tedy nejenom pro krátkodosahovou harmonickou) je v 2D systémech konečných rozměrů uspořádání na dlouhou vzdálenost možné.

2D systémy iontů pod hladinou a elektronů nad hladinou supratekutého helia s laditelnou interakcí s povrchem supratekuté kapaliny<sup>3</sup> jsou modelovými příklady klasického Coulombova systému, kdy částice interagují prostřednictvím Coulombova potenciálu s dlouhým dosahem. Problém krystalizace takového elektricky neutrálního systému - bodových elektronů nacházejících se v homogenním kladně nabitém prostředí - byl teoreticky popsán ve 30. letech minulého století Wignerem [7], proto mluvíme o wignerovské krystalizaci, přestože jeho analýza není ve dvou dimenzích aplikovatelná. Vžil se ale i alternativní termín Coulombův krystal. Krystalizaci 2D klasického elektronového systému předpověděli v 70. letech Crandall a Williams [8].

Obecně krystalizace nastane tehdy, překročí-li podíl potenciální energie ku kinetické energii na částici v nějakém systému systému určitou mez. Ve 3D systémech se obvykle využívá tzv. Lindemannova krystalizačního kritéria, pro které je definován charakteristický parametr  $\gamma = \langle a^2 \rangle^{1/2} / a_0$ , kde *a* je střední amplituda kmitů částice vzhledem k uzlu krystalické mřížky a  $a_0$  mřížková konstanta. Pro klasický 2D případ (kinetická energie částice  $\propto k_{\rm B}T$ ) můžeme definovat bezrozměrný parametr

$$\Gamma = \frac{e^2 (\pi n_0)^{1/2}}{4\pi \epsilon_0 k_{\rm B} T} , \qquad (8.7)$$

kde  $k_{\rm B}$  je Boltzmannova konstanta. Lze tedy očekávat, že krystalizační teplota poroste úměrně druhé odmocnině plošné hustoty částic  $n_0$ . Pro vyšší  $n_0$  je však třeba uvažovat kvantový případ, doplnit ještě energii nulových kmitů a parametr  $\Gamma$  psát v obecnější formě

$$\Gamma = \frac{e^2 (\pi n_0)^{1/2}}{4\pi\epsilon_0 (k_{\rm B}T + \pi\hbar^2 n_0/m^*)} .$$
(8.8)

Díky značné efektivní hmotnosti obou typů i<br/>ontů je druhý člen jmenovatele možné zanedbat, což platí i pro 2D elektrony nad povrchem helia, není-li jejich plošná hustota příliš velká. V těchto 2D systémech proto dochází ke klasické 2D krystalizaci při překročení hodnoty  $\Gamma_c \simeq 130$ . Neplatí to však pro 2D elektronové systémy v intenzivně studovaných polovodičových heterostrukturách diskutovaných v kapitole 20, kde energie nulových kmitů hraje určující roli.

Interakce krystalu s povrchem kapaliny je velmi silná, takže pod každým elektronem v uzlu 2D mřížky vznikne jakýsi důlek (angl. dimple). Proto je efektivní hmotnost elektronů v krystalu silně obohacena a dosahuje až 500  $m_{\rm e}$ , kdežto při přechodu do kapalné fáze se zmenší až na hmotnost volného elektronu  $m_{\rm e}$ . Základní stav klasického 2D krystalu byl teoreticky vyšetřo-ván Bonsallem a Maradudinem [9]. Z numerických výpočtů plyne, že stabilní je hexagonální 2D mřížka. Pro krystalickou fázi je podstaná nenulová hodnota příčného izotropního modulu pružnosti

$$\mu_{\rm tr} = 0,245 \; \frac{e^2 n_0^{3/2}}{4\pi\epsilon_0} \;, \tag{8.9}$$

 $<sup>^{3}</sup>$ Interakci s povrchem (nebo jinými slovy vzdálenost systému od hladiny helia) lze jednoduše ladit velikostí přiloženého vnějšího svislého elektrického pole.

jehož znalost je podstatná při studiu torzních kmitů krystalu.



Obr. 8.3: Ripplonová krystalografie 2D iontového krystalu.

První předložená experimentální metoda detekce 2D krystalů lokalizovaných u povrchu supratekutého helia byla založena na interakci elektronů s kapilárními vlnami - ripplony se známou disperzní relací

$$\omega^2 = \frac{\sigma}{\rho}k^3 + gk , \qquad (8.10)$$

kde  $\sigma$  značí povrchové napětí helia. Člen gk je gravitační příspěvek (zásadní pro popis dlouhých gravitačních vln na povrchu kapaliny), který je pro dostatečně velké k zanedbatelně malý. Budou-li elektrony nebo ionty oscilovat působením střídavého elektrického pole (ať už ve svislém nebo ve vodorovném směru) na takové úhlové frekvenci  $\omega$ , která podle vztahu (8.10) odpovídá některému vl-

novém vektoru reciproké 2D mřížky  $G_n$ , tj.  $\omega^2 = \sigma G_n^3$ , dojde ke konstruktivní interferenci a rezonanční odezvě systému. Tento vázaný kmitavý mód poprvé teoreticky předpověděl Šikin [10], nazýváme jej proto Šikinovým módem a lze jej experimentálně detekovat [4].

Přímá detekce spočívá v tom, že se skanuje frekvence střídavého elektrického pole a na Šikinových frekvencích je pozorována rezonanční absorpce. Předpokládáme-li hexagonální krystalickou 2D mřížku, dostaneme pro první vektor reciproké mřížky vlnové číslo  $G_1 = 2\pi(\sqrt{3}n_0/2)^{1/2}$  a s využitím vztahu (8.8) pak první Šikinovu frekvenci  $f_{S1} = (1/2\pi)[(\sigma/\rho)G_1^3]^{1/2}$ . Pro lepší představu o číselných hodnotách měřených veličin uveďme, že pro typickou plošnou hustotu  $n_0 = 5 \times 10^{11} \text{ m}^{-2}$  je  $f_{S1} \simeq 2,8 \text{ MHz}$  – na ní je pak experimentálně pozorováno maximum absorpce skanovaného signálu.

Existují ovšem i další možnosti, zahrneme-li do úvahy následující vektory reciproké mřížky. Jejich vlnová čísla lze jednoduše odvodit z geometrie hexagonální mřížky:  $G_2 = \sqrt{3}G_1$ ;  $G_3 = \sqrt{4}G_1$ ;  $G_4 = \sqrt{7}G_1$ ... Tomu odpovídají Šikinovy frekvence v poměru 1 :  $3^{3/4}$  :  $4^{3/4}$  :  $7^{3/4}$  : ... Jak ukazuje obr. 8.3, všechny tyto frekvence je možné experimentálně detekovat [11] v experimentálním uspořádání s dvojí excitací, což jednoznačně prokazuje existenci 2D krystalu s hexagonální krystalickou mřížkou. Na obr. 8.3 je vynesena amplituda konstantně buzeného základního plazmatického módu v závislosti na skanované frekvenci druhého excitačního

signálu. Kromě Šikinových frekvencí jsou jasně partná i minima pod hodnotami těchto frekvencí a maxima nad nimi. Jejich existenci lze vysvětlit díky generaci a absorpci plazmonů. Všimněme si analogie ripplonové krystalografie 2D krystalu a standardní Röntgenovy krystalografie běžných 3D krystalů. Roli Röntgenových paprsků zde hrají ripplony a Šikinovy frekvence vyplývají z podmínek analogických Braggovým podmínkám na interferenční maxima [11].

V krystalické fázi mohou existovat podobně jako v běžných pevných látkách příčné oscilace - tj. příčný zvuk - díky nenulovému příčnému modulu pružnosti (8.9). Experimentálně byly detekovány nejprve přímo pro elektronový krystal nad povrchem supratekutého helia [12] a posléze v experimentálním uspořádáním s dvojí excitací i pro iontové systémy pod povrchem [4]. Ukázalo se, že pro malou excitační amplitudu jsou příčné oscilace plně reprodukovatelné, ale při překročení určité meze dochází ke kvalitativní změně spektra a destrukci 2D krystalu [13]. Podobně jako je to možné pro běžné 3D krystaly, je i 2D iontový krystal možné pod teplotou tání  $\simeq 100 \text{ mK vyžíhat.}$ 

#### 8.5 Detekce a nukleace kvantovaných vírů



Obr. 8.4: Fotografie poloh kvantovaných vírů.

Při úvahách o pohyblivosti iontů v supratekutém heliu jsme uvažovali pouze rozptyl existujících excitací - normální složky - a neuvažovali možnost, že pohybující se ionty mohou interagovat také s kvantovanými víry nebo mohou excitace samy generovat. Přejděme nyní k situaci, kdy studovaný vzorek již obsahuje kvantované víry.

Nachází-li se v blízkosti kvantovaného víru kladný nebo záporný i<br/>on, bude na něj působit síla směrem k jádru víru. Kvalitativně to plyne z Bernoulliho rovnice pro ideální kapalinu <br/>  $p + \rho v_{\rm s}^2/2 = const$ , kde p je tlak neboli energie objemové jednotky kapaliny. Protože rychlost rotace supratekuté složky <br/>  $v_{\rm s}$  směrem k jádru víru roste nepřímo úměrně se vzdáleností od osy víru, tlak směrem k ose víru klesá a na i<br/>ont konečných rozměrů působí síla směrem k ose víru. Umístíme-li i<br/>ont přesně na osu víru, bude to energeticky výhodné, neboť ušetříme kinetickou energii<br/>  $\Delta E$  velmi rychle proudící kapaliny v objemu i<br/>ontu. Integrací kinetické energi<br/>e $\rho_{\rm s} v_{\rm s}^2/2$  přes objem i<br/>ontu vyjma oblasti jádra víru o poloměru a dostaneme

$$\Delta E = -2\pi\rho_{\rm s}\frac{\hbar^2}{m^2}R\left[1 - \left(1 + \frac{a^2}{R^2}\right)^{\frac{1}{2}}\sinh^{-1}\left(\frac{R}{a}\right)\right] (8.11)$$

Této energii se říká substituční energie (angl. *substitution energy*), protože objem rotující supratekuté složky je nahrazen objemem iontu. Přímo na ose víru se tedy ion nachází v potenciální jámě, která je o něco hlubší pro záporné ionty

s větším poloměrem  $R_- > R_+$ . Při relativně vysokých teplotách nad 1 K je tepelná energie  $k_{\rm B}T$  příliš velká a k záchytu iontů na kvantovaných vírech nedochází. Za nízkých teplot však jádra vírů slouží jako záchytná centra. Toho bylo využito Yarmchukem a Packardem [14] k vyfotografování poloh kvantovaných vírů rovnoměrně rotujícího válcového vzorku He II obsahujícího kvantovaných víry rovnoběžné s osou rotace, imitující rotaci tuhého tělesa. Počet kvantovaných vírů ve vzorku byl kontrolován úhlovou rychlostí otáčení rotujícího rozpouštěcího refrigerátoru.

Ionty byly vytvářeny radioaktivním zdrojem a pomocí slabého elektrického pole  $E_1 \perp \Omega$  manipulovány příčně přes vzorek, takže došlo k jejich záchytu na jádrech kvantovaných vírů, kde se díky odpudivé Coulombově interakci poskládaly jako korálky na niti. Po "nabití" vírů ionty bylo aplikováno silné elektrické pole  $E_1 \parallel \Omega$ , které ionty "vytáhlo" podél kvantovaných vírů na citlivou luminiscenční elektrodu. Tak byl získán přesný obraz (obr. 8.4) rozmístění kvantovaných vírů v rotujícím vzorku. Jejich počet roste se zvyšující se úhlovou rychlostí otáčení aparatury, která umožnila i studium dynamiky jejich vzniku. Ukázalo se,



Obr. 8.5: Počítačová simulace nukleace kvantovaného víru pohybujícím se iontem (časový sled procesu metodou Grossovy-Pitajevského rovnice).

že jde o velmi složitý proces - rovnovážný počet vírů nevznikne ihned po uvedení aparatury do rotace. Víry mohou vznikat se zpožděním až několika hodin a jejich počet ne vždy dosahuje teoretického rovnovážného stavu. Výsledky jsou rovněž silně závislé na čistotě helia, příměsi <sup>3</sup>He jsou totiž při velmi nízkých teplotách dominujícím faktorem pro dynamiku kvantovaných vírů, protože zvyšují vnitřní tření, které

je podrobněji diskutováno v kapitolách 5 o supratekutém $^4\mathrm{He}$ a 10 o kvantové turbulenci.

Pohybující se ionty mohou nejenom interagovat s normální složkou (tj. plynem elementárních excitací fononů a rotonů) a s kvantovanými víry, ale mohou svým pohybem excitace samy generovat. Omezíme-li se pro jednoduchost limitou velmi nízkých teplot (tj. není přítomna normální složka a prozatím předpokládáme, že nejsou přítomny ani kvantované víry), bude pohyb iontu možné aproximovat jako obtékání pevné hladké nabité koule (náboj  $\pm e$ ) o efektivní hmotnosti  $m_{\text{eff}}$  ideální tekutinou - supratekutou složkou. Pro malé rychlosti bude obtékání potenciální a tudíž na iont (pokud se pohybuje rovnoměrně a přímočaře) nebude působit síla odporu prostředí. Působením vnějšího elektrického pole však iont rychle překročí kritickou rychlost, při které dojde buď ke generaci rotonů (tento případ rozebereme později) nebo k nukleaci kvantovaných vírů (viz obr. 8.5).

Při tlacích do zhruba deseti barů je druhá možnost mnohem pravděpodobnější. Experimentálně byla při velmi nízkých teplotách (0,28 K) sledována doba průletu

iontů v komůrce mezi dvěma jemnými mřížkami [15]. Ionty obou typů byly urychlovány vnějším elektrickým polem. Ve velmi slabém poli se ionty pohybují driftovou rychlostí  $v_d = \mu E$ , ale při překročení kritické rychlosti  $v_c$  kolem 30 – 50 m/s ( $v_c$  závisí na teplotě, tlaku a při teplotách hluboko pod 1 K překvapivě velmi silně i na čistotě He II, tj. na množství rozpuštěného <sup>3</sup>He) je situace zcela odlišná a se zvyšujícím se elektrickým polem doba průletu iontů komůrkou výrazně stoupá. Je to způsobeno nukleací vírové smyčky na povrchu iontu, jak je znázorněno na základě počítačové simulace na obr. 8.5<sup>4</sup>.

Při pohybu iontu zachyceného na takovém vírovém kroužku se absorbuje energie vnějšího elektrického pole a poloměr vírového kroužku roste. Z dynamiky kvantovaných vírů je známo (viz kapitola 5 o supratekutém <sup>4</sup>He), že vírový kroužek se pohybuje ve směru kolmém k rovině, ve které se nachází a že jeho rychlost je nepřímo úměrná poloměru. Tím lze snadno vysvětlit na první pohled paradoxní fakt, že rychlost pohybu iontu (zachyceného vírovým kroužkem, tedy v podstatě rychlost vírového kroužku) se zvyšující se energií klesá, jak je patrné z experimentální závislosti na obr. 8.6.

Dodejme, že experimentální závislosti typu obr. 8.6 lze využít k určení poloměru jádra kvantovaných vírů [15]. Přesný výpočet sice slabě závisí na použitém modelu víru pro fitování experimentálních dat (uvažujeme-li např. jádro víru jako duté či vířivost



Obr. 8.6: Závislost driftové rychlosti na energii vírového kroužku.

v něm jako konstantu), avšak lze považovat za prokázané, že v limitě nulové teploty je poloměr jader kvantovaných vírů kolem 1 Å.

## 8.6 Landauova kritická rychlost

V kapitole 5 o supratekutosti <sup>4</sup>He jsme odvodili Landauovo kritérium, podle kterého by pohybující objekt v supratekutém He II neměl až do překročení kritické rychlosti  $v_{\rm L} = min[\varepsilon(p)/p]$  generovat kvazičástice. Z tvaru disperzního zákona vyplývá, že kritická rychlost bude nejnižší pro rotony:  $v_{\rm L} = \Delta/p_0$  a pro experimentálně zjištěné hodnoty energetické mezery  $\Delta$  a hybnosti  $p_0$  pro rotony by při velmi nízkých teplotách měla klesat od  $\simeq 60$  m/s při nulovém tlaku po  $\simeq 45$  m/s při maximálním

 $<sup>^4</sup>$ Tato počítačová simulace není provedena pro supratekuté helium, ale pro Boseův kondenzát v limitě absolutní nuly, kde lze uplatnit Grossovu-Pitaevského rovnici. Kvalitativně jsou však procesy nukleace vírové smyčky v těchto prostředích podobné.

možném tlaku 25 barů.



Obr. 8.7: Závislost odporu prostředí na rychlosti iontu.

V předchozím textu jsme však ukázali, že při pohybu He II mohou ionty generovat kvantované víry, při překročení kritické rychlosti  $v_{\rm c}$ , která s tlakem stoupá. Při tlacích do cca 10 barů je  $v_{\rm c} < v_{\rm L}$  a pravděpodobnost generace vírové smyčky je tedy vyšší než pravděpodobnost generace rotonu. Při vyšších tlacích je ovšem generace rotonů dominujícím procesem a McClintockem se spoluautory byla experimentálně pozorována [16]. Na obr. 8.7 je vynesena závislost sílv odporu prostředí v ultračistém vzorku kapalného helia na driftové rychlosti pro záporné ionty při tlaku 25 barů a teplotách 4 K (tj. v normální kapalině He I) a 0,35 K, kdy je podíl normální složky zanedbatelný. Z grafu je patrné, že až do dosažení Landauovy kritické rychlosti je proudění He II kolem pohybujícího se iontu

potenciální a nedochází k disipaci energie. Při překročení  $v_{\rm L}$  dojde k emisi rotonů, v souladu s Landauovou fenomenologickou teorií supratekutosti He II.

## 8.7 lonty v supratekutém <sup>3</sup>He

Oba typy iontů existují v i ve vzácnějším izotopu a byly řadou autorů použity i ke studiu supratekutých fází <sup>3</sup>He, zejména supratekuté fáze A s anizotropními vlastnostmi. Ve slabých elektrických polích je driftová rychlost iontu v <sup>3</sup>He - A úměrná přiloženému elektrickému poli  $\boldsymbol{E}$  a závisí na úhlu, pod kterým se ion pohybuje vzhledem ke směru vektoru  $\boldsymbol{l}: \boldsymbol{v}_{\rm d} = \mu_{\perp} \boldsymbol{E} - \Delta \mu(\boldsymbol{E} \boldsymbol{l}) \boldsymbol{l},$  kde  $\Delta \mu = \mu_{\perp} - \mu_{\parallel}$ . Pohyblivost je tedy tenzorem druhého řádu,  $\mu_{\perp}$  a  $\mu_{\parallel}$  jsou jeho složky kolmo a rovnoběžně s osou anizotropie energetické mezery  $\boldsymbol{l}$ .

Iontů je proto možné využít ke studiu textur vektoru l, vznikajícím díky orientujícím silám spojeným s působením vnějšího magnetického pole, díky přítomnosti stěn či proudění (protiproudu) normální a supratekuté složky [17].

Příkladem využití záporných i<br/>ontů je studium struktury kvantovaných vírů vznikajících při rotaci vzorku <sup>3</sup>He - A v experimentální komůrce, znázorněné na obr. 8.8. I<br/>onty jsou emitovány do kapaliny z ostrého wolframového hrotu v podobě pulsu, který



Obr. 8.8: Komůrka pro studium kvantovaných vírů v $^3{\rm He}$  - A pomocí iontů.

se uvnitř experimentálního prostoru pohybuje směrem vzhůru působením elektric-

kého pole vytvářeného předpětím na jednotlivých dílech komůrky. Navíc je aplikováno vnější magnetické pole ve svislém směru, takže je-li vzorek <sup>3</sup>He - A v klidu, vektor l leží díky spin-orbitální interakci ve vodorovné rovině. Lze měřit např. dobu průletu iontů komůrkou ke svrchní elektrodě - kolektoru. Ta bude v této geometrii dána pohyblivostí  $\mu_{\perp}$ .

Při roztočení kryostatu při konstantní teplotě v <sup>3</sup>He - A vznikají spojité víry, které nemají tzv. tvrdé jádro podobné jádru víru v He II, ale pouze tzv. měkké jádro, ve kterém se textura vektoru l (tj. jeho prostorové uspořádání) spojitě mění. Díky tomu dochází vlivem anizotropie pohyblivosti iontů k jevu fokusace iontů do měkkých jader kvantovanch vírů a mění se tvar registrovaného pulsu na kolektoru a jeho střední doba průletu komůrkou. Kvantované víry je tudíž tímto způsobem možné detekovat a studovat jejich strukturu. Tyto experimenty prokázaly, že v rotujícím <sup>3</sup>He - A mohou existovat nejméně dva různé typy kvantovaných vírů, v závislosti na historii přípravy rotujícího vzorku.

#### 8.8 Literatura

- [1] G. Careri, Prog. Low Temp. Phys. III, 58 (1961).
- [2] B.E. Springett, M.H. Cohen, J. Jortner, J. Phys. Rev. 159, 183 (1967).
- [3] K.R. Atkins, Phys. Rev. 116, 1339 (1959).
- [4] W. F. Vinen, L. Skrbek, in Two-Dimensional Electron Systems, ed. E. Y. Andrei, Kluwer Academic, Dordrecht, (1997).
- [5] R.E. Peierls, Helv. Phys. Acta. 7, 81 (1923).
- [6] N.D. Mermin, Phys. Rev. 176, 250 (1967).
- [7] E.P. Wigner, Phys. Rev. 46, 1002 (1934).
- [8] R.S. Crandall, R. Williams, Phys. Rev. Lett. 46, 404 (1971).
- [9] L. Bonsall, A.A. Maradudin Phys. Rev. B 15, 1959 (1977).
- [10] V.B. Shikin, JETP Letters 19, 335 (1974).
- [11] P.L. Elliott, C.I. Pakes, L. Skrbek and W. F. Vinen, Phys. Rev. B 61, 1396 (2000).
- [12] G. Deville et al., Phys. Rev. Lett. 53, 588 (1984).
- [13] P.L. Elliott, C.I. Pakes, L. Skrbek, W.F. Vinen, Czech. J. Phys. B 46, 331 (1996).
- [14] E.J. Yarmchuk, R.E. Packard, J. Low Temp. Phys. 46, 479 (1982).
- [15] G.W. Rayfield, F. Reif, Phys. Rev. 136, A1194 (1964).
- [16] P.V.E. McClintock, R.M. Bowley, Progress in Low Temperature Physics, Vol. XIV, W.P. Halperin (ed.), Elsevier Science B.V., Amsterdam (1995), p. 3.
- [17] J.T. Simola et al., Phys. Rev. Lett. 57, 1923 (1986); Phys. Rev. Lett. 58, 904 (1987).
- [18] R. J. Donnelly, Quantized Vortices in Helium II, Cambridge University Press (1991).

# 9 Chladné atomové plyny

## T. BRAUNER

Jak víme z úvodní kapitoly, jev Boseovy–Einsteinovy kondenzace (BEC) byl teoreticky předpovězen již ve dvacátých letech minulého století na základě kvantově statistického popisu systému identických bosonů. Ve třicátých letech pak London přišel s myšlenkou, že BEC je zodpovědná za supratekutost kapalného <sup>4</sup>He. Řadu kvalitativních vlastností supravodičů lze vysvětlit na základě představy Bardeenova–Cooperova–Schriefferova (BCS) základního stavu supravodiče jako BE kondenzátu Cooperových párů (za jakých podmínek je tato představa oprávněná, vysvětlíme později v sekci o fermionových plynech).

V tomto širším kontextu nachází koncept BEC širokou škálu aplikací v nejrůznějších oblastech fyziky. Kromě již zmíněných příkladů z fyziky nízkých teplot a supravodičů je to i řada problémů v jaderné a částicové fyzice. Cooperovo párování nukleonů má významné důsledky pro hmotové spektrum jader i pro nízkoenergetické vlastnosti husté jaderné hmoty, nacházející se v nitru neutronových hvězd. Při velmi vysokých hustotách navíc může docházet k BEC pseudoskalárních mezonů, pionů či kaonů. Konečně analogie s BCS teorií supravodivosti vedla Nambua k rozpracování teoretického popisu spontánního narušení tzv. chirální symetrie, zodpovědného za vznik hmot nukleonů a dalších silně interagujících částic, hadronů, za nějž mu byla v roce 2008 po právu udělena Nobelova cena.

Ačkoli princip BEC nabízí hlubší pochopení řady fyzikálních jevů, přesná souvislost BEC a supratekutosti zůstávala po řadu let obtížným problémem. Z teoretického hlediska byl víceméně zvládnut pouze případ slabě interagujícího bosonového plynu. Základy teorie vypracovali před více než půlstoletím Bogolijubov, Galickij, Beliaev, Lee, Yang, Huang a další, některé otázky (jako například korekce ke kritické teplotě způsobená slabou interakcí) byly však definitivně zodpovězeny až v poslední dekádě s pomocí moderních technik kvantové teorie pole. Z experimentální stránky bylo prototypem supratekutého systému právě kapalné <sup>4</sup>He. V něm však o slabé interakci nemůže být řeč: i při extrémně nízkých teplotách se v kondenzátu nachází jen asi deset procent atomů, zbytek je vlivem silné meziatomové interakce rozptýlen do excitovaných stavů.

Pokrok v experimentálních metodách atomové fyziky umožnil v devadesátých letech minulého století poprvé realizovat BEC v slabě interagujícím plynu atomů alkalických kovů, a konečně tak definitivně přímo experimentálně potvrdit sedmdesát let starou Boseovu[1] a Einsteinovu předpověď [2]. Příprava a studium takového systému sestává z několika klíčových elementů, o nichž se stručně zmíníme v příští sekci: chlazení atomů na dostatečně nízkou teplotu, jejich uvěznění v magnetické či optické pasti, a nakonec vlastní detekce BE kondenzátu. Chování slabě interagujícího homogenního plynu bylo podrobně rozebráno již v úvodní kapitole. Zde se tedy soustředíme na popis Boseho plynu v potenciálové pasti, který je bližší experimentu. V druhé polovině kapitoly se budeme věnovat plynům fermionovým.

Přítomnost tzv. Feshbachovy rezonance dovolující ladit sílu meziatomové interakce vnějším magnetickým polem zde umožnila experimentálně potvrdit čtyřicet let starou hypotézu [3], že ze slabě interagujícího BCS režimu lze spojitě přejít do módu, v němž silně interagující fermiony tvoří těsně vázané molekuly, jež následně podléhají BEC. Tato oblast výzkumu prošla v posledních pěti letech bouřlivým vývojem.

# 9.1 Úvod

U kterých prvků je možné BEC experimentálně realizovat? Na jeden příklad, helium, jsme již narazili. V tomto případě však jde o fázový přechod kapalného <sup>4</sup>He do supratekutého stavu. Interakce mezi atomy tedy hrají podstatnou roli. Aby se jejich vliv oslabil, bylo by záhodno dosáhnout BEC v atomovém *plynu*, kde je meziatomová vzdálenost mnohem větší. Prvním teoreticky navrženým kandidátem byl již před padesáti lety spinově polarizovaný vodík. Ten především netvoří dvouatomové molekuly z důvodu absence silně přitažlivé výměnné interakce; dipól–dipólová van der Waalsova interakce je příliš slabá. Bohužel v případě vodíku nelze použít metodu laserového chlazení, kterou stručně popíšeme níže. V experimentech tedy bylo použito chlazení kryogenní a BEC atomového vodíku bylo nakonec skutečně dosaženo koncem devadesátých let minulého století.

Neznamenalo to ovšem prvenství. Jako mnohem vhodnější pro experiment se ukázaly atomy alkalických kovů. Ty mají ve spektru silné rezonanční čáry typicky v optické oblasti (jako např. slavný sodíkový dublet). Kromě toho mají stejně jako vodík elektronový spin 1/2 a většina izotopů také nízký jaderný spin, což znamená relativně jednoduchou hyperjemnou strukturu energetických hladin. Mezi experimentálně nejčastěji používané se tak řadí bosonové izotopy <sup>7</sup>Li, <sup>23</sup>Na a <sup>87</sup>Rb, a fermionové izotopy <sup>6</sup>Li a <sup>40</sup>K.

Než se pustíme do podrobnější diskuze, pokusme se nejprve odhadnout typické parametry obláčku atomového plynu v pasti. Budeme předpokládat, že máme N atomů o hmotnosti m uvězněných v typicky harmonickém izotropním potenciálu s frekvencí  $\omega$ . Zanedbáme-li atomové interakce, budou se při nulové teplotě všechny atomy nacházet v základním stavu harmonického oscilátoru. Připomeneme-li si jeho normalizovanou vlnovou funkci,

$$\psi_0(\boldsymbol{x}) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left(-\frac{m\omega\boldsymbol{x}^2}{2\hbar}\right) , \qquad (9.1)$$

bude rozdělení hustoty částic dáno vztahem  $n_{\mathrm{T}=0}(\boldsymbol{x}) = N|\psi_0(\boldsymbol{x})|^2$ . Charakteristický rozměr a hybnost částice v základním stavu harmonického oscilátoru jsou dány vztahy  $x \sim \sqrt{\hbar/m\omega}$  a  $p \sim \sqrt{m\hbar\omega}$ . Uvažujme jako konkrétní příklad atomy <sup>23</sup>Na v pasti s (typickými) parametry  $\omega/2\pi = 200$  Hz a  $N = 10^6$ . Dostaneme tak následující odhady:

rozměr obláčku:	$x \approx 1.5 \ \mu \mathrm{m}$ ,
rychlost atomů:	$v \approx 1.9  \mathrm{mm/s}$ ,
hustota v centru pasti:	$n_{\rm T=0}(0) \approx 5.5 \times 10^{16} \ {\rm cm}^{-3}$

Poslední veličinou, kterou bychom rádi znali, je kritická teplota  $T_{\rm c}$ , na kterou je třeba plyn ochladit, aby došlo k BEC. V dalším ji pro neinteragující plyn v harmonické pasti spočítáme přesně, pro tento okamžik se spokojíme s hrubým odhadem. Už z úvodní kapitoly víme, že kvantové jevy začnou hrát podstatnou roli při teplotách, za kterých je de Broglieho vlnová délka,  $\lambda \sim \hbar/\sqrt{mk_{\rm B}T}$ , srovnatelná s meziatomovou vzdáleností. Tu určíme následující úvahou. Nad kritickou teplotou bude hustota částic dána přibližně klasickým Boltzmannovým rozdělením,

$$n_{\mathrm{T}>\mathrm{T_c}}(\boldsymbol{x}) = N \left(\frac{m\omega^2}{2\pi k_{\mathrm{B}}T}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\omega^2 \boldsymbol{x}^2}{2k_{\mathrm{B}}T}\right) \ . \tag{9.2}$$

Poloměr termálního obláčku tedy je roven šířce (Gaussova) rozdělení hustoty,  $R_{\rm T} \sim \sqrt{k_{\rm B}T/m\omega^2}$ . Srovnáním meziatomové vzdálenosti,  $N^{-1/3}R_{\rm T}$ , s de Broglieho vlnovou délkou dostaneme odhad pro kritickou teplotu,

$$T_{\rm c} = \frac{\hbar\omega}{k_{\rm B}} N^{1/3} \approx 1.0 \ \mu {\rm K} \tag{9.3}$$

pro výše uvedené parametry pasti.

## 9.2 Přehled experimentálních technik



Obr. 9.1: Typická ukázka experimentální aparatury z Institutu Maxe Plancka pro kvantovou optiku v Garchingu pro chlazení a následné studium atomového plynu v pasti.

210

Než se pustíme do podrobnější diskuze fyzikálních vlastností uvězněných atomových plynů, shrneme v této části základní experimentální techniky, jichž se při studiu atomových plynů používá. Z předchozího již víme, že je třeba plyn ochladit na teplotu kolem mikrokelvinu či nižší. Další podmínkou BEC je dostatečně vysoká hustota atomů. Podle našeho hrubého odhadu je třeba uvěznit plyn v oblasti s rozměrem řádu  $\mu m$  (ve skutečnosti může být vlivem odpudivé interakce rozměr obláčku s BEC až desetkrát větší). Sloučit

tyto dva požadavky není snadné. Velkou výhodou používaných bezkontaktních magnetických či optických pastí je, že s výjimkou samotného uvězněného obláčku může celé experimentální zařízení v principu pracovat při pokojové teplotě. Magnetooptické pasti (zkráceně MOT z angl. *Magneto-Optical Trap*) navíc umožňují atomy současně uvěznit a ochladit.

Na obrázku 9.1 vidíme typické uspořádání experimentu s ultrachladným atomovým plynem. Výchozím bodem je vzorek alkalického kovu, jehož zahřátím na teplotu několika set stupňů Celsia dojde k odpařování atomů z povrchu. Ty jsou úzkou štěrbinou vypuštěny z pece do Zeemanova zpomalovače (angl. Zeeman slower), kde jsou ochlazeny na teplotu řádově 1 K a rychlost několika desítek metrů za sekundu. Princip Zeemanova zpomalovače je velice jednoduchý. Proti letícím atomům je zapnut laserový svazek. Absorpcí fotonů je atomům předána hybnost a tím jsou zpomaleny. Frekvence laseru je vyladěna tak, aby odpovídala frekvenci přechodu mezi atomovými hladinami a absorpce tak byla efektivní. Frekvence atomového přechodu v laboratorní soustavě se však díky Dopplerovu jevu mění s časem vzhledem ke klesající rychlostí atomů. Aby se laserový svazek udržel v rezonanci s atomovým přechodem, je v trubici s atomy pomocí soustavy cívek vytvořeno nehomogenní magnetické pole. To díky Zeemanovu jevu posune energetické hladiny atomu; vhodnou konfigurací pole lze docílit zrušení časově proměnného Dopplerova jevu. Jako alternativní postup k nehomogennímu magnetickému poli v Zeemanově zpomalovači se někdy používá laserový svazek s časově proměnnou (rostoucí) frekvencí, čímž je dosaženo stejného efektu.

Po ochlazení na teplotu kolem 1 K jsou atomy uvězněny v magnetooptické pasti. Zde je jejich teplota dále snížena laserovým chlazením (angl. *laser cooling*) na zhruba stovku mikrokelvinů. To však na dosažení BEC stále nestačí. V poslední fázi přípravy experimentu je tak vypnuto laserové záření a atomy jsou dále ochlazeny v čistě magnetické pasti vypařováním (angl. *evaporative cooling*) až na potřebnou teplotu řádově mikrokelvinu či nižší. Princip obou technik chlazení bude rozebrán podrobněji níže.

#### 9.2.1 Uvěznění atomů v pasti

K uvěznění atomů se používá (kvazi)stacionárního magnetického pole či laserových svazků, a podle toho dělíme pasti zhruba na magnetické a optické. Základním fyzikálním principem magnetických pastí je již zmíněný Zeemanův jev. Energie atomu v daném spinovém stavu je ovlivněna vnějším magnetickým polem. Pomocí poruchové teorie lze ukázat, že energie daného spinového podstavu se mění lineárně s magnetickou indukcí, pokud je magnetické pole dostatečně silné<sup>1</sup>. Působení magnetického pole na atomy je tedy ekvivalentní vnějšímu potenciálu, jehož profil se řídí velikostí intenzity magnetického pole.

Aby došlo k uvěznění atomů, je třeba vytvořit magnetické pole, jehož intenzita má v určitém bodě minimum. Nejjednodušší takovou konfigurací je kvadrupólová past. Ta je tvořena párem souosých Helmholtzových cívek s opačnou orientací

 $<sup>^1 {\</sup>rm Energie}$  je striktně lineární v magnetickém poli pro tzv. dvojitě polarizované stavy, v nichž elektronová i jaderná složka spinu nabývá maximální hodnoty.

proudu. Přesně ve středu mezi cívkami se jejich pole navzájem vyruší. V okolí tohoto bodu lze magnetickou indukci aproximovat vztahem  $\boldsymbol{B} = B_0(x, y, -2z)$ , kde jsme za osu cívek zvolili osu z. Intenzita magnetického pole je tedy nulová v centru a roste lineárně se vzdáleností. Nevýhodou tohoto druhu pasti je právě existence bodu, v němž je magnetické pole nulové. V takovém bodě jsou totiž různé spinové podstavy téměř degenerované (až na hyperjemné rozštěpení) a snadno dochází k přechodům a tím ztrátě atomů z pasti. Jedním z možných řešení tohoto problému je přidání dodatečného homogenního rotujícího magnetického pole. Tento druh pasti se v literatuře nazývá TOP (z angl. *Time-averaged Orbiting Potential*).

Zvolme pro jednoduchost rotující pole ve směru kolmém k ose kvadrupólové pasti. Celková magnetická indukce pak bude B(t) = $(B_0x + B_\omega \cos \omega t, B_0y + B_\omega \sin \omega t,$  $-2B_0z$ ). Frekvenci rotující složky  $\omega$ lze zvolit mnohem vyšší než charakteristickou frekvenci pohybu atomů v pasti a zároveň mnohem nižší než frekvenci přechodu v atomovém spektru. Atomy pak zůstávají ve stejném spinovém stavu a zároveň cítí jen časově vystředovanou magnetickou intenzitu  $\bar{B}$  =  $\langle |\boldsymbol{B}(t)| \rangle_{\mathrm{T}}$ . Rozvojem v souřadnicích kolem středu pasti dostaneme

$$\bar{B} \approx B_{\omega} + \frac{B_0^2}{4B_{\omega}} (x^2 + y^2 + 8z^2) .$$
(9.4)

Přidání rotující složky pole tedy posune minimální velikost indukce do nenulových hodnot, čímž zamezí ztrátě atomů. Zároveň se změní tvar potenciálu z lineárního na harmonický.



Obr. 9.2: Schéma magnetické pasti Ioffeho–Pritchardova (též čtyřlístkového) typu, jednotlivá vinutí (1, 2, 3) vytvářejí zadanou konfiguraci magnetického pole v pasti.

Jiným typem magnetické pasti s nenulovým minimem je tzv. Ioffeho–Pritchardova past, viz obrázek 9.2. Jejím základem jsou opět dvě souosé Helmholtzovy cívky, tentokrát ovšem orientované souhlasně. Podrobným rozborem lze ukázat, že takováto axiálně symetrická konfigurace nemá ve středu lokální minimum magnetické intenzity, ale sedlový bod. To lze napravit přidáním osově nesymetrické soustavy vodičů, jako například v často používané čtyřlístkové konfiguraci na obrázku.

Na fyzikálně odlišném principu pracují pasti optické. Zde se využívá toho, že pokud je frekvence elektrického pole optického svazku nižší než frekvence atomového přechodu, dojde aplikací tohoto pole ke snížení energie základního stavu atomu (atom má při dané frekvenci kladný koeficient polarizovatelnosti). Pole elektromagnetické vlny tedy opět vytváří efektivní potenciál působící na atom. K dosažení efektu potenciálové pasti je nutné docílit nehomogenního světelného pole s lokálním maximem elektrické intenzity, což je případ fokusovaného laserového svazku. Frekvence svazku je pokud možno volena daleko od frekvence atomového přechodu, aby se zabránilo ohřívání plynu absorpcí fotonů.

Velkou výhodou optických pastí je, že působí v zásadě jen na orbitální stupně volnosti atomu (konkrétně na valenční elektron v s stavu) a vytvářejí tak stejný potenciál nezávisle na spinovém stavu atomu. Optické pasti tudíž hrají zásadní roli při studiu Fermiho plynů, v nichž je vzájemná meziatomová interakce regulovaná vnějším homogenním magnetickým polem. Toho by se těžko dosahovalo v magnetických pastech, v nichž je nehomogenita magnetického pole klíčová. Nevýhodou optických pastí naopak je jejich malá hloubka, daná reálně dosažitelnými intenzitami laserových svazků. Uvěznění plynu v magnetické pasti je tedy nevyhnutelné jako předstupeň v průběhu chlazení. Citlivost magnetických pastí na volbu spinového stavu se zároveň s výhodou využívá při chlazení vypařováním.



Obr. 9.3: Magnetooptická past.  $\sigma^{\pm}$ značí kruhovou polarizaci laserových svazků. Indukční čáry magnetického pole jsou znázorněny modře.

Pravděpodobně nejčastěji používaným druhem pasti v současných experimentech je kombinace obou výše popsaných typů, neboli MOT, viz obr. 9.3. Základem metody je použití protiběžných laserových svazků se stejnou frekvencí a intenzitou a stejnou (kladnou) kruhovou polarizací. Svazek  $\sigma^+$  tedy bude excitovat atom ze základního stavu do vyšší hladiny s magnetickým kvantovým číslem m =+1 (měřeným vůči společné ose Helmholtzových cívek), zatímco svazek  $\sigma^{-}$ jej bude excitovat do hladiny s m =-1. Přesně ve středu pasti je magnetické pole nulové a stavy  $m = \pm 1$ degenerované. Nachází-li se atom například vpravo od centra pasti, bude mít stav m = +1 vyšší energii než v centru, zatímco stav m = -1 nižší

energii než v centru. Vyladíme-li lasery na frekvenci o něco nižší, než je rezonanční frekvence pro atomový přechod, bude takový atom přednostně absorbovat fotony svazku  $\sigma^-$ a v důsledku předaného impulsu na něj tedy bude působit síla vracející jej do středu pasti. Výhodou MOT pastí je, že laserové záření současně s věznícím efektem atomy chladí.

#### 9.2.2 Laserové chlazení

Základní technikou, která byla prvním krokem k dosažení BEC v atomových plynech, je laserové chlazení (angl. *laser cooling*), tedy chlazení pomocí laserových svazků. Za jeho rozvoj získali v roce 1997 Chu, Cohen-Tannoudji a Phillips Nobelovu cenu. Fyzikální podstatou je Dopplerův jev, díky němuž atomy plynu ozá-

řeného laserovým svazkem pohybující se v různých směrech cítí různou frekvenci světla. Hlavní myšlenku lze shrnout do jedné věty: vyladíme-li laser mírně pod frekvenci atomového přechodu, budou atomy letící proti laserovému svazku v rezonanci a budou tím pádem absorbovat fotony s větší pravděpodobností než atomy letící od něj. Namíříme-li dva svazky proti sobě tak, aby celková hybnost předaná plynu byla nulová, bude důsledkem snižování kinetické energie atomů plynu, tedy jeho chlazení.

Pro zjednodušený kvantitativní popis laserového chlazení předpokládejme, že počet fotonů z jednoho laserového zdroje o frekvenci  $\omega = kc$  absorbovaných za jednotku času atomy v klidu je dán funkcí  $\rho(\omega)$ . Ta je jednak úměrná spektrálnímu profilu atomového přechodu a dále samozřejmě závisí na intenzitě laserového svazku a hustotě plynu. Atom, jehož složka rychlosti podél osy x je  $v_x$ , bude absorbovat foton přicházející zprava s pravděpodobností  $\rho(\omega + kv_x)$  za jednotku času, a foton přicházející zleva s pravděpodobností  $\rho(\omega - kv_x)$ . Změna čtverce x-ové složky hybnosti plynu za jednotku času bude

$$\frac{dp_{\rm x}^2}{dt} = \left[ (p_{\rm x} - \hbar k)^2 - p_{\rm x}^2 \right] \rho(\omega + kv_{\rm x}) + \left[ (p_{\rm x} + \hbar k)^2 - p_{\rm x}^2 \right] \rho(\omega - kv_{\rm x}) \approx \\ \approx 2\hbar^2 k^2 \rho(\omega) - 4p_{\rm x} v_{\rm x} \hbar k^2 \rho'(\omega) .$$
(9.5)

Přibližná rovnost zde platí za předpokladu, že se funkce  $\rho(\omega)$  na intervalu ( $\omega - kv_x, \omega + kv_x$ ) mění zvolna, tedy že dopplerovský posuv je mnohem menší než šířka spektrální čáry. Abychom snížili rychlost atomů v plynu současně ve všech třech směrech, můžeme jej ozářit třemi páry navzájem kolmých laserových svazků, čímž pro časovou změnu kinetické energie  $E_K$  plynu vyvolanou absorpcí záření dostaneme

$$\frac{dE_{\rm K}^{\rm abs}}{dt} = \frac{1}{2m} \left( \frac{dp_x^2}{dt} + \frac{dp_y^2}{dt} + \frac{dp_z^2}{dt} \right) = \frac{3\hbar^2 k^2}{m} \rho(\omega) - \frac{4\hbar k^2}{m} E_{\rm K} \rho'(\omega) . \tag{9.6}$$

Druhý člen přesně odpovídá našemu kvalitativnímu náhledu na proces chlazení, zatímco první člen je nezávislý na rychlosti atomů a popisuje nárůst kinetické energie atomů vyvolaný zákonem zachování hybnosti při absorpci fotonů. Již odtud je jasné, že dopplerovské chlazení bude efektivní jen nad určitou limitní hodnotou kinetické energie a tedy i teploty. Musíme však ještě zahrnout zpětnou emisi fotonů. Po čase odpovídajícím době života excitovaného stavu jsou fotony opět vyzářeny, čímž atomům dodávají kinetickou energii zpětného rázu. Tento proces probíhá náhodně ve všech směrech a přispívá k ohřívání plynu. Uvážíme-li atom s hybností p, potom po emisi fotonu s hybností k bude mít kinetickou energii  $(p - \hbar k)^2/2m$ . Po vystředování přes směry k zjistíme, že jeho kinetická energie v průměru vzrostla o  $\hbar^2 k^2/2m$ . Jelikož na plyn svítí celkem šest laserů, bude přírůstek kinetické energie za jednotku času způsobený reemisí fotonů roven  $dE_{\rm K}^{\rm em}/dt = 3\rho(\omega)\hbar^2k^2/m$ . Spolu s rovnicí (9.6) tak dostaneme celkovou časovou změnu kinetické energie

$$\frac{dE_{\rm K}^{\rm abs}}{dt} + \frac{dE_{\rm K}^{\rm em}}{dt} = \frac{6\hbar^2 k^2}{m}\rho(\omega) - \frac{4\hbar k^2}{m}E_{\rm K}\rho'(\omega) . \qquad (9.7)$$

Odtud plyne limitní dosažitelná hodnota kinetické energie  $E_{\rm K} = 3\hbar\rho(\omega)/2\rho'(\omega)$ . Uvážíme-li, že podle ekvipartičního teorému souvisí kinetická energie s teplotou vztahem  $E_{\rm K} = 3k_{\rm B}T/2$ , dostaneme okamžitě výsledek pro limitní teplotu dopplerovského chlazení,

$$k_{\rm B}T_{\rm min} = \hbar \frac{\rho(\omega)}{\rho'(\omega)} . \qquad (9.8)$$

Všimněme si, že v poměru v (9.8) se vyruší závislost na intenzitě laserového svazku i hustotě atomů. Minimální teplota dosažitelná dopplerovským chlazením závisí pouze na profilu rezonanční spektrální čáry a frekvenci laseru! Popíšeme-li tvar spektrální čáry obvyklým Breitovým–Wignerovým profilem,  $\rho(\omega) \sim 1/[(\omega - \omega_r)^2 + (\Gamma/2)^2]$ , kde  $\omega_r$  je rezonanční frekvence a  $\Gamma$  pološířka čáry, vyjde nám prostým dosazením

$$k_{\rm B}T_{\rm min} = -\frac{\hbar}{2\delta} \left[ \delta^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2 \right] \,. \tag{9.9}$$

Zavedli jsme obvyklé značení pro rozladění laseru<sup>2</sup> (angl. detuning) vůči rezonanční frekvenci  $\delta = \omega - \omega_{\rm r}$ . Minimalizací tohoto výrazu vůči  $\delta$  zjistíme, že optimální hodnotou je  $\delta = \Gamma/2$ , pročež  $k_{\rm B}T_{\rm min} = \hbar\Gamma/2$ . Účinnost dopplerovského chlazení je tedy limitována intrinsickou šířkou spektrální čáry odpovídající rezonančnímu přechodu.

Nahlédnutím do spektroskopických tabulek zjistíme, že právě odvozená limitní teplota pro dopplerovské chlazení je řádově stovky mikrokelvinů, tedy stále příliš vysoká pro dosažení BEC. Snížení teploty o další dva až tři řády lze docílit sofistikovanějším použitím lineárně polarizovaných laserových svazků, tzv. sisyfovským chlazením (angl. Sisyfos cooling). Podrobná diskuze přesahuje rámec tohoto textu, zmíníme se tedy alespoň stručně o základní myšlence. Důležitá je skutečnost, že základní stav alkalických atomů obsahuje kvůli jadernému a elektronovému spinu více podstavů,



Obr. 9.4: Základní schéma sisyfovského chlazení.

jež jsou za nepřítomnosti elektromagnetického pole degenerované. Složením dvou protijdoucích laserových svazků s kolmými rovinami polarizace dostaneme pole, jehož polarizace se mění s polohou z lineární na kruhovou a zpět. Působením tohoto

 $<sup>^2 {\</sup>rm Jak}$ již bylo řečeno, aby došlo k ochlazení plynu, rozladění musí být záporné.

pole lze atomy excitovat na vyšší energetické hladiny, přičemž různým spinovým podstavům budou odpovídat různé pravděpodobnosti přechodu do excitovaných stavů. Poruchovým započtením virtuální excitace a zpětné relaxace získají podstavy základního stavu periodicky proměnný potenciál, znázorněný schematicky na obrázku 9.4. Atom v daném podstavu bude v místě, v němž je jeho potenciální energie maximální, přednostně excitován na vyšší hladinu, z níž bude relaxovat vyzářením fotonu do podstavu s nižší potenciální energií. Opakováním tohoto procesu bude atom trvale ztrácet energii, již odnesou vyzářené fotony. Účinnost sisyfovského chlazení je omezena energií zpětného rázu při emisi fotonu o frekvenci $\omega$ ,  $E_{\rm recoil} = \hbar^2 \omega^2 / 2mc^2$ .

Konečného ochlazení na teploty, při nichž již dochází k BEC, se však v experimentech dosahuje metodou chlazení vypařováním, která je z hlediska chlazení atomů uvězněných v magnetické pasti vysoce účinná. Z obláčku plynu se odstraní nejrychlejší atomy, čímž se sníží průměrná kinetická energie a dojde k jeho ochlazení. Odstranění se provádí radiofrekvenčním polem: pomocí Dopplerova jevu je jeho frekvence vyladěna do rezonance právě s nejrychlejšími atomy. Toto pole překlopí spin atomů do stavu s opačným magnetickým momentem, pro nějž magnetická past nepředstavuje potenciálovou jámu, ale vrchol, a atomy jsou následně z pasti vypuzeny pryč. Z právě popsaného principu je zřejmé, že při chlazení vypařováním dochází k úbytku atomů z pasti. Aby byl co nejmenší, je třeba v každém kroku odstranit jen zlomek atomů o rychlostech značně přesahujících průměr. Tím ale narůstá doba chlazení, což se může negativně projevit ztrátou atomů z pasti jinými procesy, například neelastickým rozptylem. Je tedy třeba zvolit rychlost vypařování tak, aby úbytek atomů při daném poklesu teploty byl co nejnižší. Podrobnější teorie této metody je vyložena například v monografii [4].

#### 9.2.3 Detekce

Zatím jsme se zabývali výlučně experimentálními technikami, pomocí nichž se připravují vzorky pro samotné studium fyzikálních vlastností řídkých atomových plynů. Neméně důležitou součástí experimentu je samozřejmě vlastní měření. Základním nástrojem pro zkoumání statických vlastností uvězněného plynu je absorpční zobrazení (angl. absorptive imaging). Při něm je obláček ozářen laserovým pulsem vyladěným na frekvenci rezonančního přechodu v atomech a prošlé světlo je soustavou čoček nasměrováno do CCD kamery. Intenzita prošlého záření závisí na množství hmoty, kterou svazek prošel, takže je možno v principu přímo opticky měřit rozdělení hustoty částic v pasti. Jelikož však jde o promítnutí obláčku do dvojrozměrné plochy, nejedná se o skutečnou trojrozměrnou hustotu částic, ale o hustotu integrovanou podél směru zobrazovacího laserového svazku, neboli sloupcovou hustotu (angl. column density). Lepšího prostorového rozlišení je možné dosáhnout tím, že se před absorpčním měřením nejprve vypne věznící potenciál a obláček se nechá po nějakou dobu samovolně rozpínat. Změřené rozdělení hustoty pak závisí nejen na počátečním rozdělení hustoty, ale také na rozdělení rychlostí. Opakováním měření tak lze získat informace o dynamice systému.

V případě absorpčního zobrazení dojde při záchytu fotonů k zahřátí plynu a následné destrukci detekovaného kvantového stavu. Pro právě zmíněné opako-
vané měření je tedy třeba vždy připravit nový vzorek. Alternativním postupem je interferenční zobrazení (angl. *phase-contrast imaging*). To využívá faktu, že hustota částic ovlivňuje index lomu plynu jako optického prostředí. Interferencí svazku (s frekvencí dostatečně daleko od rezonance, aby nedocházelo ke ztrátám absorpcí) prošlého obláčkem a referenčního svazku je tak možné získat Fourierův obraz sloupcového rozdělení hustoty. Tato metoda je nedestruktivní a lze pomocí ní sledovat vývoj obláčku v čase. To hraje důležitou roli mimo jiné při studiu excitací kondenzátu.

Časově závislým měřením lze také získat přímou informaci o mezičásticových interakcích. Po vypnutí věznícího potenciálu a následném rozpínání obláčku se totiž zachovává součet kinetické a interakční energie. Po dostatečně dlouhém čase se bude obláček rozpínat prakticky konstantní rychlostí a integrací změřeného rozdělení rychlostí tak stanovíme celkovou energii. Energii ve věznícím potenciálu lze naopak nalézt přímým změřením rozdělení hustoty před vypnutím pasti. Z viriálového teorému (9.43) pak okamžitě dostaneme kinetickou a interakční složku celkové energie. Přesné měření rozdělení hybností se také používá ke stanovení teploty ultrachladných plynů, a to fitem předpovědi Boseova či Fermiho rozdělení na změřenou distribuci.

# 9.3 Neinteragující bosony v pasti

Ačkoli meziatomové interakce hrají zásadní roli při vzniku supratekutého stavu, základní vlastnosti plynů uvězněných v pasti lze pochopit i při jejich zanedbání. Podíváme se tedy nyní trochu blíže na termodynamiku neinteragujících plynů s pomocí stejného postupu jako v úvodní kapitole, zobecněného na případ nehomogenních systémů ve vnějším potenciálu.

## 9.3.1 Hustota stavů

Připomeňme, že statistické vlastnosti bosonového systému jsou definované Boseovým–Einsteinovým rozdělením. Střední hodnotu libovolné pozorovatelné veličiny  $\mathcal{A}$ , závisející jen na energii, spočteme jako

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \sum_{i} \frac{\mathcal{A}(\varepsilon_{i})}{e^{\beta(\varepsilon_{i}-\mu)}-1} ,$$
 (9.10)

kde sčítáme přes všechny vlastní stavy hamiltoniánu. V úvodní kapitole jsme viděli, že pokud je charakteristická tepelná energie  $k_{\rm B}T$  mnohem větší než vzdálenost sousedních energetických hladin, můžeme sumu obecně nahradit integrálem přes energie, který zahrnuje všechny excitované stavy kromě případného stavu s makroskopickým obsazením, tj. kondenzátu,

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\varepsilon > 0} = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\mathcal{A}(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon - \mu)} - 1}$$
 (9.11)

Funkce  $D(\varepsilon)$  je hustotou stavů. Představuje v podstatě jakobián transformace integrační proměnné od indexu i v sumě k energii  $\varepsilon$ . Pro volnou částici v trojrozměrném prostoru víme, že  $D(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$ .

Vraťme se nyní k nejběžnějšímu typu pasti, kterou lze v dobrém přiblížení popsat anizotropním harmonickým potenciálem

$$V(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}m(\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) .$$
(9.12)

Jaká je v tomto případě hustota stavů? Energie stavu, definovaného trojicí obsazovacích čísel  $n_1, n_2, n_3$ , je  $\varepsilon_{n_1 n_2 n_3} = \hbar \omega_1 (n_1 + \frac{1}{2}) + \hbar \omega_2 (n_2 + \frac{1}{2}) + \hbar \omega_3 (n_3 + \frac{1}{2})$ . Pro lineární harmonický oscilátor bychom nahradili sumu přes obsazovací čísla dle vztahu  $\sum_n \rightarrow \frac{1}{\hbar \omega} \int d\varepsilon$ . V této aproximaci můžeme současně zanedbat energii základního stavu a integrovat přes energie od nuly. Pro trojrozměrný oscilátor tedy bude analogicky

$$\sum_{n_1 n_2 n_3} \to \frac{1}{\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} \int d\varepsilon_1 d\varepsilon_2 d\varepsilon_3 , \qquad (9.13)$$

kde  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$  jsou energie jednotlivých nezávislých lineárních oscilátorů. Zbývá už jen převést tento trojrozměrný integrál na integrál přes celkovou energii  $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3$ . Nejprve přidáme jednotku ve tvaru  $1 = \int d\varepsilon \, \delta(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon)$ . Následně přehodíme pořadí integrací; integrál přes  $\varepsilon_3$  je triviální díky  $\delta$ -funkci a integrál přes  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$  je roven obsahu plochy omezené nerovnostmi  $\varepsilon_1 \ge 0, \varepsilon_2 \ge 0, \varepsilon_1 + \varepsilon_2 \le \varepsilon$ , tedy  $\varepsilon^2/2$ . Hustota stavů trojrozměrného izotropního oscilátoru je tedy dána vztahem

$$D(\varepsilon) = \frac{\varepsilon^2}{2\hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3} . \tag{9.14}$$

Všimněme si, že stejně jako v případě volných částic má hustota stavů tvar mocniny:

$$D(\varepsilon) = c_{\kappa} \varepsilon^{\kappa - 1}. \tag{9.15}$$

Tento vztah zahrnuje širokou škálu systémů a vyplatí se tedy dál postupovat obecně. Nejprve se ale ještě zmíníme o některých dalších konkrétních příkladech. V případě harmonického oscilátoru jsme měli štěstí, protože jeho spektrum umíme snadno najít exaktně a hustotu stavů tak spočítat explicitně úpravou sumy přes vlastní stavy hamiltoniánu. Jak ale postupovat v situaci, kdy spektrum hamiltoniánu přesně neznáme? Zde můžeme využít semiklasickou aproximaci, která je rozumným přiblížením právě v námi uvažovaném případě, kdy tepelná energie je mnohem větší než vzdálenost sousedních energetických hladin a diskrétní strukturu spektra lze proto zanedbat. V základním kurzu statistické fyziky jsme se dozvěděli, že pro systém v n (prostorových) dimenzích se počet stavů v infinitezimální oblasti fázového prostoru rovná  $d^n x d^n p/(2\pi\hbar)^n$ . Formuli (9.10) tak bude odpovídat semiklasický vztah

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{\varepsilon > 0} = \int \frac{d^n \boldsymbol{x} \, d^n \boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^n} \frac{\mathcal{A}[\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})]}{e^{\beta[\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) - \mu]} - 1} \,. \tag{9.16}$$

V souladu s definicí (9.11) je  $D(\varepsilon) d\varepsilon$ rovno počtu stavů v oblasti fázového prostoru vymezené energiemi  $\varepsilon$  a  $\varepsilon + d\varepsilon$ . Hustotu stavů tedy určíme jako  $D(\varepsilon) = \Omega'(\varepsilon)$ , kde

$$\Omega(\varepsilon_0) = \int_{\varepsilon < \varepsilon_0} \frac{d^n \boldsymbol{x} \, d^n \boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^n} \tag{9.17}$$

je objem oblasti stavů s energií nižší než  $\varepsilon_0$ , vydělený  $(2\pi\hbar)^n$ .

Pro volnou částici po drobných úpravách vyjde  $\Omega(\varepsilon) = V \Xi_n (2m\varepsilon)^{n/2} / (2\pi\hbar)^n$ , kde  $\Xi_n = 2\pi^{n/2} / n\Gamma(\frac{n}{2})$  je objem jednotkové koule v *n* dimenzích. Je tedy  $\kappa = n/2$ a

$$c_{\kappa} = \frac{V}{\Gamma(\frac{n}{2})} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{n/2}.$$
(9.18)

Kromě toho, že jsme takto jiným způsobem odvodili vztah (1.35), poznamenejme dopředu zajímavý fakt, že pro ideální plyn ve dvou dimenzích je  $\kappa = 1$ . Integrál (9.21) tudíž diverguje, což znamená, že do excitovaných stavů je možné při jakékoli nenulové teplotě umístit libovolně vysoký počet částic. V homogenním dvojrozměrném plynu tedy nedochází k BEC.

Pro *n*-rozměrný oscilátor s frekvencemi  $\omega_1, \ldots, \omega_n$  je  $\Omega(\varepsilon)$  rovno objemu asymetrického elipsoidu s poloosami  $\sqrt{2m\varepsilon}$  (pro souřadnicové osy) a  $\sqrt{2\varepsilon/m\omega_i^2}$  (pro impulsové osy), odkud dostaneme

$$\Omega(\varepsilon) = \frac{\Xi_{2n}}{(2\pi\hbar)^n} \frac{(2\varepsilon)^n}{\omega_1 \dots \omega_n} = \frac{1}{n!} \left(\frac{\varepsilon}{\hbar}\right)^n \frac{1}{\omega_1 \dots \omega_n} .$$
(9.19)

Speciálním případem pro n = 3 je náš dříve odvozený vztah (9.14). Harmonický potenciál není nejobecnějším typem potenciálu, s nímž se u atomových plynů můžeme setkat. Některé typy magnetických pastí například dávají potenciál rostoucí lineárně se vzdáleností od středu. Již jen bez podrobností dodejme, že hustotu stavů lze analogicky spočítat pro centrální potenciál tvaru  $V(\boldsymbol{x}) = a|\boldsymbol{x}|^{\gamma}$ . Obecný výsledek zní

$$\kappa = \frac{n}{2} + \frac{n}{\gamma}, \quad c_{\kappa} = \frac{2}{\gamma} \left(\frac{m}{2a^{2/\gamma}\hbar^2}\right)^{n/2} \frac{\Gamma(\frac{n}{\gamma})}{\Gamma(\frac{n}{2})\Gamma(\frac{n}{2} + \frac{n}{\gamma})} . \tag{9.20}$$

## 9.3.2 Základní termodynamické vlastnosti

Ve fázi ${\rm BEC}$  je chemický potenciál nulový a počet částic v excitovaných stavech je dán vztahem

$$N_{T < T_{c}, \varepsilon > 0} = \int_{0}^{\infty} d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)}{e^{\beta \varepsilon} - 1} = c_{\kappa} \int_{0}^{\infty} d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\kappa - 1}}{e^{\beta \varepsilon} - 1} = c_{\kappa} (k_{\rm B} T)^{\kappa} \Gamma(\kappa) \zeta(\kappa) .$$
(9.21)

Kritická teplota je dána podmínkou, že základní stav není makroskopicky obsazen, tj.  $N_{\varepsilon>0}=N,$ odkud okamžitě plyne

$$k_{\rm B}T_{\rm c} = \left[\frac{N}{c_{\kappa}\Gamma(\kappa)\zeta(\kappa)}\right]^{1/\kappa}.$$
(9.22)

Pro izotropní harmonický oscilátor bude podle (9.14)  $\kappa = 3$  a  $c_{\kappa} = 1/2\hbar^3 \omega^3$ , neboli  $k_{\rm B}T_{\rm c} = \hbar\omega N^{1/3}/[\zeta(3)]^{1/3} \approx 0.94\hbar\omega N^{1/3}$ , což je velmi blízko našemu hrubému odhadu (9.3).

Pod kritickou teplotou obsadí určitá konečná část atomů základní stav. Integrál (9.21) je pak evidentně roven  $N(T/T_c)^{\kappa}$ , neboli

$$N_{T < T_c, \varepsilon = 0} = N \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{\kappa} \right] .$$
(9.23)

To je v souhlasu se vztahem (1.47), odvozeným v první kapitole pro neinteragující plyn ve třech dimenzích, jelikož v tomto případě  $D(\varepsilon) \sim \sqrt{\varepsilon}$ , a tedy  $\kappa = 3/2$ . Energii základního stavu jsme položili rovnu nule, celková energie systému pod kritickou teplotou tedy bude dána čistě integrálem přes excitované stavy,

$$E_{T < T_{\rm c}} = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon D(\varepsilon)}{e^{\beta \varepsilon} - 1} = c_\kappa (k_{\rm B}T)^{\kappa + 1} \Gamma(\kappa + 1) \zeta(\kappa + 1) .$$
(9.24)

Zdůrazněme, že ve fázi BEC energie, a tedy ani odvozené veličiny jako tepelná kapacita či entropie, nezávisí na celkovém počtu částic! Důvod je opět ten, že částice v základním stavu mají nulovou energii, takže nemají na (rovnovážnou) termodynamiku žádný vliv. S použitím vztahu (9.21) ovšem můžeme z formule pro energii eliminovat neznámou konstantu  $c_{\kappa}$ , čímž získáme pro energii a tepelnou kapacitu,  $C = \partial E / \partial T$ ,

$$E = \kappa \frac{\zeta(\kappa+1)}{\zeta(\kappa)} N k_{\rm B} T \left(\frac{T}{T_{\rm c}}\right)^{\kappa} , \quad C = \kappa(\kappa+1) \frac{\zeta(\kappa+1)}{\zeta(\kappa)} N k_{\rm B} \left(\frac{T}{T_{\rm c}}\right)^{\kappa} . \tag{9.25}$$

Potud je naše diskuze přímočarým zobecněním analýzy neinteragujícího plynu. Nicméně detailní chování systému v okolí fázového přechodu závisí na exponentu  $\kappa$ . Pro ideální plyn ve třech dimenzích zde má tepelná kapacita nespojitou derivaci. Jak ale vzápětí uvidíme, v případě plynu uvězněného v harmonické pasti má už samotná tepelná kapacita v kritickém bodě konečný skok. Začneme tím, že si napíšeme výrazy pro celkovou energii a počet částic nad kritickou teplotou

$$E_{T>T_{\rm c}} = c_{\kappa} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\kappa}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1}, \quad N_{T>T_{\rm c}} = c_{\kappa} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon^{\kappa-1}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} - 1} . \tag{9.26}$$

Derivováním prvního integrálu podle chemického potenciálu a upravením per partes získáme  $(\partial E / \partial \mu)_{\rm T} = \kappa N$ . Stejně jako v případě formule (1.59) v úvodní kapitole tak bude o chování tepelné kapacity v blízkosti kritické teploty rozhodovat příspěvek k energii  $\kappa N \mu$ .

Předpokládejme nejprve, že $\kappa < 2.$  Použitím rozvoje analogického rovnici (1.55) v úvodní kapitole obdržíme

$$N - c_{\kappa} \Gamma(\kappa) \zeta(\kappa) (k_{\rm B} T)^{\kappa} \approx -\frac{\pi}{\sin \pi (\kappa - 1)} c_{\kappa} k_{\rm B} T |\mu|^{\kappa - 1} .$$
(9.27)

Zvídavému čtenáři, který by toužil si tento výsledek sám odvodit, doporučujeme použít užitečnou formulku [5]

$$\int_0^\infty dt \, \frac{t^{z-1}}{1+t} = \Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{z}{\sin \pi z} \,. \tag{9.28}$$

Odtud vidíme, že těsně nad kritickou teplotou se chemický potenciál a jeho derivace škálují jako

$$\mu \sim (T - T_{\rm c})^{\frac{1}{\kappa - 1}}, \quad \frac{\partial \mu}{\partial T} \sim (T - T_{\rm c})^{\frac{2 - \kappa}{\kappa - 1}}, \quad \frac{\partial^2 \mu}{\partial T^2} \sim (T - T_{\rm c})^{\frac{3 - 2\kappa}{\kappa - 1}}, \tag{9.29}$$

a můžeme uzavřít, že pro  $1 < \kappa < 2$  (pro  $\kappa \leq 1$  vůbec nedojde k BEC!) je první derivace chemického potenciálu, a tedy i tepelná kapacita, spojitá v  $T = T_c$ . Náš dřívější výsledek (1.59) pro konečný skok derivace tepelné kapacity je však partikulární pro ideální homogenní plyn ve třech dimenzích, kdy  $\kappa = 3/2$ : pro  $1 < \kappa < 3/2$  tento skok vymizí, zatímco pro  $3/2 < \kappa < 2$  je nekonečný!

Co se stane, když  $\kappa > 2$ , jako například pro plyn v trojrozměrné harmonické pasti? Zde aproximaci (9.27) nelze použít a musíme postupovat jinak. Použitím známé identity pro parciální derivaci implicitní funkce dostaneme pro *skok v tepelné kapacitě* 

$$\Delta C = \kappa N \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{T_c +} = -\kappa N \left(\frac{\partial N}{\partial T}\right)_{\mu}^{-1} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T} . \tag{9.30}$$

Obě parciální derivace opět spočteme aplikací integrace per partes na (9.26). Konečný výsledek je

$$\Delta C = -\kappa^2 \frac{\zeta(\kappa)}{\zeta(\kappa-1)} N k_{\rm B} , \qquad (9.31)$$

takže pro $\kappa>2$ má tepelná kapacita v kritickém bodě skutečně konečný skok.

## 9.3.3 Rozdělení hustoty a rychlosti

Vraťme se ještě na závěr diskuze neinteragujících plynů k úvaze, kterou jsme letmo zmínili již v úvodu kapitoly, týkající se rozdělení hustoty částic v harmonické pasti. Jak už jsme také uvedli, v experimentech se neměří přímo distribuce částic v pasti, ale z důvodu prostorového rozlišení se nejprve věznící potenciál vypne, načež se sleduje rozpínání obláčku s časem. To historicky poskytlo jednu z klíčových indicií, že v uvězněném plynu dochází k BEC. Pro popis rozpínání obláčku je důležité znát nejen rozdělení hustoty částic před vypnutím potenciálu, ale i rozdělení rychlostí. Podívejme se tedy na dva limitní případy, pro něž lze tato rozdělení snadno spočítat: nulová teplota a teplota dostatečně vysoko nad  $T_c$ .

V prvním případě už víme, že rozdělení částic bude dáno vlnovou funkcí základního stavu harmonického oscilátoru. Zobecněním vztahu (9.1) pro anizotropní potenciál dostaneme

$$n_{T=0}(\boldsymbol{x}) = N\left(\frac{m^{3}\omega_{1}\omega_{2}\omega_{3}}{\pi^{3}\hbar^{3}}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m}{\hbar}(\omega_{1}x^{2} + \omega_{2}y^{2} + \omega_{3}z^{2})\right] , \qquad (9.32)$$

a odpovídající rozdělení hybností je prostě Fourierovou transformací,

$$n_{T=0}(\boldsymbol{p}) = N\left(\frac{1}{\pi^3 m^3 \hbar^3 \omega_1 \omega_2 \omega_3}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{m\hbar}\left(\frac{p_x^2}{\omega_1} + \frac{p_y^2}{\omega_2} + \frac{p_z^2}{\omega_3}\right)\right] .$$
(9.33)

V druhém případě předpokládáme, že teplota je dostatečně vysoká na to, abychom mohli použít klasické Boltzmannovo rozdělení. To odpovídá rozdělovací funkci ve fázovém prostoru úměrné  $\exp[-\beta\varepsilon(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p})]$  s klasickou energií  $\varepsilon(\boldsymbol{x},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_1^2x^2 + \omega_2^2y^2 + \omega_3^2z^2)$ . Podstatnou vlastností tohoto rozdělení je faktorizace: je součinem nezávislých distribučních funkcí pro polohu a hybnost<sup>3</sup>. Rozdělení hustoty resp. rychlostí tedy získáme triviální integrací přes hybnosti, resp. souřadnice,

$$n_{T>T_{c}}(\boldsymbol{x}) = N\left(\frac{m}{2\pi k_{\rm B}T}\right)^{3/2} \omega_{1}\omega_{2}\omega_{3} \exp\left[-\frac{m}{2k_{\rm B}T}(\omega_{1}^{2}x^{2} + \omega_{2}^{2}y^{2} + \omega_{3}^{2}z^{2})\right] , (9.34)$$
$$n_{T>T_{c}}(\boldsymbol{p}) = N\frac{1}{(2\pi m k_{\rm B}T)^{3/2}} \exp\left(-\frac{\boldsymbol{p}^{2}}{2m k_{\rm B}T}\right) . (9.35)$$

Vidíme, že rozdělení hustoty je v obou případech anizotropní a odpovídá asymetrii potenciálu pasti. Šířka rozdělení v základním stavu je  $\sqrt{\hbar/m\omega_i}$ , zatímco poloměr termálního obláčku je  $\sqrt{k_BT/m\omega_i^2}$ . Termální rozdělení je tedy mnohem širší (vzpomeňte na (9.3), odkud plyne  $k_BT_c \gg \hbar\omega$ , neboť počet atomů v pasti N je typicky  $10^4 - 10^7$ ) a vznik kondenzátu pod kritickou teplotou se projeví úzkým píkem distribuce hustoty kolem středu pasti. Ještě výraznější je rozdíl v distribučních funkcích pro hybnost. Základní stav harmonického oscilátoru má rozdělení asymetrické s převrácenými poměry šířek než souřadnice, ve shodě s relacemi neurčitosti. Na druhou stranu, rozdělení rychlostí v termálním obláčku je zcela izotropní. Vypneme-li tedy věznící potenciál, bude termální obláček po určitém čase sféricky symetrický bez ohledu na počáteční asymetrii. Přítomnost kondenzátu v pasti se po dostatečně dlouhém čase rozpínání projeví eliptickým tvarem obláčku s opačnou asymetrií, než má potenciál.

# 9.4 Interagující bosony v pasti

Řadu kvalitativních vlastností bosonových plynů lze jednoduše popsat zanedbáním interakcí. Nicméně existuje množství fyzikálních, kolektivních jevů, pro jejichž vznik jsou interakce zásadní. Jak jsme zdůraznili v úvodní kapitole: bez interakce není supratekutosti! Již tam jsme rozvinuli základní technický aparát pro mikroskopický popis neideálního homogenního Boseova plynu. Zde se soustředíme na zobecnění některých výsledků na případ systému ve vnějším potenciálu. Naše ambice však nesahají k úplné mikroskopické teorii; spokojíme se s fenomenologickým popisem, platným za určitých, dobře definovaných zjednodušujících předpokladů.

# 9.4.1 Grossova–Pitajevského rovnice

Protože plyn ve vnějším potenciálu není homogenní, nemůžeme již pracovat s anihilačními a kreačními operátory v impulsové reprezentaci, ale musíme se vrátit k operátoru pole,  $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ . Za přítomnosti vnějšího potenciálu  $U(\boldsymbol{x})$  a pro kontaktní dvoučásticovou interakci,  $V(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = g\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')$ , nabude hamiltonián (1.12) tvar

$$\hat{H} = \int d^3 \boldsymbol{x} \left\{ \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \left[ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + U(\boldsymbol{x}) \right] \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} g \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \right\} .$$
(9.36)

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>To by neplatilo, kdybychom použili Boseho–Einsteinovo rozdělení v semiklasické aproximaci!

Bogoliubovova teorie předpokládá, že většina částic se nachází v jednom kvantovém stavu, kondenzátu, a technicky tento předpoklad implementuje posunutím  $\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \psi(\boldsymbol{x}) + \delta \hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ , kde  $\psi(\boldsymbol{x})$  (bez stříšky) je vlnová funkce kondenzátu, zatímco operátor  $\delta \hat{\psi}(\boldsymbol{x})$  představuje excitované stavy. Zde půjdeme ještě dál a příspěvek excitovaných stavů zcela zanedbáme. Jinými slovy, energie systému bude funkcionálem klasické vlnové funkce  $\psi(\boldsymbol{x})$ . Jednoduchou integrací per partes můžeme hamiltonián (9.36) přepsat jako funkcionál energie,

$$E[\psi] = \int d^3 \boldsymbol{x} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi(\boldsymbol{x})|^2 + U(\boldsymbol{x}) |\psi(\boldsymbol{x})|^2 + \frac{1}{2} g |\psi(\boldsymbol{x})|^4 \right] , \qquad (9.37)$$

a problém nalezení základního stavu formulovat jako variační úlohu: je třeba minimalizovat funkcionál $E[\psi]$  pro předem daný počet částic, tj. s podmínkou

$$N = \int d^3 \boldsymbol{x} \, |\psi(\boldsymbol{x})|^2. \tag{9.38}$$

Na tomto místě je vhodné učinit několik komentářů. Za prvé, výraz  $|\psi(\boldsymbol{x})|^2$  má evidentně význam (lokální) hustoty částic, neboť je klasickým přiblížením operátoru  $\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ . Za druhé, jednotlivé tři členy přispívající do celkové energie (9.37) mají zřejmou intuitivní interpretaci: kinetická energie kondenzátu (tj. energie související s jeho prostorovou variací), energie kondenzátu ve vnějším poli, a konečně interakční energie (hustota částic na druhou krát vazbová konstanta). Za třetí, nahrazení meziatomového potenciálu konstantou je oprávněné při dostatečně nízkých energiích; z teorie rozptylu je známo, že dominantní příspěvek do účinného průřezu pak pochází od *s*-vlny a je úplně charakterizovaný rozptylovou délkou *a*. Můžeme tedy pracovat s *efektivní interakcí g* $\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')$  s tím, že

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} . \tag{9.39}$$

Variační úlohu (9.37) s vazbou (9.38) řešíme standardně zavedením Lagrangeova multiplikátoru,  $\mu$ , načež podmínka na minimum energie nabude tvar

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\boldsymbol{x}) + U(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) + g|\psi(\boldsymbol{x})|^2 \psi(\boldsymbol{x}) = \mu \psi(\boldsymbol{x}) , \qquad (9.40)$$

což je tzv. Grossova–Pitajevského (GP) rovnice. Jelikož tato rovnice je důsledkem minimalizace funkcionálu  $E[\psi] - \mu N[\psi]$ , má multiplikátor  $\mu$  zřejmě význam chemického potenciálu. Jak plyne z odvození, GP teorie se opírá o dva základní předpoklady, které neuškodí zopakovat:

 Předpokládáme nulovou teplotu. Při nenulové teplotě bychom museli vzít v úvahu termální excitace nad kondenzátem, jak činí Bogoliubovova teorie. I ta však předpokládá, že většina částic se nachází v kondenzátu, a její platnost je tedy omezena na teploty mnohem nižší než kritická teplota.  Předpokládáme, že všechny částice se nacházejí v kondenzátu, neboli zanedbáváme excitace, ať už konečnou teplotou či vzájemnou interakcí.

Platnost druhého předpokladu můžeme v praxi otestovat pomocí výsledku (1.93) Bogoliubovovy teorie pro ochuzení kondenzátu v důsledku dvoučásticových interakcí. Přepíšeme-li ho do tvaru

$$\frac{N - N_0}{N} = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{na^3} , \qquad (9.41)$$

vidíme, že ochuzení bude malé v případě, že rozptylová délka je mnohem menší než meziatomová vzdálenost v plynu. V drtivé většině současných experimentů (s výjimkou případů, v nichž je interakce speciálně vyladěná pomocí Feshbachovy rezonance) dosahuje ochuzení kondenzátu při nulové teplotě nanejvýš jednotek procent, a tudíž GP teorie poskytuje kvantitativně spolehlivý popis BEC.

Z hlediska kvantové teorie mnohočásticových systémů je fyzikální obsah GP teorie také intuitivně jasný. Předpokládáme, že všechny částice se nacházejí ve stejném jednočásticovém stavu, popsaném vlnovou funkcí  $\psi(\boldsymbol{x})$ . Původní komplikovaný mnohočásticový problém se tak redukuje na jednočásticovou úlohu pro pohyb ve vnějším potenciálu  $U(\boldsymbol{x})$  a středním poli  $gn(\boldsymbol{x}) = g|\psi(\boldsymbol{x})|^2$ . Je užitečné všimnout si, že při absenci dvoučásticových interakcí, tj. g = 0, je variační problém (9.37) exaktně ekvivalentní nalezení základního stavu jednočásticového hamiltoniánu ve vnějším poli  $U(\boldsymbol{x})$ .

#### 9.4.2 Viriální teorém a energetické škály

Tři příspěvky do celkové energie (9.37) budeme značit  $E_{\rm kin}, E_{\rm past}, E_{\rm int}$ . Jejich vzájemné hodnoty pro řešení GP rovnice jsou svázány viriálním teorémem, jehož odvození zde naznačíme. Předpokládejme, že potenciál pasti je homogenní funkcí souřadnic řádu  $\gamma$ , tj.

$$U(\lambda \boldsymbol{x}) = \lambda^{\gamma} U(\boldsymbol{x}) . \tag{9.42}$$

Řešení GP rovnice  $\psi(\boldsymbol{x})$  je z definice problému stabilní vůči libovolným variacím zachovávajícím celkový počet částic (9.38).

Definujme novou vlnovou funkci jako  $\tilde{\psi}(\boldsymbol{x}) = N_{\lambda}\psi(\lambda\boldsymbol{x})$ . Aby zůstal počet částic zachován, musíme vzít normalizační prefaktor  $N_{\lambda} = \lambda^{3/2}$  (jak by se výsledek změnil při jiném počtu prostorových dimenzí?). Prostým přeškálováním integrační proměnné odhalíme, že jednotlivé příspěvky do celkové energie se modifikují jako  $\tilde{E}_{\rm kin} = \frac{N_{\lambda}^2}{\lambda} E_{\rm kin} = \lambda^2 E_{\rm kin}, \tilde{E}_{\rm past} = \frac{N_{\lambda}^2}{\lambda^{3+\gamma}} E_{\rm past} = \lambda^{-\gamma} E_{\rm past}$ , a  $\tilde{E}_{\rm int} = \frac{N_{\lambda}^4}{\lambda^3} E_{\rm int} = \lambda^3 E_{\rm int}$ . Součet všech složek energie musí zůstat při infinitezimální variaci,  $\lambda = 1 + \epsilon$ , nezměněn, odkud již plyne identita

$$2E_{\rm kin} - \gamma E_{\rm past} + 3E_{\rm int} = 0 , \qquad (9.43)$$

jež je zobecněním viriálního teorému známého z kvantové mechaniky, zahrnujícím vliv dvoučásticových interakcí. Přenásobením GP rovnice (9.40)  $\psi^*(\boldsymbol{x})$  a integrací přes souřadnice navíc obdržíme relaci

$$E_{\rm kin} + E_{\rm past} + 2E_{\rm int} = \mu N , \qquad (9.44)$$

která ukazuje, že chemický potenciál má běžný význam energie na jednu částici pouze za nepřítomnosti dvoučásticových interakcí.

Dvě identity (9.43) a (9.44) samy nestačí na úplné určení všech složek energie. Nicméně za vhodných dodatečných předpokladů už to možné je. V režimu velmi slabé interakce můžeme zanedbat  $E_{\rm int}$  a řešením soustavy dvou lineárních rovnic dostaneme

$$E_{\rm kin} = \frac{\gamma}{2+\gamma} \mu N, \quad E_{\rm past} = \frac{2}{2+\gamma} \mu N$$
 (slabá vazba). (9.45)

Naopak, jak uvidíme později, za běžných experimentálních podmínek je zanedbatelný příspěvek kinetické energie  $E_{\rm kin}$ , načež vyjde

$$E_{\rm int} = \frac{\gamma}{3+2\gamma}\mu N, \quad E_{\rm past} = \frac{3}{3+2\gamma}\mu N$$
 (silná vazba). (9.46)

V tomto případě bude celková energie rovna  $E = \mu N(3+\gamma)/(3+2\gamma)$ . Laskavý čtenář si jistě sám pro ilustraci dosadí  $\gamma = 2$  odpovídající harmonickému potenciálu.

Obraťme se teď k otázce, jaké jsou vlastně typické hodnoty jednotlivých složek energie v obláčku chladného atomového plynu uvězněného v pasti. Můžeme pro zahrnutí interakcí použít poruchovou teorii? Uvažme pro jednoduchost opět sféricky symetrickou harmonickou past (zobecnění na případ asymetrické pasti je přímočaré). Bez dvoučásticových interakcí je rozdělení atomů popsáno vlnovou funkcí (9.1). Kinetická i potenciální energie nabývají stejných hodnot,  $E_{\rm kin} \sim E_{\rm past} \sim N\hbar\omega$ (víme dokonce přesně, že obě jsou rovny  $\frac{3}{4}N\hbar\omega$ , ale momentálně nás zajímá je hrubý odhad). Zapněme nyní meziatomovou interakci a podívejme se, jaká bude v tomto stavu interakční energie. Opět zhruba to je g krát čtverec hustoty krát objem obláčku, tj.  $gN^2/x_{\rm HO}^3$ , kde  $x_{\rm HO} = \sqrt{\hbar/m\omega}$  je šířka rozdělení hustoty částic ve stavu (9.1). Vyjádřením vazbové konstanty pomocí rozptylové délky a drobnou úpravou vyjde

$$\frac{E_{\rm kin}}{E_{\rm int}} \sim \frac{N\hbar\omega}{\frac{\hbar^2 a}{m}N^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}} \sim \frac{x_{\rm HO}}{Na} \,. \tag{9.47}$$

Tento poměr určuje energetickou bilanci interagujícího plynu v pasti. Je-li interakce velice slabá, je  $E_{\rm kin} \sim E_{\rm past} \gg E_{\rm int}$  a rozdělení částic v pasti se prakticky nezmění. Dosadíme-li však za N a  $x_{\rm HO}$  charakteristické hodnoty shrnuté v úvodu kapitoly a za rozptylovou délku taktéž typickou hodnotu řádu desítek až stovky Bohrových poloměrů, zjistíme, že výraz  $x_{\rm HO}/Na$  je o několik řádů menší než jedna, pro naše parametry cca  $10^{-3}$ ! Ve stavu popsaném vlnovou funkcí (9.1) je tedy právě naopak  $E_{\rm kin} \sim E_{\rm past} \ll E_{\rm int}$ , což podle viriálového teorému (9.43) značí, že takový stav nemůže být stacionárním stavem funkcionálu (9.37).

Vysvětlení je nasnadě. Odpudivá interakce mezi atomy způsobí roztažení obláčku a tedy změnu energetické bilance. Během tohoto rozepnutí bude kinetická energie rychle klesat (s převrácenou druhou mocninou rozměru), zatímco potenciální energie bude rychle růst (s druhou mocninou rozměru). Kinetická energie bude tedy nakonec prakticky zanedbatelná a ve shodě s viriálovým teorémem se rovnováha ustaví tak, že  $E_{\rm kin} \ll E_{\rm past} \sim E_{\rm int}$ .

Heuristickou úvahou jsme dospěli k závěru, že za podmínek typických pro experimenty s řídkými atomovými plyny lze příspěvek kinetické energie do celkové energie systému zanedbat. Tento předpoklad je základem Thomasovy-Fermiho (TF) aproximace, kterou rozvineme v následující podsekci. Zároveň tam prozkoumáme kvantitativně, za jakých okolností je skutečně splněn. Zde jen poznamenáme, že meziatomová interakce je silná v tom smyslu, že její příspěvek do celkové energie dominuje nad kinetickou energií atomů. Mějme však ale na paměti, že interakce je zároveň stále dostatečně slabá ve smyslu, že rozptylová délka je mnohem menší než meziatomová vzdálenost. Obě tyto podmínky lze splnit současně, je-li počet atomů v pasti vhodně zvolený.

# 9.4.3 Thomasova–Fermiho aproximace

V TF aproximaci zanedbáváme

v GP rovnici (9.40) kinetický člen.

Díky tomu se redukuje na triviální algebraickou rovnici pro hustotu částic  $n(x) = |\psi(x)|^2$  s řešením

$$|\psi(\boldsymbol{x})|^2 = \frac{1}{g}[\mu - U(\boldsymbol{x})] \quad \text{pro} \quad \mu > U(\boldsymbol{x})$$

$$(9.48)$$

a  $\psi(\mathbf{x}) = 0$  pro  $\mu < U(\mathbf{x})$ . Hustotní profil obláčku tedy kopíruje věznící potenciál. Hranice obláčku je určená vztahem  $\mu = U(\mathbf{x})$  a hodnotu chemického potenciálu určíme z podmínky na celkový počet částic (9.38).

Podívejme se teď konkrétně na nám dobře známý případ kulově symetrické harmonické pasti. Označíme-li poloměr obláčku jako r, pak  $\mu = \frac{1}{2}\omega^2 r^2$  a rozdělení hustoty částic je parabolické,

$$n(\mathbf{x}) = \frac{1}{2g} m\omega^2 (r^2 - \mathbf{x}^2) .$$
(9.49)

Celkový počet částic je dán integrálem přes kouli o poloměru r,

$$N = \int_{|\boldsymbol{x}| < r} d^3 \boldsymbol{x} \, n(\boldsymbol{x}) = \frac{4\pi}{15g} m \omega^2 r^5 = \frac{r^5}{15a x_{\rm HO}^4} \,, \tag{9.50}$$

 $Na/a_{ho} = 100$ 0.008 0.006 0.004 0.002 (a) Hustota R 0.04 0.03 0.02 0.01 (b) 0 3 2 5 6 0 1 4 Vzdálenost

Obr. 9.5: Srovnání TF aproximace (čárkovaně) s přesným numerickým řešením GP rovnice (plně) pro plyn ve sférické pasti s odpudivou interakcí určenou parametrem  $Na/x_{\rm HO} = 100$  (podle [6]). Horní panel: radiální rozdělení hustoty. Dolní panel: integrovaná (sloupcová) hustota.

odkud odvodíme poloměr obláčku a zpětným dosazením i chemický potenciál a hustotu v centru pasti jako funkce počtu částic,

$$r = \left(\frac{15Na}{x_{\rm HO}}\right)^{1/5} x_{\rm HO}, \mu = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{15Na}{x_{\rm HO}}\right)^{2/5}, n(0) = \frac{1}{8\pi a x_{\rm HO}^2} \left(\frac{15Na}{x_{\rm HO}}\right)^{2/5}.$$
 (9.51)

Hodnoty potenciální a interakční energie plynou z viriálního teorému (9.46) pro $\gamma=2$ ,  $E_{\rm past}=3\mu N/7$ ,  $E_{\rm int}=2\mu N/7$ . Faktor $r/x_{\rm HO}$ , kterým meziatomové interakce zvětší rozměry obláčku, nabývá hodnot několik jednotek až asi 10.

Nakonec nám zbývá zkontrolovat, za jakých podmínek jsou splněny přepoklady TF aproximace. Za tím účelem si nejprve uvědomíme, že GP vlnová funkce může být vhodnou změnou konstantní<sup>4</sup> fáze převedena na reálnou funkci,  $\psi(\boldsymbol{x}) = \sqrt{n(\boldsymbol{x})}$ , kde hustota částic je dána vztahem (9.49). Jednotlivé složky *hustoty* energie pak nabývají tvar

$$\varepsilon_{\rm kin} = \frac{\hbar^2}{8mg} \frac{|\nabla U(\boldsymbol{x})|^2}{\mu - U(\boldsymbol{x})}, \quad \varepsilon_{\rm past} = \frac{1}{g} U(\boldsymbol{x}) [\mu - U(\boldsymbol{x})], \quad \varepsilon_{\rm int} = \frac{1}{2g} [\mu - U(\boldsymbol{x})]^2.$$
(9.52)

Potenciál můžeme vždy zvolit tak, aby byl v centru pasti nulový. V okolí centra pak máme  $\varepsilon_{\rm past}\ll\varepsilon_{\rm int}$ a platnost TF aproximace bude podmíněna nerovností $\varepsilon_{\rm kin}\ll\varepsilon_{\rm past}$ . Pro potenciál typu (9.42) bude tato nerovnost zřejmě splněna, pokud $\gamma>2$ . Pro $\gamma<2$  bude v malém okolí centra pasti kinetický člen převažovat nad potenciálním, a v této oblasti bude nutné řešit GP rovnici separátně a jednotlivá řešení v různých oblastech pak na sebe navázat. V hraničním případě $\gamma=2$ záleží na číselné hodnotě prefaktoru v potenciálu. Konkrétně pro naši izotropní harmonickou past se podmínka  $\varepsilon_{\rm kin}\ll\varepsilon_{\rm past}$  redukuje na  $\hbar\omega\ll 2\mu=\hbar\omega(15Na/x_{\rm HO})^{2/5}$ , neboli  $(Na/x_{\rm HO})^{2/5}\gg 1$ , což, jak již víme, je pro typické experimentální uspořádání dobře splněno.

Směrem od centra pasti hustota kinetické energie roste, zatímco hustoty potenciální i interakční energie klesají na okraji obláčku k nule. Je tedy zřejmé, že v tenké slupce blízko okraje TF aproximace selhává. Protože zde evidentně platí  $\varepsilon_{\rm past} \gg \varepsilon_{\rm int}$ , musíme řešit GP rovnici se zachováním kinetického a potenciálního členu a řešení opět navázat s řešením uvnitř obláčku. Tloušťku této okrajové vrstvy odhadneme z relace  $\varepsilon_{\rm kin} \sim \varepsilon_{\rm int}$ . Dosazením harmonického potenciálu dojdeme k závěru, že TF aproximace neplatí v oblasti určené nerovností

$$r - |\mathbf{x}| \le \delta \equiv r \left(\frac{\hbar\omega}{\mu}\right)^{2/3}$$
 (9.53)

V experimentech s řídkými atomovými plyny je tato vrstva velmi tenká a zlomek celkového počtu částic v ní obsažených zanedbatelný. To je vidět i z přímého srovnání TF aproximace s úplným numerickým řešením GP rovnice na obrázku 9.5. Konkrétně pro parametry pasti uvedené v úvodu kapitoly a  $a = 100 a_0$  dostaneme

$$\frac{Na}{x_{\rm HO}} \approx 3600, \quad r \approx 13 \ \mu {\rm m}, \quad \delta \approx 1 \ \mu {\rm m}, \quad n(0) \approx 2.7 \times 10^{14} \ {\rm cm}^{-3} \ .$$
 (9.54)

 $<sup>^4 {\</sup>rm Prostorově}$ závislá fáze by totiž nezměnila potenciální a interakční energii, a zvýšila díky nenulovému gradientu energii kinetickou.

Je poučné srovnat poměr hustot v centru pasti předpovězených na základě vlnové funkce harmonického oscilátoru (9.1) (tj. při absenci interakcí) a TF aproximace (9.51),

$$\frac{n_{\rm TF}(0)}{n_{\rm free}(0)} = \frac{15^{2/5}\sqrt{\pi}}{8} \left(\frac{Na}{x_{\rm HO}}\right)^{-3/5} \approx 4.8 \times 10^{-3} .$$
(9.55)

Ačkoli je plyn velice řídký, vzájemné interakce atomů snížily hustotu částic v centru pasti o více než dva řády! Toto dramatické snížení hustoty, doprovázející expanzi obláčku jako následek odpudivé interakce, je dokumentováno srovnáním s experimentálními daty na obrázku 9.6.

#### 9.4.4 Kolektivní excitace

Prozatím jsme se věnovali studiu základního stavu atomového plynu v pasti při nulové teplotě. Ukázali jsme, že je-li ochuzení kondenzátu vlivem interakcí zanedbatelné, redukuje se mnohočásticový problém pro BEC na GP rovnici (9.40), odvozenou z variačního principu (9.37). Působením vhodné vnější poruchy (jako například malou změnou věznícího potenciálu) lze však v kondenzátu vybudit kolektivní kmity, pro jejichž popis je třeba znát časový vývoj vlnové funkce kondenzátu  $\psi(x)$ .

Vrátíme-li se na okamžik k úpl-



Obr. 9.6: Rozdělení integrované (sloupcové) hustoty v pasti podle [7], obsahující 80 tisíc atomů sodíku. Plnou čarou je znázorněna předpověď GP rovnice, čárkovaně pak příslušné rozdělení pro ideální plyn.

nému mnohočásticovému hamiltoniánu (9.36), bude časový vývoj operátoru  $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ v Heisenbergově obrazu určen vztahem  $i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}}{\partial t} = [\hat{\psi}, \hat{H}]$ . Provedením komutátoru a následným nahrazením operátoru pole vlnovou funkcí kondenzátu obdržíme časově závislou GP rovnici,

$$-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \psi(\boldsymbol{x},t) + U(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x},t) + g|\psi(\boldsymbol{x},t)|^2 \psi(\boldsymbol{x},t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} .$$
(9.56)

Aby tento vztah byl kompatibilní s časově nezávislou GP rovnicí (9.40), musíme základnímu stavu přiřadit vlnovou funkci s oscilující fází,  $\psi(\boldsymbol{x},t) = \psi(\boldsymbol{x})e^{-i\mu t/\hbar}$ .

Řešení rovnice (9.56) lze hledat přímo, v dalším však použijeme alternativní

přístup založený na variačním principu definovaném akcí

$$S[\psi] = \int dt \, d^3 \boldsymbol{x} \left[ \psi^* i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 - U(\boldsymbol{x}) |\psi|^2 - \frac{1}{2} g |\psi|^4 \right] \,, \tag{9.57}$$

jenž je rovnici (9.56) zřejmě ekvivalentní. Jelikož čtverec modulu vlnové funkce odpovídá lokální hustotě částic, bude základní informace o časovém vývoji vlnové funkce ukryta v časově proměnné fázi. Parametrizujeme tedy vlnovou funkci jako  $\psi(\boldsymbol{x},t) = \sqrt{n(\boldsymbol{x},t)}e^{i\varphi(\boldsymbol{x},t)}$ . Nezávislými proměnnými variační úlohy jsou teď hustota  $n(\boldsymbol{x},t)$  a fáze  $\varphi(\boldsymbol{x},t)$ , a přímočarou aplikací Lagrangeova formalismu pro ně dostaneme pohybové rovnice

$$0 = \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\hbar}{m} \nabla \cdot (n \nabla \varphi) , \qquad (9.58)$$

$$\hbar\sqrt{n}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \nabla^2 \sqrt{n} - \sqrt{n} (\nabla\varphi)^2 \right] - \left(U\sqrt{n} + g\sqrt{n^3}\right) \,. \tag{9.59}$$

Pozornému čtenáři jistě neuniklo, že vztah (9.58) má podobu rovnice kontinuity, stačí identifikovat  $\boldsymbol{v} = \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{\nabla} \varphi$  jako rychlostní pole v BEC kondenzátu. Fakt, že toto pole je nevířivé (viz diskuzi v kapitole 5 o supratekutém <sup>4</sup>He), rot  $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ , je jedním ze základních znaků supratekutosti a bude hrát důležitou roli v příští sekci v diskuzi kvantovaných vírů. Druhou pohybovou rovnici (9.59) lze pak po vydělení  $\sqrt{n}$  a aplikaci gradientu přepsat jako

$$m\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -\boldsymbol{\nabla}\left(U + gn + \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}}\boldsymbol{\nabla}^2\sqrt{n}\right) . \tag{9.60}$$

Tato rovnice řídí dynamiku excitací BE kondenzátu ve vnějším potenciálu. Je vhodné zdůraznit, že zatím stále jde o ekvivalentní přepis nelineární časové GP rovnice (9.56), neboť jsme dosud nezavedli žádnou další aproximaci.

Obecná strategie pro nalezení spektra kolektivních excitací je založena na předpokladu malých kmitů kolem rovnovážného rozdělení částic, charakterizovaného hustotou  $n_0(\boldsymbol{x})$  a rychlostí  $\boldsymbol{v}_0 = \boldsymbol{0}$ . Položíme  $n(\boldsymbol{x},t) = n_0(\boldsymbol{x}) + n_{\text{ex}}(\boldsymbol{x},t)$  a pohybové rovnice linearizujeme v proměnných  $n_{\text{ex}}$  a  $\boldsymbol{v}$ . Pomocí časové derivace rovnice kontinuity (9.58) a dosazením z (9.60) eliminujeme rychlost a získáme tak pohybovou rovnici pro fluktuaci hustoty,

$$m\frac{\partial^2 n_{\rm ex}}{\partial t^2} = \boldsymbol{\nabla} \cdot \left[ n_0 \boldsymbol{\nabla} \left( U + gn - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n}} \boldsymbol{\nabla}^2 \sqrt{n} \right) \right] \,. \tag{9.61}$$

Ilustrujme tento výsledek na příkladu homogenního Boseova plynu, kdeU=0a $n_0$ je konstantní. Linearizací odmocniny,  $\sqrt{n}\approx\sqrt{n_0}+\frac{n_{\rm ex}}{2\sqrt{n_0}}$ , dostaneme

$$m\frac{\partial^2 n_{\rm ex}}{\partial t^2} = n_0 g \boldsymbol{\nabla}^2 n_{\rm ex} - \frac{\hbar^2}{4m} \boldsymbol{\nabla}^4 n_{\rm ex} \ . \tag{9.62}$$

Přechodem do Fourierovy reprezentace zjistíme, že energie  $E_{\mathbf{k}}$  a vlnový vektor  $\mathbf{k}$  kmitů kolem rovnovážného rozdělení hustoty jsou vázány relací

$$E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{2n_0g\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0 + (\varepsilon_{\boldsymbol{k}}^0)^2} , \qquad (9.63)$$

která přesně odpovídá Bogoliubovovu spektru (1.87). Zatímco odvození této disperzní relace podané v úvodní kapitole je založeno na diagonalizaci hamiltoniánu pro vhodně definované kvazičástice, přístup naznačený zde zdůrazňuje kolektivní povahu Bogoliubovova módu.

V případě plynů uvězněných v pasti jsme se uchýlili k TF aproximaci a ukázali, že pro harmonický potenciál a dostatečně vysoký počet uvězněných částic je kvantitativně oprávněná všude kromě tenké slupky blízko okraje obláčku. V TF aproximaci zanedbáváme kinetickou energii atomů, což v rovnici (9.61) odpovídá zanedbání posledního, nejkomplikovanějšího členu. Použijeme-li navíc rovnici (9.48) pro rovnovážnou hustotu v TF aproximaci, získáme základní vztah pro analýzu kolektivních módů v kondenzátu v TF aproximaci

$$m\frac{\partial^2 n_{\rm ex}}{\partial t^2} = (\mu - U)\boldsymbol{\nabla}^2 n_{\rm ex} - \boldsymbol{\nabla}U \cdot \boldsymbol{\nabla}n_{\rm ex} . \qquad (9.64)$$

Za zmínku stojí fakt, že se v této rovnici nikde explicitně nevyskytuje vazbová konstanta dvoučásticové interakce g. To odpovídá tzv. bezsrážkové hydrodynamické limitě [6],  $Na/x_{\rm HO} \gg 1$ .

Řešením rovnice (9.64) lze teoreticky předpovědět celou řadu kolektivních módů [4], experimentálně však bylo pozorováno jen několik nejnižších z nich. Podíváme se tedy explicitně jen na nejjednodušší excitace pro případ izotropního harmonického potenciálu,  $U(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2 \mathbf{x}^2$ . Uvažujeme-li izolovaný normální mód, kde se hustota  $n_{\text{ex}}$  mění s časem harmonicky s frekvencí  $\Omega$ , nabude (9.64) tvar

$$\Omega^2 n_{\rm ex} = \omega^2 r \frac{\partial n_{\rm ex}}{\partial r} - \frac{\omega^2}{2} (R^2 - r^2) \boldsymbol{\nabla}^2 n_{\rm ex} , \qquad (9.65)$$

kde r je radiální souřadnice a R poloměr obláčku. Jednou zřejmou třídou řešení je  $n_{\rm ex} \sim r^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$  pro libovolné hodnoty kvantových čísel l, m. Laplacián této funkce je totiž nulový, takže pro frekvenci kmitů okamžitě dostaneme  $\Omega^2 = l\omega^2$ . Případ l = 0 je triviální, neboť změna hustoty je konstantní a nezávislá na souřadnicích i čase. Změní se pouze chemický potenciál, což odpovídá přidání částic do pasti v rovnovážném stavu. Tři módy s l = 1 představují translaci obláčku jako celku. Při takovém pohybu se energie meziatomových interakcí nemění a frekvence kmitů je tedy přirozeně rovna frekvenci nezávislých oscilací každého z atomů v harmonické pasti,  $\Omega = \omega$ .

Nejjednodušší netriviální radiálně symetrické řešení rovnice (9.65) lze najít ve tvaru  $n_{\rm ex} = \alpha + \beta r^2$ . Dosazením do (9.65) se přesvědčíme, že jeho frekvence je  $\Omega = \sqrt{5} \omega$  a profil hustoty  $n_{\rm ex} \sim 1 - 5r^2/3R^2$ . Protože rychlost pohybu kondenzátu je radiální a má všude stejné znaménko, hovoříme o tzv. dýchajícím (angl. *breathing*) módu. Další módy lze nalézt explicitním řešením diferenciální rovnice (9.65) pomocí hypergeometrických funkcí [4].

## 9.5 Rotující kondenzáty a víry

Dosud jsme se zabývali řešením GP rovnice pro případ kolektivních excitací, tj. harmonicky kmitajících módů, které lze v kondenzátu vybudit vhodnou vnější poruchou. GP rovnice ovšem připouští také celou třídu stacionárních řešení, jež nelze popsat pomocí linearizované pohybové rovnice (9.61) jako malé odchylky od rovnovážného rozdělení hustoty. Tato řešení souvisí s nenulovým momentem hybnosti a představují topologicky netriviální stavy, víry, analogické vírům v supravodičích II. druhu ve vnějším magnetickém poli (viz kapitoly 13-16) nebo v supratekut0m heliu (viz kapitoly 5 a 6).

Abychom pochopili, jak víry v kondenzátu vznikají, připomeňme si z diskuze pod rovnicí (9.59), že hydrodynamická rychlost pohybu kondenzátu je přímo úměrná gradientu fáze GP vlnové funkce,  $\boldsymbol{v} = \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{\nabla} \varphi$ . Odtud okamžitě plyne, že rychlostní pole je nevířivé,

$$\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{v} = \boldsymbol{0} \ . \tag{9.66}$$

Ze základů matematické analýzy víme, že je-li rovnice (9.66) splněna v jednoduše souvislé oblasti, pak pro libovolnou uzavřenou křivku C v této oblasti platí  $\oint_C d\mathbf{l} \cdot \mathbf{v} = 0$  jako důsledek Stokesova teorému. Vírová řešení GP rovnice odpovídají obecnějšímu případu, kdy rotace rychlostního pole má v některých bodech singularitu, a tedy oblast platnosti rovnice (9.66) není jednoduše souvislá. Jelikož vlnová funkce musí být jednoznačná, je pak cirkulace podél křivky C omezena požadavkem, aby se fáze vlnové funkce při oběhu této křivky změnila o celočíselný násobek  $2\pi$ ,

$$\oint d\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{v} = \frac{\hbar}{m} \oint d\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{\nabla}\varphi = q \frac{2\pi\hbar}{m} , \qquad (9.67)$$

kde q je celé číslo. Tento zásadní výsledek nám říká, že cirkulace rychlosti v Boseově– Einsteinově kondenzátu je kvantovaná, podobně v supratekutém heliu nebo jako magnetický tok v supravodičích II. druhu. Kvantem cirkulace je zde, stejně jako v supratekutém heliu,  $2\pi\hbar/m$ .

Jakmile je  $q \neq 0$ , musí uvnitř křivky C existovat oblast, v níž rovnice (9.66) neplatí, což je možné pouze v případě, že tam rotace vektorového pole v vůbec není definovaná. Jako nejjednodušší příklad předpokládejme, že se kondenzát nachází v osově symetrickém vnější poli a rychlostní pole s toutéž symetrií má pouze tangenciální složku,  $v_{\theta}$ . Jeho cirkulace podél kružnice definované konstantní válcovou souřadnicí  $\rho$  pak bude  $2\pi\rho v_{\theta}$ , odkud  $v_{\theta} = q\hbar/m\rho$ . Rychlostní pole má tedy singularitu na ose z. Vlnová funkce kondenzátu má v tomto případě jednoduchou úhlovou závislost, danou fází  $e^{iq\theta}$ . Jelikož v GP teorii je každá částice v kondenzátu popsána stejnou jednočásticovou vlnovou funkcí, můžeme tento výsledek také interpretovat tak, že na každou částici připadá moment hybnosti  $q\hbar$  vzhledem k ose z.

V dalším se podíváme trochu podrobněji, jak víry v kondenzátu popsat a za jakých podmínek mohou představovat stabilní řešení GP rovnice. Začneme s nejjednodušším případem izolovaného víru v homogenním bosonovém plynu. K diskuzi vírů v plynech v pasti se dostaneme později.

## 9.5.1 Víry v homogenním Boseově plynu

Vraťme se tedy k variační úloze definované funkcionálem energie (9.37) s vazbou (9.38). Motivováni předchozím jednoduchým příkladem osově symetrického rychlostního pole s nenulovou cirkulací budeme hledat řešení separovaná ve válcových souřadnicích,  $\psi(\rho, \theta, z) = \chi(\rho, z)e^{iq\theta}$ . Dosazením a triviální integrací přes úhly dostaneme

$$E[\chi] - \mu N[\chi] = 2\pi \int dz \, d\rho \, \rho \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \left( \frac{\partial \chi}{\partial \rho} \right)^2 + \left( \frac{\partial \chi}{\partial z} \right)^2 + \frac{q^2}{\rho^2} \chi^2 \right] - \mu \chi^2 + \frac{1}{2} g \chi^4 \right\} \,.$$

Všimněme si, že třetí člen lze zapsat jako  $\frac{1}{2}mv_{\theta}^2 n(\rho, z)$ , jedná se tedy o odstředivý příspěvek kinetické energie azimutálního pohybu. Za absence vnějšího věznícího potenciálu můžeme řešení hledat dokonce nezávislé na souřadnici z, čímž se zbavíme členu úměrného  $\partial \chi/\partial z$ . Integrace přes z pak triviálně dá rozměr L systému v tomto směru a úloha se redukuje na výpočet energie na jednotku délky víru,  $(E[\chi] - \mu N[\chi])/L$ .

Srovnáním členu s derivacemi a členu úměrného chemickému potenciálu zjistíme, že vlnová funkce se mění na vzdálenostech charakterizovaných koherenční délkou  $\xi,$ kde

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2m\mu} \,. \tag{9.68}$$

Zavedením nové radiální souřadnice  $\tau = \rho/\xi$  a přeškálováním vlnové funkce  $\chi(\rho) = \sqrt{n_0}f(\tau)$ , kde  $n_0 = \mu/g$  je hustota homogenního plynu se stejným chemickým potenciálem  $\mu$ , přejde variační funkcionál na jednoduchý tvar

$$\frac{E[f] - \mu N[f]}{2\pi L\xi^2 n_0^2 g} \equiv \mathcal{E}_q[f] = \int d\tau \,\tau \left[ \left( \frac{df}{d\tau} \right)^2 + \left( \frac{q^2}{\tau^2} - 1 \right) f^2 + \frac{1}{2} f^4 \right] \,. \tag{9.69}$$

Odpovídající podmínka stacionarity pak bude

$$-f'' - \frac{1}{\tau}f' + \left(\frac{q^2}{\tau^2} - 1\right)f + f^3 = 0 , \qquad (9.70)$$

kde jsme derivace podle q pro jednoduchost označili čárkami. Přítomnost odstředivého členu značí, že aby byla celková energie víru konečná, musí v jeho centru být hustota částic (a tedy radiální vlnová funkce  $f(\tau)$ ) nulová. Pro malé  $\tau$  tak lze zanedbat členy  $-f + f^3$  a rovnice (9.70) je shodná se Schrödingerovou rovnici pro vlnovou funkci volné částice při nulové energii. Z kvantové mechaniky pak víme, že její řešení se asymptoticky chová jako

$$f(\tau) \sim \tau^{|q|} \quad \text{pro} \quad \tau \to 0 \;.$$
 (9.71)

Analogickou úvahou zjistíme, že pro $\tau \to \infty$ řešení přejde na vlnovou funkci homogenního plynu, tedy  $f(\tau) \to 1$ . Zanedbáním členů  $-f'' - \frac{1}{\tau}f'$ snadno odvodíme i první netriviální korekci pro velké  $\tau$ ,

$$f(\tau) \approx \sqrt{1 - \frac{q^2}{\tau^2}} \approx 1 - \frac{q^2}{2\tau^2} \quad \text{pro} \quad \tau \to \infty \;.$$
 (9.72)

Mimo asymptotické oblasti velkého a malého  $\tau$  však rovnici (9.70) analyticky vyřešit neumíme. Pro přibližné řešení můžeme s výhodou využít variačního principu. Za tím účelem je od  $\mathcal{E}_q[f]$  vhodné odečíst příspěvek homogenního rozdělení hustoty, čímž získáme energii samotného víru,

$$\mathcal{E}_q[f] - \mathcal{E}_0[1] = \int_0^{\Lambda/\xi} d\tau \,\tau \left[ (f')^2 + \frac{q^2}{\tau^2} f^2 + \frac{1}{2} (1 - f^2)^2 \right] \,. \tag{9.73}$$

Kvůli odstředivému členu je však integrál přes radiální souřadnici  $\tau$ stále logaritmicky divergentní. To je fyzikálně snadno pochopitelné; stejná divergence se objeví například při výpočtu energie elektrostatického pole nekonečného nabitého drátu či magnetického pole drátu s proudem. Abychom dostali konečnou hodnotu energie, musíme zavést ručně horní mez integrace  $\Lambda$ . Ta odpovídá charakteristickému rozměru, na němž platí limitní chování  $f \approx 1$ , tj. v praxi například velikosti kondenzátu či vzdálenosti vírů, je-li jich v systému více. Ponecháním pouze tohoto dominantního, logaritmicky divergentního příspěvku dostaneme první hrubý odhad energie víru,  $\mathcal{E}_q[f]$  –  $\mathcal{E}_0[1] \approx q^2 \ln(\Lambda/\xi)$ . Důsledkem základní důležitosti je, že energie víru s kvantovým číslem g je vyšší než energie g vírů s kvantovým číslem 1. To znamená, že celkový moment hybnosti kondenzátu se rozloží do velkého počtu vírů s jednotkovou cirkulací.



$$\mathcal{E}_q[f] - \mathcal{E}_0[1] = \ln \frac{\kappa \Lambda}{\xi}$$
, kde  $\kappa = \frac{e^{3/4}}{\sqrt{2}} \approx 1.497$ . (9.74)

റ	9	•
4	о	Э



Obr. 9.7: Ukázkové řešení GP rovnice pro izolovaný vír v uvězněném bosonovém plynu; převzato z [6]. Čárkovaně je vyznačena vlnová funkce pro neinteragující plyn, zatímco plnou, respektive čerchovanou čarou je znázorněno řešení GP rovnice pro izotropní harmonickou past s vírem a bez víru. Vložený konturový graf ukazuje rozdělení hustoty ve víru.

Poznamenejme, že přesné numerické řešení GP rovnice (9.70) vede ke stejnému výsledku, pouze s mírně modifikovaným koeficientem,  $\kappa \approx 1.464$ .

### 9.5.2 Víry v uvězněném plynu

V souladu s obecným výrazem pro GP funkcionál (9.37) musíme v přítomnosti věznícího potenciálu  $U(\mathbf{x})$  přidat na pravou stranu rovnice (9.68) člen  $U\chi^2$ . Pro jednoduchost uvažujeme pouze harmonickou, osově symetrickou past a vír umístěný přesně v její ose. Podrobný výpočet energie víru vychýleného z osy pasti lze nalézt například v [4]. GP rovnici lze vyřešit analyticky v případě nulové dvoučásticové interakce. Příslušným řešením jsou pak prostě vlnové funkce harmonického oscilátoru s odpovídající hodnotou momentu hybnosti. Stejně jako v případě základního stavu bez vírů má však odpudivá, třebaže slabá, mezičásticová interakce silný vliv na rozdělení hustoty. To je názorně ilustrováno na obr. 9.7 srovnáním řešení GP rovnice pro neinteragující a interagující plyn.

Vraťme se nyní tedy k analýze interagujícího plynu v pasti. Z výsledků v Thomasově–Fermiho aproximaci (9.51) je patrné, že (lokální) koherenční délka  $\xi$ , vyjádřená vztahem (9.68), klesá s počtem částic v pasti, zatímco poloměr obláčku r roste. Dostatečně vysokým počtem částic tedy vždy můžeme zajistit, aby koherenční délka v centru pasti  $\xi_0$ , jež určuje poloměr víru, byla mnohem menší než rozměr obláčku. Integrační mez  $\Lambda$  pro výpočet energie víru pak můžeme zvolit tak, aby  $\xi_0 \ll \Lambda \ll r$ . Uvnitř víru je potenciál pasti prakticky konstantní a jeho energie je tudíž dána vztahem (9.74). Naopak vně víru je rozdělení hustoty prakticky totožné s rozdělením bez víru, daným TF vztahem (9.48),  $n(\boldsymbol{x}) = n(0)(1 - \boldsymbol{x}^2/r^2)$ . Přítomnost víru, a tedy fáze  $e^{iq\theta}$  vlnové funkce, však dodá nový příspěvek do energie, pocházející z odstředivého členu. S normováním jako v rovnici (9.69), pouze se záměnou  $n_0 \rightarrow n(0)$  a  $\xi \rightarrow \xi_0$ , tento příspěvek bude

$$\int_{\Lambda/\xi_0}^{r/\xi_0} \frac{d\tau}{\tau} \left( 1 - \frac{\xi_0^2 \tau^2}{r^2} \right) \approx \ln \frac{r}{\Lambda} - \frac{1}{2} .$$
(9.75)

Po sečtení obou příspěvků tedy celková (normovaná) energie víru v harmonické pasti na jednotku délky bude

$$n(0)\frac{\pi\hbar^2}{m}\ln\frac{\kappa' r}{\xi_0}$$
, (9.76)

kde  $\kappa' = \kappa/e^{1/2} \approx 0.888.$ 

V předchozím výpočtu jsme zcela zanedbali závislost hustoty kondenzátu na souřadnici z podél osy pasti. To je jistě oprávněný předpoklad pro vysoce asymetrické pasti doutníkového tvaru a obecně v případě, že rozměr pasti ve směru osy z,  $r_{\parallel}$ , je mnohem větší než koherenční délka  $\xi_0$ . Energii víru pak můžeme spočíst pomocí výše odvozeného vztahu (9.76), kam dosadíme hustotu podél osy z,  $n(z) = n(0)(1 - z^2/r_{\parallel}^2)$ , poloměr obláčku v rovině kolmé k ose z,  $r(z) = r_{\perp}\sqrt{1 - z^2/r_{\parallel}^2}$ ,

a koherenční délku  $\xi(z) = \xi_0 \sqrt{n(0)/n(z)},$ 

$$E = \frac{\pi \hbar^2}{m} \int_{-r_{\parallel}}^{+r_{\parallel}} dz \, n(z) \ln \frac{\kappa' r(z)}{\xi(z)} =$$
$$= n(0) \frac{\pi \hbar^2}{m} \int_{-r_{\parallel}}^{+r_{\parallel}} dz \left(1 - \frac{z^2}{r_{\parallel}^2}\right) \ln \left[\frac{\kappa' r_{\perp}}{\xi_0} \left(1 - \frac{z^2}{r_{\parallel}^2}\right)\right] = \frac{4\pi \hbar^2}{3m} n(0) r_{\parallel} \ln \frac{\kappa'' r_{\perp}}{\xi_0} , \quad (9.77)$$

kde  $\kappa'' = 4\kappa'/e^{5/3} \approx 0.671$ . Spočtěme ještě celkový moment hybnosti víru. Jak bylo vysvětleno výše, na každou částici v kondenzátu připadá moment hybnosti  $\hbar$  (q = 1). Celkový moment hybnosti je pak roven  $L = N\hbar$ , takže stačí najít celkový počet částic. Analogicky vztahu pro izotropní harmonickou past (9.50) najdeme  $N = \frac{8\pi}{15}n(0)r_1^2 r_{\parallel}$ , takže

$$L = \frac{8\pi\hbar}{15}n(0)r_{\perp}^2 r_{\parallel} .$$
 (9.78)

## 9.5.3 Stabilita víru

V předchozím se nám podařilo nalézt kvantovaný vír jako řešení GP rovnice, zatím jsme se však nezabývali otázkou, za jakých okolností může být řešením stabilním, tj. zda jej lze skutečně realizovat v experimentu. Především ze vztahu (9.77) je zřejmé, že energie vírového stavu je vždy vyšší než energie odpovídajícího stavu bez víru. To je pochopitelné: znamená to pouze, že moment hybnosti základního stavu je nulový. Jelikož však, alespoň v osově symetrické pasti, se moment hybnosti zachovává, musíme pro zjištění stability víru srovnávat jen stavy, jejichž moment hybnosti je stejný. Ze statistické mechaniky víme, že podmínku na předepsanou hodnotu jakékoli zachovávající se veličiny lze nejsnáze implementovat pomocí Lagrangeova multiplikátoru, který má význam kanonicky sdružené rychlosti. V případě momentu hybnosti L jím je úhlová frekvence  $\Omega$  a požadavek stability odpovídá minimalizaci funkcionálu  $E[\psi] - \Omega \cdot L[\psi]$ . Označíme-li energii základního stavu jako  $E_0$ , pak stav s momentem hybnosti  $L[\psi]$  bude oproti základnímu stavu energeticky výhodnější, když úhlová frekvence překročí kritickou hodnotu

$$\Omega_{\rm crit} = \frac{E[\psi] - E_0}{L[\psi]} . \tag{9.79}$$

Spojením rovnic (9.77) a (9.78) tak dostaneme kritickou úhlovou frekvenci pro stav s jedním vírem,

$$\Omega_{\rm crit} = \frac{5\hbar}{2mr_{\perp}^2} \ln \frac{\kappa'' r_{\perp}}{\xi_0} . \qquad (9.80)$$

Abychom si udělali představu o číselné velikosti kritické frekvence, vraťme se na chvíli k ilustračnímu případu izotropní harmonické pasti, který jsme rozvedli v podsekci 9.4.3 o Thomasově–Fermiho aproximaci. Pro uvedené numerické parametry dostaneme pro koherenční délku v centru pasti

$$\xi_0 = x_{\rm HO} \left(\frac{x_{\rm HO}}{15Na}\right)^{1/5} \approx 0.2 \ \mu {\rm m} \ .$$
 (9.81)

0	2	5
4	J	J

Dosazením za  $r_{\perp} = r$  z (9.51) nakonec získáme úhledný vzoreček

$$\Omega_{\rm crit} = \omega \left(\frac{x_{\rm HO}}{15Na}\right)^{2/5} \ln \left(\kappa''^{5/2} \frac{15Na}{x_{\rm HO}}\right) . \tag{9.82}$$

Číselně vyjde  $\Omega_{\rm crit}/2\pi \approx 0.13\omega/2\pi \approx 25$  Hz. Čtenáři doporučujeme průběžně porovnávat tyto úvahy ohledně BEC s popisem rotujícího supratekutého helia v kapitole 5.

Vírové řešení GP rovnice odpovídá situaci s dostatečně vysokým momentem hybnosti, kdy na každou částici připadá moment hybnosti  $\hbar$  či vyšší (za přítomnosti více jednoduchých vírů). Jak vypadá energeticky nejvýhodnější stav kondenzátu v případě, že moment hybrosti na jednu částici je mnohem menší než  $\hbar$ ? Je dobré si vzpomenout na naši diskuzi excitací kondenzátu pod rovnicí (9.65). Tam jsme pro libovolné l našli kolektivní mód s momentem hybrosti  $l\hbar$  a energií  $E_l = \hbar\omega\sqrt{l}$ . Energie na jednotku momentu hybnosti v takovém stavu je rovna  $E_l/l = \hbar\omega/\sqrt{l}$ , tedy je výhodné excitovat módy s co nejvyšším l. Srovnáním s kritériem (9.79) by se mohlo zdát, že minimální frekvence pro vybuzení takových excitací jde k nule. Potíž je v tom, že l nemůže nabývat libovolně vysokých hodnot. Fluktuace hustoty částic v těchto módech je přímo úměrná  $r^l$  a pro vysoká l je lokalizovaná v tenké vrstvičce u povrchu o tloušťce r/l. Popis módů, založený na TF aproximaci, tedy selže pro  $l > l_{\rm crit} \approx r/\delta$ , kde  $\delta$  značí tloušťku slupky, v níž nelze zanedbat příspěvek kinetické energie atomů a TF aproximace neplatí. Dá se dokonce ukázat, že pro l podstatně větší než  $l_{\rm crit}$  mají excitace jednočásticovou povahu a jejich energie je dána kinetickou energií orbitálního pohybu, a je tedy úměrná  $l^2.$  Energie na jednotku momentu hybnosti pak roste s l. Vidíme, že nejvýhodnější je excitovat módy s  $l \approx l_{\rm crit}$ . Odtud dostaneme odhad na kritickou úhlovou frekvenci, potřebnou pro excitaci těchto oscilací,

$$\Omega_{\rm crit} = \frac{\omega}{\sqrt{l_{\rm crit}}} = \omega \sqrt{\frac{\delta}{r}} \approx \omega \left(\frac{x_{\rm HO}}{15Na}\right)^{2/15} \,. \tag{9.83}$$

Srovnáním s podobným odhadem (9.82) vidíme, že pro vysoký počet částic je kritická úhlová frekvence pro vytvoření víru parametricky nižší než úhlová frekvence potřebná pro excitaci nevírových kmitů. Pro konkrétní diskutované numerické parametry harmonické pasti vychází poměr kritických frekvencí (9.83) a (9.82) zhruba roven dvěma. Při dalším zvyšování úhlové frekvence, a tím i momentu hybnosti, se začnou v kondenzátu tvořit další víry. Pro úhlové frekvence mnohem vyšší než  $\Omega_{\rm crit}$ tvoří základní stav velké množství paralelních vírů, které jsou rozmístěny rovnoměrně v uzlech trojúhelníkové Abrikosovovy mřížky.

Tvorba vírů je obecným znakem supratekutých systémů, dochází k ní tedy nejen v chladných Boseho plynech, ale také například v kapalném heliu či v přitažlivých Fermiho plynech, u nichž je supratekutost důsledkem Cooperova párování. To podrobněji rozebereme v pozdější sekci věnované právě atomovým Fermiho plynům. Zde jen dodáme, že analogií ke Grossově–Pitajevského rovnici je u spárovaných

I ESIIDACIIOVA IEZOIIAIICE



Obr. 9.8: Mřížka kvantovaných vírů v supratekutém Fermiho plynu sodíkových atomů. Pomocí Feshbachovy rezonance takto byly experimentálně realizovány víry ve všech režimech přechodu BCS–BEC.

Fermiho plynů efektivní Ginzburgova–Landauova (GL) teorie. Oba přístupy jsou formálně shodné, liší se však fyzikálními předpoklady i oborem platnosti. Zatímco GP rovnice popisuje Boseho plyn při nulové teplotě za předpokladu, že prakticky všechny částice se nacházejí v kondenzátu, GL teorie pro kondenzát Cooperových párů je dobrou aproximací blízko kritické teploty pro přechod do supratekutého stavu. Abrikosov jako první ukázal řešením GL rovnice, že při vysokém momentu hybnosti je energeticky nejvýhodnější vytvořit trojúhelníkovou mříž vírů nesoucích jednotkovou cirkulaci. Na obrázku 9.8 je znázorněno experimentální pozorování vírové mřížky v přitažlivém Fermiho plynu sodíkových atomů, a to ve všech třech režimech tzv. přechodu BCS–BEC, o němž se zmíníme později.

Nakonec poznamenejme, že naše hrubé úvahy v této podsekci platí s dostatečnou přesností pro Boseův plyn s odpudivou mezičásticovou interakcí. V případě přitažlivé interakce je obrázek podstatně jiný. Ukazuje se, že energeticky nejvýhodnější je pak totiž uložit veškerý moment hybnosti do pohybu obláčku jako celku, což odpovídá výše diskutovanému povrchovému módu s l = 1. Kvalitativně lze tento efekt vysvětlit tak, že v jádru víru dojde k lokálnímu snížení hustoty částic, čímž se zmenší energetický zisk z přitažlivé mezičásticové interakce. Vírové stavy v takovém systému budou vždy nestabilní.

# 9.6 Feshbachova rezonance

Dříve než otevřeme diskuzi fermionových plynů, zmíníme se o jednom důležitém fyzikálním jevu, který dal experimentům s řídkými atomovými plyny zcela bezprecedentní flexibilitu a kontrolu nad sílou meziatomové interakce. Atom alkalického kovu má díky nenulovému elektronovému a jadernému spinu řadu blízko položených

237

9.0

energetických hladin, jejichž degenerace je sejmuta hyperjemným štěpením. Jednotlivé stavy mají různý magnetický moment a jsou tedy dále rozštěpeny v přítomnosti magnetického pole.

Experimenty s bosonovými (fermionovými) plyny jsou typicky realizovány s atomy v jediném (dvou) polarizačním stavu. Přítomnost dalších stavů ve spektru však může zásadním způsobem ovlivnit vzájemnou interakci atomů v plynu. Jejich prvním důsledkem je, že jejich spinový stav se může neelastickým rozptylem atomů změnit. V případě magnetických pastí pak konečný stav již často není uvězněn (změní-li jeho magnetický moment při srážce znaménko, stane se pro něj z potenciálové jámy potenciálový vrchol) a atom je z pasti vypuzen. Vlivem neelastických procesů tedy dochází ke ztrátě atomů z pasti, což má za následek konečnou dobu života uvězněného obláčku. Ta zpravidla činí řádově jednotky až desítky sekund.

Druhým jevem je elastický rozptyl ve vyšších řádech poruchové teorie, při němž se atom dočasně (virtuálně) nachází v jiném spinovém stavu. Abychom pochopili základní mechanismus tohoto procesu, uvažme srážku atomů ve spinových stavech  $|i\rangle a |j\rangle$ , při níž jsou rozptýleny do obecně jiných stavů  $|i'\rangle a |j'\rangle$ . Označíme-li ještě energii spinového stavu  $|i\rangle$  jako  $\varepsilon_i$ , plyne ze zákona zachování energie relace mezi počátečním a koncovou hybností,  $\mathbf{k}_{ij}$  a  $\mathbf{k}'_{i'j'}$ ,

$$\frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{ij}^2}{2m_{\rm r}} + \varepsilon_{\rm i} + \varepsilon_j = \frac{\hbar^2 \boldsymbol{k}_{i'j'}^{\prime 2}}{2m_{\rm r}} + \varepsilon_{i'} + \varepsilon_{j'}, \qquad (9.84)$$

kde  $m_{\rm r}$  je redukovaná hmota dvoučásticové soustavy. Pro atomy stejného izotopu o hmotnosti m je  $m_{\rm r} = m/2$ . Pokud je celková energie v počátečním stavu nižší než  $\varepsilon_{i'} + \varepsilon_{j'}$ , je rozptyl do spinového stavu  $|i'j'\rangle$  energeticky zakázán. Hovoříme o zavřeném kanálu. V opačném případě je rozptylový kanál *otevřený*.

V zavřeném kanálu při dané energii E neexistují žádné asymptotické rozptylové stavy. Mohou v něm však přirozeně existovat stavy vázané. Jsou-li atomy při interakci dočasně rozptýleny do zavřeného kanálu, ve kterém se v blízkosti energie E nachází vázaný stav s energií  $E_{\rm B}$ , dojde k silné modifikaci rozptylové amplitudy v otevřeném kanálu, tzv. *Feshbachově rezonanci*. Na základě druhého řádu časové poruchové teorie intuitivně očekáváme příspěvek do amplitudy rozptylu úměrný  $1/(E - E_{\rm B})$ . Rozptylová amplituda (a tedy i rozptylová šířka a) by tudíž v okolí energie  $E_{\rm B}$  měla divergovat a změnit znaménko.

# 9.6.1 Dvoukanálový model

Podívejme se kvantitativně na jednoduchý model, v němž předpokládáme existenci jediného otevřeného a jediného zavřeného kanálu. Prostor spinových stavů je součtem podprostorů odpovídajících těmto dvěma kanálům. Řešení Schrödingerovy rovnice  $|\psi\rangle$  můžeme analogicky rozložit jako  $|\psi\rangle = |\psi_o\rangle + |\psi_z\rangle$ . Projekcí Schrödingerovy rovnice  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$  do obou podprostorů dostaneme dvě rovnice

$$(E - H_{\rm oo})|\psi_{\rm o}\rangle = H_{\rm oz}|\psi_{\rm z}\rangle , \quad (E - H_{\rm zz})|\psi_{\rm z}\rangle = H_{\rm zo}|\psi_{\rm o}\rangle , \qquad (9.85)$$

kde  $H_{oo}, H_{zz}$  jsou hamiltoniány na jednotlivých podprostorech a  $H_{oz}, H_{zo}$  nediagonální složky hamiltoniánu, spojující tyto podprostory. Ty právě zprostředkují

vazbu mezi otevřeným a zavřeným kanálem, která má za následek rezonanční rozptyl v otevřeném kanálu.

Abychom to nahlédli, vyjádříme z druhého vztahu (9.85) vlnovou funkci zavřeného kanálu jako  $|\psi_{\rm z}\rangle = (E-H_{\rm zz}+i\eta)^{-1}H_{\rm zo}|\psi_{\rm o}\rangle$ a dosadíme do vztahu prvního. Infinitezimální člen $i\eta$ zaručí, že nalezená rozp<br/>tylová řešení budou obsahovat pouze rozbíhavé vlny. Dostáváme tak Schrödingerovu rovnici pro samotný otevřený kanál, avšak s efektivním hamiltoniánem

$$H_{\rm eff} = H_{\rm oo} + H_{\rm oz} (E - H_{\rm zz} + i\eta)^{-1} H_{\rm zo} .$$
(9.86)

Označme dále  $H_{\rm oo} = H_0 + U$  a  $H_{\rm eff} = H_0 + \mathcal{U}, \mathcal{U} = U + U_{\rm eff}$ , kde U je interakční potenciál v otevřeném kanálu a  $U_{\rm eff}$  potenciál indukovaný vazbou na zavřený kanál. Rozptylová matice T při zanedbání interakce se zavřeným kanálem je dána řešením Lippmannovy–Schwingerovy (LSch) rovnice  $T = U + UG_0^{(+)}T$ , kde  $G_0^{(+)} = (E - H_0 + i\eta)^{-1}$  je retardovaný volný propagátor. Analogicky úplná rozptylová matice  $\mathcal{T}$  plyne z  $\mathcal{T} = \mathcal{U} + \mathcal{U}G_0^{(+)}\mathcal{T}$ . Formálním řešením LSch rovnice je

$$T = (1 - UG_0^{(+)})^{-1}U = U(1 - G_0^{(+)}U)^{-1} .$$
(9.87)

Napsáním  $\mathcal{T}=(1-\mathcal{U}G_0^{(+)})^{-1}\mathcal{U}$ a aplikací identity  $(A-B)^{-1}=A^{-1}+A^{-1}B(A-B)^{-1}$ s $A=1-UG_0^{(+)}$ a $B=U_{\mathrm{eff}}G_0^{(+)}$ dospějeme po krátké úpravě k výsledku

$$\mathcal{T} = T + (1 - UG_0^{(+)})^{-1} U_{\text{eff}} (1 - G_0^{(+)} \mathcal{U})^{-1} , \qquad (9.88)$$

který zřetelně odděluje příspěvky do rozptylové matice od samotného otevřeného kanálu a od interakce s kanálem zavřeným.

Chtěli bychom nyní s pomocí tohoto výsledku zjistit, jak přítomnost interakce se zavřeným kanálem ovlivní rozptylovou délku v kanálu otevřeném. Za tím účelem musíme vypočítat maticový element mezi vlastními stavy operátoru impulsu. Z definice je  $\langle {\bf k}' | T | {\bf k} \rangle = 4\pi \hbar^2 a_{\rm o}/m$  a  $\langle {\bf k}' | T | {\bf k} \rangle = 4\pi \hbar^2 a/m$ . Při výpočtu maticového elementu druhého členu v (9.88) linearizujeme v indukovaném potenciálu  $U_{\rm eff}$ , tj. v poslední závorce nahradíme  $\mathcal U$  potenciálem v otevřeném kanálu U. Tento předpoklad je oprávněný, pokud je vazba mezi kanály slabá. Z definice T-matice plyne  $T | {\bf k} \rangle = U | \psi_{\bf k}^{(+)} \rangle$ , kde  $| \psi_{\bf k}^{(+)} \rangle$  je přesný rozptylový vlastní stav hamiltoniánu  $H_{\rm oo}$ . Z (9.87) pak dostaneme  $| \psi_{\bf k}^{(+)} \rangle = (1 - G_0^{(+)} U)^{-1} | {\bf k} \rangle$ , takže (9.88) se redukuje na

$$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{\rm o}}{m} + \langle \psi_{\mathbf{k}'}^{(-)} | U_{\rm eff} | \psi_{\mathbf{k}}^{(+)} \rangle \ . \tag{9.89}$$

Znaménko "–" u bra-vektoru  $\langle \psi_{\boldsymbol{k}'}^{(-)} |$  pochází z komplexního sdružení. Z teorie rozptylu víme, že stavy  $|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}\rangle$ a  $|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}\rangle$ se liší pouze znaménkem fáze oscilující exponenciály. V limitě nulové energie však tato fáze vymizí a oba stavy tedy budou stejné.

Navíc je nízko<br/>energetický rozptyl dominovaný s-vlnou a tudíž izotropní. Je ted<br/>y $|\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}\rangle = |\psi_{\boldsymbol{k}}^{(-)}\rangle \equiv |\psi_0\rangle$ . Dosazením z (9.86) tak získáme finální vztah

$$\frac{4\pi\hbar^2 a}{m} = \frac{4\pi\hbar^2 a_{\rm o}}{m} + \sum_{\rm n} \frac{\langle n|H_{\rm zo}|\psi_0\rangle}{E - E_{\rm n}} , \qquad (9.90)$$

v němž sčítáme přes všechny (diskrétní) vlastní stavy hamiltoniánu v zavřeném kanálu.

Dostali jsme tedy očekávaný výsledek: rozptylová délka diverguje, shoduje-li se energie E srážejících se atomů v otevřeném kanálu s energií vázaného stavu v zavřeném kanálu. V okolí této energie rozptylová délka mění znaménko a je výrazně větší než nerezonanční rozptylová délka  $a_o$ , pocházející z interakce v samotném otevřeném kanálu. Jak už bylo zmíněno výše, jednotlivé kanály v praxi odpovídají různým spinovým konfiguracím interagujících atomů. Jelikož různé spinové stavy obecně mají různý magnetický moment, lze vzájemnou polohu energetických hladin v otevřeném a zavřeném kanálu měnit vnějším magnetickým polem na základě Zeemanova jevu.

Toto je výsledek zásadní důležitosti. Plyne z něj, že rozptylovou délku, a tedy efektivní interakci mezi atomy, lze ladit vnějším magnetickým polem. S pomocí Feshbachovy rezonance je možné nejen měnit její sílu, ale dokonce i znaménko. To umožnilo experimentálně realizovat spojitý (a adiabatický neboli vratný) přechod mezi BCS režimem slabě interagujících fermionů a BEC silně vázaných dvoufermionových molekul, o němž pojednáme v poslední sekci této kapitoly. V praxi můžeme závislost všech energetických hladin kromě rezonanční na magnetickém poli zanedbat a pro popis Feshbachovy rezonance si vystačíme s fenomenologickým vztahem

$$a = a_{\rm nr} \left( 1 + \frac{\Delta B}{B - B_{\rm r}} \right) \,, \tag{9.91}$$

kde  $a_{\rm nr}$  je nerezonanční část rozp<br/>tylové délky,  $B_{\rm r}$  poloha rezonance vyjádřená v jednotkách magnetického pole <br/>a $\Delta B$  její šířka.

Poznamenejme, že v důsledku vazby mezi kanály, tedy stejného jevu, který dává vzniknout rezonanci v otevřeném kanálu, získá vázaný stav v zavřeném kanálu konečnou, třebaže dlouhou dobu života. Jinými slovy, atom z tohoto vázaného stavu bude moci uniknout změnou svého spinu. V důsledku toho získá energie  $E_n$  malou imaginární část a divergence v rozptylové délce bude nahrazena ostrým, ale hladkým píkem. V praxi jsou však Feshbachovy rezonance v atomech alkalických kovů velmi ostré. Nakonec zdůrazněme, že jsme provedli analýzu pro rozptyl dvou atomů ve vakuu. Nebrali jsme v úvahu, že reálný plyn je mnohočásticový systém. Jaký vliv na dvoučásticové interakce může toto médium mít, uvidíme později při diskuzi BCS–BEC přechodu.

# 9.7 Neinteragující fermiony v pasti

Jak se kvalitativně liší fermionové a bosonové plyny? Při dostatečně vysokých teplotách nepříliš. Statistické obsazení energetických hladin je pak totiž malé a rozdíl mezi Boseovou–Einsteinovou a Fermiho–Diracovou statistikou prakticky zanedbatelný. Při nízkých teplotách je ovšem rozdíl propastný, a úměrně tomu i termodynamické chování degenerovaných kvantových plynů. Zatímco v ideálním Boseově plynu při nulové teplotě se usadí všechny atomy v základním stavu, ve Fermiho plynu obsadí nejnižší energetické hladiny ve shodě s Pauliho vylučovacím principem. Nepřekvapí proto, že kinetická energie tvoří v řadě fermionových systémů dominantní složku celkové energie a obzvláště v řídkých slabě interagujících atomových plynech dostaneme kvantitativně uspokojivý popis i při úplném zanedbání interakcí. Důležitou výjimku tvoří Fermiho systémy s přitažlivou interakcí, která způsobí Cooperovo párování a vznik supravodivého či supratekutého stavu.

Uvažujme však pro začátek plyn fermionových atomů v jediném spinovém stavu. V takovém případě jsou meziatomové interakce při nízkých teplotách silně potlačeny právě Pauliho principem: z teorie rozptylu plyne, že při nízkých energiích je účinný průřez dominovaný s-vlnou. Ta je však kvůli symetrii vlnové funkce zakázaná. Zanedbání dvoučásticových interakcí tedy pro fermiony představuje podstatně lepší přiblížení než v případě bosonů. Je-li charakteristická tepelná energie  $k_{\rm B}T$  mnohem větší než vzdálenost sousedních energetických hladin, můžeme opět nahradit sumu přes vlastní stavy hamiltoniánu integrálem přes energie s váhou danou hustotou stavů  $D(\varepsilon)$ . Ve formuli (9.11) pak pouze změníme rozdělovací funkci,

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int_0^\infty d\varepsilon \frac{D(\varepsilon)\mathcal{A}(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \ . \tag{9.92}$$

Při nulové teplotě přejde Fermiho–Diracova distribuce na skokovou funkci a integrál se zjednoduší na

$$\langle \mathcal{A} \rangle_{T=0} = \int_0^\mu D(\varepsilon) \mathcal{A}(\varepsilon) .$$
 (9.93)

Speciálně dosadíme-li za  $\mathcal{A}$  operátor počtu částic, vyjde nám  $N_{T=0} = \Omega(\mu)$ . Má-li hustota stavů tvar mocniny (9.15), plyne odtud okamžitě jednoduchý vztah mezi celkovým počtem částic a hustotou stavů na Fermiho ploše,  $N = \mu D(\mu)/\kappa$ . Pro volný fermionový plyn ve třech dimenzích tak dostaneme s pomocí rovnice (9.18)

$$\frac{N}{V} = \frac{2\mu}{3} \frac{\mu^{1/2}}{\frac{1}{2}\sqrt{\pi}} \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} = \frac{(2m\mu)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3} , \qquad (9.94)$$

ve shodě se vztahem (1.115) úvodní kapitoly. Hustotu stavů na Fermiho ploše vyjádříme nejjednodušeji jako  $D(\mu) = 3N/2\varepsilon_{\rm F}$ .

Jak se bude chovat ideální Fermiho plyn v harmonické pasti? Hustotu stavů již známe. Je dána vztahem (9.14)a pro izotropní past dá výsledek

$$\mu = \hbar \omega (6N)^{1/3} . \tag{9.95}$$

Je zajímavé si všimnout, že až na nepodstatný numerický prefaktor se Fermiho teplota, definovaná jako  $T_{\rm F} = \varepsilon_{\rm F}/k_{\rm B}$ , shoduje s kritickou teplotou pro BEC v ideálním Boseově plynu v harmonické pasti se stejným počtem částic. Tentýž závěr, jak se může každý snadno přesvědčit, platí i pro homogenní Fermiho a Boseovy plyny. Znamená to, že vliv kvantové statistiky, ač kvalitativně velice odlišný, se v obou systémech začíná projevovat při zhruba stejné teplotě.

## 9.7.1 Rozdělení hustoty a rychlosti

Rozdělení hustoty a rychlostí atomů v ideálním Boseově plynu při nulové teplotě jsme nalezli velice snadno: stačilo nám znát vlnovou funkci základního stavu v potenciálové pasti. Ve Fermiho plynu je situace v tomto směru komplikovanější, neboť je obsazeno velké množství energetických hladin. Znamená to, že musíme znát všechny odpovídající vlnové funkce a provést přes ně středování? Naštěstí ne. Můžeme totiž s výhodou použít semiklasické aproximace. Ta šla v případě bosonů (9.16) použít pouze na excitované stavy. Zde je aplikovatelná již při nulové teplotě díky tomu, že každá hladina je obsazena nejvýše jedním atomem,

$$\langle \mathcal{A} \rangle = \int \frac{d^{n} \boldsymbol{x} \, d^{n} \boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^{n}} \frac{\mathcal{A}[\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})]}{e^{\beta[\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) - \mu]} + 1} \,. \tag{9.96}$$

Rozdělení hustoty a hybnosti tak dostaneme integrací rozdělovací funkce na fázovém prostoru,  $n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) = 1/\{e^{\beta[\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})-\mu]}+1\}$ , podle hybností, resp. souřadnic. Při nulové teplotě se výpočet redukuje na integrál přes oblast fázového prostoru, vymezenou nerovností  $\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) \leq \mu$ . Ve věznícím potenciálu  $U(\boldsymbol{x})$  má energie  $\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$  obecně tvar  $\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) = \frac{p^2}{2m} + U(\boldsymbol{x})$  a integraci přes hybnosti lze provést vždy analyticky, což vede k rozdělení hustoty

$$n_{T=0}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{6\pi^2} \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [\mu - U(\boldsymbol{x})] \right\}^{3/2}$$
(9.97)

pro  $U(\boldsymbol{x}) < \mu$ , jinak  $n_{T=0}(\boldsymbol{x}) = 0$ .

Tento výsledek je formálně velice podobný rozdělení hustoty v interagujícím Boseově plynu v TF aproximaci (9.48). Hranice uvězněného obláčku je v obou případech stejná, daná relací  $U(\mathbf{x}) = \mu$ . Díky jiné mocnině výrazu  $\mu - U(\mathbf{x})$  jsou fermiony více soustředěné blízko středu pasti než bosony. Je však potřeba okamžitě dodat, že fyzikální obsah rovnic (9.48) a (9.97) je zcela odlišný! TF aproximace pro bosony je založená na předpokladu, že vzájemná (odpudivá) interakce je natolik silná, aby bylo možné zanedbat příspěvek kinetické energie atomů do celkové energie. Naopak relace (9.97) byla odvozena pro *neinteragující* Fermiho plyn, kde kvantový Pauliho tlak hraje klíčovou roli. Vzpomeňme na úvodní kapitolu, kde bylo explicitně ukázáno, že v limitě nulové teploty tlak ideálního bosonového plynu vymizí, avšak fermionového nikoli.

Rozdělení hybností nelze z (9.96) odvodit v obecném případě explicitně. Jeden důležitý závěr však učinit lze: jelikož energie  $\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$  závisí jen na čverci hybnosti, bude (lokální) rozdělení hybností vždy izotropní, bez ohledu na tvar věznícího potenciálu! To je opět v ostrém kontrastu s bosonovým plynem, kde je rozdělení hybností dáno vlnovou funkcí základního stavu a pro anizotropní past má opačnou asymetrii než rozdělení hustoty v souřadnicovém prostoru. Konkrétně pro past tvaru (9.12) dostaneme rozdělení hybností integrálem distribuce  $n(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$  přes elipsoid s poloosami  $\sqrt{2m\mu - \boldsymbol{p}^2}/m\omega_i$ . Po drobných úpravách obdržíme

$$n_{T=0}(\boldsymbol{p}) = \frac{8N}{\pi^2 p_{\rm F}^3} \left(1 - \frac{p^2}{p_{\rm F}^2}\right)^{3/2} , \qquad (9.98)$$

nonogenin i ennino piyn s pritazivou interakc

kde  $p_{\rm F} = \sqrt{2m\mu}$  je Fermiho hybnost. Dosazením za chemický potenciál z (9.95) navíc získáme vztah pro poloměr obláčku, analogický (9.51), a Fermiho hybnost,

$$r = (48N)^{1/6} x_{\rm HO}, \quad k_{\rm F} = \frac{(48N)^{1/6}}{x_{\rm HO}} .$$
 (9.99)

Ačkoli závislost na celkovém počtu částic napovídá, že pro velmi vysoké N by měl fermionový obláček být o něco menší než bosonový, přítomnost rozptylové délky v (9.51) způsobí, že pro typické harmonické pasti používané v experimentech je tomu právě naopak. Konkrétně pro numerické hodnoty použité v (9.53) bude poměr poloměrů  $r_{\rm Fermi}/r_{\rm Bose} \approx 2.2$ .

# 9.8 Homogenní Fermiho plyn s přitažlivou interakcí

Podívejme se nyní na případ Fermiho plynu obsahujícího atomy ve dvou různých vnitřních stavech. Může jít o atomy různých prvků či různých izotopů téhož prvku, případně o atomy téhož izotopu ve dvou různých hyperjemných stavech. Jak už jsme zmínili a jak je všeobecně známo z teorie supravodivosti, přitažlivá (libovolně slabá) interakce způsobí kvalitativní změnu základního stavu mnohofermionového systému. Podrobný rozbor BCS teorie supravodivosti je předmětem kapitoly 13. Přesto zde naznačíme odvození teorie středního pole při nulové teplotě, neboť v případě Fermiho plynu s přitažlivou interakcí laditelnou pomocí Feshbachovy rezonance má své specifické rysy. Naším výchozím bodem bude mnohočásticový hamiltonián

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_{\boldsymbol{k}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} a_{\boldsymbol{k}\sigma} - \frac{g_{\Lambda}}{2V} \sum_{\sigma,\sigma'} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'},\boldsymbol{q}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}-\boldsymbol{q},\sigma'} a_{\boldsymbol{k'}\sigma'} a_{\boldsymbol{k}\sigma} , \qquad (9.100)$$

který je zobecněním vztahu (1.80) úvodní kapitoly pro fermiony s dvěma spinovými polarizacemi (vnitřními stavy), které budeme značit  $\sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow$ . Jak je zvykem, odečetli jsme od hamiltoniánu operátor  $\mu \hat{N}$ , což se v kinetickém členu projeví záměnou  $\varepsilon_{\mathbf{k}}^{0} \rightarrow \xi_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}^{0} - \mu$ . Zároveň jsme explicitně zdůraznili přitažlivost interakce změnou znaménka interakčního členu. Index  $\Lambda$  u vazbové konstanty vysvětlíme později. Mlčky předpokládáme, že počet atomů v obou spinových stavech je stejný, tudíž je lze popsat jedním společným chemickým potenciálem  $\mu$ . Obecnější situace s rozdílnými počty atomů přináší mnoho zajímavých kvalitativně nových jevů, její popis je však nad rámec tohoto textu.

## 9.8.1 BCS teorie

V následující diskuzi se omezíme na párování atomů s opačným spinem a nulovou celkovou hybností. To znamená, že v hamiltoniánu ponecháme jen členy, pro něž platí  $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{0}$ , čímž se redukuje na standardní BCS hamiltonián,

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_{\boldsymbol{k}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} a_{\boldsymbol{k}\sigma} - \frac{g_{\Lambda}}{V} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'\uparrow} a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}'\downarrow} a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} \ .$$
(9.101)

V aproximaci sředního pole uvažujeme existenci nenulové vaku<br/>ové střední hodnoty (kondenzátu)  $\langle a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle$  a předpokládáme, že fluktu<br/>ace nad tímto kondenzátem,

 $a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow} - \langle a_{-\mathbf{k}\downarrow}a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ , jsou malé. Hamiltonián v nich pak můžeme linearizovat, čímž dostaneme (až na pro naše účely nepodstatnou konstantu)

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}\sigma} \xi_{\boldsymbol{k}} a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\sigma} a_{\boldsymbol{k}\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k}} \Delta (a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\uparrow} a^{\dagger}_{-\boldsymbol{k}\downarrow} + a_{-\boldsymbol{k}\downarrow} a_{\boldsymbol{k}\uparrow}) , \qquad (9.102)$$

kde jsme zavedli  $\Delta = -\frac{g_{\Lambda}}{V} \sum_{k} \langle a_{-k \downarrow} a_{k \uparrow} \rangle$ . Vhodnou změnou fáze anihilačních a kreačních operátorů lze $\Delta$ vždy učinit reálné. Spektrum hamiltoniánu teď můžeme najít exaktně, nejlépe s pomocí Nambuova dubletního formalismu, v němž hamiltonián nabude kompaktní tvar

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \begin{pmatrix} \xi_{\boldsymbol{k}} & \Delta \\ \Delta & -\xi_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} A_{\boldsymbol{k}}, \quad A_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} a_{\boldsymbol{k}\uparrow} \\ a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^{\dagger} \end{pmatrix} .$$
(9.103)

To už vypadá jako hamiltonián harmonického oscilátoru, jen ještě musíme diagonalizovat 2 × 2 matici koeficientů. Její vlastní čísla jsou  $\pm E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$ a do diagonálního tvaru ji přivedeme unitární transformací,

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} A_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \mathcal{U}_{\boldsymbol{k}} \tau_3 \mathcal{U}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} A_{\boldsymbol{k}}, \quad \mathcal{U}_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \cos \theta_{\boldsymbol{k}} & -\sin \theta_{\boldsymbol{k}} \\ \sin \theta_{\boldsymbol{k}} & \cos \theta_{\boldsymbol{k}} \end{pmatrix} , \quad (9.104)$$

kde  $\tau_3$  je Pauliho matice v Nambuově prostoru. Úhel otočení  $\theta_k$  je dán vztahem tan  $2\theta_k = \Delta/\xi_k$ . Nakonec zbývá identifikovat

$$\mathcal{U}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} A_{\boldsymbol{k}} = \begin{pmatrix} \alpha_{\boldsymbol{k}} \\ \beta_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger} \end{pmatrix}, \quad \text{pak} \quad \hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} (\alpha_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \alpha_{\boldsymbol{k}} + \beta_{\boldsymbol{k}}^{\dagger} \beta_{\boldsymbol{k}}) , \qquad (9.105)$$

pričemž jsme opět zanedbali konstantní část hamiltoniánu (která je sice velmi důležitá, neboť určuje kondenzační energii BCS stavu, nehraje však roli v naší diskuzi). Operátory  $\alpha_{\mathbf{k}}, \beta_{\mathbf{k}}$  tudíž anihilují kvazičástice s energií  $E_{\mathbf{k}}$ . Stav s nejnižší energií  $|\text{BCS}\rangle$  je pak evidentně definovaný relacemi  $\alpha_{\mathbf{k}}|\text{BCS}\rangle = \beta_{\mathbf{k}}|\text{BCS}\rangle = 0$ . Souvislost s původními anihilačními a kreačními operátory je dána maticovými elementy matice  $\mathcal{U}_{\mathbf{k}},$ 

$$a_{\mathbf{k}\uparrow} = \alpha_{\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} - \beta_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \sin \theta_{\mathbf{k}}, \quad a_{-\mathbf{k}\downarrow} = \alpha_{\mathbf{k}}^{\dagger} \sin \theta_{\mathbf{k}} + \beta_{-\mathbf{k}} \cos \theta_{\mathbf{k}} .$$
(9.106)

Dosazením do původní definice parametru uspořádání  $\Delta$  a spočtením vakuové střední hodnoty  $\langle a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$  obdržíme selfkonzistentní rovnici energetické mezery (angl. gap equation):

$$\Delta = \frac{g_{\Lambda}}{V} \sum_{k} \frac{\Delta}{2E_{k}} . \tag{9.107}$$

V dalším ještě budeme potřebovat znát celkovou hustotu částic n. Použijeme definici  $n = \frac{1}{V} \sum_{k\sigma} a^{\dagger}_{k\sigma} a_{k\sigma}$  a dosadíme z (9.106),

$$n = \frac{2}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \sin^2 \theta_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{V} \sum_{\boldsymbol{k}} \left( 1 - \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}} \right) .$$
(9.108)

## 9.8.2 Renormalizace vazbové konstanty

Suma přes hybnosti v rovnici energetické mezery<br/>(9.107) je očividně divergentní. Mohlo by se zdát, že jsme se v průběhu jejího odvození dopustili příliš hrubých zjednodušení. Fyzikální příčina ovšem tkví v tom, že jsme v hamiltoniánu uvažovali kontaktní interakci. Jak jsme už dříve několikrát zdůraznili, taková aproximace je dobře definovaná při nízkých energiích, kdy je účinný průřez dvoučásticových interakcí dominován s-vlnou. V sumě v (9.107) však sčítáme přes všechny možné hodnoty hybnosti.

Tento problém lze vyřešit předpokladem, že vazbová konstanta  $g_{\Lambda}$  představuje *efektivní interakci*, platnou pro hybnosti nižší než určitá, předem daná škála,  $|\mathbf{k}| < \Lambda$ . Než se pokusíme vyřešit rovnici (9.107), musíme tedy nejprve pochopit, jak souvisí  $g_{\Lambda}$  s fyzikální rozptylovou délkou a.

Pro obecnou dvoučásticovou interakci U zapíšeme LSch rovnici,  $T = U + UG_0^{(+)}T$ , v impulsové reprezentaci,

$$\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = \langle \mathbf{k}'|U|\mathbf{k}\rangle + \int \frac{d^3\mathbf{k}''}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{k}'|U|\mathbf{k}''\rangle G_0^{(+)}(\mathbf{k}'')\langle \mathbf{k}''|T|\mathbf{k}\rangle .$$
(9.109)

Zde integrujeme přes všechny hybnosti v intermediálním stavu. Integrál konverguje díky asymptotickému poklesu Fourierova obrazu potenciálu při velkých hybnostech. Přímým dosazením se snadno přesvědčíme, že tutéž integraci můžeme rozdělit do dvou kroků,

$$\langle \boldsymbol{k}' | U_{\text{eff},\Lambda} | \boldsymbol{k} \rangle = \langle \boldsymbol{k}' | U | \boldsymbol{k} \rangle + \int_{|\boldsymbol{k}''| > \Lambda} \frac{d^3 \boldsymbol{k}''}{(2\pi)^3} \langle \boldsymbol{k}' | U | \boldsymbol{k}'' \rangle G_0^{(+)}(\boldsymbol{k}'') \langle \boldsymbol{k}'' | U_{\text{eff},\Lambda} | \boldsymbol{k} \rangle , (9.110)$$

$$\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle = \langle \boldsymbol{k}'|U_{\text{eff},\Lambda}|\boldsymbol{k}\rangle + \int_{|\boldsymbol{k}''|<\Lambda} \frac{d^3 \boldsymbol{k}''}{(2\pi)^3} \langle \boldsymbol{k}'|U_{\text{eff},\Lambda}|\boldsymbol{k}''\rangle G_0^{(+)}(\boldsymbol{k}'')\langle \boldsymbol{k}''|T|\boldsymbol{k}\rangle \ .(9.111)$$

V prvním kroku zahrneme všechny mezistavy s hybností větší než  $\Lambda$  do selfkonzistentní definice efektivní interakce  $U_{\text{eff},\Lambda}$ . V druhém kroku použijeme tuto interakci k výpočtu fyzikální *T*-matice, přičemž už uvažujeme jen hybnosti nižší než  $\Lambda$ . Zdůrazněme, že výsledná *T*-matice, na rozdíl od efektivní interakce  $U_{\text{eff},\Lambda}$ , je zcela nezávislá na volbě škály  $\Lambda$ .

Speciálně pro rozp<br/>tyl dvou částic o stejné hmotnosti m je při nízkých energiích<br/>  $\langle \mathbf{k}'|T|\mathbf{k}\rangle = 4\pi\hbar^2 a/m$ . Předpokládáme-li navíc, že škála  $\Lambda$  je tak nízká, že i efektivní interakci lze považovat za kontaktní jako v hamiltoniánu (9.101), <br/>  $U_{\rm eff,\Lambda} = -g_{\Lambda}$ , přejde (9.111) v limitě nulové energie na tvar

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = -\frac{1}{g_{\Lambda}} + \int_{|\mathbf{k}| < \Lambda} \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} .$$
(9.112)

Faktor 2 ve jmenovateli posledního zlomku pochází z toho, že kinetická energie relativního pohybu o hybnosti  $\mathbf{k}$  je  $\hbar^2 \mathbf{k}^2/m$ . Rozptylovou délku *a* můžeme identifikovat s *renormalizovanou vazbovou konstantou* ve smyslu běžně užívaném v kvantové teorii pole.

Tzv. holá vazbová konstanta  $g_{\Lambda}$  představuje efektivní interakci platnou pro hybnosti nižší než  $\Lambda$ . V gap rovnici (9.107) tedy pak také musíme sčítat jen přes  $|\mathbf{k}| < \Lambda$ . Po náhradě sumy integrálem a dosazení za  $g_{\Lambda}$  dostaneme spolu s rovnicí pro hustotu částic (9.108) soustavu

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}\right), \quad n = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left(1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}}\right) . \tag{9.113}$$

Oba tyto integrály jsou již konvergentní a škálu  $\Lambda$  tedy můžeme poslat do nekonečna. Výše jsme sice uvedli, že by měla být dostatečně malá, aby efektivní interakce  $U_{\text{eff},\Lambda}$  nezávisela na hybnosti, což je samozřejmě pravda. Naštěstí integrandy v (9.113) rychle ubývají pro  $|\xi_k| \gg \Delta$ , takže limita  $\Lambda \to \infty$  je čistě formální.

## 9.8.3 Přechod BCS–BEC

Formule (9.113) představují soustavu rovnic pro energetickou mezeru  $\Delta$  a chemický potenciál  $\mu$  pro zadané hodnoty hustoty n a rozptylové délky a. Srovnejme tento výsledek s klasickou teorií supravodivosti BCS. Tam řešíme jedinou rovnici pro energetickou mezeru pro danou hodnotu chemického potenciálu. Při nulové teplotě je tato zpravidla velice blízko Fermiho energii; přesná rovnost nastane v limitě nekonečně slabé interakce. Ukazuje se, současné řešení rovnice pro chemický potenciál při zadané hustotě částic (tedy z hlediska statistické fyziky přechod z grandkanonického do kanonického souboru) je klíčové pro kvalitativně správný popis režimu silné interakce [3].

Než se pustíme do řešení rovnic (9.113), bude dobré si vyjasnit, co od něj vlastně očekáváme. Vstupním parametrem, který zásadně ovlivňuje fyzikální vlastnosti řešení, je dvoučásticová rozptylová délka a. Z teorie rozptylu je známo, že při nízkých energiích určuje fázový posuv v s-vlně  $\delta_0(k)$  vztahem tan $\delta_0(k) = -ka$ . Parciální amplituda rozptylu v s-vlně se pak rovná

$$f_0(k) = \frac{1}{-k\cot\delta_0(k) + ik} = \frac{1}{\frac{1}{a} + ik} .$$
(9.114)

Pro slabou přitažlivou interakci je fázový posuv  $\delta_0$  malý a kladný, tedy rozptylová délka je malá a záporná. Při spojitém zesilování interakce (například vnějším magnetickým polem) fázový posuv roste a rozptylová délka klesá do velkých záporných hodnot. Při dalším zesílení interakce se nakonec dostaneme do bodu, kde je fázový posuv roven  $\pi/2$  a rozptylová délka diverguje. To přesně odpovídá Feshbachově rezonanci (9.91). Zesílíme-li interakci ještě více, fázový posuv spojitě vzroste nad  $\pi/2$ , přičemž rozptylová délka změní znaménko do velkých kladných hodnot a začne opět klesat. Extrémně silné přitažlivé interakci odpovídá malá kladná hodnota a.

Co se stalo v bodě rezonance, v němž rozptylová délka diverguje? Došlo k nějakému druhu fázového přechodu či jiné singularitě? Pohled na fázový posuv  $\delta_0$  nás přesvědčí, že tomu tak není. Fázový posuv i rozptylová amplituda a účinný průřez se mění zcela spojitě. Něco se však přece změnilo. Při obrácení znaménka rozptylové délky ze záporného na kladné se komplexní pól v amplitudě  $f_0(k)$  přehoupne z dolní

do horní poloroviny komplexní hybnosti. To odpovídá existenci reálného vázaného stavu! Vazebná energie, příslušející pólu k=i/a, je $E_{\rm B}=\hbar^2k^2/2m_{\rm r}=-\hbar^2/ma^2$ .

Cooperovo párování a supratekutý stav tedy existují ve dvou kvalitativně odlišných, avšak spojitě souvisejících režimech. Pro a < 0 hovoříme o **režimu BCS**. Jak záhy uvidíme, v základním stavu zde dochází ke Cooperovu párování jen blízko Fermiho hladiny. Naopak pro a > 0 mluvíme o **režimu BEC**. Ten je charakteristický existencí vázaného dvoučásticového stavu. Fermiony tedy tvoří dvoučásticové molekuly, **ty se ovšem řídí Boseovou–Einsteinovou statistikou!** Základní stav lze potom popsat jako BEC kompozitních molekul. Jelikož mezi oběma režimy neexistuje žádná ostrá hranice či fázový přechod, vžil se termín přechod BCS–BEC (angl. *BCS–BEC crossover*). Na pomezí mezi BCS a BEC režimem se nachází **bod unitarity**, v němž rozptylová délka diverguje.

V bodě unitarity vykazuje Fermiho plyn řadu fascinujících vlastností. Podrobná diskuze by daleko přesáhla rámec tohoto textu, přesto se zmíníme aspoň krátce. Základním rysem je *univerzalita*: v limitě  $a \to \infty$  zůstane jediným parametrem systému Fermiho hybnost, případně mezičásticová vzdálenost. Libovolnou fyzikální pozorovatelnou veličinu lze potom vyjádřit, v závislosti na jejím rozměru, jako příslušnou mocninu Fermiho hybnosti či energie, vynásobenou pouhým číslem. Chování unitárního Fermiho plynu je tedy při nulové teplotě plně popsáno sadou čísel, která nezávisejí na volbě systému. To bylo experimentálně potvrzeno studiem rezonančního plynu atomů různých prvků. Termodynamické vlastnosti při nenulové teplotě jsou pak dány univerzální funkcí poměru  $T/T_{\rm F}$  [8]. Jako konkrétní příklad univerzálního parametru uveďme parametr $\xi$ , definovaný pomocí chemického potenciálu při nulové teplotě,  $\xi = \mu/\varepsilon_{\rm F}$ . Stanovení jeho hodnoty bylo věnováno značné teoretické i experimentální úsilí. Víme už, že jeho hodnota se pohybuje zhruba v rozmezí 0.40 až 0.45 [9]. Stejný parametr  $\xi$  určuje řadu dalších pozorovatelných veličin; například střední energie připadající na jednu částici je rovna  $E = \frac{3}{5}\xi\varepsilon_{\rm F}$ , termodynamická rychlost zvuku je pak  $c = v_{\rm F} \sqrt{\xi/3}$ , kde  $v_{\rm F} = k_{\rm F}/m$  je Fermiho rychlost.

# 9.8.4 Výsledky v aproximaci středního pole

Vraťme se k řešení soustavy rovnic (9.113). Lze je vyjádřit v analytické podobě pomocí eliptických integrálů [10], my se však spokojíme s BCS a BEC limitami a numerickou ilustrací obecného případu. Jako první si uvědomíme, že vstupními parametry soustavy rovnic (9.113) jsou hustota n a rozptylová délka a, z nichž lze vytvořit jedinou bezrozměrnou kombinaci,  $na^3$ . Ekvivalentně můžeme použít vztah (1.117) úvodní kapitoly k *definici* Fermiho hybnosti,  $k_{\rm F} = (3\pi^2 n)^{1/3}$ . Bezrozměrnou proměnnou  $1/k_{\rm F}a$  budeme měřit sílu mezičásticové interakce, zatímco jako jednotka energie poslouží Fermiho energie,  $\varepsilon_{\rm F} = \hbar^2 k_{\rm F}^2/2m$ . S jejich pomocí přepíšeme rovnice (9.113) jako soustavu pro bezrozměrné neznámé  $\bar{\Delta} = \Delta/\varepsilon_{\rm F}$  a  $\bar{\mu} = \mu/\varepsilon_{\rm F}$ :

$$-\frac{\pi}{2k_{\rm F}a} = \int_0^\infty dx \left[\frac{x^2}{\sqrt{(x^2 - \bar{\mu})^2 + \bar{\Delta}^2}} - 1\right] , \qquad (9.115)$$

$$\frac{2}{3} = \int_0^\infty dx \, x^2 \left[ 1 - \frac{x^2 - \bar{\mu}}{\sqrt{(x^2 - \bar{\mu})^2 + \bar{\Delta}^2}} \right] \,. \tag{9.116}$$

V limitě BCS je energetická mezera  $\Delta$  velmi malá a chemický potenciál prakticky roven své hodnotě pro volný Fermiho plyn, tedy Fermiho energii  $\varepsilon_{\rm F}$ . Skutečně, pohledem na (9.116) se přesvědčíme, že  $\bar{\mu} = 1$  je jejím řešením v limitě  $\bar{\Delta} \to 0$ . Řešení rovnice energetické mezery (9.115) je trochu delikátnější.

V integrálu na pravé straně (9.115) položíme  $\bar{\mu} = 1$  a v čitateli zlomku rozepíšeme  $x^2 = (x^2 - 1) + 1$ . V prvním členu pak už můžeme provést limitu  $\Delta \to 0$ ,

$$\int_0^\infty dx \left[ \frac{x^2}{\sqrt{(x^2 - \bar{\mu})^2 + \bar{\Delta}^2}} - 1 \right] \approx -2 + \int_0^\infty dx \frac{1}{\sqrt{(x^2 - 1)^2 + \bar{\Delta}^2}} \,. \tag{9.117}$$

Zbývající integrál má v limitě  $\Delta \to 0$  logaritmickou singularitu. Integrační oblast tedy rozdělíme na intervaly  $(1 - \delta, 1 + \delta)$  a  $(0, 1 - \delta) \cup (1 + \delta, \infty)$ . Jelikož v limitě nekonečně slabé interakce bude i energetická mezera zanedbatelně malá, můžeme vždy dosáhnout  $\overline{\Delta} \ll \delta \ll 1$ . V integrálu přes  $(1 - \delta, 1 + \delta)$  pak nahradíme  $(x^2 - 1)^2 \approx 4(x - 1)^2$ , čímž dostaneme argsinh  $\frac{2\delta}{\Delta} \approx \ln \frac{4\delta}{\Delta}$ . V integrálu přes  $(0, 1 - \delta) \cup (1 + \delta, \infty)$  naopak pošleme  $\Delta \to 0$  a pro malé  $\delta$  nám vyjde ln  $\frac{2}{\delta}$ . Závislost na libovolném parametru  $\delta$  se v součtu vyruší a řešení rovnice (9.115) v limitě BCS nabude asymptotický tvar

$$\frac{\Delta}{\varepsilon_{\rm F}} = \frac{8}{e^2} \exp\left(\frac{\pi}{2k_{\rm F}a}\right) \ . \tag{9.118}$$

Dostali jsme všeobecně známý výsledek, že energetická mezera ubývá exponenciálně se slábnoucí interakcí. Rozdíl oproti kovovým supravodičům spočívá v tom, že zatímco tam je faktor před exponenciálou úměrný Debyeově energii a pochází z přitažlivé interakce zprostředkované výměnou fononů, zde je kompletně určený Fermiho energií fermionového plynu.

Jak již víme, v režimu BEC tvoří dva fermiony ve vakuu vázaný stav. To znamená, že chemický potenciál, který udává energii potřebnou na přidání jedné částice do systému, bude záporný. Jak vzápětí uvidíme, je v limitě BEC, kdy  $a \rightarrow 0+$ ,  $\bar{\Delta} \ll |\bar{\mu}|$ . S tímto předpokladem rozvineme pravou stranu (9.116) do prvního řádu v  $\bar{\Delta}^2$ , což vede ke vztahu

$$\frac{4}{3} = \bar{\Delta}^2 \int_0^\infty dx \frac{x^2}{(x^2 - \bar{\mu})^2} = \frac{\pi \bar{\Delta}^2}{4\sqrt{|\bar{\mu}|}} .$$
(9.119)

V rovnici energetické mezery (9.115) položíme přímo  $\overline{\Delta} = 0$  a po triviální integraci a zpětném dosazení do (9.119) obdržíme asymptotické chování energetické mezery a chemického potenciálu v limitě BEC:

$$\mu = -\frac{\hbar^2}{2ma^2}, \quad \frac{\Delta}{\varepsilon_{\rm F}} = \frac{4}{\sqrt{3\pi k_{\rm F}a}} . \tag{9.120}$$



Obr. 9.9: Řešení rovnic středního pole pro nulovou a kritickou teplotu. Čárkovaně jsou vyznačeny limitní případy BCS a BEC, odpovídající analytickým formulím (9.118) a (9.120). Čerchované linky: výsledky v aproximaci středního pole s Gorkovovou–Melik-Barkhudarovovou korekcí k interakci. Tenkými tečkovanými čárami jsou zobrazeny výsledky NSR teorie pro kritickou teplotu.

Přesné numerické řešení soustavy rovnic (9.113) je znázorněno na obr. 9.9. Limitní chování, odpovídající vztahům (9.118) a (9.120), je vyznačeno čárkovaně. S použitím logaritmické škály je exponenciální ubývání energetické mezery v limitě BCS  $(-1/k_{\rm F}a \rightarrow +\infty)$  jasně patrné. Rovnice (9.113) jsme odvodili pro případ nulové teploty. Zobecnění na nenulovou teplotu již mírně přesahuje rámec tohoto textu, je však přímočaré. Pro zajímavost zde uvedeme alespoň výsledek,

$$-\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left( \frac{\tanh\frac{E_{\mathbf{k}}}{2T}}{2E_{\mathbf{k}}} - \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) , \quad n = \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \left( 1 - \frac{\xi_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\frac{E_{\mathbf{k}}}{2T} \right) .$$
(9.121)

Řešením této soustavy je možné nalézt například kritickou teplotu  $T_c$ , při níž energetická mezera  $\Delta$  vymizí. Numerické výsledky pro  $T_c$  a odpovídající chemický potenciál  $\mu_c$  jsou také zobrazeny na obr. 9.9. V BCS limitě lze odvodit jednoduchý vztah mezi kritickou teplotou a energetickou mezerou při nulové teplotě,

$$\frac{k_{\rm B}T_{\rm c}}{\Delta_0} = \frac{e^{\gamma}}{\pi} \approx 0.567 . \qquad (9.122)$$

Než uzavřeme, uveďme dvě poznámky k mezi platnosti zde použité aproximace

středního pole. Především jsme všechny výsledky vyjadřovali pomocí dvoučásticové rozptylové délky a, která popisuje interakci dvou atomů ve vakuu. Jak ukázali Gorkov a Melik-Barkhudarov [11], po řádném započtení vlivu média na dvoučásticovou interakci dojde v limitě BCS k redukci energetické mezery o konstantní faktor; v (9.118) je třeba nahradit  $8/e^2 \rightarrow (2/e)^{7/3}$ . Stejným faktorem se změní také kritická teplota, takže BCS poměr (9.122) zůstane nezměněn.

Aproximace středního pole poskytuje spolehlivý výpočetní nástroj v režimu BCS a při velmi nízkých teplotách také v limitě BEC. Zcela však selhává při předpovědi pro kritickou teplotu na BEC straně přechodu. Zde fermiony tvoří těsně vázané molekuly: skutečně, podle (9.120) roste jejich vazebná energie v limitě  $a \rightarrow 0+$  jako  $1/a^2$ . Vzájemná interakce těchto molekul je však velice slabá. Přímým řešením čtyřčásticového problému lze ukázat, že rozptylová délka popisující nízkoenergetickou interakci molekul je ve skutečnosti přímo úměrná a,

$$a_{\rm B} \approx 0.60 \ a$$
 . (9.123)

Systém se tedy chová jako slabě interagující Boseův plyn! Jeho kritickou teplotu můžeme odhadnout s použitím výsledků úvodní kapitoly. Vztah (1.44) úvodní kapitoly nám řekne  $k_{\rm B}T_{\rm c} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_{\rm B}} \left[\frac{n_{\rm B}}{\zeta(3/2)}\right]^{2/3}$ , kde  $m_{\rm B} = 2m$  a  $n_{\rm B} = n/2$  je hmotnost a hustota molekul. Vyjádřením hustoty pomocí Fermiho energie pak okamžitě dostaneme

$$\frac{kT_{\rm c}}{\varepsilon_{\rm F}} = \frac{2\pi}{\left[6\pi^2\zeta(\frac{3}{2})\right]^{2/3}} \approx 0.218 \;. \tag{9.124}$$

Kritická teplota by tedy v limitě BEC měla jít k této konstantě. Aproximace středního pole však předpovídá rostoucí funkci. Fyzikální příčinou tohoto selhání je, že kritická teplota je v zásadě určena hustotou tepelně excitovaných bosonových molekul. Aproximace středního pole však bere do úvahy pouze fermionové kvazičástice, a tím zásadním způsobem podceňuje celkovou hustotu. Popisuje sice stále správně dynamiku párování, ta však má v limitě BEC vliv pouze na vazebnou energii molekul, nikoli na termodynamiku takto vzniklého bosonového plynu. Bosonové stupně volnosti jsou řádně vzaty do úvahy v přístupu (tzv. NSR teorii), který rozvinuli Nozières a Schmitt-Rink [12].

# 9.9 Aproximace lokální hustoty

Zcela na závěr bychom se rádi stručně zmínili o jedné výpočetní metodě, která je syntézou různých aproximací, jež jsme dosud použili, a dovoluje jejich systematické rozšíření. Je známa pod názvem aproximace lokální hustoty (angl. *local density approximation*) a umožňuje mimo jiné aplikovat výsledky předcházející sekce na Fermiho plyn s přitažlivou interakcí uvězněný v pasti. Výchozím předpokladem je, že systém se lokálně chová jako homogenní. Celková hustota energie při nulové teplotě potom sestává ze dvou složek: vnitřní energie  $\varepsilon[n(\boldsymbol{x})]$ , závislé pouze na lokální hustotě částic  $n(\boldsymbol{x})$ , a energie ve vnějším poli,  $U(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{x})$ . Celková energie je tedy funkcionálem rozdělení hustoty  $n(\boldsymbol{x})$ ,

$$E[n] = \int d^3 \boldsymbol{x} \left\{ \varepsilon[n(\boldsymbol{x})] + U(\boldsymbol{x})n(\boldsymbol{x}) \right\} .$$
(9.125)

Stejně jako při odvození GP rovnice (9.40) teď použijeme variační princip s vazbou, zajišťující konstantní celkový počet částic,  $N[n] = \int d^3 \boldsymbol{x} n(\boldsymbol{x})$ . Příslušný Lagrangeův multiplikátor budeme v této sekci značit  $\mu_0$ . Variační rovnice, jež určuje selfkonzistentně distribuci  $n(\boldsymbol{x})$ , má jednoduchý tvar

$$\mu_0 = \mu[n(\mathbf{x})] + U(\mathbf{x}) , \qquad (9.126)$$

kde  $\mu(n) = \partial \varepsilon(n)/\partial n$  je termodynamický chemický potenciál. Hlavní přednost aproximace lokální hustoty tkví v tom, že závislost  $\varepsilon(n)$  není ničím jiným než stavovou rovnicí, platnou bez ohledu na vnější potenciál  $U(\boldsymbol{x})$ , a můžeme ji tedy změřit či spočíst v jednodušším případě homogenního systému. Rovnice (9.126) pak má jednoduchou interpretaci: celkový chemický potenciál, daný součtem lokálního chemického potenciálu  $\mu[n(\boldsymbol{x})]$  a vnějšího pole  $U(\boldsymbol{x})$ , musí být v termodynamické rovnováze konstantní.

## 9.9.1 Příklady použití

Z GP rovnice (9.40) okamžitě vidíme, že pro homogenní slabě interagující Boseův plyn je chemický potenciál prostě  $\mu(n) = gn$ . Dosazením do (9.126) zjistíme, že se v tomto případě aproximace lokální hustoty redukuje na TF aproximaci (9.48)! Rovnice (9.126) však umožňuje spočíst systematicky korekce k TF aproximaci. Bez důkazu uvedeme, že po započtení první poruchové opravy bude chemický potenciál Boseova plynu dán vztahem

$$\mu(n) = gn\left(1 + \frac{32}{3\sqrt{\pi}}\sqrt{na^3}\right) \ . \tag{9.127}$$

Iterativním řešením rovnice (9.126) pak dostaneme korekci k TF výsledku (9.48),

$$n(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{g} [\mu_0 - U(\boldsymbol{x})] - \frac{4m^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} [\mu_0 - U(\boldsymbol{x})]^{3/2} .$$
(9.128)

Jak už jsme zmínili výše, v případě slabě (odpudivě) interagujícího Fermiho plynu je velice dobrou aproximací úplné zanedbání vzájemné interakce, neboť největší příspěvek k celkové vnitřní energii pochází z Pauliho principu. Chemický potenciál je tedy prakticky dán vztahem (9.94) pro ideální Fermiho plyn,  $\mu(n) = (6\pi^2 n)^{2/3} \hbar^2/(2m)$ . Dosazením této stavové rovnice do (9.126) přesně reprodukujeme náš předchozí vztah (9.97), původně odvozený ze semiklasické aproximace pro distribuční funkci na fázovém prostoru.

Zajímal-li by čtenáře skutečný vliv interakce, pak dodáme, že v prvním přiblížení (Hartreeho aproximaci) nabude chemický potenciál tvar

$$\mu = \varepsilon_{\rm F} \left( 1 + \frac{4}{3\pi} k_{\rm F} a \right) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \left[ 1 + \frac{4a}{3\pi} (3\pi^2 n)^{1/3} \right] \,. \tag{9.129}$$

ົ	5	1
4	J	T

Všimněme si faktoru 3 pod třetí odmocninou namísto 6 v (9.94): je dán tím, že nyní uvažujeme plyn skládající se ze dvou různých polarizací, protože náš výsledek bude platit jak pro odpudivý Fermiho plyn, tak pro přitažlivý plyn s BCS párováním (párování má vliv pouze na rozdělení částic v prostoru hybností, prakticky však neovlivní rozdělení hustoty v reálném, souřadnicovém prostoru). Dosazením do (9.126) a iterativním řešením tak dostaneme výsledek

$$n(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{3\pi^2} \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [\mu_0 - U(\boldsymbol{x})] \right\}^{3/2} - \frac{2a}{3\pi^3} \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [\mu_0 - U(\boldsymbol{x})] \right\}^2 .$$
(9.130)

Jak se dalo očekávat, přitažlivá interakce způsobí mírnou kompresi obláčku, zatímco odpudivá interakce jeho roztažení.

Nakonec se zmíníme o jedné netriviální aplikaci aproximace lokální hustoty, totiž o Fermiho plynu v bodu unitarity. Ačkoli jde o velmi silně interagující systém, je výpočet velmi snadný. Z předchozího víme, že pro chemický potenciál unitárního Fermiho plynu platí stejný vztah jako pro plyn neinteragující, až na přeškálování faktorem  $\xi$ . Pohledem na rovnici (9.126) se přesvědčíme o tom, že rozdělení hustoty v unitárním Fermiho plynu v potenciálu  $U(\boldsymbol{x})$  tedy bude stejné jako v ideálním plynu v potenciálu  $U(\boldsymbol{x})/\xi$ . Poloměr obláčku při zafixovaném počtu částic bude dán vztahem (9.99) vynásobeným faktorem  $\xi^{1/4}$ .

# 9.10 Optické mřížky

Chladné atomové plyny poskytly vhodný experimentální nástroj ke studiu základních fyzikálních vlastností interagujících bosonových i fermionových plynů za plně kontrolovatelných podmínek. Pomohly tak potvrdit desítky let staré teoretické předpovědi a zároveň inspirovaly další rozvoj teorie v oblasti silně interagujících kvantových mnohočásticových systémů. Zcela nové obzory se však otevřely použitím optických mřížek. Jde o periodický potenciál vytvořený soustavou laserových svazků. Tento jednoduchý princip dovoluje simulovat jevy, které se jinak vyskytují pouze v krystalických pevných látkách, ovšem při zachování všech výhod práce s chladnými atomovými plyny.

Zmiňme stručně základní výhody použití optických mřížek oproti klasickým krystalickým strukturám. Především, jak zakrátko uvidíme, je perioda optické mřížky v zásadě dána vlnovou délkou použitého laseru, tedy je v optické oblasti, což značně usnadňuje experimentální studium. Vlastnosti mřížky je možné zároveň snadno ladit například změnou intenzity či geometrie laserových svazků, případně ji lze zcela vypnout a následně studovat systém stejnými metodami jako v případě atomových plynů v pasti. Další výhodou je, že optické mřížky představují prakticky ideální periodický potenciál, který je prostý fluktuací a defektů. Případné poruchy či šum lze zavést opět kontrolovaně. Vhodnou změnou uspořádání laserových svazků lze navíc snadno vytvořit potenciál, v němž se atomy mohou pohybovat pouze v jednom či dvou směrech, a studovat tak fyziku nízkodimenzionálních systémů. V reálných experimentech se atomy zpravidla pohybují v superpozici periodického potenciálu a věznící harmonické pasti. Aby byla efektivně zachována periodicita
problému, je třeba zajistit, aby rozměr pasti byl mnohem větší než mřížková konstanta.

Popišme si nyní, jak lze čistě optickou cestou dosáhnout periodického potenciálu působícího na atomy. Atom nacházející se ve vnějším elektrickém poli  $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)$  o frekvenci  $\omega$ , jehož působení dominuje nad vlivem magnetické složky světelného pole, cítí efektivní potenciál  $U(\boldsymbol{x}) = -\frac{1}{2}\alpha(\omega)\langle \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)^2 \rangle$ , kde  $\alpha(\omega)$  je atomová susceptibilita, či přesněji její reálná část. Jelikož frekvence elektromagnetického pole je ve viditelné oblasti mnohem větší než charakteristická frekvence atomových pohybů, dostaneme efektivní potenciál vystředováním kvadrátu intenzity elektrického pole přes časový úsek mnohem delší než perioda kmitů pole. Předpokládejme nyní, že atom vložíme do pole vytvořeného superpozicí lineárně polarizovaných laserových svazků o stejné frekvenci  $\omega$  a vlnových vektorech  $\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) = \sum_i \boldsymbol{E}_i \cos(\boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{x} - \omega t)$ . Optický potenciál potom bude úměrný

$$\langle \boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x},t) \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i} \boldsymbol{E}_i^2 + \sum_{i < j} \boldsymbol{E}_i \cdot \boldsymbol{E}_j \cos(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_j) \cdot \boldsymbol{x} .$$
 (9.131)

Jelikož svazky mají stejnou frekvenci a tím i vlnovou délku, bude perioda potenciálu vzniklého zkřížením dvou svazků pod úhlem  $\phi$  evidentně rovna  $d = 2\pi/|\mathbf{k}_{\rm i} - \mathbf{k}_{\rm j}| = \lambda/(2\sin\frac{\phi}{2})$ . Speciálně v případě dvou protijdoucích svazků tak dostaneme jednorozměrný periodický potenciál s mřížkovou konstantou  $d = \lambda/2$ . Superpozicí většího počtu svazků můžeme snadno docílit i vícerozměrných struktur.

#### 9.10.1 Blochovy oscilace

Nejprve si stručně připomeneme základní vlastnosti jednočásticových stavů v periodickém potenciálu. Uvažujme pohybovou rovnici pro stacionární stav popsaný vlnovou funkcí  $\psi(\boldsymbol{x})$ ,

$$H\psi(\boldsymbol{x}) \equiv -\frac{\hbar^2 \boldsymbol{\nabla}^2}{2m} \psi(\boldsymbol{x}) + U_{\text{eff}}(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) = E\psi(\boldsymbol{x}) , \qquad (9.132)$$

kde  $U_{\text{eff}}(\boldsymbol{x})$  je efektivní potenciál, o němž předpokládáme pouze, že je periodický. Jelikož se jedná o jednočásticový problém, budou naše výsledky platit pro bosony i fermiony. Dopředu jen poznamenáme, že v případě bosonového plynu lze tuto rovnici odvodit z Grossovy–Pitajevského rovnice (9.40), přičemž vlastní hodnota E bude odpovídat chemickému potenciálu  $\mu$  a efektivní potenciál  $U_{\text{eff}}(\boldsymbol{x})$  bude dán vztahem  $U_{\text{eff}}(\boldsymbol{x}) = U(\boldsymbol{x}) + gn(\boldsymbol{x})$ .

Periodicitu potenciálu lze formálně vyjádřit faktem, že hamiltonián H komutuje se sadou posunovacích operátorů  $T_j$ , reprezentujících translace o elementární mřížkové vektory  $d_j$  (o délce  $d_j$ ). Operátory translace jsou unitární, a tedy jejich vlastní čísla lze zapsat jako  $e^{ik_jd_j}$ , kde  $k_j$  značí složky vektoru kvazihybnosti v reciproké bázi  $e_j$  definované vztahem  $e_j \cdot d_k = \delta_{jk}d_k$ . Vlnovou funkci  $\psi(\boldsymbol{x})$  lze pak hledat jako společný vlastní stav hamiltoniánu a operátorů translace, neboli požadujeme  $\psi(\boldsymbol{x} + d_j) = e^{ik_jd_j}\psi(\boldsymbol{x})$ . Poznamenejme, že je-li mřížka nekonečná, může kvazihybnost nabývat libovolné hodnoty, zatímco pro konečnou mřížku s periodickými okrajovými podmínkami jsou povolené pouze určité diskrétní hodnoty.

V obou případech se však posunutím impulsu  $k_j$  o  $2\pi/d_j$  vlastní číslo operátoru translace nezmění a výsledný stav je tedy fyzikálně ekvivalentní. Stačí tedy uvažovat vektory kvazihybnosti pouze z první Brillouinovy zóny, definované nerovnostmi  $-\pi \leq \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j \leq +\pi$  pro všechny mřížkové vektory  $\mathbf{d}_j$ .

Podle Blochova teorému z teorie pevných látek můžeme řešení rovnice (9.132)hledat ve tvaru

$$\psi(\boldsymbol{x}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} , \qquad (9.133)$$

kde funkce  $u_k(x)$  již má stejnou periodicitu jako potenciál  $U_{\text{eff}}(x)$ . Rovnice (9.132) potom nabude tvar

$$-\frac{\hbar^2 (\boldsymbol{\nabla} + i\boldsymbol{k})^2}{2m} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) + U_{\text{eff}}(\boldsymbol{x}) u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = E_{\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}).$$
(9.134)

Spektrum problému závisí na (kvazi)<br/>spojitém vektorovém parametru k, a energie stacionárních stavů tedy netvoří diskrétní hladiny, ale celé intervaly, tzv. dovolené pásy.

Předpokládejme nyní, že k periodickému potenciálu  $U_{\text{eff}}(\boldsymbol{x})$  zapneme dodatečné slabé homogenní (tedy neperiodické) pole  $\delta U(\boldsymbol{x}) = -\boldsymbol{E} \cdot \boldsymbol{x}$ . To by v kovovém vodiči odpovídalo slabému elektrickému poli; v uvězněném atomovém plynu má podobný efekt například tíhové pole. Časový vývoj operátoru hybnosti v Diracově obrazu bude

$$\hbar \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = -i[\boldsymbol{k}, \delta U(\boldsymbol{x})] = \boldsymbol{E}.$$
(9.135)

To odpovídá klasické pohybové rovnici, podle níž bude hybnost rovnoměrně růst s časem. Jak už jsme zmínili výše, impulsy  $k_{\rm j}$  a  $k_{\rm j} + 2\pi/d_{\rm j}$  jsou fyzikálně ekvivalentní, což znamená, že dávají stejné hodnoty všech fyzikálních pozorovatelných. Ve vnějším homogenním poli hybnost (pro jednoduchost vynecháváme index j) vzroste o  $2\pi/d$  za čas  $2\pi\hbar/dE$ . V konečném důsledku tedy budou střední hodnoty všech fyzikálních pozorovatelných veličin oscilovat v čase s úhlovou frekvencí  $\omega_{\rm B} = dE/\hbar$ , což je jev známý jako Blochovy oscilace.

Je zajímavé si uvědomit, že na základě právě popsaného jevu by materiál s ideální periodickou mřížkou v elektrickém poli nevedl elektrický proud. V důsledku Blochových oscilací by totiž časová střední hodnota rychlosti elektronů byla nulová. Důležitou součástí principu elektrické vodivosti je rozptyl vodivostních elektronů na defektech a kmitech mříže, který zabrání koherentním Blochovým oscilacím. Potenciál optické mřížky je však téměř ideální, a proto právě pomocí optické mřížky byl tento vysoce zajímavý fyzikální jev poprvé experimentálně pozorován.

#### 9.10.2 Bosony v optické mřížce

Pro studium mnohočásticových efektů v bosonovém plynu v optické mřížce se, tak jako v jednoduché pasti, nabízí použít GP rovnici. Její platnost je však omezena na slabé mezičásticové interakce, zatímco optické mřížky umožňují studovat vlastnosti silně korelovaných kvantových systémů a simulovat tak některé jevy vyskytující se v krystalických pevných látkách. Zvolíme proto jiný přístup, platný za podmínek, jichž lze v experimentu snadno dosáhnout.

Nejčastěji používaným typem optické mřížky je potenciál vytvořený třemi páry navzájem kolmých laserových svazků. Vzhledem ke vztahu (9.131) lze pak potenciál zapsat ve vhodném tvaru

$$U(x, y, z) = U_0(\sin^2 kx + \sin^2 ky + \sin^2 kz) , \qquad (9.136)$$

kde výšku bariéry  $U_0$  lze ladit změnou intenzity popřípadě frekvence laserů a  $k = \pi/d$ . Odhlédněme na chvíli od mezičásticových interakcí a soustředme se na pohyb částice v potenciálu U(x, y, z). Vedle samotné amplitudy  $U_0$  lze mřížku charakterizovat jinou veličinou rozměru energie (angl. *recoil energy*),  $E_r = \hbar^2 k^2/2m = \hbar^2 \pi^2/2md^2$ . Ta kvalitativně odpovídá kinetické energii, kterou by částice získala díky principu neurčitosti, kdybychom ji uvěznili v jediné buňce mřížky. Ačkoli přesnými vlastními stavy hamiltoniánu jsou Blochovy stavy, v nichž je částice rozprostřena přes celou mřížku, pro  $E_r \ll U_0$  ji zřejmě nalezneme s největší pravděpodobností v okolí některého z minim potenciálu. Částice může být dokonce po dlouhou dobu lokalizovaná v jednom minimu, protože pravděpodobnost protunelování skrz vysokou bariéru  $U_0$  do sousedního minima je velmi malá.

Za takové situace, jíž lze v experimentech s optickými mřížkami docílit pouhým zvýšením intenzity laseru, má smysl uvažovat jako bázi jednočásticových stavů vlnové funkce lokalizované okolo jednoho minima. V teorii pevných látek se používají tzv. Wannierovy stavy  $|w_j\rangle$ , které dokonce splňují relaci ortogonality  $\langle w_i|w_j\rangle = \delta_{ij}$ . To znamená, že stavy lokalizované kolem různých minim potenciálu mřížky jsou navzájem kolmé. V mnohočásticovém hamiltoniánu (9.36) pak můžeme od operátorů pole přejít k operátorům  $\hat{a}_j = \int d^3 \boldsymbol{x} w_j^*(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ , nebo analogicky  $\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_j w_j(\boldsymbol{x}) \hat{a}_j$ . Díky ortogonalitě Wannierových funkcí splňují operátory  $\hat{a}_j$  komutační relaci  $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^{\dagger}] = \delta_{ij}$ . Sdružený operátor  $\hat{a}_j^{\dagger}$  tedy má význam kreačního operátoru, který do mřížky přidá boson v místě j. Pomocí těchto operátorů lze hamiltonián přepsat do tvaru

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \hat{a}_{i}^{\dagger} \hat{a}_{j} \int d^{3} \boldsymbol{x} \, w_{i}^{*}(\boldsymbol{x}) \left[ -\frac{\hbar^{2} \nabla^{2}}{2m} + U(\boldsymbol{x}) \right] w_{j}(\boldsymbol{x}) + \\ + \frac{1}{2} g \sum_{i,j,k,l} \hat{a}_{i}^{\dagger} \hat{a}_{j}^{\dagger} \hat{a}_{k} \hat{a}_{l} \int d^{3} \boldsymbol{x} \, w_{i}^{*}(\boldsymbol{x}) w_{j}^{*}(\boldsymbol{x}) w_{k}(\boldsymbol{x}) w_{l}(\boldsymbol{x}) \,.$$
(9.137)

Abychom postoupili dál, je samozřejmě potřeba znát konkrétní tvar vlnových funkcí. Naznačíme si alespoň část výpočtu. V limitě  $E_{\rm r} \ll U_0$  je částice prakticky lokalizovaná kolem minima potenciálu, jenž lze tudíž dobře aproximovat potenciálem harmonickým. Rozvojem potenciálu (9.136) kolem libovolného minima zjistíme, že odpovídající charakteristická frekvence  $\omega_{\rm eff}$  je dána vztahem  $\hbar\omega_{\rm eff} = 2\sqrt{E_{\rm r}U_0}$ . Wannierovy funkce lze tedy v prvním přiblížení odhadnout pomocí vlnové funkce základního stavu harmonického oscilátoru (9.1).

Jelikož Wannierovy funkce jsou silně lokalizované kolem minim potenciálu, budou příspěvky členů zahrnujících vlnové funkce různých mřížových uzlů silně potla-

čeny. V interakční části hamiltoniánu lze takové členy úplně zanedbat a po jednoduché integraci čtvrté mocniny gaussovské vlnové funkce (9.1) tak interakční hamiltonián nabude tvar  $\frac{1}{2}G\sum_{j} \hat{a}_{j}^{\dagger} \hat{a}_{j}^{\dagger} \hat{a}_{j} \hat{a}_{j}$ , kde  $G = \sqrt{\frac{8}{\pi}} ka E_{\rm r} \left(\frac{U_0}{E_{\rm r}}\right)^{3/4}$ . Použili jsme relaci (9.39) mezi vazbovou konstantou a rozptylovou délkou. Odtud okamžitě vidíme důležitý důsledek, že efektivní vazbová konstanta G roste se zesilováním intenzity laserů, a tedy zvyšováním bariéry  $U_0$ . V kinetické části hamiltoniánu můžeme analogicky zanedbat příspěvky od párů stavů, které jsou od sebe vzdáleny víc než jedna mřížková konstanta. Pro konkrétní výpočet bychom potřebovali znát přesný tvar Wannierových funkcí, proto uvedeme jen konečný výsledek,

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \hat{a}_{\mathbf{i}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{j}} + \sum_{\mathbf{j}} \epsilon_{\mathbf{j}} \hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{j}} + \frac{G}{2} \sum_{\mathbf{j}} \hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{j}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{j}} \hat{a}_{\mathbf{j}} \hat{a}_{\mathbf{j}} , \qquad (9.138)$$

kde v prvním členu se sčítá přes (uspořádané) páry nejbližších sousedů. Parametr  $\epsilon_j$  má význam jednočásticové energie v místě j, a závisí na tomto místě pouze v případě, že potenciál  $U(\boldsymbol{x})$  není striktně periodický (například kvůli dodatečnému harmonickému věznění). V dalším budeme periodicitu pro jednoduchost předpokládat, a proto položíme prostě  $\epsilon_j = \epsilon$ . Koeficient J představuje amplitudu přeskoku částice mezi sousedními uzly mřížky (angl. hopping amplitude). Podrobným výpočtem lze odvodit vztah [13]

$$J = \frac{4}{\sqrt{\pi}} E_{\rm r} \left(\frac{U_0}{E_{\rm r}}\right)^{3/4} \exp\left[-2\left(\frac{U_0}{E_{\rm r}}\right)^{1/2}\right], \qquad (9.139)$$

z něhož vidíme intuitivně zřejmý fakt, že tunelování mezi sousedními minimy potenciálu je exponenciálně potlačeno s rostoucí šířkou energetické bariéry.

Hamiltonián (9.138) zaujímá velice významné místo v teorii pevných látek, kde definuje tzv. Hubbardův model. Zde jsme si ukázali, že jej lze realizovat pomocí atomového plynu v optické mřížce se vším odpovídajícím luxusem, tedy možností nezávisle ladit jeho jednotlivé parametry. Za nepřítomnosti interakcí (G = 0) lze hamiltonián snadno diagonalizovat: víme už, že jeho vlastními stavy jsou Blochovy vlnové funkce. Pro přehlednost se omezíme na jednorozměrnou mřížku, kde index j probíhá přes všechna celá čísla. Blochovy stavy jsou zároveň vlastními stavy operátoru translace, a lze je tedy zapsat ve tvaru  $|k\rangle = \sum_j e^{ijkd} |w_j\rangle$ . Odtud okamžitě plyne vlastní energie

$$E_k = \epsilon - 2J\cos kd \ . \tag{9.140}$$

Poznamenejme, že v trojrozměrném případě by měl tento výsledek tvar  $E_{\mathbf{k}} = \epsilon - 2J(\cos k_x d + \cos k_y d + \cos k_z d)$ . Energetické hladiny tedy tvoří jediný pás o šířce 4J. V blízkosti jeho minima můžeme energii rozvinout jako  $E_k \approx \epsilon - 2J + \hbar^2 k^2 / 2m_*$ , kde  $m_* = \hbar^2 / 2Jd^2$  představuje efektivní hmotu částice. Blochovy vlnové funkce odpovídají jednočásticovým stavům rozprostřeným přes celou mříž. Při nulové teplotě se tedy všechny částice usídlí ve stejném Blochově stavu, což je přesně situace, na niž lze aplikovat GP rovnici.

#### 9.10.3 Fázový přechod supratekutina-izolant

Zastavme se nyní u otázky, jak bude základní stav bosonového plynu v optické mřížce ovlivněn meziatomovou interakcí. Bude-li vazbová konstanta G velice malá, zůstanou Blochovy stavy zřejmě dobrým přiblížením; změnu energie je potom možné spočítat poruchově. Na druhou stranu, v opačném extrému, kdy G nabývá konečné hodnoty a J = 0, bude základní stav kvalitativně odlišný. V tomto případě totiž nic nenutí částice přeskakovat mezi uzly mřížky. Ježto je hamiltonián dán prostou sumou přes všechna mřížová místa, bude přesný základní stav dán souborem částic zcela lokalizovaných v jednom uzlu mříže. Interakční hamiltonián můžeme přepsat jako  $\frac{G}{2} \sum_j \hat{n}_j (\hat{n}_j - 1)$ , kde  $\hat{n}_j$  je operátor počtu částic v místě j. Přidání jedné další částice do uzlu, kde už n částic je, stojí energii Gn. Abychom minimalizovali celkovou energii, musíme částice po mřížce zřejmě rozmístit co nejrovnoměrněji, protože přemístěním částice z jednoho uzlu do jiného s nižším počtem částic získáme energii.



Obr. 9.10: Schematické znázornění fázového přechodu ze supratekutého do izolujícího stavu.

Základní stav tedy bude takový, v němž všechny uzly obsahují buď  $\bar{n}$ , nebo  $\bar{n} + 1$  částic, kde  $\bar{n}$  je celá část středního počtu částic na jeden uzel mřížky. Pokud tento střední počet částic není celé číslo, mohou se "nadbytečné" bosony volně pohybovat po mřížce beze změny energie. Systém tedy vykazuje supratekuté vlastnosti. Přidáním další částice se zvýší energie o  $G\bar{n}$ . Chemický potenciál je tedy roven  $G\bar{n}$  nezávisle na počtu částic, až do okamžiku, kdy dojde k zaplnění všech uzlů mřížky.

Tento stav, v němž všechny uzly obsahují stejný počet částic  $\bar{n}$  + 1 (angl. *integer filling*), má řadu neobvyklých vlastností. Především v něm částice nemohou migrovat po mřížce: přesunutí jedné částice na

jiné místo vyžaduje energii G. Spektrum systému tedy vykazuje energetickou mezeru o šířce G a systém se chová jako izolant (tzv. Mottův izolant). Chemický potenciál se přidáním jediné částice skokem zvýšil z  $G\bar{n}$  na  $G(\bar{n} + 1)$ . To znamená, že Mottův izolant má nulový koeficient stlačitelnosti,  $\partial n/\partial \mu$ . Jinak řečeno, jeho hustota zůstává při změně chemického potenciálu konstantní, což se projevuje například tím, že v optické mřížce ve vnější harmonické pasti se hustota atomů v tomto stavu nemění s polohou.

Tím jsme popsali základní stav Hubbardova modelu (9.138) v limitě  $J/G \rightarrow 0$ . Při zvětšení amplitudy přeskoku se zvýší pohyblivost atomů v mřížce. Jelikož v opačné limitě  $G/J \rightarrow 0$  je základní stav kvalitativně odlišný, musí někde mezi těmito dvěma extrémy existovat fázový přechod. Při něm dojde k delokalizaci atomů,

původně lokalizovaných a rovnoměrně rozmístěných po mřížce, do Blochova stavu, v němž jsou fluktuace počtu částic v jednotlivých uzlech mříže vysoké (přesněji řečeno, řídí se Poissonovým rozdělením). Schematicky je tento fázový přechod znázorněn na obrázku 9.10.

Úplný fázový diagram v závislosti na chemickém potenciálu a poměru J/G při nulové teplotě lze odvodit v aproximaci středního pole [4], viz obrázek 9.11. Pro zajímavost uvedeme alespoň analytický výsledek pro kritickou amplitudu přeskoku, při níž fázový přechod nastane,

$$zJ = \frac{(G\bar{n} - \mu)[\mu - G(\bar{n} - 1)]}{\mu + G},$$
(9.141)

kde z je počet nejbližších sousedů v mřížce. Oválné oblasti nalevo, definované celočíselnou hodnotou  $\bar{n}$ , vyznačují fázi Mottova izolantu. Zbytek fázového diagramu je obsazen supratekutým stavem. Čárkovaně jsou naznačeny linie konstantní střední hustoty. Je patrné, že izolující stav existuje skutečně jen pro celočíselné  $\bar{n}$ .

### 9.10.4 Fermiony v optické mřížce

Zcela na závěr se stručně zmíníme

o některých vlastnostech atomových plynů v optických mřížkách, specifických pro fermiony. Jedním z charateristických projevů fermionů v optické mřížce je závislost tvaru Fermiho plochy na Fermiho energii. Jak jsme si vysvětlili výše, pro fermiony s jedinou polarizací jsou meziatomové interakce při nízkých teplotách silně potlačené Pauliho vylučovacím principem a plyn lze ve velmi dobrém přiblížení považovat za neinteragující. Rozdělení hustoty respektive impulsu lze pak odvodit ze semiklasické aproximace (9.96). V té má celková energie fermionu tvar  $\varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p}) = \varepsilon_{\text{lat}}(\boldsymbol{p}) + \varepsilon_{\text{past}}(\boldsymbol{x})$ , kde  $\varepsilon_{\text{lat}}(\boldsymbol{p})$  je energie v mřížce, závisející pouze na mřížkové kvazihybnosti  $\boldsymbol{p} = \hbar \boldsymbol{k}$ , a  $\varepsilon_{\text{past}}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}m\omega^2\boldsymbol{x}^2$  harmonický věznící potenciál. Při nulové teplotě je distribuční funkce na fázovém prostoru prostě  $\theta[\mu - \varepsilon(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})]/(2\pi\hbar)^3$  a triviální integrál přes souřadnice dá rozdělovací funkci pro kvazihybnost

$$n_{T=0}(\mathbf{p}) = \frac{1}{6\pi^2(\hbar\omega)^3} \left\{ \frac{2[\mu - \varepsilon_{\text{lat}}(\mathbf{p})]}{m} \right\}^{3/2} .$$
(9.142)



Obr. 9.11: Fázový diagram Hubbardova modelu (9.138) v aproximaci středního pole. z značí počet nejbližších sousedů v mřížce. Tenké čárkované linie představují hladiny konstantní střední hustoty (hodnoty uvedeny tučně).

Je-li chemický potenciál neboli Fermiho energie mnohem nižší než šířka dovoleného pásu energií 4J, jsou obsazené jen hladiny blízko dna pásu, kde lze disperzní relaci aproximovat parabolou. Rozdělení hybností je pak popsáno vztahem (9.98) s příslušnou záměnou hmotnosti za efektivní hmotnost  $m_* = \hbar^2/2Jd^2$ . Fermiho moře má tvar koule s poloměrem  $p_{\rm F} = \sqrt{2m_*\mu}$ . Je-li naopak chemický potenciál mnohem větší než šířka dovoleného pásu (a menší než energetická mezera mezi tímto a případným výše položeným pásem), můžeme ve vztahu (9.142) zanedbat  $\varepsilon_{\rm lat}(\boldsymbol{p})$  vůči  $\mu$ . Rozdělení hybnosti tedy bude konstantní a všechny stavy v první Brillouinově zóně budou obsazeny. Fermiho moře bude mít pro kubickou mřížku, definovanou potenciálem (9.136), tvar krychle. Celkový počet částic N získáme vynásobením distribuční funkce objemem Brillouinovy zóny,  $(2\pi\hbar/d)^3$ . Po úpravě dostaneme vztah mezi  $N \neq \mu$ ,

$$\mu = \left(\frac{3\pi^2}{32}\right)^{2/3} \frac{(\hbar\omega)^2}{E_{\rm r}} N^{2/3} .$$
(9.143)

Tato změna tvaru Fermiho moře v závislosti na počtu fermionů vložených do optické mřížky byla experimentálně přímo potvrzena změřením rozdělení hybností po vypnutí věznícího a mřížkového potenciálu a rozepnutí obláčku.

I za přítomnosti optické mřížky je možno studovat párování ve Fermiho plynu složeném ze dvou různých polarizací s přitažlivou vzájemnou interakcí. Aniž bychom zacházeli do detailů, dodáme pro zajímavost, za přítomnosti mřížkového potenciálu mohou dva fermiony vytvořit vázaný stav i pro (dostatečně velkou) zápornou dvoučásticovou rozptylovou délku. I tento jev byl potvrzen experimentálně.

### 9.11 Literatura

- [1] S. N. Bose, Z. Phys. 26, 178 (1924).
- [2] A. Einstein, Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., Phys. Math. Kl. Bericht 3, 18 (1925).
- [3] D. M. Eagles, Phys. Rev. 186 (1969) 456.
- [4] C. J. Pethick, H. Smith, Bose–Einstein Condensation in Dilute Gases, Cambridge University Press, second edition, (2008).
- [5] M. Abramowitz, I. A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, National Bureau of Standards, (1964).
- [6] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Rev. Mod. Phys. 71, 463 (1999).
- [7] L. V. Hau, B. D. Busch, C. Liu, Z. Dutton, M. M. Burns, J. A. Golovchenko, *Phys. Rev. A* 58, R54 (1998).
- [8] T.-L. Ho, Phys. Rev. Lett. 92, 090402 (2004).
- [9] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, Rev. Mod. Phys. 80, 1215 (2008).
- [10] M. Marini, F. Pistolesi, G. C. Strinati, Eur. Phys. J. B 1, 151 (1998).
- [11] L. P. Gorkov, T. K. Melik-Barkhudarov, Sov. Phys. JETP 13, 1018 (1961).
- [12] P. Nozières, S. Schmitt-Rink, J. Low Temp. Phys. 59, 195 (1985).
- [13] W. Zwerger, J. Opt. B: Quantum Semiclass. Opt. 5, S9 (2003).

# 10 Kryogenní dynamika tekutin a kvantová turbulence

### L. SKRBEK

Znalost zákonitostí dynamiky tekutin a zejména turbulence je podstatná pro pochopení mnoha přírodních jevů, probíhajících na obrovské škále délkových měřítek, od galaktických měřítek (řádu  $10^{20}$  m) až po rozměr jádra kvantovaného víru v He II ( $10^{-10}$  m) [1]. Ačkoli toho o turbulentním proudění víme velmi mnoho [2], pojem turbulence tekutin není dosud ani jednoznačně definován a je považován za poslední nevyřešený problém klasické fyziky.

Prvním, kdo se studiem turbulence seriózně zabýval, byl Leonardo da Vinci. Z obr. 10.1 i z jeho zápisků je patrné, že si velmi dobře uvědomoval roli vírů různých velikostí v turbulentním proudění - od těch největších o rozměrech celého systému až po ty nejmenší, které jsou unášeny a deformovány v rychlostním poli těch větších.



Obr. 10.1: Leonardo da Vinci - turbulentní proudění vody vytékající z otvoru.

Protože obecná teorie turbulence neexistuje, je role experimentu pro hlubší poznání turbulence tekutin nezastupitelná. Klíčem k dalšímu posunu by se mohlo stát studium kvantové turbulence, která je díky kvantování cirkulace v supratekuté kapalině a existenci kvantovaných vírů jednodušší a představuje zejména v limitu nulové teploty jakýsi matematicky snáze popsatelný prototyp turbulence.

V této kapitole se budeme věnovat zákonitostem a příkladům proudění (zejména turbu-

lentního) kryogenních kapalin a plynů - chladného plynného $^4\mathrm{He}$ , normálního kapalného (He I) a supratekutého (He II)  $^4\mathrm{He}$  a supratekutých fází A a B $^3\mathrm{He}$ . Ukážeme, že všechny tyto modifikace kryogenního helia je možné velmi dobře využít jako unikátní pracovní média k experimentálnímu studiu klasické i kvantové dynamiky tekutin.

### 10.1 Úvod do proudění a turbulence klasických tekutin

Budeme se nejprve zabývat prouděním vazkých tekutin [3], které lze popsat pomocí kontinuálního přiblížení. Základním pojmem je zde částice tekutiny, která je na jedné straně velmi malá ve srovnání se všemi charakteristickými délkami daného proudění, ale zároveň obsahuje velké množství atomů nebo molekul dané tekutiny, abychom nemuseli uvažovat jejich diskrétní povahu. Omezíme se nestlačitelným prouděním, v němž rychlostní pole vyhovuje podmínce

$$\operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \ . \tag{10.1}$$

Vazké proudění klasické tekutiny je popsáno Navierovou - Stokesovou rovnicí

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}\nabla)\boldsymbol{v} = -\frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{v} , \qquad (10.2)$$

kde p je tlak a  $\nu$ kinematická vazkost tekutiny, která je podílem dynamické vazkosti $\eta$ a hustoty tekutiny $\rho$ . Pro konkrétní geometrii proudění je pak názorné zavést charakteristickou rychlost U a charakteristické délkové měřítko L (jimiž mohou být např. rychlost a rozměr tělesa pohybujícího se v tekutině) a definovat bezrozměrné veličiny

$$v' = \frac{v}{U}; r' = \frac{r}{L}; t' = \frac{tU}{L}; p' = \frac{p}{\rho U^2},$$
 (10.3)

pomocí nichž můžeme Navierovou - Stokesovu rovnici napsat v bezrozměrném tvaru

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}'}{\partial t} + (\boldsymbol{v}'\nabla')\boldsymbol{v}' = -\nabla'p' + \frac{1}{Re}{\nabla'}^2\boldsymbol{v}' , \qquad (10.4)$$

kde  $Re = UL/\nu$  je Reynoldsovo číslo. Odtud okamžitě plyne, že proudění (např. obtékání koule) se shodnými Re jsou si geometricky podobná. Na velikosti Re závisí charakter proudění. Při malých Re je role vazkosti dominantní a nelineární člen  $(\boldsymbol{v}\nabla)\boldsymbol{v}$  lze zanedbat; jde o laminární proudění. Naopak, při velkých Re je role vazkosti nepodstatná a nelineární člen vede k nestabilitě laminárního proudění a ke vzniku turbulence.

Roli Reynoldsova čísla  $Re = Ud/\nu$  pro geometricky jednoduché proudění obtékání válce o poloměru R = d/2 názorně ukazuje obr. 10.2. Pro velmi malá Re je obtékání laminární, při  $Re \simeq 10$  vzniká za válcem dvojice vírů. Jejich vznik lze na základě jednoduché fyzikální představy chápat následovně. Uvažujme síly působící v laminárním režimu na částici tekutiny bezprostředně za válcem: pro jednotkový objem tekutiny jde o vazkou sílu  $\eta U/R^2$  působící ve směru ke stagnačnímu bodu na válci v ose proudění a Bernoulliho sílu  $\rho U^2/R$  působící opačným směrem. Jakmile s růstem rychlosti proudění (přibližně při  $Re \simeq 2$ ) Bernoulliho síla převáží vazkou sílu, dojde za válcem k obrácení směru proudění a vzniknou víry. Při  $Re \simeq 100$ dochází ke střídavému odtrhávání těchto vírů a vzniku tzv. Karmanovy vírové řady (viz obr. 10.2 c). Další zvyšování Re pak vede ke vzniku turbulence v úplavu.

Nejjednodušší formou rozvinuté turbulence [2] je homogenní izotropní turbulence - za takovou je možné přibližně považovat turbulenci vznikající v určité vzdálenosti v proudění za mřížkou, jak je vidět na fotografii vizualizace takové turbulence v pravé části obr. 10.3. Z obou uvedených příkladů je vidět, že turbulence zahrnuje vířivé proudění. Energie se do turbulentního proudění dostává



Obr. 10.2: Vliv velikosti Reynoldsova čísla na formu úplavu za válcem obtékaným vazkou tekutinou.

na délkovém měřítku L (rozměr válce, mřížková konstanta) a tyto energetické víry (angl. energy containing eddies), které nesou podstatnou část energie turbulentního proudění, pak v kaskádním procesu předávají svou kinetickou energii postupně menším a menším vírům. Pro velké víry je Re velké, takže vazkost nehraje podstatnou roli a tzv. Richardsonova kaskáda přenosu energie k menším a menším vírům probíhá (téměř) bez disipace energie až do té doby, kdy se Re pro malé víry zmenší na přibližně jednotkovou hodnotu. Pro takové víry se dominujícím faktorem stává vazkost a díky ní dojde k disipaci energie (přeměmní se na teplo, ale pro většinu proudění je ohřev zanedbatelně malý). Základní fyzikální představa je

tedy taková, že za jednotku času do systému na délkovém měřítku Lvstupuje energie  $\varepsilon = -dE/dt$ , která se kaskádním nedisipativním procesem (který může být popsán jako difúze energie v prostoru vlnových čísel, k) přenáší ke stále menším a menším vírům, až v těch, které mají rozměr tzv. Kolmogorovovy disipační délky  $\ell_{\rm d}$  (a  $Re\simeq 1$ ), dojde k vazké disipaci energie. Existuje proto tzv. inerciální oblast vlnových čísel  $2\pi/L\ll k_{\rm i}\ll 2\pi/\ell_{\rm d}$ , na kterých (téměř) nedochází k disipaci energie.

K důležitým závěrům je možné dojít pomocí jednoduché rozměrové analýzy. Spektrální hustota energie, E(k), na hmotnostní jednotku tekutiny v oblasti vlnových čísel mezi k a k + dk je E(k)dk. Veličina E(k) je důležitou statistickou charakteristikou turbulence. Na základě popsané idey kaskády můžeme postulovat, že v inerciální oblasti může E(k) záviset pouze na  $\varepsilon = -dE/dt$  a na k, nikoli však na  $\nu$ . Z rozměrové analýzy jednoduše vyplývá tvar energetického spektra se slavným exponentem -5/3 (tzv. K41, podle A.N. Kolmogorova)<sup>1</sup>

$$E(k) = C\varepsilon^{2/3}k^{-5/3} , \qquad (10.5)$$

 $<sup>^1</sup>$ Tento přístup zanedbává tzv. intermitenční opravy, které vedou k mírně odlišnému tvaru, tzv. K62, ovšem tato problematika vychází za rámec tohoto textu.



Obr. 10.3: Vizualizace turbulence vznikající při proudění mřížkou.

rovova konstanta ( $C \simeq 1.5$ ) a přibližný vztah pro Kolmogorovovu disipační délku  $\ell_{\rm d}^{-1} \approx k_{\rm d} \approx$  $(\varepsilon/\nu^3)^{1/4}$ . Další důležitou veličinou pro popis turbulentního proudění je vířivost, definovaná jako  $\omega = \operatorname{rot} \boldsymbol{v}$ .

kde C ie tzv. Kolmogo-

Z Navierovy - Stokesovy rovnice plyne důležitý vztah

$$\varepsilon = \nu \langle \omega^2 \rangle$$
, (10.6)

kde  $\langle \omega^2 \rangle$  je střední kvadratická vířivost. Tento vztah budeme později modifikovat pro případ kvantové turbulence. Ačkoli je uvedený popis turbulence zjednodušený, poskytuje základní fyzikální představy o povaze izotermického turbulentního proudění. Energetické spektrum izotropní homogenní turbulence je schematicky znázorněno (v log-log měřítku) na obr. 10.4. Svislá čára v levé části spektra odráží prostý fakt, že velikost vírů je omezena velikostí nádoby - tj. turbulentního systému. Podstatná část kinetické energie proudění je soustředěna v okolí maxima odpovídajícího energetickým vírům o rozměrech srovnatelných s převrácenou hodnotou vlnového čísla  $k_{\rm g}$ , na kterém je turbulence generována. Spektrální hustota energie vlevo od energetických vírů je chrakterizována vztahem  $E(k) = Ak^{m}$ ; přičemž pro různá proudění dosud není případ od případu zcela jasné, zda m = 2 či m = 4 a tento problém není dosud uzavřen. Platí zde princip tzv. permanence velkých vírů - při rozpadu turbulence na energii této části spektra s malými k dojde až naposled. Vpravo od maxima je inerciální oblast spektra, po které se kaskádním bezdisipačním způsobem přesouvá enrgie k menším a menším vírům a posléze je disipována ve vírech o rozměrech Kolmogorovské disipační délky.

## 10.2 Možnosti využití kryogenního helia pro studium klasické turbulence

V klasické dynamice tekutin lze studovaná proudění výstižně charakterizovat pomocí řady bezrozměrných parametrů či "čísel" [3]. Pro izotermická ustálená proudění jsme již zavedli jako důležitý dynamický parametr Reynoldsovo číslo; pro tepelně generovaná konvektivní proudění vznikajími mezi dvěma horizontálními ideálně tepelně vodivými deskami (teplota horní je stabilizována na hodnotě T, spodní je ohřívána na teplotu  $T + \Delta T$ ) v gravitačním poli je to pak Rayleighovo číslo

$$Ra = \frac{\alpha}{\nu\sigma}gL^3 , \qquad (10.7)$$





Obr. 10.4: Forma 3D energetického spektra homogenní izotropní turbulence. Energie do systému vstupuje na délkovém měřítku energetických vírů a v inerciální oblasti se formou Richardsonovy kaskády přenáší ke stále menším a menším vírům, až na délkovém měřítku Kolmogorovovy disipační délky  $\ell_{\rm d}$ dojde k její vazké disipaci. V inerciální oblasti je spektrální hustotu energie možné přibližně vyjádřit v Kolmogorovově (K41) tvaru  $E(k) = C \varepsilon^{2/3} k^{-5/3}$ .

kde L je vertikální vzdálenost mezi deskami,  $\alpha$  je koeficient tepelné roztažnosti,  $\sigma$  je tepelná difuzivita a q značí gravitační zrychlení. Obecně platí, že pro dostatečně velké hodnoty Reči Ra je proudění turbulentní, přičemž jejich velikost je mírou intenzity turbulence. Existuje celá řada důležitých přírodních jevů spojených s turbulentním prouděním o obrovských Re a Ra [4], které jsou pro lidskou společnost zcela podstatné tím, že přímo ovlivňují naše bvtí či nebytí, jakými jsou konvektivní proudění na Slunci ( $Re \simeq 10^{21}$ ;  $Ra \simeq$  $10^{13}$ ), mořské proudy v oceánech ( $Re \simeq 10^{20}; Ra$  $\simeq 10^{19})$ či tvorba počasí  $(Re \simeq 10^{17}; Ra \simeq 10^9).$ 

Ale i v prouděních vznikajících při pohybu lodí či dopravních letadel dosahuje  $Re\simeq 10^9.$ 

Protože obecná teorie turbulence neexistuje, je role experimentu prováděného v dobře definovaných laboratorních podmínkách při studiu takových proudění nezastupitelná. V takovém experimentu, omezeném rozměry "laboratoře" a rozumnou vstupní energií je nutné použít jako pracovní látku tekutinu s co možná nejnižší kinematickou vazkostí a poměrem  $\alpha/\nu\kappa$ . Normální kapalné helium při teplotě těsně nad supratekutým přechodem má nejnižší kinematickou vazkost ze všech známých klasických tekutin. Z hodnot uvedených jako příklady v tabulce je zřejmé, že kryogenní helium zde otevírá velice perspektivní možnosti. Umožňuje dosažení obrovských Re a Ra, ale navíc je možné pomocí změn teploty a tlaku těchto kryogenních pracovních látek jejich fyzikální vlastnosti spojitě měnit a vytvořit tak metodou *in situ* proudění pokrývající mnoho řádů dynamických parametrů Re či Ra.

Příkladem takového experimentu [5] je studium turbulentní konvekce s pomocí kryogenní aparatury na obr. 10.5, využívající jako pracovní látky chladný heliový plyn. Pracovní nádoba je válec o výšce 1 m a průměru 50 cm s dobře vodivým měděným víkem a dnem, s boční stěnou z nerezové oceli, umožňující studium

IVIOZIIOSLI V	yuzili kiyoj	gennino nena	pro studium	KIASICKE	Lui Dulence
---------------	--------------	--------------	-------------	----------	-------------

Pracovní látka	$\begin{array}{c} \text{teplota} \\ (\text{K}) \end{array}$	$\frac{\nu}{(\mathrm{cm}^2/\mathrm{s})}$	$lpha/ u\kappa$ (s <sup>2</sup> /cm <sup>4</sup> K)
vzduch	300	0,15	0,122
voda	300	0,01	14,4
normální kapalné <sup>4</sup> He	2,25 (TNP)	$1,96{ imes}10^{-4}$	$3,\!25{\times}10^5$
supratekuté ${}^{4}\text{He}$	1,80 (TNP)	$9,01 \times 10^{-5}$	Х
chladný He plyn	5,5 (2,5  bar)	$3,\!21{ imes}10^{-4}$	$1,\!41\! imes\!10^{8}$
TNP - tlak nasyconých par			

INP = tlak nasycenych par

efektivity tepelného přenosu rozvinutým turbulentním prouděním v rozmezí jedenácti řádů Ra až po nejvyšší laboratorně dosaženou<sup>2</sup> hodnotu  $Ra > 10^{17}$ .

Na obr. 10.6 je vynesena efektivita tepelného přenosu, vyjádřená hodnotou Nusseltova čísla. Nu udává, kolikrát je konvektivní tepelný přenos od vyhřívané spodní vodivé desky ke svrchní efektivnější než kdyby konvektivní proudění tekutiny neexistovalo a teplo se šířilo pouze molekulárním vedením. Tento graf Nu = Nu(Ra) ukazuje, že v tomto případě nedošlo k přechodu k tzv. Kraichnanovu režimu konvekce, předpovězeného jako  $Nu \propto Ra^{1/2}$ , ale v celém tomto obrovském intervalu Ra přibližně platí  $Nu \propto Ra^{0.31}$ , což je ve velmi dobré shodě s klasickou předpovědí  $Nu \propto Ra^{1/3}$ .

Dalším příkladem aplikace helia (kryogenního plynu a normálního kapalného) je měření součinitele odporu pro proudění trubkou kruhového průřezu. V jednom experimentu [6] v klasickém heliovém kryostatu o vnitřním průměru 13 cm, s jedinou experimentální trubkou o průměru 5 mm bylo na Univerzitě v Eugene, USA, provedeno měření pro  $10 < Re < 3, 6 \times 10^7$ . Uveďme pro srovnání, že klasický experiment do  $Re \simeq 3 \times 10^6$  provedl ve 30. letech 20. století Nikuradze s využitím vody jako pracovního média s použitím složitého zařízení umístěného do dvoupatrové budovy o rozměrech menší tovární haly [7].



10.2

Obr. 10.5: Kryostat pro studium kryogenní turbulentní konvekce.

Posledním příkladem použití kryogenního helia jako pracovní látky je studium přechodu od laminárního k turbulentnímu odporu prostředí v proudění vyvolaném kmity křemenného krystalu (o úhlové frekvenci  $\Omega$ ), kdy se na MFF UK podařilo v jediném experimentu [8] prokázat, že kritická rychlost tohoto přechodu závisí

 $<sup>^2 \</sup>rm Aby bylo výsledky experimentu možné smysluplně vyhodnotit, je třeba, aby podmínky experimentu splňovaly tzv. Boussinequeovo přiblížení. V podstatě to znamená, že v celém objemu experimentu lze všechny fyzikální vlastnosti pracovní látky kromě hustoty považovat za konstantní.$ 



na $\sqrt{\nu\Omega}$  přes více než dva řády kinematické vazkosti $\nu$  plynného a normálního kapalného helia.



Obr. 10.6: Graf efektivity tepelného konvektivního přenosu dokládá možnosti využití chladného heliového plynu pro generování a detekci turbulentního proudění v rozsahu jedenácti řádů dynamického parametru Ra.

### 10.3 Supratekutá hydrodynamika, kvantované víry a jejich dynamika

Supratekuté tekutiny se liší od klasických vazkých tekutin především ve třech základních aspektech, které jsou důsledky jejich kvantově-mechanické povahy: (i) vykazují dvousložkové chování (za nenulové teploty), (ii) přičemž supratekutá složka nemá vazkost a (iii) způsob jejího proudění je omezen kvantově-mechanickými principy. Normální složka se chová v podstatě jako klasická vazká tekutina a nese veškerou entropii systému. Proudění supratekuté složky je bezdisipativní a splňuje podmínku rot $v_{\rm s}=0$  (pro rychlosti nepřevyšující Landauovu kritickou rychlost). Dvousložkový model lze dobře uplatnit jak pro proudění <sup>4</sup>He (He II), tak i supratekutých fází <sup>3</sup>He. Pokud nebude uvedeno jinak, budeme se v této kapitole pro jednoduchost zabývat prouděním supratekutého <sup>4</sup>He. Nad teplotou 1 K je vazkost jeho normální složky velmi nízká, srovnatelná s vazkostí He I nad teplotou lambdabodu.

Již jsme diskutovali v kapitole 5 o supratekutosti He II, že z kvantově-mechanického popisu supratekutého helia pomocí makroskopické vlnové funkce je rychlost proudění supratekuté složky dána jako  $v_{\rm s} = \hbar/m_4 \nabla \phi$ , kde  $\phi$  je makroskopická fáze. V supratekuté složce mohou existovat kvantované víry - přičemž supratekutá složka cirkuluje kolem čarové singularity na níž je amplituda vlnové funkce nulová. Protože je to energeticky výhodnější, v supratekutém <sup>4</sup>He (toto pravidlo v <sup>3</sup>He vždy neplatí) existují jedenkrát kvantované víry [1], v nichž je cirkulace kvantována v jednotkách  $\kappa = h/m_4$ .

Připomeneme si, že energie jednotkové délky kvantovaného víru je v podstatě kinetická energie cirkulující supratekuté složky

$$E_v = \frac{\rho_s}{2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{a_0}^b v_s^2 \, dr = \frac{\rho_s \kappa^2}{4\pi} \ln \frac{b}{a_0} \,, \tag{10.8}$$

kde  $a_0$  je efektivní poloměr jádra víru (v němž je supratekutost potlačena) a b je charakteristická vzdálenost (daná buď poloměrem nádoby či vzdáleností mezi kvantovanými víry). Excitace (fonony a rotony) tvořící normální složku jsou jádry kvantovaných vírů rozptylovány. Pohyb vírového vlákna vůči normální složce tak vede ke vzniku síly vnitřního tření, jejíž velikost na jednotkovou délku víru je dána [1, 9]

$$\boldsymbol{f} = -\gamma_0 \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times [\hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm L})] - \gamma_0' \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm L}) , \qquad (10.9)$$

kde  $\hat{\kappa}$  je jednotkový vektor ve směru vírového vlákna a  $v_{\rm L}$  rychlost, se kterou se vír pohybuje kolmo ke směru jádra. Bezdisipativní člen s parametrem  $\gamma'_0$  je malý a pro jednoduchost jej dále zanedbáme. Pro další zjednodušení teoretického popisu se obvykle koeficient  $\gamma_0$  nahrazuje koeficientem  $\alpha$ , neboť (kromě teplotní oblasti blízko pod bodem lambda) platí  $\alpha = (1 + \alpha^2)\gamma_0/\rho_{\rm s}\kappa \simeq \gamma_0/\rho_{\rm s}\kappa$ . Fyzikálně to znamená, že pohyb kvantovaného víru není vnitřním třením příliš ovlivňován.

Ačkoli sama existence kvantovaných vírů vyplývá z kvantově-mechanického popisu supratekuté kapaliny, jejich dynamické chování lze dále popisovat čistě klasicky. Podstanou roli zde hraje tzv. Magnusova síla (analogie Loretzovy síly v elektrodynamice), takže pohybovou rovnici můžeme psát ve tvaru

$$\boldsymbol{f} + \rho_{\rm s} \kappa \hat{\boldsymbol{\kappa}} \times (\boldsymbol{v}_{\rm L} - \boldsymbol{v}_{\rm s}) = 0, \qquad (10.10)$$

kde f je síla vnitřního tření a  $\rho_s \kappa \hat{\kappa} \times (v_L - v_s)$  Magnusova síla. Tento tvar pohybové rovnice odráží fakt, že jádro víru má zanedbatelnou hmotnost. Z této rovnice okamžitě plyne, že při velmi nízkých teplotách, kdy je síla vniřního tření zanedbatelně malá, se bude kvantovaný vír pohybovat "s proudem", tj. rychlostí  $v_s$ .

Všimněne si analogie mezi supratekutou hydrodynamikou a elektrodynamikou, která se projevuje mezi těmito fyzikálními veličinami: rychlost  $v_s$  vs. magnetická indukce **B**. Je tomu tak proto, že  $v_s$  musí splňovat stejné podmínky potenciálního nestlačitelného proudění pro supratekutou kapalinu:

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = 0 \ , \ \operatorname{div} \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = 0 \ , \tag{10.11}$$

jaké jsou dány Maxwellovými rovnicemi ve vakuu pro magnetickou indukci:

]

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{B} = 0 \ , \ \operatorname{div} \boldsymbol{B} = 0 \ . \tag{10.12}$$

10.0

Lokální supratekutá rychlost $v_{\rm s}$ v každém bodě na víru sestává z kombinace nějaké rychlosti proudění zadané zvějšku a z rychlosti vytvářené přítomností ostatních vírů, včetně ostatních částí stejného víru, jehož pohyb vyšetřujeme. Tato složka rychlosti v bodě  $r_0$  na víru je dána Biotovým-Savartovým zákonem

$$\boldsymbol{v}_s(\boldsymbol{r}_0) = \frac{\kappa}{4\pi} \int \frac{(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \times d\boldsymbol{r}}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|^3}, \qquad (10.13)$$

kde integrace probíhá po celé délce vírového vlákna. Pro  $| \mathbf{r} \to \mathbf{r}_0 |$  integrál diverguje, což ale lze odstranit, budeme-li uvažovat konečný poloměr vlákna.

Je užitečné rozdělit tento integrál na dvě části: jednu díky integraci daleko od bodu  $\mathbf{r}_0$  (tzv. nelokální příspěvek) a druhou díky integraci blízko bodu  $\mathbf{r}_0$ . Lze ukázat, že tento lokální příspěvek můžeme zapsat ve tvaru

$$\boldsymbol{v}_s^{loc} = \frac{\kappa}{4\pi} \ln\left(\frac{1}{|\mathbf{r''}| \mathbf{a}_0}\right) [\mathbf{r'} - \mathbf{r''}]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0}.$$
 (10.14)

Vyjádřili jsme  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(\xi)$ , kde  $\xi$  je délka oblouku ve směru vlákna a derivace jsou podle  $\xi$ . Tento lokální příspěvek míří do směru kolmého k rovině ohybu víru a má velikost  $[\kappa/(4\pi R)]\ln(R/a_0)$ , kde R je poloměr křivosti vírového vlákna v bodě  $\mathbf{r}_0$ .

Ukazuje se, že v praxi je často tento lokální příspěvek nejdůležitější a metoda tzv. lokální indukční aproximace (LIA - angl. *Local Induction Approximation*) jako dostatečně přesná. Jako příklad uveďme jednoduchý vírový kroužek o poloměru b, který se pohybuje kolmo ke své rovině rychlostí

$$\boldsymbol{v}_L = \frac{\kappa}{4\pi b} \ln \frac{b}{a_0} , \qquad (10.15)$$

což velmi dobře odpovídá přesnému řešení. Dalším a důležitým příkladem je deformace vírového vlákna s charekteristickým vlnovým číslem k. Lze ukázat, že se bude po vláknu šířit ve formě kruhově polarizované Kelvinovy vlny [1] s disperzní relací

$$\omega = \frac{\kappa k^2}{4\pi} \ln \frac{1}{ka_0} , \qquad (10.16)$$

kde  $\omega$  je úhlová frekvence.

Další důležitou vlastností kvantovaných vírů v supratekuté kapalině (na rozdíl od singulárních vírů v ideální tekutině) je to, že při přiblížení dvou vírových vláken může dojít k jejich přepojení (angl. *reconnection*). Dojde přitom jednak k určité malé ztrátě kinetické energie (tj. k neznatelnému zkrácení délky vírového vlákna), jednak ke vzniku Kelvinových vln. Je tomu tak proto, že při přepojení vzniknou na vírovém vlákně ostré úhly - deformace o malém poloměru křivosti, tj. o velkém vlnovém čísle, která se pak od místa přepojení po vírovém vlákně šíří ve formě Kelvinových vln. Jak ukážeme později, přepojování a Kelvinovy vlny hrají důležitou roli v kvantové turbulenci, která byla teoreticky předpovězena Feynmanem [11] a experimentálně objevena Vinenem [11].

### 10.4 Kvantová turbulence v protiproudu normální a supratekuté složky

Tepelná generace protiproudu normální a supratekuté složky v supratekutém heliu [12] (obr. 10.7) je důsledkem existence fontánového jevu, diskutovaného v kapitole 5 o supratekutosti $^4{\rm He}$ . Do odporového topení umístěného ve slepém konci proudového



Obr. 10.7: Tepelná generace protiproudu normální a supratekuté složky v supratekutém heliu.

kanálu je přiváděn tepelný výkon na jednotkový průřez  $\dot{q} = \dot{Q}/A$ , kde A je průřez kanálu, který pro jednoduchost uvažujeme konstantní. Ve stacionárním stavu musí být tento tepelný výkon odváděn normální složkou (supratekutá nenese entropii) takže platí

$$v_{\rm n} = \dot{q}/(ST\rho)$$
, (10.17)

kdeS je entropie He II. Znamená to, že tepelná energie přiváděná do topení se zcela zužitkuje na přeměnu supratekuté složky na normální <sup>3</sup>. Rychlost protiproudu  $\boldsymbol{v}_{\rm ns} = \boldsymbol{v}_{\rm n} - \boldsymbol{v}_{\rm s}$  pak můžeme lehce dopočítat ze zákona zachování hmoty, protože musí platit podmínka  $\rho_{\rm s} \boldsymbol{v}_{\rm s} + \rho_{\rm n} \boldsymbol{v}_{\rm n} = 0.$ 

Experimenty s protiproudem normální a supratekuté složky probíhaly již před tím, než byly Onsagerem a Feynmanem [11] předpovězeny kvantované víry. Např. existenci síly vnitřního tření mezi n a s složkou fenomenologicky vyjádřili ve tvaru  $A\rho_{\rm s}\rho_{\rm n}(v_{\rm s}-v_{\rm n})^3$  již Gorter a Mellink v roce 1949 [13], ale podstata tohoto jevu, na základě existence kvantovaných vírů, byla objasněna v experimentech Vinena teprve v roce 1956 [11]. Protiproudou turbulenci lze velmi dobře popsat pomocí Vinenovy rovnice, která vychází z představy náhodné orientace vírů ve vzniklém vírovém klubku (angl. tangle) o vírové hustotě L (tj. délky vírového vlákna v jednotkovém objemu)

$$\frac{\partial L}{\partial t} = \alpha \chi_1 v_{\rm s} L^{3/2} + g(v_{\rm ns}) - \frac{\kappa}{2\pi} \chi_2 L^2 , \quad (10.18)$$



Obr. 10.8: Počítačová simulace vírového klubka v protiproudé kvantové turbulenci.

 $<sup>^{3}</sup>$ Tento přístup je sice zjednodušený, zanedbává např. kinetickou energii proudícího He II, ale pro experimentálně dosahované rychlosti platí velmi dobře.

kde $\chi_1,\chi_2$ jsou bezrozměrné konstanty a $\alpha$ již zavedený disipativní parametr vnitřního tření. Jak je pro turbulenci typické, k této rovnici vedou rozměrové argumenty: první člen na pravé straně vyjadřuje produkci turbulence, zatímco poslední její rozpad. Funkce  $g(v_{\rm ns})$  je přidána, aby v souladu s experimentem pro podkritické rychlosti $v_{\rm ns} < v_{\rm ns}^{\rm cr}$ v kanále nebyly kvantované víry (kromě remanentních) a tudíž ani vnitřní tření.

Tato fenomenologická rovnice byla později potvrzena na základě fundamentálních zákonů vírové dynamiky a počítačových simulací (ukázka vírového klubka je na obr. 10.8) metodou lokální indukční aproximace (LIA) v 70. a 80. letech minulého století v sérii Schwarzových prací [14], jejichž podrobný rozbor vychází za rámec tohoto textu.

Vinenova rovnice velmi dobře popisuje stacionární stav protiproudé turbulence, tj stav s  $\partial L/\partial t = 0$ . Pro  $v_{\rm ns} \gg v_{\rm ns}^{\rm scr}$  můžeme člen  $g(v_{\rm ns})$  zanedbat a jednoduše vyčíslit rovnovážnou vírovou hustotu L, která je úměrná čtverci  $v_{\rm ns}$  a tudíž čtverci přiváděného tepelného výkonu.



Obr. 10.9: Měření teplotního rozdílu (nahoře) a tlakového spádu (dole) na protiproudovém kanále v závislosti na tepelném výkonu přiváděném do kanálu. Jsou znázorněny oblasti turbulentních stavů TI a TII a Allenovo-Riekiho pravidlo v oblasti TI.

Experimentálně byla protiproudá turbulence v He II studována pomocí různých technik. Nejvíce informací poskytla technika tlumení druhého zvuku [15], schematicky znázorněná na obr. 10.7, kdy proudový kanál slouží jako rezonátor pro stojaté vlny. Druhý zvuk může být generován a detekován buď tepelně nebo pomocí polopropustných zlacených membrán. Při jejich pohybu iniciovaném elektrostaticky přivedeným ac napětím submikronovými pórv membrán bez problému protéká supratekutá složka, ovšem díky konečné vazkosti membrána normální složku nepropouští - vzniká tak druhý zvuk, jehož frekvenci lze naladit na jednu z rezonančních frekvencí rezonátoru. Stejná membrána pak na opačné straně kanálu amplitudu stojaté vlny druhého zvuku synchronně detekuje. Vzniknou-li v kanále díky protiproudu  $v_{\rm ns}$ kvantované víry, bude detekovaná ampli-

tuda druhého zvuku díky rozp<br/>tylu zvukových kvant na jejich jádrech potlačena a jejím měřením lze získ<br/>at informaci o vírové hustotě L.

K detekci kvantovaných vírů lze použít i i<br/>onty [16], které jsou v potenciální jámě se středem na ose víru zachy<br/>covány.

Další experimentální technikou je měření teplotního gradientu podél kanálu [12]. Vzhledem k tomu, že He II je extrémně dobrým tepelným vodičem, lze tuto techniku použít jen pro velmi úzké proudové kanály – v podstatě kapiláry – a i tak vyžaduje přesnost měření teploty na úrovni mikrokelvinů. Ukažme si na příkladu této techniky, co se v kanále děje při postupném zvyšování tepelného výkonu do topení na jeho slepém konci. Dokud je výkon  $\dot{q}$  podkritický, rychlostní pole normální a supratekuté složky nejsou ovlivněna vnitřním třením. Vazká normální složka proto zaujme obvyklý parabolický proudový profil daný Poiseulleovým vzorcem pro laminární proudění a vedoucí k tlakovému spádu

$$\Delta p_{\rm lam} = G\eta \ell v_{\rm n}/d^2 , \qquad (10.19)$$

kdeG je numerický faktor daný formou průřezu proudového kanálu,  $\ell$  jeho délka a d jeho nejmenší příčný rozměr. Z Londonovy rovnice proto plyne, že teplotní rozdíl $\Delta T$ mezi opačnými konci kanálu bude

$$\Delta T_{\rm lam} = \Delta p_{\rm lam} / \rho S = G \eta \ell v_{\rm n} / \rho S d^2.$$
(10.20)

Stacionární stav protiproudé turbulence bude existovat pouze překročí-li  $\dot{q}$  kritickou mez. Tlakový spád  $\Delta T_{\rm turb}$  zde jen mírně překračuje  $\Delta T_{\rm lam}$  (tzv. Allenovo-Riekiho pravidlo), ale teplotní gradient značně roste, přibližně úměrně  $\dot{q}^3$ . Podrobné studium ukázalo, že existují dva různé turbulentní stavy TI a TII. Méně je známo o stavu TI, který existuje pouze v úzkém intervalu  $\dot{q}_{c1} < \dot{q} < \dot{q}_{c2}$ . Přechod TI-TII nevykazuje hysterzní vlastnosti, avšak při pomalém zvedání tepelného výkonu existuje metastabilní laminární stav nad hodnotou  $\dot{q}_{c1}$ , podobně jako je tomu pro laminární proudění vazké tekutiny v trubce. Jakmile je turbulentní stacionární stav TI vytvořen, při snižování tepelného výkonu existuje až do  $\dot{q}_{c1}$ .

Experimentálně bylo nalezeno [12], v souladu s Vinenovou rovnicí (10.18), že hustota kvantovaných vírů v obou stavech TI a TII je přibližně úměrná čtverci rychlosti protiproudu normální a supratekuté složky, tedy  $L^{1/2} \simeq \gamma_1(T)v_{\rm ns}$  a  $L^{1/2} \simeq \gamma_2(T)v_{\rm ns}$ , kde teplotně závislý koeficient  $\gamma_2$  je zhruba dvakrát větší než  $\gamma_1$ .

Existence dvou turbulentních stavů TI a TII byla záhadou a dosud není plně objasněna, ačkoli se obecně má za to, že v oblast TII se od TI liší tím, že je zde turbulentní i normální složka [17]. Toto vysvětlení je v kvalitativním souladu s tím, že v úzkých štěrbinách nejsou dva různé turbulentní stavy pozorovány - turbulence v normální složce se nemůže rozvinout díky malému Re definovanému pomocí úzkého profilu štěrbiny.

### 10.5 Kvantová turbulence vyvolaná prouděním supratekuté složky

Využitím fontánového jevu lze dosáhnout toho, že proudovým kanálem bude protékat pouze supratekutá složka. Neznamená to, že v kanále normální složka proudit nemůže, ale nemůže do kanálu vtékat ani jej opouštět. Ukázka takového experimentálního uspořádání [18] je na obr. 10.10. Proudový kanál je z obou stran uzavřen sintrovanými supratekutými děrami vytvořenými z velmi jemného stlačeného stříbrného prášku, kterými normální složka díky konečné vazkosti protékat nemůže. Nad horním sintrem je umístěno fontánové čerpadlo, což je v podstatě odporové

topení H1. Při jeho zapnutí bude supratekutá složka stoupat kanálem vzhůru a na něm se bude částečně přeměňovat na normální složku. Přebytek kapaliny pak stříká jako fontána zpět do heliové vany.



Obr. 10.10: Experimentální schéma pro generování proudění supratekuté složky pomocí fontánového čerpadla.

Pro výpočet střední rychlosti  $v_{\rm s}$  supratekutého proudění kanálem vycházíme z toho, že příkon topení H1 je zcela využit na přeměnu supratekuté složky na normální a že fontána má stejnou teplotu (ve skutečnosti jen o málo vyšší, což lze prokázat přímým měřením teploty pomocí teploměrů T1 a T2) jako He vana, proto v ní budou normální a supratekutá rychlosti shodné. Za jednotku času tedy fontánou odteče  $M_{\rm out} = v_{\rm n}(\rho_{\rm s} + \rho_{\rm n})d^2$ , kde  $v_{\rm n} = \dot{q}/(\rho ST)$  (viz vztah 10.17). Stejné množství He  $M_{\rm in} = v_{\rm s}\rho_{\rm s}d^2$  musí přitékat kanálem, tedy pro střední rychlost supratekutého proudění dostaneme

$$v_{\rm s} = \frac{\dot{Q}}{\rho_{\rm s} ST d^2} \tag{10.21}$$

a je tudíž shodná s rychlostí protiproudu normální a supratekuté složky, která by byla vytvořena stejným tepelným příkonem, pokud by topení H1 bylo umístěno ve slepém konci takového proudového kanálu.

Budeme-li pomalu zvyšovat tepelný příkon do fontánového čerpadla, poteče kanálem supratekutá složka směrem vzhůru, ale až do určité kritické rychlosti  $v_{cr}^{I}$  kolem 1 cm/s v kanálu nevzniká kvantová turbulence. Normální složka je v klidu a proudění supratekuté složky s plochým profilem (viz obr. 10.11 a) je potenciální.

Všimněme si, že toto proudění je bezdisipativní (zanedbámeli remanentní víry, které v kanále vždy existují), kdežto v případě protiproudu normální a supratekuté složky je i proudění pod první kritickou rychlostí disipativní, díky konečné vazkosti proudící normální složky.

Obr. 10.11: Fenomenologický model proudění v kanále uzavřeném supratekutými děrami. Podrobnosti jsou v textu.

Překročí-li rychlost supratekuté složky  $v_{\rm cr}^{\rm I}$ , která je jen slabě závislá na tep

lotě a nezávisí na průměru kanálu, vzniká v kanále klubko kvantovaných vírů - kvantová turbulence. Uplatní se proto disipativní síla vnitřního tření a na kanále vznikne mírný tlakový a teplotní spád. Těsně nad  $v_{\rm cr}^{\rm I}$  je rychlostní profil proudící supratekuté složky stále ještě přibližně plochý a normální složka dál zůstává v klidu, jak je znázorněno na obr. 10.11 b. Hovoříme o turbulentním stavu A, který je podobný turbulentnímu stavu TI v protiproudé turbulenci (zanedbáme-li rychlostní profil normální složky, je shoda zřetelně jasná, neboť stavy A dostaneme ze stavu T1 pomocí Galileovy transformace).

Při dalším zvyšování tepelného příkonu fontánového čerpadla se dostaneme do turbulentního stavu B, ve kterém  $L = \beta(v - v_{\rm cr}^{\rm II})$ , kde  $\beta$  je téměř teplotně nezávislé. Fenomenologický model tohoto proudění předpokládá, že supratekutá složka imituje parabolický rychlostní profil proudění vazké tekutiny, ale s konečnou rychlostí kluzu  $v_{\rm cr}^{\rm II}$  (angl. *slip velocity*) na stěnách kanálu. Síla vnitřního tření však způsobí, že dojde k vnitřnímu proudění normální složky toroidálního charakteru, naznačenému na obr. 10.11 d. Rychlostní profily supratekuté (horní křivka) a normální složky (dolní křivka, normální složka proudí směrem vzhůru v oblasti kolem osy kanálu a zpět dolů se vrací kolem stěn, protože přes supratekuté díry nemůže kanál opustit) jsou znázorněny na obr. 10.11 c.

Tento fenomenologický model předpokládá (po odeznění počáteční komplexní fáze) exponenciální rozpad měřené hustoty vírů, což se experimentálně potvrdilo. Je tomu tak proto, že po vypnutí fontánového čerpadla se průtok supratekuté složky směrem vzhůru rychle zastaví, ale síla vnitřního tření způsobí, že dojde k toroidálnímu proudění obou složek naznačeného na obr. 10.11 d, tedy jakési kvazivazké tekutiny charakterizované efektivní kinematickou vazkostí  $\nu_{\rm eff}$ , jejíž hodnota odpovídá  $\nu_{\rm eff}$  získané z jiných experimentů, k jejichž rozboru přistupujeme.

## 10.6 Turbulence v He II generovaná mechanicky, mřížková turbulence

Dosud uvažovaná tepelně generovaná turbulence, kdy je v rámci dvousložkového modelu vytvořen protiproud n a s složky, nemůže mít klasickou analogii. Budeme se nyní věnovat situaci, kdy n a s složka mají shodná rychlostní pole, alespoň na dostatečně velkých délkových měřítkách. Že je taková situace možná dokazuje příklad rotace válcové nádoby s He II o úhlovou rychlostí  $\Gamma$ . Normální složka je díky nenulové vazkosti unášena stěnami nádoby a rotuje stejně jako tuhé těleso, tedy rychlostní pole má tvar  $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{\Gamma} \times \boldsymbol{r}$  a vířivost  $\boldsymbol{\omega} = \operatorname{rot} \boldsymbol{v} = 2\boldsymbol{\Gamma}$ . Supratekutá složka vytvoří mřížku kvantovaných vírů rovnoběžných s osou rotace a rotaci tuhého tělesa tak imituje. Na délkových měřítkách převyšujících vzdálenost mezi kvantovanými víry jsou tak jejich rychlostní pole a vířivost shodná, takže  $\langle \omega_s \rangle = \omega_n = \omega = \kappa L$ . Představíme-li si klasickou turbulenci jako soubor vírů různých velikostí, lze se domnívat, že supratekutá složka bude mít tendenci tyto víry imitovat podobně

jako rotaci tuhého tělesa. Budeme-li tedy turbulenci v He II generovat klasicky, měli bychom ji generovat shodným způsobem jak v n tak i v s složce. Je tomu opravdu tak?

V experimentu Maurera a Tabelinga [19], kdy byla turbulence jak v He I, tak i v He II generována mezi dvěma protisměrně rotujícími disky, bylo měřeno energetické spektrum. V He I – klasické vazké tekutině – byla měřením fluktuací citlivým tlakovým čidlem podle očekávání nalezena inerciální oblast energetického spektra, charakteristická slavným Kolmogorovovým exponentem -5/3. Při ochlazení heliové lázně do supratekutého stavu nebyla žádná znatelná změna tvaru spektra pozorována. Dokonce i intermitenční opravy, které jsme pro jednoduchost v úvodu podrobně nediskutovali, zůstaly stejné.

V experimentech na univerzitě v Oregonu, USA, byla turbulence generována protažením mřížky čtvercovým kanálem zaplněným He II při různých teplotách nad 1 K [20]. Vzniklé klubko kvantovaných vírů (jeho vírová hustota L) bylo detekováno již popsanou metodou tlumení druhého zvuku. Interpretace tohoto experimentu je poměrně složitá, avšak zásadním výsledkem je naměřená časová závislost rozpadu vzniklého vírového klubka  $L(t) \propto t^{-3/2}$ , která se nemění s teplotou a nezávisí na počáteční hodnotě L (je-li dostatečně velká, aby mohla turbulence být charakterizována jako plně rozvinutá). Ukážeme, že přesně takový časový rozpad lze očekávat pro vířivost klasické turbulence, předpokládáme-li Kolmogorovovský tvar spektra  $E(k) = C\varepsilon^{2/3}k^{-5/3}$  pro všechna relevantní vlnová čísla k, tedy od největších možných vírů rozměru samotného kanálu  $D = 2\pi/k_{\text{max}}$  až po ty nejmenší, jejichž konečný rozměr pro jednoduchost zanedbáme (tím se dopustíme jen malé nepřesnosti, neboť tyto nejmenší víry nesou jen zanedbatelnou energii). Kinetickou energii hmotnostní jednotky turbulentní tekutiny získáme integrací přes všechny hodnoty relevantních vlnových čísel

$$E = \int E(k)dk = \int_{k_{\text{max}}}^{\infty} C\varepsilon^{2/3} k^{-5/3} dk \,.$$
 (10.22)

Integrací a dosazením  $\varepsilon = -dE/dt$  získáme diferenciální rovnici pro E = E(t), kterou lze jednoduše řešit separací proměnných. S přihlédnutím k výše zmíněnému vztahu (10.6) dostaneme časovou závislost rozpadu vířivosti ve tvaru

$$\omega(t) = \frac{D(3C)^{3/2}}{2\pi\sqrt{\nu}}(t+t^*)^{-3/2} , \qquad (10.23)$$

kde $t^{\ast}$  je tzv. virtuální čas, tj. časový okamžik, kdy by se turbulence o nekonečně velké vířivosti začala rozpadat podle této závislosti.

Předpokládáme-li nyní, že všechny klasické víry, které tvoří turbulenci v normální složce, jsou imitovány prostřednictvím kvantovaných vírů v supratekuté složce (podobně jak jsme diskutovali pro případ rotující nádoby s He II), můžeme položit  $\omega = \kappa L$  a dostáváme rozpadový zákon pro vírovou hustotu

$$L(t) = \frac{D(3C)^{3/2}}{2\pi\kappa\sqrt{\nu_{\text{eff}}}} (t+t^*)^{-3/2} , \qquad (10.24)$$

tedy v souladu s experimentem. Znamená to, že alespoň v prvním přiblížení se mřížková turbulence v He II chová stejně jako klasická turbulence ve vazkých kapalinách. Normální a supratekutá složka mají (na relevantních délkových měřítkách) shodná rychlostní pole a He II se chová jako kvazivazká tekutina, které můžeme připsat teplotně závislou efektivní kinematickou vazkost  $\nu_{\rm eff}$ .

Vzniká však důležitá otázka o disipačním mechanismu kinetické energie (dodané protažením mřížky) supratekuté složky. Při relativně vysokých teplotách nad 1 K je představa taková, že disipace probíhá díky vnitřnímu tření a vazké disipaci v normální složce, podobně jak jsme diskutovali pro klasickou turbulenci. Co se však stane, snížíme-li teplotu hluboko pod 1 K, kdy je podíl normální složky zanedbatelně malý? Bude vůbec existovat inerciální Kolmogorovská oblast spektra? Co když je její existence nějakým způsobem podmíněna turbulencí v normální složce?

### 10.7 Kvantová turbulence v limitě nulové teploty

Odpovědi na tyto zásadní otázky jsou předmětem současného studia zákonitostí kvantové turbulence [9], a to jak z teoretického, tak i z experimentálního hlediska. Současné představy jsou takové, že na délkových měřítkách velkých ve srovnání se střední vzdáleností mezi kvantovanými víry  $\ell$  i v limitě nulové teploty stejně jako pro klasickou turbulenci v podstatě funguje Richardsonova kaskáda, jak je schématicky znázorněno na obr. 10.12. V případě klasické turbulence Richardsonova kaskáda končí



Obr. 10.12: Schématické znázornění disipačního procesu pomocí Richardsonovy kaskády v klasické turblenci (vlevo) a v mechanicky generované kvantové turbulenci v limitě nulové teploty.

vazkou disipací ve vírech o rozměrech Kolmogorovovy disipační délky. V případě čistě supratekuté turbulence však díky nulové vazkosti tento disipační kanál neexistuje. Richardsonova kaskáda se dostane na úroveň vírů o velikosti  $\ell$ , kde však

není k dispozici žádný disipativní mechanismus. Energie proto přechází do kaskády Kelvinových vln – na jednotlivých kvantovaných vírech a nelineárním způsobem se dále posouvá do oblasti vyšších a vyšších frekvencí Kelvinových vln, kde je pak vyzářena ve formě zvukových kvant - fononů. Protože fonony tvoří normální složku, její podíl stoupá, stoupá tedy i teplota a v konečném důsledku je kinetická energie turbulentního proudění (stejně jako v klasické turbulenci) přeměněna na teplo.

Z pohledu experimentu v této teplotní oblasti již nelze použít metodu tlumení druhého zvuku, protože v podstatě neexistuje normální složka. V Manchesteru [21] však bylo využito iontů a při teplotách hluboko pod 1 K pak iontů zachycených na vírových kroužcích o průměru kolem 1  $\mu$ m, které jsou jimi při pohybu v elektrickém poli samy vytvořeny. Turbulence byla generována s využitím rotujícího kryostatu v krychlové experimentální cele tak, že po postupném uvedení kryostatu do rotace (vytvořila se mřížka kvantovaných vírů imitující rotaci tuhého tělesa) byl kryostat náhle zastaven. Do vzniklého klubka kvantovaných vírů pak byly ve vodorovném i svislém směru stříleny ionty z ostrého wolframového hrotu, manévrovány elektrickým polem k protější stěně a měřil se jejich úbytek díky zachycení na klubku kvantovaných vírů v závislosti na čase. Experiment tak dává informaci o vírové hustotě L a jejím rozpadu, podobně jak jsme diskutovali výše pro tlumení druhého zvuku pro případ mřížkové turbulence nad teplotou 1 K. Podstatným výsledkem tohoto experimentu je to, že i v limitě nulové teploty je časový rozpad kvantové turbulence úměrný  $t^{-3/2}$ , což je silný argument pro existenci inerciální oblasti energetického spektra Kolmogorovova tvaru na délkových měřítkách převyšujících  $\ell$ .

Z naměřených výsledků se podařilo dedukovat teplotní závislost efektivní kinematické vazkosti, definované vztahem  $\varepsilon = -dE/dt = \nu_{\rm eff}(T)\kappa^2 L^2$ . Pod 1 K  $\nu_{\rm eff}(T)$  se snižováním teploty rychle roste. Znamená to, že při velmi nízkých teplotách, kdy je disipativní kanál přes vnitřní tření a normální složku vyřazen, je pro stejnou hodnotu  $\varepsilon$  třeba mnohem větší délky kvantovaných vírů L a ve spektru na délkových měřřítkách srovnatelných se střední vzdáleností mezi kvantovanými víry, tedy tam, kde na sebe navazuje klasická Richardsonova kaskáda a kaskáda Kelvinových vln, by mělo být maximum v energetickém spektru [22]. Formu energetického spektra v limitě nulové teploty je však stále možné považovat za otevřený problém [23].

Dosud jsme jako pracovní látku pro experimentální studium kvantové turbulence uvažovali pouze běžný izotop helia, <sup>4</sup>He, v supratekutém stavu. Kvantová turbulence byla studována i s použitím vzácnějšího izotopu <sup>3</sup>He při milikelvinových a submilikelvinových teplotách, v supratekuté fázi <sup>3</sup>He-B<sup>4</sup>. Pro proudění <sup>3</sup>He-B se podobně jako pro He II hodí dvousložkový model. Co se týče supratekuté složky, její vlastnosti jsou z hydrodynamického hlediska téměř shodné se supratekutou složkou He II - nenese entropii, nemá vazkost a existují v ní kvantované víry. Ty se od kvantovaných vírů v He II liší hodnotou cirkulačního kvanta  $\kappa = h/2m_3 \approx 0.66 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$  (dvojka ve jmenovateli je proto, že supratekutou

 $<sup>^{4}</sup>$ V supratekuté fázi <sup>3</sup>He-A existují kromě singulárních kvantovaných vírů, podobným kvantovaným vírům v He II, i tzv. spojité víry, které mají topologicky odlišné vlastnosti a otázka existence kvantové turbulence (zejména v limitě velmi nízkých teplot, kdy fáze A existuje v silném magnetickém poli) je dosud otevřeným problémem.

částicí je zde Cooperův pár dvou atomů <sup>3</sup>He) a dále tím, že mají zhruba stokrát větší průměr jádra. V limitě nulové teploty (prakticky na úrovni teplot 100 - 200  $\mu$ K) nemusíme zatím normální složku uvažovat, neboť její hustota se snižující se teplotou exponenciálně klesá.

Lze tedy očekávat, že v limitě nulové teploty budou vlastnosti kvantové turbulence generované v He II nebo v <sup>3</sup>He-B analogické. Technicky velmi náročný experiment při mikrokelvinových teplotách s využitím metod chlazení pomocí rozpouštěcího refrigerátoru <sup>3</sup>He -<sup>4</sup>He a jaderné demagnetizace byl proveden v Lancasteru [24]. Miniaturní mřížka byla připevněna k supravodivému drátku ohnutému do tvaru "fotbalové branky", jejíž "tyče" jsou pevně zakotveny. Prochází-li v magnetickém poli svislého směru drátkem proud, bude na drátek působit Lorentzova síla v horizontálním směru. Budeme-li aplikovat střídavý proud o frekvenci blízké mechanické rezonanční frekvenci drátku (v tomto případě "branky" s upevněnou mřížkou), Lorentzova síla drátek rozkmitá. Protože se pohybuje v magnetickém poli, na jeho koncích bude indukováno napětí, které je úměrné ryhlosti pohybu drátku, a které můžeme měřit. Jakmile rychlost kmitajícího drátku s mřížkou překročí určitou kritickou rychlost, dojde ke generaci kvantové turbulence. Jak ale vzniklou kvantovou turbulenci při těchto ultranízkých teplotách detekovat?

Ukázalo se, že vhodným detektorem takové je opět vibrující drátek, kmitající na jiné frekvenci a umístěný ve vhodné vzdálenosti v místě, kde chceme vzniklou kvantovou turbulenci detekovat. Takový kmitající drátek je v podstatě velice citlivý teploměr, protože frekvenční šířka jeho rezonanční odezvy je úměrná počtu kvazičástic a děr (protože jde o Fermiho systém a excitace existují vždy v párech) s ním interagujících, které se při takto extrémně nízkých teplotách pohybují po vzorku <sup>3</sup>He-B balisticky, v podstatě beze srážek, neboť jejich střední volná dráha je mnohem větší než rozměr systému. Zvýšíme-li teplotu, kvazičástic a kvaziděr exponenciálně přibývá a šířka rezonanční odezvy drátku proto rychle roste s teplotou. Obklopíme-li však takový kmitající drátek klubkem kvantovaných vírů v důsledku produkce kvantové turbulence mřížkou, šířka jeho rezonanční odezvy překvapivě poklesne – drátek ukazuje jakoby nižší teplotu (ačkoli ta se v prvním přiblížení nemění). Příčinou užší rezonanční odezvy tedy není pokles teploty, ale to, že díky klubku kvantovaných vírů v jeho blízkosti se k němu část balisticky se pohybujících kvazičástic a kvaziděr nedostane a neinteraguje s ním. Rychlostní pole cirkulující supratekuté kapaliny kolem jáder vírů totiž způsobí částečný Andreevův rozptyl těchto kvazičástic, protože příchozí kvazičástice (kvazidíra) nemá v oblasti dostatečně blízko u jádra víru (rychlost supratekuté složky roste směrem k ose víru) díky Galileově transformaci k dispozici volný stav a bezdisipativně se odrazí jako kvazidíra (kvazičástice) nazpět přesně po dráze, po které přiletěla.

Tato metoda detekce turbulence ukázala [24], že i v limitu velmi nízkých teplot se kvantová turbulence rozpadá analogicky jako klasická  $(L \propto t^{-3/2})$  a že její energetické spektrum na délkových měřítkách převyšujících střední vzdálenost mezi kvantovanými víry zahrnuje inerciální oblast Kolmogorovova typu, tedy  $C\varepsilon^{2/3}k^{-5/3}$ .

Existenci Richardsonovy kaskády a inerciální oblasti Kolmogorovova typu lze tedy pro čistě kvantovou turbulenci v limitě nulové teploty považovat za prokáza-

nou, a to jak pro supratekuté <sup>4</sup>He, tak i pro supratekutou fázi <sup>3</sup>He-B. To ovšem platí jen v případě, že kvantová turbulence je generována klasicky (zde to bylo náhlým zastavení rotující krychlové komůrky nebo kmity mřížky), kdy je kinetická energie do proudění injektována na velkém délkovém měřítku.

Tak tomu ovšem nemusí být vždy. Manchesterský experiment s ionty [21] experimentálně prokázal, že v limitě nulové teploty mohou existovat dva typy turbulence. Ten, který jsme právě diskutovali v souvislosti s Richardsonovou kaskádou a existencí inerciální oblasti budeme nazývat Kolmogorovovou turbulencí. Budeme-li ovšem turbulenci v limitě nulové teploty (což zde není nic jiného než vírové klubko) vytvářet pomocí velmi intenzívní emise iontů do komůrky s přiloženým elektrickým polem, budeme generovat tzv. Vinenovu turbulenci. Mechanismus generace zde spočívá v tom, že v elektrickém poli se iont urychlí na kritickou rychlost, při níž na něm vznikne zárodečná vírová smyčka. Iont tak sám sebe zachytí na vírovém kroužku, jehož průměr dále roste, protože absorbuje energii elektrického pole, které se snaží urychlit na něm zachycený nabitý iont (ve skutečnosti ale jeho rychlost klesá, jak je podrobně diskutováno v kapitole 8 o iontech). Je-li v komůrce takových vírových kroužků dostatečný počet, díky interakci jejich rychlostních polí se deformují a dochází k jejich přepojování a vzniku vírového klubka. Prostorová orientace jednotlivých segmentů kvantovaných vírů je zde zcela náhodná a vlastnosti takového klubka jsou jiné než klubka vytvořeného klasicky. To se nejmarkantněji projeví při rozpadu Vinenovy turbulence, kdy je experimentálně pozorován rozpadový zákon

$$L(t) = L_0 \frac{1}{t + t_{\rm vo}} \simeq L_0 \frac{1}{t}$$
(10.25)

který lze jednoduše odvodit z Vinenovy rovnice 10.18 pro nulovou rychlost protiproudu normální a supratekuté složky. Rozpadový zákon 1/t byl v tomto případě experimentálně pozorován.

Po diskusi vlastností kvantové turbulence v limitě nulové teploty je vhodné provést její srovnání s klasickou turbulencí. Dodejme, že toto srovnání je na místě pouze pro kvantovou turbulenci v limitě nulové teploty. Při vyšších teplotách kvantové kapaliny vykazují dvousložkové chování a kvantová turbulence obecně zahrnuje (ať už laminární či turbulentní) proudění obou složek a jejich vzájemnou interakci prostřednictvím síly vnitřního tření.

Základním stavebním kamenem obou jsou víry. V klasické turbulenci sestávající z vírů (angl. eddies) různých velikostí (viz obr. Leonarda da Vinciho 10.1) jsou víry jsou topologicky nestabilní a je velmi obtížné je identifikovat a matematicky rigorózně popsat. Cirkulace se liší od víru k víru; díky vazké disipaci neplatí zákon zachování cirkulace. V kvantové turbulenci v limitě nulové teploty jsou velké víry vytvářeny svazky kvantovaných vírů, které jsou topologicky stabilní a všechny mají stejnou cirkulaci. Platí zde zákon zachování cirkulace. Je proto jednodušší tyto víry matematicky popsat.

Vidíme, že kvantová turbulence v limitě nulové teploty je jednodušší a snadněji matematicky popsatelná než klasická turbulence ve vazkých tekutinách. Může být chápána jako jakýsi prototyp turbulence a mohla by význemně přispět k prohloubení poznání o turbulentním proudění.

### 10.8 Kvantová turbulence v <sup>3</sup>He-B v přítomnosti normální složky

Budeme se nyní věnovat kvantové turbulenci v supratekuté fázi <sup>3</sup>He-B při vyšších teplotách, zhruba nad 0,2  $T/T_c$ , (prakticky jde o teploty kolem 1 mK), kdy je podíl vazké normální složky nezanedbatelný. Již jsme diskutovali, že kinematická vazkost normálního kapalného <sup>3</sup>He těsně nad teplotou supratekutého přechodu, jakož i normální složky <sup>3</sup>He-B je na rozdíl od <sup>4</sup>He mnohokrát vyšší, srovnatelná zhruba s vazkostí oleje. Proto lze v typických hydrodynamických experimentech se supratekutým <sup>3</sup>He-B uvažovat normální složku jako nehybnou, efektivně "přibitou" ke stěně experimentální komůrky díky vysoké vazkosti. Nepohyblivá normální složka pak tvoří speciální souřadný systém (kde samozřejmě platí  $v_n = 0$ ), ve kterém budeme uvažovat potenciální či vírové proudění supratekuté složky.

Experimentálně byl výzkum kvantové turbulence v těchto podmínkách studován v nízkoteplotní laboratoři Helsinské technické univerzity pomocí techniky jaderné magnetické rezonance (JMR) s pomocí rotujícího kryostatu jaderné demagnetizace [25]. Protože jádra kvantovaných vírů v supratekutém <sup>3</sup>He-B mají rozměr zhruba stokrát větší než jádra kvantovaných vírů v He II, stěny použité křemenné experimentální komůrky lze považovat za hydrodynamicky hladké, tj. na jejich nerovnostech nedochází k zachycení (pinningu) kvantovaných vírů a existenci remanentních vírových smyček. Při rotaci tak víry musejí vznikat intrinsicky, tedy teprve tehdy, kdy dojde k překročení kritické rychlosti. Ta je mnohem vyšší než dává Fevnmanovo termodynamické kritérium, které jsme diskutovali v kapitole o supratekutosti <sup>4</sup>He. Začneme-li v takové válcové komůrce rotovat supratekuté <sup>3</sup>He-B, při překročení Feynmanovy kritické podmínky víry nevzniknou, ale vzorek bude v metastabilním, tzv. Landauově bezvírovém stavu. Situace je do jisté míry analogická supravodiči druhého druhu v magnetickém poli nižším než je první kritické a platí v něm Meissnerův jev. I zde si lze představit, že v souřadném systému spojeném s normální složkou vzorkem cirkulují stínící hmotové supraproudy, které "vytěsňují rotaci" supratekuté složky vně vzorku.

Princip a výsledek experimentu je dobře patrný z obr. 16.47. Je-li do Landauova stavu rotující supratekuté fáze <sup>3</sup>He-B injektována jedna nebo několik vírových smyček<sup>5</sup>, záleží pouze na teplotě kolik bude v komůrce po odeznění přechodového stavu kvantovaných vírů. Při vysoké teplotě (přibližně při  $T > 0, 6 T_c$ ) dochází pouze k běžné expanzi zárodečných vírových smyček a jejich počet se v přechodové fázi nemění. Při nízké teplotě  $T < 0, 6 T_c$  však JMR zaregistruje termodynamicky rovnovážný stav s mnoha kvantovanými víry, odpovídající imitaci rotace tuhého tělesa. Zárodečná smyčka (nebo několik smyček) se tudiž musela v přechodovém procesu rozmnožit - došlo ke generaci kvantové turbulence, která pak postupně relaxovala k termodynamicky rovnovážnému stavu s hexagonální mřížkou kvantovaných vírů

 $<sup>^5</sup>$ Lze to udělat třemi způsoby: využitím Kelvinovy-Helmholtzovy nestability rozhraní fází A a B, využitím otvoru spojujícího experimentální objem s objemem vzorku chlazeném sintrem, kterým vírové smyčky mohou za určitých podmínek proniknout nebo využitím tzv. Kibbleova-Zurkova mechanismu, kdy zárodečné víry v experimentálním objemu vzniknou důsledkem lokálního přehřátí vzorku při reakci s neutronem - podrobná disluze je v kapitole 11.



Obr. 10.13: Fázový diagram turbulentního proudění supratekuté složky v supratekutém <sup>3</sup>He-B. Princip měření: a) Výchozí tzv. Landauův bezvírový stav, kdy je v souřadném systému spojeném s rotující normální složkou supratekutá složka ve stavu rotace o úhlové rychlosti  $\Omega$ . b) Injekce jedné nebo několika,  $(\Delta N)$ , zárodečných vírových smyček vede k přechodovému stavu, po jehož odeznění je měřen počet vírů  $N_{\rm f}$  v konečném stacionárním stavu. Byly nalezeny dvě kategorie výsledků, do kterých lze všechny experimenty rozdělit. Jsou to: c)  $N_{\rm f} = \Delta N$ , čili běžná expanze zárodečných vírových smyček, a d)  $\Delta N \ll N_{\rm f} \leq N_{\rm eq}$ , kdy došlo k multiplikaci počtu vírových smyček a generaci kvantové turbulence. e) Fázový diagram proudění vyplývající z popsaného experimentu, šedivá plocha je oblastí existence kvantové turbulence.

rovnoběžných s osou rotace komůrky.

Popišme na základě jednoduchých fyzikálních úvah, proč tomu tak je. Při expanzi zárodečné vírové smyčky se na vírovém vlákně generují Kelvinovy vlny a šíří se po něm stejně jako vlny po pružném vlákně. Kelvinovy vlny jsou tlumené díky disipativní síle vnitřního tření, jejíž účinek je kvantitatině dán velikostí parametru vniřního tření  $\alpha$ . Hodnota parametru  $\alpha$  strmě klesá s teplotou, při  $T \approx 0,6 T_c$  je přibližně rovna jedné a při dalším snižování teploty exponenciálně klesá. Při vysokých teplotách  $T > 0,6 T_c$  jsou Kelvinovy vlny přetlumené. Zjednodušeně řečeno, každá vzniklá porucha bude utlumena v podstatě tam, kde vznikla. Při nízkých teplotách se však vzniklá porucha bude po vírovém vlákně šířit pouze s nepatrným tlumením, může se odrazit od konce víru na stěně nádoby nebo obkroužit celou vírovou smyčku. Dojde k nelineární interakci takových poruch, na vírovém vlákně se vytvářejí smyčky, dochází k jejich přepojování a tudíž násobení jejich počtu - tj. kvantové turbulenci.

Poněkud rigorózněji lze vznik a vlatnosti kvantové turbulence v přítomnosti stacionární normální složky popsat matematicky v přiblížení kontinuálního modelu. Uvažujme kvantovou turbulenci v supratekuté složce tvořenou supratekutými víry různých velikostí, jež jsou složeny z mnoha přibližně rovnoběžných kvantovaných vírů (podobně jako je tomu při rotaci nádoby obsahující supratekuté helium). Sonin teoreticky ukázal [26], že přestředováním (angl. *coarse-graining*) přes vzdálenost přesahující střední vzdálenost mezi jednotlivými kvantovanými víry vede k tomu, že Eulerova rovnice pro supratekutou složku nabývá tvaru

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \nabla \mu = (1 - \alpha') \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\omega} + \alpha \hat{\boldsymbol{\omega}} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v}) . \qquad (10.26)$$

Tato rovnice je napsána v souřadném systému spojeném s nepohyblivou normální složkou,  $\boldsymbol{\omega} = \nabla \times \mathbf{v}$  je vystředovaná vířivost supratekuté složky a  $\hat{\boldsymbol{\omega}}$  je jednotkový vektor ve směru  $\boldsymbol{\omega}$ . Substitucí  $\tilde{t} = (1 - \alpha')t$  dostaneme

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \tilde{t}} + \nabla \tilde{\mu} = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\omega} + q \hat{\boldsymbol{\omega}} \times (\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{v}) . \qquad (10.27)$$

Srovnejme nyní tuto rovnici (která není invariantní vůči Galileově transformaci) s klasickou Navierovou-Stokesovou rovnicí 10.4 (která samozřejmě invariantní vůči Galileově transformaci je), přepsanou do tvaru:

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \nabla \mu = \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{\omega} + \nu \nabla^2 \boldsymbol{v} . \qquad (10.28)$$

Vidíme, že první tři členy těchto rovnic jsou identické. Disipativní členy klasické Navierovy-Stokesovy rovnice (10.28) a supratekuté pohybové rovnice (10.27) se liší. Roli Reynoldsova čísla zde hraje intrinsický parametr  $Re_{\rm eff} = q^{-1} = (1 - \alpha')/\alpha$ , který přes koeficienty vntřního tření  $\alpha$  a  $\alpha'$  závisí na teplotě, nikoli však na geometrii proudění, jak je tomu v případě klasické Navierovy-Stokesovy rovnice. Lze tedy říci, že roli Reynoldsova čísla zde hraje teplota - při vysokých teplotách  $T > 0, 6 T_c$  je proudění laminární, při nízkých teplotách  $T < 0, 6 T_c$  je proudění turbulentní.

Dodejme ještě, že energetická spektra odpovídající rovnicím (10.27) a (10.28) se podstaně liší. Rovnici (10.28) odpovídá 3D energetické spektrum znázorněné na obr. 10.4, které je charakterizováno inercálním intervalem tvaru  $E(k) = C\varepsilon^{2/3}k^{-5/3}$ , kde nedochází k disipaci energie. Disipativní síla vnitřního tření ovšem působí na všech délkových měřítkách, proto inerciální část spektra generovaného rovnicí (10.27) na velkých délkových měřítkách chybí. Formálně se tvar spektra ke Kolmogorovskému blíží na malých délkových měřítkách, ale tam již rovnici (10.27) nelze aplikovat.

### 10.9 Závěr

V této kapitole jsme diskutovali možnosti využití kryogenního helia pro studium turbulence tekutin. Ukázali jsme, že jak chladný heliový plyn tak i normální kapalné <sup>4</sup>He jsou zejména díky extrémně nízké vazkosti a dalším experimentálně jednoduše laditelným fyzikálním vlastnostem vhodným pracovním médiem pro generaci a studium proudění extrémně vysokých Reynoldsových či Rayleighových čísel v dobře definovaných laboratorních podmínkách. Kromě studia klasické turbulence však kvantové kapaliny (supratekuté <sup>4</sup>He, supratekuté fáze <sup>3</sup>He, směsi <sup>3</sup>He–<sup>4</sup>He a v současné době již i chladné atomové plyny) umožňují studium nového směru dynamiky tekutin – kvantové turbulence.

Kvantová turbulence, teoreticky předpovězená Feynmanem [11] a experimentálně objevená Vinenem [11], je v objektivu zájmů nízkoteplotních fyziků již více než půl století. Lze říci, že až do devadesátých let minulého století se rozvíjela v podstatě nezávisle, zejména proto, že byla studována v protiproudu normální a supratekuté složky supratekutého He II, které nemá zřejmou klasickou analogii. Přesto bylo dosaženo mnoha pozoruhodných experimentálních výsledků a v určitých případech i jejich kvantitativnícho teoretického popisu.

Ke kvalitativnímu posunu pak došlo v devadesátých letech a později, kdy byla studována kvantová turbulence generovaná klasicky a prokázala se hluboká analogie mezi klasickou a kvantovou turbulencí. Přispělo k tomu i studium kvantové turbulence v supratekuté fázi <sup>3</sup>He-B, kde může kvantová turbulence koexistovat s nepohyblivou vazkou normální složkou. Významným způsobem pak přispěl jak experimentální tak teoretický výzkum kvantové turbulence v limitě nulové teploty, kdy jí lze chápat jako jakýsi jednodušší prototyp turbulence, který může významně přispět k vyřešení významného problému klasické fyziky - pochopení obecného problému turbulence. Zejména díky této perspektivě je v současné době kvantová turbulence jedním z nejdynamičtěji se rozvíjejících oborů fyziky nízkých teplot.

### 10.10 Literatura

- [1] R. J. Donnelly, Quantized Vortices in Helium II, Cambridge University Press (1991).
- [2] U. Frisch, Turbulence, Cambridge University Press (1995).
- [3] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Fluid Mechanics, 2nd Ed., Butterworth-Heinemann, Oxford (1987).
- [4] R. J. Donnelly and K. R. Sreenivasan (eds.), Flow at Ultra-High Reynolds and Rayleigh Numbers, Springer-Verlag, Berlin (1998).

- [5] J. J Niemela, K. R. Sreenivasan, L. Skrbek, R. J. Donnelly, Nature 404, 837 (2000).
- [6] B. J. Mc Keon, C. J. Swanson, M. V. Zagarola, R. J. Donnelly, A. J. Smits, J. Fluid Mechanics 511, 41 (2004).
- [7] J. Nikuradse, Forsch. Arb. Ing.-Wes. No 356 (1932).
- [8] M. Blazkova, D. Schmoranzer, and L. Skrbek, Phys. Rev. E75, 025302, (2007).
- [9] W. F. Vinen, J. J. Niemela, J. Low Temp. Phys. 128, 167 (2002).
- [10] R. P. Feynman, Progress in Low Temperature Physics, Vol. 1, Chap. 2, C. J. Gorter (ed.), North-Holland, Amsterdam (1955).
- [11] W. F. Vinen, Proc. Roy. Soc. A 240 114 (1957); 240, 128 (1957); 242, 493 (1957); 243, 400 (1958).
- [12] J. T. Tough, Progress in Low Temperature Physics, Vol. 8, D. F. Brewer (ed.), North-Holland Publishing Co., Amsterdam (1982), p. 133.
- [13] C. J. Gorter, J. H. Mellink, Physica 15, 285 (1949).
- [14] K. W. Schwarz, Phys. Rev. B 18, 245 (1978); 31, 5782 (1985); 38, 2398 (1988); Phys. Rev. Lett. 50, 364 (1983).
- [15] C. F. Barenghi, L. Skrbek, J. Low Temp. Phys. 146, 5 (2007).
- [16] D. D. Awschalom, F. P. Milliken and K. W. Schwarz, Phys. Rev. Lett. 53, 1372 (1984).
- [17] D. J. Melotte, C. F. Barenghi, Phys. Rev. Lett. 80, 4181 (1998).
- [18] T. V. Chagovets, L. Skrbek, Phys. Rev. Lett. 100, 215302 (2008).
- [19] J. Maurer, P. Tabeling, Europhys. Lett. 43, 29 (1998).
- [20] S. R. Stalp, L. Skrbek, R. J. Donnelly, Phys. Rev. Lett. 82, 4831 (1999); L. Skrbek, J. J. Niemela, R. J. Donnelly, Phys. Rev. Lett. 85, 2973 (2000).
- [21] P. M. Walmsley, A. I. Golov, H. E. Hall, A. A. Levchenko, W. F. Vinen, *Phys. Rev. Lett.* 99, 265302 (2007).
- [22] V. S. L'vov, S. V. Nazarenko, O. Rudenko, Phys. Rev. B 76, 024520, (2007).
- [23] E. Kozik, B. Svistunov, Phys. Rev. B 77, 060502, (2008).
- [24] D. I. Bradley, D. O. Clubb, S. N. Fisher, A. M. Gue'nault, R. P. Haley, C. J. Matthews, G. R. Pickett, V. Tsepelin, and K. Zaki, *Phys. Rev. Lett.* 96, 035301 (2006).
- [25] A. P. Finne, T. Araki, R. Blaauwgeers, V. B. Eltsov, N. B. Kopnin, M. Krusius, L. Skrbek, M. Tsubota, G. E. Volovik, *Nature* **424**, 1022 (2003).
- [26] E. B. Sonin, Rev. Mod. Phys. 59, 87 (1987).

# 11 Supratekuté hélium ako kozmologické laboratórium ?

P. Skyba, L. Skrbek

### 11.1 Supratekuté hélium - modelový systém pre kozmológiu



Obr. 11.1: Schématické znázornenie hierarchie interakcií a narúšaní symetrie vo Vesmíre po Veľkom tresku. Napriek pokroku dosiahnutému vo vede za posledné storočie, ľudstvo v podstate nepozná presnú odpoveď na fundamentálnu otázku týkajúcu sa vzniku a vývoja Vesmíru (vlastnosti kvantového vákua) a pôvod hmoty. Súčasné teoretické predstavy a modely o vývoji Vesmíru od Veľkého tresku až po dnešné dni sú podporené experimentálnymi objavmi a pozorovaniami napríklad objavom reliktného žiarenia a poslednými astronomickými a astro-fyzikálnymi pozorovaniami. Avšak v dôsledku nemožnosti realizácie kontrolovaného kozmologického experimentu (experimentu na obrovských škálach) pozemská veda zostáva v pozícii pasívneho pozorovateľa prírodných javov na javisku divadla zvaného Vesmír. Práve táto nemožnosť uskutočnenia týchto experimentov vedie teoretických a experimentál-

nych fyzikov k hľadaniu analógií medzi fyzikálnymi procesmi a javmi študovanými v kozmológii a podobných javov a procesov vo fyzike kondenzovaných látok, ktoré môžu byť študované experimentálne. Je zrejmé, že nepôjde o úplné, sto percentné analógie, avšak možnosť realizovať kontrolovaný experiment poskytuje nesporné výhody. Naviac, väčšina fyzikálnych vlastností kondenzovaných látok je známa z prvých princípov a tieto fyzikálne vlastnosti boli verifikované experimentami. Teoretické modely predpovedajú, že počas svojej evolúcie náš Vesmír prechádzal niekoľkými fázovými prechodmi, pri ktorých sa spontánne narúšala symetria jednotlivých jeho stavov a súčasne sa pri nich separovali alebo formovali jednotlivé interakcie: gravitačná, silná a elektro-slabá a nakoniec elektromagnetická interakcia. Matematicky zapísané, došlo k narušeniu symetrie typu  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ , ako je schématicky znázornené na obr. 11.1. Viacej sa o symetrii a jej narušení dozvieme v následujúcej kapitole o kvantovej chromodynamike a supratekutosti farebných kvarkov.

Základná myšlienka použitia kondenzovaných látok k štúdiu analógií s fyzikálnymi procesmi v kozmológii je v princípe veľmi jednoduchá: symetria stavu s nižšou energiou je pozostatkom symetrie stavu s vyššou energiou, pričom obidve sú separované fázovým prechodom. Vo všeobecnosti, pri vyšších teplotách sa kondenzované látky nachádzajú v energetickom stave majúcom vyššiu symetriu. Keď následne je táto kondenzovaná látka ochladená a prechádza fázovým prechodom, dostane sa do stavu s nižšou energiou a redukovanou symetriou.

Najjednoduchším príkladom z oblasti kvantových kvapalín je supratekuté <sup>4</sup>He, konkrétne fázový prechod He I - He II. Z kapitoly 5 vieme, že parameter usporiadania supratekutej zložky He II môžeme zapísať v tvare  $\Psi = \sqrt{\rho}_{\rm s} \exp\{i\phi\}$ , čo je dôsledkom narušenia kalibračnej invariancie pri fázovom prechode do supratekutého stavu. Ako opíšeme nižšie, práve toto narušenie symetrie inšpirovalo Zureka k prvému konkrétnemu návrhu realizácie laboratorného experimentu využívajúceho analógiu kozmologie a fyziky kondenzovaných látok.



Obr. 11.2: Volná energia  $V(\Psi)$  v GL modeli nad (vľavo) a pod (vpravo) kritickou teplotou.

Ako vieme z kapitoly 6, fázový prechod <sup>3</sup>He do supratekutého stavu je spojený s narušením spinovej, orbitálnej a kalibračnej symetrie, ktorá sa dá stručne vyjadriť ako  $SU^{S}(3) \times$  $SU^{L}(3) \times U(1)$ . Tento fázový prechod možno považovať za fázový prechod s najväčším počtom narušených symetrií. Preto sú supratekuté fázy hélia-3 najhorúcajším kandidátom na realizáciu experimentov, ktoré môžu simulovať niektoré javy študované v kozmológii. Podrobný opis s vysvetlením fyzikálnej podstaty použitia supratekutých fáz <sup>3</sup>He ako modelového systému pre kozmológiu možno nájsť v knihách Volovika [1, 2], ktorý je považovaný za

otca tejto myšlienky, tohto modelu a prístupu. V tejto kapitole uvedieme iba niekoľko príkladov experimentov, ktoré simulujú, respektíve môžu byť analógami takých javov a efektov študovaných v kozmológii akými sú napríklad simulácia Veľkého tresku, Unruhov efekt, či vzniku horizontu událostí.

### 11.2 Kibbleův-Zurkův mechanismus vzniku defektů při fázovém přechodu druhého druhu

Pro vysvětlení fyzikální podstaty Kibbleova-Zurekova mechanismu vzniku defektů (v konkrétním případě supratekutého helia pak čarových singularit - kvantovaných vírů) budeme uvažovat fázový přechod druhého druhu. Protože (jako tomu je v případě fázového přechodu prvního druhu) s ním není svázané latentní teplo, může proběhnout velmi rychle a v případě dostatečně homogenních fyzikálních podmínek téměř současně ve velkém objemu. Budeme-li předpokládat, že přechod nastane

díky snižování teploty, můžeme definovat charakteristickou dobu přechodu jako

$$\tau_{\rm Q} = \left( \frac{1}{T_{\rm c}} \left| \frac{dT}{dt} \right|_{T=T_{\rm c}} \right)^{-1} \,. \tag{11.1}$$

Odtud plyne, že časový vývoj teploty v okolí kritické teploty přechodu  $T_{\rm c}$  je možné v prvním přiblížení považovat za lineární:  $T(t) = T_{\rm c}(1 - t/\tau_{\rm Q})$ .

K popisu fázového přechodu druhého druhu použijeme fenomenologický Ginzburgův - Landauův (GL) model. Pro případ supravodiče je GL popis podrobně diskutován v kapitole 13 o základech supravodivosti. Zde se budeme nejprve věnovat nejjednoduššímu 1D popisu. Model GL předpokládá hladkou závislost hustoty volné energie na parametru uspořádání,  $\Psi$ , ve tvaru

$$V(\Psi) = \alpha (T - T_{\rm c}) |\Psi|^2 + \frac{1}{2} \beta |\Psi|^4 , \qquad (11.2)$$

kde  $\alpha$  a  $\beta$  jsou fenomenologické koeficienty. Pro jednoduchost předpokládáme konstantní  $\beta$  a lineární teplotní závislost pro  $\alpha$  typu  $\alpha \propto (T - T_c)/T_c$ . K narušení symetrie dochází při  $T < T_c$ , kde je  $\alpha$  záporné. Minimum volné energie se přesouvá (viz obr. 11.2) z bodu  $\Psi = 0$  (kde se nachází při  $T > T_c$ ) do dvou degenerovaných minim  $\pm \sqrt{|\alpha|}/\beta$ .

Pro izotropní dvojrozměrný případ pak přecházejí dvě minima z 1D případu v kružnici o poloměru  $\pm \sqrt{|\alpha|}/\beta$ . Pro 3D izotropní situaci pak povrch koule o tomto poloměru představuje alternativní degenerovaná fyzikální vakua (angl. manifold), která leží ve vzdálenosti  $\alpha^2/(2\beta)$  pod původním absolutním minimem pro teploty nad  $T_{\rm c}$ , v analogii s 1D případem na obr. 11.2.



Obr. 11.3: Oblasti rozměru koherenční délky s okamžitým stavem parametru uspořádání(vlevo) při fázovém přechodu zamrznou a v nové fázi vzniknou defekty (vpravo).

metru uspořádání (v případě supratekutého He II je to informace o fázi vlnové funkce).

Charakteristickou dobu přechodu  $\tau_{\rm O}$  nyní porovnáme s relaxačním časem parametru uspořádání nové fáze  $\tau$ , která při takovém fázovém přechodu druhého druhu vznikne. Relaxační čas  $\tau$  při přiblížení ke kritické teplotě diverguje, v rámci GL modelu jako  $\tau = \tau_0(1 - \tau_0)$  $T/T_{\rm c})^{-1}$ , a v těsné blízkosti  $T_{\rm c}$  se termodynamická rovnováha ustavuje jen pomalu. Na druhé straně informace se šíří konečnou rychlostí, v kondenzovaných soustavách rychlostí zvuku. Při rychlém ochlazení soustavy pod  $T_{\rm c}$  proto jednotlivé oblasti nově vzniklé fáze ne-

mohou sdílet informaci o para-

Můžeme si představit, že nad fázovým přechodem 2D parametr uspořádání (amplituda, fáze) fluktuuje kolem minima (viz obr. 11.2 vlevo, ovšem v jeho 2D variantě, takže v oblasti kolem počátku jde o paraboloid), takže v každém okamžiku vymezuje v oblasti rozměru koherenční délky určitý směr v rovině xy, který při přechodu "zamrzne". V nové fázi proto vzniknou defekty, viz obr. 11.3.

Představíme-li si 3D případ, nepůjde jen o bodové defekty v rovině, ale i o čarové singularity v 3D prostoru, které budou vznikat na hranicích zrn. Britský astrofyzik Kibble v roce 1976 aplikoval tyto úvahy na celý raný vesmír [3], ve kterém při rychlém rozpínání a ochlazování záhy po velkém třesku (angl. *Big Bang*) mohlo dojít k fázovému přechodu druhého druhu a vzniku čarových singularit - strun či superstrun (angl. *strings, superstrings*). Jejich existence však dosud nebyla přesvědčivě experimentálně prokázána. V roce 1985 Zurek [4], inspirován Kibbleovou prací, aplikoval tyto úvahy na kondenzované systémy, konkrétně zejména na supratekuté helium, kde by při rychlém přechodu do supratekutého stavu měly vznikat defekty a čarové singularity - kvantované víry. V následujícím textu se budeme věnovat experimentům, které byly nízkoteplotními fyziky provedeny s úmyslem tyto předpoklady potvrdit.

### 11.3 Kibbleův-Zurkův mechanismus v kondenzovaných látkách

Při fázových přechodech druhého druhu v různých kondenzovaných systémech je vznik defektů spíše pravidlem než výjimkou a přesvědčivá prověrka Kibbleova - Zurkova mechanismu je doposud živým předmětem zájmu. Byly prováděny experimenty se supravodiči, kapalnými krystaly, kapalným <sup>4</sup>He a supratekutým <sup>3</sup>He-B. Některé z nich v následujícím textu popíšeme. Jako nejpřesvědčivější je dosud jeví experimenty se supratekutým <sup>3</sup>He-B, jejichž výsledky je obtížné vysvětlit jinak než právě pomocí Kibbleova - Zurkova mechanismu, ačkoli jejich úplná mikroskopická teorie dosud neexistuje.

#### 11.3.1 Kibbleův-Zurkův mechanismus v supratekutém <sup>3</sup>He-B



Obr. 11.4: Schéma interakce neutronu v supratekutém  ${}^{3}$ He-B.

Supratekuté <sup>3</sup>He-B je nejvhodnějším systémem pro testování fyzikálních procesů proběhnuvších v raném vesmíru. Je tomu tak proto, že na rozdíl od supratekutého <sup>4</sup>He (kde je narušena kalibrační invariance) či kapalných krystalů (kde je narušena orbitální rotační symetrie) vykazuje kombinaci narušené spinové rotace, orbitální rotace a kalibrační invariance typu (SO3<sup>L</sup>× SO3<sup>S</sup>× U(1)), což je nejblíže předpokládanému narušení symetrie, ke kterému došlo v raném vesmíru (viz obr. 11.1). Navíc existuje významná po-

dobnost elementárních i kolektivních excitací v těchto systémech [1, 2]. Výsledky níže popsaných experimentů jsou proto pro kosmologii velmi užitečné a inspirující.

Experiment využívá ozařování vzorku $^3\mathrm{He}\text{-B}$ tepelnými neutrony. Střední volná

dráha neutronu v <sup>3</sup>He-B je kolem 0,1 mm, poté dojde k jaderné reakci

$$n + {}^{3}_{2} \operatorname{He} \rightarrow {}^{3}_{1} \operatorname{H} + p + 764 \operatorname{keV},$$
 (11.3)

schématicky znázorněné na obr. 11.4. Ionizované atomy vzápětí rekombinují a generují tak oblasti s teplotou vyšší než  $T_c$ . Fyzikální procesy, které se při vzniku a následném rychlém chlazení bubliny odehrávají, jsou názorně přiblíženy na obr. 11.5. Produkty reakce, které unášejí značnou kinetickou energii řádu stovek keV, tj. jádro tricia (triton) a proton, následně způsobí ionizační kaskádu okolních atomů <sup>3</sup>He obr. 11.5 (a). Vznikne tak přehřátá expandující bublina o rozměru nepřesahujícím cca 0,1 mm, která se velmi rychle, v řádu mikrosekund, chladí zpět na submilikelvinovou teplotu, při které je experiment prováděn.

V procesu jejího ochlazování dojde uvnitř bubliny k fázovému přechodu druhého druhu a vzniku nezávislých ostrůvků supratekuté fáze <sup>3</sup>He-B s různým parametrem uspořádání - obr. 11.5 (b). V centrální části bubliny pak (c) dojde ke kontaktu těchto ostrůvků a (d) ke vzniku hranic zrn těchto oblastí, přičemž na styku tří takových oblastí (při obejití takového bodu se amplituda parametru uspořádání nemění, ale fáze se změní o hodnotu  $\pm 2\pi$ ) dochází k vytvoření čarových singularit - kvantovaných vírů ve formě vírového klubka (e).

Lze popsaný proces experimentálně detekovat? Odpověď zní ano, povedlo se to již dokonce dvěma způsoby. První experiment byl proveden ve spolupráci se skupinou z



Obr. 11.5: Ilustrace Kibbleova - Zurkova mechanismu v supratekutém  ${}^{3}$ He-B. Podrobnosti jsou v textu.

Lancasteru při teplotě 160  $\mu$ K na jaderném refrigerátoru v Grenoblu [6]. Využil vysoké citlivosti jednoduchého detektoru - kmitajícího supravodivého drátku ve formě polokruhové smyčky. Jak jsme již podrobně diskutovali v kapitole 7, lze jej dobře využít jako velmi citlivý sekundární teploměr. V tomto experimentu byly dva takové detektory umístěny uvnitř malého objemu 0,15 cm<sup>3</sup> supratekutého <sup>3</sup>He-B, propojeného s větším objemem vzorku jen malým otvorem o rozměru 60  $\mu$ m. Pomocí AmBe zdroje malé intenzity byl vzorek ozařován proudem tepelných neutronů a uvnitř objemu detektoru tak docházelo k exotermické reakci, popsané rovnicí 11.3. Detektor dokáže registrovat každý jednotlivý případ jako pík rezonanční odezvy, který odeznívá s časovou konstantou danou geometrií experimentu, jak kvazičástice opouštějí prostor detektoru do celého objemu otvorem. Již jsme diskutovali, že při těchto teplotách se kvazičástice tvořící normální složku pohybují balisticky,
protože jejich střední volná dráha mnohokrát - při takto nízké teplotě o mnoho řádů - převyšuje rozměry vzorku. Jde právě o ty kvazičástice, které byly generovány při reakci tepelného neutronu s atomy <sup>3</sup>He v objemu detektoru. Druhý kmitající drátek slouží jako topení - generátor kvazičástic pro kalibraci, aby bylo možné zjistit, kolik energie v absolutní škále každý reagující neutron v prostoru detektoru zanechal.

Protože jde o náhodný proces, v experimentu se nabírá statistika: detektor bolometr je vystaven expozici neutronů delší dobu. Detekovaný počet srážek se analyzuje z pohledu disipované energie v určitém energetickém intervalu a odpovídající četnost se vynáší v závislosti na energii, takže výsledkem měření je energetické spektrum ve formě histogramu.



Obr. 11.6: Ke Kibbleovu - Zurkovu mechanismu v supratekutém <sup>3</sup>He-B. Podrobnosti jsou v textu.

Na obr. 11.6 jsou takové histogramy, získané při třech různých tlacích, ukazující že experiment přesvědčivě registruje energetický deficit ve srovnání s reakcí 11.3, neboť maximum histogramu neleží na očekávané hodnotě 764 keV, ale je posunuté k nižší hodnotě energie na jeden neutron. Posunutí přitom závisí na tlaku, při kterém byl experiment prováděn. Je zřejmé, že ne všechna energie deponovaná neutrony do objemu detektoru byla přeměněna na tepelné kvazičástice. Lze ukázat, že z celkové enerie 764 keV přibližně 7% energie odeberou ultrafialové fotony. Ale i po odečtení této energie by se maximum mělo nacházet zhruba na 710 keV. Energetický deficit je možné přičíst na vrub kvantovaných vírů vznikajících ve výše popsaném procesu v důsledku Kibbleova-Zurkova mechanismu. Provedené počítačové simulace [7] ukázaly kvalitativní a částečně kvantitativní<sup>1</sup> shodu teorie s experimentem.

Druhý experiment [8] byl proveden na rotační aparatuře ROTA v Helsinkách. Toto zařízení využívá detekční techniky NMR. Experimentální uspořádání bylo v podstatě shodné s tím, které jsme již popsali v kapitole 10 při diskuzi kvantové turbulence v <sup>3</sup>He-B.

 $<sup>^1</sup>$ Již jsme zmínili, že úplná teorie pro Kibbleův-Zurkův mechanismus dosud neexistuje a některé parametry modelu jsou fenomenologické. Na základě odhadu velikosti ohřátých bublinek $^3$ He o poloměru R=25  $\mu m$ a energie jednotkové délky víru $E_{\rm v}{=}0.5 \rm keV/mm$  byl získán dobrý souhlas s předpovědí Kibbleovy - Zurkovy teorie. Např. naměřené energetické deficity z obr. 11.6 jsou dobře vysvětlitelné díky známé tlakové závislosti koherenční délky a tedy i rozměru jádra vznikajících kvantovaných vírů.



Tam jsme též popsali, že rotující vzorek <sup>3</sup>He-B válcového tvaru se může nacházet v tzv. Landauově bezvírovém stavu, kdy normální složka rotuje spolu s nádobou a supratekutá se rotace neúčastní a v laboratorním souřadném systému zůstává v klidu. Víme také, že by bylo energeticky výhodnější, aby supratekutá složka imitovala rotaci tuhého tělesa prostřednictvím mřížky rovnoběžných kvantovaných vírů, ale že se tak nestane, dokud se nějakým způsobem nevytvoří zárodečná vírová smyčka, např. překročením intrinsické kritické rychlosti někde na stěně nádoby. Víme také, že při relativně vysokých teplotách  $T > 0,6 T_c$  víry vznikají a pohybují se směrem k ose rotace jednotlivě, neboť jejich dynamika je silně utlumena vnitřním třením s normální složkou, kdežto při nízkých teplotách zárodečná smyčka generuje kvantovou turbulenci v celém vzorku.



Obr. 11.7: Výřez P-T fázového diagramu <sup>4</sup>He znázorňující trajektorii expanze přes *lambda* čáru z výchozího bodu  $(P_i, T_i)$  do konečného bodu  $(P_f, T_f)$ .

Těchto vlastností <sup>3</sup>He-B bylo využito k prokázání Kibbleova-Zurkova mechanismu. Rotující vzorek <sup>3</sup>He-B byl ozařován neutrony z blízkého zdroje a při reakci neutronů s atomy vzorku došlo k vytvoření klubka kvantovaných vírů při rychlém ochlazování přehřáté bubliny přes fázový přechod druhého druhu. Ve stacionárním vzorku <sup>3</sup>He-B by vytvořené zárodečné smyčky kvantovaných vírů díky disipačnímu mechanismu vnitřního tření zanikly. Je-li však rotující vzorek <sup>3</sup>He-B v Landauově stavu, existuje v něm protiproud normální a supratekuté složky, jehož amplituda je úměrná vzdálenosti od osy rotace. Příznivě orientovaná zárodečná smyčka může v protiproudu expandovat (jak jsme diskutovali v kapitole 10 v souvislosti s

kvantovou turbulencí v protiproudu normální a supratekuté složky), dotkne se stěny nádoby, dojde k přepojení a zachycení a její konce se budou pohybovat po stěně nádoby směrem k ose rotace. Počet vírů rovnoběžných s osou rotace je díky změně textury vektoru  $\hat{n}$  možné detekovat metodikou NMR. Provedené experimenty za různých tlaků, teplot a rychlostí rotace jsou v souladu s očekáváním za předpokladu existence Kibbleova-Zurkova mechanismu [8, 9].

Při nízkých teplotách je situace jiná. Přiblížíme-li zdroj neutronů k rotujícímu vzorku, vzniklá zárodečná smyčka bude generovat kvantovou turbulenci v celém vzorku a nastane relaxace k termodynamicky stabilnímu stavu, kdy rotující <sup>3</sup>He-B bude obsahovat mřížku rovnoběžných vírů imitující rotaci tuhého tělesa.

### 11.3.2 Kibbleův-Zurkův mechanismus v supratekutém He II

Ačkoli Zurkovu předpověď generace kvantovaných vírů při přechodu do supratekutého stavu se na první pohled zdá být experimentálně jednodušší prověřit v $^4\text{He},$ 

kde přechod probíhá o dva řády teploty výš, situace se zde ukázala velice komplikovanou a výsledky jsou dosud rozporuplné. Předně díky logaritmické singularitě v teplotní závislosti měrného tepla v okolí  $T_{\lambda}$  není experimentálně možné vzorek <sup>4</sup>He dostatečně rychle ochladit. To je však možné obejít a studovat přechod do supratekutého stavu ne ochlazováním vzorku, ale díky konečnému sklonu  $\lambda$  čáry jeho rychlou expanzí z vysokého tlaku, jak je patrno z obr. 11.7.

Experimentální zařízení McClintockovy skupiny v Lancasteru je schématicky znázorněno na obr. 11.8. Stěny experimentální komůrky jsou tvořeny pružným vlnovcem. Víko komůrky je spojeno táhlem s přírubou kryostatu, takže jeho prostřednictvím se komůrka může velmi rychle prodloužit a uvnitř dojde k velmi rychlému poklesu tlaku, v souladu obr. 11.7. Víko a dno komůrky mají na vnitřní straně odporové topení (4) a citlivý bolometr (6), sloužící k detekci a kalibraci kvantovaných vírů metodou tlumení druhého zvuku (viz kapitola 10 o kvantové turbulenci). Vidíme polohu membrány tlakového čidla (1), vlnovcové boční stěny (2) a plnící otvor (3). Samotná vnitřní komůrka (5) je vyrobena z křemene.

Experiment byl po dobu zhruba deseti let postupně vylepšován a zpřesňován, obr. 11.8 ukazuje jeho poslední variantu. Již první experimenty ukázaly [10], že po expanzi vzniká v komůrce značný počet kvantovaných vírů a zdálo se, že Kibbleův - Zurkův mechanismus byl prokázán, ovšem pozdější experimenty a kritická analýza výsledků ukázaly [11], že citlivost experimentu na prokázání mechanismu nestačí. Důvodem je zejména to, že při expanzi mohou kvantované víry vznikat i z jiných důvodů. Ani poslední publikace [12], ve které jsou shrnuty výsledky mnoha eperimentů a provedena kritická analýza a zohled-



Obr. 11.8: Schématické znázornění experimentální komůrky pro expanzi přes $\lambda$ čáru. Podrobnosti jsou v textu.

nění dalších možných faktorů, které mohou hrát v tomto experimentu důležitou úlohu (podrobná analýza vychází za rámec tohoto textu) bohužel nedává jednoznačnou experimentální odpoveď na otázku, zda byl Kibbleův - Zurkův mechanismus ve <sup>4</sup>He prokázán.

# 11.4 Supratekuté <sup>3</sup>He-B a analóg Unruhovho javu

Unruh [13] študoval chovanie detektora, ktorý sa pohybuje vo fyzikálnom vákuu (vákuu kvantového poľa) s konštantným zrýchlením *a*. Ukázal, že takýto zrýchlene pohybujúci sa detektor bude interagovať s týmto fyzikálnym vákuom, bude ho excitovať a pozorovateľ spojený s týmto zrýchlene pohybujúcim sa detektorom bude "vnímať" toto vákuum ako teplo vyžarujúce absolutne čierne teleso, tepelný

rezervoár, pričom mu meraním priradí efektívnu teplotu

$$T_{\rm U} = \frac{\hbar a}{2\pi k_{\rm B}c} , \qquad (11.4)$$

na Fermiho ploche na jed-

notku objemu a spin,  $f(\varepsilon, T)$ 

je Fermi-Diracova rozdeľo-

vacia funkcia a  $\Delta(T)$  je ener-

getická medzera v spektre

ktorá pod teplotou  $0.25 T_c$ 

môže byť approximovaná

že s klesajúcou teplotou hus-

tota excitácií veľmi rýchlo

klesá a že na supratekutú

B-fázu je možno nazerať

ako na kvantové vákuum (z pohľadu excitácií), pri-

čom úlohu rýchlosti svetla v

tomto vákuu excitácií bude mať Landauovská rýchlosť

Z obrázku 11.9 je zrejmé,

kvázičasticových excitácií,

výrazom  $\Delta \approx 1.76 k_{\rm B} T_{\rm c}$ .

kde $\hbar$  a  $k_{\,\mathrm{B}}$  sú Planckova respektíve Boltzmanova konštanta a c je rýchlosť svetla vo vákuu.

Z predchádzajúcich kapitol vieme, že na supratekutú B-fázu <sup>3</sup>He je možno nazerať ako na dvojzložkovú či dvojkomponentnú kvapalinu obsahujúcu supratekutú zložku pri teplote T=0 K a normálnu zložku t.j. plyn kvázičasticových excitácií, ktorých celková energia v podstate predstavuje teplotu T kvapaliny. Celková hustota kvázičasticových excitácií  $N_n$  klesá s teplotou ako (pozri obr. 11.9)

$$N_{\rm n} = 2N(0) \int_{\Delta}^{\infty} \frac{\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta^2(T)}} f(\epsilon, T) d\epsilon , \qquad (11.5)$$
kde  $N(0)$  je hustota stavov



Obr. 11.9: Závislosť hustoty excitácií v  ${}^{3}$ He-B na teplote vypočítaná pomocou vzťahu (11.5).

 $v_{\rm L} = \Delta/p_{\rm F}$ . Ako zrýchlene pohybujúci sa detektor v takomto vákuu je možno použiť jednoduchý vibrujúci drôtik. Dá sa ukázať, že ak sa vibrujúci drôtik v tomto vákuu kvázičastíc supratekutého <sup>3</sup>He-B pohybuje s rýchlosťou v na rezonančnej frekvencii  $\Omega$ , potom odpovedajúcu Unruhovu teplotu  $T_{\rm U}$  možno vypočítať podľa vzťahu [1]:

$$T_{\rm U}(v) = \frac{\hbar\Omega}{4k_{\rm B}[\ln(v_{\rm L}/v + \sqrt{v_{\rm L}^2/v^2 - 1}) - \sqrt{1 - v^2/v_{\rm L}^2}]} .$$
(11.6)

Na obrázku 11.10 je znázornená závislosť Unruhovej teploty, vypočítanej podľa vzťahu (11.6) pre vibrujúce drôtiky s rezonančnými frekvenciami 1000 Hz a 4000 Hz. Rýchlosť pohybujúceho sa drôtika je škálovaná na Landauovu rýchlosť  $v_{\rm L}$ .



Obr. 11.10: Závislosť Unruhovej teploty na rýchlosti drôtikov škálovaných na Landau<br/>ovu rýchlosť  $v_{\rm L}.$ 

generované "Unruhove" excitácie výrazne prispejú k tlmeniu pohybu vibrujúceho drôtika. Ako uvidíme ďalej, až také jednoduché to nie je.

Predpokladajme, že ideálny vibrujúci drôtik (s nulovým vlastným tlmením) sa v dôsledku učinkujúcej Lorentzovej sily pohybuje v supratekutom <sup>3</sup>He-B, ktoré sa nachádza v uzatvorenom objeme. Pohyb drôtika je tlmený následkom jeho interakcie ako s jestvujúcimi excitáciami, ktoré reprezentujú "tepelné pozadie" (pozri kapitolu o Andrejevovskej reflexii), tak aj s novými, "Unruhovými" excitáciami generovanými tunelovým procesom následkom akcelerácie drôtika. Táto prídavná disipácia energie spojená s interakciou "Unruhových" excitácií s drôtikom, na jednotku plochy drôtika a za jednotku času, môže byť vyjadrená ako

$$Q_{\rm U} = (\Delta + k_{\rm B} T_{\rm U}) < nv_{\rm g} >_{\rm U} \approx \Delta < nv_{\rm g} >_{\rm U} , \qquad (11.7)$$

kde <  $nv_{\rm g}$  > U reprezentuje tok "Unruhových" excitácií, majúcich energiu  $\Delta$  pretože  $\Delta \gg k_{\rm B}T_{\rm U}$ . Tok "Unruhových" excitácií je úmerný

$$\langle nv_{\rm g} \rangle \approx n(p_{\rm F})k_{\rm B}T_{\rm U}\exp(-\Delta/k_{\rm B}T_{\rm U})$$
 (11.8)

a tento tok prispieva k tlmeniu pohybu drôtika prídavnou silou

$$F_{\rm U} = n(p_{\rm F})\Delta k_{\rm B}T_{\rm U}\exp(-\Delta/k_{\rm B}T_{\rm U})/v .$$
(11.9)

Potom celkovú silu tlmenia možno vyjadriť ako

$$F = F_{\rm T} + F_{\rm U} = F_{\rm T} \left( 1 + F_{\rm U} F_{\rm T} \right) , \qquad (11.10)$$

293

Z obrázku 11.10 je zrejmé, že ak sa rýchlosť vibrujúceho drôtika bude blížiť k hodnote Landauovej rýchlosti  $v_{\rm L}$ , Unruhova teplota  $T_{\rm U}$  bude rýchlo narastať. S nárastom Unruhovej teploty je však spojený nárast hustoty excitácií, ktoré sú generované zrýchleným (spomaleným) pohybom vibrujúceho drôtika. Na prvý pohľad sa zdá, že Unruhov efekt by mal byť v supratekutom <sup>3</sup>He-B lahko experimentálne merateľný: stačí, aby rýchlosť pohybu vibrujúceho drôtika bola veľmi blízka hodnote  $v_{\rm L}$  a

pričom druhý člen v zátvorke reprezentuje príspevok k tlmeniu od Unruhovho javu škálovaného tlmením od excitácií "tepelného" pozadia. Tento člen sa dá vyjadriť ako

$$\frac{F_{\rm U}}{F_{\rm T}} = \frac{k_{\rm B}T_{\rm U}}{p_{\rm F}v} \frac{v_{\rm L}}{v} \exp\left(-\frac{\Delta}{k_{\rm B}} \frac{(T-T_{\rm U})}{TT_{\rm U}}\right) , \qquad (11.11)$$

pričom hodnota  $T_{\rm U}$  je daná výrazom (11.6). Analýza výrazu (11.11) ukazuje, že experimentálne pozorovanie analógu Unruhovho javu v supratekutom <sup>3</sup>He-B je limitované hlavne dvoma faktormi. Prvým faktorom je relatívne nízka hodnota Unruhovej teploty  $T_{\rm U}$  (ako dôsledok nízkej pracovnej frekvencie vibrujúceho drôtika). S hodnotou  $T_{\rm U}$  je následne spojená nízka hustota "Unruhových" excitácií a tým aj veľkosť prídavnej tlmiacej sily, ktorá, aby bola detekovateľná, musi byť väčšia ako  $10^{-4} F_{\rm T}$ . Druhým faktorom je samotný makroskopický vibrujúci drôtik: ten pri svojom pohybe generuje obtekanie supratekutej komponenty, ktorá zvyšuje svoju energiu až na hodnotu  $2p_{\rm F}v$  (viď. kapitola 6 o Andrejevovej reflexii). V dôsledku tohto obtekania už pri rýchlosti drôtika  $v_{\rm L}/3$  dochádza ku generácii excitácií v dôsledku Galileiho posunu energií, ktoré potom maskujú tvorbu excitácií Unruhovým javom. Riešením týchto problémov by mohlo byť použitie vibrujúceho nanodrôtika, ktorého priemer by bol porovnateľný s koherenčnou dĺžkou supratekutého <sup>3</sup>He-B. Aplikáciou takéhoto drôtika by sa mali eliminovať obidva vyššie spomínané faktory: rezonančná frekvencia nano-drôtika je rádovo niekoľko megahertzov, o tri rády vyššia ako u konvenčného drôtika. To povedie k zvýšeniu hodnoty  $T_{\rm U}$ , so všetkými dôsledkami. Naviac, keďže priemer nano-drôtika je porovnateľný s koherečnou dĺžkou, supratekutá komponenta bude takýto objekt "ignorovať", čo následne by malo umožniť dosiahnúť rýchlosti pohybu nano-drôtika blízke k $v_{\rm L}$ a umožniť experimentálne pozorovanie analógu Unruhovho javu v <sup>3</sup>He-B.

## 11.4.1 Spinová supratekutosť v <sup>3</sup>He-B a simulácia horizontu udalostí

Schuetzhold a Unruh [16] navrhli realizáciu relatívne jednoduchého experimentu pre pozorovanie analógu horizontu udalostí (analógiu čiernej diery) na povrchových vlnách generovaných na povrchu kvapalín nachádzajúcich sa v gravitačnom poli, pričom samotná kvapalina mohla prúdiť s rôznou rýchlosťou prúdenia. Fyzikálna myšlienka tohto experimentu je jednoduchá. Na obrázku 11.11 je schématicky znázornený experiment simulujúci horizont udalostí. Vlny s vlnovou dĺžkou  $\lambda$  a amplitúdou  $\Delta h$  sú generované na povrchu kvapaliny, ktorá má hĺbku  $h_{\rm b}$ , pričom sú splnené podmienky  $\Delta h < h_{\rm b} < \lambda$ .



Obr. 11.11: Schématické znázornenie experimentu simulujúceho horizont udalostí na povrchových vlnách unášaných tokom kvapaliny v gravitačnom poli.

Vlna na povrchu kvapaliny v gravitačnom poli sa šíri grupovou rýchlosťou  $v_{\rm g}$ , kým samotná kvapalina tečie rýchlosťou  $v_{\parallel}$ . Grupová rýchlosť  $v_{\rm g} = d\Omega/dk$  závisí na disperznej relácii, ktorá v tomto jednorozmernom prípade môže byť vyjadrená ako  $\Omega^2 = kg \tanh(kh_{\rm b}) \sim gh_{\rm b}k^2$ , kde k je vlnový vektor a g je konštanta gravitačného zrýchlenia. Rýchlosť toku kvapaliny, ako aj grupová rýchlosť vĺn závisí od hĺbky  $h_{\rm b}$ . Pri splnení podmienky kontinuity a nevírového prúdenia ( $\nabla \times \mathbf{v} = 0$ ) autori odvodili pre inverznú efektívnu metriku vzťah

$$g_{00}^{\text{eff}} = 1 - \left(\frac{v_{\parallel}}{\sqrt{g \, h_{\text{b}}}}\right)^2,$$
 (11.12)

kde výraz  $\sqrt{g h_{\rm b}}$  reprezentuje rýchlosť vĺn. Zo vzťahu (11.12) vyplýva, že horizont udalostí vznikne v mieste kde je splnená podmienka  $g_{00}^{\rm eff}_{00=0}$ , t.j. v mieste, v ktorom rýchlosť toku  $v_{\parallel}$  sa bude rovnať rýchlosti vĺn  $\sqrt{g h_{\rm b}}$ . Detailná analýza modelu simulujúceho horizont události pomocou vĺn na povrchu kvapalín v gravitačnom poli ukázala, že takýto experiment by, v princípe, bolo možné uskutočniť. Ukazuje sa, že je veľmi obtiažne splniť napríklad podmienku nevírového prúdenia, ktorej nesplnenie v podstate znemožní dosiahnúť parametre pre vytvorenie horizontu udalostí. Tu je však možné nájsť analógiu so spinovo precesujúcimi vlnami v supratekutom <sup>3</sup>He-B.

V kapitole o supratekutých fázach <sup>3</sup>He sme ukázali [18], že na rozhraní homogénne precesujúcej a neprecesujúcej domény je možno generovať spinovo precesujúce vlny. Tie sú úplne analogické vyššie spomínaným vlnám na povrchu kvapalín v gravitačnom poli. Disperzný vzťah pre tieto spinovo precesujúce vlny možno vyjadriť v tvare

$$\Omega_{Sm}^2 = Q_{im} \frac{c_1 c_2}{RB} \tanh\left(Q_{im} L \frac{c_2}{2Rc_1}\right) \nabla B . \qquad (11.13)$$

Tento disperzný vzťah je analogický s disperzným vzťahom pre vlny na povrchu kvapalín v gravitačnom poli $\Omega^2 = kg \tanh(kh_{\rm b})$ , pričom  $\nabla {\rm B}$ má funkciu zrýchlenia gravitačného poľa.

Predstavme si dve experimentálne komôrky spojené kanálikom. V obidvoch komôrkach metódou kontinuálnej jadrovej magnetickej rezonancie na rovnakej frekvencii  $\omega_{\rm L}$  a s nulovým fázovým rozdielom medzi excitačnými signálmi vygenerujeme homogénne precesujúce domény. Veľkosť týchto domén a tým aj polohu ich doménových stien možno kontrolovať nastavením hodnoty statického magnetického poľa  $\mathbf{B}_0$ . To umožňuje nastaviť také magnetické pole, aby doménová stena bola v spojovacom kanáliku, a tým bola spoločná pre obidve domény. Pretože rozdiel fáz medzi precesujúcimi spinmi v doménach je rovný nule, medzi doménami netečie žiaden spinový tok. Spinovo precesujúca vlna excitovaná na doménovej stene jednej z precesujúcich domén sa šíri po kanáliku k druhej doméne grupovou rýchlosťou  $v_{\rm g}$ . Tok magnónov, ekvivalent toku kvapaliny, sa vytvorí pomocou gradientu fáze precesie týchto dvoch domén, nastavením rozdielu medzi fázami excitačných signálov ( $\nabla \alpha$ ). Dá sa ukázať, že anizotrópnu rýchlosť toku magnónov možno vyjadriť v tvare

$$v_{\rm s}^{\rm i} = \frac{\hbar}{m_{\rm ij}} \nabla_{\rm j} \alpha , \qquad (11.14)$$

റ	n	-
2	ч	n
~	υ	$\sim$



Obr. 11.12: Schématické znázornenie experimentu simulujúceho vytvorenie horizontu udalostí na spinovo precesujúcich vlnách generovaných na rozhraní medzi precesujúcou a stacionárnou doménou v supratekutom <sup>3</sup>He-B a experimentálne meraná závislosť frekvencie prijímaných spinovo precesujúcich vĺn ako funkcie fázového rozdielu medzi excitačnými napätiami generujúcimi homogénne precesujúce domény.

kde  $m_{ij}$  predstavuje anizotrópnu hmotnosť magnónov, ktorá je omnoho menšia ako hmotnosť atómov <sup>3</sup>He,  $m_3$ . Je zrejmé, že zväčšovaním fázového rozdielu narastá rýchlosť toku magnónov.

Vyššie opísaný experiment bol realizovaný v košickom laboratóriu fyziky veľmi nízkych teplôt [17]. Pre ilustráciu získaných výsledkov, na obrázku 11.12 je znázornená závislosť frekvencie spinovo precesujúcich vln ako funkcia rozdielu fáz medzi excitačnými signálmi homogénne precesujúcich domén. Z obrázku je zrejmé, že frekvencia prijímaných spinovo precesujúcich vĺn je funkciou  $\nabla_{i} \alpha$  a v zmysle výrazu (11.14) aj rýchlosti toku magnónov. Či ide o analóg Dopplerovho efektu na spinovo precesujúcich vlnách unášaných supratokom magnónov nie je zatiaľ isté, pretože nameraný efekt je možno vysvetliť aj inými fyzikálnymi mechanizmami, napríklad zmenou tuhosti doménovej steny. Avšak samotná pozorovaná závislosť je sľubným predpokladom a stimulom pre realizáciu ďalších experimentov.

Záverom tejto kapitoly je potrebné poznamenať, že v poslednej

dobe sa mnohé, najmä europske laboratória fyziky veľmi nízkych teplôt orientujú na výskum a štúdium rôznych ďalších analógií kozmologických javov, študovaných vo fyzike kvantového vákua pomocou supratekutých fáz hélia-3 (pozri napríklad [19, 20]). Tieto fázy pri ultranízkych teplotách predstavujú najčistejšie fyzikálne systémy, ku ktorým má ľudstvo prístup.

### 11.5 Literatúra

- [1] G. E. Volovik, Exotic properties of superfluid  ${}^{3}$ He, World Scientific (1992).
- [2] G. E. Volovik, Universe in Helium-3 Droplet, Oxford University Press (2003).
- [3] T. W. B. Kibble, J. Phys. A 9, 1387 (1976).
- [4] W. H. Zurek, Nature **317**, 505 (1985).

- [5] W. H. Zurek, Phys. Rep. 276, 177 (1996).
- [6] C. Bauerle, Yu. M. Bunkov, S. N. Fisher, H. Godfrin and G. R. Pickettt, *Nature* 382, 332 (1996).
- [7] C. Bauerle, Yu. M. Bunkov, S. N. Fisher, H. Godfrin and G. R. Pickettt, J. Low Temp. Phys. 110, 112 (1998).
- [8] V. M. H. Ruutu, V. B. Eltsov, A. J. Gill, T. W. B. Kibble, M. Krusius, Yu. G. Makhlin, B. Placais, G. E. Volovik, Wen Xu, Nature 382, 334 (1996).
- [9] A.P. Finne, S. Boldarev, V.B. Eltsov, M. Krusius, J. Low Temp. Phys. 135, 479 (2004).
- [10] P.C. Hendry, N.S. Lawson, R.A.M. Lee, P.V.E. McClintock and C.H.D. Williams, Nature 368, 315 (1994).
- [11] M. E. Dodd et al., Phys. Rev. Lett. 81, 3703 (1998).
- [12] V. B. Efimov, O. J. Griffiths, P. C. Hendry, G. V. Kolmakov, P. V. E. McClintock, and L. Skrbek, *Phys. Rev. E* 74, 056305 (2006).
- [13] W. G. Unruh, Phys. Rev. D 14 870 (1976).
- [14] T. W. B. Kibble, J. Phys. A 9, 1387 (1976).
- [15] W. H. Zurek, Nature **317**, 505 (1985).
- [16] R. Schuetzhold, W. Unruh, Phys. Rev. D 66 044019 (2002).
- [17] M. Človečko et al., Journal of Physics: Conference Series 150 032016 (2009).
- [18] E. Gažo et al., Phys. Rev. Lett. 91 055301 (2003).
- [19] D. I. Bradley et al., Nature Physics 4 46 (2008).
- [20] M. Človečko et al., Phys. Rev. Lett. 100 155301 (2008).

# 12 Supratekutost barevných kvarků

J. Hošek

### 12.1 Základní pojmy

Před dávnými lety jeden náš vážený kolega (Démokritos, 400 př. n.l.) spekuloval: "konvence je, že věci jsou barevné, konvence je, že jsou sladké, hořké, ...; ve skutečnosti jsou jen atomy a prostor." Dnes se nabízí přiléhavá parafráze: konvence je, že věci jsou z atomů, konvence je, že v atomech jsou jádra, ...; ve skutečnosti jsou jen barvy, vůně a prostor." Pod barvami a vůněmi máme samozřejmě na mysli kvantová čísla současného **standardního modelu elementárních částic**.

Předpokládáme, že každý student fyziky ví, že nukleony jsou složeny z kvarků, které nesou poetická kvantová čísla vůně a barva. Pro naše účely nyní uvedené a další příbuzné pojmy řádně, byť stručně, zavedeme. Naším cílem bude totiž odpovědět na dětsky zvídavou otázku: *Jak se chová hmota při velkém stlačení?* Reálně budeme mít na mysli stlačení nukleonů uvnitř neutronové hvězdy díky gravitaci. V duchu nejlepších tradic teoretické fyziky poskytneme odpověď v rámci rozumných aproximací, modelů, které umožní semikvantitativní popis systému a přitom nezmění generické vlastnosti reality. Reálně totiž zanedbáme **elektromagnetické a slabé interakce** mezi kvarky v nukleonech ve srovnání s tzv. **silnými interakcemi**, které drží kvarky v nukleonech pohromadě<sup>1</sup>.

V přírodě existuje (je zatím pozorováno) šest typů kvarků, elementárních fermionů se spinem 1/2, které se liší "vůněmi": u(up), d(down), s(strange), c(charm), b(bottom), t(top). Pro naše potřeby, jak dále uvi-

s (strange), c (charm), b (bottom), t (cop). FTO hase potteby, jak date dridíme, dokonale postačí omezit se na tři nejlehčí vůně u (up), d (down), s (strange) s hmotami  $m_{\rm u} \sim 5$  MeV,  $m_{\rm d} \sim 8$  MeV,  $m_{\rm s} \sim 150$  MeV. V takovém případě budeme popisovat kvarkové kvantové pole symbolem  $\psi_{f\alpha}(x)$ , f = u, d, s. Kvarky u, c, t nesou elektrický náboj Q = 2/3, kvarky d, s, b nesou elektrický náboj Q = -1/3. Podobnost s popisem starého známého elektronového kvantového pole  $\psi_{\sigma}(x)$  (viz vztah (1.8) v úvodní kapitole) není náhodná. Rozdíly je však dobré si přesně uvědomit.

Pokud je svět elementárních částic relativistický, neinteragující fermionová pole v něm splňují Diracovu rovnici

$$[i(\gamma_{\mu})_{\alpha\beta}\partial^{\mu} - m]\psi_{\beta}(x) = 0. \qquad (12.1)$$

Systémy řízené Schrödingerovou rovnicí, jimž jsou skripta především věnována, jsou tak vlastně popisovány v nerelativistické *aproximaci*. Matice  $\gamma$  rozměru 4 × 4 v (12.1) jsou zobecněním spinových Pauliho matic a index  $\alpha$  popisuje čtyři stavy fermionového pole se spinem 1/2 s kladnou energií, zahrnující *antičástice*; m je hmota fermionu. Matematicky se funkce  $\psi_{\alpha}(x)$  transformuje jako bispinor vůči

 $<sup>^1{\</sup>rm O}$ tom, jaké interakce zanedbáváme, je možné se dočíst v učebnici [1].

Lorentzově transformaci. Přítomnost prvních prostorových derivací spolu s první časovou derivací vyjadřuje intuitivně zřejmým způsobem požadavek relativistické invariance<sup>2</sup>.

Pojem kvarků navrhli v roce 1964 nezávisle Gell-Mann a Zweig, aby vnesli řád do stále se rozrůstající rodiny hadronů – částic, charakterizovaných interakcemi, kterým se tehdy říkalo silné. Předpokládali, že baryony (hadrony s polocelým spinem), např. proton (P), neutron (N),  $\Delta$  (baryony se spinem 3/2) jsou kvantověmechanicky složeny ze tří kvarků ( $P \sim uud$ ,  $N \sim udd$ ) a mezony (hadrony s celočíselným spinem), např.  $\pi$  mezon (pseudoskalár (spin nula)) a  $\rho$  mezon (polární vektor (spin 1)) jsou složeny z kvarků a antikvarků ( $\pi^+ \sim \bar{u}d, \rho^+ \sim ud$ ). Klasifikační schéma (kvarkový model), které se zrodilo, slavilo mnoho úspěchů a iniciovalo mnoho nových experimentů. Úspěchy kvarkového modelu vyvolaly také mnoho "povinných" otázek. Explicitně jich zmíníme pět:

(1) Jak uvést kvarkový model do souladu s Pauliho principem? Podle základních kvantově mechanických představ by měl být experimentálně pozorovaný baryon se spinem 3/2,  $\Delta_{3/2}^{++}$ , tvořen třemi kvarky u s paralelními spiny (symetrická spinová vlnová funkce) v s-stavu (symetrická prostorová vlnová funkce). Posvátný Pauliho princip však takovou možnost nepřipouští. Nabízí se na kvark každé vůně "navěsit" nové kvantové číslo, index i = 1, 2, 3 a psát  $\Delta_{3/2}^{++} \sim \epsilon_{ijk} u^i(\uparrow) u^j(\uparrow) u^k(\uparrow)$ . Symbol  $\epsilon_{ijk}$  je invariantní, úplně antisymetrický tenzor grupy SU(3). Pokud se předpoklad ověří (stalo se, viz dále), budeme říkat, že každý kvark každé vůně existuje ve třech barevných podobách (můžeme např. zavést pojmenování 1=červená, 2=zelená, 3=žlutá).

Matematicky to znamená, že kvarkové pole se transformuje vůči tomuto indexu jako triplet 3 grupy  $SU(3)_c$  (c - color). Triplet je fundamentální reprezentace grupy, antikvarková pole se transformují jako antitriplet  $\bar{3}$ . Grupa je neabelovská (nekomutativní). V těchto slovech není žádná mystika. Grupa SU(3) je grupa unitárních unimodulárních matic rozměru  $3 \times 3$ . Má osm generátorů, takže např. kvarkový triplet se transformuje vůči infinitesimální SU(3) jako

$$\psi^i \to \psi^{i'} = \left(1 + i\alpha_a \frac{1}{2} (\lambda_a)_j^i \psi_j\right) \,. \tag{12.2}$$

Matice  $\frac{1}{2}\lambda_a$  jsou generátory grupy SU(3) ve fundamentální reprezentaci a  $\alpha_a$  je osm libovolných konstantních reálných parametrů. Podobnost s grupou SU(2), kterou známe, není náhodná, ale má své meze.

Tím se stalo, že na kvarkovém fermionovém operátoru "visí" tři indexy:  $\psi_{f\alpha}^i(x)$ . Index *i* je barevný, index *f* je voňavý a lorenzovský index  $\alpha$  je fakticky spinový. Rafinovanost konstrukce spočívá v tom, že hadrony jsou "bezbarvé" (ale voňavé). Znamená to, že se vůči barevné grupě  $SU(3)_c$  všechny hadrony transformují jako její singlety, tj. jsou invariantní. Baryony mají generickou strukturu  $B \sim \epsilon_{ijk}q^iq^jq^k$ , mesony  $M \sim \bar{q}_iq^i$  a žádný barevný index na nich "nevisí".

Grupa $SU(3)_{\rm c}$ má nekonečně mnoho reprezentací, které je všechny možné zkonstruovat vektorovým násobením rostoucího počtu "fundamentálních" reprezentací 3

 $<sup>^2 \</sup>mathrm{Do}$ nejmenších detailů jsou relativistická kvantová mechanika a teorie pole presentovány v[2].

a jí komplexně sdružených ( $\bar{3}$ ). V dalším budeme potřebovat vědět, že  $3 \times \bar{3} = 1_a + 8_s$ a  $3 \times 3 = \bar{3}_a + 6_s$ . Indexy a, s označují, která reprezentace v součinu reprezentací je symetrická s a která antisymetrická a (každou čtvercovou matici je možné rozložit na součet symetrické a antisymetrické matice). Na tyto algebraické vztahy bude dobré si vzpomenout, až budeme uvažovat Cooperovo párování barevných kvarků: **Cooperův pár barevných kvarků nemůže být bezbarvý !** 

(2) Je kvantové číslo barva měřitelné? Nepochybně. Uvedeme zatím pouze jeden příklad. Podle představ kvarkového modelu se  $\pi^0 \sim (\bar{u}u - \bar{d}d)$  mezon musí rozpadat na dvě gama (připomínáme, že kvarky, z nichž je složen, jsou elektricky nabité). Rozpadovou šířku není těžké ve standardním modelu spočítat. Soulad s experimentem získáme teprve tehdy, budeme-li předpokládat, že kvarky existují ve třech barevných podobách.

(3) Jsou barevné kvarky uvnitř hadronů viděť? Nepochybně. Uvedeme zatím pouze jeden příklad. V sérii slavných experimentů jsou v hluboce nepružných (velká předávaná hybnost, tj. malé vzdálenosti) inkluzivních ( $e+P \rightarrow e+cokoliv$ ) srážkách elektronů s protony "vidí" virtuální fotony uvnitř protonů kvarky s jejich spinem, elektrickým nábojem i barvou jako prakticky neinteragující, volné, elementární fermiony. Experimentální výsledek, že čím jsou kvarky blíže u sebe, tím slaběji mezi sebou interagují, však rozhodně není jednoduché přijmout.

(4) Jsou barevné kvarky reálné? Přijde na to. Rozhodně ne jako elektrony. Přes veškeré úsilí se ani největšími dostupnými energiemi doposud jednotlivé barevné kvarky z hadronů vyrazit nepodařilo. Ve srážkách vždy vznikají bezbarvé hadrony a v závislosti na energii jich mohou být tisíce. Vznikla představa (říká se jí uvěznění či konfinement barvy), že čím jsou barevné kvarky od sebe dál, tím větší síla mezi nimi působí. Protože se ale mohou spontánně rodit z vakua v párech, je možné snadno silnou interakci odstínit tvorbou nových bezbarvých hadronů.

(5) Jaké interakce drží barevné kvarky a antikvarky v hadronech pohromadě? To je moc dobrá otázka. Jak ukazují experimenty, měly by slábnout a logaritmicky vymizet na malých vzdálenostech a být silné na vzdálenostech velkých do té míry, že ionizace kvarků není možná. Takové silné interakce existují a jmenují se **kvantová chromodynamika (QCD)** (Nobelova cena 2004 [3, 4]). Autor této kapitoly chápe zavedení QCD do částicové fyziky jako triumf teorie. Původně fenomenologické, "kinematické" kvantové číslo "barva" dostalo aplikací obecného *principu kalibrační invariance* [5] klíčovou dynamickou roli.

Tento princip leží v základech současné teorie všech interakcí: elektromagnetických, slabých, gravitačních i silných (všechny interakce kromě silných budeme ovšem v dalším zanedbávat). Ideu konstrukce QCD nyní krátce popíšeme<sup>3</sup>.

Budeme nejprve *požadovat* invarianci teorie vůči tranformaci barevných indexů kvarkových polí (12.1) nezávisle ve všech bodech prostoročasu, t.j. budeme považovat osm reálných grupových parametrů  $\alpha_a$  za prostoročasově závislé:  $\alpha_a = \alpha_a(x)$ . Takový předpoklad však okamžitě zruinuje invarianci Diracovy rovnice (12.1), v níž

 $<sup>^{3}</sup>$ Kalibrační kvantová teorie elementárních částic je pedagogicky dokonale prezentována v knize [6].

se objeví neinvariantní člen

$$\partial^{\mu} \alpha_{\mathbf{a}}(x)$$
 . (12.3)

Záchrana invariance spočívá v postulování existence nových, tzv. kalibračních (někdy se říká "kompenzujících") polí  $A^{\mu}_{a}(x)$ , která do teorie vstoupí nahrazením obyčejné derivace v Diracově rovnici (12.1) *derivací kovariantní*:

$$\partial^{\mu} \to D^{\mu} = \partial^{\mu} - ig \frac{1}{2} \lambda_{a} A^{\mu}_{a}(x)$$
 (12.4)

Dynamická pole  $A^{\mu}_{a}(x)$  ve svých transformačních vztazích (tvoří oktet grupy) obsahují člen (12.3) v takovém tvaru (všechny derivace jsou kovariantní), že celkové pohybové rovnice jsou vůči kalibrační transformaci  $SU(3)_{c}$  (s prostoročasově závislými parametry) invariantní. Pro úplnost tento důležitý vztah pro infinitesimální transformaci uvedeme:

$$A^{\mu}_{\rm a}(x) \to A^{\mu}_{\rm a}(x) - f_{abc}\lambda_b A^{\mu}_{\rm c}(x) + \frac{1}{g}\partial^{\mu}\lambda_a \ . \tag{12.5}$$

V rovnici (12.5) symbol  $f_{abc}$  představuje generátory grupy v oktetní reprezentaci a symbol g je teoreticky libovolná bezrozměrná vazbová konstanta. Princip kalibrační invariance jednoznačně fixuje dynamiku, zadáme-li prostou kalibrační grupu (její algebra se nerozpadá na komutující podalgebry) a částicový obsah teorie.

**Každý** čtenář by si měl na tomto místě uvědomit, že právě popsaná konstrukce vede k zavedení starých známých fotonů jako kvant elektromagnetického vektorového potenciálu  $A^{\mu}(x)$ , interagujících s elektricky nabitými částicemi (poli). V případě elektrodynamiky je kalibrovanou symetrií abelovská grupa U(1) (žádný tenzor f), vyjadřující zachování elektrického náboje e, hrající roli teoreticky libovolné vazbové konstanty této kalibrační symetrie. Elektricky nabitá pole specifikují částicový obsah teorie.

Je dobré vědět, že hmotový (m je parametr s rozměrem hmoty) člen bosonového pole  $\Phi$  se spinem nula má v Lorentz-invariantním hamiltoniánu tvar

$$m^2 \Phi \Phi$$
 . (12.6)

Spinový a grupový index generický tvar hmotového členu bosonů nemůže změnit, takže hmotový člen kalibračních polí $A^\mu_{\rm a}$ musí mít tvar

$$-m^2 A^{\mu}_{a} A^{a\mu} \tag{12.7}$$

Takový člen ale není invariantní vůči kalibrační transformaci (12.5), ani v případě elektromagnetického pole! Říkáme, že kalibrační invariance chrání nehmotnost kalibračního pole. Budeme si pamatovat, že samotná kalibrační invariance však negarantuje nehmotnost kvant, častic kalibračního pole. Nehmotné vektorové pole může popisovat hmotnou částici se spinem jedna. Pro nehmotnost či hmotnost kalibračních částic je klíčová invariance či neinvariance základního stavu teorie. Tvrzení, v literatuře časté, že nehmotnost fotonu je důsledkem kalibrační invariance, není správné. Hmotový člen diracovského fermionového pole má tvar

$$m\bar{\psi}\psi \equiv m\bar{\psi}_{\rm L}\psi_{\rm R} + m\bar{\psi}_{\rm R}\psi_{\rm L} , \qquad (12.8)$$

kde diracovsky sdružený bispinor je definován vztahem  $\bar{\psi} = \psi^+ \gamma_0$  (tranformuje se kovariantně vůči Lorentzově tranformaci) a  $\psi_{L,R} \equiv \frac{1}{2}(1 \mp \gamma_5)\psi$ . Na místě je fyzikální otázka: Existuje, stejně jako v případě vektorových polí, symetrie, která garantuje nehmotnost fermionových polí? Existuje, jmenuje se *chirální symetrie* a je v částicové fyzice velmi důležitá. To není těžké pochopit, když si uvědomíme, že hmoty fermionů mohou být mnohem menší než všechny ostatní energetické škály v problému.

Chirální symetrii osvětlíme na případu jednoho typu fermionu, t.j. na abelovské symetrii  $U(1)_{\rm L} \times U(1)_{\rm R}$ (zobecnění na neabelovské symetrie je opravdu přímočaré). Uvažujme transformaci fermionového pole

$$\psi_{\rm L} \to \exp i\alpha\psi_{\rm L} \simeq (1+i\alpha)\psi_{\rm L} , \qquad (12.9)$$

$$\psi_{\rm R} \to \exp i\beta\psi_{\rm R} \simeq (1+i\beta)\psi_{\rm R}$$
 . (12.10)

Pro  $\alpha \neq \beta$  evidentně hmotový člen (12.8) není invariantní vůči chirální transformaci (12.10). Říkáme, že chirální invariance chrání nehmotnost fermionového pole. Absence hmotového členu ani v případě fermionových polí neznamená automaticky nehmotnost odpovídajících částic, fermionů.

Pro úplnost a bez dalších komentářů dodejme, že v současné době je experimentálně doloženým faktem sjednocení elektromagnetických interakcí se slabými v rámci kalibrační chirální grupy  $SU(2)_{\rm L} \times U(1)_{\rm Y}$  (Nobelovy ceny 1979, 1984, 1999). Úspěšnost konceptu je v tomto případě doložena existencí čtyř kalibračních polí a jejich částic:  $A_{\mu}(x)$  (foton),  $W^{\pm}_{\mu}(x)$  (elektricky nabité intermediální bosony) a  $Z_{\mu}$ (neutrální intermediální boson) s vlastnostmi diktovanými kalibračním principem. Neuškodí vědět, že jak intermediální bosony ( $m_{\rm W} \simeq 80$  GeV,  $m_Z \simeq 90$  GeV) tak hmotné leptony a kvarky jsou popisovány nehmotnými poli. Protože elektroslabá grupa není prostá, jsou elektroslabé interakce charakterizovány dvěma vazbovými konstantami g, g'. Elektroslabé interakce máme právo v rozumné aproximaci v našem kontextu zanedbat, protože obě jejich vazbové konstanty jsou číselně podobné konstantě jemné struktury

$$\alpha(q^2 = 0) \equiv e^2/4\pi = 1/137 , \qquad (12.11)$$

podstatně menší než odpovídající síla interakce v QCD. V textu o experimentálních projevech uspořádaných fází kvarkové hmoty se o elektroslabě interagujících částicích, elektronech a neutrinech, budeme muset  $\text{zmínit}^4$ .

V případě QCD vede naznačená konstrukce k postulování existence osmi nových vektorových polí, jejichž kvanty jsou nehmotné bosony se spinem jedna, zvané gluony. Důsledkem neabelovosti grupy  $SU(3)_c$  je, že barevné gluony samy se sebou (na

 $<sup>^{4}</sup>$ Vše potřebné o soudobé teorii elektroslabých interakcí lze najít v knize [1].

rozdíl od fotonů, které elektrický náboj nenesou) předepsaným způsobem interagují. Geniální je konstrukce proto, že gluony s teoreticky odvozenými vlastnostmi existují ve stejném smyslu jako barevné kvarky. Kvantové číslo barva má tudíž mnoho nových dynamických, experimentálně prověřitelných manifestací. Dobrý fyzikální smysl (i formální definici) mají i pojmy chromoelektrické  $E_{\rm a}(x)$  a chromomagnetické  $H_{\rm a}(x)$  pole, vyjádřená pomocí  $A_{\rm a}^{\mu}(x)$ .

(i) Ve shodě s experimentálními daty silné interakce mezi kvarky a gluony zprostředkované výměnami gluonů se zmenšujícími se vzdálenostmi (zvětšujícími se předávanými hybnostmi) logaritmicky slábnou. Říkáme, že QCD je asymptoticky volná. Tento unikátní jev je detailně popsán poruchovou teorií a je důsledkem interakcí gluonů samých se sebou<sup>5</sup>. Pro nás je důležité, že  $g^2(q^2 = m_Z^2) \simeq 0.12 \gg e^2(q^2 = m_Z^2)$ .

(ii) Na velkých vzdálenostech poruchová teorie ztrácí smysl (vazbová konstanta je velká, řádu jedna) a QCD je jediná kvantová teorie pole, o níž má smysl předpokládat, že má vlastnost konfinementu, či uvěznění barvy. Excitacemi QCD na velkých vzdálenostech jsou bezbarvé hadrony, systémy složené z bezbarvých kombinací barevných kvarků a barevných gluonů, o nichž se experimentálně ví, že mají konečný rozměr řádu  $10^{-13}$  cm. Tato hypotéza však pro QCD zatím te-



Obr. 12.1: Fázový diagram QCD.

oreticky dokázána není (na její důkaz je vypsána odměna  $10^6$  dolarů). Je na místě zdůraznit, že problém je akutní, protože pro pochopení světa kolem nás není možné QCD nikdy zanedbat, viz fázový diagram QCD na obr. 12.1. Gluony dostaly své jméno od slova lepidlo (angl. *glue*), protože lepí kvarky (a gluony) do hadronů.

Čtenář fyziky kvantových kapalin by měl v tomto okamžiku zpozornět. V duchu nejlepších tradic teoretické fyziky jsme povinni, pokud je mikroskopické chápání mnohočásticového (kvantově polního) problému konfinementu příliš složité, přijít s popisem fenomenologickým. Poučnou lekcí je v tomto ohledu dlouhý vývoj v chápání a popisu supravodivosti, detailně popsaný v kapitole 13 o základech supravodivosti. Fyzikální podstata problému konfinementu barvy je totiž dosti názorná. Hledáme médium (fyzikální základní stav, či vakuum QCD), které do sebe nepouští chromoelektrické pole, jehož jsou barevné kvarky a barevné gluony zdroji.

 $<sup>^5</sup>$ Kvantová elektrodynamika, v níž fotony samy se sebou neinteragují, má opačnou vlastnost, rovněž ve shodě s experimentálními daty: elektrodynamické interakce mezi nabitými částicemi se zmenšujícími se vzdálenostmi rostou.

Chceme, aby výsledkem bylo to, co pozorujeme: Hadrony jsou bubliny konečného rozměru či "bagy" v takovém médiu. Uvnitř hadronů žijí kvanta (kvarky a gluony) jako asymptoticky volné (na velmi malých vzdálenostech prakticky neinteragující). Konfinující médium je (podle předpokladu o správnosti QCD) zatím neznámým způsobem vytvořeno klasickým gluonovým polem (nic jiného nemáme k dispozici). Hmoty hadronů, kromě pionů typicky řádu GeV, by měly být v takovém rámci dány celkovou energií polí v bublině.

Dobrá otázka pro čtenáře skript je, vědí-li o existenci fyzikálního mnohočásticového systému, který by vykazoval vlastnost konfinementu nějakého (jakéhokoliv) náboje. Mohli by. **Supravodič je konfinující médium magnetických monopó**lů<sup>6</sup>. Je to proto, že supravodič (prvního druhu) je ideální diamagnet, t.j. existuje Meissnerův jev (viz kapitola 13). Není pochyb o tom (a řešením GL rovnic je možné se o tom přesvědčit [7]), že magnetické pole monopól-antimonopólového páru, umístěného do supravodiče, nebude díky Meissnerovu jevu dipólové. Rozruší GL kondenzát v konečném objemu ve tvaru okurky a vytvoří "mezonový bag", v němž je magnetické pole uvězněno. Na základě této krásné fyzikální analogie říkáme, že **vakuum QCD je duální barevný supravodič**, t.j. médium, které do sebe nepouští chromoelektrické pole. Zatímco dnes víme, že základní stav supravodiče je kondenzát Cooperových párů elektronů, popsaný ve fenomenologické teorii GL skalárním, dvojnásobně elektricky nabitým parametrem uspořádání, podstata konfinujícího média QCD zůstává neznámá<sup>7</sup>.

### 12.2 Fázový diagram QCD

Pro lepší intuitivní pochopení mnoha tváří QCD [8] (na kvantitativní pochopení na tomto místě nepretendujeme) je užitečné projít se krátce podél os jejího fázového diagramu z obr. 12.1. Ve světě elementárních částic je (kvůli podstatnému zjednodušení teoretických výrazů) přijato pracovat v takové jednotkové soustavě, kde klademe  $\hbar = c = k_{\rm B} = 1$ . Energii, hmotu, teplotu a chemický potenciál měříme v MeV, vzdálenost pak v (MeV)<sup>-1</sup>. Užitečné je pamatovat si převodní vztah 1 fm =  $10^{-13}$  cm  $\simeq (200 \text{ MeV})^{-1}$ .

Vertikální osu teplot (T) je přirozené chápat jako osu kosmologickou. Při nulové baryonové hustotě (stejný počet baryonů a antibaryonů) je zapotřebí znát spektrum QCD. Jak už víme, je to v rámci QCD teoreticky nevyřešený problém. Experimentálně je však velmi dobře prozkoumaný. Při nejnižších teplotách se tepelně mohou excitovat pouze nejlehčí hadrony, což jsou evidentně piony ( $m_{\pi} \sim 140$  MeV). O nich bezpečně víme, že interagují mezi sebou slabě, takže popis chování pionového plynu při velmi nízkých teplotách je teoreticky důvěryhodný. Se zvyšující se teplotou se

 $<sup>^{6}</sup>$ Úvaha předpokládá, že čtenáři vědí, že Dirac, ve snaze pochopit kvantování elektrického náboje, postuloval existenci magnetických monopólů. Tím se Maxwellovy rovnice staly symetrickými vůči záměně elektrického a magnetického pole. Pro úplnost je poctivé dodat, že magnetické monopóly zatím prokazatelnč objeveny nebyly.

 $<sup>^7\</sup>mathrm{Problematika}$  konfinementu je tak složitá, že od roku narození QCD v ní nebylo nalezeno konsensu. Kvalitativní fyzikální obraz konfinementu, který jsme nastínili, je zatím rozptýlen v časopiseckých článcích a je pro čtenáře těžko uchopitelný.

systém mění v silně interagující (a tudíž teoreticky těžko popsatelný) hadronový plyn. Intuitivně průhledná představa je, že hadronové bubliny se postupně začínají překrývat, až při teplotě  $T_c \simeq 170$  MeV, aniž dojde k ostrému fázovému přechodu, se systém změní v úplně dekonfinovaný, silně interagující (teoreticky těžko popsatelný) systém nejrůznějších barevných excitací. Experimentálně je to situace podobná té, kterou pozorujeme v ultrarelativistických srážkách těžkých iontů. Důvěryhodnost fyzikální představy je podepřena numerickými simulacemi tohoto režimu QCD na prostoročasové mřížce. Při asymptoticky vysokých teplotách, ve shodě s asymptotickou volností QCD se systém změní v slabě interagující quarkgluonovou plazmu. Takový systém není těžké teoreticky popsat a popis je vhodný pro pochopení prvních okamžiků po vzniku vesmíru. Fyzikou podél kosmologické osy se však ve skriptech zabývat nebudeme.

Horizontální osu baryonových hustot  $(n_{\rm B})$  je přirozené chápat jako osu astrofyzikální. Uvažujeme systémy nekonečně mnoha částic, obecně charakterizované nenulovým rozdílem hustoty baryonů a antibaryonů (v nerelativistických systémech se antibaryony nerodí). Fermionová hustota není lorentzovsky invariantní pojem. Víme, že hustota Diracova pole  $\psi^+(x)\psi(x) \equiv \bar{\psi}(x)\gamma^0\psi$  se transformuje jako nultá komponenta čtyřproudu  $\bar{\psi}(x)\gamma^{\alpha}\psi(x)$ . Je proto přirozené popisovat relativistický systém baryonů s konečnou hustotou členem v hamiltoniánu, obsahujícím **chemický potenciál**  $\mu$  ve tvaru  $\mu \bar{\psi} \gamma^0 \psi$ .

Najít základní stav (T = 0) a termodynamické chování při nízkých teplotách interagujícího mnohočásticového systému s danou baryonovou hustotou je rozhodně jednodušší problém, než jakým je nalezení základního stavu QCD. Je to program, který nesporně patří do těchto skript. Problém se systémy, o kterých bude nadále řeč, je však naprostý nedostatek přímých experimentálních dat. Jak naznačuje obrázek, mnohofermionové systémy s nenulovou baryonovou hustotou by měly (mohly), na základě 'zdravého rozumu', existovat v neutronových hvězdách. Je zřejmé, že s neutronovými hvězdami se experimentální fyzika nízkých teplot provozuje těžko.

Problematika, kterou budeme dále krátce a kvalitativně diskutovat, je zatím dostupná v těžko čitelných originálních článcích a více či méně specializovaných přehledových článcích. Zapáleným čtenářům doporučujeme následující: (1) V "Bibli QCD" [8] je jedna kapitola s charakteristickým názvem "The Condensed Matter of QCD". Je k mání i na preprintovém serveru jako [9]. (2) V detailní expozici ("NJL model analysis of quark matter at large density")[10] jsou k nalezení i základy QCD. (3) Supratekutost jaderné a neutronové hmoty je souhrnně popsána v [11]. (4) Nejnovější, velmi kvalitní a podrobný je přehledový článek "Color superconductivity in dense quark matter" [12], obsahující rovněž přehled možných experimentálních projevů.

### 12.2.1 Jaderná hmota

Netriviální fyzika začíná na ose chemického potenciálu za rozumných předpokladů při hustotě jaderné hmoty,  $n_{\rm B} \sim 0.16 \ {\rm fm}^{-3}$ , číselně podobné baryonové hustotě konečných jader. Uvážíme-li, že vazbová energie nukleonu v jaderné hmotě je typicky  $E_{\rm n} \simeq 15 \ {\rm MeV}$  a nukleon je složen ze tří kvarků, je baryonový chemický potenciál  $\mu_{\rm n} = m_{\rm n} - E_{\rm n}$ , takže kvarkový chemický potenciál, uvedený na obr. 12.1, odpo-

vídající homogenní jaderné hmotě, je skutečně  $\mu = \mu_n/3 \simeq 310$  MeV. Z jaderné fyziky víme, že relativistické efekty nejsou velké a že v dobré aproximaci vystačíme s popisem nukleonů stejným nerelativistickým fermionovým Schrodingerovým polem  $\psi$ , jakým jsme popisovali elektrony v supravodiči, atomy hélia v supratekutém <sup>3</sup>He či fermionové atomy v řídkých fermionových plynech.

Jediný rozdíl je, že nukleon je fermion, charakterizovaný dvěma indexy:  $\psi_{\alpha a}(x)$ .  $\alpha$  je známý index spinu (S), zatímco a = 1, 2 je index *izospinu* (T), odlišující obecně proton od neutronu. V naší aproximaci (vypnuté elektromagnetické a slabé interakce) je izospinová symetrie SU(2) přesná. Jak už dobře víme, tvar základního stavu uvažovaného mnohočásticového systému, a tudíž i jeho nízkoteplotní chování, budou záviset na charakteru interakce mezi nukleony. Nukleon-nukleonový potenciál je ze studia atomových jader dobře znám, navíc lze při nízkých teplotách očekávat, že se systém bude genericky chovat podle pravidel Ladauovy teorie Fermiho kapalin (viz kapitola 3 o vlastnostech normálního kapalného <sup>3</sup>He). V každém případě je na místě předpokládat, že hamiltonián je spinově, izospinově a rotačně invariantní.

Ne tak základní stav. Dobře víme (viz kapitola 13 o základech supravodivosti), že v případě libovolně slabé přitažlivé interakce mezi nukleony na Fermiho ploše s opačnými hybnostmi dojde ke Cooperově nestabilitě a spontánní tvorbě Cooperových párů. Můžeme proto obecně klasifikovat možné supratekuté fáze uniformní nukleonové hmoty (spin-orbitální vazba je rovna nule) ve shodě s Pauliho principem kondenzáty s následujícími vlastnostmi:

(1) ProS=0,T=0 (antisymetrické spinové a izospinové vlnové funkce  $\psi^+_{\alpha a}(\sigma_2)_{\alpha \alpha'}(\tau_2)_{aa'}\psi^+_{\alpha' a'})$  a proS=1,T=1 (symetrické spinové a izospinové vlnové funkce  $\psi^+_{\alpha a}(\sigma_2\sigma_i)_{\alpha \alpha'}(\tau_2\tau_I)_{aa'}\psi^+_{\alpha' a'})$  je třeba uvažovat liché orbitální momenty,  $L=1,3,\ldots$ 

(2) ProS=0,T=1 a S=1,T=0 je spin-izospinová vlnová funkce antisymetrická a  $L=0,2,\ldots$ 

Z formálního hlediska se tedy systém velmi podobá už popsaným supratekutým mnohofermionovým systémům, jen je zapotřebí příslušně přeškálovat energetickou mezeru ve vybrané fázi. Explicitní výpočty toto očekávání samozřejmě potvrzují. Nejnovější výpočet [13], popisující realistickou interakci mezi relativistickými nukleony výměnami silně interagujících mezonů potvrzuje nerelativistické výsledky, že by se měla realizovat při jaderných hustotách nejjednodušší supratekutá fáze, v níž dochází k párování protonu a neutronu (T = 0) na spin S = 1 s momentem hybnosti L = 0. Hodnota energetické mezery a kritické teploty je v tomto případě řádu  $\Delta, T_c \sim \text{MeV}.$ 

#### 12.2.2 Silně interagující mnohokvarkový systém (nonCFL)

Zvyšováním baryonové hustoty (viz obr. 12.1) se dostaneme do bodu, kdy se nukleonové bubliny (bagy) začnou překrývat (konfinující médium zmizí) a bezbarvé objekty všeho druhu, které v systému mohly existovat, ztratí svou identitu (začátek fáze nonCFL). Dojde k dekonfinementu. Barevné kvarky a barevné gluony jsou osvobozeny. Systém se začne chovat jako silně interagující relativistický mnohočásticový systém barevných kvarků a barevných gluonů.

Na tomto místě je poctivé zdůraznit, že právě prezentovaný scénář je jen výsledek našich představ o chování QCD v tomto režimu. Není podepřen kvantitativními výpočty (mřížové výpočty vlastností QCD při konečném chemickém potenciálu nejsou z technických důvodů proveditelné) a už vůbec ne experimentálními daty.

Jako už několikrát předtím, opět zdůrazníme, že důvěryhodný teoretický kvantově polní popis silně interagujících systémů neexistuje. Musíme se proto při popisu nízkoteplotního chování silně interagujícího systému barevných kvarků v "nonCFL" oblasti uchýlit k modelům. Je rozumné předpokládat, že k termodynamice systému přispívají pouze lehké u, d kvarky v chirální limitě. Základním objektem našich úvah tedy bude Diracovo pole  $\psi_f^a$ , kde a = 1, 2, 3 je barevný index grupy SU(3) a f = u, d je voňavý index grupy SU(2). Lorentzův index Diracova pole na tomto místě pro jednoduchost nevypisujeme.

Interakci mezi kvarky aproximujeme schématickou efektivní kontaktní čtyřfermionovou interakcí typu NJL (Nambu-Jona-Lasinio), která se osvědčila při fenomenologickém popisu spontánního narušení chirální symetrie QCD ve vakuovém sektoru. Ve skutečnosti je pouhou relativistickou parafrází redukované BCS interakce. Představujeme si, že gluonové stupně volnosti jsou "vyintegrovány" a projevují se pouze nepřímo v rozměrných vazbových konstantách čtyřfermionové interakce. Tím také fixujeme fenomenologické konstanty, mající rozměr hmoty v řádu O(100 MeV). Budeme tedy uvažovat interakci, která je Lorentzův skalár a je invariantní vůči globální symetrii  $SU(3)_c \times SU(2)_L \times SU(2)_R \times U(1)_B$ . Abelovská symetrie je fázová symetrie, odpovídající zachování baryonového náboje. Vyjádřena v termínech kvarkových operátorů, z nichž jsou baryony už popsaným způsobem složeny, reprezentuje invarianci hamiltoniánu vůči fázové transformaci  $q \to \exp^{i\lambda}q$  pro všechna kvarková pole. Stejně jako v nerelativistických mnohofermionových systémech bude tato abelovská symetrie specifickým dikvarkovým kondenzátem v této fázi spontánně narušena a způsobí její supratekutost.

Bouřlivý rozmach problematiky "barevné supravodivosti<sup>8</sup>" se datuje od konce roku 1998, kdy Wilczek [14] (nositel Nobelovy ceny za asymptotickou volnost QCD) a Shuryak se svými spoluautory [15] poukázali na fenomenologickou zajímavost jevů barevné supravodivosti. Čistě teoreticky jsou jev Cooperova párování a vlastnosti interakcí v QCD, k Cooperovu párování vedoucí tak fyzikálně převědčivé, že samotná existence uspořádaných fázi QCD hmoty při nízkých teplotách je mimo jakoukoliv rozumnou pochybnost [16].

S NJL interakcí uvažujeme kvark-kvarkový kondenzát v nejjednodušším tvaru

$$\langle \psi_{f\alpha}^a (C\gamma_5)_{\alpha\beta} \psi_{g\beta}^b \rangle \propto \Delta \epsilon^{ab3} (\sigma_2)_{fg}$$
 (12.12)

Pro lepší chápání tohoto vztahu připomeneme, že Diracův bispinor  $\psi^{\mathcal{C}}$ , nábojově sdružený bispinoru  $\psi$ , je definován vztahem  $\psi^{\mathcal{C}} = C(\bar{\psi})^T$ , kde matice C je číselná

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>S pojmy supravodivost a supratekutost nakládáme v této kapitole velkoryse vzhledem k přiblížením, která činíme. Operační smysl pojmy získají teprve při poctivém započtení kalibračních interakcí. Rozdíl dobře chápeme v případě abelovské kalibrační elektromagnetické interakce. Obecně lze říci, že při zapnutých kalibračních interakcích je v závislosti na vzorci spontánně narušené symetrie třeba uvažovat Meissnerův jev ("zhmotnění" kalibračního pole) v odpovídajících kanálech.

Diracova matice nábojového sdružení. Operátor  $\psi C \gamma_5 \psi = \bar{\psi}^C \gamma_5 \psi$  je tedy opravdu Lorentzův skalár s kladnou vnitřní paritou (přítomnost  $\gamma_5$  neznamená spontánní narušení prostorové inverze, jak by se mohlo na první pohled zdát). Je snadné se přesvědčit, že matice v Lorentzových indexech,  $(C\gamma_5)_{\alpha\beta}$ , je antisymetrická. Že jsou antisymetrické matice ve voňavém prostoru  $((\sigma_2)_{fg})$  a barevném prostoru  $(\epsilon^{ab3})$ , je evidentní. Pauliho princip je tudíž respektován.

Rovnice pro energetickou mezeru má tvar prostého zobecnění rovnice BCS, stejně jako popis systému při konečné teplotě. Číselná řešení pro  $\Delta$  a  $T_c$  řádu O(100 MeV) vysvětlují, proč systém začal být zajímavý fenomenologicky.

Z teoretického hlediska je zajímavé, že Cooperova párování se účastní kvarky pouze dvou barev (a, b = 1, 2). Protože i kvark barvy číslo 3 má své Fermiho moře, může i pro tento typ relativistických fermionů v systému dojít ke Cooperovu párování, např. na spin jedna. Následná spontánní rotační symetrie má pochopitelně za následek existenci specifických NG bosonů.

Protože o interakci mezi kvarky v této části fázového diagramu víme tak málo, o to více je možné teoreticky spekulovat a uvažovat nejrůznější typy Cooperova párování konzistentní s Pauliho principem. Pro zanícené čtenáře je takový program možné považovat za vhodné cvičení. Řešení rozhodně najdou v některém z citovaných přehledových článků.

Závěrem nemůžeme nezmínit možnou existenci fáze zvanou LOFF, uvažovanou dávno i v nerelativistickém světě ([17, 18]: Za určitých podmínek může být energeticky výhodná tvorba Cooperových párů s nenulovou hybností. Výsledkem je "krystalická" forma kvarkové hmoty.

### 12.2.3 Slabě interagující mnohokvarkový systém (CFL)

(1) Při dostatečně velkém kvarkovém chemickém potenciálu  $\mu$  díky asymptotické volnosti  $SU(3)_c \times U(1)_B$  invariantní QCD interakce mezi kvarky a gluony zeslábne a stane se poruchovou a tudíž teorecky dobře popsatelnou. Navíc je dobrým přiblížením hmoty "lehkých" relativistických kvarků zanedbat,  $\mu \gg m_q$  (položit  $m_u = m_d = m_s = 0$ ). Tím, jak už víme, systém získá novou globální,  $SU(3)_V \times SU(3)_A$  chirální symetrii.

O symetrii  $U(1)_{\rm B}$  už jsme se zmínili: vyjadřuje zachování baryonového náboje.

(2) Spontánní narušení chirální symetrie je jev, k němuž nesporně dochází v Lorentz-invariantním vakuu QCD. Jak uvidíme, dochází k němu i v základním stavu QCD s nehmotnými kvarky při nenulovém chemickém potenciálu, byť mechanismus je jiný, než na jaký jsou zasvěcení čtenáři zvyklí v Lorentz-invariantním vakuu QCD. Tam je totiž vakuum charakterizováno *bezbarvým* kondenzátem

$$\langle \psi_L \psi_R \rangle$$
 . (12.13)

Vakuová střední hodnota součinu dvou kvarkových operátorů, která se transformuje jako Lorentzův skalár a charakterizuje supratekutou CFL fázi, má tvar

$$\langle \psi^a_{f\alpha}(C\gamma_5)_{\alpha\beta}\psi^b_{g\beta}\rangle =$$
  
=  $\Delta(\kappa+1)\delta^a_f\delta^b_g + \Delta(\kappa-1)\delta^a_g\delta^b_f = \Delta\epsilon^{abS}\epsilon_{fgS} + \kappa\Delta(\delta^a_f\delta^b_g + \delta^a_g\delta^b_f)$ . (12.14)

Indexy a, b jsou tripletní barevné indexy grupy  $SU(3)_{color}$ , indexy f, g jsou tripletní voňavé grupy  $SU(3)_{flavor}$ . Jejich míchání vypadá sice perverzně, je ale možné a dalo fázi anglický název: *Color-Flavor Locking* (CFL), pro který zatím neexistuje vžitý český ekvivalent. Rozhodně příslušné kondenzáty vedou k nejnižší možné energii základního stavu.

Čistá CFL fáze odpovídá  $\kappa = 0$ . Příměs  $\kappa \neq 0$ , v níž dochází k párování v symetrických reprezentacích, uvádíme pouze pro úplnost. Dobrá otázka je, proč právě kondenzát (12.14). Důvodů je několik. Především, pro zasvěcené je snadné ukázat, že poruchová jednogluonová výměna mezi dvěma barevnými kvarky je přitažlivá v barevném antitripletním antisymetrickém kanálu. Kondenzát v antisymetrickém diracovském (fakticky spinovém) indexu zachovává rotační symetrii a je tudíž robustnější než symetrický kondenzát. O výhodnosti kladné vnitřní parity kondenzátu rozhoduje t.zv. instantonová interakce, jejíž původ je neporuchový (a jejíž popis přesahuje rámec skript). Celková antisymetrie kondenzátu vyžadovaná Pauliho principem si pak vynucuje párování ve voňavém prostoru: musí být antisymetrické, t.j. tripletní.

Fyzikální vlastnosti CFL fáze jsou zakódovány ve způsobu, jakým je symetrie hamiltoniánu  $SU(3)_c \times U(1)_B \times SU(3)_V \times SU(3)_A$  kondenzátem (12.14) spontánně narušena.

Především, ze struktury jeho grupových indexů je patrné, že nenarušenou symetrií je diagonální  $SU(3)_{c+L+R}$  podgrupa všech tří zúčastněných SU(3) grup.

Znamená to, že globální chirální symetrie je spontánně narušena kondenzátem genericky jiného typu, než na jaký jsme v QCD při nulové baryonové hustotě zvyklí:  $(\bar{\psi}_L \psi_R)$ .

Jak už dobře víme, schéma spontánního narušení globální spojité symetrie, i bez detailní znalosti dynamiky definuje spektrum bezmezerových NG excitací, klíčových pro termodynamické chování systému při nízkých teplotách. Počet generátorů, které v uvedeném schématu neanihilují základní stav, je roven 8 + 1 + 8 + 8 - 8 = 17. Při tomto počítání považujeme i barevnou symetrii  $SU(3)_c$  za globální. Za tohoto předpokladu bychom tedy měli očekávát existenci sedmnácti nehmotných NG bosonů.

Skutečnost je však jiná. Jednak je symetrie  $SU(3)_c$  kalibrační, t.j. existuje osm nehmotných vektorových gluonových polí, které v případě slabé interakce zůstanou ve hře. Kromě toho, jeden z generátorů grupy  $SU(3)_{L+R}$  je elektrický náboj, který generuje  $U(1)_Q$  elektromagnetickou kalibrační symetrii. To reálně znamená, že neporušená symetrie  $SU(3)_{c+L+R}$  obsahuje jeden generátor  $\tilde{Q}$ , spojený s abelovským kalibračním polem a odpovídajícím současné elektromagnetické a barevné rotaci.

V úvodní kapitole jsme v souvislosti s Goldstoneovým teorémem uvedli: "V teorii elektroslabých interakcí mají NG bosony zajímavý osud. Stanou se podélnými polarizačními stavy hmotných částic se spinem 1 a z energetického spektra beze zbytku zmizí. Tento mechanismus "zhmotnění" původně nehmotných částic se spinem 1 se v částicové fyzice nazývá Higgsův. V kapitolách o supravodivosti se s jeho projevem setkáme v podobě tzv. Meissnerova jevu."

Příklad CFL fáze je jiným konkrétním příkladem obecného Higgsova mecha-

nismu, kombinujícího kalibrační princip s principem spontánního narušení symetrie. Osud devíti kalibračních polí je díky Higgsovu mechanismu následující: sedm gluonů a jedna gluon-fotonová kombinace budou "zhmotněny" Higgs-Meissnerovým jevem, ortogonální gluon-fotonová kombinace zůstane nehmotná. Ve spektru zůstane osm + jedna nehmotných bezspinových NG excitací. Můžeme je klasifikovat podle nenarušené  $SU(3)_{c+L+R}$  symetrie, takže se chovají jako oktet pseudoskalárních mezonů  $\pi, K, \eta$ . Devátý NG boson vyjadřuje standardní supratekutost této komplikované fáze.

Analogicky můžeme klasifikovat excitace se spinem jedna, které získaly hmotu Higgsovým mechanismem: chovají se jako oktet vektorových mezonů.

Neobyčejně zajímavá, genericky nová metamorfóza čeká v CFL fázi díky specifičnosti poruchových QCD interakcí: triplet barevných kvarků, které současně tvoří voňavý triplet. Především se všechny účastní párování.

Připomeňme pro srovnání osud elektronů v supravodiči. Díky kontaktní interakci má rovnice pro energetickou mezeru $\Delta$ tvar

$$\Delta \propto g^2 \int d\xi \frac{\Delta}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} , \qquad (12.15)$$

kde $\xi=k-\mu$ (uvažujeme nehmotné kvarky) a její řešení je charakteristické neanalytičností ve vazbové konstantě g typu  $\Delta\propto\exp\{-const/g^2\}$ . Fermionové spektrum je tvořeno Bogolubov-Valatinovými kvazikvarky s energetickou štěrbinou.

V CFL fázi má interakce, způsobující Cooperovu nestabilitu, komponentu dlouhého dosahu, způsobenou výměnou nehmnotných chromomagnetických gluonů. Komplikovaná analýza rovnice pro energetickou štěrbinu vede k výsledku, v němž je neanalytičnost ve vazbové konstantě jiná, než v BCS:

$$\Delta = 2\mu exp(-\frac{3\pi^2}{\sqrt{2}g}) \tag{12.16}$$

Je sice zřejmé, že Bogolubovova-Valatinova transformace může popisovat jen devět kvazikvarků s energetickou mezerou, ale díky specifickému schématu narušení symetrie v CFL fázi se těchto devět kvazikvarků chová jako oktet plus singlet bezbarvých baryonů.

Protože, jak jsme výše zmínili, podobný osud potkal jak pseudoskalární tak vektorové excitace, je docela dobře možné, že mezi CFL kvarkovou fází a fází hyperjaderné hmoty, tvořené degenerovanými SU(3) multiplety bezbarvých hadronů, není žádný fázový přechod.

### 12.3 Experimentální projevy supratekutosti barevných kvarků

Nyní ještě krátce zmíníme některé robustní fyzikální veličiny, charakterizující hustou baryonovou hmotu, které umíme teoreticky spočítat a které je zároveň také možné reálně experimentálně určit.

Rámec je následující. Neutronové hvězdy jsou nejhustší známé objekty ve vesmíru. Jejich hmota je řádu hmoty slunce  $O(M_{\odot})$  a jejich poloměr je řádu O(10 km).

Vzdálenost od Země většiny z nich se měří v tisících světelných let. Odhaduje se, že hustota jejich nitra je přibližně troj až dvanáctinásobek jaderné hustoty  $n_{\rm B}$ . Vnější krusta je tvořena pevnou mřížkou pozitivních iontů neutralizovanou elektronovou kapalinou a vnitřní část krusty je tvořena supratekutými neutrony. Uvnitř krusty je tekutý plášť, sestávající pravděpodobně ze supratekutých protonů a neutronů, a kromě toho elektronů. Co je ještě hlouběji, není známo. Věděli bychom daleko víc, kdybychom znali stavovou rovnici jaderné hmoty. Pokud by byla stavová rovnice dostatečně tuhá, bylo by i nitro neutronových hvězd tvořeno nukleony a elektrony. V opačném případě je jednou z přirozených možností existence dekonfinované a barevně supravodivé kvarkové hmoty.

Experimentální otázka tedy zní, jaké astrofyzikální experimenty mohou rozhodnout, je-li nitro neutronové hvězdy husté natolik, že se nukleony překrývají? Samozřejmě se nabízí měřit závislost hmoty neutronové hvězdy na jejím poloměru s dostatečnou přesností. První prostá úvaha je: Kvarková hmota by měla být "měkká", takže neutronová hvězda s kvarkovým nitrem by měla být maximálně lehká. Nalezení neutronové hvězdy s hmotou ~  $1.8M_{\odot}$  a větší by existenci kvarkového nitra vylučovalo. Úvaha je ovšem správná pouze pro volné kvarky a tento předpoklad není evidentně v reálném světě splněn.

Dále se nabízí: mezi nukleonovým pláštěm a kvarkovým nitrem by mělo existovat ostré hustotní rozhraní. Takové rozhraní by mělo být vidět ve spektru gravitačních vln (detektorem LIGO) doprovázejících fúzi neutronových hvězd. Předpoklad o existenci ostrého hustotního rozhraní však není vodotěsný. S odkazem na existenci supravodičů druhého druhu si umíme představit směs dropletů nukleonové a kvarkové hmoty, v níž ostré hustotní rozhraní chybí.

Bohaté zkušenosti s kvantovými kapalinami nabízejí experimentální možnosti rozlišit mezi různými supratekutými fázemi, zejména odlišit CFL od jiných fází. Logické je rozlišovat jednotlivé fáze podle počtu bezmezerových NG excitací, které jsou nejdůležitější pro termodynamické chování systému.

Chladnutí neutronové hvězdy emisí neutrin, produkovaných z objemu v nitru hvězdy, vůči jejichž průchodu je neutronová hvězda prakticky průhledná. Takové chladnutí bude dominováno takovou barevně supravodivou fází, která má největší neutrinovou emisivitu  $\epsilon_{nu} \sim \text{erg cm}^{-3}\text{s}^{-1}$  a nejvyšší specifické teplo. Z tohoto hlediska má výsadní postavení CFL fáze, charakterizovaná nejmenší emisivitou a nejmenším specifickým teplem (na rozdíl od všech ostatních fází je převážně bosonové, tj.  $\sim T^3$ . Neutronová hvězda, mající CFL nitro by chladla především emisí neutrin z nukleonového pláště.

Pozorované náhlé periodické nárůsty úhlové rychlosti rotace (angl. *Glitches*) neutronových hvězd - pulsarů mají "konvenční" vysvětlení. Vyžaduje existenci supratekuté složky neutronové hvězdy ve vnějším plášti hvězdy a jeho pevnou část (vnější krustu), na níž se mohou zachytit kvantované víry rotující supratekuté složky. Zdá se, že argumentaci je možné převzít i pro případ supratekutých fází kvarkové hmoty v nitru neutronové hvězdy, pokud je na čem zachytit supratekuté víry. K tomuto účelu se výborně hodí krystalická LOFF kvarková fáze.

# Literatura

- [1] J. Hořejší, Fundamentals of electroweak theory, The Karolinum Press (2002).
- [2] J. Formánek, Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole, Karolinum nakladatelství Univerzity Karlovy, (1998).
- [3] D. J. Gross and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. 30, 1343 (1973).
- [4] H. D. Politzer, Phys. Rev. Lett. 30, 1346 (1973).
- [5] C. N. Yang and R. L. Mills, Phys. Rev. 96, 191 (1954).
- [6] T.-P. Cheng and L.-F. Li, Gauge theory of elementary particle physics, Oxford University Press, (1984).
- [7] J. S. Ball and A. Caticha, Phys. Rev. D 37, 524 (1988).
- [8] At the frontier of Particle Physics-Handbook of QCD, ed. M. Shifman, World Scientific, (2001).
- [9] K. Rajagopal and F. Wilczek, hep-ph/0011333, (2000).
- [10] M. Buballa, Phys. Reports 407, 205 (2005); hep-ph/0402234.
- [11] M. Baldo, E. E. Saperstein and S. V. Tolokonnikov, Nucl. Phys. A 749, 42c (2005).
- [12] M. G. Alford, A. Schmitt, K. Rajagopal and T. Schaefer, Rev. Mod. Phys. 80, 1455 (2008).
- [13] J. Li, B. Y. Sun and J. Meng, Pairing properties of symmetric nuclear matter in relativistic mean field theory, arXiv:0910.4057.
- [14] M. G. Alford, K. Rajagopal and F. Wilczek, Phys. Lett. B 422, 247 (1998).
- [15] R. Rapp, T. Schafer, E. V. Shuryak and M. Velkovsky, Phys. Rev. Lett. 81, 53 (1998).
- [16] J. C. Collins and M. J. Perry, Phys. Rev. Lett. 34, 1353 (1975).
- [17] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP 20, 762 (1965).
- [18] P. Fulde and R. A. Ferrell, Phys. Rev. 135, A550 (1964).

# 13 Základy supravodivosti

## P. SAMUELY

V časoch písania týchto riadkov uplynulo sto rokov od najvýznamnejšej udalosti, ktorá otvorila cestu k fyzike nízkych teplôt a vzápätí k prvému fundamentálnemu objavu na nekonečnej ceste k absolútnej nule, keď Kamerlingh Onnes v Leidene prvýkrát skvapalnil "večný" plyn - hélium. Tento muž bol nielen geniálnym experimentálnym fyzikom, ale aj prvým organizátorom veľkého, systematicky budovaného experimentálneho pracoviska s administratívnym vedúcim a manažérom, výskumným tímom zloženým z asistentov a doktorandov, s technickou skupinou, kde nechýbali výrobcovia prístrojov a fúkači skla na výrobu sklenených kryostatov a ďalší pomocníci. Leidenská "kryofabrika", ktorá mala 15 rokov monopol na héliové teploty, už v r. 1911 objavila nový fundamentálny jav - supravodivosť v ortuti. Výber ortuti pre štúdium elektrického odporu pri nízkych teplotách nebol náhodný. Tento materiál bolo možné pripraviť veľmi čistý a tak študovať jeho intrinzické vlastnosti a nie rozptyl na prímesiach. V Leidene sa systematicky študovali čisté kovy. Elektrický odpor zlata sa s klesajúcou teplotou postupne zmenšoval a pri héliových teplotách bol takmer nemerateľný. Kamerlingh Onnes tak vyvrátil dovtedy prevládajúcu ideu (lord Kelvin), že pri nízkych teplotách elektróny "primrznú" k atómom. Naopak, potvrdil myšlienku Matthiesena, že vodivostné elektróny zostanú voľné, ale rozptyľujúce "vibrátory" (atómy) sa stanú prakticky nehybné. V ortuti však pri teplote v blízkosti 4 K došlo v elektrickom odpore k náhlemu poklesu najmenej o štyri rády, keď odpor vzorky klesol z hodnoty 0,11 Ohmu pod najnižšiu hodnotu, ktorú vedeli v Leidene merať, t.j.  $10^{-5}\Omega$  [1]. Čoskoro nasledovali objavy supravodivosti v cíne a olove. V r. 1913 dostal Kamerlingh Onnes za svoj objav Nobelovu cenu. Do supravodivosti vkladali v Leidene veľké nádeje. Verili, že supravodivé cievky by mohli generovať magnetické polia s indukciami až do 10 Tesla. Tieto nádeje sa však ukázali ako predčasné, lebo maximálny prúd, ktorý tiekol v bezodporovom režime vo vlastnom poli cievky, mal iba malé hodnoty. Horná hranica prúdu bola neskôr označená ako kritický prúd  $I_c$ . Trvalo desaťročia, kým boli objavené tzv. supravodiče II. typu, ktoré, oproti supravodičom I. typu, skúmaným v Leidene, boli schopné niesť oveľa väčšie prúdy a generovať vysoké magnetické polia. Praktické aplikácie silných supravodivých magnetov v laboratóriách aj nemocniciach sa objavili až v šesť desiatych rokoch 20. storočia.

Supravodivosť čoskoro priniesla ďalšie objavy. Meissner a Ochsenfeld [2] zistili v Berlíne v roku 1933, že magnetické pole do istej kritickej hodnoty do supravodiča neprenikne. Ukázalo sa, že ide o jav (dnes nazývaný Meissnerov), ktorý nemožno z ideálnej vodivosti odvodiť a že ide o druhú fundamentálnu vlastnosť supravodičov - ideálny diamagnetizmus, ktorý definuje nový termodynamický stav. K ďalšiemu významnému pokroku došlo v r. 1957, keď konečne Landau dovolil svojmu bývalému študentovi Abrikosovovi zverejniť svoje teoretické objavy o supravodivých víroch v supravodičoch II. typu (Nobelova cena pre Abrikosova v r. 2003 spolu s

Ginzburgom). Bol to práve mladý Abrikosov, ktorý ako prvý verejne ocenil nikdy dovtedy neuznané experimentálne objavy supravodičov II. typu ďalšieho vynikajúceho ruského fyzika Šubnikova (zastrelený v sovietskom gulagu v r. 1937). Rok 1957 priniesol aj mikroskopickú kvantovú teóriu supravodivosti, podľa Američanov Bardeena, Coopera a Schrieffera nazývanú aj teóriou BCS, ktorá sa považuje za jeden z vrcholných intelektuálnych výkonov 20. storočia. Tvorcovia teórie získali Nobelovu cenu v r. 1972. Začiatkom 60-tych rokov 20. storočia Giaever navrhol aj realizoval experiment kvantového tunelovania elektrónov medzi supravodivým a normálnym kovom a Josephson vo svojej dizertačnej práci predpovedal možnosť tunelovania spárovaných elektrónov, dnes nazývaných Cooperove páry. Tieto objavy viedli k ďalšiemu rozvoju teórie aj aplikácií tzv. slabej supravodivosti. Nobelovu cenu dostali spoločne (aj s Esakim) v r. 1973. Pokrok v rozvoji materiálov s vyššou kritickou teplotou však nebol veľký a za 75 rokov od objavu sa posunul na hodnotu  $T_{\rm c} = 23.2 \text{ K}$  v systéme Nb<sub>3</sub>Ge. V r. 1986 publikovali Bednorz a Müller prelomový objav vysokoteplotnej supravodivosti v kysličníkoch medi, tzv. kuprátoch, kde sa kritická teplota vyšplhala na dnešný rekord cca 165 K v systéme HgBa<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>8</sub> pri vysokých tlakoch. Mechanizmus supravodivosti v týchto materiáloch zatiaľ nie je uspokojivo vysvetlený, ale ich samotný objav priniesol obrovský pokrok vo fyzike a očakávania v aplikáciách.



Obr. 13.1: Experimentálna závislosť elektrického odporu veľmi čistej ortuti získaná Kamerlinghom Onnesom v r. 1911. Závislosť ukazuje prechod z odporového do supravodivého stavu.

314

Aplikácie supravodivosti sú založené na fundamentálnych vlastnostiach týchto čisto kvantových materiálov. Dokonalá elektrická vodivosť ponúka bezstratový transport elektrickej energie, silné supravodivé magnety, obmedzovače prúdu a pod. Ideálny diamagnetizmus umožňuje magnetické tienenie, levitujúce vlaky maglévy a koherencia Cooperových párov napr. skvid, t.j. supravodivý kvantový interferenčný detektor s najjemnejším meraním magnetických veličín, alebo mikrovlnové detektory.

Posledné dve desaťročia priniesli veľa nových supravodivých materiálov a to viac, alebo menej konvenčných. Medzi prvými je najvýznamnejší objav supravodivosti v MgB<sub>2</sub>, ktorý viedol v rekordne krátkom čase k aplikáciám. Z druhej skupiny možno spomenúť zlúčeniny UGe<sub>2</sub> a ZrZn<sub>2</sub>, kde, napriek notoricky známemu faktu, že supravodivosť a feromagnetizmus sú protikladné javy, sa slabý feromagnet stáva supravodičom bez toho, aby feromagnetizmus zanikol. Neúspešné hľadanie nových typov vysokoteplotných supravodičov mimo kuprátov bolo prelomené až začiatkom roku 2008, ktorý priniesol objav supravodivosti v zlúčeninách železa (!) a arzénu, v tzv. železných pniktidoch s kritickou teplotou do 55 K. Ak sa supravodivosť zdala byť dlho vzácnou kuriozitou, existuje dnes obrovské množstvo supravodivých materiálov. Pri veľmi vysokých tlakoch sa stane supravodivými väčšina chemických prvkov, existujú tisíce supravodivých anorganických zlúčenín, ba supravodivé sú aj organické materiály. Aj dvojskrutková molekula DNA sa stane supravodivou pod 1 Kelvinom, ak k nej pripojené kovové elektrické kontakty prejdú do supravodivého stavu (ide o indukovanú supravodivosť).

Supravodivosť však nie je limitovaná len na materiály, ide o jav ďaleko obecnejší a vyskytujúci sa vo všetkých škálach od kozmických strún, cez supravodivé jadrá neutrónových hviezd až po supravodivosť v jadrovej hmote.

### 13.1 Ideálna vodivosť

Prvou fundamentálnou vlastnosťou supravodičov je nulová rezistivita pri prenose podkritického jednosmerného prúdu (pozri obr. 1.1). Ide teda o prechod zo stavu s konečným merným odporom  $\rho_N$  nad kritickou teplotou  $T_c$  do stavu s  $\rho = 0$ , alebo s dokonalou vodivosťou  $\sigma = \infty$ , pod  $T_c$ .

Po objave supravodivosti nebolo jasné, či sa jedná o stav so skutočne nulovým elektrickým odporom, alebo o stav s mimoriadne nízkou hodnotou konečného odporu. Kamerlingh Onnes ako pravý experimentátor pripúšťal, že mikroodpor existuje aj v supravodivom stave. Priamo totiž nie je možné experimentálne zmerať ani nulový odpor, ani nekonečnú, alebo ideálnu vodivosť. Obvykle sa odpor meria Wheatstonovým mostíkom, kde je vzorka zapojená ako štvtý, neznámy odpor. Presnosť jeho určenia závisí na presnosti rezistorov v mostíku, ako aj na presnosti odčítania nulovej hodnoty vybalansovaného mostíka galvanometrom. Existuje však experimentálna možnosť ukázať s vysokou presnosťou, že sa v supravodiči naozaj jedná o ideálnu vodivosť. V takýchto experimentoch bolo ukázané, že magnetické pole vyvolané indukovaným prúdom v supravodivej slučke z hliníka sa nezmenilo za 1 rok.

Pomocou magnetickej indukcie *B* indukujeme do supravodivej slučky ( $T < T_c$ ) prúd  $I_0$  v čase t = 0. Ak je v okruhu prítomný okrem indukčnosti *L* aj nenulový odpor *R*, pre indukovaný prúd I(t) v čase *t* platí:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}LI^2\right) + RI^2 = 0 \tag{13.1}$$

so známym riešením

$$I(t) = I_0 e^{-(R/L)} , (13.2)$$

kde časový útl<br/>m $\tau=L/R$ je rovnaký pre prúd aj magnetickú indukci<br/>uB.Po roku bolo v slučke namerané to isté pol<br/>eB.Znamená to aj nulový odporR? S istou presnosťou. Ukážeme si, akou.

Pole B, ako výsledok prúdu I(t), je merané s presnosťou, povedzme,  $\delta B/B_0 = 10^{-5}$ . Potom je pokles prúdu, resp. poľa v čase t menší ako toto číslo

$$\delta I > I_0 - I(t) = I_0 (1 - e^{-(R/L)t})$$
(13.3)

$$\frac{\delta I}{I_0} = \frac{\delta B}{B_0} > 1 - e^{-(R/L)t}$$
(13.4)

a horná medza odporu je

$$R < -\frac{L}{t} \ln(1 - \frac{\delta B}{B_0}) = -\frac{L}{t} \ln(1 - \frac{\delta I}{I_0}) .$$
 (13.5)

Ak sme použili slučku s polomerom  $r=5~{\rm cm}$ z čistého hliníka s polomerom drôtu $a=0,5~{\rm mm}$ , indukčnosť bude mať hodnotu  $L\approx \mu_0 r \ln(r/a)\approx 3\times 10^{-7}~{\rm H}$ . Po roku  $t=t_1\approx 3\times 10^7 {\rm s}$ sme teda namerali zmenu menšiu ako $\delta B/B_0=10^{-5}$ a odpor bude menší ako  $R<10^{-19}\Omega$ . Merný odpor hliníka v supravodivom stave  $\rho=RS/l$ s prierezom vodičaSa dĺžkou l bude najviac ak

$$\rho = 10^{-19} \Omega \frac{S}{l} \approx 2,5 \times 10^{-25} \Omega \mathrm{m} .$$
 (13.6)

Ak ho porovnáme s merným odporom veľmi čistého hliníka pri héliových teplotách  $\rho \approx 10^{-12} \Omega m$ , ide o zmenu o viac ako 13 rádov. Konštanta časového útlmu  $\tau = R/L$  bude potom väčšia ako  $3 \times 10^{12}$  s, čo je viac ako 100 tisíc rokov. Pravdaže to je iba dolný limit, daný citlivosťou nášho prístroja. Použitie citlivejších magnetometrov - skvidov vedie ku relaxačnému času pre zmenu prúdu, resp. magnetického poľa, ktorý je dlhší, ako je doba života vesmíru. To je silný argument pre tvrdenie, že odpor supravodiča pre prenos jednosmerného prúdu je reálne nulový.

Nulový odpor sa netýka prenosu striedavého prúdu, pri ktorom sa akcelerujú náboje a pritom sa prenáša energia do systému. Striedavý odpor rastie so štvorcom frekvencie a je silne obmedzujúcim faktorom len pre vysoké frekvencie. Každopádne je ideálna vodivosť supravodiča, umožňujúca bezstratový supraprúd po milióny rokov, fascinujúcim javom, ktorý protirečí akejkoľvek fyzikálnej skúsenosti pochádzajúcej z makrosveta. Ide o čistý kvantovo-fyzikálny efekt na makroskopickej škále. Ako bude uvedené v ďalších paragrafoch, ku bezstratovému prenosu elektrického náboja v supravodiči treba pripočítať ešte jednu vlastnosť a to fázovú koherenciu mnohočasticovej vlnovej funkcie supravodiča.

### 13.2 Ideálny diamagnetizmus

Dvadsaťdva rokov po objave ideálnej vodivosti objavili Meissner a Ochsenfeld druhú fundamentálnu vlastnosť supravodičov - ideálny diamagnetizmus. Pred týmto objavom sa viedli spory o magnetické vlastnosti supravodiča, pokiaľ by jeho jedinou fundamentálnou vlastnosťou bola ideálna vodivosť. Ako ukážeme nižšie, takáto situácia by spôsobila, že výsledný stav supravodiča by záležal na histórii jeho ochladenia a zmagnetovania (pozri obr. 1.2). Našťastie Meissner a Ochsenfeld ukázali, že magnetické pole aplikované nad  $T_c$  bude zo supravodiča pri jeho ochladení pod  $T_c$  vytlačené tak, aby výsledná magnetická indukcia vo vnútri supravodiča bola B = 0. Teda v supravodivom stave je vždy

$$B = \mu_0(H + M) = 0 , \qquad (13.7)$$

čo znamená, že vo vnútri supravodiča je magnetizácia opačná ako aplikované poleM=-Ha susceptibilita nadobúda hodnotu ideálneho diamagnetu

$$\chi = \frac{dM}{dH} = -1. \tag{13.8}$$

Vonkajšie pole odtienia zo supravodiča tieniace prúdy tečúce po jeho povrchu tak, že sa vonkajšie pole a opačne orientovaná magnetizácia presne vnútri vykompenzujú a zvonku sa sčítajú. V normálnom stave prenikajú magnetické tokočiary cez kov prakticky voľne, ako cez vákuum, ale v supravodivom, tzv. Meissnerovom stave sú tokočiary nútené supravodič obísť. Ak máme supravodič v tvare gule je najväčšia hustota tokočiar na rovníku, zatiaľčo pri póloch je najnižšia. Stav supravodiča je definovaný výlučne na základe hodnôt termodynamických premenných - teploty T a aplikovaného poľa H. Preto hovoríme o termodynamickom stave, nezávislom na spôsobe, akým bol dosiahnutý.

Inak by tomu bolo, ak by výhradnou charakteristikou supravodiča bola jeho ideálna vodivosť. Uvažujme nasledujúce prípady: nech je supravodič najprv pri bežnej, povedzme izbovej teplote  $T > T_c$ . Ochladme ho na teplotu  $T < T_c$ , čo spôsobí pokles jeho merného elektrického odporu na nulu,  $\rho =$ 0. Po zapnutí magnetického poľa vzniknú v dôsledku Lenzovho zákona tieniace prúdy, ktoré vo vnútri supravodiča pole vykompenzujú. Odpor supravodiča zostane nulový,  $\rho = 0$ , prúdy budú večné a vonka-



Obr. 13.2: Odozva ideálneho vodiča (nie supravodiča) na magnetické pole.

jšie pole nikdy do supravodiča neprenikne. Po vypnutí magnetického poľa sa magnetický tok cez vzorku nezmení (zostane nulový) a prúdy klesnú na nulu. Predstavme si teraz iný postup. Aplikujme na vzorku v normálnom stave, pri izbovej teplote vonkajšie magnetické pole. Toto pole prestúpi kovovú a slabo (para)magnetickú vzorku bez väčších ťažkostí. Po ochladení vzorky do supravodivého stavu na teplotu  $T < T_c$ , kde  $\rho = 0$ , Lenzov zákon vyžaduje, aby magnetický tok vo vzorke zostal

konštantný. Ak je vonkajšie pole vypnuté, znova Lenzov zákon a  $\rho = 0$  vyžadujú nezmenenú hodnotu magnetického toku. Ale to si vyžaduje vytvorenie spontánnych prúdov na povrchu supravodiča, ktoré vďaka nulovému odporu  $\rho = 0$  budú večné. Teda, konečné hodnoty premenných - teploty T a aplikovaného poľa H sú v oboch postupoch rovnaké, ale výsledný stav ideálneho vodiča diametrálne odlišný. V skutočnom supravodiči však vedú oba postupy ku rovnakému stavu - ku stavu, keď je magnetický tok zo supravodiča vždy vypudený. Teda supravodivosť nie je len *ideálna vodivosť*, ale vykazuje aj *ideálny diamagnetizmus*. Na rozdiel od bežného diamagnetizmu, kde stojí za diamagnetickou reakciou na vonkajšie pole atómový, resp. molekulový tieniaci prúd a výsledná susceptibilita je malá,  $\chi = -10^{-6}$ , v supravodiči je tieniaci prúd skutočne makroskopický.

### 13.3 Supravodiče I. a II. typu

V doterajších úvahách sme predpokladali, že aplikované pole ani prúd supravodivosť nerozrušia. V skutočnosti však Meissnerov stav existuje len pod určitou kritickou hodnotou magnetického poľa  $H_c$ , alebo  $H_{c1}$ , ktorá závisí na konkrétnom supravodivom materiáli. V poliach nadkritických supravodič prechádza do normálneho stavu. Rovnako existuje aj kritický prúd, čo je však veličina skôr závislá na technológií prípravy materiálu a nie na termodynamike systému. Prechod do normálneho stavu v magnetickom poli môže prebehnúť dvojakým spôsobom. Ako ukazuje obr. 13.3,

v supravodičoch I. typu, ako je väčšina supravodivých prvkov (napr. Hg. Al, Pb, Sn, In), až po hodnotu  $H_{\rm c}$  záporne vzatá magnetizácia narastá rovnako ako aplikované pole, teda susceptibilita sa rovná -1. V poli  $H_{\rm c}$  sa situácia zmení skokom, magnetický tok náhle prenikne vzorku a normálny stav je charakterizovaný hodnotou M = 0. Takýto skok je však pozorovaný (napr.



Obr. 13.3: a) Odozva supravodiča na vonkajšie magnetické pole H vyjadrená magnetizáciou M (prerušovaná čiara popisuje supravodiče I. typu, plná čiara supravodiče II. typu), b) teplotná závoslosť horného  $H_{c2}$  a dolného  $H_{c1}$  kritického magnetického poľa supravodičov II. typu.

v náraste signálu na cievke obopínajúcej vzorku) len v prípade, ak je demagnetizačný faktor vzorky nulový, t.j. napr. pre prípad dlhej, tenkej ihlovitej vzorky v pozdĺžnom magnetickom poli. V supravodičoch II. typu (prípad všetkých praktických supravodičov, ako je NbTi, Nb<sub>3</sub>Sn, ale aj vysokoteplotných kuprátov, či  $MgB_2$ ) prechádza vzorka v poli  $H_{c1}$  z Meissnerovho stavu do stavu s čiastočným vytesnením vonkajšieho poľa, resp. s parciálnym preniknutím magnetického toku. Tento stav sa nazýva zmiešaným, alebo tzv. Abrikosovova fáza podľa nositeľa Nobelovej ceny, ktorý tento stav teoreticky predpovedal. So zvyšovaním poľa magnetický tok čoraz efektívnejšie preniká do vzorky, až v poli $H_{\rm c2}$  prenikne úplne a vzorka dosiahne normálny stav.

Hustota magnetickej energie  $B_{\rm c}^2/2\mu_0$ , potrebná na rozrušenie Meissnerovho stavu supravodičov I. typu, meria priamo stabilitu supravodivej fázy oproti normálnej. Pochopiteľne, že táto "sila" supravodivosti bude v každom materiáli, ktorý má osobitné elektrónové vlastnosti, iná.

V prípade, že vzorka nemá vyššie uvedený tvar tenkej ihly umiestnenej v pozdĺžnom poli, bude vonkajšie, alebo aplikované pole v jej blízkosti deformované a demagnetizačný faktor bude nenulový. Napr. pre guľový tvar bude demagnetizačný faktor rovný 1/3 a magnetické pole na rovníku bude mať hodnotu  $3/2H_a$ . V dôsledku tohoto efektu by mal vo vzorke vzniknúť normálny stav už pri hodnote  $2/3H_c$ . V skutočnosti, pretože je to energeticky výhodnejšie, vznikne laminárna štruktúra, alebo tzv. medzistav, kde sa striedajú normálne a supravodivé lamely, paralelné s vonkajším poľom. Supravodivé lamely sú v Meissnerovom stave bez magnetického toku, zatialčo normálne lamely majú hustotu magnetického toku zodpovedajúcu kritickému poľu  $B_{\rm c} = \mu_0 H_{\rm c}$ . Relatívna hrúbka supravodivých a normálnych oblastí je určená kombináciou tohoto faktu so zachovaním magnetického toku.

Do supravodiča II. typu preniká magnetický tok vo forme tokotrubíc, resp. supravodivých vírov v jemných kvantách  $\Phi_0$  = h/2e, kde h je Planckova konštanta a e je náboj elektokotrubíc a vírov narastá s apliko-

vaným poľom, ako

vidno na závislosti

M od H. Treba



trónu. Hustota týchto Obr. 13.4: Jadro supravodivého víru s rozmerom  $\xi$  je normálna, nesupravodivá oblasť, resp. oblasť so silne potlačeným parametrom usporiadania  $\psi$ . Magnetická tokotrubica s rozmerom  $\lambda$  môže byť v supravodičoch II. typu oveľa väčšia.

zdôrazniť, že zmiešaný stav supravodičov II. typu je veľmi odlišný od medzistavu systémov I. typu.

Najmä vo vysokoteplotných supravodičoch treba striktne rozlišovať normálne jadro supravodivého víru a celú magnetickú tokotrubicu (pozri obr.1.4). Jadro víru, resp. magnetickej tokotrubice má polomer koherenčnej dĺžky  $\xi$  a predstavuje oblasť, kde je supravodivosť magnetickým poľom kompletne rozrušená. Magnetická tokotrubica je oblasť s magnetickým tokom a má rozmer hľb<br/>ky vniku magnetického poľa $\lambda$ . Práve pomer<br/>  $\lambda>\xi$ určuje, že sa jedná o supravodič<br/> II. typu. V mnohých supravodičoch II. typu tento pomer nie je vysoký, ale vo<br/> vysokoteplotných systémoch môže byť väčší ako 100 a teda oblasť magnetického toku bude oveľa väčši<br/>a ako oblasť, kde je supravodivosť v jadre víru rozrušená.

Vlastnosťam klasických supravodičov druhého druhu a vysokoteplotným supravočičom sú venované následujúce kapitoly.

### 13.4 Demagnetizačný faktor

Pokiaľ je vzorka elipsoidálneho tvaru a pole sa aplikuje v smere jednej zo základných osí, sú vnútorné polia  $B_i$  a  $H_i$  paralelné s vonkajším aplikovaným poľom  $B_a$ . Platia nasledujúce vzťahy:

$$B_a = \mu_0 H_a aga{13.9}$$

$$B_{\rm i} = \mu_0 (H_{\rm i} + M) = (1 + \chi) \mu_0 H_{\rm i} , \qquad (13.10)$$

kde  $B_i = 0$  v Meissnerovom stave. Vzťah medzi vonkajším a vnútorným poľom je ovplyvnený demagnetizačným faktorom. Pojem demagnetizačný faktor bol prvýkrát použitý pre feromagnetiká, ale v supravodičoch, kde sú magnetizácia a demagnetizačné efekty tiež veľmi silné, hrá rovnako dôležitú rolu, aj keď s "opačným znamienkom".

Ak sa supravodič vloží do poľa  $H_a$ , na povrchu supravodiča sa objavia tieniace prúdy, ktoré v ňom vyvolajú dodatočné, tzv. demagnetizačné pole  $H_D$  a vnútorné pole je potom súčtom oboch polí

$$H_{\rm i} = H_{\rm a} - H_{\rm D}$$
 (13.11)

V prípade elipsoidálnych vzoriek bude výsledné vnútorné pole homogénne a možno písať  $H_{\rm D} = nM$ , kde n je demagnetizačný faktor a M je homogénna magnetizácia v supravodiči. Keďže v ňom platí  $M = -H_{\rm i}$ , dostaneme

$$H_{\rm i} = \frac{1}{1-n} H_{\rm a} \ . \tag{13.12}$$

V prípade guľovej vzorky bude vnútorné pole dané poľom na extremálnom priereze gule (teda na rovníku) v smere vonkajšieho poľa, kde je rovné  $H_a/(1-n)$ . Keďže n = 1/3, bude to pole rovné  $3/2H_a$ . Ak teda vložíme supravodič I. typu, ktorý má tvar gule do vonkajšieho poľa  $H_a = 2/3H_c$ , vnútorné pole dosiahne kritickú hodnotu a vzorka by mala prejsť do normálneho stavu. To by však znamenalo, že M = 0 aj  $H_D = 0$  a  $H_i = H_a < H_c$ . Teda vzorka by bola paradoxne v normálnom stave pre polia  $H < H_c$ . V skutočnosti sa vo vzorke vytvorí laminárna štruktúra (v prípade supravodičov II. typu vírová štruktúra), kde sa striedajú normálne a supravodivé oblasti, v súlade so zákonmi termodynamiky. Prechod do supravodivého stavu je potom postupný a nie náhly v poli  $H_c$ .

### 13.5 Termodynamika supravodičov

Ako vyplýva z vyššie uvedených závislostí magnetizácie supravodiča na vonkajšom magnetickom poli, supravodivý stav možno magnetickým poľom rozrušiť. M(H) závislosti možno stotožniť s fázovým diagramom a podrobiť ich termodynamickej analýze. V nasledujúcej časti podáme stručnú analýzu termodynamiky supravodičov, pričom zanedbáme demagnetizačné efekty a budeme predpokladať, že Gibbsova voľná energia v normálnom stave nie je závislá na magnetickom poli, t.j. vzorka je v normálnom stave nemagnetická. V supravodivom stave supravodiča I. typu je prítomný ideálny diamagnetizmus, to znamená, že indukovaná magnetizácia kompenzuje vonkajšie magnetické pole H: M = -H. V takom prípade je Gibbsova voľná energia G rovná

$$G_{\rm S}(H) = G_{\rm S} - \mu_0 V_{\rm m} \int_0^H M dH = G_{\rm S} + \frac{1}{2} \mu_0 H^2 V_{\rm m} , \qquad (13.13)$$

kde  $G_{\rm S}$  je Gibbsova energia v supravodivom stave a v nulovom magnetickom poli,  $\mu_0$  je magnetická permeabilita a  $V_{\rm m}$  molárny objem. Pri kritickom poli  $H_{\rm c}$  prejde vzorka do normálneho stavu, kde  $G_{\rm S}(H_{\rm c}) = G_{\rm N}$ . Potom rozdiel vo voľnej energii normálneho a supravodového stavu je

$$G_{\rm N} - G_{\rm S}(H) = \frac{1}{2}\mu_0 (H_{\rm c}^2 - H^2)V_{\rm m}$$
 (13.14)

Rozdiel medzi Gibbsovou energiou v normálnom a supravodivom stave bez prítomnosti magnetického poľa, tzv. kondenzačná energia supravodiča, je daná pozoruhodne jednoduchým výrazom

$$G_{\rm N} - G_{\rm S} = \frac{1}{2} \mu_0 H_{\rm c}^2 V_{\rm m}$$
 (13.15)

Obecne,  $H_c^2$  je mierou stability Meissnerovho stavu oproti normálnemu stavu. Energia supravodivého stavu je nižšia oproti energii normálneho stavu o hodnotu kondenzačnej energie. Ak si vezmeme za príklad niób, jeho kritická teplota je približne  $T_c = 9$  K a kritické pole asi  $H_c = 160$  kAm<sup>-1</sup> (to je  $B_c = 0, 2$  T). Potom má niób kondenzačnú energiu asi 16 kJm<sup>-3</sup>. Niób kryštalizuje v priestorovo centrovanej kubickej mriežke s mriežkovou konštantou 0,33 nm. Keď vyrátame objem pripadajúci na jeden atóm, dostaneme hustotu kondenzažnej energie na jeden atóm rovnú iba  $2\mu eV/atóm$ , čo sa zdá skutočne malá hodnota. Túto záhadu vyriešila až BCS teória supravodivosti. Kondenzačná energia je totiž v mikroskopickej teórii supravodivosti zviazaná s hodnotou energetickej medzery supravodiča, resp. je úmerná hodnote  $(kT_c)^2 N(E_F)$ , kde  $N(E_F)$  je hustota stavov s Fermiho energiou. Keďže  $N(E_F) \approx N/kT_F$  a  $kT_c$  je o 3 až 4 rády menšie ako  $kT_F$  bude aj kondenzačná energia pripadajúca na jeden atóm z celkového počtu N atómov vo vzorke rovná len niekoľkým mikroelektrónvoltom.

Ďalej môžeme vypočítať entropiu a tepelnú kapacitu supravodiča. Keďže $S=-(\partial G/\partial T)_{\rm H,P}$ , je rozdiel entropií v normálnom a supravodivom stave pri konštantnom tlaku a magnetickom poli daný výrazom

$$S_{\rm N} - S_{\rm S} = -\mu_0 H_{\rm c} \left(\frac{\partial H_{\rm c}}{\partial T}\right)_{\rm H,P}.$$
(13.16)

 ${\rm Z}$ experimentálnych pozorovaní je známe, že teplotnú závislosť kondenzačnej energie možno v dobrom priblížení popísať ako

$$H_{\rm c}(T) = H_{\rm c}(0)[1 - (T/T_{\rm c})^2]$$
 (13.17)

Potom je výraz $-\mu_0 H_{\rm c} (\partial H_{\rm c}/\partial T)\,$ stále kladný a teda entropia supravodivého

stavu nižšia než stavu normálneho. Supravodivý stav vykazuje vyššiu usporiadanosť. Prechod z neho do normálneho stavu je v magnetickom poli sprevádzaný skokom v entropii a teda ide o fázový prechod 1. druhu. Výnimku tvorí prechod pri teplote  $T_{\rm c}$ pri $H_{\rm c}=0,$ kde sa entropia mení plynule a ide o fázový prechod 2. druhu.



Obr. 13.5: Elektrónová tepelná kapacita v prípade klasického, nízkoteplotného supravodiča a pre prípad vysokoteplotného supravodiča s vplyvom tepelných fluktuácií pod aj nad  $T_{\rm c}$ .

Za znížením entropie v supravodivom stave stojí formovanie Cooperových párov a ich vzájomná fázová koherencia.

Tepelná kapacita je definovaná

$$C = T \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{\rm H,P}.$$
(13.18)

Po dvojnásobnej derivácii dostaneme

$$C_{\rm S}(T) - C_{\rm N}(T) = \mu_0 T \left[ \left( \frac{dH_{\rm c}}{dT} \right)^2 + H_{\rm c} \left( \frac{d^2 H_{\rm c}}{dT^2} \right) \right]$$
(13.19)

a pre teplotu $T=T_{\rm c},$ k<br/>de je $H_{\rm c}=0,$  bude v elektrónovej tepelnej kapacite skok

$$C_{\rm S}(T_{\rm c}) - C_{\rm N}(T_{\rm c}) = \mu_0 T_{\rm c} \left(\frac{dH_{\rm c}}{dT}\right)_{\rm T=T_{\rm c}}^2 > 0$$
 (13.20)

V experimente na klasických nízkoteplotných supravodičoch je, ako ukazuje obr. 1.5, tento skok dobre pozorovateľný a jeho veľkosť charakterizuje silu supravodivej väzby, resp. veľkosť supravodivej energetickej medzery. Vo vysokoteplotných supravodičoch, kde hrajú tepelné fluktuácie blízko $T_{\rm c}$ významnú rolu, sa diskontinuita zmení na rozmazané maximum s fluktuáciami po oboch stranách.

Podobný postup môžeme použiť aj pre výpočet kondenzačnej energie supravodičov II. typu. Tu platí

$$G_{\rm S}(T, H_{\rm c2}) - G_{\rm S}(T, 0) = \mu_0 V_{\rm m} \int_0^{H_{\rm c2}} M dH$$
 (13.21)

Integrál je jednoducho plocha pod krivkou závislosti M(H) (pozri obr. 1.2). Uvedený integrál definuje teraz termodynamické kritické pole

$$\frac{1}{2}H_{\rm c}^2 \equiv \int_0^{H_{\rm c2}} M dH \ . \tag{13.22}$$

Kondenzačná energia bude opäť

$$G_{\rm N}(T,0) - G_{\rm S}(T,0) = \frac{1}{2}\mu_0 H_{\rm c}^2 V_{\rm m}$$
 (13.23)

Tentokrát pri hodnote poľa  $H_c$  nenastane žiaden fázový prechod. Reálne fázové prechody budú iba pri dolnom kritickom poli  $H_{c1}$  a hornom kritickom poli  $H_{c2}$ .

### 13.6 BCS teória

Jav supravodivosti bol dlhé roky pre teoretikov veľkou výzvou. Beckerova teória [3] pre dokonalý vodič nemohla vysvetliť Meissnerov jav. Bratia Londonovci sa fenomenologicky zaoberali elektrodynamickými vlastnosťami supravodičov [4] a ich predstava supravodivosti, ako makroskopického kvantového stavu, zohrala veľmi dôležitú rolu. Lokálnu odozvu v ich teórii modifikoval Pippard zavedením koherenčnej dĺžky [5]. Dvojkvapalinový model, v ktorom sú rozlíšené elektróny základného stavu a excitované elektróny, podali Corter a Casimir [6]. Ginzburg a Landau publikovali v r. 1950 teóriu [7], ktorá bola založená na Landauovej teórii fázových prechodov. Zaviedli makroskopický parameter usporiadania, ktorý spojite rastie pri znižovaní teploty v blízkosti prechodu. Fenomenologická teória dosiahla veľký úspech pri vysvetlení supravodivosti II. typu.

Tieto modely však neboli schopné vysvetliť všetky otázky nastolené javom supravodivosti a nepodávali atomistické vysvetlenie supravodivého stavu - prečo vlastne supravodivosť vzniká. Prielom nastal v roku 1957, keď na základe výsledkov štúdia izotopového javu [8] a Cooperovho zistenia [9] nestability elektrónového Fermiho plynu voči tvoreniu elektrónových (Cooperových) párov Bardeen, Cooper a Schrieffer vypracovali mikroskopickú (BCS) teóriu supravodivosti [10].

### 13.6.1 Izotopický jav

Už v roku 1950 Fröhlich vyslovil predpoklad, že kmity atómov, resp. kmity kryštalickej mriežky hrajú v supravodivosti dôležitú rolu. Navrhol tiež, že výskum izotopického javu môže potvrdiť, alebo vyvrátiť túto hypotézu. Na základe jeho návrhu neskôr skutočne Maxwell a Reynolds experimentálne potvrdili existenciu izotopického javu v supravodivej ortuti. V ich experimente rôzne izotopy ortuti vykázali rôznu kritickú teplotu so vzťahom  $T_c M^{0.5} = const.$ , kde M je izotopická hmotnosť. Väčšina supravodivých prvkov vykazuje závislosť  $T_{\rm c} \approx M^{-\alpha}$  s  $\alpha \to 0.5$ . Toto zistenie malo rozhodujúci vplyv na pochopenie mechanizmu supravodivosti. Charakteristická frekvencia kmitov hmotného bodu s hmotnosťou M na pružine je úmerná  $M^{-0.5}$ . Podobná je aj závislosť frekvencie kmitov mriežky tvorenej atómami s hmotnosťou M. Z toho vyplýva, že aj keď sa supravodivosť odohráva v súbore elektrónov, dôležitú úlohu hru hrajú naozaj aj kmity mriežky, v ktorej sa elektróny pohybujú. Ako je ukázané nižšie, interakcia medzi dvomi elektrónmi, ak je sprostredkovaná fonónmi, môže byť príťažlivá. To, narozdiel od coulombovskej interakcie, povedie ku destabilizácii Fermiho kvapaliny, vytváraniu elektrónových párov a nakoniec ku ich makroskopickej koherencii a teda ku supravodivosti.

### 13.6.2 Dvojica elektrónov s príťažlivou interakciou

Takmer každý kov môže byť popísaný v rámci koncepcie Fermiho kvapaliny, ktorú zaviedol Landau (viď kapitola 3). Ide o rozšírenie modelu neinteragujúcich elektrónov popísaných Blochovými funkciami o vzájomné interakcie. Vo Fermiho kvapaline existujú dobre definované nízkoenergetické jednočasticové excitácie, tzv. kvázičastice, podobné vlastným stavom v neinteragujúcom systéme. Existuje jednoznačný vzťah medzi kvantovými číslami neinteragujúcich elektrónov a kvantovými číslami elektrónov vo Fermiho kvapaline. Na rozdiel od presných vlastných stavov neinteragujúceho systému, tu sú povolené preskoky medzi Blochovými stavmi, ktoré majú teda konečnú dobu života. Landauova kvapalina popisuje úspešne aj také exotické systémy, ako sú ťažkofermiónové kovy, kde je efektívna hmotnosť elektrónovej kvázičastice rádovo 1000-násobok hmotnosti voľného elektrónu. Prirodzene vo vzájomnej interakcii medzi elektrónmi Fermiho kvapaliny hrá dominantnú úlohu coulumbovská interakcia sprostredkovaná fotónmi. Na druhej strane elektrón interaguje aj s iónmi tuhej látky. Takto rozptýlené ióny zase interagujú s ďalšími elektrónami, čím sprostredkujú efektívnu elektrónovo-elektrónovú interakciu. Takáto interakcia medzi elektrónmi sprostredkovaná fonónmi má však celkom iný povahu, ako interakcia sprostredkovaná fotónami. Ukazuje sa, že v úzkom energetickom intervale okolo Fermiho plochy je táto interakcia príťažlivá. Táto vlastnosť postačuje na vytvorenie nestability vo Fermiho kvapaline.

Dva elektróny s príťažlivou interakciou prvýkrát uvažoval Cooper. Pridajme ku Fermiho moru neinteragujúcich elektrónov dva elektróny nad Fermiho plochu. Tieto dva elektróny sa priťahujú, pokiaľ sú od Fermiho plochy vzdialené o malú energiu  $\hbar\omega_0$  a sú na opačných stranách Fermiho plochy. Inak neinteragujú vôbec. Jeden elektrón je popísaný rovinnou vlnou  $|\mathbf{k}\rangle$  a druhý  $|-\mathbf{k}\rangle$ . Dvojčasticový stav bez takejto interakcie bude označený ako  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$ , zatiaľčo stav s interakciou bude
#### $|1,2\rangle$ . Hamiltonián systému bude

$$H = H_0 + V_{\text{eff}} \qquad a \tag{13.24}$$

$$H_0 | \boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k} \rangle = 2\varepsilon_{\boldsymbol{k}} | \boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k} \rangle \quad , \tag{13.25}$$

kde $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$ je jednočasticová excitačná energia neinteragujúcich fermiónov. Kvôli Pauliho vylučovaciemu princípu platí  $2\varepsilon_{\boldsymbol{k}} > 2\varepsilon_{\rm F}$ , pretože dva elektróny sme pridali ku Fermiho moru, kde sú všetky stavy pod Fermiho hladinou obsadené. Potom je Schrödingerova rovnica pre dve častice daná ako

$$H|1,2\rangle = E|1,2\rangle$$
, (13.26)

s energiouE pre uvedený dvojčasticový systém. Predpokladáme, že dvojčasticová vlnová funkcia sa dá napísať v tvare

$$|1,2\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} |\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k}\rangle$$
(13.27)

a po dosadení do predchádzajúcej rovnice dostaneme

$$(H_0 + V_{\text{eff}}) \sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} | \boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k} \rangle = E \sum_{\boldsymbol{k}} a_{\boldsymbol{k}} | \boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k} \rangle \quad . \tag{13.28}$$

Použijeme vzťah ortogonality  $\langle \mathbf{k'}, -\mathbf{k'} | \mathbf{k}, -\mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k'}}$ , kde  $\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k'}}$  je Kroneckerovo delta a po malej úprave získame pre koeficienty rozvoja

$$a_{\boldsymbol{k}} \left[ 2\varepsilon_{\boldsymbol{k}} - E \right] = -\sum_{\boldsymbol{k'}} a_{\boldsymbol{k'}} \left\langle \boldsymbol{k'}, -\boldsymbol{k'} | V_{\text{eff}} | \boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k} \right\rangle .$$
(13.29)

Výraz  $\langle \mathbf{k'}, -\mathbf{k'} | V_{\text{eff}} | \mathbf{k}, -\mathbf{k} \rangle$  je maticový element rozptylu pre dve častice z opačných strán Fermiho plochy, zo stavu  $|\mathbf{k}, -\mathbf{k} \rangle$  do stavu  $|\mathbf{k'}, -\mathbf{k'} \rangle$ . Uvažujme príťažlivú interakciu iba v úzkom intervale okolo Fermiho plochy,

$$\langle \boldsymbol{k}', -\boldsymbol{k}' | V_{\text{eff}} | \boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k} \rangle = -V , \qquad (13.30)$$

pre $|\varepsilon_{\pmb{k}}-\varepsilon_{\rm F}|<\hbar\omega_0,$ inak sa interakcia rovná nule. Potom možno písať

$$a_{\mathbf{k}} \left[ 2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E \right] = V \sum_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} \Theta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathrm{F}}) \Theta(\hbar\omega_0 - |\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathrm{F}}|) , \qquad (13.31)$$

kde schodkovité funkcie $\Theta$ ohraničia úzky energetický interval okolo Fermiho plochy. Ak zavedieme hustotu stavov $N(\varepsilon) = \sum_{k} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{k})$ , môžeme prejsť od sumácie cez všetky k vektory ku integrovaniu v príslušnom energetickom intervale

$$a(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \left[ 2\varepsilon_{\mathbf{k}} - E \right] = V \int_{\infty}^{-\infty} d\varepsilon \sum_{\mathbf{k'}} a(\varepsilon) \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{F}}) \Theta(\hbar\omega_0 - |\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{F}}|)$$
$$= V \int_{\infty}^{-\infty} d\varepsilon a(\varepsilon) N(\varepsilon) \Theta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{F}}) \Theta(\hbar\omega_0 - |\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{F}}|) , (13.32)$$

2	ົ	5
J	4	J

respektíve

$$a(\varepsilon) \left[2\varepsilon - E\right] = V \int_{\varepsilon_{\rm F}}^{\varepsilon_{\rm F} + \hbar\omega_0} d\varepsilon' N(\varepsilon') a(\varepsilon') . \qquad (13.33)$$

Keďže je pravá strana rovnice nezávislá na $\varepsilon,$ musí mať ľavá strana formu

$$a(\varepsilon) = \frac{C}{2\varepsilon - E} , \qquad (13.34)$$

kdeC je normalizačná konštanta. Po zavedení bezrozmernej väzobnej konštanty $\lambda\equiv VN(\varepsilon_{\rm F})$ a dosadení dostaneme selfkonzistentnú rovnicu pre vlastnú hodnotu energie

$$1 = V \int_{\varepsilon_{\rm F}}^{\varepsilon_{\rm F} + \hbar\omega_0} d\varepsilon' \frac{N(\varepsilon')}{2\varepsilon - E} = \lambda \ln\left[\frac{2(\varepsilon_{\rm F} + \hbar\omega_0) - E}{2\varepsilon_{\rm F} - E}\right] .$$
(13.35)

Definujme rozdiel energií dvoch neinteragujúcich častíc na Fermiho ploche a vlastnej hodnoty energie elektrónového páru s príťažlivou interakciou -V ako  $\Delta = 2\varepsilon_{\rm F} - E$ . Ide teda o väzbovú energiu elektrónového páru, alebo, ako ukážeme neskôr, o energetickú medzeru supravodiča. Potom platí

$$\frac{1}{\lambda} = \ln\left[1 + \frac{2\hbar\omega_0}{\Delta}\right] . \tag{13.36}$$

Keďže V je kladná veličina, aj  $\lambda$  je kladná a z predchádzajúcej rovnice vyplýva, že  $\Delta$  musí byť kladné tiež. To ale znamená, že hodnota vlastnej energie viazanej dvojice elektrónov je menšia ako súčet energií dvoch neinteragujúcich elektrónov na Fermiho ploche  $E < 2\varepsilon_{\rm F}$ . Ale vychádzali sme zo stavu kompletne obsadených stavov pod Fermiho plochou a pridali sme dva elektróny nad túto plochu. Z toho vyplýva, že Fermiho kvapalina s Pauliho vylučovacím princípom začína kolabovať, ak pripúšťa obsadzovanie už obsadených stavov.

V prípade slabej väzby $\lambda << 1$  pre väzbovú energiu platí

$$\Delta = \frac{2\hbar\omega_0}{e^{1/\lambda} - 1} \approx 2\hbar\omega_0 e^{-1/\lambda} . \tag{13.37}$$

Z uvedeného môžeme urobiť niekoľko kvalitatívnych záverov. Pár je viazaný a teda väzbová konštanta je kladná  $\lambda > 0$ , iba ak je  $N(\varepsilon_{\rm F}) > 0$ . Teda bez Fermiho mora by nebolo párovania elektrónov a  $\Delta \to 0$ . Ďalej, môžeme povedať, že ide o čisto kvantovo-mechanický efekt, kde ak  $\hbar \to 0$ , aj energetická medzera zanikne,  $\Delta \to 0$ . A môžeme zopakovať, že viazaný elektrónový pár sa nachádza v energetickom stave, ktorý je v rozpore s Pauliho vylučovacím princípom. Teda vytváranie Cooperových párov umožňuje obísť tento princíp, ako aj Fermiho-Diracovu štatistiku. Narozdiel od odpudivých coulumbovských síl, ktoré nevedú ku destabilizácii Fermiho kvapaliny, arbitrárne malá príťažlivá interakcia má túto silu. Takto sa otvárajú možnosti pre zavedenie úplne nového základného stavu systému. V čase keď Cooper zaviedol takéto elektrónové párovanie, nebol konkrétny väzobný mechanizmus známy. Až neskôr sa ukázalo, že ide o elektrón-fonónovú interakciu.

#### 13.6.3 Príťažlivá interakcia sprostredkovaná fonónmi

Dôležitým faktorom pri vysvetlení príťažlivej interakcie medzi elektrónmi prostredníctvom fonónov je skutočnosť, že pohyb ťažkých mriežkových iónov je oveľa pomalší, ako je pohyb ľahkých a rýchlych vodivostných elektrónov. Po kolízii iónu s elektrónom pretrváva výchylka iónu z rovnovážnej polohy ešte dlho potom, ako elektrón miesto zrážky opustil. Mriežková deformácia vedie ku vzniku malého dipólového momentu, ktorý ďalej interaguje s elektrónmi. Dávno potom, ako pôvodný elektrón opustil miesto zrážky, je ďalší elektrón pritiahnutý týmto dipólovým momentom. Takto viazané elektróny sú od seba vzdialené. Vzájomné coulumbovské odpudzovanie dvoch viazaných elektrónov bude tým menšie, čím budú od seba viac vzdialené. Čas príletu druhého elektrónu nesmie byť však pridlhý, aby elektrón ešte stihol trvanie lokálnej mriežkovej deformácie. Najvýhodnejšia konfigurácia dvojčasticového systému teda bude stav s vlnovými funkciami s opačnými vlnovými vektormi k a -k. A to je presne situácia uvažovaná v predchádzajúcej časti.

Celkový hamiltonián interagujúceho elektrónového plynu viazaného s fonónmi bude

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c^{+}_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k},\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'q},\sigma,\sigma'} \frac{1}{4\pi\varepsilon_{0}} \frac{2\pi e^{2}}{q^{2}} c^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} c^{+}_{\boldsymbol{k'}-\boldsymbol{q},\sigma'} c_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k'},\sigma'} + V_{e-f}$$
$$V_{e-f} = \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\sigma} M_{\boldsymbol{q}} (a^{+}_{-\boldsymbol{q}} + a_{\boldsymbol{q}}) c^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}} c_{\boldsymbol{k}} , (13.38)$$

kde $M_q$  je maticový element elektrón-fonónovej interakcie,  $c^+,c$ sú elektrónové kreačné a anihilačné operátory,  $a^+,a$ sú fonónové kreačné a anihilačné operátory a $\sigma$  je spinové kvantové číslo. Predpokladáme, že vo väzbe elektrónov dominuje jeden fonónový mód. Uvedený hamiltonián možno prepísať do čisto elektrónovej podoby ako

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c^{+}_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k},\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'},\boldsymbol{q},\sigma,\sigma'} \tilde{V}_{\text{eff}}(\boldsymbol{q},\omega) c^{+}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma} c^{+}_{\boldsymbol{k'}-\boldsymbol{q},\sigma'} c_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k'},\sigma'}$$
$$\tilde{V}_{\text{eff}}(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{2|\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{q}}|^{2} \omega_{\boldsymbol{q}}}{\omega^{2} - \omega_{\boldsymbol{q}}^{2}} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_{0}} \frac{2\pi e^{2}}{q^{2}} .$$
(13.39)

Všimnime si, že pre energie elektrón<br/>v $\omega^2 < \omega_q^2\,$ je fonónová časť elektrón-elektrónovej interakcie záporná, teda príťažlivá. Otázka je, či však môže prevládnuť nad odpudivou coulombovskou interakciou. Ak sa však<br/>  $\omega^2$  blíži zdola ku $\omega_q^2$ , fonónová časť interakcie diverguje. Teda pre ľubovoľne malý maticový element  $|M_q|^2$  bude fonónová časť interakcie vždy schopná prevládnuť nad coulombovskou. Po čase, ktorý zodpovedá charakteristickej fonónovej frekvenci<br/>i $\omega_q$ je druhý elektrón pritiahnutý do miesta mriežkovej distor<br/>zie spôsobenej prvým elektrónom. Táto minimálna čakacia doba zodpovedá hornej frekvenčnej medzi.

Efektívna interakcia je zobrazená na obrázku 1.6 ako funkcia frekvencie/energie  $\omega$  pri zafixovanej konečnej hybnosti q. Ako je vidieť, ak sa  $\omega$ priblíži zdola ku charakteristickej fonónovej frekvencii  $\omega_q$ , je celková efektívna interakcia záporná a teda príťažlivá. V prípade  $\omega^2 > \omega_q^2$  je interakcia odpudivá a rovnako je to aj pre malé  $\omega$ . Po-





Obr. 13.6: Vľavo: Závislosť efektívnej elektrónovofonónovej interakcie na frekvencii pri zafixovanej hodnote hybnosti q. Vpravo: Silne zjednodušená verzia.

sledný prípad zodpovedá situácii, keď druhý elektrón dôj<br/>de na miesto mriežkovej deformácie spôsobenej prvým elektrónom neskoro. Na obrázku v<br/>pravo je zidealizovaná a zjednodušená verzia  $\tilde{V}_{\rm eff}(\boldsymbol{q},\omega)$ , úpl<br/>ne ignorujúca odpudivú interakciu. Práve túto verziu použili Bardeen, Cooper a Schrieffer v pôvodnej práci o fonónovom mechanizme supravodivosti [10].

Frekvenčná oblasť, kde pôsobí príťažlivá interakcia  $\tilde{V}_{\text{eff}}(\boldsymbol{q},\omega)$  je úzka a tvorí len tenkú šupku okolo Fermiho plochy. Pri rozptylovom procese spôsobenom efektívnou interakciou  $\tilde{V}_{\text{eff}}(\boldsymbol{q},\omega)$  dochádza ku prenosu energie  $\omega = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} = \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}$ . Energie dvojice elektrónov pred a po rozptyle ( $\varepsilon_{\mathbf{k}}, \varepsilon_{\mathbf{k}'}, \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}, \varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}$ ) musia ležať vnútri tejto šupky, aby sa elektrónové páry v počiatočnom aj konečnom stave priťahovali.

Na obrázku sú ukázané dvojice elektrónov s vlnovými vektormi  $k_1$  a  $k_2$ . Ak sa rozptýlia na fonóne do stavov  $k_1 + q$ a  $k_2 - q$  bude celková hybnosť  $k_1 + k_2 = Q$ . Ako ukazuje obrázok, obecne neexistuje záruka, že oba stavy sa budú po rozptyle nachádzať opäť v šupke s príťažlivou interakciou. Existuje iba jedna konfigurácia, ktorá takýto stav zaručuje, a to je prípad  $k_1 + k_2 = 0$  (pozri obr. 1.7).

Príťažlivá interakcia sprostredkovaná fonónmi je krátkodosahová. To si vyžaduje, aby spárované elektróny pre-



Obr. 13.7: Rozptyl, resp. interakcia dvoch častíc vo fázovom priestore nachádzajúcich sa tesne nad Fermiho plochou. Obrázok vpravo ukazuje jediný možný prípad, keď nielen počiatočný, ale aj konečný stav dvoch častíc sa nachádza vnútri úzkej šupky v okolí Fermiho plochy.

chádzali priestorovo vzájomne blízko, aj keď sa vyhnú v čase. Z Pauliho vylučo-

vacieho princípu vyplýva, že elektróny, ktoré sa majú k sebe priblížiť, by mali mať opačné spinové čísla. Teda budeme mať k' = -k a  $\sigma' = -\sigma$ . Ak predefinujeme  $k + q \rightarrow k$  a  $k \rightarrow k'$ , bude mať hamiltonián tvar

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c^{+}_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k},\sigma} + \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'},\sigma} V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k'}} c^{+}_{\boldsymbol{k},\sigma} c^{+}_{-\boldsymbol{k},-\sigma} c_{-\boldsymbol{k'},-\sigma} c_{\boldsymbol{k'},\sigma} , \qquad (13.40)$$

kde  $V_{k,k'}$  je príťažlivý dvojčasticový maticový element rozptylu, ktorý pôsobí, ak sú oba stavy s vlnovými vektormi k a k' v úzkej šupke okolo Fermiho plochy. Uvedený výraz je slávny redukovaný hamiltonián Bardeena, Coopera a Schrieffera.

V reálnom priestore sa elektróny z Cooperovho páru pohybujú oproti sebe po veľmi blízkych paralelných priamkach s opačnými spinmi. Každý elektrón zanecháva po sebe mriežkovú deformáciu, ktorou je partnerský elektrón priťahovaný. Paralelné dráhy zaručujú maximálny čas, ktorý elektrón strávi v oblasti mriežkovej deformácie. Pohyb elektrónov v opačnom smere zabezpečí maximálnu vzdialenosť medzi elektrónmi za časovú jednotku a to minimalizuje coulombovské odpudzovanie. Cooperovské párovanie elektrónov sa teda neodohráva v reálnom priestore, ale v  $\boldsymbol{k}$  priestore.

#### 13.6.4 BCS rovnica supravodivej energetickej medzery

Zaveďme kreačné a anihilačné operátory pre Cooperove páry

$$b_{\mathbf{k}} = \langle c_{-\mathbf{k},-\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \quad ; \quad b_{\mathbf{k}}^+ = \left\langle c_{\mathbf{k},\sigma}^+ c_{-\mathbf{k},-\sigma}^+ \right\rangle . \tag{13.41}$$

Ak ešte zavedieme parameter supravodivej energetickej medzery

$$\Delta_{\mathbf{k}'}^+ \equiv -\sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^+ \quad ; \quad \Delta_{\mathbf{k}} \equiv -\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'} \quad , \tag{13.42}$$

možno prepísať redukovaný BCS hamiltoníán do podoby

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} c^{+}_{\boldsymbol{k},\sigma} c_{\boldsymbol{k},\sigma} - \sum_{\boldsymbol{k}} \left[ \Delta^{+}_{\boldsymbol{k}} c_{-\boldsymbol{k},-\sigma} c_{\boldsymbol{k},\sigma} + \Delta_{\boldsymbol{k}} c^{+}_{\boldsymbol{k},\sigma} c^{+}_{-\boldsymbol{k},-\sigma} - b^{+}_{\boldsymbol{k}} \Delta_{\boldsymbol{k}} \right] .$$
(13.43)

Takýto hamiltonián nemá formu neinteragujúceho elektrónového plynu a nemožno z neho priamo vyčítať, ako vyzerá kvázičasticové spektrum. Nato treba zaviesť nové fermiónové operátory, ktoré diagonalizujú uvedený hamiltonián. Zavedieme nový druh fermiónových anihilačných a kreačných operátorov ( $\eta_k, \gamma_k$ ) s nasledujúcim vzťahom ku pôvodným elektrónovým operátorom:

$$c_{\boldsymbol{k},\sigma} = \cos(\theta)\eta_{\boldsymbol{k}} - \sin(\theta)\gamma_{\boldsymbol{k}}$$
;  $c^{+}_{-\boldsymbol{k},-\sigma} = \sin(\theta)\eta_{\boldsymbol{k}} + \cos(\theta)\gamma_{\boldsymbol{k}}$  (13.44)  
a podobne pre konjugované operátory. Potom vyzerá hamiltonián nasledovne:

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \left[ \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \Delta_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}}^{+} \right] + \sum_{\boldsymbol{k}} \left[ \varepsilon_{\boldsymbol{k}} \cos(2\theta) - \sin(\theta) \cos(\theta) (\Delta_{\boldsymbol{k}} + \Delta_{\boldsymbol{k}}^{+}) \right] \eta_{\boldsymbol{k}}^{+} \eta_{\boldsymbol{k}}$$
$$- \sum_{\boldsymbol{k}} \left[ \varepsilon_{\boldsymbol{k}} \cos(2\theta) - \sin(\theta) \cos(\theta) (\Delta_{\boldsymbol{k}} + \Delta_{\boldsymbol{k}}^{+}) \right] \gamma_{\boldsymbol{k}}^{+} \gamma_{\boldsymbol{k}}$$
$$- \sum_{\boldsymbol{k}} \left[ \Delta_{\boldsymbol{k}} \cos^{2}(\theta) - \Delta_{\boldsymbol{k}}^{+} \sin^{2}(\theta) - 2\varepsilon_{\boldsymbol{k}} \sin(\theta) \cos(\theta) \right] \eta_{\boldsymbol{k}}^{+} \gamma_{\boldsymbol{k}}$$
$$- \sum_{\boldsymbol{k}} \left[ \Delta_{\boldsymbol{k}}^{+} \cos^{2}(\theta) - \Delta_{\boldsymbol{k}} \sin^{2}(\theta) - 2\varepsilon_{\boldsymbol{k}} \sin(\theta) \cos(\theta) \right] \gamma_{\boldsymbol{k}}^{+} \eta_{\boldsymbol{k}} .$$
(13.45)

Hodnota $\theta$ sa vyberie tak, aby bolo možné hamiltonián diagonalizovať. To sa dosiahne v prípade, ak

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta_{\boldsymbol{k}}^{+} \quad ; \quad \operatorname{tg}(2\theta) = -\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}} \; . \tag{13.46}$$

Pre takéto hodnoty  $\theta$  platí

$$\sin^2(\theta) \equiv v_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}} \right] \quad ; \quad \cos^2(\theta) \equiv u_{\boldsymbol{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}} \right] \quad , \tag{13.47}$$

kde $E_{\pmb k}\equiv \sqrt{\varepsilon_{\pmb k}^2+|\Delta_{\pmb k}^2|}.$ Výrazy $v_{\pmb k}^2$ a $u_{\pmb k}^2$ označujú tzv. koherenčné koeficienty.

Vlnová funkcia základného stavu je podľa Bardeena, Coopera a Schrieffera definovaná ako

$$|\Psi\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} (u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} c^+_{\boldsymbol{k},\sigma} c^+_{-\boldsymbol{k},-\sigma}) |0\rangle \quad , \tag{13.48}$$

kde  $|0\rangle$  je vákuum Cooperových párov, t.j. stav, keď je more fermiónov zaplnené až po Fermiho hladinu a bez excitácií. Koherenčný koeficient  $v_k^2$  určuje pravdepodobnosť, že stav  $|k\sigma, -k - \sigma\rangle$  (Cooperov pár) je obsadený (pozri ďalej obr. 1.8a) a  $u_k^2$  udáva pravdepodobnosť, že tento stav je prázdny. Základný stav je fázovo koherentný a stredný počet Cooperových párov v ňom je  $\bar{N} = \sum_k 2v_k^2$ .

Po dosadení koherenčných koeficientov do vyššie uvedeného hamiltoniánu získame jednoduchší výraz, ktorý má formu plynu voľných fermionovských kvázičastíc:

$$H = \sum_{\boldsymbol{k},\sigma} \left[ \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + \Delta_{\boldsymbol{k}} b_{\boldsymbol{k}}^{+} \right] + \sum_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}} \left[ \eta_{\boldsymbol{k}}^{+} \eta_{\boldsymbol{k}} - \gamma_{\boldsymbol{k}}^{+} \gamma_{\boldsymbol{k}} \right] .$$
(13.49)

Tento hamiltonián sa skladá z konštantného člena (v priblížení stredného poľa)  $H_0 \equiv \sum_{k,\sigma} \left[ \varepsilon_k + \Delta_k b_k^+ \right]$  a ďalšieho člena, ktorý popisuje pomocou operátorov  $(\eta_k^+, \eta_k)$  a  $(\gamma_k^+, \gamma_k)$  dva typy fermiónov. Tieto dva typy fermiónov, jeden s excitačnou energiou  $E_k$  a druhý  $-E_k$  sú bezspinové, keďže ide o lineárnu kombináciu elektrónov a dier s opačnými spinmi. Výraz  $E_k \equiv \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k^2|}$  definuje energetickú medzeru v spektre kvázičastíc, ktorá sa nachádza na Fermiho ploche. Energia elektrónov v normálnom stave  $\varepsilon_k$  je odčítaná od Fermiho plochy (tu je  $\varepsilon_k = 0$ ).

Pomocou hamiltoniánu v takomto jednoduchom tvare možno napísať voľnú energiu v systéme a jej minimalizáciou vzhľadom na hodnotu energetickej medzery získať BCS rovnicu pre energetickú medzeru:

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \Delta_{\boldsymbol{k}'} \frac{\operatorname{th}(\beta E_{\boldsymbol{k}'}/2)}{2E_{\boldsymbol{k}'}} , \qquad (13.50)$$

kde  $\beta = 1/kT$ . Táto rovnica platí v rámci priblíženia stredného poľa pre ľubovoľný supravodič bez ohľadu na typ párovania (pozri ďalej).

Vráťme sa ku najjednoduchšej forme príťažlivej interakcie, kde  $V_{k,k'} = -V$  pre dvojice vlnových vektorov z úzkej šupky s hrúbkou  $\omega_0$  okolo Fermiho plochy.  $\omega_0$ predstavuje hornú frekvenčnú medzu spektra bozónov, ktoré poskytujú väzbu medzi elektrónmi v Cooperovom páre. V prípade fonónovej supravodivosti je to Debyeova frekvencia  $\omega_D$ . Po dosadení do rovnice pre energetickú medzeru, berúc do úvahy fakt, že medzera je izotropná a teda nezávislá na vlnovom vektore, dostaneme

$$1 = V \sum_{k'} \frac{\operatorname{th}(\beta E_{k'}/2)}{2E_{k'}} .$$
 (13.51)

Túto rovnicu môžeme vyriešiť v limite  $T \to T_c$  aj  $T \to 0$ .



Obr. 13.8: a) Pravdepodobnosť obsadenia elektrónových stavov  $v_k^2$  v závislosti na energii elektrónov  $\varepsilon_k$  pre neinteragujúci Fermiho plyn (prerušovaná čiara) a pre základný stav supravodiča pri T = 0 K, b) energetická medzera na Fermiho hladine v supravodivom stave, c) teplotná závislosť energetickej medzery, d) hustota supravodivých elektrónových stavov.

V prípade  $T \rightarrow$  $T_{\rm c}$  zaniká aj supravodivá medzera v kvázičasticovom spektre a  $E_{\boldsymbol{k}} \to \varepsilon_{\boldsymbol{k}}$ . Ak prejdeme od sumovania v k-priestore ku integrovaniu cez príslušné energie, potrebujeme zaviesť hustotu kvázičastíc v normálnom stave  $N_{\rm N}(\varepsilon)$ . Keďže oblasť sumovania je v k-priestore obmedzená na úzky interval okolo Fermiho energie, stačí uvažovať hustotu stavov z tohoto intervalu. Vo väčšine prípadov je  $N_{\rm N}(\varepsilon)$  v úzkom okolí Fermiho energie viac menej konštantné a preto stačí brať hodnotu  $N_{\rm N}(0)$ . Pre bez-

rozmernú väzbovú konštantu  $\lambda \equiv V N_{\rm N}(0)^1$  dostaneme pre  $T_{\rm c}$  rovnicu:

$$1 = \lambda \int_0^{\omega_{\rm D}} d\varepsilon \frac{\operatorname{th}(\beta \varepsilon/2)}{\varepsilon} .$$
 (13.52)

Pre prípad  $\lambda \ll 1$  možno nájsť riešenie rovnice v tvare:

$$kT_{\rm c} \approx 1,13 \; \omega_{\rm D} e^{-\frac{1}{\lambda}} \; .$$
 (13.53)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Pozor, nejde tu o hĺbku vniku magnetického poľa!

<sup>331</sup> 

Pre druhý prípad,  $T \to 0$ , pôjde th =  $(\beta E_{k'}/2) \to 1$  a rovnica energetickej medzery má tvar:

$$1 = V \sum_{\mathbf{k'}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k'}}} = \lambda \int_0^{\omega_{\rm D}} \frac{d\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} = \lambda \int_0^{\omega_{\rm D}/\Delta} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 1}} = \lambda \operatorname{asinh}\left(\frac{\omega_{\rm D}}{\Delta}\right) (13.54)$$

Nášmu zvyčajnému prípadu  $\lambda \ll 1$  zodpovedá  $\omega_D/\Delta \gg 1$ . Potom je asinh $(\omega_D/\Delta) \approx \ln(2\omega_D/\Delta)$  a dostaneme

$$\Delta(T=0) = 2\omega_{\rm D}e^{-\frac{1}{\lambda}} . \tag{13.55}$$

Parameter väzby  $\lambda$  je veľmi komplexná veličina, ktorá závisí na mnohých detailoch konkrétneho systému, preto je v skutočnosti veľmi obtiažne teoreticky určiť kritickú teplotu a energetickú medzeru akéhokoľvek supravodiča z prvých princípov. Pozoruhodné je, že pomer energetickej medzery a kritickej teploty je v teórii BCS pre tzv. slabú supravodivosť ( $\lambda \ll 1$ ) univerzálna konštanta

$$\frac{2\Delta(T=0)}{kT_{\rm c}} \approx 3,52$$
 . (13.56)

V tomto pomere totiž všetky materiálové parametre, ako je Debyeova frekvencia  $\omega_{\rm D}$ , hustota stavov  $N_{\rm N}(0)$  a elektrón-elektrónová väzba V, vypadnú.

Teplotná závislosť energetickej medzery sa dá vypočítať numericky z rovnice energetickej medzery. Pre supravodiče so slabou väzbou je  $\Delta(T)/\Delta(0)$  univerzálnou funkciou  $T/T_c$ , ktorá klesá od hodnoty 1 pre T = 0 ku 0 pre  $T = T_c$ , ako je to uvedené na obrázku 1.8c. Pri nízkych teplotách je teplotná zmena energetickej medzery exponenciálne pomalá (úmerná  $e^{-\Delta/kT}$ ) a zostáva prakticky konštantná, pokiaľ sa neexcituje dostatočné množstvo kvázičastíc. V blízkosti  $T_c$  klesá takmer vertikálne, približne ako

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1.74 \left(1 - \frac{T}{T_{\rm c}}\right)^{\frac{1}{2}} , \qquad (13.57)$$

podobne, ako v ľubovoľnej teórii stredného poľa (pozri obr. 1.8c).

#### 13.6.6 Shrnutie

Výsledky teórie BCS môžeme zhrnúť do nasledujúcich bodov:

• Príťažlivá interakcia medzi elektrónmi môže viesť k základnému stavu, ktorý je od excitovaných stavov oddelený energetickou medzerou.

• Energiu potrebnú na rozbitie jedného elektrónového páru môžeme vypočítať z excitačnej energie. Táto excitačná energia je daná rozdielom energie stavu s jedným rozbitým párom a energie základného stavu. Pomocou energie elementárnej excitácie  $E_k$  pre excitačnú energiu dostávame

$$E_{exc} = E_{k} + E_{-k} = (\varepsilon^{2}(k) + \Delta^{2})^{1/2} + (\varepsilon^{2}(-k) + \Delta^{2})^{1/2}.$$
 (13.58)

 $\varepsilon(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon(-\mathbf{k})$  sú energie elektrónov v normálnom stave odčítané od Fermiho energie. Ak stavy  $\mathbf{k}$  a  $-\mathbf{k}$  sú z blízkosti Fermiho hladiny, potom energie  $\varepsilon(k_1)$  a  $\varepsilon(k_2)$  sú infinitezimálne malé ( $\rightarrow 0$ ) a na rozbitie jedného Cooperového páru je potrebná energia  $2\Delta$ .

• Hustotu stavov elementárnych excitácií môžeme vypočítať pomocou energie elementárnej excitácie  $E_k$ . Celkový počet stavov v normálnom aj supravodivom stave je rovnaký a preto platí

$$N_{\rm S}(E)dE = N_{\rm N}(\varepsilon_{\boldsymbol{k}})d\varepsilon_{\boldsymbol{k}}.$$
(13.59)

Hustota stavov elementárnych excitácií bude daná vzťahom

$$N_{\rm S}(E) = N_{\rm N}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{dE} = N_{\rm N}(0) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \quad pre \quad |E| \ge \Delta,$$
$$= 0 \qquad pre \quad |E| \le \Delta, \qquad (13.60)$$

kde  $d\nu$  je počet hladín energie v okolí E a  $N_{\rm N}(0)$  je hustota elektrónových stavov okolo Fermiho energie. Hladiny elementárnych excitácií sa zhusťujú pri  $E_k$  blížiacej sa k  $\Delta$  (obr. 1.8d).

• Magnetický tok prechádzajúci supravodivým prstencom je kvantovaný a efektívnou jednotkou náboja je 2e (Pozri ďalej časť 1.3.1).

• Z teórie BCS vyplýva existencia koherenčnej dĺžky a hĺbky vniku (pozri ďalej časť 1.3.3 a 1.3.4).

#### 13.7 Termodynamické veličiny

Fermiho-Diracova rozdeľovacia funkcia  $f_{\boldsymbol{k}} = (e^{\beta E_{\boldsymbol{k}}} + 1)^{-1}$  pre obsadenie kvázičasticových stavov supravodiča bude teda daná hodnotou energetickej medzery, ktorá vystupuje vo výraze pre excitačnú energiu $E_{\boldsymbol{k}}$ . Entropia plynu takýchto fermiónov je tu definovaná ako

$$S_{\rm S} = -2k \sum_{k} \left[ (1 - f_k) \ln(1 - f_k) + f_k \ln f_k \right] .$$
 (13.61)

Pomocou entropie môžeme vyjadriť elektrónovú tepelnú kapacitu supravodiča

$$C_{\rm S} = T \frac{dS_{\rm S}}{dT} = -\beta \frac{dS_{\rm S}}{d\beta} = 2\beta k \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial \beta} \ln \frac{f_{\boldsymbol{k}}}{1 - f_{\boldsymbol{k}}} = 2\beta k \sum_{\boldsymbol{k}} -\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial E_{\boldsymbol{k}}} \left( E_{\boldsymbol{k}}^2 + \frac{1}{2}\beta \frac{d\Delta^2}{d\beta} \right).$$
(13.62)

Prvý člen popisuje jednoduché energetické prerozdelenie kvázičastíc pri zmene teploty a druhý člen zaratúva vplyv teplotne závislej energetickej medzery na toto prerozdelenie. Pre nízke teploty  $T \ll T_c$ , kde je  $\Delta \gg kT$  budú oba členy exponenciálne malé a teda tepelná kapacita bude klesať s teplotou exponenciálne, ako to bolo spomínané vyššie. V opačnej limite, pre teploty blízke kritickej, pôjde  $\Delta(T) \rightarrow 0$  a

•]	•	99
J	0	0

excitačná energia $E_k$ sa zredukuje na  $\varepsilon_k.$  Potom sa stane z prvého člena elektrónová tepelná kapacita normálneho stavu

$$C_{\rm N} = \gamma T = \frac{2\pi^2}{3} N(0) k^2 T , \qquad (13.63)$$

ktorá je spojitá pri  $T_c$ . Druhý člen vykazuje pre  $T = T_c$  nespojité správanie. Pod touto teplotou je druhý člen konečný, keďže  $d\Delta^2/dT$  má vysokú hodnotu, ale pre  $T > T_c$ , kde je  $\Delta = 0$ , je nulový. Teda tepelná kapacita supravodiča bude mať pri kritickej teplote nespojitosť. Veľkosť tejto diskontinuity  $\Delta C = (C_S - C_N)_{T_c}$  možno vypočítať z uvedených výrazov, ak sa prejde od sumovania ku integrovaniu.

$$\Delta C = N(0)k\beta^2 \left(\frac{d\Delta^2}{d\beta}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{-\partial f}{\partial |\xi|}\right) d\xi = N(0) \left(\frac{-d\Delta^2}{dT}\right)_{T_c}.$$
 (13.64)

Ak vezmeme BCS hodnotu $\Delta(0) = 1,76~kT_{\rm c}$ , dostaneme  $\Delta = 9,4~N(0)k^2T_{\rm c}$ . Ak porovnáme túto hodnotu s hodnotou tepelnej kapacity v normálnom stave pri $T_{\rm c}$ , dostaneme hodnotu skoku v tepelnej kapacite pri prechode vzorky do supravodivého stavu

$$\frac{\Delta C}{C_{\rm N}} = \frac{9,4}{2\pi^2/3} = 1,43 , \qquad (13.65)$$

čo je ďalšia dôležitá "kánonická" BCS hodnota (obr. 1.9).

Tepelnú kapacitu v supravodivom stave pre ľubovoľnú teplotu možno získať iba numericky. Aká bude zmena vnútornej energie U pri prechode do supravodivého stavu? V bode prechodu budú hodnoty  $U_{\rm N}$  a  $U_{\rm S}$  rovnaké a rovné hodnote  $U_{\rm N}(0) + 1/2\gamma T_{\rm c}^2$ . Potom

$$U_{\rm S}(T) = U_{\rm N}(0) + 1/2\gamma T_{\rm c}^2 - \int_T^{T_{\rm c}} C_{\rm S} dT$$
(13.66)

a Gibbsova voľná energia sa vypočíta ako

$$G_{\rm S}(T) = U_{\rm S}(T) - TS_{\rm S}(T)$$
 (13.67)

Vyššie sme ukázali, že rozdiel voľných energií je

$$G_{\rm N} - G_{\rm S} = \frac{\mu_0}{2} H_{\rm c}^2(T)$$
 (13.68)

a  $G_{\rm N}(T) = U_{\rm N}(0) - 1/2\gamma T^2$ . Entropia, tepelná kapacita, vnútorná energia a Gibbsova voľná energia v supravodivom stave a normalizované na hodnotu pri $T_{\rm c}$ sú ukázané na obrázku. Hodnoty kritického termodynamického poľa možno zmerať s veľmi vysokou presnosťou. Potom možno použiť vyššie uvedené termodynamické vzťahy na testovanie napr. platnosti predpovedí BCS teórie pre ten ktorý supravodič.

#### 13.8 Supravodivosť so silnou väzbou

V pôvodnej teórii BCS sa predpokladalo, že elektróny môžu byť popísané ako dobre definované kvázičastice s dlhou dobou života. Elektrónelektrónová interakcia bola aproximovaná príťažlivým, izotropným potenciálom -V, pôsobiacim medzi elektrónmi z úzkeho energetického pásu okolo  $\varepsilon_{\rm F}$  šírky  $2\hbar\omega_{\rm c}$ . V dôsledku toho vo vnútri tohoto pásu energetická medzera má konštantnú hodnotu.

U supravodičov so silnou väzbou je elektrón-fonónová in-



Obr. 13.9: Porovnanie termodynamických veličín v supravodivom a normálnom stave. Keďže ide o fázový prechod 2. druhu, sú veličiny S, U, G v bode prechodu spojité. Naviac, strmosť  $G_{\rm eS}$  a  $G_{\rm eN}$  je v bode prechodu rovnaká, keďže platí  $\partial G/\partial T = -S$ .

terakcia tak silná, že elektrónové excitácie už nie sú dobre definované. Doba života excitácie (s energiou rádu Debyeovej energie) je tak krátka, že šírka stavu (definovaná pološírkou  $\Lambda = \hbar/\tau$ , kde  $\tau$  je doba života) je rádu samotnej excitačnej energie. Stav už nemôžeme popísať pomocou "kvázivoľných elektrónov". Preto pri výpočte energetickej medzery pomocou nasledujúcich vzťahov nemôžeme predpokladať izotropnosť a konštantnosť interakčného potenciálu a energetickej medzery. Energetickú medzeru podľa Eliašberga [11] určí výraz

$$\Delta(E) = \frac{1}{Z(E)} \int_{0}^{\hbar\omega_{\rm c}} Re \frac{\Delta(E')}{\sqrt{E'^{2} - \Delta^{2}(E')}} [K_{+}(E, E') - K_{\rm c}] dE' , \qquad (13.69)$$

kde pre renormalizačný parameter  ${\cal Z}(E)$  platí

$$[Z(E) - 1]E = \int_0^\infty Re \frac{E'}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2(E')}} K_-(E, E')dE'.$$
(13.70)

Potenciál  $K_c(E, E')$  predstavuje coulombovskú zložku interakcie a  $K_{\pm}(E, E')$  charakterizuje sprostredkovanú (elektrón-fonónovú) interakciu podľa vzťahu

$$K_{\pm}(E,E') = N_{\rm N}(0) \int_0^\infty \alpha^2(\omega) F(\omega) \left[ \frac{1}{E' + E + \omega + i\Lambda} \pm \frac{1}{E' - E + \omega - i\Lambda} \right] d\omega ,$$
(13.71)

kde  $\alpha^2(\omega)$  je mierou energeticky závislej elektrón-fonónovej interakcie a  $F(\omega)$  je fonónová hustota stavov.

Zo závislosti  $\Delta(E)$  môžeme vypočítať hustotu elektrónových stavov

$$N(E) = N_{\rm N}(0) Re \left\{ \frac{E}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \right\} .$$
 (13.72)

Energetická medzera a teda aj supravodivá hustota stavov vykazujú nelinearity pri charakteristických energiách funkcie elektrón-fonónovej interakcie  $\alpha^2(\omega)F(\omega)$ . Hustotu stavov môžeme priamo merať pomocou spektier diferenciálnej vodivosti na NIS tunelových spojoch, kde N je normálna, S je supravodivá elektróda a I je izolátor. Experimentálne štúdium fonónových efektov tunelových spektier potvrdilo platnosť teórie silnej väzby (pozri obr. 1.10) [12].

#### 13.9 Bezmedzerová supravodivosť



Obr. 13.10: Supravodivá medzera a nelinearity elektrónfonónovej interakcie v olove v diferenciálnej vodivosti tunelového spoja medzi olovom a horčíkom.

Elektróny tvoriace cooperovské páry sa môžu rozptyľovať na rôznych nečistotách, prímesiach a nehomogenitách kryštalickej mriežky, čo vedie k zmenšeniu strednej voľnej dráhy elektrónov. Pri týchto rozptyloch dochádza ku zmene hybnosti kvázičastíc (hybnosť páru kvázičastíc bude rôzna od nuly), neurčitosť v energii elektrónov môže byť oveľa väčšia ako energetická medzera, takže vlnový vektor už nebude vhodný na kvantový popis elektrónových párov. Anderson ukázal [13], že Cooperove páry v tzv. "špinavej" limite (supravodič s nemagnetickými prímesmi a so strednou voľnou dráhou elektrónov menšou, ako je tzv. koherenčná dĺžka  $\xi_0$ , ktorá popisuje rozmer Cooperovho páru) sa spárujú z takých elektrónových stavov, v ktorých je už zahrnutý rozptyl s príslušnými časovo inverznými stavmi. Kritická teplota supravodičov v podstate nezávisí od koncentrácie nemagnetických prímesí a od neperiodickosti kryštalickej mriežky.

Kým nemagnetické prímesi pozmenia termodynamické vlastnosti supravodičov pomerne málo, prítomnosť prímesí s permanentným magnetickým momentom má za následok značné zmeny. Abrikosov a Gorkov formulovali prvú úspešnú teóriu pre supravodiče s magnetickými prímesmi [14]. Táto teória bola rozšírená viacerými autormi. Podrobnosti možno nájsť v knihe de Gennesa [15].

Prítomnosť magnetických prímesí potlačí kritickú teplotu  $T_c$ . S rastúcou koncentráciou magnetických prímesí  $T_c$  klesá takmer lineárne (podobne ako  $\Delta$ ), a od istej koncentrácie prímesí  $c_{kr}^i$  hodnota  $\Delta$  klesá k nule rýchlejšie, ako  $T_c$ .  $T_c$  dosiahne nulovú hodnotu pri koncentrácii  $c_{kr}$ . Medzera vymizne z excitačného spektra pri koncentrácii  $c_{kr}^i$  a interval koncentrácií  $c_{kr}^i < c < c_{kr}$  vymedzuje oblasť tzv. bezmedzerovej supravodivosti. V prípade rozbíjania Cooperových párov napr. pôsobením magnetických prímesí treba rozlíšovať medzeru v excitačnom spektre  $\Omega_G$ , ktorá nie je nevyhnutná pre existenciu supravodivosti a parameter usporiadania  $\Delta$ . V prípade, keď rozbíjanie párov nie je prítomné, sú tieto dve veličiny totožné. Závislosti  $\Delta, T_c$  a  $\Omega_G$  na zvyšujúcom sa rozbíjaní Cooperových párov vyjadrenom parametrom  $\alpha$  (pozri ďalej) sú ukázané na obr. 1.11a.

Pri riešení problému sa vychádzalo z toho, že magnetické prímesi sú lokalizované v kondenzáte supravodivých elektrónov. Každý spin prímesi S (s lokalizovaným magnetickým momentom) je spojený so spinom  $\sigma$  vodivostného elektrónu výmennou interakciou  $JS\sigma$ . Spin elektrónu sa môže preklopiť a symetria páru voči časovej inverzii bude porušená, doba života páru  $\tau$  sa stáva konečnou (efekt rozbíjania párov). Neurčitosť v energii  $2\alpha = \hbar/\tau$  spôsobuje existenciu stavov vo vnútri energetickej medzery. To vyplýva aj zo spektra hustoty elementárnych elektrónových excitácií, ktoré v tzv. špinavej limite ( $l < \xi_0$ ) a za prítomnosti magnetických prímesí (kde  $\alpha$  je parameter rozbíjania elektrónových párov) môžeme vypočítať zo vzťahu

$$N(\omega) = N_{\rm N}(0) Re \frac{u}{(u^2 - 1)^{1/2}} , \qquad (13.73)$$

kde súčasne platí

$$u\Delta = \omega + i2\alpha \frac{u}{(u^2 - 1)^{1/2}}$$
(13.74)

a pomocný parameter u je definovaný ako podiel renormalizovaných hodnôt frekvencie  $\omega$  a parametra usporiadania  $\Delta$ . Závislosť hustoty elementárnych excitácií na parametri  $\alpha$  (v redukovaných súradniciach) je znázornená na obrázku 1.11b. Z neho vyplýva, že supravodivý stav existuje aj v tom prípade, keď už medzera  $\Omega_{\rm G}$  v excitačnom spektre neexistuje. Preto základnou vlastnosťou supravodivosti je nenulový parameter usporiadania a nie existencia energetickej medzery  $\Omega_{\rm G}$ .

Pre oblasť bezmedzerovej supravodivosti, v blízkosti prechodu do normálneho stavu de Gennes pre hustotu elementárnych excitácií odvodil vzťah

$$N(\omega) = N_{\rm N}(0) \left[ 1 + \frac{\Delta^2}{2} \frac{\omega^2 - \alpha^2}{(\omega^2 - \alpha^2)^2} \right] , \qquad (13.75)$$

ktorý je podmienený malými hodnotami parametra usporiadania  $\Delta < \alpha = \hbar/(2\tau)$ . Teplotnú závislosť parametra rozbíjania párov určí výraz

$$\ln(T_{\rm c}/T_{\rm c}^*) = \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{\pi k_{\rm B}T_{\rm c}^*}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right) , \qquad (13.76)$$

kde $T_{\rm c},T_{\rm c}^*$ sú kritické teploty supravodiča bez magnetických prímesí resp. s magnetickými prímesmi a $\Psi$ je logaritmická derivácia gama funkcie.



Obr. 13.11: a) Efekt rozbíjania supravodivých elektrónových párov na veľkosť parametra usporiadania  $\Delta$ , kritickej teploty  $T_{\rm c}$  a medzery excitačného spektra  $\Omega_{\rm G}$ , b) hustota supravodivých elektrónových stavov  $N(\omega)$  pre rôzne hodnoty parametra rozbíjania  $\alpha$  v normalizovaných súradniciach.

Symetriu elektrónových párov voči časovej inverzii môžu porušiť aj iné mechanizmy, napr. pôsobenie vonkajšieho magnetického poľa, Pauliho paramagnetizmus, prechod elektrického prúdu supravodivou tenkou vrstvou, atď. K bezmedzerovej supravodivosti môžu viesť aj také interakcie, v ktorých elektrónové páry sú rozbíjané dôsledkom priestorovej zmeny parametra usporiadania. Experimentálny dôkaz faktu, že veľkosť energetickej medzery sa zmenšuje rýchlejšie, ako kritická teplota a dôkaz zaplňovania energetickej medzery v excitačnom spektre boli podané pomocou tunelových experimentov.

#### 13.10 Tunelovanie

Tunelový spoj tvoria dve elektródy s vysokou elektrickou vodivosťou oddelené vrstvou izolátora hrúbky  $t_0$  s bariérou výšky  $U_{\rm B}$ . Ak uvažujeme bariéru ako jednorozmerný potenciál U(x) v intervale  $0 \le x \le t_0$  a elektrónovú vlnu prichádzajúcu zľava ako  $\exp(+i\mathbf{k}\mathbf{r}), \mathbf{k} = (k_{\rm x}, k_{\rm y}, k_{\rm z})$  s energiou  $E = E_{\rm x} + E_{\rm t}$ , kde  $E_{\rm x} = \hbar^2 k_{\rm x}^2/2m$  a  $E_{\rm t} = E - E_{\rm x}$ , potom koeficient pravdepodobnosti prechodu cez bariéru D) získame riešením Schrödingerovej rovnice

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + U(x)\psi = E\psi$$
(13.77)

v troch oblastiach: x < 0;  $0 \le x \le t_0$ ;  $x > t_0$ . Tiež musí platiť, že  $\psi$  a jej derivácia musia byť spojité na hraniciach  $x = 0, t_0$ . V prípade, ak  $U(x) = U_0$ , je vlnová funkcia vo vnútri bariéry rovná výrazu  $\exp[i(k_y y + k_z z)][B \exp(-\kappa x) + B \exp(\kappa x)]$ ,

kde

$$\kappa = \left(\frac{2m}{\hbar^2} [U(x) - (E - E_{\rm t})]\right)^{1/2}$$
(13.78)

je konštanta útlmu za predpokladu  $U(x) = U_0$ . V limite  $\kappa t_0 >> 1$  je výsledná pravdepodobnosť prechodu  $D = \beta^2 \exp(-2\kappa t_0)$ s prefaktorom  $\beta = \kappa k_{\rm x} (\kappa^2 + k_{\rm x}^2)^{-1}$ .

Ak vezmeme napr. tunelujúci elektrón s hmotnosťou blízkou voľnému elektrónu  $m=m_0$  a tiež bariéru s hrúbkou  $t_0 = 2$  nm, potenciálom  $U_0-E_x=1$  eV a  $\beta=1$ , dostaneme nízku pravdepodobnosť prechodu  $D \sim 10^{-9}$ . Teda, elektródy tunelového spoja sú slabo viazané takouto bariérou. Dôležitou charakteristikou koeficientu prenosu je jeho silná závislosť na uhle  $\theta$ , ktorý zviera tunelujúci elektrón s normálou na bariéru - s ostrým píkom  $T^2$  pre  $\theta = 0$ . Pre malé uhly, kde  $\theta \approx \sin \theta$  platí

$$D(\theta) = D(0) \exp\left(\frac{-\kappa t_0 E}{U_0 - E} \frac{\theta}{2\pi}\right), \qquad (13.79)$$

kde uhol  $\theta$  je udávaný v radiánoch. Ak v uvedenom príklade špecifikujeme  $U_0 = 6 \text{ eV}$ a E = 5 eV, potom bude hodnota  $D2 \ 1/e$ -krát menšia pri uhle  $\theta \approx 7^{\circ}$ . Všimnime si tiež, že koeficient prechodu potenciálovou bariérou závisí exponenciálne na hmotnosti tunelujúcej častice a teda s rastúcou hmotnosťou častice prudko klesá.

V reálnych tunelových spojoch môže mať bariéra trapezoidálny tvar a svoj sklon mení so zmenou priloženého napätia V. To vedie ku slabej parabolickej závislosti tunelovej vodivosti dI/dV(V) s centrom mimo nulové napätie V = 0.

Vysvetlenie tunelového javu možno dať napr. pomocou metódy prechodového hamiltoniánu. V tomto prístupe treba nájsť poruchový operátor  $H^D$ , prechodový hamiltonián, ktorý riadi prechod elektrónu cez tunelovú bariéru podľa Fermiho Zlatého pravidla.

Vlnové funkcie elektrónov na ľavej a pravej strane bariéry jednotkovej plochy s ostrou hranou, hrúbkou  $t_0$  a  $U(x)=U_0$  sú stojaté vlny  $\psi_{\rm L}, \psi_{\rm R}$ , kde

$$\psi_{\rm L} = t_0^{-1/2} \exp[i(k_{\rm y}y + k_{\rm z}z)] \sin(k_{\rm x}x + \gamma) \qquad x < 0 \qquad (13.80)$$

$$\psi_{\rm L} = 1/2t_0^{-1/2} \exp[i(k_{\rm y}y + k_{\rm z}z)]\beta \exp(-\kappa x) \qquad 0 < x < t_0 \qquad (13.81)$$

$$\psi_{\rm L} = 0 \qquad x > t_0 \tag{13.82}$$

s analogickými výrazmi pre $\psi_{\rm R}$ . Bardeen [16] ukázal, že maticový element prechodu Mmožno získať výpočtom operátora toku pravdepodobnosti medzi funkciami  $\psi_{\rm L}$ a $\psi_{\rm R}$ v ľubovoľnom bode v oblasti bariéry:

$$M_{\rm kR,kL} = -i\hbar < \psi_{\rm R} |j|\psi_{\rm L} > . \qquad (13.83)$$

Tento výraz bol vyhodnotený Harrisonom [17] ako

$$D = |M_{\rm kR,kL}|^2 = \delta(k_{\rm tR}, k_{\rm tL})\beta^2 \exp(-2K)(4\pi^2 N_{\rm xL} N_{\rm xR})^{-1} .$$
(13.84)

Delta funkcia spôsobí zachovanie priečneho vlnového vektora  $k_{\rm t}$  a  $N_{\rm xL},~N_{\rm xR}$ sú jednorozmerné hustoty stavov

$$N_x \sim \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial E}{\partial k_{\rm x}}\right)^{-1} \tag{13.85}$$

na oboch stranách bariéry. Pre WKB aproximáciu platí  $\beta^2 = 1$ , inak,  $U(x) = U_0$  a  $K = \kappa t_0$  pre ostrú hranicu. Prúdovú hustotu získame sčítaním medzi všetkými obsadenými počiatočnými stavmi a voľnými konečnými stavmi:

$$J = 2e\Sigma \frac{2\pi}{\hbar} |T_{RL}|^2 [f_{\rm L}(1 - f_{\rm R}) - f_{\rm R}(1 - f_{\rm L})] = \frac{4\pi e}{\hbar} \Sigma |T_{RL}|^2 [f(E) - f(E + eV)] ,$$
(13.86)

kde  $f(E) = [1 + \exp((E - \varepsilon_{\rm F})/k_{\rm B}T)]^{-1}$  je Fermiho-Diracova funkcia.

#### 13.10.1 Tunelovanie medzi dvomi systémami voľných elektrónov

Ak máme na oboch stranách tunelovej bariéry I kov (systém voľných elektrónov N), ide o NIN tunelový prechod. Tu môžeme všetky tri súradnice hybnosti  $\mathbf{k} = (k_{\rm x}, k_{\rm y}, k_{\rm z})$ , ako aj energie považovať za nezávislé, môžeme ukázať, že tunelový prúd neobsahuje informáciu o elektrónovej hustote stavov, ale iba o tunelovej bariére. Ak prejdeme od sumácie cez všetky hodnoty  $k_{\rm L}, k_{\rm R}$  k integrálu:  $\Sigma k_{\rm x} \rightarrow \int dk_{\rm x} \rightarrow \int (\partial E/\partial k_{\rm x})^{-1} dE$  a dosadíme za koeficient prechodu  $T^2$  výraz ..., jednorozmerné hustoty stavov v koeficiente prechodu a v integračnej premennej  $(\partial E/\partial k_{\rm x})^{-1}$  sa navzájom zrušia, pričom dostaneme výraz

$$J = \frac{2e}{h} \int \frac{d^2k_{\rm t}}{4\pi^2} exp(-2K) \int_{-\infty}^{\infty} [f(E) - f(E + eV)] dE .$$
 (13.87)

Integrál cez priečne vlnové vektory  $k_{\rm t}$  silne preferuje (ako bolo ukázané vyššie) malé uhly  $\theta \approx 0$ .

Ak predpokladáme konštantnú hodnotu potenciálu v bariére, čo je dobrý predpoklad, ak je  $U_{\rm B} = U(x) - \varepsilon_{\rm F}$  dostatočne veľké číslo, potom to vedie ku lineárnej voltampérovej charakteristike.

Keď predpokladáme štvorcový tvar bariéry so zarátaním efektu vonkajšieho predpätia V (čo sa prejavuje na lineárnom spáde potenciálu v oblasti bariéry)

$$U(x,V) = \Phi_1 - \frac{eVx}{t_0} , \qquad (13.88)$$

kde  $t_0$  je šírka a  $\Phi_1$  je výška štvorcovej bariéry, I - V charakteristika NIN prechodu pri nízkych napätiach bude lineárna so slabou kubickou korekciou.

Systematicky bol študovaný vplyv geometrie prechodu a asymetrie tunelovej bariéry. Napr. experimentálne niekedy pozorovaný slabý posun minima tunelovej vodivosti vzniká na asymetrickej bariére. Pri určení bariérového potenciálu okrem efektu vonkajšieho predpätia asymetriu bariéry môžeme zaviesť v trapezoidálnom tvare s rôznymi hodnotami prikontaktných potenciálov  $\phi_1$  a  $\phi_2$ .

$$U(x,V) = \phi_1 + (\phi_2 - eV - \phi_1)x/t_0 . \qquad (13.89)$$



Všimnime si teraz prípad, ak na jednej strane bariéry je namiesto systému voľných elektrónov supravodič S. Budeme teda skúmať NIS tunelový prechod (pozri obr. 1.12). Reálna energia kvázičastice s hybnosťou k bude E=  $(\varepsilon_k^2 +$  $\Delta^2$ )<sup>1/2</sup> a líši

sa od energie

 $\varepsilon_k$ , ktorú by mala kvázičas-



v supravodiči rovná Obr. 13.12: Ilustrácia tunelovania kvázičastíc medzi normálnym kovom a supravodičom. Na horizontálnej osi sú zobrazené kvázičasticové hustoty stavov, na vertikálnej zase energie. Na obr. a) je napätie na tunelovom spoji je V = 0 a prúd I = 0. Na obr. b) je napätie  $V = \Delta/e$  a tunelový prúd je nenulový.

tica bez supravodivej interakcie. Potom treba urobiť ďalšiu zámenu premenných:

$$\Sigma k_{\rm x} \to \int \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\rm x}}\right)^{-1} \frac{\partial \varepsilon}{\partial E} dE = \int \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_{\rm x}}\right)^{-1} \frac{E}{\left(E^2 - \Delta^2\right)^{1/2}} dE .$$
(13.90)

Výsledná prúdová hustota (vo WKB aproximácii) potom bude

$$J = \frac{2e}{h} \int \frac{d^2k_{\rm t}}{4\pi^2} \exp(-2K) \int_{-\infty}^{\infty} Re(\frac{|E|}{(E^2 - \Delta^2)^{1/2}}) [f(E) - f(E + eV)] dE , \quad (13.91)$$

priamo úmerná normalizovanému excitačnému spektru supravodiča. Pod reálnou časťou sa tu rozumie fakt, že supravodivá normalizovaná hustota stavov  $N_{\rm S}(E)$  sa rovná  $|E|/(E^2 - \Delta^2)^{1/2}$  pre  $|E| > \Delta$ , resp. nule pre  $|E| < \Delta$ .

Uhlová závislosť  $D(\theta)$  umožňuje v priaznivých prípadoch známej geometrie tunelového spoja získať na monokryštáloch anizotropiu energetickej medzery. Veľkou výhodou tunelovej spektroskopie supravodičov je fakt, že po normalizácii meranej tunelovej vodivosti sa môžeme všetkých komplikácií súvisiacich s vlastnosťami bariéry, alebo vplyvu normálnej elektródy zbaviť. Diferenciálna merná vodivosť bude mať tvar (pozri obr. 1.13)

$$\frac{dJ}{dV} = \sigma_{\rm S}(V) = -\frac{2e^2}{h} \int \frac{d^2k_{\rm t}}{4\pi^2} \exp(-2K) \int_{-\infty}^{\infty} N_{\rm S}(E) \frac{\partial f}{\partial E}(E+eV) dE.$$
(13.92)

Derivácia Fermiho funkcie je zvonová rozmazávacia funkcia so šírkou v polvýške rovnou 3,52  $k_{\rm B}T$ , resp. je rovná  $\delta$ -funkcii pre T = 0 K. Ak teda uvážime túto rovnicu, ako aj obdobnú deriváciu rovnice pre prúd NIN spoja, normalizovaná vodivosť tunelového spoja NIS bude mať tvar

$$\frac{\sigma_{\rm S}(V)}{\sigma_{\rm N}(V)} = \int_{-\infty}^{\infty} N_{\rm S}(E) \frac{\partial f}{\partial E} (E + eV) dE \to N_{\rm S}(eV) \quad (T \to 0)$$
(13.93)

a teda pri nízkych teplotách bude priamo merať supravodivú normalizovanú hustotu stavov.





Obr. 13.13: Voltampérová charakteristika a diferencálna vodivosť NS tunelového spoja v závislosti na napätí .

stupovať konvolúcia dvoch supravodivých excitačných spektier.

# 13.10.3 Tunelovanie medzi systémom voľných elektrónov a kvázi dvojrozmerným systémom

Niektoré supravodiče sú extrémne anizotropné. Niektoré vysokoteplotné kupráty vykazujú supravodivosť prakticky v jedinej atomárnej rovine. Ide teda o kvázi dvojrozmerné systémy. Ak jedna z elektród tvoriacich tunelový spoj je tvorená takýmto kvázi dvojrozmerným systémom, ktorý je paralelný tunelovej bariére, možno ukázať, že diferenciálna tunelová vodivosť obsahuje dvojrozmernú hustotu stavov takéhoto supravodiča. Celkový tunelový prúd v zhode so vzťahom (3.36) možno prepísať ako

$$J = \frac{2e}{(2\pi)^3\hbar} \int dk_{\rm x} d^2 k_{\rm t} \frac{\partial E}{\partial k_{\rm x}} \left[ f(E) - f(E + eV) \right] D(E, k_{\rm t}) , \qquad (13.94)$$

kde koeficient prechodu bariéry  $D(E, k_t)$  je funkciou E a  $k_t$ , alebo  $E_t$  a závisí tiež na vonkajšom napätí V a vo WKB aproximácii je rovný  $D = \exp(-2\kappa t_0)$ . Ak integráciu cez k zameníme za integráciu cez E, dostaneme pre nulovú teplotu výraz

$$J = \frac{2e}{h} \int_{0}^{eV} dE \int_{0}^{E} N_{\rm t}(E) D(E, E_{\rm t}) dE_{\rm t} , \qquad (13.95)$$

kde  $N_t(E_t)$  je dvojrozmerná hustota stavov. BenDaniel a Duke [18] ukázali, že v prípade, ak tunelový spoj tvorí z jednej strany dvojrozmerný systém paralelný s tunelovou bariérou, tento výraz možno vyjadriť ako

$$J = \frac{2e}{h} \int \gamma D(E_{\rm x}) N_{\rm t} (E - E_{\rm x}) dE \qquad (13.96)$$

a diferenciálnu vodivosť ako

$$\frac{dJ}{dV} = \frac{2e^2}{h} \gamma D(E_{\rm x}) N_{\rm t}(eV - E_{\rm x}) + \frac{2e}{h} \frac{dD}{dV} \gamma \int D(E_{\rm x}) N_{\rm t}(E - E_{\rm x}) dE .$$
(13.97)

Konštanta  $\gamma$  určuje v zmysle vzťahu  $\gamma D(E) = \hbar/\tau$  tunelovací čas daného stavu cez bariéru. Pozorovanie dvojrozmernej hustoty stavov je teda možné v prípade, ak je koeficient prechodu málo závislý na priloženom napätí.

Uvedené vzťahy naznačujú, že v prípade tunelovej spektroskopie na kvázidvojrozmerných systémoch je možné merať stredovanú (cez všetky hodnoty  $\mathbf{k}_{t} = (k_{y}, k_{z})$ ) planárnu hustotu stavov pomocou tunelovania v smere kolmom na roviny tvoriace dvojrozmerný systém. To môže mať dôsledky pri tunelovacích meraniach na kvázi dvojrozmerných supravodivých kuprátoch.

### 13.10.4 Tunelovanie v prípade anizotropnej energetickej medzery

Vlnovú funkciu Cooperovho páru $\Psi\left(\boldsymbol{r,R}\right)$ možno napísať v tvare

$$\Psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R}) = \Phi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{R}) \quad , \tag{13.98}$$

kde  $\Phi(\mathbf{r})$  opisuje vnútornú štruktúru páru a  $|\mathbf{r}|$  je vzdialenosť medzi spárovanými elektrónmi;  $\psi(\mathbf{R})$  určuje pohyb ťažiska Cooperových párov vzhľadom na počiatok súradnicovej sústavy, ktorý je vo vzdialenosti  $|\mathbf{R}|$ .  $\Phi(\mathbf{r})$  obsahuje informáciu o mikroskopickej fáze a  $\psi(\mathbf{R})$  sa vzťahuje ku makroskopickým prejavom supravodivosti, ako Josephsonov a Meissnerov efekt. Ďalej platí, že  $\Phi(\mathbf{r}) = \sum \Phi(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , pričom  $\Phi(\mathbf{k})$  je priamo zviazaná s parametrom usporiadania  $\Delta(\mathbf{k})$ vzťahom  $\Phi(\mathbf{k}) = \Delta(\mathbf{k}) / E(\mathbf{k})$ , kde  $E(\mathbf{k})$  je kvázičasticová energia v supravodivom stave:  $E(\mathbf{k}) = \sqrt{\varepsilon^2(\mathbf{k}) + \Delta^2(\mathbf{k})}$ . Teda symetria energetickej medzery odráža aj symetriu vlnovej funkcie Cooperovho páru.

V pôvodnej BCS teórii sa predpokladala konštantná hodnota energetickej medzery a teda s-vlnové párovanie. Mnohé experimentálne údaje naznačujú, že energetická medzera môže byť v niektorých nových typoch supravodičov anizotropná. Pokiaľ bude mať Cooperov pár d symetriu, pre isté smery v  $\mathbf{k}$  priestore bude hodnota medzery nulová  $\Delta(\mathbf{k}) = 0$  a samozrejme supravodivá hustota stavov bude bezmedzerová. V takýchto prípadoch budú mať vzťahy pre tunelový prúd iný tvar. Ako uvádza T. Hasegawa [19], v experimente sa anizotropia medzery môže prejaviť dvojakým spôsobom. Ak vezmeme tunelový spoj NIS so supravodičom s anizotropnou energetickou medzerou, bude tunelový prúd pre prípad T = 0 K mať tvar

$$I = \pm 2\pi e \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} |T_{\mathbf{k}\mathbf{p}}|^2 \left(1 \pm \frac{\varepsilon(\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})}\right) \theta\left(|eV| - E(\mathbf{k})\right) \delta\left(\varepsilon_{\mathrm{N}}\left(\mathbf{p}\right) - eV \pm E(\mathbf{k})\right),$$
(13.99)

9	1	9
o	4	Э.

kde  $E(\mathbf{k}) = \left(\varepsilon (\mathbf{k})^2 + \Delta (\mathbf{k})^2\right)^{1/2}$ ,  $\varepsilon_{\rm N}(\mathbf{p})$  je energia kvázičastice v normálnej elektróde,  $\theta$  je schodkovitá funkcia,  $\mathbf{k}, \mathbf{p}$  sú vlnové vektory na strane supravodiča, resp. normálneho kovu. Ak predpokladáme, že rozhranie medzi supravodičom a normálnou elektródou je dokonale ploché (planárny prechod), priečne momenty budú zachované (koherentný tunelový proces). Potom maticový element prechodu bude mať tvar

$$\left|T_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{p}}\right|^{2} = C \left|\frac{\partial\varepsilon\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial k_{\mathrm{x}}}\right| \left|\frac{\partial\varepsilon\left(\boldsymbol{p}\right)}{\partial p_{\mathrm{x}}}\right| \delta\left(k_{\mathrm{t}} - p_{\mathrm{t}}\right) \exp\left(-\frac{k_{\mathrm{t}}^{2}}{K}\right) , \qquad (13.100)$$

kde činiteľ K má tvar  $K^{-2} = \hbar t_0 / (\sqrt{2m\phi})$ , a  $t_0$ , resp.  $\phi$  sú šírka a výška potenciálovej bariéry. Potom tunelový prúd bude

$$I = \pm 2\pi eC \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial \varepsilon \left( \mathbf{k} \right)}{\partial k_{\mathrm{x}}} \right| \left( 1 \pm \frac{\varepsilon \left( \mathbf{k} \right)}{E \left( \mathbf{k} \right)} \right) \theta \left( |eV| - E \left( \mathbf{k} \right) \right) \exp \left( -\frac{k_{\mathrm{t}}^2}{K} \right) .$$
(13.101)

Výsledná tunelová vodivosť bude závisieť na kryštalickej orientácii tunelového prechodu.

Na druhej strane, ak rozhranie obsahuje významné nerovnosti, alebo prevládne neusporiadanosť, dominantné bude **nekoherentné tunelovanie**. Potom

$$\left|T_{\boldsymbol{k}p}\right|^{2} = P \left|\frac{\partial \varepsilon\left(\boldsymbol{k}\right)}{\partial k_{x}}\right| \left|\frac{\partial \varepsilon\left(\boldsymbol{p}\right)}{\partial p_{x}}\right| \overline{D}, \qquad (13.102)$$

$$I = \pm 2\pi e N_{\rm N} (0) P \overline{D} \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{\partial \varepsilon (\mathbf{k})}{\partial k_{\rm x}} \right| \left( 1 \pm \frac{\varepsilon (\mathbf{k})}{E(\mathbf{k})} \right) \theta \left( |eV| - E(\mathbf{k}) \right) , \qquad (13.103)$$

kde  $\overline{D}$  je stredná hodnota exponenciálneho člena v rovnici (4.7) a P je konštanta. Potom bude tunelový prúd v podstate nezávislý na kryštalickej orientácii a tunelová vodivosť bude so značnou presnosťou priamo úmerná stredovanej kvázičasticovej hustote stavov. U supravodiča s d-vlnovou energetickou medzerou bude mať tunelová vodivosť aj v ideálnom prípade a pri veľmi nízkych teplotách nulovú hodnotu len pri nulovom napätí a pre malé napätia bude lineárne narastať.

#### 13.11 Teória Ginzburga a Landaua

Ginzburgova a Landauova teória supravodivosti je založená na Landauovej teórii fázových prechodov druhého druhu, ktorú autor vypracoval v tridsiatych rokoch 20. storočia. Landau si všimol, že pri fázovom prechode druhého druhu dochádza ku zmene symetrie v systéme. Napríklad magnet nad Curieho teplotou  $T_c$  nemá magnetický moment. Tento sa spontánne vyvinie pod  $T_c$ . V princípe môže výsledný magnetický moment smerovať ľubovoľným smerom a energia bude rovnaká, ale systém si spontánne vyberie jeden smer. Symetria sa teda naruší. V Landauovej

teórií je fázový prechod charakterizovaný parametrom usporiadania, ktorý je nulový v neusporiadanej fáze (nad  $T_c$ ) a v usporiadanej fáze nadobudne konečnú hodnotu. V prípade magnetika je takýmto parametrom usporiadania magnetizácia M(r).

Supravodivosť charakterizovali Ginzburg a Landau (GL) parametrom usporiadania  $\psi$ . Tento parameter má za úlohu charakterizovať supravodivosť rovnako ako magnetizácia vo feromagnete. V normálnom kovovom stave nad kritickou teplotou je  $\psi = 0$ . Teda,

$$\begin{split} \psi &= 0 \qquad T > T_{\rm c} \ , \\ \psi &= \psi(T) \neq 0 \qquad T < T_{\rm c} \ . \end{split} \tag{13.104}$$

GL definovali parameter usporiadania ako komplexné číslo, totožné s makroskopickou vlnovou funkciou supravodiča, analogicky s prípadom supratekutého hélia-4. V roku 1950, keď bola publikovaná Ginzburgova a Landauova (GL) teória, mikroskopická teória supravodivosti ešte nebola známa, takže autori nepredpokladali supravodivosť so spárovanými elektrónmi. Ani fyzikálny význam komplexného parametra usporiadania  $\psi$  nebol vôbec jasný. Po vypracovaní BCS teórie Gorkov ukázal [20], že GL rovnice sa dajú odvodiť aj z mikroskopickej teórie a potvrdil platnosť GL prístupu v modifikovanej forme, so započítaním elektrónových párov ( t.j.  $m^* = 2m, e^* = 2e$ ). Zistil, že lokálna hodnota parametra energetickej medzery  $\Delta$ je úmerná parametru usporiadania  $\psi$  a časovo-priestorová variácia parametra usporiadania sa môže prejaviť len v objeme, minimálne porovnateľnom s koherenčnou dĺžkou. Štvorec  $|\psi|^2$  určuje hustotu Cooperových párov vo vzorke.

GL teória predpokladá hladkú závislosť voľnej energie (resp. jej hustoty) na parametri  $\psi$ . Keďže  $\psi$  je komplexné a voľná energia reálna, bude táto závisieť len na absolútnej hodnote  $|\psi|$ . Ďalej, ak  $\psi$  ide do nuly pri kritickej teplote  $T_c$ , možno voľnú energiu rozvinúť do Taylorovho radu v mocninách  $|\psi|$ . Pre teploty blízke  $T_c$  sa stačí obmedziť na prvé členy rozvoja

$$F_{\rm S}(T) = F_{\rm N}(T) + \alpha(T)|\psi(r)|^2 + 1/2\beta(T)|\psi(r)|^4 + \frac{\hbar^2}{2m^*}|\nabla\psi(r)|^2, \quad (13.105)$$

kde $F_{\rm S}(T)$ a $F_{\rm N}(T)$ sú hustoty voľnej energie v supravodivom, resp. normálnom stave.  $\alpha$  a  $\beta$ sú fenomenologické parametre teórie, u ktorých sa predpokladá hladká teplotná závislosť. Parameter  $m^*$ určuje energiu zviazanú s prítomnosťou gradientu parametra usporiadania a zodpovedá efektívnej hmotnosti kvantového systému s makroskopickou vlnovou funkciou $\psi$ , teda Cooperovmu páru.

Zoberme si prípad homogénneho supravodiča, kde sa parameter usporiadania nemení v priestore,  $\psi(r) = \psi$ , resp.  $\nabla \psi(r) = 0$ . Tu posledný člen uvedeného rozvoja voľnej energie vypadne. Parameter  $\beta$  musí byť kladný, aby mala voľná energia minimum ( $\partial F/\partial \psi = 0$ ). Ak si zobrazíme rozdiel voľných energií v supravodivom a normálnom stave, dostaneme dva typy kriviek v závislosti od znamienka parametra  $\alpha$ , ako je to uvedené na obrázku 1.14.

Obr. 13.14: Rozdiel voľných energií v supravodivom a normálnom stave v závislosti na parametri usporiadania v Ginzburgovej-Landauovej teórii pre  $T > T_c$  a  $T < T_c$ .

kritickú teplotu  $T_{\rm c}$ .

Koeficienty  $\alpha(T)$  a  $\beta$  môžeme tiež rozvinúť do Taylorovho radu, ako

$$\alpha(T) = a(T - T_c) + \dots$$
  
$$\beta(T) \approx b + \dots , \qquad (13.106)$$

kde a a b sú konštanty. Riešenie s minimálnou energiou bude cez tieto konštanty teda vyzerať

 $|\Psi|$ 

$$|\psi| = \sqrt{\frac{a}{b}(T_{c} - T)}$$
  $T < T_{c}$ ,  
 $|\psi| = 0$   $T > T_{c}$ . (13.107)

Teplotná závislosť takéhoto parametra usporiadania zobrazeného na obrázku 1.15 je kvalitatívne podobná vo všetkých prípadoch fázových prechodov druhého druhu popísaných obecnou Landauovou teóriou. Teda analogicky sa bude chovať magnetizácia v blízkosti Curieho bodu vo feromagnetiku popísanom Stonerovou teóriou, atď. Z uvedenej závislosti vyplýva, že hustota Cooperových párov, alebo hustota supravodivého kondenzátu, ktorá je $n_{\rm S} =$ 

346

 $|\Psi| = 0$  $T_{\rm c}$ Т

Obr. 13.15: Teplotná závislosť parametra usporiadania.

Ak je  $\alpha$  kladné, krivka má

minimum a teda stabilné rieše-

nie, len pre hodnotu  $\psi = 0$ . Pre záporné  $\alpha$  je minimum v

bode  $|\psi|^2 = -\alpha(T)/\beta(T)$ . V GL teórii zodpovedá  $\alpha > 0$  vysokým teplotám, nad  $T_{\rm c}$ , kde je  $\psi = 0$  a ide normálny, kovový

stav. So znižujúcou sa teplotou  $\alpha(T)$  klesá a v bode, kde dosiahne nulovú hodnotu, sa sys-

tém náhle zmení: Pod istou tep-

lotou, kde sa  $\alpha(T)$  stane zá-

porným, bude minimum voľnej

energie dosiahnuté pre  $\psi \neq 0$ . Takúto teplotu definujeme ako



 $|\psi|^2 \propto (T_{\rm c}-T)$ , pri teplote prechodu $T_{\rm c}$ zanikne. Tak to bude všade tam, kde je Landauova teória stredného poľa bezo zbytku platná. To je prípad klasických nízkoteplotných supravodičov. Inak je tomu u tzv. vysokoteplotných supravodičov, kde hrajú významnú úlohu tepelné fluktuácie. V týchto supravodičoch je amplitúda parametra usporiadania nenulová aj nad $T_{\rm c}$ .

Keďže je parameter usporiadania  $\psi$  komplexné číslo  $\psi = |\psi|e^{i\theta}$ , fáza môže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu. Nezávisle na jej hodnote bude celková voľná energia systému rovnaká. Avšak podobne, ako je to v prípade smeru magnetizácie feromagnetika, systém si po prechode do supravodivého stavu spontánne zvolí konkrétnu hodnotu fázy.

Po dosadení hodnoty parametra usporiadania ( $|\psi|^2 = -\alpha/\beta$ ) je hodnota minima voľnej energie, resp. hodnota minima rozdielu voľnej energie supravodivého a normálneho stavu rovná  $-\alpha(T)^2/2\beta(T)$ . Tento rozdiel musí zodpovedať kondenzačnej energii supravodiča

$$F_{\rm S}(T) - F_{\rm N}(T) = -\frac{a^2(T-T_{\rm c})^2}{2b} = -\mu_0 \frac{H_{\rm c}^2}{2} .$$
 (13.108)

Z toho dostaneme pre termodynamické kritické pole závislosť

$$H_{\rm c} = \frac{a}{\sqrt{\mu_o b}} (T_{\rm c} - T) \ . \tag{13.109}$$

Z voľnej energie derivovaním podľa teploty získame entropiu

$$S_{\rm S}(T) - S_{\rm N}(T) = -\frac{a^2}{b}(T_{\rm c} - T)$$
 (13.110)

Z toho vidíme, že v bode prechodu  $T = T_c$  nemá entropia skok a systém nevyžaruje ani nepohlcuje žiadne latentné teplo. Teda ide skutočne o fázový prechod druhého druhu. Ak zderivujeme entropiu, získame tepelnú kapacitu ako C = T dS/dT:

$$C_{\rm S} - C_n = Ta^2/b$$
  $T < T_{\rm c}$ ,  
 $C_{\rm S} - C_n = 0$   $T > T_{\rm c}$ . (13.111)

Teda tepelná kapacita má v bode prechodu skok

$$\Delta C = T_{\rm c} a^2 / b \ . \tag{13.112}$$

#### 13.11.1 Kvantovanie magnetického toku

Predstavme si pr<br/>stenec zo supravodiča, alebo masívny supravodič, v ktorom sa nachádza normálna oblasť, ce<br/>z ktorú preteká magnetický tok, ako je to naznačené na obrázku 1.16. Parameter usporiadania v supravodiči je daný ako<br/>  $\psi = |\psi|e^{i\theta}$ . V uvedenej geometrií supravodiča bude čiarový integrál gradientu fázy $\nabla \theta$  po dráh<br/>eC, ktorá obopína oblasť s magnetickým tokom, rovný<br/>  $2\pi N$ , kdeN je celé číslo. Vyplýva to z faktu, že parameter usporiadania musí byť v každom bode jednoznačný a teda integrál  $\int_2^1 d\mathbf{l}\nabla \theta = \theta_1 - \theta_2$  nezávislý na ceste, ako sa dostaneme z bodu 1 do bodu 2. Potom bude

$$\oint_C d\mathbf{l}\nabla\theta = 2\pi N \ . \tag{13.113}$$

9	1	7
0	4	1

V prítomnosti magnetického poľa bude gradient fázy parametra usporiadania ovplyvnený vektorovým potenciálom a teda daný ako

$$\nabla \theta' = \nabla \theta - \frac{2e}{\hbar} \boldsymbol{A}$$
. (13.114)

Uvážme, že  $2e/\hbar = 2e/(h/2\pi) = 2\pi/\Phi_0$ , kde  $\Phi_0 = h/2e = 2,0679 \text{ x } 10^{-15} \text{ Tm}^2$  je kvantum magnetického toku v supravodiči. Potom platí, že

$$\oint_C dl \nabla \theta' = 2\pi N = \frac{2\pi}{\Phi_0} \oint_C dl \boldsymbol{A} . (13.115)$$

S použitím Stokesovej vety dostaneme

$$\frac{2\pi}{\Phi_0} \oint_C d\mathbf{l} \mathbf{A} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{S'} d\mathbf{S} \nabla \mathbf{x} \mathbf{A} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \int_{S'} d\mathbf{S} \mathbf{B} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \Phi = 2\pi N , \qquad (13.116)$$

kde magnetický tok prechádza plochou S' obopnutou dráhou C. Odtiaľ plynie kvantovanie magnetického toku  $\Phi = N\Phi_0$ v jednotkách  $\Phi_0 = h/2e$ . Všimnime si, že do uvedenej úvahy vstúpil iba fakt, že supravodič je popísaný jedinou makroskopickou vlnovou funkciou, resp. parametrom usporiadania  $\psi$  a použili sme jediný parameter supravodiča a to náboj Cooperovho páru 2e. Podobnú argumentáciu možno použiť pre fázu jednoelektrónovej vlnovej funkcie, kde by však vo väzbe na vektorový potenciál vystupoval náboj e. V dôsledku toho má kvantovanie magnetického toku v jednoelektrónových systémoch dvojnásobnú periódu s magnetickým poľom.

#### 13.11.2 Ginzburgove-Landauove rovnice

V Ginzburgovom-Landau<br/>ovom výraze pre hustotu voľnej energie vystupuje gradient parametra usporiadania. Tomu z<br/>odpovedá v kvantovej mechanike operátor hybnosti. Ten má v prítomnosti magnetického poľa tvar

$$\boldsymbol{p} = (-i\hbar\nabla - 2e\boldsymbol{A}) , \qquad (13.117)$$

kde-2e je náboj Cooperovho páru a ostatné symboly majú svoj zvyčajný význam z kvantovej mechaniky, napr.  ${\cal A}$  je vektorový potenciál. Hustotu voľnej energie môžeme písať ako

$$F_{\rm S}(\boldsymbol{r},T) = F_{\rm N}(\boldsymbol{r},T) + \alpha(T)|\psi(\boldsymbol{r})|^2 + \beta(T)/2|\psi(\boldsymbol{r})|^4 + \frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla - 2e\boldsymbol{A})\psi(r)|^2 + \frac{B^2}{2\mu_0}.$$
(13.118)

348



тЭ

Obr. 13.16: Supravodič s normálnou oblasťou uprostred.

Prvé dva členy rozvoja po  $F_{\rm N}$  predstavujú zníženie voľnej energie supravodiča spôsobené vyšším stupňom usporiadania kondenzátu (kde  $\alpha$  a  $\beta$  sú rozvojové parametre), posledný člen odpovedá energii vytesneného magnetického poľa ~  $B^2$  a prostredný člen popisuje kinetickú energiu diamagneticky indukovaných prúdov ~  $A\psi^2$  a prípadného zvlnenia vlnovej funkcie ~  $(\nabla \psi)^2$ . Uvedené výrazy reprezentujú vždy hustotu energie. Preto je celková voľná energia systému rovná

$$F_{\rm S}(T) = \int_V d^3 \boldsymbol{r} F_{\rm S}(\boldsymbol{r}, T) \;.$$
 (13.119)

Definujme vektor  $\boldsymbol{G} \equiv (-i\hbar\nabla - 2e\boldsymbol{A})$  a magnetickú indukciu  $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ . Aby sme našli riešenie pre parameter usporiadania  $\psi$ , musíme minimalizovať voľnú energiu pomocou variácie  $\psi \to \psi + \delta \psi$  a  $\psi^* \to \psi^* + \delta \psi^*$ . Z podmienky rovnováhy  $\delta F_{\rm S}(T) = 0$  potom získame Ginzburgove-Landauove rovnice.

$$\delta F_{\rm S}(\boldsymbol{r},T) = \alpha(\psi + \delta\psi)(\psi^* + \delta\psi^*) - \alpha\psi\psi^* +\beta/2\left[(\psi + \delta\psi)^2(\psi^* + \delta\psi^*)^2 - \psi^2\psi^{*2}\right] +\frac{1}{2m^*}\left[\boldsymbol{G}(\psi + \delta\psi)\boldsymbol{G}^*(\psi^* + \delta\psi^*) - \boldsymbol{G}\psi\boldsymbol{G}^*\psi^*\right] .$$
(13.120)

Po ďalších úpravách dostaneme

$$\delta F_{\rm S}(T) = \int_{V} d^{3} \boldsymbol{r} \left( \alpha \psi + \beta |\psi|^{2} \psi + \frac{1}{2m^{*}} (-i\hbar \nabla - 2e\boldsymbol{A})^{2} \psi \right) \delta \psi^{*} + \int_{V} d^{3} \boldsymbol{r} \delta \psi \left( \alpha \psi + \beta |\psi|^{2} \psi + \frac{1}{2m^{*}} (-i\hbar \nabla - 2e\boldsymbol{A})^{2} \psi \right)^{*} .$$
(13.121)

Keďže požadujeme  $\delta F_{\rm S}(T)=0,$ musia byť výrazy pri členoch  $\delta\psi$ a $\delta\psi^*$ rovné nule. Tak získame prvú Ginzburgovu-Landauovu rovnicu, GL-I:

$$\alpha \psi + \beta |\psi|^2 \psi + \frac{1}{2m^*} (-i\hbar \nabla - 2e\mathbf{A})^2 \psi = 0 . \qquad (13.122)$$

Pre odvodenie druhej Ginzburgovej-Landauovej rovnice potrebujeme Maxwellovu rovnicu  $rot \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J}$ . V inej forme dostaneme:

$$\mu_0 \boldsymbol{J} = \nabla \mathbf{x} \boldsymbol{B} = \nabla \mathbf{x} (\nabla \mathbf{x} \boldsymbol{A}) = \nabla (\nabla \mathbf{x} \boldsymbol{A}) - \nabla^2 \boldsymbol{A} = -\nabla^2 \boldsymbol{A} , \qquad (13.123)$$

keďže v supravodiči platí  $\nabla \mathbf{x} \mathbf{A} = 0$ . Nižšie ukážeme, že člen  $-\frac{1}{\mu_0} \nabla^2 \mathbf{A}$  zodpovedá supravodivému prúdu  $\mathbf{J}_{\mathrm{S}}$ . Aby sme našli hľadanú rovnicu budeme minimalizovať voľnú energiu pomocou variácie vektorového potenciálu  $\mathbf{A} \to \mathbf{A} + \delta \mathbf{A}$ . Vo výraze pre voľnú energie ponecháme len členy závislé na vektorovom potenciále

$$\delta F_{\rm S}(\boldsymbol{r}, T, \boldsymbol{A}) = F_{\rm S}(\boldsymbol{r}, T, \boldsymbol{A} + \delta \boldsymbol{A}) - F_{\rm S}(\boldsymbol{r}, T, \boldsymbol{A}) . \qquad (13.124)$$

Supravodivý prúd vyvolaný magnetickým poľom je nájdený z derivácie

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{S}} = -\frac{\partial F_{\mathrm{S}}}{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})} \,. \tag{13.125}$$

To vedie ku druhej Ginzburgovej-Landauovej rovnici GL-II, t.j. rovnici pre supravodivý prúd

$$\boldsymbol{J}_{\rm S} = -\frac{e\hbar i}{m^*} \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right) - \frac{(2e)^2}{m^*} |\psi|^2 \boldsymbol{A} \ . \tag{13.126}$$

9	Λ	n
Э	4	9

## 13.12 Rovnica Londonovcov a hĺbka vniku $\lambda_{\rm L}$



Obr. 13.17: Prienik vonkajšieho magnetického poľa $B_{\rm a}$ do supravodiča s charakteristickou dĺžkou - hĺbkou vniku $\lambda.$ 

Obrázok 1.17 znázorňuje prejav základnej vlastnosti supravodiča, Meissnerov jav, cez magnetické tienenie. Vonkajšie magnetické pole do supravodiča neprenikne. Už dlhé roky pred Meissnerovým objavom sa Kamerlingh Onnes domnieval, že supravodivý prúd zahŕňa aj povrchové prúdy. A naozaj vonkajšie magnetické pole je odtienené práve povrchovými prúdmi. Prúdy však netečú iba na povrchu, ale prenikajú do hĺbky  $\lambda$ . Hĺbka, v ktorej prúdy tečú, musí byť pochopoiteľne konečná. Inak by hustota voľných nábojov vytvárajúcich konečný prúd v nekonečne tenkej po-

vrchovej vrstve musela byť nekonečná. Ale hustota náboja je daná hustotou voľných elektrónov  $n_e$  a tá je v kove približne 1 elektrón na atóm a teda konečná. V skutočnosti bude tienenie tým efektívnejšie, t.j.  $\lambda$  menšie, čím bude hustota voľných nábojov väčšia. De Haas Lorentz už v r. 1925 odvodil vzťah

$$\lambda = \sqrt{m_q/\mu_0 n_{\rm S} q^2} , \qquad (13.127)$$

kdeqje supravodivý náboj,  $m_q$ jeho hmotnolsť a $n_{\rm S}$ jeho hustota. Dnes vieme, že ide o charakteristiky Cooperových párov. Ak teda na povrchu supravodiča bude existovať elektrické pole, bude urýchlovať supravodivé elektróny bez trenia a odporu

$$m_q \dot{\boldsymbol{v}} = -q \boldsymbol{E} \;, \tag{13.128}$$

kde $\dot{\mathbf{v}}$  je časová derivácia rýchlosti <br/>aE je elektrické pole. Prúdová hustota j<br/>e $J=-n_{\rm S}qv$ a teda

$$\boldsymbol{E} = -\frac{m_q \dot{\boldsymbol{v}}}{q} = \frac{\mu_0 m_q \dot{\boldsymbol{J}}}{\mu_0 n_{\rm S} q^2} = \mu_0 \lambda^2 \dot{\boldsymbol{J}} .$$
(13.129)

Po priestorovej derivácii dostaneme

$$\operatorname{rot} \boldsymbol{E} - \mu_0 \lambda^2 \operatorname{rot} \times \boldsymbol{J} = 0 , \qquad (13.130)$$

čo s pomocou rot ${\cal E}=-\dot{\cal B}$ vedie ku $\mu_0\lambda^2 {\rm rot}\;\dot{J}+\dot{B}=0$ . S Maxwellovou rovnicou rot $B=\mu_0J$ to vedie ku výrazu

$$\lambda^2 \operatorname{rot} \operatorname{rot} \dot{\mathbf{B}} + \dot{\mathbf{B}} = 0. \tag{13.131}$$

Prvý člen rovnice je rovný  $-\nabla^2 \dot{B}$ . Takže dostaneme diferenciálnu rovnicu

$$\nabla^2 \dot{\boldsymbol{B}} = \frac{1}{\lambda^2} \dot{\boldsymbol{B}} \tag{13.132}$$

s riešením, kde  $\dot{B}$  exponenciálne padá od povrchu dovnútra supravodiča. Na odvodenie tohoto vzťahu sme použili bezodporový prenos náboja v supravodiči. Po časovej integrácii vyššie uvedenej rovnice dostaneme vzťah medzi statickým magnetickým poľom, resp. indukciou B a prúdom J plus neznámu integračnú konštantu. Ak ju položíme rovnú nule, dostaneme

$$\boldsymbol{B} = -\mu_0 \lambda_{\rm L}^2 \nabla \mathbf{x} \boldsymbol{J} , \qquad (13.133)$$

čo je slávna rovnica bratov Londonovcov. V nej sme premenovali  $\lambda$  na  $\lambda_L$ . Ak v rovnici Londonovcov zavedieme vektorový potenciál cez vzťah rot A = B dostaneme dôležitý vzťah medzi vektorovým potenciálom a supravodivým prúdom

$$\boldsymbol{J} = -\frac{1}{\mu_0 \lambda^2} \boldsymbol{A} = -\Lambda \boldsymbol{A} \ . \tag{13.134}$$

Tento vzťah pre supravodivý prúd je analogický Ohmovmu zákonu pre normálny kov  $J = \sigma E$ . V supravodiči v magnetickom poli vyvoláva stacionárny supraprúd vektorový potenciál. Faktor  $\Lambda$  zohráva funkciu analogickú vodivosti  $\sigma$  v normálnom kove.

Rovnica Londonovcov popisuje správne Meissnerov jav, ale jej odvodenie je čisto fenomenologické. Z prvých princípov sa ju podarilo odvodiť až po zverejnení teórie BCS v r. 1957.

Keď si uvedenú rovnicu znova prepíšeme s použitím Maxwellovej rovnice rot B =  $\mu_0 J$  do tvaru

$$\boldsymbol{B} + \lambda_{\rm L}^2 \text{rot rot B} = 0 \tag{13.135}$$

a prepíšeme ju ako

$$\lambda_{\rm L}^2 \nabla^2 \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B} , \qquad (13.136)$$

získame diferenciálnu rovnicu so známym riešením. Ak uvažujeme jednorozmerný prípad s magnetickým poľom  $B_{\rm a}$  aplikovaným v smere osi z pozdĺž povrchu supravodiča dostatočne veľkej dĺžky v smere y, bude pole v smere x do hĺbky supravodiča zanikať ako

$$B(x) = B_{\rm a} e^{-x/\lambda_{\rm L}}$$
 (13.137)

Teda  $\lambda_{\rm L}$  je naozaj tieniaca dĺžka, resp. hĺbka vniku, na ktorej je vonkajšie pole utlmené na hodnotu e-krát menšiu ako pole vonkajšie.  $\lambda_{\rm L} = \sqrt{m_q/\mu_0 n_{\rm S} q^2}$  je kontrolované materiálovou konštantou - hustotou supravodivého kondenzátu  $n_{\rm S}$ . Ďalej v nej vystupujú náboj a hmotnosť náboja v tomto kondenzáte. Hmotnosť a náboj sú dvojnásobné oproti normálnym vodivostným elektrónom. Naopak  $n_{\rm S}$ 

má polovičnú hodnotu oproti hustote náboja v normálnom stave. To znamená, že rozdielne hodnoty sa vykompenzujú a odhady  $\lambda_{\rm L}$  robené De Haasom Lorentzom pre elektrónový plyn boli správne. Typické hodnoty  $\lambda_{\rm L}$  extraplované ku nulovej teplote pre supravodivé elementy, ako je Pb, lebo Al, sú 40-50 nm.

Po druhej svetovej vojne ukázal Pippard, že hĺbka vniku supravodiča závisí od čistoty materiálu, resp. od rozptylu na nečistotách. Ak pridáme do cínu 3% india, vzrastie  $\lambda_{\rm L}$  dvojnásobne, hoci  $T_{\rm c}$  a  $H_{\rm c}$  sa nezmenili. To sa nedá vysvetliť pomocou teórie Londonovcov. Pippard navrhol riešenie, ktoré je založené na skutočnosti, že odozva supravodiča nie je striktne lokálna.

### 13.13 Koherenčná dĺžka

Pojem koherenčnej dĺžky zaviedol Pippard, keď zovše<br/>obecnil rovnicu Londonovcov. Urobil to analogicky ku nelokálnej generalizáci<br/>i Ohmovho zákona  $\boldsymbol{J} = \sigma \boldsymbol{E}$ na tvar

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = \frac{3\sigma}{4\pi l} \int \frac{\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}'))e^{-R/l}}{R^4} d\boldsymbol{r}' , \qquad (13.138)$$

kde l je stredná voľná dráha a  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r'}$ . Uvažuje sa tu fakt, že prúd v bode  $\mathbf{r}$  závisí na elektrickom poli  $\mathbf{E}(\mathbf{r'})$  stredovanom cez objem s polomerom l okolo bodu  $\mathbf{r}$ . Čím bude l kratšie (napr. pre rozptyly na prímesiach), tým bude prúdová odozva slabšia. Pippard argumentoval, že supravodivá vlnová funkcia bude mať podobnú charakteristickú dĺžku -  $\xi_0$ . Možno ju odhadnúť z princípu neurčitosti. V supravodivosti hrajú dôležitú úlohu iba elektróny s energiou ~  $kT_c$  okolo Fermiho energie. Tieto elektróny majú hybnosť rádove  $\Delta p \approx kT_c/v_F$ , kde  $v_F$  je Fermiho rýchlosť. Potom

$$\Delta x \ge \hbar / \Delta p \approx \hbar v_{\rm F} / k T_{\rm c} \tag{13.139}$$

a koherenčná dĺžka bude

$$\xi_0 = a \frac{\hbar v_{\rm F}}{kT_{\rm c}} , \qquad (13.140)$$

s konštantou *a* rádove rovnou 1. V typických supravodivých prvkoch platí, že  $\xi_0 >> \lambda_L$ . Koherenčná dĺžka predstavuje najmenšiu oblasť, kde supravodivé nosiče môžu sformovať vlnový balík - dnes vieme, že je to rozmer Cooperovho páru. Pokiaľ sa vektorový potenciál bude meniť na vzialenosti menšej ako je koherenčná dĺžka  $(\xi_0 >> \lambda_L)$ , bude prúdová odozva na takýto vektorový potenciál zoslabená. Teda  $\xi_0$  tu hrá analogickú úlohu ako stredná voľná dráha v elektrodynamike normálnych kovov. Ak je v supravodiči aj stredná voľná dráha menšia ako  $\xi_0$ , odozva sa ešte zoslabí.

Pippard navrhol modifikáciu rovnice Londonovcov

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{S}}(\boldsymbol{r}) = \frac{3\Lambda}{4\pi\xi_0} \int \frac{\boldsymbol{R}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}'))e^{-R/\xi}}{R^4} d\boldsymbol{r}' , \qquad (13.141)$$

kde opäť  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ a koherenčná dĺžka  $\xi$  sa vplyvom rozptylu môže oproti svojej hodnote  $\xi_0$  v čistom materiále skrátiť ako

$$\frac{1}{\xi} = \frac{1}{\xi_0} + \frac{1}{l} \ . \tag{13.142}$$

#### Konerencha dizka

Pomocou tohoto prístupu dokázal Pippard popísať experimenty na cíne a olove. V oboch prípadoch bola skutočná hĺbka vniku podstatne väčšia ako  $\lambda_{\rm L}$  pretože  $A(\mathbf{r})$  sa prudko zmenšuje na vzdialenosti  $\lambda \ll \xi_0$ . To spôsobí slabšiu prúdovú odozvu a tak zväčší preniknutie magnetického poľa. Neskôr sa tiež ukázalo na zliatinách cínu a india, že s klesajúcou strednou voľnou dráhou  $\lambda$  skutočne tiež rastie.

Koherenčná dĺžka je závislá na teplote, ako aj na vlastnostiach konkrétneho supravodivého materiálu. GL teória umožňuje túto veličinu odvodiť dokonca aj bez prítomnosti magnetického poľa. Bez poľa bude mať prvá GL rovnica tvar

$$\alpha(T)\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla)^2\psi = 0.$$
 (13.143)

V jednorozmernom prípade a po predelení parametrom  $\alpha$  to bude

$$-\frac{\hbar^2}{(2m^*\alpha)}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \psi + \frac{\beta}{\alpha}|\psi|^2\psi = 0.$$
 (13.144)

Keďže  $\psi$  je bezrozmerná veličina, musí byť bezrozmerný aj výraz  $\frac{\hbar^2}{(2m^*\alpha)} \frac{d^2}{dx^2}$ . Definujme si veličinu  $\xi$ 

$$\xi \equiv \left(\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha(T)|}\right)^{1/2} , \qquad (13.145)$$

ktorá bude mať rozmer dĺžky a bude to charakteristická dĺžka systému, ktorá závisí na teplote ako

$$\xi(T) = \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - T/T_c}} , \qquad (13.146)$$

kde  $\xi_0 = \hbar/(2m^* a T_c)^{1/2}$ . Veličina  $\xi$  predstavuje koherenčnú dĺžku vlnovej funkcie supravodiča. Zmeny vlnovej funkcie na kratšej vzdialenosti nevyvolajú také zmeny kinetickej energie, ktoré by narušili supravodivosť. Ak sa teplota systému priblíži ku  $T_c$ , koherenčná dĺžka začne divergovať. Z toho vyplýva, že ak je supravodivosť lokálne narušená magnetickým poľom, alebo normálnou inklúziou, supravodivosť, resp. parameter usporiadania  $\psi$  sa obnoví vo vzdialenosti  $\xi$  od poruchy. V supravodičoch II. typu je v centre víru parameter usporiadania  $\psi = 0$  a vo vzdialenosti  $\xi$  nadobudne pôvodnú, neporušenú hodnotu.  $\xi$  určuje oblasť s potlačenou hustotou Cooperových párov, čo umožňuje spočítať veľkosť energie potrebnú na generovanie víru. Koeficienty a a b v rozvoji GL voľnej energie nemožno priamo spočítať z prvých princípov, keďže ide o fenomenologickú teóriu. Možno ich však určiť z merateľných parametrov, ako sú  $\xi$ ,  $\lambda$  a  $H_c$ .

Ďalšou dôležitou charakteristickou dĺžkou supravodiča je hĺbka vniku  $\lambda$ , o ktorej sme už viackrát hovorili.  $\lambda$  určuje oblasť, v ktorej supravodivý prúd bráni vniknutiu magnetického poľa. Vezmime si druhú GL rovnicu, ktorá určuje supravodivý prúd. Uvažujme prípad čistého Meissnerovho javu, kde gradient  $\psi$  možno zanedbať. Rovnica GL-II bude mať tvar

$$J_{\rm S} = -\frac{(2e)^2}{m^*} |\psi|^2 A . \qquad (13.147)$$

9	Б	9
Э	J	Э

Z rovnice Londonovcov  $\boldsymbol{J}_{\mathrm{S}} = -(1/\mu_0\lambda^2)\boldsymbol{A}$  potom dostaneme

$$\lambda^2 = \frac{m^*}{(2e)^2 \mu_0 |\psi|^2} . \tag{13.148}$$

Teplotná závislosť hĺbky vniku je podobne ako v prípade koherenčnej dĺžky daná výrazom

$$\lambda(T) = \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 - T/T_c}} . \tag{13.149}$$

Ukážeme vzťahy medzi charakteristickými dĺžkami supravodiča a termodynamickým kritickým poľom  $H_c$ . Uvažujme homogénny supravodič bez magnetického poľa. Voľná energia je

$$F_{\rm S}(T) = F_{\rm N}(T) + \alpha(T)|\psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\psi|^4 + \dots$$
(13.150)

Pre $|\psi|^2=-\alpha/\beta$  bude rozdiel voľných energií v normálnom a supravodivom stave rovný kondenzačnej energii a teda

$$\frac{\alpha^2}{2\beta} = \frac{\mu_0 H_c^2}{2} \ . \tag{13.151}$$

Veličiny  $\alpha$  a  $\beta$  môžeme určiť s použitím nasledovných vzťahov:

$$\mu_0 H_c^2 = -\alpha |\psi|^2; \qquad |\psi|^2 = -\frac{\alpha}{\beta}; \qquad \lambda^2 = \frac{\alpha m^*}{-4e^2 \mu_0^2 H_c^2}$$
(13.152)

ako

$$\alpha = \frac{-4e^2\mu_0^2 H_c^2 \lambda^2}{m^*}; \qquad \beta = \frac{\alpha^2}{\mu_0 H_c^2} = \frac{(4e^2)^2\mu_0^3 H_c^2 \lambda^4}{m^{*2}}.$$
 (13.153)

Z teplotných závislostí  $H_c \sim 1 - T/Tc$ , resp.  $\lambda \sim 1/\sqrt{1 - T/T_c}$  plynie teplotná nezávislosť GL koeficientu  $\beta$ . Ešte jednoduchší je tiež teplotne nezávislý výraz

$$H_{\rm c}\lambda\xi = \frac{\phi_0}{2\pi\sqrt{2}\mu_0} , \qquad (13.154)$$

kde vystupuje kvantum magnetického toku  $\Phi_0 = h/2e$ .

#### 13.14 Dva typy supravodičov

Koherenčná dĺžka a hĺbka vniku umožňujú veľmi dôležité rozlíšenie medzi dvomi fundamentálne odlišnými typmi supravodičov. Ide o supravodiče I. typu, kde  $\lambda < \xi$  a supravodiče II. typu s  $\lambda > \xi$ .

• Supravodiče I. typu pri aplikovaní vonkajšieho magnetického poľa prechádzajú do normálneho stavu zrazu, pri termodynamickom kritickom poli  $B_c$ . Je to fázový prechod prvého druhu.

• Supravodiče II. typu do hodnoty magnetického poľa  $B_{c1}$  úplne vytesňujú magnetické pole zo svojho vnútra. Pri poli  $B_{c1}$  začne magnetické pole prenikať do vnútra supravodiča cez supravodivé víry. Magnetický tok je len čiastočne vytesnený až do poľa  $B_{c2}$ , kde supravodič prechádza do normálneho stavu. Tento prechod a prechod do zmiešaného stavu sú fázovými prechodmi druhého druhu.

Aké sú podmienky pre vytvorenie stabilného supravodivého víru? Predstavme si jadro víru ako normálnu oblasť v tvare valca s polomerom  $\xi$ , pričom tento valca prechádza celým supravodičom. Oblasť jadra má oproti supravodivému stavu zvýšenú energiu o hodnotu stabilizačnej energie krát prierez válca krát jeho dĺžka. Na jednotkovú dĺžku to bude hodnota

$$f_{\rm core} = \frac{B_{\rm c}^2}{2\mu_0} \pi \xi^2 \ . \tag{13.155}$$

Existencia víru súčasne umožňuje vonkajšiemu magnetickému poľu cez jadro víru voľne prenikať. Smerom od jadra vzniknú supravodivé prúdy, ktoré magnetické pole utlmia na vzdialenosti hľbky vniku  $\lambda$ . Oblasť pretekaná tieniacimi prúdmi tvorí akýsi obal jadra. Túto oblasť budeme volať tokotrubica. Stredná hodnota magnetického poľa v celej tokotrubici s polomerom  $\lambda$  nech je  $B_{\rm a}$ . Energia potrebná na odtienenie poľa  $B_{\rm a}$  vzťahovaná na jednotkový objem supravodiča je rovná  $B_{\rm a}^2/2\mu_0$ . Ale oblasť tokotrubice nie je tienená a teda sa táto energia ušetrí. Na jednotku dĺžky tokotrubice sa teda ušetrí magnetická energia

$$f_{\rm mag} = -\frac{B_{\rm a}^2}{2\mu_0} \pi \lambda^2 \ . \tag{13.156}$$

Celková energetická bilancia tokotrubice je potom

$$f = f_{\rm core} + f_{\rm mag} = \frac{B_{\rm c}^2}{2\mu_0} \pi \xi^2 - \frac{B_{\rm a}^2}{2\mu_0} \pi \lambda^2 \ . \tag{13.157}$$

Aby bol supravodivý vír stabilným objektom musí platiť, žef < 0. Prah stability, f = 0, určuje oblasť kedy je povrchová energia medzi supravodičom a normálnou oblasťou (jadro víru) záporná a kedy kladná. Ak si zadefinujeme pole $B_{\rm a} = B_{\rm c1}$ , ako pole, v ktorom môže supravodivý vír vzniknúť, dostaneme

$$\frac{B_{\rm c1}}{B_{\rm c}} \approx \frac{\xi}{\lambda} \ . \tag{13.158}$$

V prípade, že  $\lambda > \xi$ , je dolné kritické pole  $B_{c1}$  menšie ako termodynamické pole  $B_c$  a vír vznikne v supravodiči skôr, ako je supravodivosť potlačená. Ide teda o supravodič II. typu.



Obr. 13.18: Hodnota parametra usporiadania pozdĺž niekoľkých vírov pre prípad malého magnetického poľa blízko  $B_{c1}$  a pre prípad veľkého poľa blízko  $B_{c2}$ .

Pre magnetické polia blízko  $B_{c2}$  sa normálne jadrá vírov priblížia a parameter usporiadania bude mať malú hodnotu všade, ako je to ukázané na obrázku 1.18. To umožňuje zjednodušiť GL voľnú energiu tým, že vynecháme členy vyšších rádov

$$F = F_{\rm N} + \frac{1}{2}\alpha^2 |\psi|^2 + \frac{1}{2m^*} \left| (-i\hbar\nabla - 2e\mathbf{A})^2 \psi \right|^2 .$$
 (13.159)

Z podmienky minimalizácie voľnej energie dostaneme

$$\frac{\delta F}{\delta \psi} = \alpha \psi + \frac{1}{m^*} (-i\hbar \nabla - 2e\mathbf{A})^2 = 0 , \qquad (13.160)$$

resp. v tvare

$$\frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla - 2e\mathbf{A})^2\psi = -\alpha\psi , \qquad (13.161)$$

čo je vlastne Schrödingerova rovnica pre Cooperov pár, kde  $\alpha$  je vlastná hodnota operátora kinetickej energie v magnetickom poli *B*. Rovnica má v kvantovej mechanike známe riešenie pre stavy energie

$$\frac{1}{2m^*}mv^2 + (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_{\rm c} = E_{n,v_{\rm z}} , \qquad (13.162)$$

kde  $v_z$  je z-ová zložka rýchlosti paralelná s magnetickým poľom. Druhý člen na ľavej strane rovnice je príspevok od cyklotrónového pohybu v rovine kolmej. Ak položíme  $v_z$  rovné nule a pozrieme sa na najnižšiu hladinu n = 0, dostaneme

$$-\alpha = \frac{1}{2} \ \hbar \frac{2eB}{m^*} = \hbar \omega_{\rm c} \ . \tag{13.163}$$

Tomuto riešeniu zodpovedá pole $B_{\rm c2}$ a teda

$$-\alpha = \frac{\hbar e B_{c2}}{m^*} .$$
 (13.164)

Keďže platí  $-\alpha = \hbar^2/2m^*\xi^2$ dostaneme výraz

$$B_{\rm c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2} \ . \tag{13.165}$$

Ak si prenásobíme vyššie uvedený výraz  $B_c \lambda \xi$  výrazom  $\sqrt{2}/\xi^2$  a vezmeme do úvahy vzťah  $\xi^2 = \hbar^2/2m^*|\alpha|$ , dostaneme zaujímavý vzťah

$$B_{\rm c2} = \kappa \sqrt{2} B_{\rm c} \ .$$
 (13.166)

Uvedený výraz má veľkú dôležitosť pre delenie supravodičov na dve skupiny. Ak je parameter  $\kappa > 1/\sqrt{2}$ , bude  $B_{c2} > B_c$ . Presne pre  $\kappa > 1/\sqrt{2}$  sa objavia vhodné podmienky pre vznik tzv. zmiešanej fázy a teda ide o supravodič II. typu. Naopak pre  $\kappa < 1/\sqrt{2}$  bude  $B_{c2} > B_c$ . Pri znižovaní magnetického poľa dosiahneme skôr  $B_c$  ako  $B_{c2}$ . Objaví sa úplný Meissnerov jav a zmiešaný stav nenastane. To sú supravodiče I. typu.

### Supravodiče: I. typu: $\kappa > 1/\sqrt{2}$ II. typu: $\kappa < 1/\sqrt{2}$

V supravodičoch I. typu sa môžu tiež vyskytovať normálne oblasti vo forme laminárnej štruktúry. To sa stane tedy, ak má vzorka demagneticačný faktor n nenulový. V tom prípade bude vnútorné magnetické pole väčšie ako vonkajšie a prekoná aj  $B_{\rm c}$ . Aby sa znížila energia systému, prenikne do neho magnetický tok cez lamelu, ktorá prejde do normálneho stavu. V normálnom stave sa lokálne magnetické pole už bude rovnať vonkajšiemu.

Dolné magnetické pole  $B_{c1}$  v priblížení Londonovcov možno získať nasledovne. V tomto poli preniká celú supravodivú vzorku jedno kvantum magnetického toku  $\Phi_0$ . V londonovskom priblížení je  $\xi \to 0$ . Potom je vo vzorke s jadrom víru v pozícii r = 0 pole distribuuvané ako  $e^{-r/\lambda}$ . Kritické pole  $B_{c1}$ , keď kvantum toku prenikne vzorku, sa vypočíta ako magnetický tok  $\Phi_0$  cez plochu vzorky, pričom každý element tejto plochy, resp. kruhový výsek  $2\pi r dr$  prispieva váhou  $e^{-r/\lambda}$ :

$$B_{c1} = \frac{\Phi_0}{\int_0^\infty e^{-r/\lambda} 2\pi r dr} = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} .$$
 (13.167)

Obecnejší prípad možno dostať cez výpočet voľnej energie víru jednotkovej dĺžky

$$B_{\rm c1} \approx \frac{\Phi_0}{\pi \lambda^2} \frac{\ln \kappa}{2} \ . \tag{13.168}$$

Ak využijeme vzťah pre horné kritické magnetické pol<br/>e $B_{\rm c2}=\kappa\sqrt{2}B_{\rm c}$ dostaneme

$$B_{\rm c1} = \frac{B_{\rm c}}{\sqrt{2\kappa}} \ln\kappa \ . \tag{13.169}$$

Potom, až na člen  $\ln \kappa$ , ktorý je v mnohých prípadoch približne rovný 1, platí

$$\frac{B_{\rm c2}}{B_{\rm c1}} \approx \kappa^2 \tag{13.170}$$

a termodynamické pol<br/>e $B_{\rm c}$  je geometrickým priemerom horného a dolného kritického magnetického poľa.

#### 13.15 Literatúra

- [1] H. Kamerlingh-Onnes, Leiden Comm. 1206, 1226 (1911), Suppl. 34 (1913).
- [2] W. Meissner, R. Ochsenfeld, *Naturwiss.* **21**, 787 (1933).
- [3] R. Becker, G. Heller, F. Sauter, Z. Physik 85,772 (1933).
- [4] F. London, Superfluids, Vol. 1, Wiley, New York, (1950).
- [5] A.B. Pippard, Proc. Roy. Soc. A 216, 547 (1953).
- [6] C.J. Corter, H.B.G. Casimir, Z. Physik. 35, 963 (1934).
- [7] V.L. Ginzburg, L.D. Landau, ZHETF 20, 1064 (1950).
- [8] H. Fröhlich, Phys. Rev. 79, 845 (1950).
- [9] L.N. Cooper, Phys. Rev. 104, 1189 (1956).
- [10] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [11] G.M. Eliašberg, ZHETF **38**, 996 (1960).
- [12] W.L. McMillan, J.M. Rowell, in Superconductivity, ed. R.D. Parks, Vol. 1, Dekker, New York, (1969).
- [13] P.W. Anderson, J. Phys. Chem. Sol. 11, 26 (1959).
- [14] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov, ZHETF 39, 1781 (1960).
- [15] P.G. de Gennes, Superconductivity of metals and alloys, W.A. Benjamin, New York, (1966).
- [16] J.B. Bardeen, Phys. Rev. Lett. 6, 57 (1961).
- [17] W.A.H. Harrison, Phys. Rev. 123, 85 (1961).
- [18] D.J. BenDaniel, C.B. Duke, Phys. Rev. 160, 679 (1967).
- [19] T. Hasegawa, H. Ikuta, K. Kitazawa: in Physical Properties of High Temperature Superconductors III., ed. G.M. Ginsberg, World Scientific, Singapore (1992); J. R. Kirtley, Int. J. Mod. Phys., B4, 201 (1990).
- [20] L.P. Gorkov, ZHETF 36, 1918 (1959).
- [21] M. Tinkham, Introduction to Superconductivity, 2nd Edition, McGraw-Hill, New York (1996).
- [22] K. Fossheim, A. Sudbo, Superconductivity. Physics and Applications, John Wiley & Sons, Chichester (2004).
- [23] James F. Annett, Superconductivity, Superfluids and Condensates, Oxford University Press, Oxford, UK.

## 14 Supravodivé materiály

#### P. SAMUELY, Z. JANŮ

Dnes je známych niekoľko tisíc supravodivých materiálov veľmi rôznorodého zloženia. Supravodivosť bola objavená v čistej ortuti a chemické prvky tvoria významnú skupinu supravodičov. Z nich hliník a niób našli dokonca praktické využitie v oblasti tzv. slabej supravodivosti, napr. v supravodivých kvantových interferenčných detektoroch (viď kapitola 16). Ďalšou veľkou skupinou supravodičov sú binárne zliatiny a chemické zlúčeniny. Medzi nimi sú aj oba dnes prakticky využívané silnoprúdové systémy NbTi a Nb<sub>3</sub>Sn. Táto skupina materiálov bola intenzívne skúmaná najmä od päťdesiatych rokov XX. storočia, predovšetkým Matthiasovou skupinou v USA. Matthias sám pripravil a testoval asi 3000 supravodičov v úsilí nájsť vysokoteplotný materiál. V sedemdesiatych rokoch boli syntetizované prvé organické supravodiče. Začiatkom 80-tych rokoch sa objavili supravodiče v tzv. ťažkofermiónových materiáloch, kde vďaka silným elektrónovým koreláciám je hmotnosť vodivostných elektrónov aj o tri rády vyššia ako hmotnosť voľného elektrónu (viď kapitola 18). Rok 1986 priniseol začiatok éry tzv. vysokoteplotných supravodičov, v kysličníkoch medi. Významným medzníkom pri hľadaní supravodivých materiálov pre praktické použitie bol v r. 2001 objav supravodivosti v jednoduchej binárnej zlúčenine MgB<sub>2</sub>, ktorá patrí medzi tzv. kovalentné supravodiče. Fyzikálne veľmi zaujímavé sú magnetické a zvlašť feromagnetické supravodiče s nekonvenčným párovaním. Ostatným veľkým objavom, z roku 2008, sa stala nová trieda vysokoteplotných supravodičov na báze železa. V systéme NdFeAsO(F) bola dosiahnutá pozoruhodná kritocká teplota  $T_{\rm c} = 56$  K. Prekvapujúca je prítomnosť železa, pravzoru feromagnetika. Intuitívne by sa dalo predpokladať, že jeho lokálne polarizované spiny orientované jedným smerom budú rozbíjať potenciálne Cooperove páry so vzájomne opačnými spinmi. Výskum týchto systémov je ešte len v počiatkoch a môžeme sa tešiť na veľmi zaujímavú fyziku.

#### 14.1 Supravodivé chemické prvky

Zo 103 stabilných chemických prvkov je dnes 55 supravodičov [1]. Pravda, mnohé z nich sa stávajú supravodivými až po aplikovaní vonkajšieho tlaku. V poslednej dekáde nastal veľký technický pokrok v konštrukcii vysokotlakových diamantových komôrok, ktoré umožňujú dosahovať tlak až do 260 GPa, teda 2,6 megabarov. V takýchto komôrkach boli pripravené vysokotlakové fázy mnohých chemických prvkov a časť z nich vykazuje supravodivosť. Najvyššiu teplotu  $T_c = 25$  K spomedzi nich dosahuje vápnik pri tlaku 161 GPa. Kritická teplota lítia je 20K, fosfor dosahuje 18 K, síra 17 K, bór 11 K, kyslík 0,5 K, atď. Pri bežnom tlaku má najvyššie  $T_c$  niób s 9,25 K. Pozoruhodné je, že supravodisvosť sa vyskytuje vo všetkých typoch chemických prvkov od alkalických kovov (napr. Li), cez kovy alkalických zemín (Ca), prechodové kovy (C), nekovy (O), halogény (Br), vzácne zeminy (Ce) a aktinidy

14



Obr. 14.1: Periodická tabuľka prvkov s uvedením výskytu a podmienok supravodivosti.
(U). Výnimkou sú vzácne plyny. Supravodivosť sa nevyskytuje vo feromagnetických prvkoch (Fe, Co, Ni a Gd) ani v drahých kovoch a medi. To naznačuje, že supravodivosť je nekompatibilná s magnetizmom a s vysokou elektrickou vodivosťou v normálnom stave. Obe tieto pravidlá sú vysvetliteľné BCS teóriou supravodivosti: feromagnetické usporiadanie rozrušuje Cooperove páry s opačnými spinmi a vynikajúca elektrická vodivosť v normálnom stave je znakom slabého rozptylu elektrónov na fonónoch, čo zoslabuje aj elektrónovo-fonónový mechanizmus supravodivosti.

Supravodivosť je kolektívny jav koherentného transportu Cooperových elektrónových párov cez elektrónový potenciál iónov kryštalickej mriežky. Existujú mnohé spôsoby, ako ovplyvniť pásovú štruktúru, ale aj kryštalickú mriežku materiálov. Všetky môžu ovplyvniť vznik supravodivosti. Pokiaľ sa v materiáli za normálnych okolností nevyskytuje, môže sa supravodivosť objaviť pri zmenených podmienkach. Okrem spomínaného vysokého tlaku to môže byť zavedenie napätia do kryštálickej mriežky, alebo nerovnovážna kryštálová textúra vzniknutá pri príprave tenkej vrstvy na studenú podložku. Ďalším efektívnym nástrojom je chemické dopovanie, alebo substitúcia. Tá môže zmeniť vnútorné tlakové pomery, ale aj hustotu náboja vo vodivostnom páse. Napríklad, nedávno sa ukázalo, že dopovanie diamantu a kremíku bórom vedie ku supravodivosti. Ožarovanie materiálov a zavádzanie neusporiadanosti môže zase potlačiť spinové fluktuácie a tiež viesť ku supravodivosti. Efekt blízkosti vedie k indukovaniu supravodivosti do normálneho kovu na rozhraní so supravodičom. Obr. 14.1 uvádza periodickú tabuľku supravodivých chemických prvkov aj s podmíenkami výskytu suupravodivosti.

#### 14.2 Binárne zliatiny a chemické zlúčeniny



Obr. 14.2: Kryštálová štruktúra systémov A15.

Ako bolo spomenuté vyššie, obrovské úsilie Matthiassa nájsť vysokoteplotný supravodič, ktorý by otvoril cestu ku priemyselnej revolúcií založenej na supravodivých aplikáciách v masovom meradle, neviedlo ku úspechu. Toto úsilie však podnietilo hľadanie supravodivosti v úplne nových smeroch, aj mimo kovy a intermetalické zlúčeniny.

Výskum binárnych zlúčenín sa začal už v r. 1928 v Leidene, kde de Haas a Voogd objavili supravodvosť v systémoch SbSn, Sb<sub>2</sub>Sn, Cu<sub>3</sub>Sn a Bi<sub>5</sub>Tl<sub>3</sub>. Ukázalo sa, že kombinovať supravodivý a nesupravodivý prvok je efektívne. Môže to viesť ku niekoľkonásobnému zvýšeniu  $T_c$ , ale najmä sa touto cestou darilo zvyšovať kritické magnetické pole, ktoré supravodivosť rozruší. Ako najperspektívnejšia sa ukazovala eutektická zliatina Pb-Bi s

kritickým poľom až 2,3 T pri teplote 1,9 K. Nanešťastie, materiál bol priveľmi náročný na prípravu a opracovanie, takže sa z neho nepodarilo pripraviť drôty pre

supravodivé elektromagnety.

Potom prišlo obdobie Matthiasovej skupiny v USA v 50-tych rokoch minulého storočia. Podarilo sa im pripraviť celý rad materiálov s vysokou kritickou teplotou a vysokými kritickými poľami. Pripravili postupne NbN a NbC s  $T_c = 17,8$  K, V<sub>3</sub>Sn s  $T_c = 17$  K, Nb<sub>3</sub>Sn s  $T_c = 18$  K, NbTi s  $T_c = 9$  K. V roku 1973 bol pripravený Nb<sub>3</sub>Ge s  $T_c = 23,2$  K, čo bol rekord až do objavenia vysokoteplotných supravodičov v r. 1986. Tabuľka 1 uvádza kritické parametre týchto systémov. Intermetalické zlúčeniny typu A<sub>3</sub>B sú označované ako systémy A15. Štruktúra týchto systémov je uvedená na obr. 14.2.

Tab. 1. Kritické parametre binárnych zliatin a zlúčenín

P				
Zlúčenina	$T_{\rm c}$ (K)	$B_{c2}$ (T)		
$V_3Sn$	17	25		
$Nb_3Sn$	18	24		
$Nb_3Ge$	23,2	38		
$V_3Ga$	14	21		
NbTi	9	15		
VTi	7	11		

Všetky sa vyznačujú zmäkčením fonónového módu v blízkosti  $T_c$ . Vysoká prechodová teplota  $T_c$  je spôsobená silnou elektrónovo-fonónovou interakciou spôsobenou týmto zmäkčením. Nb<sub>3</sub>Sn a NbTi sú zatiaľ jediné priemyselne využívané supravodiče. Prvý je stechiometrická, intermetalická zlúčenina a druhý je zliatina. Hlavnou aplikáciou sú vinutia pre veľké laboratórne magnety a magnety pre magnetickú rezonanciu v lekárskej praxi.

Len v experimente LHC v Ústave jadrových výskumov CERN v Ženeve je umiestnených 9600 supravodivých magnetov, z toho 1232 veľkých dipólov s maximálnym poľom 8,3 Tesla (prúd 11850 A) pracujúcich pri 1,9 K, chladených supratekutým héliom. Každý dipól je 15 m dlhý a váži 35 ton. Cievky magnetu sú navinuté z kábla, ktorý pozostáva z 36 stočených 15-milimetrových žíl. Každá žila pozostáva zo 6 až 9 tisíc supravodivých filamentov. Celý 27 kilometrový okruh obsahuje 7600 km kábla a 270 000 km supravodivých žíl. Za prípravou priemyselnej aplikácie takéhoto rozsahu je obrovská práca od fyziky, cez materiálovú vedu až po elektrotechniku. Medzi najpozoruhodnejšie technické úspechy možno zara-



Obr. 14.3: Štruktúra Chevrelových fáz, konkrétne  $PbMo_6S_8$  (atóm v centre je Pb,  $\circ$  - S,  $\bullet$  - Mo.

diť prípravu multifilamentových vodičov, čo bolo nevyhnutné pre stabilizáciu supravodiča v normálnej matici.

### 14.3 Chevrelove fázy

V r. 1971 boli objavené tzv. Chevrelove fázy [2], pomenované po svojom objaviteľovi. Ich štruktúra je zobrazená na obr. 14.3. Sú to ternárne molybdénové chalkogenidy  $MMo_6X_8$ , kde X je chalkogén S, Se, alebo Te. M je kov, alebo vzácna zemina. Najpozoruhodnejšou vlastnosťou Chevrelových fáz je ich extrémne vysoké horné kritické magnetické pole, ako uvádza Tab. 2.

Tab. 2. Kritické parametre Chevrelových fáz.

Zlúčenina	$T_{\rm c}$ (K)	$B_{c2}$ (T)
${\rm SnMo_6S_8}$	12	34
$PbMo_6S_8$	15	60
$LaMo_6S_8$	7	45

#### 14.4 Kovalentné supravodiče

Začiatok roku 2001 priniesol nečakaný objav supravodivosti v diboride horčíka (MgB<sub>2</sub>) s rekordnou teplotou  $T_c$  až 40 K. Veľký skok v kritickej teplote v klasických intermetalických supravodičoch pritiahol veľkú pozornosť. Takáto teplota je v dnešných časoch rozvinutých chladiacich systémov s uzavretým cyklom technicky aj ekonomicky veľmi zaujímavá. MgB<sub>2</sub> sa dočkal preto v rekordne krátkej dobe, v r. 2006, praktického nasadenia vo vinutí supravodivých magnetov v lekárskych tomografoch firmy Columbus Superconductors. Ide o 0.5 teslový otvorený MRI supravodivý magnetický systém využívajúci 18 km drôtu z MgB<sub>2</sub>. Systém má chladenie s uzvretým cyklom, bez nutnosti dodávať kryokvapaliny.

Objav supravodivosti v MgB<sub>2</sub> mal však veľký význam aj z fyzikálneho hľadiska. Vyvrátil totiž mýtus, že klasická fonónová supravodivosť sa môže vyskytovať len pri teplotách menších ako cca 30 K. Ukazuje sa, že MgB<sub>2</sub> patrí do skupiny tzv. kovalentných supravodičov. Patria sem systémy, ako je bórom dopovaný diamant, kremík a karbid kremíka, ďalej tiež báriom dopované kremíkové clathráty, alkalicky dopované fulerény, interkalovaný grafit a pod [3]. Všetky tieto systémy majú spoločné vlastnosti: obsahujú jeden relatívne ľahký prvok (napr. bór) a vykazujú silné smerové kovalentné väzby. Silné kovalentné väzby môžu zohrať významnú rolu v supravodičoch, kde sú Cooperove páry viazané prostredníctvom fonónov. Ako bolo totiž ukázané v kapitole 13, BCS teória s elektrónovo-fonónovým mechanizmom párovania elektrónov dospela ku vzťahu

$$k_{\rm B}T_{\rm c} \approx 1,13\omega_{\rm D}e^{-\frac{1}{\lambda}} , \qquad (14.1)$$

medzi teplotou prechodu do supravodivého stavu na jednej strane a charakteristickou fonónovou frekvenciou  $\omega_{\rm D}$  a konštantou elektrónovo-fonónovej interakcie  $\lambda$  na strane druhej. Hodnota  $\lambda$  sa rovná súčinu hustoty jednoelektrónových stavov na Fermiho hladine  $N_{\rm N(0)}$  a príťažlivej interakcie medzi dvojicou elektrónov V,  $\lambda = N_{\rm N(0)V}$ . Eliašbergova teória pre klasické supravodiče so silnou väzbou vedie ku často používanej tzv. McMillanovej formule

$$k_{\rm B}T_{\rm c} = \frac{\hbar\omega_{\rm ln}}{1,2} \exp\left[\frac{-1,04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)}\right].$$
 (14.2)

9	C	9
о	υ	J



Obr. 14.4: Schématické znázornenie štruktúry a elektrónových orbitálov v grafite a  $MgB_2$ . V prípade  $MgB_2$  je bórová podmriežka vyznačená hexagónmi s menšími krúžkami a horčík väčšími krúžkami.

Tu je  $\omega_{\ln}$  tiež charakteristická fonónová frekvencia, tentokrát je to jej logaritmický priemer a  $\mu^*$  je parameter coulombovskej interakcie. Je známe, že nízke atómové hmotnosti vedú ku vysokofrekvenčným fonónovým módom, čo môže zvyšovať činiteľ  $\omega_{\ln}$  a teda aj  $T_c$ . Mimochodom, tento fakt zodpovedá tiež za izotopový jav (viď kapitola 13). Silná kovalentná väzba povedie ku vysokým fonónovým frekvenciám a silnej elektrónovo-fonónovej väzbe  $V = \lambda/N_N(0)$ , čo znova zvyšuje  $T_c$ . Cesta ku zvyšovaniu  $T_c$  však nie je taká jednoduchá, pretože nárast  $\lambda$  môže viesť ku mriežkovej nestabilite a silná elektrónovo-fonónová väzba V môže byť vyvážená malou hodnotou hustoty stavov  $N_N(0)$ , ak sa systém ocitne v blízkosti prechodu kov-izolátor.

MgB<sub>2</sub> je izovalentné s grafitom, s elektrónmi v hybrizovaných sp<sup>2</sup> orbitáloch. V grafite pretína Fermiho hladina tzv.  $\pi$  pás formovaný z  $2p_z$  orbitálov, ktoré ležia mimo bazálnej roviny grafitu. Elektrón-fonónová interakcia v  $\pi$  páse je slabá. Naopak, veľmi silná väzba sa očakáva pre tzv.  $\sigma$  pás formovaný z  $2p_{xy}$  orbitálov v bazálnej rovine. V grafite však tieto ležia hlboko pod Fermiho hladinou a tak neprispievajú ku supravodivosti. Hoci je MgB<sub>2</sub> izovalentné s grafitom, vďaka transferu náboja z horčíka do bóru sa na Fermiho hladine ocitnú oba pásy,  $\pi$  aj  $\sigma$ . Z dôvodov odlišnej priestorovej orientácie je medzipásová interakcia veľmi slabá, vlastnosti pásov sa v MgB<sub>2</sub> nevystredujú a to vedie ku novému fyzikálnemu javu, tzv. dvojpásovej, alebo dvojmedzerovej supravodivosti. Existujú tu dve relatívne samostatné skupiny elektrónov. Elektróny v  $\pi$  páse majú slabú elektrónovo-fonónovú väzbu  $V_{\pi}$  a teda aj malú supravodivú energetickú medzeru  $\Delta_{\pi}$ . Na druhej strane elektróny v  $\sigma$  páse majú veľmi silnú elektrónovo-fonónovú väzbu  $V_{\sigma}$  a veľkú supravodivú energetickú medzeru  $\Delta_{\sigma}$ .

Mikrokontaktová spektroskopia (obr. 14.5) potvrdila, existenciu dvoch samostatných energetických medzier v MgB<sub>2</sub>. Bolo ukázané, že za vysoké kritické parametre systému, ako je  $T_c$  a horné kritické magnetické pole  $B_{c2}$  zodpovedá  $\sigma$  pás. Do elektrónov v  $\pi$  páse je supravodivosť pri vyšších teplotách a magnetických poliach indukovaná zo  $\sigma$  pásu. Dvojmedzerová supravodivosť je v mnohom odlišná od jednomedzerovej. Napr. existujú interné Josephsonove efekty medzi dvomi pásmi. Jav dvojmedzerovej supravodivosti nie je v MgB<sub>2</sub> ojedinelý. V súčasnosti je študovaný v mnohých starších aj nových supravodičoch. MgB<sub>2</sub> sa ukázal ako modelový

LXOLICKE A HEROHVENCHE SUPRAVOUICE systém, umožňujúci podrobné štúdium tohoto javu. Pravdepodobne ešte silnejšie elektrónovo-fonónové väzby môžu byť v systémoch s trojrozmernými  $sp^3$  orbitálmi. Napr. diamant má k dispozícii samé smerové  $\sigma$  väzby. Problémom zostáva dopo-

vanie, ktoré by posunulo Fermiho hladinu do valenčného, alebo vodivostného pásu. Dosiaľ sa podarilo dopovať diamant 3-6 % bóru a dosiahla sa kritická teplota  $T_{\rm c}$  do 7 K. Teoretické predpovede hovoria, že kritická teplota v kubickej  $BC_5$  fázy alebo v silne dopovanom diamante by mohla prekonať MgB<sub>2</sub>. Zatiaľ sa však takéto fázy nepodarilo pripraviť.

#### 14.5 Exotické a nekonvenčné supravodiče



Obr. 14.5: Mikrokontaktové spektrá  $(\text{plné čiary}) \text{MgB}_2$  [4] Malá medzera je viditeľná pri nízkych teplotách ako pár píkov pri  $\pm 2,5$  mV, veľká ako druhý pár pri $\pm 6~{\rm mV}.$ Čiarkovane je zobrazený fit na teoretický model (hore). Teplotná závislosť veľkej a malej medzery získaná z viacerých spektier (dole).

Prelom do novej éry tzv. vysokoteplotnej supravodivosti priniesol objav Bednorza a Müllera v r. 1986 [5]. Podrobnejšie o histórií objavu a niektorých fyzikálnych vlastnostiach rozpráva ďalšia podkapitola. V tejto časti chceme poukázať na fakt, že vysokoteplotné kupráty, ale aj ďalšie systémy sa môžu viac, alebo menej vymykať "štandardnému" modelu supravodivosti, t.j. BCS teórii, ktorá popisuje elektrónovo-fonónový mechanizmus supravodivosti s tzv. singletným a s-vlnovým párovaním elektrónov.

Ukazuje sa, že v mnohých supravodivých systémoch skôr ako McMillanov vzťah uvedený vyššie platí vzťah

$$T_{\rm c} \propto 1/\lambda_{\rm L}^2 \propto n_{\rm S}/m^* \propto T_{\rm F},$$
 (14.3)

kde  $\lambda_{\rm L}$  je londonovská hĺbka vniku,  $n_{\rm S}$ hustota Cooperových párov,  $m^*$  efektívna hmotnosť elektrónu a  $T_{\rm F}$  Fermiho teplota. Tento vzťah si prvý všimol Uemura [6], ktorý tiež nazval tieto systémy exotické supravodiče. Majú mnohé zvláštne vlastnosti, ako je krátka koherenčná dĺžka a teda extrémne vysoké horné kritické magnetické pole, veľká hĺbka vniku, nízka hustota a veľká efektívna hmotnosť elektrických nábojov (elektrónov, alebo dier), extrémne veľká a anizotropná energetická medzera, niekedy s

nekonvenčnou symteriou. Najznámejším príkladom sú vysokoteplotné kupráty. Ďalej sem patria bizmutát  $Ba_{1-x}K_xBiO_3$ , alkalické fulerény, systémy A-15, Chevrelove fázy, organické a ťažkofermiónové supravodiče. Obr. 14.6 ukazuje vzťah medzi miónovo-spinovým relaxačným časom  $\sigma$  a  $T_c$  rôznych vysokoteplotných kuprátových supravodičov (označených tu ako 214, 2212, 123 a 2223).  $\sigma$  je priamo úmerné  $1/\lambda_L^2 \propto n_S/m^*$ . Platnosť Uemurovho vzťahu miesto vzťahu McMillanovho naznačuje, že v týchto systémoch by mohol fungovať exotický mechanizmus supravodivosti, alebo aspoň spolupôsobiť s klasickým, fonónovým. V niektorých prípadoch sa uvažuje aj o Boseho-Einsteinovej kondenzácii Cooperových párov, ktoré by mohli existovať bez vzájomnej koherencie aj nad teplotou prechodu  $T_c$  a pod.

Exotickú supravodivosť si netreba zamieňať za tzv. nekonvenčnú supravodivosť. Ako nekonvenčné supravodiče sú väčšinou označované systémy s "novými" kvantovými číslami oproti supravodičom popísaným BCS teóriou. To znamená parameter usporiadania, ktorý nemá s-vlnový orbitálový charakter, prípadne nie je to spinový singlet. Ako vieme, kvantová vlnová funkcia supravodiča je vytvorená koherentnou superpozíciou spárovaných elektrónových stavov. Keďže elektróny v Cooperových pároch sú fermióny (častice s poločíselným spinom), vlnová funkcia páru musí byť antisymetrická.



Obr. 14.6: Závislosť kritickej teploty supravodiča na miónovo-spinovom relaxačnom čase, priamo úmernom hustote Cooperových párov v systéme [6]. Čísla označujú rôzne triedy vysokoteplotných kuprátov (pozri ďalej).

Vlnovú funkciu možno rozdeliť na orbitálnu časť, ktorá závisí len na priestorových súradniciach, a na spinovú časť. Aby bola celková vlnová funkcia Cooperovho páru antisymetrická, musí mať orbitálna časť opačnú symetriu ako spinová. Teda, ak je orbitálna časť symetrická, musí byť spinová vlnová funkcia antisymetrická. Dvojica spinov môže existovať v 4 základných konfiguráciách:  $\uparrow\uparrow, \downarrow\downarrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\downarrow, \downarrow\downarrow$  so spinom hore a dolu. Usporiadanie

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\uparrow \downarrow - \downarrow \uparrow\right), \quad \text{(singlet)}$$
 (14.4)

je antisymetrické, keďže zámena spinov vedie k zámene znamienka vlnovej funkcie. Takéto usporiadanie, známe ako "spinový singlet" s celkovým spinom S = 0, vyžaduje symetrickú orbitálnu vlnovú funkciu s párnym orbitálnym kvantovýn číslom L. V klasických nízkoteplotných supravodičoch, ako to bolo uvedené pri BCS teórii, sa realizuje spinový singlet s celkovým orbitálnym kvantovým číslom L = 0

(teda párujú sa elektróny s opačnými hybnosťami) a hovoríme o s-vlnovej supravodivosti. Ako ukážeme ďalej, vo vysokoteplotných kuprátoch sa realizuje stav spinového singletu s celkovým orbitálnym kvantovým číslom L = 2 a hovoríme o d-vlnovej supravodivosti.

Existujú ďalšie tri usporiadania dvojíc spinov

$$|1,1\rangle =\uparrow\uparrow, \qquad |1,-1\rangle =\downarrow\downarrow, \qquad |1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\uparrow\downarrow +\downarrow\uparrow) \quad \text{(triplet)} \qquad (14.5)$$

so symetrickou spinovou vlnovou funkciou, známe ako "spinový triplet" s celkovým spinom S = 1. Takéto usporiadanie spinov vyžaduje antisymetrickú orbitálnu vlnovú funkciu s nepárnym orbitálnym kvantovýn číslom L. Tripletný stav s kvantovými číslami S = 1 a L = 1, nazývaný aj p-vlnové párovanie, sa realizuje v supratekutom héliu-3 (viď kapitola 6), kde "Cooperov pár" tvorí dvojica atómov ľahkého izotopu <sup>3</sup>He. Ak by sa spinový triplet kombinoval s L = 3, išlo by dokonca o f-vlnové párovanie. Teda, nekonvenčný supravodič je podľa vyššie uvedenej definície taký, ktorého parameter usporiadania má inú symetriu ako BCS základný stav (S = 0 aj L = 0).

Fyzikálne mimoriadne zaujímavými sú nedávno objavené feromagnetické supravodiče, teda systémy  $ZrZn_2$ , UGe<sub>2</sub> a UCoGe. Hoci ich kritická teplota je veľmi malá (< 1 K), v týchto materiáloch nielenže koexistuje feromagnetizmus a supravodivosť, ale za oba javy sú zodpovedné tie isté skupiny elektrónov. To nie je možné so supravodivým mechanizmom typu BCS so singletným párovaním. Viaceré experimenty poukazujúce napr. na extrémne vysoké horné kritické polia potvrdzujú tripletné párovanie v týchto systémoch.

Existuje však aj presnejšia definícia pojmu nekonvenčná supravodivosť, ako je supravodivá vlnová funkcia odlišná od modelu BCS. Keďže sa Cooperove páry vytvárajú z vodivostných elektrónov, treba porovnávať symetriu supravodivej vlnovej funkcie so symetriou Fermiho plochy. Symetria Fermiho plochy je daná bodovou grupou symetrie kryštálu  $\hat{R}$ . V rámci tejto striktnejšej definície budú nekonvenčnými supravodičmi iba tie, kde sa energetická medzera zmení po aplikovaní operácie symetrie

$$\Delta_{\hat{\mathbf{R}}\mathbf{k}} \neq \Delta_{\mathbf{k}} \tag{14.6}$$

aspoň pre jednu operáciu symetrie  $\hat{R}$ .

Môžeme to ilustrovať na príklade vysokoteplotných kuprátov. Základnou spoločnou črtou týchto štruktúrne komplikovaných systémov je existencia  $CuO_2$  rovín. Anizotropné až kvázi dvojrozmerné štruktúry sa prejavujú aj v ich Fermiho ploche, ktorá je tiež kvázi dvojrozmerná s tetragonálnou, resp. slabo ortorombickou symetriou. Pre popis energetickej medzery preto stačí uvažovať jej dvojrozmernú reprezentáciu v približne štvorcovej Brillouinovej zóne. Keďže už prvé exprimenty naznačili, že párovacia funkcia je spinovo singletná, uvažovali sa nasledovné supravodivé energetické medzery (orbitálne časti vlnovej funkcie) v k-priestore (ploche)

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta \qquad (s),$$
  

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(\cos(k_{\mathbf{x}}a) + \cos(k_{\mathbf{y}}a))/2 \qquad (s^{-}),$$
  

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(\cos(k_{\mathbf{x}}a) - \cos(k_{\mathbf{y}}a))/2 \qquad (d_{\mathbf{x}^{2}-\mathbf{y}^{2}}),$$
  

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta\sin(k_{\mathbf{x}}a)\sin(k_{\mathbf{y}}a) \qquad (d_{\mathbf{xy}}), \qquad (14.7)$$

kde a je mriežková konštanta v štvorcovej CuO<sub>2</sub> rovine. V prvej Brillouinovej zóne,  $(-\pi/a \le k_x \le \pi/a, -\pi/a \le k_y \le \pi/a)$ , majú všetky uvedené medzery maximálnu hodnotu medzery rovnú  $\Delta$ , ale pre rôzne smery k sa líšia, ako je vidno na obr.14.7. Prvý typ medzery je konštantný a zodpovedá štandardnej BCS situácii. Teda, medzera sa nemení vzhľadom na symetriu štvorcovej Brillouinovej zóny. Operácie symetrie však nezmenia ani energetickú medzeru definovanú druhou rovnicou. Ide teda tiež o o konvenčnú s-vlnovú supravodivosť. Ako ukazuje obrázok táto energetická medzera má 8 bodov na Fermiho ploche, kde dosahuje nulovú hodnotu. Sú to priesečníky čiarkovanej čiary s Fermiho plochou. Takúto energetickú medzeru označujeme ako "rozšírenú s-vlnovú". Ďalšie dve medzery majú nekonvenčnú symetriu. Obe zmenia znamienko pri rotácii štvorca o 90°  $(k_x \rightarrow k_y, k_y \rightarrow -k_x)$ . Energetická medzera  $d_{x^2-y^2}$  zmení znamienko pri operácii zrkadlenia na uhlopriečke štvorca a medzera  $d_{xy}$  pri zrkadlení na osiach  $k_x$  a  $k_y$ . Obe medzery sa označujú ako d-vlnové, pretože majú rovnakú symetriu ako príslušné atómové orbitály. V oboch prípadoch medzera v spektre kvázičastíc  $2|\Delta_k|$  zaniká v štyroch bodoch Fermiho plochy, ktoré označujeme ako uzly energetickej medzery.

Ako môže experiment rozlíšiť jednotlivé prípady? Ak je energetická medzera vo všetkých smeroch konečná, bude jej zodpovedajúca kvázičasticová hustota stavov mať nulovú hodnotu v istom energetickom intervale okolo Fermiho



Obr. 14.7: Štyri možné typy supravodivej energetickej medzery v supravodiči so štvorcovou (tetragonálnou) Brillouinovou zónou. s-vlnový prípad má izotropnú medzeru.  $s^-$  je tzv. rozšírený s-vlnový prípad, ktorý zachováva symetriu mriežky.  $d_{x^2-y^2}$  a  $d_{xy}$  energetické medzery majú nižšiu symetriu ako mriežka (pozri text) a ide teda o nekonvenčnú supravodivosť.

energie. Hustotu stavov možno zmerať napr. tunelovou spektroskopiou. Príklad takejto s-vlnovej energetickej medzery, resp. jej hustoty stavov je uvedený na obr. 14.8 (a) pre prípad nióbu. Ako je vidieť, v intervale napätí  $\pm 1,5$  mV, teda v oblasti energií  $\pm 1,5$  meV, je tunelová vodivosť, úmerná pri meracej teplote 0,3 K s vysokou presnosťou hustote stavov, nulová. Tento interval určuje hodnotu s-vlnovej energetickej medzery Nb. Inak je tomu obr. 14.8 (b - d), kde sú uvedené plnou čiarou (čiarkovane sú naznačené modely) obdobné merania pre vysokoteplotné kupráty Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>x</sub> (Bi2212), YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> (Y123) a Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CuO<sub>x</sub> (Bi2201). Ako vidno, v prípade vysokoteplotných kuprátov neexistuje energetický interval okolo Fermiho energie bez kvázičastíc, teda s nulovou tunelovou vodivosťou. Pre prípad ideálneho merania dvojrozmerného *d*-vlnového supravodiča očakávame tunelové spektrum rastúce lineaárne od nuly pre napätie V = 0. Teda, približne tak, ako je to na obr. 14.8 (b) pre prípad Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>x</sub>. Naozaj, tento supravodič sa svojou extrémnou anizotropiou najviac približuje ku ideálnemu dvojrozmernému systému.



Obr. 14.8: Tunelové spektrá supravodičov získané pomocou rastrovacieho tunelového mikroskopu STM tunelovaním z normálneho hrotu cez vákuum do *c*-smeru supravodivého kryštálu [7]. a) Nb pri 335 mK; b) optimálne dopovaný systém Bi2212 s  $T_c = 92$  K pri 4.8 K (plná čiara), BCS fit (bodkočiarkovane), *d*-vlnový fit pre nízke napätia (čiarkovane); c) systém Y123 pri 4,2 K; d) predopovaný systém Bi2201 s  $T_c = 10$  pri 2.5 K (plná čiara) a pri 82 K (čiarkovane).

závislosť  $C \propto T^2$ , čo opäť svedčí o d-vlnovej supravodivosti. Ako však rozlíšiť veľmi podobné prípady symetrie  $d_{x^2-y^2}$  a  $d_{xy}$ ? Tieto funkcie sa líšia len polohou uzlov vzhľadom na osi Brillouinovej zóny. Pre riešenie tohoto problému sa podarilo rozvinúť metódu ARPES fotoemisnej spektroskopie s uhlovým rozlíšením (angl. Angle Resolved PhotoEmission Spectroscopy), ktorá dnes dosahuje energetické rozlíšenie lepšie ako 1 meV. Táto technika umožňuje mapovať energetickú medzeru  $2|\Delta_k|$  v ľubovoľnom bode na Fermiho povrchu. Výsledky exprimentov ukázali, že energetická medzera vo vysokoteplotných kuprátoch má maximá v bodoch  $(k_x, k_y) = (\pi/a, 0)$ a  $(k_x, k_y) = (0, \pi/a)$ . Uzly, čiže body s nulovou hodnotou medzery (resp. nemerateľnou medzerou) na diagonálach Brillouinovej zóny  $(k_x = \pm k_y)$ . Takéto závery

častíc s ľubovoľne malou energiou, v dôsledku existencie uzlov energetickej medzery, sa prejavuje aj v ďalších experimentoch. Napr. teplotná závislosť elektrónového merného tepla už nebude mať pri veľmi nízkych teplotách  $(T \ll T_{\rm c})$  exponenciálnu závislosť, pretože tá bola priamym dôsledkom konečnej energetickej medzery. V prípade supravodiča s uzlami v energetickej medzere bude mať tepelná kapacita mocninovú závislosť na teplote. Pre vysokoteplotné kupráty bola nameraná

Existencia kvázi-

experimentu svedčia o symetrii typu  $d_{x^2-y^2}$ vo vysokoteplotných kuprátoch.

Energetické medzery so symetriou  $s^-$ ,  $d_{x^2-y^2}$  a  $d_{xy}$  však majú nielen uzly, teda nulové body v k-priestore, ale menia aj svoje znamienko. Väčšina experimentov, vrátane vyššie spomenutých, je však citlivá len na absolútnu hodnotu energetickej medzery. Experimenty založené na Josephsonovom jave (kapitola 16) sú však citlivé aj na znamienko vlnovej funkcie, resp. energetickej medzery supravodiča.



Obr. 14.9: Experiment Tsuia a Kirtleyho [53]. Pozri text.

Pre definitívne potvrdenie symetrie typu  $d_{x^2-y^2}$  vo vysokoteplotných kuprátoch bolo potrebné vykonať takéto experimenty. Obr. 14.9 prezentuje slávny experiment Tsuia a Kirtleyho [53]. Autori skonštruovali supravodivé prstence na tenkých supravodivých filmoch. Tenké filmy boli nanesené na podložku z trikryštálu, kde každý z 3 kryštálov mal inú orientáciu osí x a y, teda (100) a (010). Supravodivé filmy kopírovali túto kryštalografickú orientáciu. Hranice medzi zrnami kryštálov sú na obr. 14.9 označené hrubými čiarami. Litografickými technikami bola časť filmu mimo prstencov odstránená. Výsledkom boli prstence obsahujúce žiadnu, jednu a tri hranice zín vo svojom vnútri. Prstence obsahujúce žiadnu alebo jednu hranicu zŕn vykazovali zvyčajné kvantovanie magnetického toku cez prstenec  $\Phi = \Phi_0 = h/2e$ . Ale prste-

nec s tromi hranizami zŕn vykazoval kvantovanie

$$\Phi = (n+1/2)\Phi_0 . (14.8)$$

Vysvetlenie takéhoto prekvapujúceho kvantovania je práve zmena znamienka energetickej medzery  $\Delta_k$  v troch zrnách supravodivého zrna v strede na obr. 14.9 za predpokladu, že symetria energetickej medzery je  $d_{x^2-y^2}$ . Kvantovanie toku v supravodivom prstenci vychádza z požiadavky jednoznačnosti makroskopickej vlnovej funkcie. Poločíselné kvantovanie toku v trikryštálovom prstenci svedčí o fakte, že na rozdiel od *s*-vlnového prípadu má tu vlnová funkcia vnútornú štruktúru a to konkrétne typu  $d_{x^2-y^2}$ . Pomocou ultra citlivých skvidovských magnetometrov bol nozaj v takýchto prstencoch nájdený magnetický tok rovný pol kvanta  $\Phi_0/2$ . V súčasnosti bolo poločíselné kvantovanie magnetického toku nájdené v mnohých dierových aj elektrónových vysokoteplotných supravodivých kuprátoch. To svedčí, že symetria  $d_{x^2-y^2}$  je univerzálna pre túto triedu materiálov.

Bohužiaľ, určenie symetrie parametra usporiadania v kuprátoch neznamená automaticky určenie supravodivého mechanizmu v týchto materiáloch.  $d_{x^2-y^2}$  symetria je totiž kompatibilná s viacerými možnými mechanizmami. Nekonvenčná symetria je však nezlučitiľná s klasickým BCS fonónovým mechanizmom supravodivosti, ktorý vedie ku *s*-vlnovému párovaniu.

#### 14.6 Vysokoteplotní kupráty

V roce 1986 Müller a Bednorz z laboratoře IBM v Zurichu objevili vysokoteplotní supravodivost, za což v roce 1987 dostali Nobelovu cenu [9]. V této laboratoři byla více než dvacetiletá tradice výzkumu elektricky nevodivých oxidů s perovskitovou strukturou, jako SrTiO<sub>3</sub> a LaAlO<sub>3</sub>, na nichž se studovaly strukturní a feroelektrické přechody. U těchto materiálů je možné malou změnou chemického složení výrazně měnit jejich elektrické vlastnosti. Například částečnou redukcí, to je ubráním kyslíku, se  $SrTiO_3$  stane supravodivým s kritickou teplotou 0,3 K. Tato teplota je sice nízká, ale je zajímavé, že vůbec supravodivý je. Hustota nosičů náboje je v něm totiž velmi malá, např. ve srovnání se supravodivým NbO, který má hustotu náboje jako normální kovy. V roce 1973 byla Johnstonem objevena supravodivost v Li-Ti-O s kritickou teplotou 13 K. Ale připravit tento materiál jako jednofázový bylo složité. V roce 1975 objevil Sleight supravodivost v systému  $BaPb_{1-x}Bi_xO_3$ s kritickou teplotou 13 K, který bylo možné připravit jednoduše, i ve formě tenké vrstvy. Tyto oxidy kovů se smíšenou valencí mají malou hustotu stavů na Fermiho hladině, jenom  $\approx 4 \times 10^{21}$  cm<sup>-3</sup>. Aby jejich kritická teplota byla takto vysoká, musí v nich podle BCS teorie existovat silná elektronová-fononová interakce [10]. A právě mezi takovými materiály by mohly být supravodiče s vysokou kritickou teplotou. Snaha o zvýšení kritické teploty změnou poměru Pb:Bi ale ukázala, že v systému dojde k přechodu kov-izolátor a změně struktury.

Podle Chakravertyho modelu při nízkých teplotách a rostoucí "konstantě" elektronové-fononové vazby  $\lambda = N(E_{\rm F})V$  systém přechází z kovového stavu do stavu bipolaronového izolátoru přes supravodivý stav [11]. Proto se hledání soustředilo na materiály, ve kterých dochází k Jahnově-Tellerově (JT) jevu. Jde o spontánní deformaci (zkroucení) nelineární molekuly nebo molekulárního komplexu, který je elektronově degenerovaný, což vede k sejmutí nebo zmenšení degenerace. S rostoucí stabilizační energií  $E_{\rm JT}$  roste tendence lokalizace elektronů. Když je  $E_{\rm JT}$  velká jako šířka vodivostního pásu, měly by vznikat JT polarony. Polaron tvoří elektron a polarizovaná krystalová mřížka v jeho okolí. Je to kvazičástice, která se může krystalovou mřížkou pohybovat. Bednorz a Müller soustředili pozornost na oxidy přechodových kovů Ni, Fe a Cu, které mohou být vodivé a ve kterých je JT jev silný.

V roce 1985 Raveau studoval oxid La-Ba-Cu, který měl v rozsahu teplot -100 až 300 °C kovovou vodivost, to je odpor rostoucí s teplotou. Tento oxid s perovskitovou strukturou má Cu ionty se dvěma různými valencemi a změnou poměru La:Ba je možné jejich valenci spojitě ladit. Motivován tímto v lednu 1986 Bednorz zjistil, že jeho vzorek oxidu La-Ba-Cu se chová jako kovový vodič a při 11 K dojde k poklesu elektrického odporu (měřeno čtyřbodovou odporovou metodou). První připravené vzorky byly vícefázové. Aby zjistil, která fáze je supravodivá, začal s La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub> a postupně zvyšoval obsah Ba na úkor La. Struktura se postupně měnila z ortorombicky (kosočtverečná) zkroucené na tetragonální (čtvercová). Nejvyšší kritickou teplotu 35 K měly vzorky s koncentrací Ba blízkou strukturnímu přechodu. Pomocí rentgenové strukturní analýzy a měření elektrického odporu a magnetické susceptibility bylo možné jasně identifikovat supravodivou Ba dopovanou La<sub>2</sub>CuO<sub>4</sub>

fázi. Dále se ukázalo, že nahrazením  ${\rm La}^{3+}$ iontů i<br/>onty  ${\rm Sr}^{2+}$ o stejném poloměru kritická teplota vzrostla na 40 K. Tyto výsledky byly potvrzeny skupinou Tanaky z univerzity v Tokiu a skupinou Chu<br/>a z univerzity v Houstonu.

Objev měl obrovský ohlas a v laboratořích po celém světě se začaly připravovat keramiky všech možných představitelných kombinací s cílem dosáhnout co nejvyšší kritické teploty. Další substitucí, nahrazením La<sup>3+</sup> iontů malými ionty Y<sup>3+</sup>, dosáhltým z univerzity v Alabama-Huntsville v lednu 1987 zvýšení kritické teploty na 92 K. Sloučenina YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> je obyčejně označována jako YBCO nebo Y123. Tento materiál je supravodivý už v kapalném dusíku (77 K). Další pokrok byl dosažen použitím Tl v roce 1993 na univerzitě v Coloradu a na ETH v Zurichu. Od února 1994 drží rekord 138 K Tl dopovaný kuprát HgBaCaCuO. Při tlaku 30 GPa jeho kritická teplota ještě o 25 až 30 K vzroste. Historický vývoj kritických teplot objevených materálů je na obrázku 14.10.



Obr. 14.10: Vývoj maximální kritické teploty supravodičů. Teplota kapalného dusíku, levné kryokapaliny, určuje významnou hranici pro široké uplatnění supravodivosti v praxi.

Výchozí strukturou pro YBCO je YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6</sub>, antiferomagnetický (AF) izolátor s Néelovou teplotou  $T_{\rm N} \approx 300$  K. Postupným dopováním se stává kovovým vodičem a při nízkých teplotách supravodičem, viz. obr. 14.11.

YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6</sub> má ortorombickou strukturu, viz. obr. 14.12 vlevo. Dve  $CuO_2$  roviny jsou oddělené jednou rovinou  $Y^{3+}$  iontů, jejichž úloha je jenom držet  $CuO_2$  roviny od sebe. Nahrazení Y jiným z mnoha lanthanoidů (vzácných zemin) vede ke zhoršení supravodivých parametrů. Vně CuO<sub>2</sub>-Y-CuO<sub>2</sub> dvojvrstev jsou BaO roviny (Ba má valenci 2+) a CuO řetízky, které jsou paralelní s osou b. YBCO je jediná sloučenina s vysokým  $T_{\rm c}$ , která má jednorozměrné CuO řetízky. V YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> jsou řetízky úplné, v YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6</sub> nej-

sou žádné. Každý Cu i<br/>ont v CuO<sub>2</sub> rovině je obklopen pyramidou pěti O iontů. Dopování je dosaženo přidáním dalších O iontů, které se ukládají do CuO řetízků. CuO řetízky slouží jako rezervoár náboje. Obsah O v YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>x</sub> může být vratně měněn mezi x = 6,0 až 7,0 žíháním v kyslíku nebo vodíku. Zvýšení obsahu O vede k tetragonální symetrii základní buňky [12].

V roce 1988 byla na pracovištích v USA a Japonsku objevena druhá třída kuprátů, která má obecný chemický vzorec Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Ca<sub>n</sub>Cu<sub>n+1</sub>O<sub>2n+6-d</sub> a zkráceně se označuje BSCCO, viz. obr. 14.12 vpravo. BSCCO bylo prvním vysokoteplotním supravodičem (VTS), který neobsahoval žádnou vzácnou zeminu. Aby byly supravodivé, musí být dopovány substitucí kationtů, to je nahrazením Bi Pb nebo nadbytečnými kyslíkovými atomy. Jednotlivé typy BSCCO jsou obyčejně označovány podle sekvence počtu kovových iontů. BSCCO-2201 či Bi2201 (Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Cu<sub>1</sub>O<sub>8</sub>) má kritickou teplotu 40 K, BSCCO-2212 či Bi2212 (Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Ca<sub>1</sub>Cu<sub>2</sub>O<sub>8</sub>) má kritickou teplotu 95 K a BSCCO-2223 či Bi2223 (Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>10</sub>) má kritickou teplotu  $T_c = 107$  K. Kritická teplota optimálně dopovaných BSCCO roste s počtem CuO<sub>2</sub> vrstev, oddělených Ca vrstvami a vložených mezi SrO vrstvy, je-li jich od jedné do tří, pak začíná klesat.



Obr. 14.11: Fázový diagram dopovaných kuprátů. Počty děr a elektronů jsou na jeden atom Cu v CuO<sub>2</sub> rovině. Optimum je pro  $\approx 0.16$  [13]. Elektronovou vodivost mají jenom kupráty ceru (Nd,Pr,Sm,LaPr)CeCuO, všechny ostatní mají děrovou vodivost.

V nedopovaném kuprátu jsou Cu<sup>2+</sup> ionty v konfiguraci 3d<sup>9</sup> a fyzikální a chemické vlastnosti  $CuO_2$  vrstev určují hybridizované Cu  $3d_{x^2-y^2}$  nebo  $3d_{z^2}$  a O 2p orbitaly.<sup>1</sup> V dopovaném kuprátu jsou Cu<sup>3+</sup> ionty v 3d<sup>8</sup> konfiguraci a v důsledku JT jevu se osmistěn či pyramida z kyslíkových iontů kolem Cu iontu prodlouží ve směru osy c. Optimálně dopované kupráty, které mají nejvyšší kritickou teplotu, nejsou stechiometrické.

#### 14.6.1 Krystalová a magnetická struktura

Rentgenová i neutronová difrakce na krystalech VTS jsou náročné, protože při růstu krystalů dochází ke vzniku strukturních poruch.

Kvalitní krystaly jsou malé, mají objem kolem  $1 \times 1 \times 0, 1 \text{ mm}^3$ . Rentgenová měření se proto většinou dělají na synchrotronech, které jsou zdrojem dostatečně jasného

 $<sup>^{1}</sup>$ Měď  $^{29}$ Cu má konfiguraci  $3d^{10} 4s^{1}$ . Běžné oxidy jsou Cu<sub>2</sub>O a CuO.

Rentgenová i neutronová difrakce ukazují,

že krystalová struktura

dopovaných kuprátů je

modulovaná, s nadstruk-

turou, která se projeví

satelitními reflexemi na

tura je nesouměřitelná,

s přibližně periodickou

modulací poloh atomů v

krystalu. Tato modulace

roste s klesající teplotou

[14]. Na obr. 14.13 vlevo

difraktogramu. Nadstruk-

záření. V případě neutronové difrakce se na držák často lepí několik krystalů.



Obr. 14.12: Krystalová lotních supravodičů  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (vlevo)  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$  (vpravo).

vaná nejméně, což znamená, že je nejtužší a nejvíce drží svou původní strukturu.

Nejměkčí je BiO rovina. Vzdálenosti Cu-Cu jsou 0,37 - 0,4 nm (v YBCO a LCO jsou 0,38 nm) a Cu-O jsou 0,15 až 0,24 nm [15].

Podobně rezonanční rozptyl rentgenového záření v La $_{1.875}$ Ba $_{0.125}$ CuO<sub>4</sub> ukazuje na periodickou modulaci hustoty děr na kyslíkových iontech s periodou  $4a_0$ , kde  $a_0$  je rozměr elementární buňky. Z toho se vyvozuje, že uspořádání náboje na dlouhou vzdálenost vede ke vzniku vln nábojové hustoty - CDW (z angl. Charge Density Wave), které tvoří statické proužky (proužkovou fázi) paralelní s osou b, vzdálené od sebe  $4a_0$ .

Podobná modulace je vidět na neutronovém difraktogramu dopovaného LSCO (viz obr. 14.14), získaného nepružným rozptylem neutronů [16]. Kromě rezonančního maxima, které je souměřitelné s mříží, měření ukazují

4 reflexe s nesouměřitelným vlnovým vektorem  $Q \pm \delta$ . Nesouměřitelné reflexe mohou pocházet od sinusoidálních spinových vln, pomalu fluktuujících v prostoru a čase,

je modulovaná struktura Bi2212 v rovině ac, zrea = 5.4Å konstruovaná z rentgenové difrakce. Ve směru struktura vysokoteposy a má periodu 2,6 nm,  $\mathbf{a}$ což je 4,8 násobek rozměru  $a_0$  základní buňky.  $CuO_2$  rovina je modulo-



Obr. 14.13: Modulovaná struktura Bi2212 v rovině ac, zrekonstruovaná z rentgenové difrakce [15].

nebo od "proužkové" fáze.



Obr. 14.14: Difrakční obraz nepružného rozptylu neutronů na krystalu LSCO. Šedé hvězdičky jsou souměřitelné antiferomagnetické reflexe s vektorem  $Q = (\pm \pi/a, \pm \pi/b)$  od nedopovaného krystalu, ideálního Mottova izolátoru. Dopováním souměřitelné reflexe zaniknou a jsou nahraženy 4 rozšířenými nesouměřitelnými dynamickými reflexemi (černé čtverce a kolečka) s nesouměřitelností  $\delta$ . Reflexe základní mříže jsou velké šedé tečky. Dopováním vzniknou nové reflexe (černé trojúhelníky a ovály) s nesouměřitelností 2 $\delta$  [16].

V "proužkové" fázi je spinová vlna souměřitelná lokálně, ale fáze se skokem mění o  $\pi$  v periodické řadě doménových stěn, zakončených antifázovými hranicemi - proužky nábojové hustoty. Protože perioda magnetické struktury je  $8a_0$ , soudí se, že nesouměřitelné reflexe pocházejí od "proužkové" fáze.

Obecně vlny spinové hustoty -SDW (z angl. Spin Density Wave) a vlny nábojové hustoty pocházejí z vnoření Fermiho povrchu - FS (z angl. Fermi Surface) do Brillouinovy zóny (BZ) v nízkorozměrných systémech. SDW jsou důsledkem Coulombické interakce. CDW jsou důledkem elektronové-fononové interakce a FS perfektně vnořeného do BZ, což vede k 1D transportu. SDW i CDW mohou být statické či dynamické. Vznikem proužků se 4-četná symetrie CuO<sub>2</sub> rovin sníží na 2-četnou a translační i rotační symetrie je spontánně narušena. Spinové vlny mají dvojnásobnou periodu než nábojové,  $\lambda_{\rm CDW} = \lambda_{\rm SDW}/2 =$ 2,5 nm. Otázkou je, zda supravodivost (tedy Cooperovy páry delokalizované v reálném prostoru) může existovat současně se statickými SDW či CDW.

Schody na povrchu krystalu YBCO, které jsou důsledkem modulovaných podmříží, jsou dobře patrné na obr. 14.15, získaném pomocí mikroskopu atomárních sil (angl. *Atomic Force Microscopy*).

#### 14.6.2 Transport elektronů

Měření termoelektrické síly (Seebekův jev) ukazuje, že LSCO, YBCO a BSCCO mají v normálním stavu děrovou vodivost. Elektronovou vodivost (viz obr. 14.11) mají jenom kupráty ceru. Dopováním kuprátů se kvalitativně mění charakter teplotní závislosti elektrického odporu v normálním stavu, jak je znázorněno na obr. 14.16. Optimálně dopované kupráty mají závislost odporu na teplotě v *ab* rovině  $\rho_{ab}(T) \propto aT$  a ve směru osy c  $\rho_c \propto aT + b/T$ . Vodivost je silně anizotropní, ve směru osy c je 10<sup>2</sup> až 10<sup>4</sup> krát menší než v rovině *ab*.

Podle současných představ jsou za supravodivost zodpovědné  $CuO_2$  roviny.





Obr. 14.15: Na povrchu krystalu YBCO jsou patrné schody nm měřítka, které ilustrují nadstrukturu vznikající v důsledku modulovaných podmříží krystalové struktury [17].

orbitalu. Mottův izolátor je materiál, který by podle konvenčních pásových teorií měl být elektricky vodivý, protože má lichý počet elektronů připadajících na elementrání buňku. Ve skutečnosti je ale (při nízkých teplotách) izolátorem, v důsledku silné interakce mezi elektrony, která není v běžné formulaci pásové teorie započítána. Řada oxidů přechodových kovů je Mottovými izolátory.

"Umělcův pohled" na

transport elektronů v konvenčním (BCS) supravodiči a vysokoteplotním supravodiči je na obr. 14.17. Vznik zakázaného pásu energií (zdomácněl pro něj anglický výraz gap) je důsledkem soutěže mezi odpudivým Coulombickým potenciálem U mezi 3d elektrony a přenosovým integrálem (angl. *transfer integral*) t d elektronů mezi nejbližšími sousedy. Nejjednodušší teorií popisující Mottovy izolátory je Hubbardův model [18].

Kupráty představují systém silně korelovaných elektronů, jejichž poloha a pohyb jsou korelované s dalšími elektrony. Zatímco pro popis elektronů v běžném kovu obvykle postačí aproximace středního pole, kupráty vzhledem k jejich anizotropii představují nízkorozměrný systém, ve kterém můžeme pozorovat supravodivost, vlny nábojové hustoty, vlny spinové hustoty, kolosální magnetorezistenci, atd. Je tedy otázkou, zda elektronový systém může vůbec být adekvátně popsán modelem Fermiho kapaliny nebo spíše modelem Luttingerovy kapaliny.



Obr. 14.16: Teplotní závislost elektrického odporu kuprátů pro různé dopování. Nahoře: odpor v rovině ab. Dole: odpor ve směru osy c. Zleva: nedopovaný, poddopovaný, skoro optimálně dopovaný, předopovaný.

Fermiho kapalina (FK) je termín pro kvantově mechanickou kapalinu fermionů, která vzniká za jistých fyzikálních podmínek při dostatečně nízkých teplotách a ve vztahu k supravodivosti byla dikutována v předchozí kapitole 13. Fenomenologická Landauova teorie (viz kapitola 3 o vlastnostech normálního kapalného <sup>3</sup>He) vysvětluje, proč některé vlastnosti systému interagujících fermionů jsou velmi podobné vlastnostem ideálního Fermiho plynu (viz kapitola 1), zatímco jiné se významně liší.

Při malých excitačních energiích a nízkých teplotách může být dynamika a termodynamika Fermiho kapaliny i neinteragujícího Fermiho plynu popsána pomocí kvazičástic, které mají stejný spin, náboj a hybnost jako původní částice. Pohyb kvazičástic je ovlivňován ostatními kvazičásticemi v jejich okolí. Každý excitovaný mnohačásticový stav interagujícího systému může být popsán pomocí všech obsazených stavů, jako v neinteragujícím systému. V důsledku toho např. tepelná kapacita, stlačitelnost a spinová



Obr. 14.17: V konvenčních supravodičích (vlevo) je supravodivost důsledkem elektronové-fononové interakce. Pod kritickou teplotou  $T_c$  elektrony vytvoří Cooperovy páry, které kondenzují do jednoho fázově koherentního stavu. Páry vázané přitažlivou interakcí zprostředkovanou fonony jsou v singletním stavu s nulovým spinem. Ve vysokoteplotních supravodičích (vpravo) jsou za supravodivost zodpovědné CuO<sub>2</sub> vrstvy. V nedopovaném materiálu na každém iontu Cu<sup>2+</sup> sedí jeden elektron a systém je antiferomagnetický izolátor. Dopováním vzniknou díry, které přeskakují na sousední ionty [19].

susceptibilita kapaliny mají stejnou, lineární, závislost na teplotě jako v případě plynu, ale jejich velikost je změněna.

Ale energie mnohačásticového systému není jednoduše součtem jednočásticových energií všech obsazených stavů. Změna energie při dané změně  $dn_k$  obsazení stavů k obsahuje lineární i kvadratické členy  $dn_k$  (u Fermiho plynu je jenom lineární člen). Lineární příspěvek odpovídá renormalizovaným jednočásticovým energiím a obsahuje například změnu efektivní hmotnosti částic. Kvadratický příspěvek odpovídá interakci typu středního pole mezi kvazičásticemi, která určuje chování oscilací hustoty náboje a spinu v kapalině. Interakce typu středního pole nevedou k rozptylu kvazičástic, při kterých dochází k přechodům mezi stavy s různou hybností.

Mezi kvazičásticemi navíc k interakcím typu středního pole přibývají další slabé interakce, které vedou ke srážkám kvazičástic mezi sebou. Proto mají kvazičástice konečnou dobu života. Nicméně při energiích nepříliš vysoko nad Fermiho povrchem mohou tyto kvazičástice žít velmi dlouho. Při nulové teplotě má i rozdělení kvazičástic v prostoru hybností skok na Fermiho hladině (jako Fermiho plyn), ale je menší než z 1 (obsazené) na 0 (prázdné). Při nízkých teplotách je elektrický odpor kovu dán elektronovým-elektronovým rozptylem a anharmonickými U-procesy, do kterých přispívá krystalová mřížka fonony s hybností  $\hbar \mathbf{G}$ , kde  $\mathbf{G}$  je vektor reciproké mřížky. Elektronový-elektronový rozptyl vede k $T^2$ závislosti na teplotě, což se často považuje za experimentální důkaz existence Fermiho kapaliny, podobně jako lineární teplotní závislost měrného tepla.



Obr. 14.18: Na dolním obrázku je "očekávané" fotoemisní spektrum v normálním a supravodivém stavu. V normálním stavu je hustota stavů v okolí Fermiho hladiny skoro konstantní a obsazení stavů je dáno Fermiho-Diracovým rozdělením. Podle BCS teorie v důsledku vzniku supravodivé energetické mezery  $\Delta$  v okolí Fermiho hladiny zmizí kvazičásticové stavy, které jsou nahraženy zvýšenou hustotou stavů nad a pod mezerou, v důsledku čehož má závislost intenzity na energii lokální maximum na její hraně. Fotoemisní spektra BSCCO nahoře a uprostřed ukazují, že v tomto materiálu k úplnému zániku stavů v mezeře nedojde [25].

378

Luttingerova kapalina (LK) je teoretický model popisující elektrony (fermiony) v jednorozměrném vodiči (kvantových drátech, uhlíkových nanotrubičkách). V 1D případě model FK selhává. LK byla poprvé předpovězena Tomonagou v roce 1950. V roce 1963 Luttinger teorii přeformuloval do tvaru Blochových zvukových vln a ukázal, že omezení zavedená Tomonagou byla potřebná k tomu, aby se s poruchami druhého řádu mohlo zacházet jako s bosony. Odpovědí nábojové (částicové) hustoty na vnější poruchu jsou zvukové vlny (plazmony), šířící se rychlostí, která je určena silou interakce a střední hustotou. V neinteragujícím systému je tato rychlost stejná jako Fermiho rychlost, přitažlivá interakce vede k jejímu snížení, odpudivá ke zvýšení. Podobně existují vlny spinové hustoty, jejichž rychlost je v prvním přiblížení rovna Fermiho rychlosti.

Ve Fermiho kapalině kvazičásticové excitace nesou spin i náboj. V Luttingerově kapalině se spinové vlny šíří nezávisle na nábojových vlnách, což je jev známý jako separace spinu a náboje, popsaný spinonen a holonem.

K experimentálnímu studiu vlastností elektronové struktury kuprátů se používají dvě komplementární povrchové metody: úhlově rozlišená fotoemisní spektroskopie - ARPES (z angl. Angle-Resolved PhotoEmission Spectroscopy) pro zobrazení v reciprokém (k) prostoru, a řádkovací tunelová mikroskopie (STM angl. *Scan*-

ning Tunneling Microscopy) pro zobrazení v reálném (r) prostoru. Prakticky všechna měření jsou na vzorcích BSCCO, protože krystaly tohoto materiálu, na rozdíl od YBCO, je možné díky slabé kohezi mezi BiO vrstvami štípnout tak, že se vytvoří atomárně hladký povrch. Vrstvy BiO a SrO jsou izolátory.

ARPES je metoda studia elektronové struktury povrchu pevných látek, která umožňuje rozlišení hybnosti elektronů, což je důležité při zkoumání nízkorozměrných a silně anizotropních systémů [20]. Měřením kinetické energie  $E_k$  a směru pohybu (úhlu) elektronu vyraženého ze vzorku fotonem s energií  $h\nu$ , která je větší než výstupní práce  $\phi$  materiálu, je možné získat informace o energii i hybnosti jednoelektronových excitací v reciprokém prostoru v pevné látce. Ze zákona zachování energie dostaneme

$$E_{\rm k} = h\nu - \phi - |E_{\rm B}|,\tag{14.9}$$

kde je  $E_{\rm B}$  je vazebná energie. Protože hybnost dopadajícího fotonu $h\nu/c$ , kdec je rychlost světla, je ve srovnání s hybností elektronu zanedbatelná, použitím vztahu  $k = \sqrt{2mE_{\rm k}}/\hbar$ určíme složku hybnosti kolmou k povrchu a paralelní s povrchem. Cílem těchto měření je určit disperzní relaci elektronů E(k), to je relaci mezi vazebnou energií a hybností elektronu pohybujícího se v pevné látce.



Obr. 14.19: 2D mapa spektrální intenzity fotoemise, která ukazuje *d*-vlnovou symetrii [22].

ARPES přímo dává Greenovu funkci  $G(\mathbf{k}, \omega)$ , která popisuje pohyb elektronu v mnohačásticovém systému. To je důležité pro vysvětlení souvislosti mezi elektronovou, magnetickou a chemickou strukturou pevných látek, hlavně v komlexních systémech, které nemohou být popsány pomocí nezávislých částic. Pokrok této techniky a jejího využití v posledním desetiletí přinesl novou éru fotoemisní spektroskopie. Zařízení mají citlivost okolo 1 meV a 0,2 úhlového stupně a dávají detailní informace o disperzi pásů E(k) a Fermiho povrchu, stejně jako o síle a podstatě mnohačásticových korelací, které mohou ovlivňovat jednoelektronová excitační spektra a určovat makroskopické fyzikální vlastnosti. Bohužel aparatury pro ARPES nejsou elektromagneticky stíněné a z principu nelze studovat vliv magnetického pole na vzorek.

Fotoemisní spektrum z BSCCO je na obr. 14.18. Obr. 14.19 představuje 2D mapu nízkonergetické spektrální intenzity, která má maxima (světlé části) ve tvaru Fermiho oblouků ve směru uzlů d stavové vlnové funkce, to je ve směru  $(0, 0) - (\pi, \pi)$ , a minima ve směru  $(0, \pi) - (\pi, \pi)$ , v oblasti, kde je FS vnořený do BZ a má přímé části [22].



Obr. 14.20: Měření řádkovacím tunelovým mikroskopem ukazuje proužky hustoty elektronových stavů v Bi2212 paralelní s osou b a široké  $4a_0$  [23].

Řádkovací tunelová mikroskopie umožňuje zobrazení povrchů s atomárním rozlišením.<sup>2</sup> Je založena na kvantovém tunelování elektronů mezi vodivým hrotem a povrchem vodiče nebo polovodiče. Tunelující proud je úměrný hustotě stavů a vzdálenosti elektrod, se kterou ubývá exponenciálně. Při nízkých napětích je tunelový proud funkcí lokální hustoty stavů LDOS (z angl. Local Density Of States) na Fermiho povrchu. Pohybem hrotu po povrchu, který je řízen piezoposuvy, dostaneme závislost proudu na laterální poloze. STM vyžaduje extrémně čisté povrchy a ostré hroty. Laterální citlivost dobrých STM je 100 pm a vertikální 10 pm. Většina těchto měření probíhá v ultravysokém vakuu, při tlaku menším než  $10^{-9}$  Pa, a vzorky jsou štípnuty "in situ" přímo v aparatuře.

Na obr. 14.20 je vidět, že hustota stavů v ab rovině vytváří proužky, které jsou rovnoběžné s osou b a široké  $4a_0$ . Proužky nemohou být přímo spojeny s dopováním, to je jednotlivými

atomy příměsí, protože ve zde uvedeném materiálu připadá na 20 Cu-O-Cu vazeb jeden atom příměsi, který je v různých látkách na krystalograficky odlišných místech.

#### 14.7 Shrnutí

Před objevem vysokoteplotních supravodičů v 80. letech minulého století se zdálo, že fenomén supravodivosti byl zcela pochopen a uspokojivě teoreticky popsán. Ale dnes, více než dvacet let po objevu vysokoteplotních supravodičů (VTS), stále ne-umíme uspokojivě vysvětlit proč jsou tyto materiály supravodivé.

Shrňme body, ve kterých se vysokoteplotní supravodiče liší od těch klasických:

 $<sup>^2 \</sup>rm Vyvinuli ji v roce 1981 Binnig a Rohrer z IBM v Zürichu a v roce 1986 za ni dostali Nobelovu cenu za fyziku.$ 

Mají jinou symetrii parametru uspořádání. Zatímco elektronové páry v klasických supravodičích mají *s*-vlnovou funkci, řada experimentů ukazuje, že ve vysokoteplotních supravodičích mají *d*-vlnovou funkci. Pro tuto symetrii nelze klasickou BCS teorii jednoduše zobecnit.

Kupráty mají vrstevnatou perovskitovou strukturu a jsou proto silně anizotropní. Koherenční délka  $\xi$  je ve srovnání klasickými supravodiči malá. V YBCO je  $\xi$  v *ab* rovině 2 nm, což je zhruba pětinásobek rozměru elementrální buňky, a ve směru osy c 0.4 nm, což je zhruba třetina rozměru elementrální buňky. Horní kritické pole  $H_{c2} \propto 1/\xi^2$  monokrystalů je 120 T pro  $\boldsymbol{B}$  kolmé a 250 T pro  $\boldsymbol{B}$  paralelní s CuO<sub>2</sub> rovinami. Naopak hloubka vniku magnetického pole  $\lambda$  je mnohem větší, v *ab* rovině je 120 nm a ve směru osy c 800 nm. V polykrystalických vzorcích BSCCO je horní kritické pole 200 T a v polykrystalických vzorcích YBCO je 168 T při teplotě 4.2 K. Ginzburgův-Landauův parametr  $\kappa = \lambda/\xi$  dosahuje hodnot řádu 100 a VTS jsou tak typickými reprezentanty supravodičů II. druhu.

Podle současných představ je supravodivost kuprátů spojená s CuO<sub>2</sub> vrstvami. Základní stav těchto vrstev je antiferomagnetický Mottův izolátor s elektrony lokalizovanými v reálném (r) prostoru, na každém Cu iontu je jeden. Ubráním malé části těchto elektronů, tj. dopováním děrami částečnou substitucí prvků nebo přidáním kyslíku, se elektronový systém transformuje na supravodivou kapalinu delokalizovaných Cooperových párů. Během této transformace vniknou dvě odlišné třídy elektronových excitací. Pro vysoké energie vznikne záhadná pseudo-energetická mezera - tzv. pseudogap, který představuje ochuzení hustoty elektronových stavů nad kritickou teplotou. Poprvé byl pozorován pomocí NMR (kde byl chybně interpretován jako spinový) a pomocí měření tepelné kapacity. Nízkoenergetické excitace jsou Bogoliubovovy kvazičástice, které pocházejí z roztržených Cooperových párů. Ty obsazují pouze omezenou oblast v reciprokém k-prostoru, která se rychle zmenšuje s klesající hustotou děr. Současně se spektrální váha (hustota) posune v r-prostoru ke stavům s vyššími energiemi, které postrádají charakteristické excitace od delokalizovaných Cooperových párů. Tyto stavy v atomárním měřítku lokálně narušují translační a rotační symetrii, nezávisle na energii. Excitace v r-prostoru jsou stavy pseudogapu. S klesající hustotou děr, jak systém přechází do stavu Mottova izolátoru, zmizí delokalizované Cooperovy páry v k-prostoru a jsou nahrazeny stavy v pseudogapu.

Podle některých fyziků hraje pseudogap v záhadné vysokoteplotní supravodivosti klíčovou roli. Nyní ale bylo zjištěno, že existuje i v úplně jiných materiálech a tak přirozeně vzniká otázka, zda skutečně se supravodivostí přímo souvisí. Na experimentálním zařízení LAS (Advanced Light Source) v Berkeley našli pseudogap v manganátech (LaSrMnO), oxidech manganu, které jsou pod jistou kritickou teplotou feromagnetické a vykazují obří magnetorezistenci CMR (angl. *Colossal MagnetoResistence*). Pseudogap je v těchto materiálech stejný jako v kuprátech, i když feromagnetizmus je považován za pravý opak supravodivosti. Je tedy otázka, zda pseudogap je charakteristickým znakem VTS nebo je to jev charakteristický pro oxidy přechodových kovů a vytváření polaronů je pro ně charakteristické.

"Fyzika a chemie" CuO<sub>2</sub> vrstev je unikátní. Cu má neobvyklou valenci, semiko-

valentní vazbu a velmi silné JT zkroucení. Supravodivost a magnetické uspořádání by měly způsobovat stejné elektrony. Pak ale budeme mít izolátor a magnetizmus nebo kovovou vodivost a supravodivost. Kovová vodivost optimálně dopovaných kuprátů je podivná, tím spíše její lineární závislost na teplotě. Teplotní závislost vodivosti Fermiho kapaliny je kvadratická, což je dáno srážkami mezi elektrony. Pokud je elektronový systém jednorozměrný, pak místo modelu Fermiho kapaliny musíme uvažovat model Luttingerovy kapaliny popsaný Hubbardovým hamiltoniánem. Ale nikdo zatím neví, zda Hubbardův model je ten správný. Pro pochopení chování VTS je potřeba mít hluboké znalosti téměř z celé fyziky kondenzovaného stavu. Na druhé straně právě tato skutečnost tolik přitahuje. Od objevu VTS bylo o této tématice odhadem publikováno více než 100 000 článků. I přes záplavu detailních experimentálních dat jednoznačný výsledek nemáme. Něco musí "lepit" páry dohromady. Podle teorie BCS jsou tímto lepidlem vibrace mřížky - fonony. Jiné teorie navrhují: a) posouvání elektronů za sebou, b) strukturovanou hustotu náboje nebo proudu, c) spinové vlny, d) slabé kvantové spojení mezi elektrony na sousedních Cu iontech, e) proužky elektrického náboje ve vrstvách h) proudové smyčky v každém Cu-O čtverci. Většina teoretiků si myslí, že VTS přímo nesouvisí s kmity krystalové mřížky [24]. V každém případě však výzkum VTS přinesl obrovské vylepšení experimentálních technik.

#### 14.8 Literatura

- [1] C. Buzea, K. Robbie, Supercond. Sci. Technol. 18, R1 (2005).
- [2] R. Chevrel, M. Sergent, J. Prigent, Solid state chem. 3, 515 (1971).
- [3] X. Blase, E. Bustarret, C. Chapelier, T. Klein, C. Marcenat, Nature Materials 8, 375 (2009).
- [4] P. Szabó, P. Samuely, J. Kačmarčik et al., Phys. Rev. Lett. 87, 137005 (2001).
- [5] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Z. Phys. B 64, 189 (1986).
- [6] Y. J. Uemura et al., Phys. Rev. B 38, 909 (1988).
- [7] O. Fischer, M. Kugler, I. Maggio-Aprile, C. Berthod, Rev. Mod. Phys. 79, 353 (2007).
- [8] C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, Rev. Mod. Phys. 72, 969 (2000).
- [9] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Perovskite-type oxides the new approach to high-Tc superconductivity, Nobel lecture, December 8 (1987).
- [10] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [11] S. Lakkis et al., Phys. Rev. B 14, 1429 (1976).
- [12] M. R. Norman, Science 325, 1080 (2009).
- [13] www.wmi.badw-muenchen.de; z archivu P. Samuelyho.
- [14] Islam Z. et al., Phys. Rev. B 66, 92501 (2002).
- [15] X. B. Kan et al., Acta Cryst. B 48, 122 (1992).
- [16] A. Mourachkine, in Room-Temperature Superconductivity, Cambridge International Science Publishing, Cambridge UK, (2004).
- [17] Převzato z archivu Z. Janů
- [18] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, in Solid State Physics, Holt, Rinehart and Winston, New York (1976).

- [19] A. Cho, Science **314**, 1072 (2006).
- $[20]\,$  A. Damascelli, Physica Scripta  ${\bf T109},\,61$  (2004).
- [21] P. W. Anderson, in The theory of superconductivity in the High-T<sub>c</sub> cuprates, Princeton University Press, New Jersey (1997).
- $[22] \ ssrl.slac.stanford.edu/research/highlights\_archive/htsc.pdf$
- [23] J. A. Slezak et al., PNAS 105, 3203 (2008).
- [24] D. Clery, Science **314**, 1078 (2006).

## 15 Elektrodynamické vlastnosti supravodičů

#### M. Jirsa

Ve dvou předchozích kapitolách jsme zjistili, že v závislosti na velikosti Ginsburgova-Landauova parametru $\kappa$ rozdělujeme "svět" supravodičů na dva podstatně odlišné tábory. Při  $\kappa < 1/\sqrt{2}$  mluvíme o supravodičích I. druhu, pokud je  $\kappa$  $>1/\sqrt{2},$ jde o supravodiče II. druhu. Při magnetování materiálů z první skupiny (patří sem většina čistých kovů a jejich slitin) je magnetické pole z jejich objemu dokonale vytlačeno působením povrchových stínících proudů, tekoucích v povrchové vrstvě supravodiče hloubky vniku  $\lambda,$ a to až do hodnoty vnějšího pole intenzity  $H_c$ . To je maximální hodnota pole, kterou supravodič I. druhu snese a při jejím dosažení skokově přejde do normálního stavu (viz obr. 15.1). Režim, ve kterém je objem supravodiče dokonale magneticky stíněn, se nazývá Meissnerův [1].

Supravodiče II. druhu se chovají při magnetování podobně, neboť při zvyšování magnetického pole z nuly jsou z počátku také v Meissnerově stavu. Při dosažení magnetického pole  $H = H_{c1} \ll H_c$ začne magnetický tok pronikat do objemu



Obr. 15.1: Schéma magnetizačního procesu v supravodičích I. a II druhu. Svislá přerušovaná čára v poli  $H_c$  představuje skokový přechod mezi supravodivým a normálním stavem u supravodičů I. druhu. Plná čára je magnetizace supravodiče II. druhu. V obou případech jde o termodynamicky rovnovážný stav. Tento magnetizační proces je vratný neboli reverzibilní.

supravodiče ve formě supravodivých vírů [2]. Tomuto stavu supravodiče se říká stav smíšený a trvá až do dosažení druhého kritického pole,  $H_{c2}$ . Čím je Ginsburgův-Landauův parametr  $\kappa$  vyšší, tím větší je poměr  $H_{c2}$  ku  $H_{c1}$  a tedy tím širší je oblast smíšeného stavu.

V této kapitole se budeme podrobně zabývat elektrodynamickými vlastnostmi supravodičů druhého druhu, neboť jsou to právě tyto vlastnosti, které v největší míře ovlivňují možnosti použití supravodičů v technické praxi. Nejprve se budeme věnovat klasickým supravodičům druhého druhu a pak přejdeme k vysokoteplotním supravodičům.

# 15.1 Kvantované víry v "klasických" supravodičích druhého druhu

Supravodivý vír je útvar připomínající nanoskopickou kapiláru. V ose víru je jádro (angl. *core*) o průměru dvou koherenčních délek  $2\xi$ . Kolem jádra tečou stínící

proudy, tvořící obal víru, který má efektivní tloušťku rovnou hloubce vniku magnetického pole  $\lambda$ . Právě díky tomu, že stínící proudy představují miniaturní vír, podobně jako v supratekutém heliu a v BEC, vznikl název těchto magnetických kvantových objektů. V izotropních materiálech má vír kruhový průřez, přičemž osa víru sleduje směr vnitřního magnetického pole. Jádro je nesupravodivé. Každý vír nese právě jedno kvantum magnetického toku,  $\Phi_0 = h/2e=2.07 \ 10^{-15} \text{Wb}.$ 

Výpočet charakteristik víru v obecném případě vyžaduje numerické řešení Ginsburgových-Landauových rovnic. Pro  $\kappa >> 1/\sqrt{2}$  je však možné odvodit řadu analytických výrazů. Vlnová funkce má průběh daný výrazem

$$\psi(r) \approx \psi_{\infty} \tanh\left(\frac{r}{\xi}\right) e^{i\theta} \quad .$$
(15.1)

Její absolutní hodnota  $|\psi|$ tedy stoupá přibližně lineárně od nulové hodnoty ve středu jádra k 1 na jeho hraně,  $r \approx \xi$ , a zůstává na této hodnotě v objemu materiálu (viz obr. 15.2). Magnetické pole stínících proudů je téměř konstantní v oblasti jádra víru a exponenciálně klesá pro $r > \xi$ , jako

$$h(r) = \frac{\Phi_0}{2\mu_0 \pi \lambda^2} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad . \tag{15.2}$$

Z vlastností Hankelovy funkce nultého stupně  $K_0(x)$  lze odvodit tyto limitní případy:

$$h(r) \approx \frac{\Phi_0}{2\mu_0 \pi \lambda^2} \left( \ln \frac{\lambda}{r} + 0.12 \right) \quad \text{pro} \quad \xi \ll r \ll \lambda \quad , \tag{15.3}$$

$$h(r) \to \frac{\Phi_0}{2\mu_0 \pi \lambda^2} \left(\frac{\pi}{2} \frac{\lambda}{r}\right)^{1/2} \mathrm{e}^{-r/\lambda} \quad \mathrm{pro} \quad r \to \infty \quad .$$
 (15.4)

Pro  $r \rightarrow 0$  závislost h(r) nediverguje, ale ustálí se na konečné hodnotě (viz obr. 15.2). Energie supravodivého víru je tvořena kondenzační energií jádra a energií magnetického pole stínících proudů. Kondenzační energie na jednotku délky je

$$E_{\rm cond} = \frac{\mu_0 H_{\rm c}^2}{2} \pi \xi^2 \quad , \quad (15.5)$$

energie stínících proudů vyjde přibližně



Obr. 15.2: Průběh absolutní hodnoty vlnové funkce a magnetického pole h(r) supravodivého víru.

$$E_{\rm elm} = \mu_0 H_{\rm c}^2 2\pi \xi^2 \ln \kappa \quad . \tag{15.6}$$

385

10.1

Vidíme, že energie stínících proudů je  $(4 \ln \kappa)$ -násobkem kondenzační energie<sup>1</sup>. Z volné energie pro volný (osamocený) vír dostaneme první kritické pole

$$H_{c1} = \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2} \ln \kappa = \frac{H_c}{\sqrt{2}} \frac{\ln \kappa}{\kappa} .$$
 (15.7)

Se zvyšujícím se vnějším magnetickým polem počet vírů v supravodiči roste a v okamžiku, kdy se dostanou do vzdálenosti srovnatelné s  $2\lambda$  (k čemuž dojde velmi rychle), začnou na sebe navzájem působit. Vzhledem ke shodné symetrii magnetického pole vírů je jejich vzájemná interakce odpudivá. V důsledku toho víry zaujmou takové uspořádání, aby celková energie systému byla co nejnižší a takovým uspořádáním je (stejně jako tomu bylo v supratekutém heliu či BEC) hexagonální mřížka.

Síla, kterou působí proud okolí víru na magnetický tok víru sousedního, je

$$F_{\rm int} = \frac{\Phi_0^2}{2\mu_0 \pi \lambda^2} K_0 \left(\frac{x}{\lambda}\right) \quad , \tag{15.8}$$

kde x je vzdálenost mezi osami obou vírů. Tento vztah můžeme zobecnit na působení mřížky vírů na jeden konkrétní vír. Dostaneme

$$\boldsymbol{f}_{\text{int}} = \boldsymbol{J} \times \Phi_0 \hat{\boldsymbol{i}} \,, \tag{15.9}$$

kde J je vektor lokálního proudu v supravodiči<sup>2</sup> a  $\hat{i}$  je jednotkový vektor ve směru osy víru. Lorentzova síla na jednotku délky jednoho víru  $f_{int}$  působí kolmo na osu víru a na směr lokálního proudu J. K tomuto proudu je pak nutné přičíst případný příspěvek od vnějších zdrojů, např. transportní proud z připojeného zdroje proudu nebo proud naindukovaný změnou vnějšího magnetického pole.

Podívejme se ještě na reverzibilní rovnovážnou magnetizační křivku supravodiče. Je předem jasné, že se vnitřní magnetické pole  $B = \mu_0(H + M)$ , tedy magnetická indukce, bude vyvíjet jinak v nízkých, středních a velmi vysokých magnetických polích. Protože názornější veličinou než magnetická indukce je experimentálně lehce měřitelný magnetický moment (nebo přesněji magnetizace), budeme vyšetřovat závislost M(H). Pro velmi nízká pole H, až do hodnoty  $H_{c1}$ , magnetizace kvůli podmínce  $B = \mu_0(H + M) = 0$  kompenzuje nárůst magnetického pole, tedy -M = H, až dosáhne maximální hodnoty  $(-M = H_{c1})$  při  $H = H_{c1}$ . Pro pole vyšší než  $H_{c1}$ , ale dost nízká na to, aby vzdálenost vírů  $a \approx 0.049/\sqrt{B} \,\mu$ m byla větší než  $\lambda$ , začne rovnovážná magnetizace ostře klesat podle vztahu

$$-M = H - \frac{2\Phi_0}{\sqrt{3}\lambda^2} \left\{ \ln \left[ \frac{3\Phi_0}{\mu_0 \lambda^2 (H - H_{c1})} \right] \right\}^{-2} .$$
(15.10)

V oblasti $\lambda \leq a \leq \xi$ klesá magnetizace s rostoucím polem jako

$$-M = \frac{H_{c1}}{\ln \kappa} \left[ \ln(H_{c2}) - \ln(H) \right] \quad , \tag{15.11}$$

až pro  $H = H_{c2}$  zanikne.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Ve vysokoteplotních supravodičích je  $\kappa \approx 100$ . Tam tedy energie stínících proudů více než o řád převyšuje kondenzační energii. Proto lze v mnoha výpočtech jádro víru zanedbat.

 $<sup>^2 {\</sup>rm Je}$ to proud vznikající z "vnitřních" zdrojů – z gradientu lokálního magnetického pole, tedy rovnovážné, termodynamické odezvy prostředí.

$$-M \approx \frac{H_{\rm c2} - H}{2\kappa - 1}$$
 . (15.12)

Výsledky (15.10) až (15.12) jsou společně schématicky znázorněny na obr. 15.3.

#### 15.1.1 Upínání vírů a relaxace.

Ukázali jsme, že na víry působí Lorentzova síla, která je nutí k pohybu. Jakýkoli pohyb vírů má však za následek vznik elektrického pole ve směru proudu, s ním spojeného nenulového odporu a tím ztrát energie ve formě tepla. Pro vytvoření bezeztrátového supravodiče schopného nést co nejvyšší proudy potřebujeme zabránit pohybu vírů, fixovat je na jejich místech. Upínaní vírů zabraňuje nejen pohybu vírů v důsledku "vnitřního" proudu J z rovnice (15.9) (ten je relativně velmi malý), ale oponuje i vlivu mnohem silnějších proudů z vnějšího zdroje. S těmito proudy jsou spojeny silné gradienty vnitřního magnetického pole B. Lorentzova síla na jednotku objemu,

$$F_{\rm L} = J \times B$$
 , (15.13)

kde J je hustota *celkového* proudu v daném místě supravodiče, musí být kompenzována stejnou upínací silou. Avšak i v přítomnosti upínacích defektů, buď převahou Lorentzovy síly nad silou upínací nebo vlivem tepelné excitace, dochází k pomalému či rychlejšímu pohybu vírů ve směru Lorentzovy síly, podle velikosti uvedené nerovnováhy. Dochází buď k jednotlivým přeskokům vírů z jednoho upínacího centra k druhému nebo přímo k jejich "tečení" objemem supravodiče. Prvnímu režimu říkáme relaxace (angl. *flux creep*), druhému tečení magnetického toku (angl. *flux flow*). Přestože upínací defekty nejsou v posledním případě schopny magnetický tok zadržet, interakce vírů s nimi způsobuje viskózní brzdění pohybu.

#### 15.1.2 Model kritického stavu.

Nejdříve se podíváme na situaci, ve které je upnutí vírů dostatečně silné na to, aby kompenzovalo vliv Lorentzovy síly tak, aby se víry prakticky nepohybovaly, elektrické pole (s pohybem vírů spojené) bylo nulové a tedy aby byl nulový i odpor supravodiče. Označíme-li Lorentzovu sílu na jednotku objemu supravodiče  $f_{\rm L}$ , je jasné, že tato síla musí být menší než určitá kritická hodnota  $f_{\rm Lc}$ . Pokud připustíme, v souladu s realitou, že proud v nulovém poli neroste nade všechny meze, zjistíme z definice Lorentzovy síly (viz např. výraz (15.27)), že  $f_{\rm L}$  s polem klesajícím k nule bude klesat k nule také. Může tedy klesat i mezní, kritická síla  $f_{\rm Lc}$ . První vyšetřoval tzv. kritický stav (stav, kdy je nastavena kritická rovnováha mezi hnací a





Obr. 15.3: Schématický průběh rovnovážné (termodynamické) magnetizace v závislosti na přiloženém magnetickém poli.

upínací silou) Bean [3]. Jeho model popisuje tenkou nekonečnou desku supravodiče druhého druhu magnetovanou ve své rovině, takže odpadají problémy s demagnetizací (demagnetizační faktor je roven nule). Dále Bean předpokládal, že proud v supravodiči je všude konstantní. Podle Maxwellových rovnic je tomuto předpokladu ekvivalentní konstantní gradient vnitřního magnetického pole. Magnetizování vzorku pak probíhá podle obr. 15.4.



Obr. 15.4: schématický obraz magnetování nekonečné tenké desky supravodiče magnetované v rovině podle Beanova modelu. (a) zvyšování pole z nulové hodnoty, (b) snižování pole z maximální kladné hodnoty do záporné hodnoty - $H_{\rm s}$ , zajišťující plné přemagnetování vzorku.

Při magnetování vzorku z demagnetizovaného stavu  $H_{\text{ext}} = M = 0$  (například po ochlazení vzorku v nulovém poli (angl. zero field cooling - ZFC) se při zvyšování pole začne uvnitř vzorku u jeho povrchu vytvářet gradient pole  $dB/dx = J_c$ . Se zvyšujícím se polem se tento gradient posouvá do objemu vzorku (obr. 15.4 a), až při hodnotě pole  $H_{\rm s} = J_{\rm c} d/2$  celý vzorek vyplní (gradienty z obou stran se ve středu vzorku spojí). Toto pole se nazývá pole úplného průniku (angl. full penetration field). Při dalším zvyšování vnějšího

pole zůstává gradient pole konstantní a plocha uzavřená oběma větvemi gradientu se s polem nemění. To odpovídá Beanovu předpokladu, že proud je konstantní v celém objemu vzorku a že je na magnetickém poli nezávislý. Při snižování pole z dosažené maximální hodnoty se začne u povrchu vzorku vytvářet opačný gradient pole, který opět s dále se snižujícím polem prorůstá do vzorku podle obr. 15.4 (b), až při poli  $H = H_{\rm max} - 2H_{\rm s}$  se celý gradient převrátí. V okamžiku, kdy vnější pole klesne na nulu, je uvnitř vzorku stále zachyceno vnitřní pole. Tohoto efektu se využívá pro zachycení magnetického pole v tzv. supravodivých "permanentních" magnetech<sup>3</sup>.

Beanův model se běžně využívá k výpočtu "kritického" proudu – proudu odpovídajícího Beanovu kritickému stavu ze změřeného magnetického momentu,

$$J_{\rm c} = \Delta M / \Omega \quad , \tag{15.14}$$

kde  $\Delta M$  je rozdíl mezi horní a dolní větví magnetizační křivky a  $\Omega$  je geometrický faktor, závislý na tvaru vzorku. Vztah (15.14) byl odvozen s Beanovým dosti

 $<sup>^3{\</sup>rm Tyto}$ objemové supravodivé magnety zůstávají stálé za předpokladu nízké relaxace a stálého chlazení pod hodnotu kritické teploty.

hrubým předpokladem, že proud, tedy i gradient dB/dx, je v celém objemu supravodiče konstantní a nezávisí na magnetické indukci B. Pro některé základní tvary jsou výrazy pro  $\Omega$  uvedeny v následující tabulce. V této tabulce je vždy první člen

typ a tvar vzorku	geometrický faktor $\Omega$
vrstva o tloušťce $2a$ a rozměrech $b, c \parallel H$ (Bean)	2abc. a
disk o poloměru $r$ a tlouštce $d \parallel H$	$2\pi r^2 d. r/3$
kvádr o rozměrech $a \leq b$ a tloušťce $d \parallel H, d \ll a, b$	2 <i>abd.</i> $a(1-a/3b)/4$

ve výrazech pro geometrický faktor  $\Omega$  dvojnásobkem objemu vzorku. Vydělením tímto členem se výška magnetizační křivky v jednotkách magnetického momentu  $\Delta M$  (emu,  $10^{-3}$ Am<sup>2</sup>) převede na magnetizaci ( $10^{-3}$ A/m). Druhý člen je pak korekční faktor, specifický pro daný tvar. Všechny uvedené výrazy byly odvozeny bez uvážení demagnetizačních efektů. V důsledku toho jsou hodnoty  $J_c$  vypočtené z výrazu (15.14) podhodnoceny v nízkých magnetických polích, protože tam je demagnetizační efekt značný. Exaktní výpočet je nutné provést numericky [4], ale ve většině analýz se používá vzorec (15.14) i pro nízká magnetická pole.

Výraz pro kvádr platí i pro hranol (a = b). Korekční faktor pro hranol je pak shodný s faktorem pro jemu vepsaný disk, tedy disk o poloměru a/2.



Obr. 15.5: Typická magnetická hysterzní křivka supravodiče.

Podíváme-li se na reálnou magnetizační křivku supravodiče (obr. 15.5), zjistíme, že výraznou dominantou je centrální pík. Magnetický moment a od něho odvozený kritický proud tedy na magnetickém poli závisejí velmi silně a Beanův předpoklad proudu nezávislého na poli není splněn. Kim, Hempstead a Strnad [5] navrhli empirickou závislost

$$J_{\rm c} = \alpha / (B + B_0)$$
 , (15.15)

kde  $\alpha$  a  $B_0$  jsou konstanty.

Z exaktních výpočtů profilu magnetického pole uvnitř vzorku vyplynulo, že Beanův předpoklad konstan-

tního gradientu pole uvnitř vzorku je přesně splněn v případě nekonečné vrstvy magnetované v její rovině. Pokud se začne rozměr vrstvy ve směru pole snižovat, začne se profil pole uvnitř vzorku měnit, až pro tenkou vrstvu magnetovanou kolmo k rovině je profil vnitřního pole velmi deformovaný. Navíc vlivem demagnetizace dojde u okraje konečného vzorku k jeho přemagnetování, takže vnitřní pole u okraje vzorku má opačný směr než v objemu. Tento jev se markantně projeví např. u BiSCCO pásků – texturovaných granulárních struktur pro vysokoteplotní supravodivé vodiče. Pokud je takový pásek magnetovaný kolmo k rovině, je pole

na hranicích jednotlivých plochých zrn opačné než v jejich objemu a proud tekoucí mezi zrny teče v opačně orientovaném poli než je pole vnější.

#### 15.1.3 Tepelně excitovaná relaxace.



Obr. 15.6: schématický diagram periodického upínacího profilu, na horním obrázku bez Lorentzovy síly, na dolním skloněný vlivem Lorentzovy síly. V reálném vzorku mají pochopitelně jednotlivé bariéry různou výšku a jejich perioda také není konstantní. Při nenulové teplotě je tepelná energie dostatečně silná, aby umožnila některým vírům zachyceným na defektech se z defektu uvolnit a přeskočit na další, ve směru působení Lorentzovy síly. Pokud tento jednosměrný proud tepelně aktivovaných vírů není kompenzován např. magnetickou indukcí vlivem vhodně nastavené změny vnějšího magnetického pole, dojde k poklesu zachyceného magnetického pole, ke snižování vnitřního gradientu pole a s ním svázaného kritického proudu. Na druhou stranu, každý pohyb magnetického toku je spojen se vznikem elektrického pole a růstu elektrického odporu.

Teorii relaxace vypracovali Anderson a Kim [25]. Představme si, že na cestě víru supravodivou matricí leží idealizovaný periodický potenciál (viz obr. 15.6 nahoře). Výška bariery mezi jednotlivými lokálními minimy je

úměrná kondenzační energii zachycené části víru. Má-li tato zachycená část objem $d^3,\,{\rm pak}$  příslušná energetická bariera je

$$U_0 = p \ d^3 \mu_0 H_c^2 / 2 \quad , \tag{15.16}$$

kde p je faktor efektivity upnutí, většinou  $p \ll 1$ . Pokud je Lorentzova síla nulová, pravděpodobnost přeskoku do obou směrů je stejná. Při nenulové Lorentzově síle se upínací profil skloní (obr. 15.6 dole) a pravděpodobnost přeskoku ve směru Lorentzovy síly se výrazně zvýší. Efektivní bariéra je pak

$$U = p \ d^3 \mu_0 H_c^2 / 2 - J \Phi_B d^2 \quad , \tag{15.17}$$

kde druhý člen představuje vliv Lorentzovy síly, J hustotu elektrického proudu a  $\Phi_{\rm B}$  celkový magnetický tok svazku vírů. Na tomto potenciálovém profilu je frekvence přeskoků mezi jednotlivými potenciálovými minimy ve směru Lorentzovy síly

$$\omega = \omega_0 [\exp(-U/kT) - \exp(U/kT)] \quad . \tag{15.18}$$

kde  $\omega_0$  je tzv. elementární preskoková frekvence (angl. elementary attempt frequency). Rovnici (15.43) můžeme také modifikovat pro rychlost pohybu víru v daném směru

$$v = 2v_0 \sinh \frac{U}{kT} \quad , \tag{15.19}$$

kde  $v_0$  je rychlost svazku s nulovou upínací bariérou U = 0. Pokud je zpětný proud zanedbatelný, představuje výraz (15.19) důležitou Arheniovu závislost  $v = v_0 e^{-U/kT}$ .

Pokud je Lorentzova síla větší než upínací síla, pohybují se víry nebo jejich svazky tak dlouho, až dojde k takovému poklesu vnitřního proudu a tedy i Lorentzovy síly, že se nastaví rovnováha mezi ní a upínací silou. To platí zcela přesně při nulové teplotě. Pokud je teplota nenulová, mohou svazky vírů překonávat potenciální bariéry i v případě, že je Lorentzova síla *nižší* než upínací. Přeskoky mají za následek postupný pokles vnitřního gradientu pole, s ním spojeného kritického proudu a magnetického momentu v čase. Kritický stav je z tohoto hlediska hůře definován, je třeba jej zobecnit na vliv tepelných excitací.

Celkem přesný, ale matematicky i fyzikálně komplikovaný rozbor vlivu tepelných excitací na stabilitu výše uvedených veličin v čase provedli autoři práce [7]. Je možné provést i velmi zjednodušené odvození [6], ze kterého dostaneme pohybovou rovnici vírů ve tvaru

$$\frac{\partial B}{\partial t} = -\nabla (Bw\omega_0 \mathrm{e}^{-U/kT}) \quad , \tag{15.20}$$

kde w je střední vzdálenost elementárního přeskoku víru nebo svazku vírů (w je obecně funkcí B a J),  $\omega_0$  je elementární přeskoková frekvence (předpokládá se, že zpětné přeskoky jsou zanedbatelné) a U je výška bariéry pro přeskok víru, tedy rozdíl úrovně mezi potenciálním maximem a sousedním minimem. Řešením rovnice (15.45) pro konstantní vnější magnetické pole je

$$B = B_0 - R_B \ln t \quad , \tag{15.21}$$

odkud vyplyne také logaritmická závislost magnetizace na čase:

$$M = M_0 - R_0 \ln t \quad . \tag{15.22}$$

Beasley a spol. [7] ukázali, že jakékoli jiné módy pohybu vírů se utlumí výrazně rychleji než mód logaritmický. Ten tedy představuje jakýsi dynamický kritický ("rovnovážný") stav systému vírů s přihlédnutím k vlivu tepelné excitace<sup>4</sup>.

Ze vztahu (15.47) plyne, že logaritmická derivace magnetizace,  $R_0 = -\partial M / \partial \ln t$ , je parametr nezávislý na čase. Nazývá se logaritmická relaxační rychlost. V praxi se používá také tzv. normalizovaná logaritmická relaxační rychlost,  $S = -\partial \ln M / \partial \ln t$  $= R_0 / M$ .

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Poznamenejme, že uvedené tvrzení je pravdivé pouze v případě klasických supravodičů s relativně nízkou rychlostí relaxace. U vysokoteplotních supravodičů se relaxace od logaritmické závislosti odchyluje směrem k rychlejšímu časovému průběhu, zejména v počátku relaxace a v blízkosti kritických hodnot kterékoli z proměnných (J, B, T).

#### 15.1.4 Tečení supravodivých vírů

Je-li elektrický proud v supravodiči blízký kritickému, Lorentzova síla je schopna sklonit upínací profil natolik, že efektivní upínací bariéry zmizí. Víry nebo jejich svazky se pak mohou pohybovat supravodičem volně, pokud nenarazí na nějakou nenulovou bariéru<sup>5</sup>. Přestože je tento pohyb mnohem rychlejší než pohyb při relaxaci, je jeho rychlost omezena "třením" vírů o supravodivé prostředí. Tento režim se nazývá tečení vírů (angl. flux flow).

Odpor spojený s tímto typem pohybu magnetického toku se nazývá odpor při tečení vírů,  $\rho_f$ , na rozdíl od odporu supravodiče v normálním stavu  $\rho_n$ .

K vyšetření pohybu vírů v režimu tečení vypracovali Bardeen a Stephen [9] jednoduchý model, později další autoři [10, 11] řešili přímo časově závislé Ginsburgovy-Landauovy rovnice. Zde uvedeme jen nejdůležitější body teorie. Viskózní sílu můžeme vyjádřit jako  $\eta v_{\rm L}$ , kde  $\eta$  je koeficient "tření" prostředí a  $v_{\rm L}$  rychlost pohybu víru. Tato síla by měla být v rovnováze se Lorentzovou silou (na jeden vír),  $J\Phi_0$ . Vyjádříme-li odpor při tečení vírů jako  $\rho_{\rm f} = E/J$  a proud v tomto vztahu pomocí výše uvedené rovnováhy sil, dostaneme pro koeficient tření vztah

$$\eta = B\Phi_0/\rho_{\rm f} \quad . \tag{15.23}$$

Energii rozptýlenou díky tečení vírů za jednotku času můžeme vyjádřit jako $W=\eta v_{\rm L}^2.$ Z Bardeenova - Stephenova modelu plyne, že energie rozptýlená pohybem jádra víru je

$$W_{\rm c} = \frac{v_{\rm L}^2 \Phi_0^2}{4\pi \xi^2 \rho_{\rm n}} \tag{15.24}$$

a zhruba stejná energie je rozp<br/>týlena proudy vně jádra. Pokud součet těchto energií porovnáme <br/>s $\eta v_{\rm L}^2,$ dostaneme

$$\eta \approx \frac{\Phi_0 \mu_0 H_{c2}}{\rho_n} \tag{15.25}$$

a z výrazů (15.48) a (15.25) vyjde důležitý výsledek, že odpor při tečení vírů je ve vztahu k odporu v normálním stavu supravodiče jako

$$\frac{\rho_{\rm f}}{\rho_{\rm n}} \approx \frac{B}{\mu_0 H_{\rm c2}} \quad . \tag{15.26}$$

Při dosažení magnetického pole  $B = \mu_0 H_{c2}$  tedy  $\rho_f$  přejde plynule v  $\rho_n$ , což odpovídá faktu, že přechod mezi smíšeným a normálním stavem supravodiče je fázovým přechodem druhého druhu.

#### 15.2 Specifika vysokoteplotních supravodičů

V 80. letech minulého století se zdálo, že fenomén supravodivosti byl zcela pochopen a uspokojivě teoreticky popsán. Objev supravodivosti v kysličníkových materiálech v roce 1986 [12] však kromě obrovského posuvu v kritických teplotách (rekordní  $T_c$ 

 $<sup>^5\</sup>mathrm{V}$  supravodiči nejsou všechny defekty stejné a tedy i upínací bariéry jsou různě vysoké.

pro klasické kovové supravodiče je 23 K) přinesl i poznání, že jev supravodivosti je mnohem širší a komplexnější než se předpokládalo. Řadu aspektů vysokoteplotní supravodivosti jsme diskutovali v předchozí kapitole, na níž následující text navazuje.

Vysokoteplotní supravodiče (VTS) jsou směsné kysličníky, tvořící několik základních skupin. Do jedné patří materiály typu RE-Ba<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7- $\delta$ </sub> ("REBCO", "RE-123", kde RE značí vzácnou zeminu (angl. *rare earth*), některý z prvků La, Y, Nd, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Er, Tm, Yb nebo jejich kombinaci). Kritická teplota těchto materiálů se pohybuje v oblasti 90 – 96 K (s výjimkou LaBaCuO, kde  $T_c \approx 35 - 38$  K). V další skupině jsou materiály typu BiSrCaCuO, jejichž dvě fáze dosahují  $T_c \approx 80$  K a 110 K. Velmi vysokých kritických teplot dosahují TlBaCaCuO a HgBaCaCuO ( $T_c \approx 130$  K), vysokoteplotním supravodičem je ale také např. materiál bez vzácné zeminy F<sub>2</sub>Ba<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>6</sub> (F-0212,  $T_c \approx 108$  K). Jde vesměs o perovskitové struktury, jejichž základními stavebními kameny jsou supravodivé roviny CuO<sub>2</sub> oddělené "izolačními" rovinami Ba<sub>2</sub>O, RE<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a řetězci CuO. Ty slouží jako zásobník nosičů náboje. Před oxidací mají tyto látky tetragonální (nesupravodivou) strukturu, po oxidaci přejdou do fáze ortorombické, supravodivé.

Shrňme pro přehlednost body, ve kterých se vysokoteplotní supravodiče liší od těch klasických. Jsou to zejména:

- Odlišná symetrie párování elektronů. Zatímco elektronovým párům v klasických supravodičích přísluší vlnová funkce typu s (na čemž také stojí teorie BCS [13]), ve vysokoteplotních supravodičích řada experimentů ukazuje, že jde o párování typu d nebo podobné. Pro tuto symetrii nelze klasickou teorii BCS jednoduše zobecnit.
- Energetická mezera je mnohem širší než v klasických supravodičích, navíc je pravděpodobně komplikovaná množstvím intrinsických energetických stavů. V MgB<sub>2</sub> existují dokonce dvě energetické mezery.
- Koherenční délka  $\xi$  je řádově menší. S tím souvisí mnohem vyšší hodnota  $H_{c2} \propto 1/\xi^2$ , mnohem menší průměr jádra supravodivého víru  $2\xi$ , mnohem nižší kondenzační energie,  $U_c \propto \xi^2$ , tedy i energie upnutí víru. Zároveň se také posouvají rozměry účinných upínacích poruch k mnohem nižším hodnotám, do oblasti blízké atomárním rozměrům.
- Naopak hloubka vniku  $\lambda$  je mnohem větší a tím je i větší vzdálenost, na kterou spolu víry interagují. Ginsburgův-Landauův (GL) parametr  $\kappa = \lambda/\xi$  dosahuje hodnot řádu 100, což naznačuje, že vysokoteplotní supravodiče jsou typickými reprezentanty supravodičů II. druhu.
- Kysličníkové materiály mají vrstevnatou strukturu. Jsou proto silně anizotropní. Trojrozměrný "abrikosovský" supravodivý vír je zde reprezentován sloupcem více či méně volně vázaných dvourozměrných vírů koláčků (angl. pancakes). Takový vír je pochopitelně silně elastický, což značně komplikuje výpočty dynamiky pohybu vírů a modelů mechanismů upínání.

• V důsledku vysoké kritické teploty (šířky teplotní oblasti supravodivosti) dochází k mnohem vyšším tepelným fluktuacím, což ruku v ruce s malou aktivační energií vede k tzv. obří relaxaci (angl. giant relaxation) kritického proudu. Výsledkem relaxace je pak omezení ireverzibilního chování magnetického momentu pod tzv. čáru nebo hranici ireverzibility (angl. irreversibility line),  $H_{irr}(T) \ll H_{c2}(T)$ .

Z hlediska problematiky diskutované v této kapitole, tj. elektrodynamických vlastností, je zřejmé, že systém vírů ve VTS se může nalézat v řadě různých fází, v závislosti na teplotě, magnetickém poli, jeho orientaci vůči krystalografickým osám a na struktuře defektů. Výpočty energetické bilance při interakcích vírů mezi sebou a s materiálovými defekty jsou zde extrémně komplikované.

Další odlišností (spíše materiálového rázu, která však představuje značnou překážku ve využití těchto látek v praxi) je, že jde o křehké, nekovové substance, rostoucí ve formě malých krystalků. Vytvořit z nich velký homogenní blok, dlouhý homogenní vodič nebo velkoplošnou epitaxní vrstvu je velmi náročný technologický úkol.

#### 15.2.1 Supravodivý stav VTS

Při popisu vlastností nových supravodičů byla pochopitelná tendence vyjít z teorie BCS [13], která byla po desítky let velice úspěšným prostředkem při popisu vlastností klasických supravodičů. Zavedením vyšších hodnot  $T_c$ , anizotropie a příslušných hodnot Fermiho rychlosti a hustoty elektronových stavů se v řadě případů podařilo dostat uspokojivou interpretaci experimentálních dat i u vysokoteplotních supravodičů. Vždyť projevy nových supravodičů se v řadě aspektů velmi podobají supravodičům klasickým. Vysokoteplotní supravodivost je nepochybně opět založena na existenci Cooperových párů nositelů náboje - vzpomeňme na úvodní kapitolu o Boseově a Fermiho plynech. Párování elektronů v nových materiálech odlišné od klasické s-symetrie, podobně jako je tomu u supratekutých fází <sup>3</sup>He. Pokusme se zodpovědět, do jaké míry se tato odlišná symetrie projeví a jaké experimenty na ni ukazují.

Symetrie párování. S-symetrie párování elektronů v konvenčních supravodičích je svázána s izotropními vlastnostmi těchto látek. I energetická mezera je tam úhlově nezávislá. Perovskity jsou však látky výrazně anizotropní a lze proto očekávat, že se to odrazí i ve vlastnostech energetické mezery. Pokud výraz pro ni,  $\Delta_{\mathbf{k}} \propto \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow c_{\mathbf{k}\uparrow}} \rangle$ , jednoduše upravíme zavedením anizotropie krystalové mřížky, vyjde symetrie energetické mezery shodná se symetrií krystalové mřížky. V tetragonální krystalové mřížce jsou osy x a y ekvivalentní a symetrie mřížky  $d_{\mathbf{x}2-\mathbf{y}2}$  je tedy nezávislá na výměně x za y. Zato  $d_{\mathbf{x}2-\mathbf{y}2}$  symetrie párování elektronů na výměně x za y závisí a je tedy nižší symetrií než je symetrie krystalu. Pro orthorhombickou symetrii mřížky jsou směry x a y téměř ekvivalentní, takže situace je podobná případu tetragonální mřížky. Stav, kdy symetrie párování elektronů je nižší než symetrie mřížky, se nazývá nekonvenční párování (angl. unconventional pairing) a supravodivost v kysličnících je jedním z jeho příkladů.

Energetická mezera. Podle teorie BCS by měla být šířka energetické mezery

rovna 3.52-násobku  $k_{\rm B}T_{\rm c}$ . Z řady experimentů na VTS však vychází vyšší násobek, 4 až 7. To ukazuje, že nejde o slabě vázané supravodiče, jak předpokládá teorie BCS, ale že vazba je velmi silná.

Co se týče symetrie energetické mezery, přesná měření úhlově závislé fotoemise prokázala energetickou mezeru v  $\mathbf{k}$  – prostoru podél směrů  $k_x$  a  $k_y$ , zatímco mezi těmito směry byla její velikost potlačena. To jednoznačně podporuje symetrii  $d_{x2-y2}$ . Přestože velká řada experimentů naznačovala, že energetická mezera není "čistá", že je v ní řada stavů až po nulovou energii, daly se tyto výsledky interpretovat i na základě nečistot v měřených materiálech. V důsledku malé koherenční délky jsou i jednotlivé atomy schopny vyvolat poruchu v elektronové struktuře a na lokální úrovni energetickou mezeru potlačit. Tato pozorování však nevylučují interpretaci ve smyslu *d*-párování elektronů.

Nepřímým argumentem pro jiné než *s*-párování je také fakt, že většinu výsledků infračervené spektroskopie, měření hloubky vniku nebo jaderné magnetické rezonance na vysokoteplotních materiálech nelze vysvětlit v rámci teorie BCS.

Anizotropie - Lawrenceův-Doniachův model. VTS jsou v důsledku vrstevnaté struktury látky silně anizotropní. K popisu takové struktury se velmi dobře hodí Lawrenceův – Doniachův model [14]. V něm je volná energie vyjádřena jako součet volných energií jednotlivých vrstev. Fakt, že transport náboje v rovinách je podstatně odlišný od transportu mezi rovinami, lze vyjádřit různou velikostí efektivní hmoty  $m_{\rm ab}$  a  $m_{\rm c}$  nosičů náboje (při slabé interakci mezi CuO<sub>2</sub> vrstvami platí  $m_{\rm ab} \ll m_{\rm c}$ ). Minimalizací takto formulované volné energie dojdeme k Lawrenceově - Doniachově rovnici

$$\alpha \Psi_{n} + \beta \left|\Psi_{n}\right|^{2} \Psi_{n} - \frac{\hbar}{2m_{ab}} \left(\boldsymbol{\nabla} - i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}\right)^{2} \Psi_{n}$$
$$-\frac{\hbar^{2}}{2m_{c}s^{2}} \left(\Psi_{n+1}e^{-2ieA_{c}s/\hbar} - 2\Psi_{n} - \Psi_{n-1}e^{2ieA_{c}s/\hbar}\right) = 0 \quad , \tag{15.27}$$

kde s je vzdálenost mezi supravodivými vrstvami,  $\nabla$  a A jsou vektory v rovině (a,b). Povšimněme si, že s vystupuje jen v posledním členu rovnice (15.27), jenž odpovídá energii interakce podél osy c.

Ginsburgovo - Landauovo přiblížení. Pokud změny vlnové funkce podél osy c jsou malé, poslední člen v rovnici (15.27) vymizí a ta přejde v klasickou třírozměrnou Ginsburgovu-Landauovu rovnici [15],

$$\alpha \Psi + \beta \left|\Psi\right|^2 \Psi - \frac{\hbar}{2\mathrm{m}} \left(\boldsymbol{\nabla} - i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}\right)^2 \Psi = 0 , \qquad (15.28)$$

kde  $\nabla$  a A nyní leží v 3D prostoru a m je tenzor. Pro tento limit se ustálil název Ginsburgovo – Landauovo anizotropní přiblížení.

#### 15.3 Supravodivé víry ve vysokoteplotních supravodičích

Stejně jako v klasických supravodičích, i ve VTS přejde supravodič po překročení prvního kritického pole  $H_{c1}$  z Meissnerova stavu [16] do smíšeného stavu, ve kterém

magnetické pole v objemu supravodiče existuje ve formě tokotrubic – supravodivých vírů. Vír má jádro o průměru 2 $\xi$  a obal tvořený stínícími proudy, o průměru  $\lambda$ . Protože platí  $H_{c1} \propto \lambda^{-2}$  a  $H_{c2} \propto \xi^{-2}$ , jsou hranice smíšeného stavu  $H_{c1}$ ,  $H_{c2}$  v poměru čtverců obou charakteristických délek,  $\kappa^2 = (\lambda/\xi)^2$ . U vysokoteplotních supravodičů je  $\kappa \approx 10^2$ ,  $H_{c2}/H_{c1}$  je proto řádu 10<sup>4</sup> a šířka smíšeného stavu je obrovská.

Zopakujme si, že supravodivý vír nese právě jedno kvantum magnetického toku  $\Phi_0 = h/2e$ , stejně v izotropních i anizotropních látkách a tedy i ve vysokoteplotních supravodičích. Platí vztah

$$\Phi_0 = 2\sqrt{2\pi}B_{\rm c}\xi_{\rm j}\lambda_{\rm j} \quad , \tag{15.29}$$

kde index j odpovídá buď směru podél osy c nebo v rovině (a,b). Kritické pole  $B_c$  je sice teplotně závislé, ale je to izotropní veličina. Z rovnice (15.29) pak plyne, že  $\xi_j$  a  $\lambda_j$  jsou funkcemi úhlu  $\theta$ . Koherenční délka je ve VTS mnohem menší než v klasických supravodičích; opačné tvrzení platí pro hloubku vniku (pro oba základní směry). Anizotropii lze vyjádřit poměrem efektivních hmotností elektronového páru podél jednotlivých os,  $\gamma = \sqrt{m_c/m_{ab}}$ . Pomocí konstanty anizotropie  $\gamma$  můžeme jednoduše vyjádřit poměry velikostí úhlově závislých veličin podél hlavních os jako

$$\gamma = \frac{\lambda_{\rm c}}{\lambda_{\rm ab}} = \frac{\xi_{\rm ab}}{\xi_c} = \frac{B_{c2||ab}}{B_{c2||c}} = \frac{B_{c1||c}}{B_{c1||ab}} \quad . \tag{15.30}$$

Pro obecný úhel lze  $B_{c2}$  vyjádřit vztahem

$$B_{c2}(\theta) = \frac{\gamma B_{c2}(0)}{\sqrt{\left(\sin^2 \theta + \gamma^2 \cos^2 \theta\right)}} \quad , \tag{15.31}$$

kde  $\theta$  je úhel mezi směrem magnetického pole a osou c. Z výrazů (15.30) a (15.31) plyne, že  $B_{c2}$  v rovině (a,b), tedy  $B_{c2}(\pi/2)$ , je  $\gamma$ -krát větší než druhé kritické pole podél osy c,  $B_{c2}(0)$ . Opačná relace platí pro  $B_{c1}$ .



Obr. 15.7: Schématický obraz průběhu magnetického toku supravodičem s vrstevnatou strukturou.

Kvantum magnetického toku  $\Phi_0$ je integrálem toku neseného celým vírem. Protože ve vyskoteplotním supravodiči je efektivní poloměr obalu jádra, protékaného stínícími proudy,  $\lambda$ , cca 100 krát větší než poloměr jádra,  $\xi$ , znamená to, že je převážná část magnetického toku víru nesena jeho obalem. Pokud se koncentrace vírů zvýší do té míry, že vzdálenost mezi nimi je srovnatelná s  $2\lambda$ , začnou se víry navzájem silně ovlivňovat a v důsledku odpudivých sil se uspořádají do hexagonální mřížky. U supravodiče s  $\kappa = 100$  dojde k takovému stavu při
průměrné magnetické indukci kolem 0,02 T, tedy při hodnotě relativně nízké vzhledem k běžnému poli ireverzibility (v YBCO při 77 K kolem 7 T). Ve značné části oblasti smíšeného stavu se tedy víry vyskytují ve formě relativně husté mřížky, na jejíž ploše se hodnota magnetické indukce jen mírně vlní. S růstem magnetického pole toto zvlnění klesá a úroveň magnetické indukce roste, až při  $B \approx B_{c2}$  přejde supravodič do normálního stavu.

Směřuje-li pole (tedy i supravodivý vír) podél osy c, je průřez jádrem víru prakticky kruhový, s poloměrem  $\xi_{ab}$ . Uvědomme si však, že vír je ve vrstevnatém supravodiči tvořen jednotlivými koláčky (angl. *pancakes*) lokalizovanými v supravodivých rovinách. Tyto koláčky jsou v 3D režimu navzájem dobře vázané a pohybují se téměř jako klasický Abrikosovův vír. Začneme-li magnetické pole sklánět směrem k rovině (a,b), začnou se koláčky posouvat tak, aby jejich "sloupec" co nejlépe koreloval se směrem vnějšího pole. Na mikroskopické úrovni si můžeme představit, že jsou sousední koláčky ve sloupci propojeny "spojkou" ležící mezi dvěma sousedními supravodivými rovinami, tedy v rovině (a,b) (obr. 15.7). Tato "spojka" se s rostoucím úhlem  $\theta$  postupně prodlužuje, až pro pole rovnoběžné s rovinou (a,b) se stane regulérním vírem.

Jakýkoli úsek víru v rovině (a,b) má silně eliptické jádro (obr. 15.8) s poloosami  $\xi_{ab}$  a  $\xi_c$ . Druhé kritické pole v rovině (a,b) je pak  $B_{c2}(\pi/2)$  $= a(\kappa)\Phi_0/(\pi\xi_{ab}\xi_c)$ , v souladu s výrazy (15.30) a (15.31). U víru ležícího v rovině (a,b) má i prostor kolem jádra, ve kterém působí stínící proudy, eliptický tvar o poloosách  $\lambda_{ab}$  a  $\lambda_c$ ,  $\lambda_{ab} \ll \lambda_c$ . Zde je nutné si uvědomit, že



Obr. 15.8: Schématický náčrt průřezu supravodivým vírem v anizotropním supravodiči.

hloubka vniku magnetického pole podél určitého směru je definována velikostí efektu stínění způsobeného proudem tekoucím v daném směru: relativně malé  $\lambda_{\rm ab}$  směřuje podél osy c, zatímco větší  $\lambda_{\rm c}$  odpovídá rovině (a,b). Ginsburgův - Landauův parametr $\kappa$ v anizotropním supravodiči lze v obou základních směrech vyjádřit jako  $\kappa = \lambda_{\rm ab}/\xi_{\rm c}$  nebo $= \lambda_{\rm c}/\xi_{\rm ab}$ a je zřejmé, že tento parametr je úhlově nezávislý.

Pro většinu situací ve vysokoteplotních supravodičích je aproximace středního pole (Ginsburgova - Landauova teorie) dobře splněna, zejména při středních teplotách a blízko k  $T_c$ . Protože ale koherenční délka závisí na teplotě jako  $\xi_c(T) = \xi_c(0)(1-t)^{-1/2}$ , kde  $t = T/T_c$ , může v nízkých teplotách její hodnota klesnout pod úroveň, kdy podmínka kontinuity/plavnosti vlnové funkce ve směru osy c přestane platit. Pak je nutno počítat s diskrétní strukturou materiálu, kdy se jednotlivé supravodivé roviny budou projevovat nezávisle. Přechod mezi 3D a 2D režimem

nastane při teplotě  $T_{2D}$  definované zhruba vztahem  $\xi_c(T_{2D}) = s/\sqrt{2}$  (s je vzdálenost mezi supravodivými rovinami). Zatímco u uměle vytvořených tenkovrstvých kompozitů byl tento model bez problémů ověřen, u vysokoteplotních supravodičů je potíž v složitější struktuře materiálu: krystalografickou buňku tvoří dva i více systémů CuO rovin a s není přesně definováno, kromě toho tepelné fluktuace rozmývají oblast  $H_{c2}$ . Nicméně, pro realisticky odhadnuté hodnoty,  $\xi_c(0)=0,28$  nm pro YBCO,  $\xi_c(0)=0,01$  nm pro BiSCCO a s=1 nm pro oba materiály, vychází, že v YBCO je 2D přechod přibližně při 78 K, zatímco v BiSCCO k němu dojde v těsné blízkosti  $T_c$ . BiSCCO tedy vykazuje spíše 2D chování v celém teplotním oboru, zatímco YBCO pouze pod 78 K. Toto vše platí pro pole v rovině (a,b).

# 15.4 Magnetizační procesy

#### 15.4.1 Vliv anizotropie

V rámci londonovského modelu, uvažujícího pouze energii stínících proudů vně jádra víru, s anizotropním tenzorem hmotnosti místo konstantní hodnoty a při zanedbání demagnetizačního efektu za předpokladu  $B_{c1} \ll B \ll B_{c2}$ , lze volnou energii na jednotku objemu napsat ve tvaru

$$F = \frac{1}{2}B^2 + B^* \sqrt{B_{\rm ab}^2 + \gamma^2 B_{\rm c}^2} \quad , \tag{15.32}$$

kde $B_{\rm ab}$ a $B_{\rm c}$ jsou složky vektoru ${\pmb B}$ podle příslušných os, $B^*$  je relativně malé pole, velikostí srovnatelné s $B_{c1}(\pi/2){=}B_{c1}(0)/\gamma,$ 

$$B^*(\theta) \approx \frac{B_{c1}(0)}{\gamma} \ln \frac{\eta \gamma B_{c2}(0)}{\sqrt{\sin^2 \theta + \gamma^2 \cos^2 \theta}} \quad , \tag{15.33}$$

a  $\eta \approx 1$ .

Derivací výrazu (15.33) podle B dostaneme

$$H_{\rm j} = B_{\rm j} + B^* \frac{B_{\rm j}(\sin^2 \theta + \gamma^2 \cos^2 \theta)}{\sqrt{B_{\rm ab}^2 + \gamma^2 B_{\rm c}^2}} \quad , \tag{15.34}$$

kde $\theta$  je úhel mezi magnetickým polem a osou c. Odtud je zřejmé, že magnetizace  $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{B}-\boldsymbol{H}$  je malá, velikostí srovnatelná s $B^*\approx B_{c1},$  což dává oprávnění k zanedbání demagnetizace. Podstatné je, že složka magnetizace podél osy c je v důsledku vysoké hodnoty  $\gamma$  větší než složka v rovině (a,b). Vektor  $\boldsymbol{M}$  se tedy podstatně odchyluje od směru magnetického pole. Mimo jiné je to důsledek struktury perovskitů, kdy je supravodivý vír složen z koláčků ležících striktně v supravodivých rovinách, tedy vždy kolmo na osu c. Na druhou stranu, složka  $M_{\rm ab}$ , přestože menší než $M_{\rm c}$ , není nulová. Poměr $M_{\rm c}/M_{\rm ab}$  je úměrný  $\gamma^2$ , čehož lze právě ke stanovení anizotropní konstanty využít.

Za předpokladu, že víry jsou slabě upnuté a mohou se volně pohybovat, je k testování anizotropie experimentálně zvlášť vhodná torzní magnetometrie. Torze

na jednotku objemu je dána vektorovým součinem magnetizace a magnetického pole:

$$\boldsymbol{\tau}(\theta) = \boldsymbol{M}(\theta) \times \boldsymbol{H}(\theta)$$
 . (15.35)

Po dosazení lze její úhlovou závislost vyjádřit ve tvaru [17]

$$\tau(\theta) \propto \frac{(\gamma^2 - 1)}{\gamma} \frac{\sin 2\theta}{\sqrt{\sin^2 \theta + \gamma^2 \cos^2 \theta}} \ln \frac{\eta \gamma B_{c2}(0)}{B\sqrt{\sin^2 \theta + \gamma^2 \cos^2 \theta}} \quad . \tag{15.36}$$

Průběh této úhlové závislosti je znázorněn na obr. 15.9.



Obr. 15.9: Teoretická úhlová závislost normalizované torze (15.36) pro různé  $\gamma$ . Hodnota  $\gamma \approx 7$  dobře odpovídá YBCO a  $\gamma \approx 55$  BiSCCO [7].

Vliv logaritmické závislosti  $B^*(\theta)$  není pro nízké a střední hodnoty anizotropie příliš výrazný a úhlová závislost torze je v těchto případech dána především zlomkem před logaritmem. Pro  $\gamma \approx 1$  je  $\tau(\theta) \propto$  $\sin 2\theta$ , s maximem v  $\theta \approx \pi/4$ . S rostoucí hodnotou  $\gamma$  se maximum posune k  $\theta = \pi/2$ . Kromě toho se ale s rostoucím  $\gamma$  začne projevovat úhlová závislost pod logaritmem a závislost (15.36) se prohne vzhůru (viz obr. 15.9). Pro  $\gamma \to \infty$  přechod v  $\pi/2$  přejde v singulární skok. Fitem experimentální závislosti  $\tau(\theta)$  pomocí funkce (15.36) lze

zjistit hodnotu  $\gamma$  mnohem přesněji než měřením kritických polí  $B_{c1}$  a  $B_{c2}$ .

Vliv anizotropie na vazbu mezi supravodivými vrstvami byl testován i na uměle připravených multivrstvách. Na obr. 15.10 je měření torze na multivrstvě Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CuO<sub>y</sub> dopované lantanem ( $T_c = 28$  K) [8]. Měření bylo provádělo při teplotě 17,4 K v magnetickém poli 0,8 T. Fitováním výrazem (15.36) byla nalezena hodnota  $\gamma = 208$ .

Všechna zde uváděná měření torze [18, 19, 20, 21] byla prováděna v režimu reverzibilní magnetizace, kde nebylo třeba



Obr. 15.10: Normalizovaná úhlová závislost torze měřená při 17,4 K na multivrstvě  $Bi_2Sr_2CuO_y$  dopované lantanem ( $T_c = 28$  K).

brát v úvahu upnutí vírů a ty

se mohly volně pohybovat. Na

první pohled ve všech uvedených případech dobře fungoval teoretický popis pomocí 3D modelu. Velmi pečlivá měření torze v blízkosti roviny (a,b), zejména při nižších teplotách [22], vykázala odchylky od závislosti (15.36), které bylo možné interpretovat pouze na základě Lawrenceovy - Doniachovy teorie, v 2D režimu.

# 15.5 Pohyb vírů ve vysokoteplotním supravodiči

# 15.5.1 Teplotní excitace – čára ireverzibility

Již jsme se zmínili o malé hodnotě koherenční délky, se kterou souvisí malý průřez jádra vírů v porovnání s klasickými supravodiči. Zatímco kondenzační energie  $\propto B_c^2$  je u vysokoteplotních supravodičů vyšší než u klasických, charakteristický objem bodových poruch je mnohem menší. Celkově je upínací energie bodových defektů,  $U_0$ , u VTS i NTS zhruba srovnatelná. Co však srovnatelné není, je obor pracovních teplot. Zatímco u NTS se pohybujeme v okolí 4 K, u VTS je teplotní rozsah roztažen až k 90 K i výše. Protože pravděpodobnost teplotně aktivovaného procesu, jakým může být i uvolnění víru z bodové poruchy, je úměrná exp  $\{-U_0/k_{\rm B}T\}$ , může být u VTS argument exponenciální funkce až 25-krát menší,

což odpovídá zhruba  $10^{80}$ krát vyšší pravděpodobnosti uvolnění víru z poruchy a tedy příslušně silnější relaxaci supravodivých proudů. To má pochopitelně zásadní vliv na magnetizační procesy. Zatímco v klasických supravodičích přetrvávají v supravodivém stavu (tj. při teplotách pod  $T_{\rm c}$ ) stínící proudy a s nimi spojený ireverzibilní magnetický moment až do těsné blízkosti  $B_{c2}(T)$ , ve VTS je magnetický moment reverzibilní v širokém pásu polí pod  $B_{c2}$ a stává se ireverzibilním až pod tzv. hranicí ireverzibility (angl. irreversibility limit),  $B_{ir}(T) \ll B_{c2}(T)$ . Hranice ireverzibility je důsledkem obří relaxace ve VTS. Potřebujeme-li v apli-



Obr. 15.11: Supravodivý přechod měřený na tenké vrstvě YBCO připravené na polykrystalické podložce ze slitiny Hastelloy s biaxiálně orientovanou mezivrstvou ytriem stabilizovaného kysličníku zirkonu (YSZ) pro H||(a,b)|[32].

kacích vysoké kritické proudy a tedy vysoký ireverzibilní magnetický moment, musíme zajistit vysoký gradient vnitřního magnetického pole. Jinými slovy, musíme

zvýšit účinnost souboru upínacích defektů v supravodiči.



Obr. 15.12: Hranice ireverzibility (závislost  $B_{ir}(T)$ ) vyhodnocená z experimentu a obr. 15.10 pro dvě různé orientace magnetického pole [33].

Definovali jsme čáru ireverzibility  $B_{ir}(T)$  jako hranici, pod kterou je supravodič prakticky využitelný, protože v něm přetrvávají dostatečně vysoké kritické proudy. To ale znamená, že pohyb vírů lze téměř zanedbat a zanedbatelný je i odpor supravodiče.  $B_{ir}(T)$  se tedy dá zjistit nejen jako hodnota magnetického pole, při které se magnetická hysterezní křivka uzavře (magnetické experimenty), ale také z průběhu supravodivého přechodu (transportní měření) jako teplota, při které klesne odpor pod rozumně zvolený limit (viz obr. 15.11).

V nulovém magnetickém poli je supravodivý přechod relativně úzký, ale se zvyšujícím se polem se rozšiřuje. Pokud pro různá B stanovíme teplotu, při které křivka R(T) klesne pod zvo-

lenou hodnotu  $R_{\text{lim}}$  (v případě z obr. 15.10 by byla vhodná hodnota  $1\mu\Omega$ ), stanovíme závislost  $T_{\text{ir}}(B_{\text{ir}})$ , která v diagramu H - T udává hranici ireverzibility (viz obr. 15.12). Poznamenejme, že křivka  $B_{c2}(T)$  by zde v dané škále teploty a pole vycházela z bodu ( $H=0,T=T_c$ ) téměř kolmo vzhůru.



Obr. 15.13: Teplotní závislost pole ireverzibility, měřená na multivrstvách připravených střídavým nanášením  $YBa_2Cu_3O_y$  a  $Y_2O_3$  [25].

Hranice ireverzibility byla nalezena prakticky ihned po objevu VTS [23]. Bylo zjištěno, že s teplotou se tato hranice mění jako  $B_{\rm ir}(T) \propto (1-t)^{3/2}$ , kde  $t = T/T_{\rm c}$ , což bylo interpretováno jako důsledek chování mřížky vírů popsatelného modelem supravodivého skla [23]. Později se objevila řada dalších interpretací, např. že aktivační energie závisí na poli a teplotě jako  $U(T,B) \propto (1$  $t)^{3/2}/B$  [24]. Je však nutné poznamenat, že exponent 3/2 vychází z idealizovaných teoretických před-pokladů. Realita je jako vždy poněkud složitější, exponent se často od 3/2 liší

a většinou je nutné jej uvažovat jako fitovací parametr [25] (obr. 15.13). 15.5.2 Křivka tání mřížky vírů 3D režim

Již jsme se několikrát setkali s vlivem teplotních excitací na upínání vírů na defektech ve VTS, vedoucích k obří relaxaci kritických proudů. Doposud jsme ale uvažovali supravodivé víry jako ideálně tuhé útvary, organizované na základě interakce na velkou vzdálenost do ideální abrikosovské mřížky. Je však přirozené očekávat, že s rostoucí teplotou poroste nejen pravděpodobnost uvolnění 3D víru z defektu, ale může dojít i k destrukci ideální mřížky 3D vírů.

Předpokládejme, že vlivem tepelných fluktuací se určitý vír v pravidelné mřížce vychýlí ze své polohy. Podle Lindemannova kriteria ( $c_{\rm L} \approx 0, 17$ ) amplituda teplotních vibrací A dosáhne kvůli vratným odpudivým silám okolních vírů pouze zlomek průměrné vzdálenosti mezi víry  $a, A \approx c_{\rm L}a$ , kde  $c_{\rm L}$  je Lindemannův koeficient. Z úvah o mezích elastických sil v závislosti na tepelných fluktuacích lze odvodit výraz pro hod-



Obr. 15.14: Křivky teplotní závislosti odporu v řadě hodnot magnetického pole pro dva čisté monokrystaly YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub> s různým obsahem kyslíku ((a) y=6,92; (b) y=6,89) [55].

notu magnetického pole tání mřížky vírů,  $B_{\rm m}$ ,

$$B_{\rm m}(T,\theta) = \frac{K_1 \Phi_0^4}{\left(k_{\rm B}T\right)^2 \lambda_{\rm ab}^4 \gamma \left(\sin^2 \theta + \gamma^2 \cos^2 \theta\right)^{1/2}} \quad , \tag{15.37}$$

kde  $K_1 \ll 1$  je malá numerická konstanta. Při experimentech s konstantní teplotou T a měnícím se polem tedy můžeme při poli  $B_{\rm m}$  očekávat změnu. Podobně pro experimenty v konstantním poli s měnící se teplotou lze z výrazu (15.27) odvodit vztah pro teplotu tání mřížky,  $T_{\rm m}(B)$ .

Ze vztahu (15.37) jednak plyne úhlová závislost, kterou by veličina  $B_{\rm m}$  (nebo  $T_{\rm m}$ ) měla splňovat, jednak závislost teplotní, daná závislostí  $\lambda_{\rm ab}(T)$ , tedy  $B_{\rm m}(T) \propto$ 

 $(T_{\rm c}-T)^2$ v blízkosti kritické teploty nebo $B_{\rm m}(T)\propto (T_{\rm c}^4-T^4)$ v širším teplotním oboru. Stejnou úhlovou závislost jako $B_{\rm m}$ má však i $H_{\rm c2}$  (viz výraz (15.31). Z toho plyne, že poměr $B_{\rm m}/B_{\rm c2}$ je úhlově nezávislý,

$$\frac{B_{\rm m}}{B_{\rm c2}} \propto (kT\lambda_{\rm ab}\kappa)^{-2}.$$
(15.38)

Faktor v závorce je asi o 3-6 řádů vyšší než u klasických supravodičů, kde je hranice tání mřížky vírů prakticky shodná s  $B_{c2}(T)$ . U VTS se hranice značně rozštěpí. Výraz (15.28) dává kvalitativní náhled na důvody existence hranice tání 3D vírové mřížky.

Měření teplotní závislosti odporu velmi čistých monokrystalů YBCO bez dvojčatění ukázala drobný schod, systematicky se opakující pro různé hodnoty magnetického pole (viz obr. 15.14) [26, 55]. Schůdek navíc měnil tvar pro různé hodnoty magnetického pole a pro různý obsah kyslíku. V optimálně okysličeném krystalu v polích do 5 T představoval schůdek prakticky kolmý skok, interpretovaný jako fázový přechod prvního druhu, ( viz obr. 15.15 a) – body označené  $T_{\rm m}$  – odpovídající tání 3D mřížky vírů (někdy také nazývané Braggova mřížka nebo Braggovo sklo). Na stejném vzorku ve vyšších magnetických polích, 7 T < H <11 T (obr. 15.14a), a v celém oboru magnetických polí v krystalu s mírným nedostatkem kyslíku (obr. 15.14 b) měl schůdek sice ostrou hranu (značenou  $T_{\rm k}$ ), ta však jen pozvolna přešla k nulovému odporu (v bodě obvykle značeném  $T_{\rm g}$ ).



Obr. 15.15: Fázový B-Tdiagram systému vírů v čistém optimálně okysličeném YBCO krystalu bez hranic dvojčatění [56].

Tento pozvolnější průběh byl interpretován jako fázový přechod druhého druhu mezi fázemi vírového skla a vírové kapaliny. Různé fáze systému vírů z obr. 15.14 a jsou patrné z fázového diagramu na obr. 15.15. Plné kroužky vyznačují přechod 1. druhu mezi mřížkou 3D vírů uspořádanou na dlouhou vzdálenost (Braggovo sklo) a vírovou kapalinou. Plné trojúhelníky naznačují přechod druhého druhu mezi vírovým sklem (sklem bez uspořádání na dlouhou vzdálenost) a vírovou kapalinou. Obě hranice se setkávají v tzv. multikritickém bodě. Je zajímavé, že nad tímto bodem je přechod mezi vírovým sklem a kapalinou totožný s hranicí ireverzibility zjištěnou z magnetických měření.

Tato hranice se však pro nižší magnetická pole výrazně odchýlí od hranice  $T_{\rm m}(B)$  (obr. 15.15). Celé schéma se významně změní se změnou obsahu kyslíku. Kyslíkové vakance totiž do vzorku vnášejí bodové upínací defekty. S jejich rostoucí koncentrací se multikritický bod posouvá doprava dolů, až pro určitou koncentraci defektů splyne s bodem  $(T_c,$ B=0). Porovnání fázových diagramů vzorků z obr. 15.14 a,b je uvedeno na obr. 15.16 a,b.  $H_{\rm p}$  v obrázcích značí polohu sekundárního píku na magnetizační křivce (k tomuto efektu se dostaneme později). Defi-



Obr. 15.16: Fázový B - T diagram systému vírů (a) v čistém, optimálně okysličeném YBCO krystalu ( $y = 6,92, T_c=93,3 \text{ K}$ ) bez hranic dvojčatění a (b) v krystalu se značným obsahem kyslíkových vakancí ( $y = 6,89, T_c = 93,0 \text{ K}$ ) [55].

nice hranic $T_{\rm k}(B)$  a  $T_{\rm g}(B)$ jsou patrné z obr. 10 a,<br/>b. Mezi hranicemi $T_{\rm k}(B)$  a  $T_{\rm g}(B)$ se vírový systém má nacházet v<br/>e stavu jakési vírové huspeniny, čehosi mezi sklem a kapalinou, někdy nazývaném zárodečné 3D<br/> vírové sklo.

Tání supravodivé mřížky má jiný průběh v materiálech s relativně nízkou anizotropií (a tedy silnější vazbou mezi supravodivými rovinami jako je YBCO), a materiály vysoce anizotropními, kde jsou koláčky v jednotlivých vírech vázány relativně volně (BiSCCO). Systém vírů přejde z 3D režimu do režimu 2D, pokud síly působící na určitý vír-koláček v jeho rovině jsou silnější než působení koláčků ze sousedních rovin. Kritické magnetické pole pro tento přechod,  $B_{\rm cr}$ , vyplyne z faktu, že síly mezi koláčky v jedné rovině jsou na poli (tedy koncentraci vírů) závislé, zatímco síly mezi vrstvami ne. Z této úvahy vyjde

$$B_{\rm cr} \approx \Phi_0 / (s\gamma)^2, \tag{15.39}$$

kde s je vzdálenost mezi supravodivými rovinami. Čím větší anizotropie, tím je  $B_{\rm cr}$  nižší. Tato veličina je navíc teplotně nezávislá. Pro YBCO vychází tento limit mimo experimentálně dosažitelná pole. Pro BiSCCO leží v oblasti jednotek T. Nad touto hranicí interagují víry v každé ze supravodivých rovin mezi sebou silněji než s víry

v sousedních rovinách, jsou tedy v 2D režimu. Pod  $B_{\rm cr}$  víry vnímají i své sousedy z jiných rovin a systém je 3D.

Experimentálně byly fázové přechody v 2D systému vírů zkoumány nejrůznějšími metodami, jednak na polykrystalických páscích, jednak na monokrystalech.



Obr. 15.17: H - T diagram sestavený z dat transportních měření na pásku Bi-2223.

vším vírů uvnitř zrn. V silně anizotropní látce jako je BiSCCO musíme počítat s projevy 2D režimu.

Fázový přechod prvního druhu byl pozorován také na čistých krystalech BiSCCO, např. odporovým měřením v nízkých teplotách a vysokých polích (obr. 15.18) [30] nebo kombinací měření lokální magnetizace pomocí série hallovských mikrosond a polní závislosti odporu v nízkých polích při středních a vyšších teplotách (obr. 15.19) [31]. Na obr. 15.18 je vidět změna v chování závislosti odporu na teplotě a autoři tvrdí, že nad teplotou  $T^{\ast}$ má odpor charakter tepelně aktivovaného procesu (řídí se Arheniovým zákonem,  $R \propto \exp(-U_0/k_{\rm B}T)$ , zatímco pod  $T^*~R~\propto~(T~-$ 

Na obr. 15.17 jsou experimentální data vynesena do fázového diagramu spolu s několika teoretickými hranicemi. Plná čára vpravo je schématická hranice  $H_{c2}(T)$ , šrafovaný vodorovný pás je hranicí přechodu mezi 3D a 2D vírovou kapalinou podle výrazu (15.39), svislý šedý pás představuje hranici tání 2D vírového systému (15.13). V uvedené práci je však interpretován jako přechod mezi 2D kapalinou a tzv. zárodečnou 3D kapalinou. Ta pak na hranici  $H_{\rm g}(T_{\rm g})$  přechází v neuspořádanou mřížku vírů (vírové sklo -angl. vortex glass). Tento přechod se týká přede-

2.0 00000 SLOPE = 0.17 1.5 Bi: 2212 H = 3.0 T Ĥ∥ĉ (T6/(R) n)6) 1.0 0.3 ([1-2) = 20.2 K Ta 0.5 H/T 0.0 25 30 35 20 T (K)

Obr. 15.18: Výsledky odporových měření  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$  [30].

 $T_{\rm g})^{\nu(z-1)}$ . Závislost exponentu na magnetickém poli je vynesena ve vloženém obr. 15.18. Je téměř nezávislý na poli, v souladu s předpoklady modelu vírového skla, navíc je jeho hodnota velmi blízká hodnotě získané na YBCO krystalech. Hranice  $H^*(T^*)$  je autory interpretována jako přechod 3D-2D systému vírů. Křivka  $H_{\rm g}(T_{\rm g})$  představuje hranici, pod kterou je odpor nulový.



Obr. 15.19: Fázový diagram vyplývající z měření [30].

dynamické) magnetizaci.

Tři typy experimentů (měření lokální magnetizace, závislost odporu na teplotě v konstantním poli a závislost odporu na poli při konstantní teplotě) daly shodnou křivku  $B_{\rm m}(T)$ [31], podobnou té z obr. 15.20 [?]. Fázový diagram v tomto obrázku ukazuje oblast nízkých polí s téměř dokonalou mřížkou vírů s uspořádáním na dlouhou vzdálenost [34], která táním na hranici  $B_{\rm m}(T)$ (přechodem 1. druhu)

Vrátíme-li se k obr. 15.15 a připustíme, že tamější  $T_k$  je totožné s  $T^*$  z obr. 15.19, dostáváme kvalitativně podobný obraz 3D režimu v YBCO. Bod setkání obou křivek na obr. 15.19 by pak odpovídal multikritickému bodu z obr. 15.15 (a) a prostor mezi křivkami  $T^*$  a  $T_g$  by byl oblastí přechodu 2. druhu k silně upnutému vírovému sklu ve vysokých polích a nízkých teplotách.

Kombinované měření odporu a magnetizace v závislosti na magnetickém poli u krystalu Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub> [31] ukázalo, že odpor klesl na nulu přesně v témže poli, ve kterém byl pozorován schod na reverzibilní (termo-



Obr. 15.20: B - T diagram v širokém oboru teploty a pole pro monokrystal Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8</sub> [33].

přejde ve vírovou kapalinu. Hranice tohoto přechodu končí v multikritickém bodu

 $T_{cp}$ , kde se setkává s křivkou  $B_{sp}(T)$ , značící počáteční hranu sekundárního píku na magnetizační křivce – viz obr. 15.21 – a křivkou  $B_{IB}(T)$ , označující hranici objemové ireverzibility. Ta byla deteko-vána z přímého měření dH/dx, udávajícího podle Beanova modelu (a také Maxwellovy rovnice) míru kritického proudu v objemu supravodiče. Hranice ireverzibility, tedy pole, při kterém dH/dx vymizí, je zde interpretována jako přechod 2. druhu mezi vírovým sklem (angl. disordered solid) a vírovou kapalinou (angl. vortex liquid). Podobné výsledky byly získány i dalšími experimenty [35].

Pokud zkombinujeme H-T(B-T) diagramy z obr. 15.19 a 15.20, dostaneme zhruba stejný obraz jako pro polykrystalický vzorek (obr. 15.17). Kvalitativně je pak tento fázový diagram podobný i diagramu čistého YBCO, obr. 15.16.

## 15.6 Upínání vírů

Magnetický moment supravodičů je momentem elektrických proudů indukovaných změnou vnějšího magnetického pole. Podle Maxwellovy rovnice rot H = J je proud tekoucí uvnitř supravodiče ekvivalentní gradientu vnitřního magnetického pole. Jinými slovy, aby-



Obr. 15.21: Magnetizační křivka měřená systémem Hallových sond na monokrystalu  $Bi_2Sr_2CaCu_2O_8$  [33].

chom v objemu supravodiče získali reálný proud, ireverzibilní magnetický moment nebo zachycené magnetické pole, potřebujeme v supravodiči vytvořit gradient vnitřního magnetického pole. Protože velikost tohoto pole je dána lokální hustotou supravodivých vírů, potřebujeme zabránit pohybu vírů z daného prostoru nebo ho alespoň co nejvíce omezit, tj. potřebujeme víry efektivně upnout pomocí upínacích poruch nebo defektů. Jinak lze tentýž požadavek formulovat tak, že s pohybem vírů jsou spojeny energetické ztráty a s nimi souvisí nenulový elektrický odpor.

U VTS je situace komplikovaná tím, že jádro víru má velmi malý průřez. V důsledku toho jsou víry schopny interagovat i s velmi nepatrnými poruchami mříže, které se jednak špatně detekují, ale také je obtížná jejich řízená produkce a distribuce. Navíc typ efektivních upínacích poruch souvisí i s formou vzorku a metodou jeho přípravy (ať jde o monokrystalický či polykrystalický materiál ve formě tenké vrstvy nebo masivního bloku). Na každý vír v supravodiči působí Lorentzova síla  $F_{\rm L} = J \times B$ , která se snaží snížit vnitřní gradient pole, avšak upínací síla defektů je naopak schopná ji kompenzovat a pohybu vírů zabránit.

Defekty můžeme třídit podle nejrůznějších kriterií. Tím nejjednodušším je jejich dimensionalita: bodové poruchy, tedy objekty s dimenzí 0, lineární nebo 1D defekty,



plošné – 2D, a nakonec relativně velké (v porovnání s rozměrem jádra víru ) poruchy nebo 3D precipitáty.

Z jiného pohledu lze poruchy dělit na náhodně rozložené a korelované, jakými mohou být buď uměle vytvořené řady defektů (např. mikroskopických otvorů v tenké vrstvě – antidotů (angl. *antidots*), hranice dvojčatění nebo samoorganizované struktury (angl. *self-organized structures*). Dalším kriteriem může být zda je defekt nesupravodivý nebo je jeho supravodivost jiná než u materiálu matrice.

Tato rozmanitost se navíc kombinuje se škálou stavů vírového systému. V závislosti na teplotě a magnetickém poli tak dostáváme velké množství možných typů interakcí, které ovlivňují tvar magnetizační křivky nebo závislosti kritického proudu na poli a teplotě. K tomu všemu je interakce vír - defekt díky anizotropii úhlově závislá. Vhodnou volbou druhu a množství defektů můžeme jednak docílit vyrovnaně vysokých kritických proudů v širokém oboru magnetických polí, můžeme dosáhnout velmi vysokých kritických proudů v nízkých a středních magnetických polích, a to až do těsné blízkosti kritické teploty (experimentálně byla prezentována levitace supravodiče s  $T_c \approx 93,5$  K chlazeného kapalným kyslíkem s bodem varu 90,2 K), nebo zvýšit hranici ireverzibility ze standardních 6 – 7 T na víc než dvojnásobek při chlazení kapalným dusíkem.

Probereme teď typy defektů a naznačíme možné mechanismy jejich vzájemného působení. V podstatě půjde hlavně o defekty v objemových supravodičích. Necháme stranou tenké vrstvy, které mají určitá specifika.

#### 15.6.1 Bodové poruchy

Jak už bylo výše naznačeno, malý rozměr jádra víru  $2\xi_{\rm ab}(T=0)\approx 3$  nm, způsobuje, že prakticky každá porucha v krystalové mříži na úrovni jednotlivých atomů je potenciálním upínacím defektem. U VTS mohou být takovou poruchou kyslíkové vakance. V materiálech typu LRE-BaCuO, kde LRE=Nd,Eu,Sm,Gd jsou atomy lehké vzácné zeminy - (angl. Light Rare Earth), je častým zdrojem takových poruch záměna pozice Ba a vzácné zeminy, tzv. tuhý roztok LRE/Ba. V podstatě každá odchylka od stechiometrie nebo lokální pnutí v oblasti řádu nanometrů může přispívat k tomuto typu upnutí. Vzhledem k rozměrům těchto defektů jde vždy o interakci s jediným vírem. Každý bodový defekt má relativně malý objem V. Kondenzační energie  $U_{\rm p}=VH_{\rm c}^2/2$ ušetřená zachycením víru na nesupravodivém objemu V je velmi malá, je tedy nízká i aktivační energie a tepelná aktivace víru je velmi pravděpodobná. Ještě nižší je v případě, kdy defekt není nesupravodivý. Pak ušetřená kondenzační energie  $U_{\rm p}=V\Delta H_{\rm c}^2/2$  je jen zlomkem předchozí ( $\Delta H_{\rm c}$  je rozdíl termodynamických kritických polí matrice a defektu).

V supravodiči je však velké množství defektů, stejně jako vírů, které díky odpudivým silám vytvářejí zhruba hexagonální mřížku. Důsledkem je, že vzájemné působení defektu s vírem je zprostředkované přes kolektivní interakci systému vírů jako celku s celým systémem defektů. Model interakce mřížky elastických tokotrubic se systémem slabých bodových náhodně rozložených poruch, tzv. teorie kolektivního upnutí, byl vypracován Larkinem a Ovchinnikovem [36, 37] dlouho před objevem vysokoteplotních supravodičů.

Model kolektivního upnutí - 3D režim. Základy tohoto modelu položil Larkin [36]. Vyšel z experimentálního faktu, že vlivem interakce vírů s defekty ztrácí pravidelná vírová mřížka uspořádání na dlouhou vzdálenost. V rámci Ginsburgova - Landauova popisu rozdělil objem supravodiče na tzv. korelační objemy, ve kterých je mřížka uspořádána. Ve zbytku prostoru se mřížka posuny a náklony přizpůsobuje existujícímu rozložení upínacích defektů. Tím se podstatně sníží kondenzační energie systému, na druhou stranu se poněkud zvýší rostoucí elastickou energií vírů. Dále je třeba vzít v úvahu periodicitu mřížky vírů, která způsobí, že výchylky vírů z rovnovážné polohy nemohou přesáhnout vzdálenost srovnatelnou s periodou mřížky a  $\approx (\Phi_o/B)^{1/2}$ . Minimalizací výrazu pro střední kvadratickou odchylku od pravidelného rozložení vírů vzhledem ke korelačním rozměrům  $R_{||}$  a  $R_{\perp}$ našel Larkin optimální rozměr korelačního objemu  $V_c = R_{||}R_{\perp}^2$  a dostal

$$R_{\perp} < \frac{a^2 \sqrt{C_{44}}}{W(C_{11}^{-3/2} + C_{66}^{-3/2})} \quad , \qquad \qquad R_{||} < \frac{a^2 C_{44}}{W(C_{11}^{-1} + C_{66}^{-1})} \quad , \qquad (15.40)$$

kde  $W = n(fa/\xi)^2$  je fenomenologický parametr závislý na koncentraci defektů na jejich elementární upínací síle f, a je perioda mřížky vírů a  $C_{ii}$  (i=1,4,6) jsou elastické moduly mřížky vírů:  $C_{11}$  modul jednoosého stlačení,  $C_{44}$  modul náklonu a  $C_{66}$  modul smyku. Pokud budeme uvažovat mřížku vírů téměř nestlačitelnou, vypadne ze vzorce (15.27)  $C_{11}$  a dostaneme [6]

$$R_{\perp} = \frac{\sqrt{2}\xi^2 \sqrt{C_{44}} C_{66}^{3/2}}{nf^2}, \quad R_{||} = \frac{2\xi^2 C_{44} C_{66}}{nf^2}, \quad V_{\rm c} = R_{||} R_{\perp}^2 = \frac{4\xi^6 C_{44}^2 C_{66}^4}{n^3 f^6}.$$
(15.41)

Pro vysoké hodnoty parametru  $\kappa = \lambda/\xi$ , typické pro VTS, a pro pole v intervalu  $(2\kappa)^{-2} < b < 1$ , se elastické moduly dají vyjádřit vztahy [39, 40]

$$C_{44} = \frac{B_{c2}^2}{\mu_0} b^2 \quad , \tag{15.42}$$

$$C_{66} = \frac{B_{c2}^2}{\mu_0} \frac{b(1-b)^2}{8\kappa^2} \left(1 - 0.58b + 0.29b^2\right) \quad , \tag{15.43}$$

kde  $b = B/B_{c2}$ . Tyto výrazy jsou platné pro izotropní supravodiče. Celková upínací síla na jednotku objemu, vyplývající z tohoto typu interakce, je

$$F = J_{\rm c}B = \frac{n^2 f^4}{2C_{44}C_{66}^2 \xi^3} \,. \tag{15.44}$$

Vidíme, že upínací síla a potažmo kritický proud jsou tím větší, čím je vyšší koncentrace defektů a jejich elementární upínací síla a čím je mřížka vírů měkčí, tzn. čím jsou elastické konstanty nižší.

Model kolektivního upnutí - 2D režim. Pokud má vzorek jeden z rozměrů redukovaný (tenká vrstva nebo vzorek s "rozpojenými" supravodivými rovinami),

je třeba pro směr magnetického pole kolmý k rovině vzorku uvážit 2D režim pohybu vírů. V takovém případě je korelační rozměr  $R_{||}$  dán tloušťkou vzorku d nebo vrstvy s. Pak  $V_c = R_{\perp}^2 d$ , kde  $R_{\perp}$  je dáno vztahem

$$R_{\perp} = \frac{C_{66}a\sqrt{d}}{\sqrt{n}f} \tag{15.45}$$

a pro upínací sílu platí vztah

$$F = J_{\rm c}B = \frac{nf^2}{C_{66}^{\xi} d} \quad . \tag{15.46}$$

I v 2D režimu tedy platí, že upínací síla a s ní spojený kritický proud jsou tím větší, čím je větší koncentrace defektů a jejich elementární upínací síla a čím nižší je elastický modul smyku. Zde navíc přibývá nepřímá úměrnost tloušťce vzorku nebo supravodivé vrstvy. Povšimněme si, že závislosti F a  $J_c$  na n, f,  $C_{66}$  a  $\xi$  jsou mnohem slabší než u 3D režimu.

V modelu kolektivního upnutí se předpokládá náhodně rozložený systém relativně slabých upínacích center jednoho a téhož typu. Ve skutečnosti vždy existuje ve vzorku rozdělení velikostí, síly f a typů defektů, některé z nich ani nesplňují požadavky tohoto modelu. Ve skutečnosti nejsou tedy korelační délky určeny výhradně velikostí elastických modulů, ale i dalšími faktory, které v řadě případů mohou vliv elastických vlastností přehlušit. To mohou být např. dislokace mřížky vírů v 3D režimu nebo intersticiály a vakance v případě 2D režimu. Kvantitativní porovnání s experimentem je obtížné; podrobný rozbor viz [41].

Režim plastické deformace. Základem modelu kolektivního upnutí je náhodná interakce velkého množství relativně slabých defektů. V případě, že jsou ve vzorku pouze tak silné defekty, že omezí korelační objem vlastně jen na své bezprostřední okolí, zdeformuje se mřížka vírů plasticky, nevratně, a dokonale se přizpůsobí rozložení všech takových defektů. Tím pochopitelně výrazně stoupnou celková energie a síla upnutí. Upínací síla je pak dána prostým součtem přes jednotlivé defekty a jejich upínací síly, pochopitelně komplikovanou faktem, že je ve vzorku rozložení různých typů defektů s různými elementárními silami upnutí, že je tam nehomogenní vnitřní magnetické pole apod. Zatímco model kolektivního upnutí není schopen vysvětlit jeden z nejdůležitějších experimentálních faktů, tzv. jev rybího ocasu (angl. *fishtail effect*) – anomální zvýšení kritického proudu ve středních magnetických polích, plastická deformace mřížky vírů je často uváděna jako jedna z možných příčin [42, 43].

Efekt obří relaxace v modelu kolektivního upnutí. Model kolektivního upnutí byl původně vytvořen pro klasické supravodiče, ve kterých tepelné excitace nehrály příliš významnou roli a relaxace kritického proudu byla dobře popsána Andersonovým – Kimovým modelem. V něm se předpokládalo, že supravodič je blízko kritickému stavu a uvažovaný proud je blízký kritickému proudu, myšleno proudu při nulové relaxaci.

Zde odbočíme, neboť jsme arazili na nejednotnost v terminologii. Kritickým proudem je totiž nazýván jednak nejvyšší proud, který je supravodič schopen nést, aniž by přešel do normálního stavu (nazvěme ho  $J_{c0}$ ), ale i proud rovnovážný, odpovídající ustálenému tzv. Beanovu kritickému stavu při magnetizačním procesu v supravodiči, nazvěme ho  $J_c$ . Obě veličiny se mohou velmi podstatně lišit a je třeba je striktně rozlišovat. Vždy platí  $J_c \leq J_{c0}$ .

Vraťme se však k relaxaci. Ve VTS existuje velmi silná tepelná excitace a v jejím důsledku dochází k tzv. obří relaxaci (angl. *giant relaxation*) kritického proudu. V klasickém relaxačním experimentu se po předchozím zastavení magnetického pole na určité hodnotě měří pokles magnetického momentu a s ním spojeného  $J_{\rm c}$  s časem. V klasickém supravodiči byl tento pokles relativně malý a dal se vyjádřit logaritmickou závislostí  $J_c(t) \propto \ln(t)$ . Dobře tomu odpovídala lineární závislost aktivační energie na proudu,  $U = U_0(1-J/J_{c0})$ . Podobnou tendenci jako v klasických supravodičích má kritický proud i v supravodičích vysokoteplotních. Ovšem s tím rozdílem, že relativní změna je obrovská: za prvních pár zlomků vteřiny po zastavení magnetického pole je proud schopen poklesnout o více než polovinu původní hodnoty. Změřená hodnota tak podléhá velké experimentální chybě, protože nedokážeme spolehlivě určit absolutní počátek relaxačního času a tedy přesně extrapolovat do počáteční hodnoty proudu. Z modelu kolektivního upnutí vyplývá pro nízké proudy závislost aktivační energie na proudu  $U \propto (J_{c0}/J)^{\mu}$ , kde  $\mu \leq 1$ . Tento typ závislosti má důležité důsledky: pro  $J \rightarrow 0$  roste U nade všechny meze, což znamená, že je utlumen jakýkoliv pohyb vírů a odpor supravodiče se stává silně nelineárním, klesne na nulu. Závislost  $U \propto (J_{c0}/J)^{\mu}$  vede k silně nelineární volt-ampérové charakteristice ve tvaru

$$V(J) \propto \exp\left[-\frac{U_0}{k_{\rm B}T} \left(\frac{J_{\rm c0}}{J}\right)^{\mu}\right]$$
 (15.47)

V důsledku závislosti  $U \propto (J_{\rm c0}/J)^{\mu}$ se také změní časová závislost J(t) oproti klasickému Andersonovu – Kimovu vztahu a nabude pro malé hodnoty J tvaru

$$J(t) \approx J_{\rm c0} \left(\frac{k_{\rm B}T}{U_0} \ln(1 + t/t_0)\right)^{-1/\mu} \quad . \tag{15.48}$$

Pro hodnoty J blízké  $J_{\rm c0}$ však upínací bariéra vymizí, čemuž odpovídá původní Andersonův – Kimův vztah. Kombinací obou výrazů byla získána univerzální závislost

$$J(t) \approx J_{\rm c0} \left[ 1 + \frac{\mu \, k_{\rm B} T}{U_0} \ln \left( 1 + \frac{t}{t_0} \right) \right]^{-1/\mu} \quad . \tag{15.49}$$

Veličina  $t_0$  ve výrazech (15.48), (15.49) je řádu  $10^{-8}$  až  $10^{-12}$  s, takže pro jakýkoli reálný experimentální čas je možno jedničku v argumentu logaritmu zanedbat.

Model vírového skla. Z literatury je znám ještě model vírového skla [44], který jak v 3D tak i v 2D reprezentuje spíš formu systému vírů, vyskytující se nezávisle na defektech materiálu a vychází za rámec těchto skript.

#### 15.6.2 Velké defekty

V supravodičích nejsou jen bodové poruchy, ale mnoho defektů s rozměry značně převyšujícími koherenční délku a tedy rozměr jádra víru. V důsledku toho mohou takové poruchy vázat mnoho vírů najednou. Experimentálně bylo zjištěno, že takovéto defekty zvyšují kritický proud v nízkých magnetických polích, tedy v oblasti, kde bodové poruchy nejsou příliš efektivní. Typickým příkladem takových poruch jsou částice sekundární fáze k fázi supravodivé, RE<sub>2</sub>BaCuO<sub>5</sub>, které se přidávají v průběhu přípravy tzv. texturovaných bloků REBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>v</sub>. Tyto částice jsou nesupravodivé a jejich bod tání je vyšší než bod tání supravodivé fáze, takže ohřevem materiálu v průběhu přípravy nejsou příliš ovlivněny. Model interakce vírů s velkými defekty navrhl Murakami [45], který pro jednoduchost zvolil částici ve tvaru krychle s hranou rovnoběžnou se směrem vírů (obr. 15.22). Mřížka vírů byla považována za tuhou, elastické deformace nebyly vzaty v úvahu. Upínací energie na jeden vír je rovna ušetřené kondenzační energii, která je úměrná části objemu jádra víru, zachycené defektem. V případě krychle se však zachycený objem  $V = \pi \xi^2 d$ , kde d je délka hrany krychle, při průchodu přes defekt nemění a jedinými víry, u kterých dojde ke skokové změně energie, jsou víry povrchové (na obrázku označené černě). Odtud potom vyplynul scénář povrchového upnutí vírů na velkých defektech. S ním je spojena závislost kritického proudu na magnetickém poli

$$J_{\rm c}(B) = \frac{V_{\rm f} W_{\rm c}}{2.14\sqrt{\Phi_0} \xi \, d\sqrt{B}} = J_{\rm c}(0)/\sqrt{B},\tag{15.50}$$



Obr. 15.22: Schematický obraz velkého defektu ve tvaru krychle, přes který přechází hexagonální mřížka vírů. Směr pole je kolmý k podložce, Lorentzova síla směřuje zprava doleva [45].

kde  $V_{\rm f} = N_{\rm p} d^3$  je tzv. objemová frakce, určující poměrný objem sekundární fáze v supravodiči,  $W_c = 1/2 \ \mu_0 H_c^2 \pi \xi^2$  je kondenzační energie na jednotku délky víru. Vidíme, že v rámci tohoto modelu je kritický proud přímo úměrný  $V_{\rm f}, d^{-1}, a B^{-1/2}$ . Přestože závislost  $J_{\rm c} \propto 1/\sqrt{B}$  byla indikovaná řadou experimentů, většinou šlo jen o úzké úseky magnetického pole. Pochybnosti o jednoznačnosti těchto interpretací dává fakt, že uvedená modelová situace v supravodiči prakticky nikdy neexistuje. Především, defekty mají více méně oblý tvar, navíc ve vzorku vystupují s různými rozměry. Přestože lze stanovit určitý střední rozměr, tvar defektu se ukazuje být pro závislost  $J_{\rm c}(B)$  zásadní.

Zablotskii a kol. [45] vypracovali model interakce vírů s defektem ve tvaru koule. Byla zde vzata v úvahu elastická energie i energie upnutí. V důsledku oblého tvaru defektu se při přechodu víru přes defekt zachycená délka víru mění, tím se mění i ušetřená kondenzační energie. V důsledku toho se změnila závislost (15.50) na

$$J_{\rm c}(0) \propto \frac{V_{\rm f}}{\sqrt{\xi d}} , \qquad (15.51)$$

kded je průměr defektu. Pro odvození závislosti proudu na magnetickém poli bylo užito předpokladu, že pravděpodobnost zachycení svazku tvořenéhomvíry je v třírozměrném rozložení defektů dána Poissonovým rozdělením

$$P_{\rm m}(B) = \frac{1}{m!} \left(\frac{\pi R^2 B}{\Phi_0}\right)^m \exp\left(-\frac{\pi R^2 B}{\Phi_0}\right) \ . \tag{15.52}$$

Za tohoto předpokladu byla odvozena závislost na magnetickém poli

$$J_{\rm c}(B) = J_{\rm c}(0) \exp(-B/B_{\rm L}) , \qquad (15.53)$$

kde $B_{\rm L}{=}\Phi_0/S_{\rm d}$ a $S_{\rm d}$  je průřez zachyceného svazku vírů.

Velmi důležitým faktem je, že v obou modelech je kritický proud nepřímo úměrný d nebo  $d^{1/2}$ . To znamená, že pro stejný objem sekundární fáze  $(V_{\rm f})$  je efekt tím větší, čím jsou defekty menší. Mletím v kulovém mlýnu pomocí ZrO<sub>3</sub> koulí se podařilo zmenšit částice z původních komerčních 3 mikrometrů až na 150 - 70 nm [47]. Velkým překvapením pak bylo, že po dokončení texturování bylo ve vzorku nalezeno množství částic o rozměrech až 20 – 50 nm, přestože se předtím pokládalo za nemožné takovou redukci provést a předpokládalo se, že částice buď koagulují nebo se v matrici rozpustí. Pomohla však náhoda. Ukázalo se, že se částice při mletí kontaminovaly zirkonem a ten díky své inertnosti pomohl částice v průběhu texturovacího žíhání nejen zachovat, ale dokonce dále jejich velikost zredukovat. Posléze se potvrdilo, že podobně působí řada dalších inertních prvků, např. Ir, Mo, Nb.

Redukcí velikosti částic se zvýšil kritický proud zhruba o řád. Rozšířil se také rozsah teplot s reálně využitelným supravodivým prou-

dem, takže bylo možné s ternárním supravodičem (Nd,Eu,Gd)BaCuO připraveným výše uvedeným postupem demonstrovat levitaci při teplotě 90,2 K (bod varu kapalného kyslíku), tedy těsně pod kritickou teplotou daného materiálu [47].



Obr. 15.23: Schematický obraz velkého defektu ve tvaru koule, přes který přechází svazek vírů. Směr pole je zdola nahoru, Lorentzova síla směřuje zleva doprava [46].

#### 15.6.3 Korelované defekty

TO

Korelovanými nazýváme takové defekty, které nepůsobí na mřížku vírů statisticky náhodně, ale mají alespoň jeden směr, ve kterém působí shodně. Mohou jimi být např. uměle vytvořené, pravidelně uspořádané "bodové" poruchy v tenké vrstvě, tzv. antidoty, shodně orientované amorfní kanály vzniklé průletem těžkých iontů, hranice dvojčatění, ale i vrstvy dělící supravodivé roviny v perovskitu. Efekt takové upínací struktury je zpravidla mnohem silnější než u náhodně rozložených defektů, protože za určitých podmínek mohou korelované defekty působit na mřížku vírů koherentně. Experimenty s ozařováním supravodičů těžkými ionty ukázaly, že kritický proud vzroste v široké oblasti magnetických polí a teplot zhruba o řád. Tato technologie není příliš vhodná pro průmyslovou praxi, protože vzorky jsou po ozařování delší dobu radioaktivní. Je však užitečné vědět, jaká je fyzika vírů v takových systémech.

Model bosonového skla. Pro popis interakce vírů se systémem korelovaných defektů, zejména systému shodně orientovaných nesupravodivých kanálů (např. po průletu těžkých iontů) vyhovuje model bosonového skla [48].

Na první pohled je jasné, že víry směřující podél takových defektů jsou na nich velmi silně upnuty, protože celková upínací síla na jeden vír je rovna kondenzační energii celé délky víru. Přestože vysoké teploty u VTS umožňují uvolnění víru tepelnou aktivací i z takovéto poruchy, při nízkých teplotách jsou všechny víry v blízkosti defektů dobře lokalizovány a v důsledku kolektivní interakce mezi víry je vlastně lokalizována celá mřížka vírů. Zatímco ve vyšších teplotách, kde dochází k difúznímu pohybu vírů mezi defekty, je odpor lineární, při nižších teplotách je v důsledku "zamrznutí" pohybu odpor nulový. Tento režim se nazývá Boseovo sklo. Třírozměrný systém vírů v takovémto uspořádání podléhá podobné statistice jako dvojrozměrný systém bosonů. Vír upnutý na dlouhém defektu je ekvivalentní bosonu ležícímu v lokální potenciální jámě. Interakce mezi částicemi (bosony nebo víry) má za následek, že systém přejde ostrým fázovým přechodem při teplotě $T_{\rm BG}$  z režimu nulového odporu (skla) do režimu nenulového lineárního odporu.

Hranice dvojčatění. Hranice dvojčatění představují pro magnetický tok velmi silnou překážku. Při pohybu vírů v takovém vzorku proto vzniká tzv. kanálový efekt (angl. *channel effect*), víry se pohybují kanály mezi hranicemi dvojčatění. Protože systém hranic zpravidla není jednoduchý (viz obr. 15.24), vzniká v rovině vzorku dodatečná magnetická anizotropie, která deformuje rozložení proudů proti předpokladu Beanova modelu [49]. Proud v takovém krystalu není rozložen rovnoměrně. Protože perioda i rozložení hranic dvojčatění je specifické pro každý vzorek, v podstatě neexistuje možnost, jak jednotně působení dvojčat kvantitativně a dokonce i kvalitativně popsat.

Nanoskopické lamely. Ze všech materiálů



Obr. 15.24: Struktura dvojčatění na monokrystalu NdBaCuO.

typu RE-123, tedy materiálů s jedním atomem vzácné zeminy, dvěma atomy Ba a třemi atomy Cu, mají zdaleka nejlepší elektromagnetické vlastnosti ternární supravodiče (Nd<sub>0.33</sub>Eu<sub>0.33</sub>Gd<sub>0.33</sub>)BaCuO.

Výzkum vlivu koncentrace jednotlivých lehkých vzácných zemin v tomto supravodiči (při zachování jejich celkové koncentrace 1) vedl k objevu, že v určité oblasti vzájemného poměru lehkých zemin (Nd: Eu: Gd = 33: 38: 28) dochází v materiálu k určité frustraci, která má za následek vznik velmi jemné podstruktury ve formě lamel tvořených nanoskopickými klastry pevné fáze LRE/Ba [50]. Tyto lamely o tloušťce asi 3 nm a periodě také 3 nm jsou seřazeny ve směru hranic dvojčatění a vyplňují kanály mezi nimi (typická šířka těchto kanálů je 80-100 nm). Protože je tato substruktura velmi hustá a má charakteristický rozměr blízký jádru víru, velmi efektivně zabraňuje průchodu vírů kanály mezi hranicemi dvojčatění a představuje proto velmi účinný upínací prvek, zejména ve vysokých magnetických polích.

V důsledku této struktury se objevil na magnetizační křivce výrazný hrb ve vyšších magnetických polích a zvýšilo se pole ireverzibility zhruba na dvojnásobek běžných hodnot, na cca 15 T při 77 K [50]. Obraz lamel pořízený transmisním mikroskopem je na obr. 15.25.

Mechanismus vzniku lamel zatím není zcela jasný, protože hranice dvojčatění vznikají při okysličení materiálu a ke vzniku lamel a jejich směrování musí tedy dojít také až při okysličování. V rozporu s tím se zdá být fakt, že při teplotách užívaných pro okysličování by měla být pohyblivost klastrů LRE/Ba malá.

# 15.7 Relaxace

Klasická relaxace. Účinnost upnutí vírů na daném systému defektů se nejlépe kvantifikuje pomocí relaxační rychlosti. Klasický model relaxace, navržený Andersonem a Kimem [51], předpokládal lineární potenciální bariéru  $U(J) = U_0(1-J/J_{c0})$ .

Ta vyhovuje klasickým supravodičům s vysokou aktivační energií vzhledem k energii tepelné, malé relaxaci a proudům v blízkosti kritického proudu  $J_{c0}$ (míněno proudu schopného převést supravodič do normálního stavu). U VTS je situace jiná, neboť potenciální bariera má složitější závislost na proudu. To by příliš nevadilo, protože časová závislost kritického proudu i pro takové tvary bariér zůstává více méně logaritmická. Protože je však logaritmická, diverguje v  $t \rightarrow 0$ . V důsledku toho dojde během prvních pár zlomků vteřiny k nejrychlejší změně momentu (proudu), zpravidla v čase, který nejsme schopni přesně změřit. Důležité je také si uvědomit, že supravodič nejdříve musíme do určitého startovního magnetického stavu



Obr. 15.25: Obraz nanoskopických lamel z transmisního mikroskopu. Tmavý pruh vpravo nahoře je hranice dvojčatění [50].

dostat. V supravodiči jde při magnetických experimentech vždy o magnetický moment indukovaný změnou vnějšího magnetického pole. Čím rychlejší je změna pole, tím vyššího vnitřního gradientu pole a tedy vyššího proudu dosáhneme. Proti této indukční akci působí relaxace.

U VTS je aktivační energie srovnatelná s energií tepelnou, dochází k silné tepelné aktivaci vírů a mohutné, tzv. obří relaxaci. V podstatě nejsou takové technické prostředky, abychom mohli obří relaxaci zabránit dostatečně rychlou (a v čase dlouhou) změnou magnetického pole. Proto při nenulových teplotách leží úroveň magnetického momentu a s ním spojeného "kritického" proudu vždy podstatně pod  $J_{c0}$ a klasický relaxační experiment startuje z jakési "podkritické" hodnoty momentu, která závisí na (nejasné) předchozí magnetické historii vzorku. Nikdy nevíme, jak daleko startovní hodnota proudu od $J_{\rm c0}$ vlastně je, jinými slovy neznáme přesný počátek relaxační časové osy. V praxi se tento fakt obchází tím, že se klasický relaxační experiment vyhodnocuje až od vyšších časů, typicky desítek až stovek sekund, kdy se předpokládá, že na přesnosti stanovení počátečního času už příliš nezáleží. To je však pravda jen částečně - většina relaxace již odezněla. Navíc potřebujeme dostatečně dlouhý logaritmický úsek času k vyhodnocení, takže musíme exponenciálně prodloužit celkový čas měření - experiment se tím stává drahý a časově náročný. Zatímco časová náročnost klasických relaxačních měření je daný fakt, problém s počátkem času je řešitelný. Použijeme trik. Změříme závislost M(t), zderivujeme ji a vynášíme místoM(t) závislost M(dM/dt) [52]. Ta už na počátku časové osy nezávisí. Navíc je  $M \propto J$  a  $dM/dt \propto E$ , elektrickému poli v supravodiči a tedy i V, elektrickému napětí. Je to tedy podobná reprezentace jako v transportních měřeních, V-I charakteristika. Můžeme tak oba experimenty vynést do stejného grafu a protože se oba odehrávají v jiné oblasti efektivních relaxačních časů nebo, chcete-li, proudů (transportní měření odpovídá velmi krátkým efektivním časům a proudům v blízkosti  $J_{c0}$ ), dostaneme mnohem širší experimentální okno, kterým můžeme do relaxačních dějů nahlédnout.



Obr. 15.26: Náhled měření konvenční a dynamické relaxace v části magnetizační křivky vyznačené na vloženém obrázku. Počátek konvenční relaxace se vyhpodnocuje až po úplné stabilizaci pole, vyznačené na křivce čtverečkem.

Dynamická relaxace. V předchozím odstavci jsme se zmínili podkritický stav supravodiče při jeho magnetování. Závislost indukovaného magnetického momentu na rychlosti změny vnějšího magnetického pole se odráží i ve výšce magnetizační křivky. Pro různé rychlosti změny pole dostáváme různě vysoké hysterezní křivky. Na základě tohoto faktu (patrného zejména u VTS) byla navržena metoda dynamické relaxace [53]. Změří se série hysterez-

ních křivek s různými rychlostmi změny pole (obr. 15.26) a pro jednotlivá magnetická pole se vynáší závislost M(dB/dt).

Data pro dynamickou relaxaci (DR) jsou body na hysterezních křivkách měřených při různé rychlosti změny pole (klesající shora dolů). V důsledku konečné časové konstanty měřícího zařízení nelze pole zastavit okamžitě a dlouhý čas mezi zastavením řídícího signálu a úplným zastavením pole vnáší další neurčitost do tohoto typu měření. Např. u skvidu je typický stabilizační čas před každým měřením asi 3 minuty. Klasickou relaxaci (CR), nastartovanou z úrovně druhé nejvyšší hysterezní křivky, je tedy možné spolehlivě vyhodnocovat až od okamžiku úplné stabilizace magnetického pole, vyznačeného na křivce v obr. 15.26 čtverečkem.

Změřenou křivku M(t) lze digitálně derivovat nebo nafitovat jakoukoli vhodnou analytickou funkcí, kterou pak derivujeme, následně získáme data v reprezentaci M(dM/dt). Body tzv. dynamické relaxace, ležící nad sebou na jednotlivých hysterezních křivkách (obr. 15.26) ve stejném magnetickém poli jako klasická relaxace, jsou charakterizovány odpovídajícími hodnotami magnetického momentu a rychlosti změny pole. Dají se tedy vynést v reprezentaci M(dH/dt). Protože mezi magnetickým momentem a magnetickým polem



Obr. 15.27: Kombinace klasické (CR) a dynamické (DR) relaxace, odpovídájící mnohem kratším efektivním relaxačním časům. Proto se oba experimenty téměř nepřekrývají.

je přímá úměrnost, daná konstantou susceptibility (ta je dána tvarem vzorku a je tedy nezávislá na poli a čase), můžeme psát d $M/dt = \chi_0 dH/dt$  a vynést relaxační data ve stejném grafu – viz obr. 15.27. V semilogaritmické reprezentaci (obr. 15.27) lze oba soubory dat přesunout na sebe, přičemž úsek posunutí představuje hodnotu susceptibility  $\chi_0$ .

Z obrázků 15.26 a 15.27 je patrné, že jsou oba soubory dat téměř disjukntní, dynamická relaxace typicky odpovídá mnohem nižším relaxačním časům než klasická. Každé křivce měřené určitou rychlostí změny pole dH/dt ze přidělit efektivní relaxační čas

$$t_{\rm eff} = \frac{\mu_0 R}{\chi_0 \dot{H}} \quad , \tag{15.54}$$

kde  $\dot{H} = dH/dt$  je rychlost změny pole,  $R = m_0 kT/U_0$  je relaxační rychlost a  $m_0$  je

magnetický moment odpovídající počátku relaxace, ted<br/>y $t_{\rm eff}{=}0.$ Derivací klasické časové závislosti magnetického momentu [51]

$$m(t) = m_0 [1 - (k_{\rm B}T/U_0) \ln(t/t_0)$$
(15.55)

dostaneme

$$R = -\frac{\partial m}{\partial \ln t} \quad . \tag{15.56}$$

R je tedy směrnice logaritmické relaxační závislosti. V praxi se však častěji používá tzv. logaritmická nebo normalizovaná relaxační rychlost, daná proklasickou a dynamickou relaxaci vztahy

$$S = -\frac{\partial \ln m}{\partial \ln t} ; \quad Q = \frac{\partial \ln m}{\partial \ln \dot{H}} \quad . \tag{15.57}$$

Kombinací obou měření dostaneme v logaritmickém měřítku zhruba dvojnásobně široké experimentální okno [53]. Data transportních měření by pak ležela v obr. 15.27 vysoko vpravo nahoře.

#### 15.8 Granulární supravodiče



Obr. 15.28: Změna polohy centrálního maxima v závislosti na aplikovaném jednoosém tlaku, který postupně destruuje mezizrnné spoje. Konečná křivka odpovídá součtu magnetických momentů od jednotlivých zrn.

Dosud jsme v našich úvahách předpokládali kompaktní materiál s homogenními vlastnostmi v celém objemu. U granulárních supravodičů přistupuje složitost struktury, složené ze zrn s výše popsanými vlastnostmi a mezizrnného prostoru s vlastnostmi odlišnými. Takovými materiály byly první vysokoteplotní supravodiče, připravené ve formě lisovaných keramik. Později se staly významným představitelem této skupiny pásky na bázi BiSCCO, většinou ve stříbrné matrici. Jsou však jimi i polykrystalické tenké vrstvy, v poslední době intenzívně studované ve spoji-

tosti s vývojem supravodivých vodičů druhé generace (angl. *coated conductors*). V těchto materiálech se setkáváme s tím, že uvnitř zrn tečou proudy s typickou vysokou hodnotou a rozložením shodnými s homogenními objemnými vzorky, tyto proudy však obíhají po dráze s relativně malým poloměrem. Naopak proudy mezi

zrny jsou relativně malé, omezené odporem mezizrnných spojů, obíhají však po mnohem větších drahách a jejich příspěvek k celkovému měřenému momentu je proto srovnatelný s příspěvkem od proudů uvnitř zrn.

Zrna v páscích BiSrCaCuO mají typicky plochý tvar a rozměr několika set mikrometrů, tloušťku okolo jednoho mikrometru. Proudy indukované v takovýchto zrnech vyvolávají demagnetizační efekt, který má za následek magnetické pole na obvodu zrn, směřující v obráceném směru ke směru magnetického pole v "objemu" zrna. V důsledku tohoto jevu však proudy tekoucí mezi zrny interagují s magnetickým polem opačné polarity než je polarita vnějšího pole.



Obr. 15.29: Magnetizační křivka keramiky YBCO při 60 K. Typický je úzký "krk" v nízkých teplotách způsobený povrchovou bariérou a relativně vysokým poměrem povrchu (zrn) k supravodivému objemu. To vyvolává atypické chování magnetizační křivky. Zatímco normální hysterezní křivka má typicky centrální maximum posunuté z nulového pole ve směru změny pole (tedy na horní větvi vlevo od nuly), u BiSCCO pásků leží toto maximum na opačné straně. Na první pohled se to zdá absurdní, vypadá to jako by vnitřní pole předcházelo vnější, ale s uvážení demagnetizačního efektu je vše pochopitelné. S narušením kontaktů mezi zrny, např. stlačováním vzorku, se postupně anomální charakter magnetizační křivky změní na normální – viz obr. 15.28.

V uvedeném případě byla zrna velmi dobře shodně orientována. U obecné keramiky, kde jsou zrna orientována náhodně, k takovému efektu dojít nemůže. Zato se tam zpravidla

projeví daleko větší vliv povrchu vůči supravodivému objemu – vliv povrchové bariéry, který způsobí charakteristické zdeformování magnetizační křivky v nízkých polích – viz obr. 15.29.

# 15.9 Literatura

- [1] W. Meissner, R. Ochsenfeld, Naturwissenschaften 21, 787 (1933).
- [2] A. A. Abrikosov, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 32, 1442 (1957).
- [3] C. P. Bean, Phys. Rev. Lett. 8, 250 (1962).
- [4] M. Däumling, D.C. Larbalestier, Phys. Rev. B 40, 9350 (1989).
- [5] Y. B. Kim, C.F. Hempstead, A.R. Strnad, Phys. Rev. 129, 528 (1963).
- [6] P.W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 9, 309 (1962); Y.B. Kim, C.F. Hempstead, A. Strnad, Phys. Rev. Lett. 9, 306 (1962); P.W. Anderson, Y.B. Kim, Rev. Mod. Phys. 36, 39 (1964).
- [7] M.R. Beasley, R. Labusch, W.W. Webb, Phys. Rev. 181, 682 (1969).

- [8] M. Tinkham, in Introduction to Superconductivity, McGraw-Hill, Inc. New York, St. Louis. (1996).
- [9] J. Bardeen, M.J. Stephen, Phys. Rev. 140, A1197 (1965).
- [10] C. Caroli, K. Maki, Phys. Rev. 159, 316 (1967); 164, 591 (1967); 169, 381 (1968).
- [11] C.R. Hu, R.S. Thompson, Phys. Rev. B 6, 307 (1972).
- [12] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Z. Phys. B 64, 189 (1986).
- [13] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [14] W.E. Lawrence, S. Doniach, in Proc. 12<sup>th</sup> Int. Conf. Low Temp. Phys., Kyoto, Japan (Keigaku, Tokyo 1971, ed. Kanda), p. 361 (1970).
- [15] V.L. Ginsburg, L.D. Landau, Zh. Eksperim. i Teor. Fiz. 20, 1064 (1950).
- [16] W. Meissner, R. Ochsenfeld, Naturwissenschaften 21, 787 (1933).
- [17] V.G. Kogan, Phys. Rev. B38, 7049 (1988).
- [18] D.E. Farrell et al., Phys. Rev. Lett. 63, 782 (1989).
- [19] Inoue et al., Czech. J. Phys. 46, Suppl. S3, 1759 (1996).
- [20] C. J. Martinez et al., Phys. Rev. Lett. 63, 782 (1989).
- [21] D. E. Farrell et al., Phys. Rev. Lett. 64, 1573 (1990).
- [22] F. Steinmayer et al., Europhys. Lett. 25, 459 (1994).
- [23] K.A. Müller, M. Takashige, J.G. Bednorz, Phys. Rev. Lett. 58, 1143 (1987).
- [24] Y. Yeshurun, A. P. Malozemoff, Phys. Rev. Lett. 60, 2202 (1988).
- [25] C. Cai et al., J. Appl. Phys. 98, 123906 (2005).
- [26] D.E. Farrel et al., Phys. Rev. Lett. 67, 1165 (1991); H. Safar et al., Phys. Rev. Lett. 69, 824 (1992); W.K. Kwok et al., Phys. Rev. Lett. 69, 3370 (1992).
- [27] K. Shibata et al., Physica B 294-295, 354 (2001).
- [28] J.M. Kosterlitz, D.J Thouless, J. Phys. C 6, 1181 (1973).
- [29] Qiang Li et al., Appl. Phys. Lett. 66, 637 (1995).
- [30] H. Safar et al., Phys. Rev. Lett.68, 2672 (1992).
- [31] D.T. Fuchs et al., Phys. Rev. B 54, R796 (1996).
- [32] R.A. Doyle et al., Physica C 308, 169 (1998).
- [33] R.A. Doyle et al., Physica C 282-287 (1997) 323-326).
- [34] R. Cubitt et al., Nature 365, 407 (1993); S. L. Lee et al., Phys. Rev. Lett. 71, 3862 (1993).
- [35] E. Zeldov et al., Nature 375, 373 (1995).
- [36] A.I. Larkin, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 58, 1466 (1970).
- [37] A.I. Larkin, Yu. V. Ovchinnikov, J. Low Temp. Phys. 34, 409 (1979).
- [38] M. Tinkham, Introduction to Superconductivity, Mc Grow-Hill, Inc. NY (1996).
- [39] A. Sudbo, E.H. Brandt, Phys. Rev. Letters 66, 1781 (1991).
- [40] E.H. Brandt, Phys. Rev. B 34, 6514 (1986).
- [41] G. Blatter, M.V. Feigelman, V. B. Geshkenbein, A.I. Larkin, V.M. Vinokur, Revs. Mod. Phys. 66, 1125 (1994).

- [42] Y. Abulafia, A. Shaulov, Y. Wolfus, R. Prozorov, L. Burlachkov, Y. Yeshurun, D. Majer, E. Zeldov, H. Wuhl, V.B. Gechkenbein, V.M. Vinokur, *Phys. Rev. Letters* 77, 1596 (1996).
- [43] L. Miu, T. Noji, Y. Koike, E. Cimoiasu, T. Stein, C.C. Almasan, Phys. Rev. B 62, 15172 (2000).
- [44] M.P.A. Fisher, Phys. Rev. Lett. 62, 1415 (1989); D.S. Fisher, M.P.A. Fisher, D.A. Huse, Phys. Rev. B 43, 130 (1991).
- [45] M. Murakami, S. Gotoh, H. Fujimoto, K. Yamaguchi, N. Koshizuka, S. Tanaka, Supercond. Sci. Technol. 4, S43 (1991).
- [46] V. Zablotskii, M. Jirsa, P. Petrenko, Phys. Rev. B 65, 2245081-4 (2002); V. Zablotskii et al., Phys. Rev. B 65, 2245081-4 (2002).
- [47] M. Muralidhar, N. Sakai, M. Jirsa, M. Murakami, Appl. Phys. Lett. 83, 5005 (2003).
- [48] M.P.A. Fisher, P.B. Weichman, G. Grinstein, D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* 40, 546 (1989); D.R. Nelson, V.M. Vinokur, *Phys. Rev. Lett.* 68, 2398 (1992).
- [49] M. Jirsa, M.R. Koblischka, T. Higuchi, M. Murakami, Phys. Rev. B 58, R14771 (1998).
- [50] M. Muralidhar, N. Sakai, N. Chikumoto, M. Jirsa, T. Machi, M. Nishiyama, Y. Hu, M. Murakami, Phys. Rev. Lett. 89, 2370011 (2002).
- [51] P.W. Anderson, Phys. Rev. Lett. 9, 309 (1962); P.W. Anderson, Y.B. Kim, Rev. Mod. Phys. 36, 39 (1964).
- [52] L. Pust, J. Kadlecova, M. Jirsa, S. Durcok, J. Low Temp. Phys. 78, 179 (1990).
- [53] M. Jirsa, L. Půst, H.G. Schnack, R. Griessen, Physica C 207, 85 (1993).
- [54] G.K. Perkins, A.D. Caplin, *Phys. Rev.* B 54, 12551 (1996); G.K. Perkins *et al.*, *Phys. Rev.* B 55, 8110 (1997); G.K. Perkins, L.F. Cohen, A.A. Zhukov, A.D. Caplin, *Phys. Rev.* B 55, 8110 (1997); M. Jirsa, L. Pust, D. Dlouhy, M.R. Koblischka, *Phys. Rev.* B 55, 3276 (1997).
- [55] K. Shibata et al., Physica B 294-295, 354 (2001).
- [56] T. Nishizaki et al., Phys. Rev. B 58, 11169 (1998).

421

10.9

# 16 Josephsonovy jevy a jejich aplikace

# Z. Janů

V Mondově Laboratoři v Cambridge v letech 1961-1962 pracoval pod Pippardovým vedením student Josephson [1]. Laboratoř navštívil Anderson, který se zabýval tunelujícími supravodivými proudy a narušenou symetrií v supravodičích [2] a jeho přednášky přivedly Josephsona k zájmu o tyto jevy.

Podle Bardeenovy-Cooperovy-Schriefferovy (BCS) mikroskopické teorie supravodivosti [3] mohou být supravodivé elektrony v jistém smyslu chápány jako Boseův – Einsteinův kondenzát Cooperových párů (vzpomeňme úvodní kapitolu), který popisuje komplexní parametr uspořádání  $\Psi$ , zavedený v Ginzburgově – Landauově fenomenologické teorii supravodivosti [4]. Parametr uspořádání, který je řešením Ginzburgových – Landauových rovnic (GLR), je v podstatě makroskopická vlnová funkce kondenzátu. Její fáze  $\varphi$  je veličina, která má vlastnost uspořádání na dlouhou vzdálenost, a její koherence je kooperativní jev – když ji v některém bodě v supravodiči zafixujeme, určíme tím její hodnotu i v ostatních bodech.

Uvažujeme-li dva od sebe izolované identické supravodiče ve stejném stavu, mohou se jejich parametry uspořádání lišit jenom ve fázi  $\varphi$ . Fáze v izolovaném supravodiči může mít libovolnou hodnotu: je-li  $\Psi(r)$  řešením GLR, pak je jím i  $\exp(i\varphi)\Psi(r)$ . Když však tyto dva supravodiče spojíme, bude kondenzát popsán stejným parametrem uspořádání s jedinou fází. Při postupném přibližování se začnou supravodiče vzájemně ovlivňovat, vznikne mezi nimi vazba, v důsledku které jejich parametry uspořádání plynule splynou v jeden. Slabou vazbu mezi dvěma supravodiči můžeme vytvořit například jejich oddělením tenkou bariérou, vrstvou z normálního kovu nebo dielektrika. Volná energie takového systému musí mít člen, který závisí na rozdílu fází a který roste s tím, jak se bariéra ztenčuje. Jakmile se tato povrchová vazebná energie stane srovnatelná s tepelnou energií  $k_{\rm B}T$ , fáze v obou supravodičích<sup>1</sup> se vzájemně zamknou.

Ačkoli absolutní fáze  $\varphi$  není měřitelná, rozdíl fází  $\Delta \varphi$  měřitelný je a Josephsona fascinovala myšlenka možnosti pozorovat jej experimentálně. Relace neurčitosti  $\Delta N \Delta \varphi \geq 1$  pro počet částic N ve stavu popsaném  $\Psi$  a fázi  $\varphi$  vlnové funkce říká, že rozdíl fází může být pozorován, když si oba supravodiče mohou vyměnit elektrony. Proud mezi dvěma supravodiči by tedy měl být funkcí  $\Delta \varphi$ .

Pippard na základě popisu tunelování kvazičástic (normální proud) soudil, že současné tunelování dvou elektronů, které tvoří CP, izolační bariérou je velmi málo pravděpodobné, protože je úměrné součinu pravděpodobností tunelování jednotlivých elektronů. Argumentem pro existenci tunelování CP ale byly koherenční faktory v BCS teorii. V té době však nebyla žádná teorie pro výpočet tunelujícího proudu, jenom Giaeverova heuristická formule. K tomu, jak spočítat proud, Josephson došel poté, co mu Anderson ukázal, jak Cohen, Facilov a Phillips spočítali tunelující kvazičásticový proud a potvrdili tak Giaeverův fenomenologický popis.

 $<sup>^1 {\</sup>rm Jak}$ uvidíme později, stejně se chovají dva objemy supratekuté kapaliny.

Použitím metod druhého kvantování Josephson provedl podobný výpočet tunelujícího proudu pro případ supravodivých elektrod a dostal členy, které zůstanou nenulové, i když je napětí na bariéře rovno nule [1]. Bariérou by tedy kromě normálního kvazičásticového proudu měl téci i supravodivý proud. Otázkou bylo, jak je supravodivý proud velký ve srovnání s normálním proudem.

První "funkční" přechod na základě Josephsonovy předpovědi z roku 1962 připravili v roce 1963 Rowell a Anderson [5]. Závislost proudu na magnetickém poli jasně ukázala, že proudy nejsou důsledkem zkratu mezi elektrodami. V magnetickém poli Země byl kritický proud 0,3 mA, v kompenzovaném (nulovém) poli 0,6 mA a v poli 2 mT byl potlačen. Podobně jako v objemovém supravodiči i v Josephsonově přechodu vnější magnetické pole potlačuje maximální supravodivý proud [6]. To vysvětluje, proč Josephsonovy pokusy změřit supravodivý proud byly neúspěšné. Jak si později s Andersonem uvědomili, potíž byla v tom, že při jeho experimentech i slabé magnetické pole Země (kolem 50  $\mu$ T) supravodivý proud zlikvidovalo.

V roce 1932 Holm a Meissner zjistili, že kontaktní potenciál mezi dvěma kovy, stanou-li se supravodivými, vymizí. V roce 1952 Meissnerova studentka Dietrichová zjistila, že odpor mezi dvěma zoxidovanými tantalovými elektrodami pod jistou teplotou zanikne, přičemž při větších proudech zanikne při nižších teplotách. V roce 1961 Giaever a Megerle pozorovali supravodivý proud v jednom ze svých vzorků, který však přisoudili zkratu mezi elektrodami. Nikdo však tyto jevy nespojoval se supravodivým tunelovým proudem, protože experimentátoři ani teoretici ještě nebyli na tuto možnost duševně připraveni.

Josephson objasnil celou řadu jevů, které spojují elektromagnetizmus a supravodivost. Umožnil nový pohled na uspořádání na velkou vzdálenost a pozorování kvantových jevů v makroskopickém měřítku. Tyto jevy spojují jednoduše měřitelné fyzikální veličiny s některými základními fyzikálními konstantami. Za svou předpověď dostal v roce 1973 Nobelovu cenu. Oblast fyziky zabývající se těmito jevy se nazývá slabou supravodivostí, neboť vazebná energie Cooperových párů je v oblasti Josephsonova přechodu o několik řádů menší než v objemu supravodiče.

Po Josephsonově objevu následoval rychlý sled experimentů: Rowell dokázal vliv magnetického pole na kritický proud přechodu, Shapiro existenci schodů na voltampérových charakteristikách, schody jako důsledek autodetekce pozoroval Fiske, mikrovlnné záření generované přechodem pozoroval Janson, násobení kmitočtů Shapiro, směšování kmitočtů Grimes a Shapiro, poměr h/e změřil Langenberg. Jaklevic, Lambe, Silver a Mercereau pozorovali makroskopickou kvantovou interferenci na dvou paralelně spojených Josephsonových přechodech. Tento jev tvoří základ celé fyziky slabé supravodivosti. Následoval i rychlý rozvoj teorie: Ambegaokar a Baratoff vypočetli závislost kritického proudu na teplotě a McCumber volt-ampérové charakteristiky přechodu.

Na základě Josephsonových jevů je možné vyvinout měřící přístroje s citlivostí sahající až k samé fyzikální hranici - Heisenbergovým relacím neurčitosti. Josephsonovy přechody jsou základním prvkem supravodivé elektroniky. Detektory milimetrového a submilimetrového elektromagnetického záření jsou používány hlavně v radioastronomii. Střídavý Josephsonův jev se využívá v metrologii, v normálech

stejnosměrného elektrického napětí, a v generátorech mm a sub-mm elektromagnetického záření. Největšího rozšíření však Josephsonovy přechody doznaly ve skvidech, velmi citlivých čidlech magnetického pole. Skvid (supravodivý kvantový interferenční detektor, angl. superconducting quantum interference device) je v podstatě převodník magnetického toku na napětí. Můžeme jím proto měřit všechny veličiny, které umíme na magnetický tok převést. Základem skvidu je supravodivá smyčka s jedním nebo dvěma přechody. Vysokofrekvenční neboli rf skvidy (angl. radio frequency) mají jeden přechod, což dříve zjednodušovalo a zlevňovalo jejich výrobu vzhledem ke stejnosměrným neboli dc skvidům (angl. direct current), které mají dva přechody a umožňují citlivější měření magnetického pole. Stejnosměrný skvid vynalezli v roce 1964 Silver, Jaklevic, Lambe a Mercereau [7] a vysokofrekvenční v roce 1965 Zimmerman a Silver [8].

Extrémní citlivost skvidů umožňuje studium aktivity neuronů v mozku, kterým se zabývá magnetoencefalografie (MEG). Ta využívá k měření magnetického pole vytvořeného proudy tekoucími neurony řadu nebo matici až několika stovek skvidů, jejichž kmitočtový rozsah pokrývá celé pásmo kmitočtů generovaných mozkem. Skvidy využívá magnetogastrografie, která se zabývá studiem slabých magnetických polí generovaných žaludkem, a používají se ke sledování cesty orálně podávaných magneticky označených léků. Skvidy slouží k zobrazení jaderné magnetické rezonance (MRI - z angl. *Magnetic Resonance Imaging*) ve slabých polích [9]. Zatímco při běžném MRI jádra vykonávají precesní pohyb v poli několik T, pro MRI se skvidem stačí pole velké jako magnetické pole Země. Tady je citlivost skvidů plně využita, protože signál jaderné magnetické rezonance (NMR) klesá se čtvercem magnetického pole. Vzhledem k silnopolním MRI systémům má MRI detekované skvidem výhodu v malých finančních nákladech a kompaktnosti. Funkčnost těchto zařízení byla ověřena zobrazením lidských končetin a předpokládá se jejich použití hlavně k zobrazování nádorů.

Pravděpodobně nejširší využití skvidů je v přístrojích pro měření magnetických vlastností látek. Lze jimi měřit magnetické vlastnosti vzorků materiálů od milikelvinových teplot až do několika set stupňů nad pokojovou teplotu a v magnetickém poli až 7 T. Skvidy se používají také v geofyzice, v magnetometrech pro vyhledávání nerostných surovin a geotermálních zdrojů. Dalším příkladem jejich použití je magnetický skanovací mikroskop. Skvidy se také používají v přesných snímačích pohybu, například v detektorech gravitačních vln. Možné rozkmitání velké Al tyče, která slouží jako anténa s velkým činitelem jakosti pro příjem gravitačních vln, se detekuje pomocí supravodivé Nb membrány, jejíž pohyb se snímá skvidem. V experimentu, který na družici ověřuje meze platnosti obecné teorie relativity, se snímá s přesností 200 nanoradiánů směr osy rotace křemenné koule pokovené niobem [10].

Slabou vazbu mezi dvěma supravodiči (Josephsonův přechod) je možné vyrobit několika způsoby, například jako dvě supravodivé elektrody spojené přibližně 2 nm tlustou izolační bariérou nebo 500 nm tlustou vrstvou z normálního vodiče. Zatímco kritická hustota supravodivého proudu v objemných supravodičích je při nulové teplotě řádově 100 GA m<sup>-2</sup>, kritická hustota proudu ve slabé vazbě je typicky 10 MA m<sup>-2</sup>. Proto také o Josephsonových jevech hovoříme jako o slabé supravodivosti.

Nejpoužívanějším materiálem pro výrobu supravodivé elektroniky je Nb. Z něho vyrobené obvody pracují při teplotách pod 9 K a většinou jsou chlazeny kapalným heliem. Po objevu vysokoteplotní supravodivosti se vyrábějí obvody, hlavně z YBaCuO, pro jejichž chlazení stačí kapalný dusík.

# 16.1 Josephsonovy jevy

Původní Josephsonovo odvození bylo provedeno metodou druhého kvantování. Pro pedagogické účely je vhodnější vysvětlení pomocí Feynmanových vázaných módů nebo pomocí Hamiltonových rovnic.

# 16.1.1 Feynmanovo odvození Josephsonových jevů



Obr. 16.1: Slabou vazbu (Josephsonův přechod) představují například dvě supravodivé elektrody oddělené zhruba 2 nm tlustou dielektrickou (nevodivou) vrstvou, která tvoří bariéru. V bariéře amplituda vlnové funkce a hustota Cooperových párů exponenciálně klesají. Mějmě dvě supravodivé elektrody, oddělené tenkou dielektrickou vrstvou. Supravodivý stav v levé a pravé elektrodě je popsán makroskopickými vlnovými funkcemi  $\Psi_{\rm L}$  a  $\Psi_{\rm R}$ , které mají fáze  $\varphi_{\rm L}$  a  $\varphi_{\rm R}$ , chemickými potenciály  $\mu_{\rm L}$  a  $\mu_{\rm R}$  a vazebnou energií K (obr. 16.1) [11]. Časovou závislost vlnových funkcí určují dvě vázané Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\dot{\Psi}_{\rm L} = \mu_{\rm L}\Psi_{\rm L} + K\Psi_{\rm R} , \qquad (16.1)$$
$$i\hbar\dot{\Psi}_{\rm R} = \mu_{\rm R}\Psi_{\rm R} + K\Psi_{\rm L} . \qquad (16.2)$$

Konstanta K je charakteristikou přechodu. Když je rovna nule, jsou rovnice (16.1) a (16.2) nezávislé a dávají stav s nejnižší energií. Při nenulovém K dochází k "prosakovaní" z jedné strany na druhou. Překrytí vlnových funkcí levé a pravé elektrody vede k tomu, že stav levé elektrody je ovliv-

něn pravou elektrodou a naopak. Pak tyto rovnice popisují dva vzájemně vázané kvantově mechanické stavy. Kdyby obě strany přechodu byly stejné s $\mu_{\rm L}=\mu_{\rm R},$ mohli bychom je odečíst. Ale předpokládejme, že k elektrodám můžeme připojit elektrickou baterii. Pak rozdíl chemických potenciálů je $\delta\mu=\mu_{\rm L}-\mu_{\rm R}=2eV,$ kde V je napětí baterie a 2e je elektrický náboj Copperova páru. Nyní použijme substituci

$$\Psi_{\rm L} = \sqrt{\rho_{\rm L}} \exp i\varphi_{\rm L} ,$$
  

$$\Psi_{\rm R} = \sqrt{\rho_{\rm R}} \exp i\varphi_{\rm R} , \qquad (16.3)$$

kde $\rho_{\rm L}$  a  $\rho_{\rm R}$ jsou hustoty Cooperových párů v elektrodách, které jsou ve skutečnosti téměř přesně stejné. Dosazením do rovnic (16.1) a (16.2) a jejich rozdělením na

imaginární a reálné části dostaneme dva páry rovnic

$$\dot{\rho}_{\rm L} = + (2K/\hbar) \sqrt{\rho_{\rm L}\rho_{\rm R}} \sin \phi ,$$
  

$$\dot{\rho}_{\rm R} = - (2K/\hbar) \sqrt{\rho_{\rm L}\rho_{\rm R}} \sin \phi ; \qquad (16.4)$$
  

$$\dot{\phi}_{\rm R} = -(K/\hbar) \sqrt{\rho_{\rm R}/\rho_{\rm R}} \cos \phi - eV/\hbar$$

$$\dot{\varphi}_{\rm L} = (K/\hbar) \sqrt{\rho_{\rm R}/\rho_{\rm L}} \cos \phi - eV/\hbar ,$$
  
$$\dot{\varphi}_{\rm R} = (K/\hbar) \sqrt{\rho_{\rm L}/\rho_{\rm R}} \cos \phi + eV/\hbar , \qquad (16.5)$$

kde $\phi\equiv\varphi_{\rm R}-\varphi_{\rm L}$ je rozdíl fází vlnových funkcí popisujících stavy elektrod.

Rovnice (16.4) říkají, že  $\dot{\rho}_{\rm L} = -\dot{\rho}_{\rm R}$ . Hustota proudu z jedné elektrody do druhé je úměrná  $\dot{\rho}_{\rm L}$  (nebo  $-\dot{\rho}_{\rm R}$ ), to je

$$j = j_{\rm c} \sin \phi \propto (2K/\hbar) \sqrt{\rho_{\rm L} \rho_{\rm R}} \sin \phi, \,, \tag{16.6}$$

kde  $j_c$  je kritická hustota proudu přechodem. Tak jako K i  $j_c$  charakterizuje přechod. Vztah (16.6) mezi proudem a rozdílem fází na přechodu popisuje **stejnos-měrný Josephsonův jev**: přechodem díky tunelování teče bez jakéhokoliv vnějšího elektromagnetického pole stejnosměrný supravodivý proud  $|I| \leq I_c$ , kde  $I_c$  je kritický proud přechodu. Při jeho překročení se na přechodu objeví napětí. Jednoduchá sinusoidální závislost platí pro malé přechody se šířkou  $w \ll \xi_0$ , kde  $\xi_0 \equiv \hbar v_F / \pi \Delta(0)$  je BCS koherenční délka, která je řádově 10 až 100 nm, a  $\Delta(0)$  je BCS energetická mezera (angl. *energy gap*) [3]. V obecném případě je závislost složitější, ale v každém případě jde o lichou  $2\pi$  periodickou funkci rozdílu fází.

Odečtením dalšího páru rovnic (16.5) zjistíme, že časová derivace rozdílu fází je

$$\dot{\phi} = \dot{\varphi}_{\rm R} - \dot{\varphi}_{\rm L} = 2eV/\hbar \ . \tag{16.7}$$

To znamená, že můžeme napsat

$$\phi(t) = \phi(0) + (2e/\hbar) \int V(t) dt .$$
(16.8)

Po připojení stejnosměrného napětí  $V_{\rm dc}$  k elektrodám bude rozdíl fází narůstat v čase jako  $\phi(t) = \phi(0) + 2eV_{\rm dc}t/\hbar$ . Protože  $\hbar$  je malá veličina ( $\approx 0.625$  feV s), proud rychle osciluje, ale střední časová hodnota proudu je rovna nule. Vztah (16.7) popisuje **střídavý Josephsonův jev**, evoluci rozdílu fází. Energie párů se liší o 2eV a tunelování přes bariéru může nastat jenom jako virtuální proces, ve kterém proud s amplitudou  $I_c$  osciluje s kmitočtem  $\nu = 2eV/h$  a rozdíl fází roste s časem rychlostí úměrnou napětí. Přechodem teče střídavý supravodivý proud.

K tomuto jevu existuje také opačný jev. Roste-li rozdíl fází v čase, pak na přechodu (v supravodiči obecně) vznikne napětí. Je-li tento proces monochromatický, můžeme napsat  $\partial \phi / \partial t = \omega$ . Josephsonův přechod tak je ideálním převodníkem napětí na kmitočet. Poměr kmitočtu a napětí je dán dvěma základními fyzikálními konstantami, elementárním nábojem e a Planckovou konstantou h,  $\nu/V = 2e/h = 483,594$  THz/V.

#### 16.1.2 Odvození Josephsonových jevů pomocí Hamiltonových rovnic pro Cooperovy páry

Můžeme-li počet částic N, v tomto případě Cooperových párů, považovat za spojitou proměnnou, pak N a  $\varphi$  jsou dynamicky sdružené proměnné. Pokud N a neurčitost v počtu částic  $\Delta N$  jsou dostatečně velké a neurčitost  $\varphi$  není příliš velká, pak  $\Delta N \Delta \varphi \approx 1$ . Vezmeme-li střední hodnoty a předpokládáme, že  $\Delta N/N$  a  $\Delta \varphi$  jsou malé (kvaziklasický případ), pak Hamiltonovy pohybové rovnice pro N a  $\varphi$  jsou

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \varphi} ; \quad \hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\partial E}{\partial N} = -2\mu , \qquad (16.9)$$

kde E je energie,  $\mu$  je chemický potenciál, totožný při nulové teplotě s Fermiho hladinou  $E_{\rm F}$ . Je-li supravodič ve stacionárním stavu (tedy i tehdy, když jím protéká konstantní supravodivý proud), to je v termodynamické rovnováze, je v celém supravodiči chemický potentiál stejný. Časová závislost fáze makroskopické vlnové funkce supravodivého kondenzátu je dána druhou z rovnic (16.9).

Slabá vazba mezi supravodiči vede k tomu, že se chovají korelovaně a může vést k interferenčním jevům. Rozdíl fází vlnových funkcí popisujících tyto supravodiče se tedy v čase mění jako

$$\phi(t) = \phi(0) - \delta \mu t / \hbar = \phi(0) + 2eVt / \hbar , \qquad (16.10)$$

kde  $\delta\mu$  je rozdíl elektrochemických potenciálů supravodičů a V je elektrické napětí mezi nimi. Při nenulovém napětí se rozdíl fází vyvíjí v čase a dochází k fázovým skluzům, které vedou k disipaci energie.

S vazebnou energií mezi supravodiči jsou spojené supravodivé tunelující proudy. V analogii s první z rovnic (16.9) dostaneme pro hustotu proudu

$$j = \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial f_{\rm J}}{\partial \phi} , \qquad (16.11)$$

kde  $f_J$  je hustota povrchové vazebné energie. Protože při změně rozdílu fází o  $2\pi$  se fyzikálně nic nezmění a vazebná energie musí být sudou a hustota proudu j lichou periodickou funkcí  $\phi$ , v limitě slabé vazby, kdy vystoupí jenom první harmonické, dostaneme

$$f_{\rm J} = -\frac{\hbar}{2e} j_c \cos\phi + konst . \qquad (16.12)$$

$$j = j_{\rm c} \sin \phi \ , \tag{16.13}$$

kde  $j_c = 2e f_J/\hbar$  je kritická hustota proudu. Rovnice (16.13) tak popisuje stejnosměrný a rovnice (16.10), nebo její časová derivace, střídavý Josephsonův jev.

Stav supravodiče je termodynamicky stabilní i v magnetickém poli, když jím teče supravodivý stínící proud. V nerovnovážném stavu se rozdíl fází mění v čase a tunelující supravodivý proud interaguje s fotony.

Ferrell a Prange ukázali, že hamiltonián pro slabou vazbu je stejný jako hamiltonián pro jednorozměrný řetízek atomů v přiblížení těsné vazby s vlnovou funkcí

elektronu lokalizovaného na N-tématomu [12, 13]. V obou případech mají vlastní funkce tvar

$$\Psi = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \exp\left(iN\varphi\right)\Psi_{\rm N} , \qquad (16.14)$$

kde v případě řetízku atomů je  $\Psi_N$  vlnová funkce elektronu lokalizovanáho na *N*-tém atomu a  $\hbar \varphi$  moment hybnosti krystalu kanonicky sdružený s *N*. Vazebná energie zajistí uspořádání  $\varphi$  na dlouhou vzdálenost.

#### 16.2 Josephsonovy jevy v supratekutém heliu

Podobně argumentoval Anderson v souvislosti s možným pozorováním Josephsonových jevů v supratekutém heliu [14]. Supravodivý i supratekutý stav představují kvantové pole částic, jehož střední hodnota může být vzata za makroskopickou proměnnou. Rovnice (16.9) říká, že: i) když je stav supratekuté kapaliny v čase neměnný,  $\varphi$  jako termodynamická proměnná bude konstantní v čase a  $\mu$  musí být všude stejné - nejsou žádné potenciálové rozdíly; ii) když mezi dvěma místy existuje potenciálový rozdíl  $\delta\mu$ , rozdíl fází  $\phi$  mezi nimi se musí měnit v čase. K tomu dojde buď zrychlením

$$d\hbar\nabla\varphi/dt = \boldsymbol{F} , \qquad (16.15)$$

kde ${\pmb F}$ je síla, nebo změnou počtu částic

$$\overline{\delta\mu} = h \overline{dN/dt} , \qquad (16.16)$$

kde  $\overline{dN/dt}$  je střední rychlost fázového skluzu (navíjení fáze). Fázový skuz (angl. phase slip) doprovází všechny disipativní procesy. Když působí síly, které vedou ke zrychlení a časově závislému  $\phi$ , poteče i kvazičásticový proud a hydrodynamika kapaliny bude dvousložková, s normální a supratekutou složkou. Supratekutý proud teče rychlostí  $v_s$ , i když je rozdíl fází stacionární a nepůsobí žádné síly, které by vyvolávaly zrychlení. Supratekutý proud teče kvůli potenciálu

$$\mu = m\frac{P}{\rho} + mgh_0 + \frac{1}{2}mv_{\rm s}^2, \qquad (16.17)$$

kde *m* je hmotnost částice,  $\rho$  je hustota kondenzátu, *P* je tlak, *g* je gravitační zrychlení a  $h_0$  je výška hladiny. Ve stacionárním případě musí být chemický potenciál  $\mu = E_i + E_k + E_e$ , kde  $E_i$  je vnitřní energie,  $E_k$  je kinetická energie a  $E_e$  je energie související s vnějšími silami, všude stejný a konstantní.

Experimenty se supratekutým heliem jsou náročné, protože koherenční délka v <sup>4</sup>He je jenom  $\xi \approx 0.15$  nm (při nulové teplotě a tlaku). V <sup>3</sup>He je  $\xi \approx 70$  nm, ale to je supratekuté až při teplotě menší než 2,491 mK.

V roce 1988 Avenel a Varoquaux pozorovali střídavý Josephsonův jev v supratekutém <sup>4</sup>He při teplotě 10 mK, kterou získali chlazením rozpouštěcím refrigerátorem [15]. Jako slabou vazbu použili úzký kanálek o průřezu  $0.3 \times 5 \ \mu \text{m}^2$  v 200 nm tlusté Ni fólii. Nanokanál byl vymlet fokusovaným iontovým svazkem. Když vnějším střídavým tlakem budili rozdíl elektrochemických potenciálů  $\delta \mu = V \delta P$ , pozorovali

jednotlivé fázové skluzy. K tomu použili Helmholtzův rezonátor s velkým činitelem jakosti. Na pružné membráně z kaptonu byla supravodivá Al vrstva, jejíž poloha byla snímána rf skvidem. V podobném experimentu v Berkeley použili jako slabou vazbu síto z 50 nm tlustého plátku nitridu křemíku se čtvercovou maticí  $65 \times 65$  děr se 70 nm otvory [16]. Vzdálenost mezi děrami byla 3  $\mu$ m.

Když rychlost supratekuté kapaliny  $v_{\rm s}$  dosáhne kritické hodnoty, dochází k fázovým skluzům a jsou emitována vírová vlákna nebo kroužky, které nesou kvantum cirkulace  $\kappa = h/m_4$ , kde  $m_4$  je hmotnost atomu <sup>4</sup>He (viz kapitoly o supratekutosti helia a kvantové turbulenci). V kanálu o šířce d a při poloměru jádra víru  $\xi_0$  k tomu dojde při rychlosti  $v_{\rm c} = (\kappa/2\pi d) \ln(d/\xi_0)$ . Při skluzu o  $2\pi$  je celková práce vykonaná na proud tekoucí rychlostí  $v_{\rm c}$  kanálem o průřezu s rovna  $\delta E = \rho \kappa s v_{\rm c}$ . Rychlost fázového skluzu je

$$\hbar \partial \phi / \partial t = -\delta \mu . \tag{16.18}$$

Tato rovnice je zobecněním Eulerovy-Landauovy rovnice pro ideální kapalinu

$$\partial \boldsymbol{v}_s / \partial t + \nabla \left( \mu / m_4 + v_s^2 / 2 \right) = 0 \tag{16.19}$$

na případ, kdy vznikají kvantované víry. Když je kapalina urychlena, aniž by vznikaly víry, dostaneme z rovnic (16.18) a (16.19)  $\boldsymbol{v}_{s} = (\hbar/m_{4})\nabla\phi$ .

# 16.3 Fyzikální vlastnosti Josephsonových přechodů

V následujícím textu se budeme zabývat základními fyzikálními charakteristikami supravodivých Josephsonových přechodů. Budeme dále zkoumat, jak jsou vlastnosti Josephsonova kontaktu ovlivněny teplotou, magnetickým polem, mikrovlnným zářením či transportním proudem a ukážeme na analogii slabé supravodivosti s klasickou mechanikou. Začneme fundamentálními vlastnostmi přechodu.

#### 16.3.1 Kalibrační invariance (lokální vnitřní symetrie)

Globální transformace fáze  $\varphi$  představuje změnu fáze o hodnotu konstantní v prostoru a čase. Maxwellovy rovnice i kvantová elektrodynamika jsou vůči globální transformaci invariantní, protože měřitelné veličiny, jako je intenzita elektrického pole  $\boldsymbol{E}$ , magnetická indukce  $\boldsymbol{B}$  a hustota proudu  $\boldsymbol{j}$ , se nezmění. Transformace  $\Psi(x) \rightarrow e^{i\varphi}\Psi(x)$  odpovídá otočení souřadné soustavy.

Při lokální transformaci je fáze závislá na prostorové souřadnici,  $\varphi = \varphi(x)$  [17, 18]. Maxwellovy rovnice jsou invariantní i vzhledem k lokální transformaci, protože různé magnetické potenciály A a různé elektrostatické potenciály U, které se liší o gradient nějaké časově nezávislé skalární funkce, nemají vliv na měřitelné veličiny. V prvním případě proto, že rotace gradientu skalární funkce je identicky rovna nule

$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A} = \nabla \times (\boldsymbol{A} + \nabla \varphi(\boldsymbol{x})) \tag{16.20}$$

a v druhém případě proto, že skalární funkce není funkcí času

$$\boldsymbol{E} = -\nabla U - \partial \boldsymbol{A} / \partial t = -\nabla U - \partial (\boldsymbol{A} + \nabla \varphi(x)) / \partial t .$$
(16.21)

Supravodivý stav ale představuje kvantové pole částic a v kvantové elektrodynamice jsou veličiny na potenciálech a jejich kalibraci závislé. Proto se v případě lokální transformace fáze musejí potenciály i gradient fáze transformovat najednou tak, aby se měřitelné veličiny, jako je například hustota proudu j či hybnost p, daná operátorem  $-i\hbar\nabla - e^*A$ , nezměnily. V případě supravodiče je díky Cooperovu párování náboj  $e^* = 2e$ . Změníme-li  $\nabla\varphi$  na  $\nabla\varphi'$ , musíme změnit i A na  $A' = A + (\hbar/2e) (\nabla\varphi' - \nabla\varphi)$ . Tímto způsobem můžeme zavést do Josephsonových rovnic závislost na magnetickém poli. Zatímco výběr fáze je libovolný, protože na měřitelné veličiny nemá vliv, rozdíl fází mezi dvěma body v prostoru je měřitelný a není kalibračně invariantní. Integrací vektorového poteciálu po uzavřené křivce dostaneme pro rozdíl fází

$$\phi' = \phi + (2e/\hbar) \Phi = \phi + 2\pi \Phi/\Phi_0 , \qquad (16.22)$$

kde $\Phi_0=h/2e$ je kvantum magnetického toku.

Rozšíření globální symetrie na lokální symetrii vede ke specifické interakci s nehmotným vektorovým polem.<sup>2</sup> Obecný popis kalibrační invariance je dán kovariantní derivací

$$D_{\mu} \to \partial_{\mu} - ieA_{\mu} - i\partial_{\mu}\phi$$
, (16.23)

kde  $\mu$  jsou indexy odpovídající časové a prostorovým souřadnicím. Tím do problému vstupuje i časová závislost. Je-li při jedné kalibraci soustava v rovnováze a  $\partial \Psi / \partial t = 0$ , pak v jiné na čase závisí. Ve stacionárním případě je časová závislost  $\Psi$  daná Schrödingerovou rovnicí.

Problém kalibrace je podobný definici "elektrické země". Když všechny potenciály vzrostou o stejnou hodnotu, v elektrickém obvodu se nic nezmění. Absolutní velikost potenciálů, která je spojená s globální kalibrační transformací, není podstatná. Co je důležité, je rozdíl potenciálů. Kalibrační pole přestavuje rychlost změny kovariantní derivace a může být eliminováno transformací síly pole, která je dána jeho křivostí (tj. derivací). Kalibrační pole musí být bráno jako dyna-



Obr. 16.2: Geometrie přechodu je dána jeho šířkou d a délkou l. Dole: závislost profilu hustoty proudu na magnetickém toku v přechodu.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Nambu dostal v roce 2008 Nobelovu cenu za fyziku za práce související s kvantovou elektrodynamikou (QED) Podnět k pracem na spontánním narušení symetrie mu dala BCS teorie. Zde je opět namístě zdůraznit vazbu na úvodní kapitolu.

micky proměnná interakce, která přispívá k vlastní energii. Tento jev je analogický Coriolisově jevu v klasické mechanice.

#### 16.3.2 Vliv statického magnetického pole na přechod

V dostatečně silném magnetickém poli dojde k tomu, že v bariéře vzniknou domény, ve kterých proud teče opačným směrem a maximální velikost celkového supravodivého proudu je silně potlačena. Tento jev umožňuje jasně rozlišit Josephsonovy přechody od zkratů mezi elektrodami.

Mějme vnější magnetické pole B, orientované kolmo na Josephsonův přechod s pravoúhlou geometrií (obr. 16.2). Magnetický tok v přechodu je  $\Phi = Bdl$ , kde  $d = \lambda_{\rm J} + w + \lambda_{\rm J}$  je efektivní šířka přechodu (osa x),  $\lambda_{\rm J}$  je Josephsonova hloubka vniku magnetického pole do oblasti přechodu, w je tloušťka dielektrické vrstvy a l je délka přechodu (osa y). Celkový proud přechodem je

$$I = h_0 \int_{-l/2}^{l/2} j_c \sin(\phi + \phi_0) \delta y , \quad (16.24)$$

kde  $h_0$  je tloušťka supravodivé vrstvy (osa z). Integrací (16.24) použitím substituce  $\phi = 2\pi \Phi / \Phi_0 = 2\pi / \Phi_0 \cdot B dy$  a  $\delta \phi = 2\pi / \Phi_0 \cdot B d\delta y$  dostaneme<sup>3</sup>

$$I = I_{c} \frac{\sin(\pi \Phi/\Phi_{0})}{\pi \Phi/\Phi_{0}} \sin \phi_{0} . \qquad (16.25)$$

Obr. 16.3: Závislost maximálního supravodivého proudu přechodu na magnetickém toku v přechodu.

Pro obdélníkový průřez přechodu a konstatní hustotu proudu dostaneme Fourierův obraz obdélníku. Statické magnetické pole ovlivňuje maximální supravodivý proud

$$I_{\rm max} = I_{\rm c} \left| \frac{\sin \left( \pi \Phi / \Phi_0 \right)}{\pi \Phi / \Phi_0} \right| , \qquad (16.26)$$

který může přechodem téci. Závislost maximálního proudu na toku v přechodu na obr. 16.3 je analogická Fraunhoferově difrakci koherentního světla na pravoúhlé štěrbině. Má-li přechod kruhový průřez, dostaneme vzor analogický difrakci světla na kruhové štěrbině. Tento jev můžeme využít k měření magnetického pole, ale protože plocha přechodu ld je typicky několik  $\mu m^2$ , je cilivost poměrně malá, jednomu kvantu toku odpovídá změna pole o  $\delta B = \Phi_0/ld \approx 2 \text{ mT}.$ 



10.0

431

 $<sup>^{3}\</sup>cos\alpha - \cos\beta = -2\sin\frac{\alpha+\beta}{2}\sin\frac{\alpha-\beta}{2}$ 

## 16.3.3 Závislost kritického proudu přechodu na teplotě

Použitím teplotní závislosti energetické mezery  $\Delta(T)$  z mikroskopické BCS teorie Ambegaokar a Baratoff spočítali pro rovnovážný případ závislost kritického proudu přechodu na teplotě (viz obr. 16.4) [19]:

$$I_{\rm c}(T) = G_{\rm N} e \frac{\pi \Delta(T)}{2e} \tanh \frac{\Delta(T)}{2k_{\rm B}T} , \qquad (16.27)$$

kde  $G_{\rm N} = 1/R_{\rm N}$  je kvazičásticová vodivost přechodu (s elektrodami v normálním stavu). Při teplotě blízko absolutní nuly,  $T \to 0$ , je kvazičástic málo a energetická mezera je prakticky konstantní,  $\Delta(T) \propto \exp(\Delta(0)/k_{\rm B}T)$ . V okolí kritické teploty závisí zakázaný pás na teplotě jako  $\Delta(T) = \Delta(0)[1 - (T/T_{\rm c})^2]^{1/2}$ . V případě, že supravodiče nejsou stejné a mají různé energetické mezery, dostal Anderson výsledek [20]

$$I_{c}(T) = G_{N} \frac{\pi \Delta_{1}(T) \Delta_{2}(T)}{e(\Delta_{1}(T) + \Delta_{2}(T))} K\left( \left| \frac{\Delta_{1}(T) - \Delta_{2}(T)}{\Delta_{1}(T) + \Delta_{2}(T)} \right| \right) , \qquad (16.28)$$

kde K je úplný eliptický integrál.

# 16.3.4 Elektrodynamika rozdílu fází v Josephsonově přechodu

Obecně je rozdíl fází na přechodu funkcí prostorových souřadnic a času. Jeho elektrodynamiku dostaneme z Maxwellovy rovnice

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \boldsymbol{j} + \partial \boldsymbol{D} / \partial t \tag{16.29}$$

a rovnice (16.6) pro stejnosměrný Josephsonův jev. V reprezentaci magnetického vektorového potenciálu a rozdílu fází budeme mít

$$\nabla \times \left(\frac{1}{\mu} \nabla \times \boldsymbol{A}\right) = \boldsymbol{j}_{\rm c} \sin \phi - \epsilon \partial^2 \boldsymbol{A} / \partial t^2 , \qquad (16.30)$$

kde  $\mu$  je permeabilita a  $\epsilon$  je dielektrická konstanta. Substitucí  $\mathbf{A} = (\hbar/2e)\phi/d$ , kde d je vzdálenost, na které vznikne rozdíl fází  $\phi$ , dostaneme rovnici<sup>4</sup>

$$\frac{1}{\tilde{c}^2}\frac{\partial^2\phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = \frac{1}{\lambda_{\rm I}^2}\sin\phi,\tag{16.31}$$

kde  $\tilde{c} = 1/\sqrt{\mu\epsilon}$  je rychlost šíření elektromagnetického vlnění v bariéře, typicky 1/20 rychlosti světla ve vakuu, a  $\lambda_{\rm J} = (h/2e\mu dj_c)^{1/2}$  je Josephsonova hloubka vniku elektromagnetického pole. Rovnice fenomenologicky popisuje elektrodynamiku přechodu, tj. šíření elektromagnetického vlnění v bariéře. Tato nelineární diferenciální

432



Obr. 16.4: Závislost kritického proudu Josephsonova

přechodu na teplotě.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>rotace gradientu  $\nabla \times (\nabla U)$ a divergence rotace  $\nabla (\nabla \times \mathbf{A})$ jsou identicky rovny nule. Rotace rotace je $\nabla \times \nabla = \nabla (\nabla \cdot) - \nabla^2$ .
rovnice je známa jako sine - Gordonova rovnice<sup>5</sup>. V obecném případě do ní musíme zahrnout i normální kvazičásticový a interferenční proud (mezi supravodivým a kvazičásticovým). Interferenční proud je ale obyčejně možné zanedbat. Celkový proud je tedy

$$j = j_{c} \sin \phi + \sigma \left( V \right) V , \qquad (16.32)$$

kde $\sigma\left(V\right)$  je měrná kvazičásticová vodivost přechodu, která je obecně závislá na napětí, a  $V=(h/2e)\,\partial\phi/\partial t,$ takže dostaneme

$$\lambda_{\rm J}^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \tau \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{1}{\omega_1^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \sin \phi , \qquad (16.33)$$

kde  $\tau = \sigma \mu d\lambda_{\rm J}^2 = \sigma h/2ej_{\rm c}$  je relaxační doba tlumení oscilací rozdílu fází daná nenulovou viskozitou prostředí a  $\omega_{\rm J} = \tilde{c}/\lambda_{\rm J} = (2edj_{\rm c}/h\epsilon)^{1/2}$  je úhlový kmitočet plazmových oscilací rozdílu fází v přechodu. Obecné řešení rovnice (16.33) není známé. Linearizací této rovnice pro  $\phi \to 0$ , zanedbáním viskózního členu a použitím řešení ve tvaru běžící rovinné vlny,  $\phi(x,t) = \phi(0) \exp(i(kx - \omega t))$ , dostaneme disperzní relaci

$$(\omega/\omega_{\rm J})^2 = (\lambda_{\rm J}k)^2 + 1$$
. (16.34)

Kvazistatické řešení této rovnice pro $\omega=0$ dává  $k=i/\lambda_{\rm J},$ tedy

$$\phi(x) = \phi(0) \exp(-x/\lambda_{\rm J})$$
, (16.35)

které popisuje Meissnerův jev. Vnější magnetické pole v přechodu tlumí stínící proudy na charakteristické délce dané hloubkou vniku  $\lambda_J$ . Tento jev se pozoruje, jenom když jsou rozměry přechodu větší než  $\lambda_J$ , která je typicky stovky  $\mu$ m, tj. o dva až čtyři řády větší než Londonova hloubka vniku v objemových supravodičích. Proto o Josephsonových jevech hovoříme jako o slabé supravodivosti.

Je-li  $l \gg \lambda_{\rm J}$ , hovoříme o dlouhém Josephsonově přechodu. Takový přechod se chová jako objemový supravodič II. typu: v poli menším než  $H_{\rm c1J} = \lambda_{\rm J} j_{\rm c}$  je v Meissnerově stavu a ve větším poli je ve stavu analogickém smíšenému stavu v supravodičích II. typu. Do přechodu vnikají víry, které jsou od sebe vzdáleny  $\lambda_{\rm J}$ . Dolní kritické pole  $\mu_0 H_{\rm c1J}$  bývá řádově 0, 1 mT.

V časově závislém případě může být porucha (fluktuace) rozdílu fáz<br/>í $\delta\phi$ chápána jako nízkofrekvenční plazmová oscilace, související s malou husto<br/>tou elektronů v

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Její tři hlavní řešení se (v přijaté hantýrce, spisovné české překlady nebyly dosud zavedeny) nazývají: kinky a antikinky, breathery a radiační pole. Kinky a antikinky jsou solitony (název pochází od Kruskala a Zabuského z angl. *solitary waves*), což jsou zvláštně tvarované pulzy ve tvaru běžící vlny s konstantním profilem, které jsou řešením nelineárních rovnic se známou disperzí grupové rychlosti. Solitony mají podobné vlastnosti jako částice. Dva solitony se při vzájemné srážce nezmění, zachovají si svůj tvar i rychlost. Srážka vede pouze k jejich časovému zdržení. Kink (kladné

znaménko, záporné znaménko je pro anti-kink) má tvar  $\phi(x,t) = 4 \arctan \exp\left(\pm \frac{x-vt}{\lambda_J \sqrt{1-(v/c)^2}}\right)$ , kde v je jeho rychlost. Stejně jako ostatní řešení je invariantní vzhledem k Lorentzově transformaci.

Kite v je jeho rychiost. Stejne jako ostatili řesem je invariantili vznedení k hořentzové transformati Kink je spojený s otočením fáze o  $2\pi$ , antikink s otočením fáze o  $-2\pi$ .

bariéře. Vlastní kmity (plazmové oscilace) jsou důsledkem periodického přelévání volné energie mezi Josephsonovou energií přechodu  $E_{\rm J}(1-\cos\phi)$ , kde  $E_{\rm J} = \Phi_0 I_{\rm c}$ , a elektrostatickou energií  $(Ne)^2/2C$ , kde C je kapacita přechodu. Nejnižší kmitočet oscilací s malou amplitudou, které se mohou přechodem šířit, je dán plazmovým kmitočtem  $\omega_{\rm J} = (2\pi I_c/\Phi_0 C)^{1/2}$ . Kmitočet  $\omega_{\rm J}/2\pi$  je typicky několik GHz.

V analogii sLCrezonančním obvodem, jehož rezonanční kmitočet je $\omega=2\pi/\sqrt{LC},$ můžeme zavést ekvivalentní indukčnost Josephsonova přechodu

$$L_{\rm J} = \frac{\partial \Phi}{\partial I} = \frac{\hbar}{2eI_{\rm c}\cos\phi} = \frac{\Phi_0}{2\pi I_{\rm c}\cos\phi} , \qquad (16.36)$$

která je parametrická, protože závisí na proudu. Pro  $\phi = \pm \pi/2 + 2\pi n$  diverguje. Pro nulový proud, I = 0, je  $L_{\rm J} = (\hbar/2e) / (Aj_{\rm c}) = \Phi_0/2\pi I_{\rm c}$ . Kapacita přechodu je  $C = \epsilon A/d$ , kde  $A = wh_0$  je plocha elektrody.

Přechodem se tedy mohou šířit jenom fotony s energií větší než  $\hbar\omega_{\rm J}$ . Když je  $\omega > \omega_{\rm J}$ , je postupná elektromagnetická vlna lokalizována v okolí bariéry, podél které se může šířit. Když je  $\omega < \omega_{\rm J}$ , je  $\mathbf{k}$  imaginární, vlna se stává evanescentní a porucha je tlumená na vzdálenosti  $\lambda_{\rm J}$  exponenciálně, jako v případě stejnosměrného pole. V tomto případě je impedance na jednotku délky hrany polonekonečné bariéry induktivní a velmi malá, až na případ  $\omega \approx \omega_{\rm J}$ , kdy diverguje. Když je  $\omega = \omega_{\rm J}$ , je  $\mathbf{k} = 0$  a porucha je typu plazmových oscilací. Magnetické pole je rovno nule a proud a elektrické pole směřují od jedné elektrody ke druhé. Ve velmi malých přechodech je jediným důležitým módem oscilací, který vede k fluktuacím  $\delta\phi$ , mód s k = 0 a  $\omega = \omega_{\rm J}$ . Jsou-li oscilace malé a harmonické, pak jejich teplotní závislost je daná Boseovou – Einsteinovou statistikou a nulovými kmity

$$\overline{\left(\delta\phi\right)^2} = \frac{2e\omega_{\rm J}}{Aj_{\rm c}} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{\rm J}/k_{\rm B}T) - 1}\right) \ . \tag{16.37}$$

#### 16.3.5 RCSJ model Josephsonova přechodu

RCSJ je zkratka pro odporově a kapacitně zkratovaný přechod (z angl. Resistively-Capacitively-Shunted-Junction). Rovnici (16.33) můžeme napsat pomocí makroskopických parametrů: kapacity přechodu C a kvazičásticového odporu přechodu  $R_N$ . V obecném případě má normální kvazičásticový proud složitou závislost na napájecím napětí. Situace se podstatně zjednoduší, když přechod můžeme považovat za ohmický, to je s odporem nazávislým na napětí. Kvazičásticový odpor  $R_N$  je typicky  $(1 - 10) \Omega$ . Kritický supravodivý proud bývá  $I_c \approx 1 \mu A$  až 1 mA.

Celkový proud je součtem supravodivého proudu a normálního kvazičásticového proudu, což je základem dvoukapalinového modelu se supravodivou a normální složkou, a posuvného proudu

$$I = I_{\rm c} \sin \phi + V/R_{\rm N} + C \partial V/\partial t . \qquad (16.38)$$

Nahrazením napětí časovou derivací rozdílu fází dostaneme

$$I = I_{\rm c} \sin \phi + (\Phi_0/2\pi R_{\rm N}) \,\partial\phi/\partial t + (C\Phi_0/2\pi) \,\partial^2\phi/\partial t^2 \,. \tag{16.39}$$

Tabuľka 16.1: Podobnost Josephsonova přechodu a mechanického kyvadla

Josephsonův přechod	Mechanické kyvadlo
napájecí stejnosměrný proud $I_{\rm dc}$	působící kroutící moment $T_{\rm a}$
kapacita přechodu ${\cal C}$	moment setrvačnosti ${\cal M}$
kvazičásticová vodivost $G=1/R_{\rm N}$	koeficient tlumení $D$
maximální Josephsonův proud $I_{\rm c}$	maximální kroutící moment
	gravitační síly $mgl$
rozdíl fází $\phi$	odklon od svislice $\phi$

Stejný typ diferenciální rovnice popisuje dynamiku kyvadla o hmotnosti m a délce l v gravitačním poli se zrychlením g:

$$T_{\rm a} = mgl\sin\phi + D\partial\phi/\partial t + J\partial^2\phi/\partial t^2 , \qquad (16.40)$$

kde $\phi$  je úhel mezi kyvadlem a svislicí, působící vnější kroutící moment je $T_{\rm a}$ , moment gravitační síly je  $-mgl\sin\phi$  a tlumení momentu třením je  $-Dd\phi/dt$ , kde D je koeficient tlumení, a J je moment setrvačnosti kyvadla. Porovnání parametrů je v tabulce 16.1.

#### 16.3.6 Volt-ampérové charakteristiky přechodu

Volt-ampérovou charakteristiku (VACH) přechodu napájeného z proudového zdroje dostaneme řešením rovnice (16.39). Pro zjednodušení ji přepíšeme do bezrozměrného tvaru

$$I/I_{\rm c} = \sin\phi + \tau \partial\phi/\partial t + \beta_{\rm c}\omega_{\rm J}^{-2}\partial^2\phi/\partial t^2 , \qquad (16.41)$$

kde časová konstanta tlumení oscilací je  $\tau = L_{\rm J}/R_{\rm N} = \Phi_0/2\pi R_{\rm N}I_{\rm c}, \ \beta_{\rm c} = \tau_{\rm c}/\tau = 2\pi R_{\rm N}^2 C I_{\rm c}/\Phi_0$  je **McCumberův parametr** a  $\tau_{\rm c} = R_{\rm N}C$ .

Pro $\beta_{\rm c} \rightarrow 0$  je přechod přetlumený a rovnice (16.41) se zjednoduší na

$$\frac{d\phi}{I/I_{\rm c} - \sin\phi} = \frac{dt}{\tau} , \qquad (16.42)$$

která má analytické řešení. Když je proud menší než kritický, je rozdíl fází v čase konstantní,  $\phi = \arcsin(I/I_c)$ , a na přechodu není napětí. Pro  $I \rightarrow I_c$  je rozdíl fází  $\pi/2$ . Když je proud větší než kritický, rozdíl fází začne narůstat s časem a na přechodu je napětí, jehož časová závislost je

$$V(t) = \Phi_0 \frac{\phi(t) - \phi(0)}{t} = \frac{\Phi_0}{t} \int_0^t \frac{\partial \phi}{\partial t'} dt' . \qquad (16.43)$$

Integrací rovnice (16.42) dostaneme

$$V(t) = \frac{R_{\rm N}I_{\rm c}\left[\left(I/I_{\rm c}\right)^2 - 1\right]}{I/I_{\rm c} - \sin\left\{\left[\left(I/I_{\rm c}\right)^2 - 1\right]^{1/2}t/\tau + \arctan\left[\left(I/I_{\rm c}\right)^2 - 1\right]^{1/2}\right\}}$$
(16.44)



Obr. 16.5: Vlevo: Oscilující napětí na přechodu pro různé hodnoty  $I/I_c$ . Vpravo: Volt-ampérová charakteristika hysterezního (plná křivka) a přetlumeného bezhysterezního (čárkovaná křivka) přechodu. Lineární závislost představuje ohmický odpor.

Oscilující napětí je anharmonické a kmitočet oscilací roste s poměrem  $I/I_{\rm c}$  (obr. 16.5 vlevo). Volt-ampérová charakteristika (VACH) přechodu je závislost střední časové hodnoty napětí na napájecím proudu  $\overline{V(t)} = R_{\rm N}\sqrt{I^2 - I_{\rm c}^2}$ , viz obr. 16.5 vpravo.

Když přechod není dostatečně zatlumený, rozdíl fází bude oscilovat a VACH bude hysterezní. VACH se stane bezhysterezní přidáním odporu paralelně k přechodu, čímž se zmenší McCumberův parametr  $\beta_c$  a oscilace se zatlumí.

Rozdíl fází můžeme považovat za částici v potenciálu "nakloněné valchy" (angl. tilted washboard potential)

$$U(\phi) = E_{\rm J}(1 - \cos\phi) - I(\hbar/2e)\phi = E_{\rm J}(1 - \cos\phi - \phi I/I_{\rm c}) , \qquad (16.45)$$

který závisí na souřadnici  $\phi$ . Vazebná energie Josephsonova přechodu je  $E_{\rm J} = (\hbar/2e)I_{\rm c}$ . Práce vykonaná vnějším proudem je  $(\hbar/2e)I\phi$ . Při nulovém proudu je částice lokalizovaná v jednom z minim potenciálu (obr. 16.6). Jak proud roste, roste náklon valchy a minima postupně zanikají. Když proud překročí  $I_c$ , částice se začne pohybovat rychlostí  $\partial \phi / \partial t$  a na přechodu bude napětí.

Nejjednodušší VACH má přetlumený přechod, který má malou kapacitu a velkou disipaci. Můžeme definovat faktor  $Q = \omega_{\rm J} R_{\rm N} C = (2eI_{\rm c}R_{\rm N}^2 C/h)^{1/2}$ , který charakterizuje relativní disipaci. Je-li Q > 0, je VACH hysterezní. Není-li kapacita přechodu zanedbatelná, musíme přidat Coulombickou energii. Elektrostatická energie kondenzátoru tvořeného elektrodami je

$$E_{\rm C} = \frac{CV^2}{2} = \frac{C}{2} \left(\frac{\hbar}{2e}\right)^2 \left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)^2 \,. \tag{16.46}$$

Bude-li proud růst od nuly, pak dokud  $I < I_c$ , bude rozdíl fází lokalizovaný a napětí bude nulové. Při  $I > I_c$  se částice začne pohybovat a na přechodu vznikne napětí.

Když začneme proud snižovat, disipativní režim s nenulovým napětím zůstane i při proudu menším než  $I_c$ . Teprve když proud poklesne pod hodnotu  $I_r$ , která se nazývá proud znovuzachycení, se částice stane opět lokalizovanou a napětí zanikne. Při malé disipaci se částice bude pohybovat dolů a překonávat maxima potenciálu díky setrvačnosti, dokud energie ztracená při pohybu z jednoho minima do druhého bude menší než práce Ih/2e vykonaná vnějším proudem I. Když bude disipace větší, tj. Q menší, ztráty energie převýší získanou energii a částice se zastaví.

V silně podtlumeném přechodu s $Q\to\infty$ j<br/>de proud znovuzachycení k nule a VACH má lineární ohmickou závislost. V tom<br/>to případě je napětí prakticky konstantní  $V\approx\overline{V}$ a rozdíl fází se navíjí rychlostí

$$\phi(t) = 2e\overline{V}t/\hbar + \delta\phi , \qquad (16.47)$$

kde $\delta\phi\ll 1.$  Protože platí

$$\omega = 2e\overline{V}/\hbar = 2eIR_N/\hbar = \omega_J QI/I_c , \qquad (16.48)$$



Obr. 16.6: Potenciál nakloněné valchy jako funkce  $I/I_c$ . Pro  $I < I_c$ má minima, která pro  $I > I_c$ zaniknou.

dostaneme  $\overline{V} = R_{\rm N}I$ . Řešením rovnice (16.41) pro velké Q je  $\delta \phi = (\omega_{\rm J}/\omega) \sin \omega t$ . Je-li  $\omega_{\rm J}/\omega \ll 1$ ,  $\delta \phi$  je malé , z čehož plyne podmínka  $I_{\rm c}/IQ \ll 1$ , jinak je  $\delta \phi$  velké. Proud, při kterém dojde k znovuzachycení, je  $I_{\rm r} \approx I_{\rm c}/Q$ .

Při nenulové teplotě má částice tepelnou energii  $k_{\rm B}T$ , díky níž může přeskočit v potenciálu  $U(\phi)$  do sousedního minima a změnit rozdíl fází o  $2\pi$ . Pravděpodobnost přeskoku za jednotku času je dána Arrheniovým vztahem

$$\nu_{\pm} = \nu_{\rm a} \exp\left[-\frac{U \pm (Ih/4e)}{k_{\rm B}T}\right] , \quad (16.49)$$

kde $\nu_{\rm a}$ je kmitočet nárazů částice na bariéru

o výšce U. Znaménko plus je pro přeskoky do vyššího potenciálu, minus pro přeskoky do nižšího potenciálu. Pravděpodobnost přeskoku ze stavu  $\phi$  do stavu  $\phi + 2\pi$  za jednotku času je dána rozdílem

$$\nu = \nu_{-} - \nu_{+} = 2\nu_{\rm a} \exp\left(-\frac{U}{k_{\rm B}T}\right) \sinh\left(\frac{Ih}{4ek_{\rm B}T}\right) . \tag{16.50}$$

Přeskoky způsobují napětí  $\overline{V} = (h/2e)\nu$ . Při malých proudech,  $I \ll I_c$ , je výška bariéry  $U \approx 2E_J$  a v limitě proudu jdoucího k nule  $(Ih/4e \ll k_B T)$  dostaneme

$$\overline{V} = I \frac{h}{e^2} \frac{h\nu_{\rm a}}{4k_{\rm B}T} \exp\left(-\frac{2E_{\rm J}}{k_{\rm B}T}\right) .$$
(16.51)

Λ	2	7
4	J	1

Pro  $2E_{\rm J} \approx k_{\rm B}T$  je bariéra neefektivní a odpor přechodu  $\overline{V}/I$  je srovnatelný s normálním odporem, z čehož dostaneme  $R_{\rm Q}h\nu_{\rm a} \approx 4R_{\rm N}k_{\rm B}T$ , kde  $R_{\rm Q} = h/e^2 \approx 26 \ \mathrm{k\Omega}$  je kvantový odpor. Dosazením dostaneme pro odpor přechodu

$$R_{\rm J} \approx R_{\rm N} \frac{E_{\rm J}}{4k_{\rm B}T} \exp\left(-\frac{2E_{\rm J}}{k_{\rm B}T}\right)$$
 (16.52)

Při nízkých teplotách je odpor exponenciálně malý, ale i při malých proudech je nenulový.



Obr. 16.7: Závislost voltovéampérové charakterisky RCSJ přechodu na  $E_{\rm J}/k_{\rm B}T$ . Zleva doprava křivky odpovídají rostoucímu  $E_{\rm J}/k_{\rm B}T$ . Křivka začínající u  $I_{\rm c}$  odpovídá případu  $E_{\rm J} = \infty$ .

Když je přechod podtlumený, "částice" se začne pohybovat, jakmile se dostane nad bariéru. Kmitočet nárazů nyní závisí na rozdílu fází, sin  $\phi = I/I_c$ ,

$$\nu_{\rm a}^2 = \nu_{\rm J}^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \cos \phi = \nu_{\rm J}^2 \left(1 - \frac{I^2}{I_{\rm c}^2}\right)^{1/2}.$$
(16.53)

Pravděpodobnost přeskoku za jednotku času roste s proudem, je velká pro $I \to I_{\rm c},$ kdy je bariéra

$$U = 2E_{\rm J} \left[ \left( 1 - \frac{I^2}{I_{\rm c}^2} \right)^{1/2} - \frac{2I}{I_{\rm c}} \arccos\left(\frac{I}{I_{\rm c}}\right) \right]$$
(16.54)

malá, a na proudu závisí přibližně jako  $U \approx 2E_{\rm J} (1 - I/I_c)^{3/2}$ . Jak proud roste od nuly do  $I_c$ , pravděpodobnost přeskoku za jednotku času roste z exponenciálně malé hodnoty na kmitočet plazmových kmitů  $\nu_{\rm J} \approx 10$  GHz. Generované napětí je  $V \approx (h/2e)\nu \approx 10 \ \mu$ V.

## 16.3.7 Josephsonův přechod ozářený mikrovlnami - Shapirovy schody

Když je na přechod přiloženo stejnosměrné napětí V, teče jím střídavý supravodivý proud o kmitočtu  $\nu = (2e/h)V$ a kvazičásticový proud  $V/R_{\rm N}$ . Ten v následujícím zanedbáme. Když je navíc přiloženo střídavé napětí  $V_{\rm rf}$ o kmitočtu  $\nu_{\rm rf}$ , toto oscilující napětí moduluje kmitočet střídavého supravodivého proudu a na VACH vzniknou schody s konstantním stejnosměrným napětím  $V = n(h/2e)\nu_{\rm rf}$ , kde n je celé číslo, viz. obr. 16.8.

Celkové napětí na přechodu je

$$V(t) = V + V_{\rm rf} \exp\left(i\omega_{\rm rf}t\right) . \tag{16.55}$$

Střídavé napětí kmitočtově moduluje rychlost navíjení rozdílu fází, což vede k modulaci střídavého proudu. Vývoj rozdílu fází (fázového skluzu) v čase je

$$\phi(t) = \int_0^t \omega \left[ 1 + \frac{V_{\rm rf}}{V} \exp\left(i\omega_{\rm rf}t'\right) \right] dt' = \omega t - i\frac{2e}{\hbar} \frac{V_{\rm rf}}{\omega_{\rm rf}} \exp\left(i\omega_{\rm rf}t\right) + \phi_0 . \quad (16.56)$$

Dosazením do rovnice pro stejnosměrný Josephsonův jev (16.6) dostaneme

$$I = I_{\rm c} \sin \phi \left( t \right) = I_{\rm c} \sin \left( \omega t - i \frac{2e}{\hbar} \frac{V_{\rm rf}}{\omega_{\rm rf}} \exp \left( i \omega_{\rm rf} t \right) + \phi_0 \right) \,. \tag{16.57}$$

Pomocí Jacobiho Angerovy identity<sup>6</sup> můžeme tento vztah přepsat na

$$I(t) = I_{\rm c} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_{\rm n} \left(\frac{2eV_{\rm rf}}{\hbar\omega_{\rm rf}}\right) \exp\left\{-i\left(n\omega_{\rm rf}+\omega\right)t\right\} , \qquad (16.58)$$



Obr. 16.8: Schody konstantního napětí na voltové-ampérové charakteristice přechodu ozářeného mikrovlnami. kde J<sub>n</sub>() je Besselova funkce řádu *n*. Pro  $\hbar\omega = 2eV = \pm n\hbar\omega_{\rm rf}$  má celkový proud stejnosměrnou složku, protože rozdíl fází nezávisí na čase. Důsledkem toho jsou schody konstantního napětí na VACH. V závislosti na fázovém rozdílu  $\phi_0$  mezi Josephsonovým a mikrovlnným zářením je stejnosměrný supravodivý proud

$$I_{\rm n} = I_{\rm c} J_{\rm n} \left(\frac{2eV_{\rm rf}}{\hbar\omega_{\rm rf}}\right) \sin\phi_0 \qquad (16.59)$$

přidán nebo ubrán ke kvazičásticovému proudu. Na kladné části proudového schodu, kde je proud větší než bez záření, dochází k tunelování Cooperových párů s emisí fotonů. Na záporné části dochází k tunelování s absorpcí fotonů z vysokofrekvenčního pole.

V jazyce kvantové mechaniky to znamená, že při interakci oscilujícího proudu s elektromagnetickým polem může dojít k reálným procesům, které zachovávají energii emisí nebo absorpcí fotonů. V tomto případě je záření koherentní, každý foton pochází ze stejného procesu. Když na bariéru dopadá záření, energie může být absorbována nebo vyzářena, to závisí na relativní fázi záření a oscilaci proudu. Absorpce i emise mohou být vícefotonové. Přechod napájený mikrovlnným polem je tak ideálním napěťovým zdrojem s nulovou vnitřní impedancí a teče jím stejnosměrný supravodivý proud.

Schody na VACH přechodu ozářeného mikrovlnami poprvé pozoroval Shapiro [21]. Protože napětí závisí pouze na kmitočtu vnějšího záření a v poměrně širokých mezích nezávisí na napájecím proudu, tento jev se využívá v Josephsonově standardu stejnosměrného elektrického napětí. Přesnost těchto normálů závisí jen na stabilitě kmitočtu mikrovlnného záření.

1	9	) (	٦
4	•	5.	1
	~		

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup>Jacobiho Angerova identita:  $e^{iz\cos\phi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(z) e^{in\phi}$ 



Obr. 16.9: Vlevo: Supravodivý interferometr - prstenec se dvěma paralelně zapojenými Josephsonovými přechody. Vpravo: Makroskopická kvantová interference maximální supravodivý proud, který může interferometrem téci, je periodickou funkce magnetického toku v prstenci speriodou  $\Phi_0$ , tedy periodickou funkcí vnějšího magnetického pole.

#### 16.4 Makroskopická kvantová interference

Jaklevic, Lambe, Silver a Mercereau jako první v roce 1964 pozorovali kvantovou interferenci v supravodivém interferometru, který tvoří prstenec o indukčnosti L se dvěma paralelně zapojenými Josephsonovými přechody (obr. 16.9) [22]. Když měnili vnější magnetické pole, zjistili, že maximální supravodivý proud tekoucí interferometrem osciluje s periodou kvanta magnetického toku  $\Phi_0$ . Tyto oscilace jsou důsledkem interference makroskopických vlnových funkcí v přechodech.

Předpokládejme, že oba přechody jsou stejné (mají stejný kritický proud) a že stínící proudy, jejichž velikost je omezená kritickým proudem, jsou pro  $LI_c \ll \Phi_0$  malé. Levým přechodem teče proud  $I_{\rm L} = I_{\rm c} \sin \phi_{\rm L}$  a pravým přechodem proud  $I_{\rm P} = I_{\rm c} \sin \phi_{\rm P}$ . Rozdíly fází  $\phi_{\rm L}$  a  $\phi_{\rm P}$  na obou přechodech jsou na sobě závislé, protože při oběhu po obvodu prstence tvořícího interferometr musí být fáze jednoznačná. Jsou-li délky obou přechodů zanedbatelné vzhledem k obvodu prstence, je

$$\phi_{\rm L} + \phi_{\rm P} + 2\pi\Phi/\Phi_0 = 2\pi n , \qquad (16.60)$$

kde  $\Phi = \int \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \int \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S}$  je magnetický tok v prstenci. Pro jednoduchost můžeme vzít n = 0. Vezmeme-li v úvahu orientaci rozdílu fází, je proud interferometrem (oběma paralelně zapojenými přechody)

$$I = I_{\rm c} \left[ \sin \phi_{\rm L} + \sin \left( \phi_{\rm L} + 2\pi \Phi / \Phi_0 \right) \right] \,. \tag{16.61}$$

Použitím goniometrického vztahu<sup>7</sup> dostaneme

$$I = 2I_{\rm c} \cos \frac{\pi \Phi}{\Phi_0} \sin \phi_{\rm L} . \qquad (16.62)$$

 $^{7}\sin\left(\alpha\pm\beta\right) = \sin\alpha\cos\beta\pm\cos\alpha\sin\beta, \,\sin\alpha+\sin\beta = 2\sin\frac{\alpha+\beta}{2}\cos\frac{\alpha-\beta}{2}.$ 



Obr. 16.10: Vlevo: Schema interferometru se supratekutým heliem. Zařízení je naplněné supratekutým <sup>4</sup>He a potopené v lázni kapalného helia. Odporové topení (R) je zdrojem tepla a měděná destička (S) je norou, do které teplo teče. Křížky označují umístění sít, které tvoří matice  $100 \times 100$  30 nm otvorů v 60 nm tlustém okénku z SiN, vzdálených od sebe 3  $\mu$ m. Pružná membrána (D) a elektroda (E) tvoří elektrostatickou tlakovou pumpu. Membrána zároveň slouží jako citlivý mikrofon. Vpravo: Závislost amplitudy oscilací interferenčního proudu na výkonu topení (R).

Maximální supravodivý proud, který může interferometrem téci,

$$I_{\max}(\Phi) = 2I_{c} \left| \cos \left( \pi \Phi / \Phi_{0} \right) \right| , \qquad (16.63)$$

je závislý na vnějším magnetickém toku a je jeho  $\Phi_0$  periodickou funkcí (obr. 16.9).

Tento jev můžeme využít k měření magnetického pole. Při vnitřní ploše prstence  $1 \text{ mm}^2$  jednomu kvantu toku odpovídá změna magnetické indukce o  $\delta B = \Phi_0/S \approx 2 \text{ nT}$ , což je hodnota miliónkrát menší než změna magnetické indukce, která odpovídá jednomu kvantu v přechodu, viz. "*Vliv statického magnetického pole na přechod*". Když stínící proudy nejsou zanedbatelné, tj. když  $LI_c > \Phi_0/2$ , je modulace maximálního proudu menší a neklesá k nule. Totéž se stane, když oba přechody nejsou stejné.

Analogický jev je možné pozorovat i v supratekutém heliu. V popisu vlastností supratekutého <sup>4</sup>He se prolíná Landauovo pojetí dvousložkové kapaliny a Londonovo pojetí kondenzátu v mnohačásticovém systému, popsaného makroskopickou vlnovou funkcí  $\Psi = |\Psi| e^{i\varphi}$ . Dvousložková kapalina má supratekutou složku s nulovou entropií o hustotě  $\rho_{\rm s}$ , tekoucí rychlostí  $v_{\rm s}$ , a normální složku o hustotě  $\rho_{\rm n}$ , pohybující se rychlostí  $v_{\rm n}$ , a entropií, která nese celou entropii kapaliny. Spojení mezi oběma pojetími představuje vztah

$$v_{\rm s} = (\hbar/m_4) \, \nabla \varphi \;.$$
 (16.64)

4	4	-1
4	4	
т	т	-

Platnost tohoto vztahu potvrdili pomocí "supratekutého heliového kvantového interferometru" (SHeQUID), jehož schéma je na obr. 16.10, Sato, Joshi a Packard [23]. Teplo vytvořené v odporovém topení (R) je od něho neseno normální složkou do nory (S) rychlostí  $v_n$ . Podle dvousložkové teorie je  $v_s \rho_s + v_n \rho_n = 0$  a tedy aby celkový tok hmotnosti byl roven nule, k topení musí naopak téci supratekutá složka. Rychlost supratekuté složky je  $|v_s| = (\rho_n / \rho_s T s \sigma) \dot{Q}$ , kde T je teplota,  $\rho$  je celková hustota, s je měrná entropie,  $\sigma$  je vnitřní průřez horní trubice a  $\dot{Q}$  je výkon topení. Gradient fáze v horní trubici je

$$\nabla \varphi = \frac{m_4}{\hbar} \frac{\rho_{\rm n}}{\rho \rho_{\rm s} T S \sigma} \dot{Q} . \qquad (16.65)$$

Při teplotě mnohem nižší, než je teplota přechodu do supratekutého stavu  $T_{\lambda} \approx 2,17$ K, je závislost proudu otvory v sítě na fázi lineární s diskrétními  $2\pi$  fázovými skluzy. Při teplotě blízko  $T_{\lambda}$  je závislost sinusoidální, jak ji popisuje stejnosměrný Josephsonův jev. Rozdíl teplot a tlaků vytvoří na otvorech rozdíl chemických potenciálů  $\delta\mu$ . Na každém sítě pak hmotový proud osciluje s kmitočtem  $\nu_{\rm J} = \delta\mu/h$ , který je detekován mikrofonem (D). V popisovaném experimentu byly oscilace udržovány v okolí kmitočtu 700 Hz. Oscilace z obou zdrojů spolu interferují a výsledná amplituda interferenčního proudu je

$$I \propto |\cos(\phi/2)| , \qquad (16.66)$$

kde  $\phi$  je rozdíl fází obou proudů (platí jak v režimu slabé tak silné vazby). Když interferometrem (smyčkou) neteče proud, je  $\oint \nabla \phi \cdot d\mathbf{l} = 0$ . Při dostatečně malé rychlosti, kdy ještě nevznikají kvantové víry, tato podmínka platí, i když tepelný tok  $\dot{Q}$  v horní trubici indukuje proud o rychlosti  $v_{\rm s}$ . Pak platí  $\phi_{\rm Q} + \phi = 0$ , kde  $\phi_{\rm Q} = \nabla \varphi l \propto \dot{Q}$ , a amplituda oscilací proudu je

$$I \propto |\cos(\phi_{\rm Q}/2)| . \tag{16.67}$$

Analýza experimentálních dat dává poměr $v_{\rm s}/\nabla\varphi\approx9,1\times10^{-8}~{\rm m^2/s},$ který je blízký poměru  $h/m_4=9,97\times10^{-8}~{\rm m^2/s},$ a potvrzuje tak vztah (16.64).

#### 16.5 Supravodivá smyčka s jedním přechodem

Pro parametr uspořádání v supravodivém prstenci přerušeném přechodem existuje řada řešení, která se liší o násobek  $2\pi$ . Řešení s velkou energií, to je s velkým stínícím proudem, jsou metastabilní. Skok z jednoho stavu do druhého je spojený s překonáním vazebné energie.

Supravodivý proud, který stíní vnější magnetický tok v prstenci o indukčnosti L s jedním Josephsonovým přechodem, se řídí rovnicí pro stejnosměrný Josephsonův jev. Můžeme-li zanedbat rozměry přechodu vzhledem k vnitřní ploše prstence, je závislost toku  $\Phi$  v prstenci na vnějším toku  $\Phi_{\rm a}$ 

$$\Phi = \Phi_{\rm a} - LI_{\rm c} \sin \left( 2\pi \Phi / \Phi_0 \right) \ . \tag{16.68}$$

Závislost vnitřního toku na vnějším  $\Phi(\Phi_{\rm a})$  má tvar "hadovité" křivky (obr. 16.11). Pro parametr vazby  $\beta \equiv 2\pi L I_{\rm c}/\Phi_0 < 1$  je závislost jednoznačná a bezhysterezní. Pro  $\beta > 1$  je závislost  $\Phi(\Phi_{\rm a})$  nejednoznačná a hysterezní. Stavy se zápornou derivací  $d\Phi/d\Phi_{\rm a} < 0$  jsou nestabilní a závislost  $\Phi(\Phi_{\rm a})$  je nespojitá. Když vnější tok monotónně roste nebo klesá, dochází k přechodům mezi jednotlivými metastabilními stavy vnitřního magnetického toku (obr. 16.11). Integrací rovnice (16.68) podle  $\Phi$  dostaneme závislost volné energie prstence s přechodem na vnějším magnetickém toku

$$E\left(\Phi_{\rm a} - \Phi\right) = \frac{\left(\Phi_{\rm a} - \Phi\right)^2}{2L} - \frac{I_{\rm c}\Phi_0}{2\pi}\cos\left(2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right) + E_0 , \qquad (16.69)$$

kde  $E_0$  je integrační konstanta, kterou zvolíme tak, aby volná energie byla rovna nule v bodě, v němž dojde k přechodu do stavu s menší energií, to je

$$E_0 = -\frac{\left(\Phi_0/2\pi\right)^2}{2L} \left(1 + \beta^2\right).$$
 (16.70)

Závislost volné energie na vnějším toku  $\Phi_a$  je na obr. 16.11 vpravo. Při přechodu do stavu s menší energií se v Josephsonově přechodu rozptýlí energie

$$E \approx \frac{\Phi_0^2}{2L} \left(\frac{\beta}{\pi} - 1\right) = \Phi_0 I_c - \frac{\Phi_0^2}{2L},$$
(16.71)

která je pro typické hodnoty  $L \approx 1$  nH,  $I_c \approx 1 \mu A$  a  $\beta \approx 2\pi$ řádově  $10^{-21}$  J. Protože jednomu kvantu odpovídá tok  $\Phi_0 \approx 2$  fV s, při přeskoku, který trvá  $\tau = L/R_N \approx 1$  ns, vnikne na přechodu pulz napětí o velikosti řádově  $\mu V$ .

#### 16.6 Vybrané fyzikální vlastnosti malých kontaktů supravodičů a normálních kovů

Abychom mohli v dalším přejít k praktickým aplikacím Josephsonových jevů, především ke skvidům, musíme definovat a popsat některé obecné vlastnosti zejména malých (co to znamená vyplyne z textu) elektronických prvků a kontaktů.

### 16.6.1 Proud rozhraním normálního kovu a supravodiče (Andreevův odraz)

Andreevův odraz (AR z angl. Andreev reflection) popisuje, jak je na rozhraní normálního vodiče a supravodiče (SN přechod, z angl. superconducting-normal juction) transformován normální proud na supravodivý [24]. Protože jednočásticový proud je v supravodiči zakázaný, je nahrazen dvoučásticovým: elektron (díra) dopadající z normálního kovu, který má vzhledem k Fermiho energii energii menší než supravodivá energetická mezera (angl. gap), na rozhraní vytvoří CP a zpět je odražena díra (elektron), která má opačný spin vzhledem k dopadající částici.

Tento proces silně závisí na spinu částice. Když je v normálním materiálu vodivostními elektrony obsazen jenom jeden spinový pás a materiál je tedy úplně spinově polarizován, bude Andreevův odraz úplně potlačen, protože se v supravodiči



Obr. 16.11: Magnetický tok v prstenci (vlevo) a energie magnetického toku v prstenci (vpravo) jako funkce vnějšího magnetického toku (pole) pro různé hodnoty parametru  $\beta$ . Závislosti jsou jednoznačné pro  $\beta \leq 1$  a víceznačné s hysterezí a skokovým rozptýlením energie pro  $\beta > 1$ .

nemůže vytvořit pár a jedno<br/>elektronový přenos je přitom zakázaný. Ve feromagnetu nebo v materiálu, ve kterém existuje nebo může být vnějším magnetickým polem indukována spinová polarizace, je účinnost Andreevova odrazu (a tedy vodivosti přechodu) závislá na polarizace spinů v normálním stavu. Toho se využívá při měření spinově polarizovaných proudů nebo charakterizaci spinově polarizovaných vrstev nebo objemových vzorků a vlivu magnetického pole na jejich vlastnosti. Při<br/>AR je rozdíl fází mezi elektronem a dírou  $-\pi/2$  plus fáze parametru uspořádání v supravodivém stavu.

S AR se ještě setkáme v kapitole o kvantové turbulenci, kdy slouží jako účinná metoda detekce kvantovaných vírů v supratekuté fázi $^3\mathrm{He-B.}$ 

#### 16.7 Tepelný šum

Tepelný šum libovolného elektronického prvku má původ v tepelných fluktu<br/>acích. Elektrony, které jsou v normálním vodiči s nenulovým elektrickým odporem v tepelné rovnováze s kmity krystalové mřížky i<br/>ontů, vykonávají náhodný Brownův pohyb stimulovaný fonony a jejich hustota fluktu<br/>uje. Výkon šumového napětí na vývodech odporuRv<br/> kmitočtovém pásmu širokém  $\Delta\nu$ je dán energií fononů, jejich<br/>ž rozdělení je určeno Boseovou – Einsteinovou rozdělovací funkcí a nulovými kmity,

$$\frac{\overline{V^2}}{2R}\frac{1}{\Delta\nu} = h\nu \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{e^{h\nu/k_{\rm B}T} - 1}\right) .$$
(16.72)

Při nízkých kmitočtech,  $h\nu \ll k_{\rm B}T$ , je výkon úměrný  $k_{\rm B}T$ . Tomuto bílému šumu (z angl. *white noise*), který je nezávislý na kmitočtu, se říká Johnsonův nebo Nyquistův šum po jeho objevitelích, kteří jej nezávisle na sobě pozorovali v roce

1928 [25, 26]. Protože napětí je dáno reálnou složkou kmitočtového spektra signálu a spektrum je symetrické vzhledem ke kladným a záporným kmitočtům, je spektrální hustota výkonu šumového napětí dvojnásobná,  $S_{V^2} = 4k_BTR$ . Spektrální hustota výkonu napětí má rozměr V<sup>2</sup> Hz<sup>-1</sup>. Tato veličina charakterizuje šum prvku nezávisle na tom, jak dlouho měření trvá. Změřený výkon šumového napětí totiž závisí na tom, jak dlouho měření středujeme, to je na šířce pásma. Odmocnina ze spektrální hustoty výkonu šumového napětí je spektrální hustota šumového napětí  $S_V = \sqrt{S_{V^2}}$ , která má rozměr V Hz<sup>-1/2</sup>. Odmocnina ze střední kvadratické hodnoty (rms je zkratka z angl. root mean square) šumového napětí je  $V_{\rm rms} = (S_{V^2}\Delta\nu)^{1/2} = (4k_BTR\Delta\nu)^{1/2}$ . Je daná jenom teplotou T, velikostí odporu R a šířkou kmitočtového pásma  $\Delta\nu$ . Na odporu 1 k $\Omega$  při teplotě 300 K a šířce pásma 1 Hz naměříme střídavé napětí 4 nV. Podobně můžeme zavést spektrální hustotu výkonu šumového proudu  $S_{I^2} = 4k_BTG$ . Šumový proud je  $I_{\rm rms} = (4k_BTG\Delta\nu)^{1/2}$ . Ideální indukčnost nebo kondenzátor (kapacita) mají šumovou energii

$$\frac{1}{2}L\overline{I^2} = \frac{1}{2}\frac{\overline{\Phi^2}}{L} = \frac{1}{2}k_{\rm B}T ; \qquad \frac{1}{2}C\overline{V^2} = \frac{1}{2}\frac{\overline{Q^2}}{C} = \frac{1}{2}k_{\rm B}T , \qquad (16.73)$$

protože mají jenom jeden stupeň volnosti. Spektrální hustota šumu magnetického toku v cívce je  $S_{\Phi} = (4k_{\rm B}TL)^{1/2}$  a má rozměr Wb Hz<sup>-1/2</sup>. Spektrální hustota šumu náboje na kondenzátoru je  $S_{\rm Q} = (4k_{\rm B}TC)^{1/2}$  a má rozměr Coulomb Hz<sup>-1/2</sup>.

Kromě bílého šumu se prakticky všude v přírodě vyskytuje 1/f šum, jehož spektrální hustota výkonu roste nepřímo úměrně s kmitočtem. Jeho původ není dodnes dobře objasněn. Kmitočtu, pod kterým má šum 1/f charakter a nad kterým má již charakter bílého šumu běžně říkáme koleno 1/f šumu.

#### 16.8 Malé přechody a Coulombická blokáda

Tunelový přechod s dielektrickou bariérou mezi dvěma elektrodami v normálním stavu (NIN – z angl. Normal-Insulating-Normal junction) má odpor nezávislý na napětí a proudu, chová se jako ohmický odpor. Odpor tunelového přechodu roste exponenciálně s tloušťkou bariéry. Kondenzátor, který NIN struktura tvoří, je nabíjen elektrickým nábojem tunelujícího elektronu a je na něm napětí V = e/C. Když je kapacita kondenzátoru malá, napětí může být tak velké, že brání dalším elektronům v tunelování. Elektrický proud je pak potlačen a odpor vzroste. Nárůstu diferenciálního odporu při nulovém napětí se říká Coulombická blokáda. S tímto jevem se podrobně seznámíme v poslední kapitole. Podobné jevy můžeme pozorovat ve velmi malých strukturách, tvořených například supravodivými zrníčky spojenými s rezervoárem náboje přes Josephsonovy přechody s malou kapacitou a velkým tunelovým odporem. To je možné za podmínky, že: i) Coulombická nabíjecí energie  $E_{\rm C} = e^2/2C$  je větší než tepelná energie  $k_{\rm B}T$ . Při teplotě 1 K tomu odpovídá kapacita  $C \leq 1$  fF.<sup>8</sup> ii) Tunelový odpor R je dostatečně velký, aby omezil vystředování kvantových fluktuací v počtu částic.

 $<sup>^8</sup>$ Kapacitu 1 f<br/>F má například kondenzátor, jehož elektrody mají ploch<br/>u $100\times100~{\rm nm}^2$ a tloušťka dielektrické vrstvy, jejíž dielektrická konstanta j<br/>e $\epsilon=10,$  je1nm.

Nabíjecí energie  $e^2/2C$  musí být větší než  $\hbar/\tau \approx \hbar/RC$ , která určuje dobou života náboje na kondenzátoru. Z podmínky  $e^2/2C = \hbar/RC$  dostaneme, že odpor musí být  $R > 0, 5R_Q$ , kde  $R_Q = h/e^2 \approx 25,8128 \text{ k}\Omega$  je kvantový odpor.

Celková energie malého přechodu je dána

$$E = Q^2/2C + E_{\rm J} \left(1 - \cos\phi\right) - \frac{\hbar I}{2e}\phi , \qquad (16.74)$$

kde první člen je Coulombická energie, druhý je Josephsonova energie a třetí je práce vykonaná vnějším proudem. NábojQdostaneme působením operátoru náboje

$$\hat{Q} = -2ie\frac{\partial}{\partial\varphi} + q(t) \tag{16.75}$$

na vlnovou funkci, to je na parametr uspořádání. q(t) je kontinuální náboj dodávaný proudovým zdrojem. Operátor náboje je až na 2e totožný s operátorem počtu částic.

## 16.9 Vybrané aplikace Josephsonových jevů16.9.1 Technologie přípravy Josephsonových přechodů



Obr. 16.12: Typy Josephsonových přechodů: a) s izolační bariérou (SIS), b) s normální bariérou (SNS), c) zůžený můstek, d) hrotový kontakt, e) na základě jevu blízkosti, f) tunelový, g) "hrana schodu (*step* edge)", h) "na hranici zrn (*grain* boundary)".

Josephsonův přechod lze zhotovit různým způsobem a technologií. Některé z nich jsou znázorněny na obr. 16.12. Jedním z průkopníků aplikací slabé supravodivosti byla v sedmdesátých letech firma IBM, která používala tenkovrstvovou technologii se slitinou Pb s 10% Au nebo In. Vrstvy z čistého Pb jsou však při tepelném cyklování mechanicky nestabilní a rozpadají se a problémy se stárnutím obvodů, hlavně vlivem difúze Pb a In, vedly k zastavení programu. Dnes je nejpoužívanějším konvenčním supravodičem pro výrobu Josephsonových přechodů Nb. Japonci pracovali na Nb technologii, která je náročnější, protože Nb je těžko tavitelný kov s teplotu tání 2468°C. Obvody z Nb ale nestárnou a jsou odolné proti vlhkosti a tepelným cyklům.

Donedávna se vyráběly hlavně SIS přechody typu Nb/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Nb s typickou plochou 18×30  $\mu$ m<sup>2</sup>, použitím litografických zařízení s větším rozlišením se dnes vyrábějí SNS přechody typu Nb/PbAu/Nb s plochou 2×2  $\mu$ m<sup>2</sup>. Tloušťka PbAu vrstvy je 30 až 40 nm, což umožňuje dosáhnout větší homogenitu proudu přechodem než s Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> vrstvami tlustými jenom několik nm. I při velkých hustotách kritického proudu SNS přechodů, které jsou 2 až 4 mA  $\mu$ m<sup>-2</sup>, je kritický proud přechodem o ploše 1 až 4  $\mu$ m<sup>-2</sup> kolem 10 mA. Normální

(kvazičásticový) odpor takového přechodu je  $R_{\rm N} \approx 3~{\rm m}\Omega$  a není třeba paralelní odpor k jeho zatlumení.

Typickou technologii výroby SIS přechodů představuje třívrstvá struktura, tvořená vrstvami Nb/Al-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Nb. Zhruba 100 až 250 nm tlustá Nb vrstva je připravena magnetronovým naprašováním na 200 až 400 nm tlusté SiO<sub>2</sub> vrstvě, která naroste termální oxidací Si podložky, plátku běžně používaného v polovodičovém průmyslu, v kyslíkové atmosféře. Na Nb vrstvu se pak napráší zhruba 5 nm tlustá vrstva Al nebo Mg, který se termálně oxiduje v kyslíkové atmosféře. Pak se napráší horní Nb vrstva. Tunelové SIS přechody s dielektrickou vrstvou z Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nebo MgO<sub>2</sub> mají lepší vlastnosti než s dielektrikem z oxidů Nb, jejichž růst se hůře kontroluje a mají hrubší povrch. Kritická proudová hustota  $I_c$  přechodů je obyčejně 0,3 až 45 mA  $\mu$ m<sup>-2</sup>. U integrovaných struktur je rozptyl parametrů, kritického proudu  $I_c$  a odporu v normálním stavu  $R_N$ , na čipu 2-5% [27]. Tunelové přechody z MgO<sub>2</sub> mají velký odpor a velký McCumberův parametr  $\beta_c$ . Aby jejich VACH nebyly hysterezní, zapojují se paralelně s nimi odpory o velikosti okolo 1  $\Omega$ , které jsou zhotoveny litograficky z naprášené Cr nebo MoN<sub>x</sub> vrstvy.

V čipech pro Josephsonovy standardy napětí se často používají složitější přechody typu SINIS (z angl. Superconducting - Insulating - Normal - Insulating - Superconducting junction). Například v obvodech vyrobených v PTB [28] tvoří bariéru tři Al vrstvy, tlusté 8 nm, oddělené dvěma AlO<sub>x</sub> vrstvami, narostlými termální oxidací v kyslíku. Struktura je na sendviči vytvořena reaktivním leptáním Nb ionty CF<sub>4</sub> a mokrým leptáním Al-AlO<sub>x</sub> vrstev. Vzniklé hrany jsou elektricky izolovány anodickou oxidací a 200 nm tlustou vrstvou SiO<sub>2</sub>. Propojovací Nb vrstva má tloušťku 350 nm. Mikrovlnné páskové vedení je vytvořené pokrytím 2,5 µm tlusté SiO<sub>2</sub> dielektrické vrstvy 250 nm tlustou Nb vrstvou. Všechny kovové vrstvy jsou naprášeny stejnosměrným magnetronem, SiO<sub>2</sub> střídavým magnetronem. Plocha přechodu je 8×50 µm<sup>2</sup>, jsou přetlumené a mají kritickou proudovou hustotu 1,5 mA µm<sup>-2</sup>.

Zatímco pro chlazení obvodů vyrobených Nb technologií je potřeba kapalné helium, obvody vyrobené z vysokoteplotních supravodičů (VTS) pracují i v kapalném dusíku. Specifické vlasnosti vysokoteplotních supravodičů, jako je malá koherenční délka, silná anizotropie a citlivost na stechiometrii kyslíku, neumožňují vytvořit struktury technologií používanou pro nízkoteplotní supravodiče (LTS), která využívá dielektrické vrstvy, jejichž tloušťka je srovnatelná s koherenční délkou. Koherenční délka v Nb je  $\xi = 38$  nm a jeho  $T_c$  je 9,25 K, v NbN je  $\xi = 5$  nm a jeho  $T_{\rm c}$  je 16 K. Vysokoteplotní supravodiče (kupráty) mají supravodivé CuO<sub>2</sub> vrstvy, ležící v ab rovině, které jsou ve směru os<br/>ycoddělené málo vodivými vrstvami. V YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+x</sub> (YBCO) je  $\xi_{ab} \approx 1,6$  nm a  $\xi_c \approx 0,3$  nm. Kvalita povrchů VTS by měla být o řád až dva lepší než u LTS, tedy s atomově hladkými povrchy. Vazba mezi  $CuO_2$  vrstvami je slabá a tak v podstatě vznikají ve směru osy c na sebe naskládané Josephsonovy přechody. Na rozdíl od kovů a slitin tenké vrstvy z vysokoteplotních supravodičů potřebují epitaxní růst. Nejlepší výsledky se dosahují nanášením z par kovoorganických sloučenin (MOCVD - angl. Metal Organic Chemical Vapor Deposition) a pulzní laserovou depozicí. Tenké vrstvy nejpoužívanějšího materiálu YBCO se připravují většinou na podložkách SrTiO<sub>3</sub>, LaAlO<sub>3</sub> nebo MgO.

Protože SrTiO<sub>3</sub> má mřížkovou konstantu, která se od YBCO liší jenom o několik procent, epitaxní vrstvy mají velkou kritickou proudovou hustotu, řádově 10 GA m<sup>-2</sup>. Vrstvy rostou orientované krystalografickou osou c kolmo na povrch podložky.

Josephsonovy přechody ve VTS jsou typu GBJ (z angl. Grain Boundary Junction) nebo RTJ (z angl. Ramp Type Junction či step edge junction). GBJ technologie vyžaduje speciální podložky, které jsou drahé. Přechody jsou v ab rovině na hranicích zrn bi- nebo tri-krystalických podložek, většinou z SrTiO<sub>3</sub> [29]. Využívá se toho, že na rozhraní zrn, která mají rozorientované ab roviny, kritický proud závisí na rozorientaci. Pro úhly 45° a 135° je potlačen nejvíce. Na druhé straně, RTJ technologie vyžaduje vícevrstvou depozici. Pozvolnější RTJ přechody mají obyčejně tenkou vrstvu z oxidů polovodičů. Strmější přechody na okraji vrstvy (angl. step edge) mají mezivrstvu z drahého kovu, většinou Au a normální odpor  $R_{\rm N}$  o více než o řád vyšší, než je odpor normálních kovů [27]. Při teplotě 4,2 K mají kritickou proudovou hustotu 0,1 až 1 m<br/>A $\mu {\rm m}^{-2}$ a součin $R_{\rm N} I_{\rm c}$   $\approx$  0.5 až 2 mV, to je vysoký kritický kmitočet  $\nu_{\rm c} = (2e/h)I_{\rm c}R_{\rm N} \approx 1$  THz. VACH přechodů jsou bezhysterezní a velmi blízké RSJ modelu. I při teplotě 4,2 K jsou lepší než VACH LTS přechodů. Problémem je ale reprodukovatelnost přechodů, nejlepší je na bikrystalických SrTiO<sub>3</sub> podložkách, které ale mají velkou dielektrickou konstantu,  $\epsilon > 10^3$ , a proto nejsou vhodné pro vysoké kmitočty. Tradičním materiálem pro mikrovlnnou elektroniku je safír (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), který má  $\epsilon = 9 - 11$  a malé ztráty (tan  $\delta \approx 10^{-8}$ na 72 GHz). Na safírové podložce ale musí být nejprve rf magnetronem naprášena epitaxní bufferová vrstva CeO<sub>2</sub>, která brání difúzi Al z podložky do YBCO vrstvy.

#### 16.9.2 Josephsonův standard napětí

Schody konstantního napětí, které vzniknou na Josephsonově přechodu ozářeném elektromagnetickým zářením o kmitočtu  $\nu$ , jsou od sebe vzdáleny o napětí  $V = h\nu/2e$ . Poměru kmitočtu a napětí se říká Josephsonova konstanta, která je definována  $K_{\rm J-90} \equiv 483,5979$  THz/V. Převrácená hodnota tohoto poměru je přibližně 2,07 fV s. Pro praktické účely by napětí mělo být co největší. Na druhé straně jsme ale omezeni stabilními zdroji záření. Jednoduše lze generovat kmitočty řádově desítky GHz (mm vlnová délka záření ve vakuu). Obyčejně se používá záření s kmitočtem 70 - 80 GHz, jehož zdrojem je oscilátor s Gunnovou diodou, fázově zavěšený na cesiový standard kmitočtu.<sup>9</sup> Při tomto kmitočtu jsou schody od sebe vzdálené  $\approx 140 \ \mu$ V. Abychom dostali v praxi používané napětí 1 nebo 10 V, musí být tisíce přechodů zapojeny v sérii. Tyto přechody jsou integrované na jednom čipu i s vlnovodem, který slouží k jejich homogennímu ozáření. Technologickým problémem je udržet přechody v koherentním (synchronním) režimu, jinak by jejich chování bylo chaotické. Čip pro 10 V standard stejnosměrného napětí je na obr. 16.13 [31].

 $<sup>^9</sup>$ Cesiový standard je primární standard kmitočtu, ve kterém jsou elektronové přechody mezi dvěma hyperjemnými základními stavy atomů  $^{133}$ Ce použity k řízení výstupního kmitočtu. Podle definice SI sekundy, přechod mezi dvěma hyperjemnými základními stavy odpovídá (při vyloučení vnějších vlivů jako je magnetické pole Země, atd.) přesně kmitočtu 9 192 631 770 Hz. V současnosti jsou nejlepší atomové standardy kmitočtu (hodiny) založeny na absorpční spektroskopii studených atomů v atomových zdrojích. Národní úřady pro standardy udržují přesnost těchto zdrojů na úrovni  $10^{-9}$  sekundy za den, to je s relativní stabilitou  $10^{-14}$ .



Obr. 16.13: Čip o rozměrec<br/>h $25\times11~{\rm mm^2}$ s 13 920 Josephsonovými přechody pro napětí 10 V [31].

V Evropě čipy pro Josephsonův standard napětí vyvíjel či vyvíjí PTB [28]. Na základě tohoto vývoje čipy vyrábí plně Nb technologií IPHT [30] a dnes je celý standard komerčně dostupný [31, 32]. Čipy jsou zkoušeny, proměřeny a dostávají osvědčení od PTB. Jako zdroj kmitočtu je použit rubidiový standard se stabilitou  $\pm 5 \times 10^{-11}$  za měsíc a  $\pm 5 \times 10^{-9}$  za rok při 25°C nebo GPS reference se stabilitou  $\pm 1 \times 10^{-12}$  za 24 hod. Vzájemné srovnání dvou 10 V standardů ukazuje, že jejich přesnost je ±4 nV, což znamená relativní přesnost  $\Delta V/V_{10V} = 4 \times 10^{-10}$ .

V USA čipy s SNS přechody s normální vodivou bariérou z AuPd slitiny vyvíjel či vyvíjí NIST [33] a dnes jsou 1 V i 10 V standard komerčně dostupné [34].

Srovnání parametrů standardů, které slouží v národních metrologických ústavech pro kalibraci sekundárních standardů napětí a kalibraci linearity a přesnosti stejnosměrných voltmetrů v rozsahu napětí 0 až  $\pm 10$  V, je v tabulce 16.2. Kompletní zařízení jsou chlazená kapalným heliem nebo refrigerátorem s uzavřeným cyklem.

#### 16.9.3 Přijímače sub-mm záření

Spektrum elektromagnetického záření v pásmu stovek GHz až jednotek THz je technicky složité jak přijímat tak generovat<sup>10</sup>. Protože v tomto pásmu kmitočtů leží rotační spektra molekul<sup>11</sup>, příjem záření umožňuje molekulární spektroskopii, což jinými slovy znamená chemickou analýzu "na dálku". Příjmem záření z vesmíru pozemskými radioteleskopy umožňuje astrochemii a radioteleskopy na družicích umožňují výzkum vesmíru nebo horních vrstev atmosféry Země.

10.9

 $<sup>^{10}{\</sup>rm Z}$ áření o kmitočtu 1 THz má ve vakuu vlnovou délku 0,3 mm, energii 4,14 meV a teplotu 48 K.

 $<sup>^{11}\</sup>mathrm{Například}$ molekula CO má rotační přechody v pásmu kmitočtů od 345 do 850 GHz.

Tabuľka 16.2: Parametry čipů pro Josephsonův standard napětí.

výrobce	Supracon	PREMA		HYPRES	
výstupní napětí	10 V	10 V	1 V	10 V	1 V
rozměry čipu $(mm^2)$		$25 \times 11$	$19 \times 11$		
počet přechodů	19700	13920	2400	20208	3660
plocha přechodu $(\mu m^2)$		$8{\times}50$	$8{\times}50$	$18{\times}38$	$18 \times 38$
rozsah napětí $(V)$		$\pm 11$	$\pm 2,5$	$\pm 11$	$_{\pm 2,5}$
pracovní kmitočet (GHz)		70 - 75	70-75	72-78	72-78
výstupní impedance $(\Omega)$		< 3	< 3	< 1	< 1
stabilita (ppm)	0,01			0,005	$0,\!05$

Současné přijímače pro kmitočty pod 1 THz se stavějí jako heterodynní<sup>12</sup>, ke směšování využívají nelineární kvazičásticovou VACH SIS přechodů (obr. 16.6) nebo Schottkyho diod. Bolometry s horkými elektrony typu HEB (z angl. *Hot Electron Bolometer*) se používají pro kmitočty nad 1 THz. SIS směšovače a HEB jsou z nízkoteplotních supravodičů, což omezuje pracovní teploty pod 10 K. SIS směšovače mohou teoreticky pracovat až do kmitočtu  $\nu = 2\Delta/h \approx 3.5k_{\rm B}T_{\rm c}/h$ , což je v případě Nb do 7 THz (kritická teplota Nb je 9,25 K) [35, 36] a v případě NbN do 12 THz (kritická teplota NbN je 16 K). Schottkyho diody pracují nad 20 K, ale jejich šumová teplota roste s kmitočtem a potřebují větší výkon místního oscilátoru, několik mW, který nad 600 GHz není jednoduché získat.

Přijímače se SIS směšovači jsou dnes na několika pozemních observatořích. Často je několik radioteleskopů zapojeno interferometricky, například: IRAM (řada šesti antén o průměru 15 m) na Plateau de Bure ve Francouzských Alpách [37], "Millimeter array" (USA) tvoří 40 teleskopických antén o průměru 8 m s rozlišením 1 úhlové sekundy (podobně jako u Hubblova teleskopu) na 115 GHz [34], "Large millimeter array" (Japonsko) tvoří 30 teleskopických antén o průměru 10 m, dále "Australia Telescope" (Austrálie), "Bordeaux Observatory" (Francie) a "South Pole" (University of California, Santa Barbara, USA), který umožňuje velmi přesná měření záření, které vniklo po velkém třesku.

Další přijímače jsou nebo budou na družicích: Herschlerova kosmická labolatoř<sup>13</sup>, která bude umístěna v druhém Lagrangeově bodu soustavy Země-Slunce, bude největší infračervenou laboratoří [38]. Bude zkoumat koloběh formování a vývoje plynných a prašných hvězdných mračen. S 3,5 metrovým zrcadlovým teleskopem a přístroji chlazenými <sup>4</sup>He umožní sledovat kosmické záření na vlnových délkách, které zatím nebylo možné přijímat. Při startu bylo v jejím kryostatu 2000 litrů supratekutého <sup>4</sup>He o teplotě 1,7 K, které by mělo stačit k chlazení po dobu

<sup>&</sup>lt;sup>12</sup>V heterodynním přijímači se přijímaný signál směšuje se signálem kmitočtově stabilního lokálního oscilátoru. Získaný signál, jehož kmitočet je rozdílem kmitočtů přijímaného signálu měřeného mikrovlnného záření a lokálního oscilátoru, má mnohem nižší kmitočet než přijímaný signál (žádná informace se však neztratí), a proto je ho možné zpracovat lépe a jednodušeji. Tato technika se běžně používá v radiovém a televizním vysílání a u radarů.

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>Byla vypuštěna 14. 5. 2009 raketou Ariane 5.

4 let. Heterodynní spektrometr umožní příjem v pásmu od 480 do 1910 GHz. Pro pásmo 480 až 1250 GHz má přijímač NbN SIS směšovače a pro pásmo 1410 až 1910 GHz HEB. Zařízení SMILES (z angl. *Superconducting sub-mm Limb Emission Sounder*) bude na japonském experimentálním modulu na vesmírné stanici ISS [39]. Zařízení je určeno pro chemický výzkum stratosféry, hlavně molekul O<sub>3</sub>, ClO a HCl, které hrají důležitou roli v úbytku ozonu. Dále bude měřit SO<sub>2</sub> a BrO vulkanického původu s citlivostí 2 ppb (ppb= $10^{-9}$ , z angl. *particle per billion*) ve výšce 20-25 km.<sup>14</sup>

Směšovač pro kmitočet 345 GHz s vysokoteplotním YBCO Josephsonovým přechodem je popsán v ref. [40]. Přechod je společně s anténou a filtrem zhotoven na MgO čipu. Přechody mají kritický proud mezi 100 až 150  $\mu$ A, normální odpor  $R_{\rm N}$  mezi 10 a 20  $\Omega$  a pracovní teplotu 20 K. Směšovače tvoří 1  $\mu$ m široké přechody na bikrystalické MgO podložce s rozorientací 24°. Vrstva YBCO byla vytvořena pulzní laserovou depozicí a in-situ pokryta Au vrstvou. Struktura, která byla vytvořena optickou litografií a iontovým leptáním, je pasivovaná SiO<sub>x</sub> vrstvou.

#### 16.9.4 Generátory mikrovlnného záření

První, kdo pozorovali inverzní střídavý Josephsonův jev, t.j. elektromagnetické záření z Josephsonova přechodu, na který je připojeno stejnosměrné napětí, byli Janson a spol. [41]. Protože impedance Josephsonových přechodů, která je okolo 1  $\Omega$ , je podstatně menší než impedance vakua, která je 377  $\Omega$ , je kvůli impedančnímu nepřizpůsobení vyzářený výkon poměrně malý.

Josephsonovy přechody mohou generovat záření až THz kmitočtů, které na rozdíl od rentgenového není ionizující a je tedy považováno za bezpečné. V analogii s X-ray (rentgenové záření) se toto záření označuje jako T-ray. V zásadě cokoli teplejšího než 10 K generuje THz záření. Toto záření neproniká do větší hloubky kovy a vodou, ale proniká pokožkou do hloubky asi 5 mm, tkaninami, lepenkou či papírem. Může tedy sloužit k odhalení rakoviny kůže a prsu nebo k zobrazení zubů. Největší využití se však očekává v detektorech výbušnin a zbraní na letištích. Až do devadesátých let minulého století bylo generování koherentního THz záření technickým problémem.

Silně anizotropní VTS kupráty Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+ $\delta$ </sub> (BSCCO), (BiPb)<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+ $\delta$ </sub> (BPSCCO) a Tl<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+ $\delta$ </sub> (TSCCO) tvoří supravodivé CuO<sub>2</sub> dvojvrstvy vzdálené  $\approx 0,3$  nm. Tyto dvojvrstvy jsou oddělené izolujícími nebo polovodivými Bi<sub>2</sub>O<sub>3</sub> a SrO vrstvami a vzdálené  $\approx 1,2$  nm. Vznikají tak přirozeně naskládané intrinsické Josephsonovy přechody. BSCCO monokrystaly mají kritickou teplotu  $T_c = 80$  až 90 K. Na obr. 16.14 vlevo jsou VACH mesa struktury o rozměrech  $2 \times 1 \times 0,001$  mm<sup>3</sup>

 $<sup>^{14}{\</sup>rm SIS}$ směšovač tvoří pár paralelně zapojených Nb/AlO<sub>x</sub>/Nb přechodů, které mají plochu 1,25×1,25  $\mu{\rm m}^2$ , kritickou proudovou hustotu  $j_c=5,5$  kA m $^{-2}$ , normální odpor $R_{\rm N}=10,6$   $\Omega$ , a $R_{\rm N}I_c=8$  na kmitočtu 640 GHz. Přijímač tvoří dva SIS směšovače chlazené na teplotu 4,5 K a čtyři mezifrekvenční zesilovače s HEMT (z angl. *High electron mobility transistor*), dva chlazené na 20 K a dva na 100 K. Výhodou použití SIS směšovačů je získání mezifrekvenčního pásmo širokého ≈10 GHz, které umožňuje najednou pozorovat více různých molekul. Místní oscilátor generuje kmitočet 638 GHz zdvojením a ztrojením kmitočtu z oscilátoru s Gunnovou diodou na nelineárním dielektriku. Zařízení je chlazeno dvoustupňovým Stirlingovým a Jouleovým-Thomsonovým refrigerátorem s uzavřeným cyklem.



Obr. 16.14: Vlevo: Ampérové-voltové charakteristiky přirozeně naskládaných Josephsonových přechodů v mesa struktuře z BSCCO [42]. Vpravo: Generátor koherentního THz záření, který tvoří mesa struktura na monokrystalu BSCCO [44].

na BSCCO monokrystalu [42]. Rozměry v *ab* rovině jsou větší než Josephsonova hloubka vniku. Na VACH, které byly získány mnohonásobným rozmítnutím proudu při teplotě 4,2 K, jsou vidět mnohonásobné odporové větve s hysterezí. Tyto přechody mají Josephsonovu vazebnou energii mnohem větší než přechody na hranici zrn a lepší homogenitu, protože jsou víceméně v dokonalém krystalu [43].

Schema přenosného z baterie napájeného generátoru koherentního THz záření, který je vyroben na povrchu BSCCO monokrystalu, je na obr. 16.14 vpravo. Stejnosměrný napájecí proud excituje v dutinovém rezonátoru o šířce w, tvořeném mesa strukturou vyleptanou na povrchu monokrystalu, základní  $\lambda/2$  mód a ze strany rezonátoru vychází elektromagnetické záření [44]. Přechodů je na sobě okolo 1000, což umožňuje získat silnější signál. Když je vlnová délka generovaného záření naladěna na šířku dutiny rezonátoru, vlastní rezonance synchronizují oscilace, udrží záření ve fázi a zesílí jej, jako je tomu se světlem v laseru. Koherentní záření z řady přechodů je ale důsledkem fázového zavěšení Josephsonových oscilátorů a ne stimulované emise jako u laseru [?]. Při stejné délce rezonátoru, ale změnou jeho šířky mezi 40 až 100 µm je možné generovat záření mezi 0,4 až 0,85 THz s výkonem 0,5 µW. I když v případě koherentního záření všech přechodů roste celkový výkon kvadraticky s jejich počtem, dostat větší vyzářený výkon je kvůli impedančnímu nepřizpůsobení problém.

Spojením generátoru a přijímače je v podstatě možné na jeden čip integrovat základní části radaru.

#### 16.9.5 Supravodivé digitální obvody a převodníky

Původně navržené supravodivé číslicové obvody kopírovaly princip napětím řízeného tranzistoru a jeho předchůdce elektronku. O největší rozvoj této techniky (angl. Josephson latching logics) se zasloužili v letech 1969-1983 v IBM, v rámci programu supravodivého superpočítače [45]. Paradoxně v době, kdy IBM ukončila program kvůli problémům s Pb technologií, byla zavedena nová Nb RSFQ technologie (z angl. Rapid Single Flux Quantum technology) [46]. RSFQ logika využívá bezztrátový přenos digitálních dat balistickým pohybem Josephsonových vírů rychlostí blízkou rychlosti světla<sup>15</sup>. Používá se buď napěťový režim (v okolí blízkosti hysterezní proudově-napěťové charakteristiky) nebo fázový režim (související s kvantováním magnetického toku) přechodů. Rychlost RSFQ logiky je dána fyzikálními jevy a nesouvisí s miniaturizací, jako je tomu u polovodičových obvodů. Na rozdíl od polovodičových obvodů zde proto není není důležitá otázka spojování jednotlivých prvků, čili "drátování". RSFQ technologie je plně tenkovrstvá, nezávisí na úrovni dopování a náročných polovodičových technologiích, jako je epitaxní růst nebo depozice z chemických par a je plně kompatibilní se zavedenými polovodičovými technologiemi ECL (z angl. Emitter Coupled Logic) a CMOS (z angl. Complementary Metal Oxide Semicondutor).

Josephsonovy integrované obvody jsou zajímavé hlavně proto, že jejich hodinový kmitočet může být až 1 THz a přitom mají malou disipaci energie  $(10^{-18} \text{ joule/bit}),$ což je o 5 řádů méně, než mají moderní polovodičové CMOS integrované obvody. Navíc LTS RSFQ technologie je jednodušší než CMOS technologie. Procesory a paměti pro počítače, které jsou vyráběny Nb třívrstvou technologií a  $0.8 \ \mu m$  litografií, byly eperimentálně zkoušeny s hodinovým kmitočtem až 770 GHz. Mají být součástí tzv. "petaflop" počítačů, které zvládnou  $10^{15}$ operací za sekundu<sup>16</sup>. Analogově-digitální a digitálně-analogové převodníky pracují s hodinovým kmitočtem až 100 GHz. Archi-



Obr. 16.15: stejnosměrný skvid a jeho elektronika: vstupní cívka  $L_i$ , zpětnovazební cívka  $L_z$ , zdroj proudu (I), zesilovač (A), fázový detektor (FD), oscilátor (OSC) a integrátor (INT).

tektura SOC (z angl. *System On Chip*) integruje jak vstupní analogové obvody tak i číslicové obvody. Tyto obvody jsou od roku 1990 součástí komerčně dostupných ditálních vzorkovacích osciloskopů, které mají rozsah do 70 GHz [34].

#### 16.10 Skvidy – supravodivé kvantové interferenční detektory

Jsou dva základní typy skvidů: *stejnosměrný* (dc SQUID) se dvěma Josephsonovými přechody, který využívá jev makroskopické kvantové interference (viz 16.4),

 $<sup>^{15}</sup>$ Josephsonovy víry v přechodech nemají normální jádro, jako mají víry v supravodičích II. typu, přesto jako ony nesou kvantum magnetického toku.

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Jsou vyvíjeny National Science Foundation spolu s NASA, DARPA a několika univerzitami.

<sup>453</sup> 



Obr. 16.16: Přenosová funkce skvidu - závislost napětí na magnetickém toku v prstenci.

a střídavý (rf SQUID) s jedním přechodem, který je založený na disipaci energie v prstenci s přechodem (viz 16.5).

#### 16.10.1 Stejnosměrný skvid

Základem stejnosměrného skvidu (angl. dc SQUID) je supravodivý pr<br/>stenec se dvěma stejnými bezhysterezními Josephsonovými přechody (obr. 16.9.5). Podle RCSJ modelu přechodu je časová střední hodnota napětí na paralelně zapojených přechodech při konstantním napájecím proudu  $I \geq 2I_c$  oscilující  $\Phi_0$  periodickou funkcí magnetického toku  $\Phi$  v pr<br/>stenci,

$$\overline{V(\Phi)} = R_{\rm N} \sqrt{(I/2)^2 - I_{\rm c}^2 \cos^2(\pi \Phi/\Phi_0)}.$$
(16.76)

Z hlediska poměru přenosové funkce (viz obr. 16.16)  $\overline{V(\Phi)}$  a šumu je optimální velikost napájecího proudu $I=2I_{\rm c}.$ V praxi se ale používá proud o 5 až 10% větší. Elektronika, která je na pokojové teplotě, převádí periodickou závislost napětí na toku na lineární. Toho se docílí tak, že skvid pracuje jako detektor nuly: měří rozdíl magnetických toků vytvořených v prstenci vstupní cívkou  $L_i$  a zpětnovazební cívkou  $L_z$ . Obě cívky jsou na prstenec induktivně navázané. Záporná zpětná vazba, zavedená přes odpor a cívku  $L_z$ , vyrovnává změny vstupního magnetického toku a drží pracovní bod skvidu v některém lokálním minimu přenosové funkce (viz obr. 16.16). Zpětnovazební napětí je úměrné magnetickému toku vytvořenému vstupní cívkou. Minimum se "experimentálně" najde pomocí malého střídavého toku s amplitudou  $\Phi < \Phi_0/4$ , který v prstenci indukuje střídavý proud z generátoru, tekoucí cívkou  $L_z$ . Pomocí této modulace, která má typicky kmitočet 100 kHz, a fázově citlivého (angl. lock-in) detektoru se měří derivace přenosové funkce skvidu  $dV(\Phi)/d\Phi$ . Ta je v minimu rovna nule a proto se na výstupu integrátoru napětí nemění. Změna proudu ve vstupní cívce způsobí vychýlení (polarizaci) a nenulovou derivaci  $dV(\Phi)/d\Phi$ . Změna napětí na výstupu integrátoru pak kompenzuje vstupní změnu. V prstenci skvidu je tak udržován konstantní magnetický tok, odpovídající celému počtu kvant magnetického toku. Elektronika skvidu běžně rozliší a kompenzuje polarizaci

kvantového stavu tak, že spektrální hustota šumu magnetického toku v prstenci je okolo  $5 \times 10^{-6} \Phi_0 \text{ Hz}^{-1/2}$  [?]. Zpětná vazba udrží kvantový stav "zamčený" v rozsahu ±500  $\Phi_0$ . Protože závislost  $\overline{V(\Phi)}$  je periodická, jsou základní stavy degenerované a skvid není detektorem absolutní hodnoty magnetického toku, ale měří změny magnetického toku vzhledem k "zamčenému" stavu.



Obr. 16.17: Střídavý skvid a jeho elektronika: vstupní cívka  $L_i$ , cívka rezonančního obvodu  $L_T$ , kondenzátor laděného obvodu C, zdroj konstantního vysokofrekvenčního proudu (I), rf zesilovač a usměrňovač, fázový detektor (FD), oscilátor (OSC) a integrátor (INT).

16.10.2 Střídavý skvid

Dynamický rozsah skvidu je obrovský, okolo  $10^8 - 10^9$  (170 dB). Konečná rychlost přeběhu zpětno-vazební smyčky (angl. *sleu rate*), která je typicky  $10^6 \Phi_0/s$ , omezuje nejvyšší kmitočet a amplitudu signálů, které může skvid zpracovat. Příliš rychlé změny měřeného magnetického toku, které zpětná vazba "neuhlídá", mohou vést k chybě - přeskoku do jiného minima, což se projeví skokovou změnou napětí na výstupu.

Stejnosměrný skvid může pracovat i v bezhysterzním režimu, jehož princip je patrný z obr. 16.16 nahoře.

Základem střídavého skvidu (angl. rf SQUID) je supravodivý prstenec přerušený jedním Josephsonovým pře-chodem a rezonanční LC obvod, který je na prstenec induktivně navázaný (viz. obr. 16.17). Rezonanční obvod je napájený ze zdroje konstantního vysokofrekvenčního proudu $I_{\rm rf}$ s kmitočtem shodným s rezonančním kmitočtem obvodu. Amplituda vysokofrekvenčního napětí  $V_{\rm rf}$  na rezonančním obvodu je periodickou funkcí magnetického toku v prstenci. Rezonanční obvod tvoří spolu s prstencem rovnovážnou soustavu. Veškeré ztráty energie v prstenci, ke kterým dochází při přeskoku mezi metastabilními stavy (obr. 16.11), jsou doplňovány z rezonančního obvodu. Protože ten je napájen ze zdroje konstantního proudu, je střední hodnota amplitudy vysokofrekvenčního napětí nepřímo úměrná ztrátám. Závislost  $V_{\rm rf}$  ( $I_{\rm rf}$ ) má tvar schodů (obr. 16.18), a proto se nazývá schodovitou charakteristikou. Části charakteristiky s větším dynamickým odporem  $dV_{\rm rf}/dI_{\rm rf}$  odpovídají situaci, kdy je daný typ přechodů mezi jednotlivými metastabilními stavy v prstenci je nasycen a energie v rezonančním obvodu nestačí k tomu, aby nastal další typ přechodu. Části s menším dynamickým odporem odpovídají situaci, kdy zvýšení vysokofrekvenčního proudu vede ke zvýšení intenzity přechodů.

Magnetický tok v prstenci je součtem měřeného nízkofrekvenčního magnetického toku, vysokofrekvenčního toku indukovaného vysokofrekvenčním proudem v cívce rezonančního obvodu, zpětnovazebního toku a modulačního toku,  $\Phi = \Phi_{\rm m} + \Phi_{\rm rf} + \Phi_{\rm z} + \Phi_{\rm mod}$ . Při konstantním vysokofrekvenčním toku bude závislost amplitudy

napětí  $V_{\rm rf}(\Phi)$  na měřeném vnějším toku po částech lineární. Má tvar trojúhelníkového vzoru s periodou  $\Phi_0$  (obr. 16.18). Závislost  $V_{\rm rf}$  se nazývá signální nebo trojúhelníkovou charakteristikou skvidu. Podobně jako u stejnosměrného skvidu, je možné tuto periodickou závislost linearizo-

niožne tuto periodičkou žavisiost interiižovat zpětnou vazbou, která "zamkne" stav v některém z minim trojúhelníkové charakteristiky, které se najde pomocí modulačního toku. Strmost přenosové funkce je  $\partial V_{\rm rf}/\partial \Phi =$  $(\omega/k_{\rm T}) (L_{\rm T}/L)^{1/2}$ , kde  $\omega$  je úhlový kmitočet vysokofrekvenčního proudu (totožný s rezonančním kmitočtem LC obvodu,  $\omega = (L_{\rm T}C_{\rm T})^{1/2}$ ). Strmost (a tedy i citlivost) roste s rostoucím kmitočtem, ale protože s rostoucím kmitočtem rostou nároky na rezonanční obvod, rf vedení a vstupní předzesilovač, jsou výsledky dosahované na GHz kmitočtech horší, než by odpovídalo prostému zvýšení kmitočtu. Používané kmitočty jsou nejčastěji 40 nebo 180 MHz.

Ve srovnání s elektronikou stejnosměrného skvidu má elektronika střídavého skvidu navíc vf předzesilovač, amplitudový detektor a místo zdroje konstantního stejnosměrného proudu zdroj vf proudu s konstantní amplitudou (obr. 16.18).

V tabulce 16.3 je porovnání typických pa-

rametrů nízkoteplotních stejnosměrných a střídavých skvidů a vysokoteplotních stejnosměrných skvidů. Na obr. 16.19 je "pracovní oblast" skvidu a srovnání jeho citlivosti s některými zdroji pole.

Tabuľka 16.3: Typické parametry skvidů: T – pracovní teplota,  $S_{\rm E}$  – spektrální hustota šumové energie,  $f_{1/{\rm f}}$  – koleno 1/f šumu,  $S_{\Phi}$  – spektrální hustota šumového magnetického toku,  $S_{\rm I}$  – spektrální hustota vstupního šumového proudu,  $L_{\rm s}$  indukčnost prstence skvidu,  $L_{\rm i}$  – indukčnost vstupní cívky,  $1/M_{\rm is}$  – vazba vstupní cívky na prstenec,  $L_{\rm s}$  – indukčnost prstence.

		dc Nb $[49]$	rf Nb [49]	dc YBCO [32]
Т		0 - 7 K	mK - 4,2 K	77 K
$S_{\mathrm{E}}$	(J/Hz)	$5 \times 10^{-31}$	$1 \times 10^{-29}$	
$S_{\Phi}$	$(\Phi_0 \ { m Hz}^{-1/2})$	$5 \times 10^{-6}$		$10^{-6}$
$S_{\mathrm{I}}$	$(A Hz^{-1/2})$	$1,5\times 10^{-12}$		
$f_{1/\mathrm{f}}$	(Hz)	< 0, 5	< 0, 1	
$L_{i}$	(nH)	2000		
$1/M_{\rm is}$	$(\mu { m A}/\Phi_0)$	$^{0,2}$		
$L_{\rm s}$	(pH)	50		50

456



Magnetický tok v prstenci

Obr. 16.18: přenosová funkce - trojúhelníková závislost amplitudy rf napětí na rezonančním obvodu na magnetickém toku v prstenci.



Obr. 16.19: Vlevo: Typická spektrální hustota šumové energie dc a rf skvidu. Bílý šum dc skvidu je řádově  $10^3h$ , kde  $h \approx 6.6 \times 10^{-34}$  J/Hz je Planckova konstanta. Vpravo: Pole charakteristických zdrojů. Typická spektrální hustota šumu magnetometru s dc skvidem je několik fT Hz<sup>-1/2</sup>.

#### 16.10.3 Skvidový zesilovač

Protože vstupní cívka skvidu je supravodivá, je jeho stejnosměrný vstupní odpor nulový a vstupní impedance má indukční charakter. Kmitočtový rozsah skvidů je omezen několika kHz konečnou rychlostí přeběhu signálu zpětnovazební elektronikou. Při měření proudu ze zdrojů, které mají malou nebo nulovou výstupní impedanci, ale rychlou odezvu, jako jsou některé detektory částic nebo některé magnetometry, například pro neinvazivní defektoskopii, je potřeba zpracovat signály v podstatně širším pásmu kmitočtů. Pro tyto účely se používá integrovaný skvidový zesilovač, který tvoří citlivý skvid na vstupu, řídící řadu skvidů zapojených v sérii (obr. 16.20). Ty dávají větší změnu výstupního napětí se vstupním proudem než jeden skvid. Na rozdíl od napěťových zesilovačů zde není potřeba používat vstupní transformátor "nahoru".

Skvidový zesilovač byl vyvinut v několika laboratořích a dnes je dostupný komerčně [34]. NIST vyvinul v rámci programu, který byl sponzorovaný NASA, zesilovač s přenosovou funkcí (transimpedancí) 10 nV/pA, standardním kmitočtovým rozsahem 2 MHz a spektrální hustotou vstupního šumového proudu 2 pA  $\text{Hz}^{-1/2}$  [33]. Novější zesilovače s řadou 100 dc skvidů mají kmitočtový rozsah od dc do 120 MHz, vstupní indukčnost 150 nH, transimpedanci 0,5 nV/pA a ekvivalentní vstupní hustotu šumového proudu 2,5 pA  $\text{Hz}^{-1/2}$  při 4 K [47, 48].



Obr. 16.20: Schema skvidového zesilovače.



Obr. 16.21: Vlevo: nízkoteplotní Nb skvid vyrobený třívrstvou technologií na Si podložce. Vpravo: VTS YBCO skvid na  $SrTiO_3$  bikrystalické podložce [55].

#### 16.10.4 Technologie výroby skvidů

Z nízkoteplotních supravodičů se v současnosti v podstatě vyrábějí stejnosměrné skvidy, protože jsou citlivější než střídavé a rozptyl parametrů přechodů, hlavně  $R_{\rm N}I_{\rm c}$ , se bez problémů dosahuje pod několik procent<sup>17</sup>. Skvidy se zhotovují třívrstvou Nb/Al-AlO<sub>x</sub>/Nb technologií na Si čipu. Jeden skvid s integrovanou vstupní a zpětnovazební cívkou zabírá plochu několik mm<sup>2</sup> (viz obr. 16.21) [50, 49, 51]. Skvidy jsou obvykle uloženy v Nb stínění. Jsou vybaveny topením, které umožňuje čip vyhřát nad kritickou teplotu supravodiče a uvolnit tak z filmu zachycený magnetický tok (víry), který zvyšuje šum skvidu.

Zatímco technologie výroby nízkoteplotních skvidů je velmi podobná výrobě přechodů a čipů pro standardy napětí, výroba vysokoteplotních skvidů je specifická. Hlavním důvodem je, že zatímco k Nb skvidům můžeme supravodivou Nb snímací cívku připojit na supravodivé svorkovnici jednoduše šroubky, u vysokoteplotních supravodičů rozebíratelné kontakty dosud neumíme.

Skvidy z VTS se obyčejně vyrábějí pulzní laserovou depozicí YBCO vrstvy na krystalickou podložku z LaAlO<sub>3</sub> nebo SrTiO<sub>3</sub>. Přechody jsou buď na hranici zrn bikrystalické podložky nebo na hraně schodu, které nejsou tak citlivé na orientaci snímače v magnetickém poli [50]. Šum VTS skvidů závisí na použité technologii [52]. Na obr. 16.21 vpravo je VTS skvid o vnějších rozměrech 100×100  $\mu$ m<sup>2</sup>, vnitřních rozměrech 20×20  $\mu$ m<sup>2</sup> a šířce čáry přechodu 3,4  $\mu$ m.

Protože nemáme technologii pro rozebíratelné spoje z VTS, a tedy ke skvidům nemůžeme dodatečně připojit snímací cívky (antény), jsou magnetometry i gradiometry z VTS vyráběny technologií, která integruje skvid se vstupním transformátorem. Anténa je buď velká snímací cívka nebo planární gradiometr, který

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Nejsou-li oba přechody ve stejnosměrném skvidu stejné, je variace přenosové funkce menší.

snímá  $dB_{\rm z}/dx$  nebo $dB_{\rm x}/dz$ [50]. Periodickou změnou polarity stejnosměrného napájecího proudu VTS skvidů lze dosáhnout zlepšení jejich šumových vlastností na nízkých kmitočtech, to je pod 1 Hz. Standardní VTS magnetometry mají integrovanou anténu o rozměrech 50  $\times$  50  $\mu {\rm m}^2$  (pro mikroskopii) až 16  $\times$  16 mm² (pro měření pole s velkou citlivostí). Podobně jako u nízkoteplotních skvidů, integrované topení umožňuje čidlo vyhřát nad jeho kritickou teplotu bez nutnosti ohřátí celé aparatury.

#### 16.10.5 Skanovací skvidový mikroskop

Skanovací skvidový mikroskop je dosud nejcitlivějším přístrojem pro získání obrazu rozložení magnetického pole v blízkosti povrchu vzorku. Mikroskop může zobrazit spontánní nebo indukovanou magnetizaci nebo pole vytvořené transportními či indukovanými proudy ve vodičích. Kirtley a spol. takovýmto mikroskopem zobrazili v supravodiči jednotlivé víry [53]. V tomto mikroskopu jsou vzorek i skvid umístěny v kapalném heliu. Nad pevně uchyceným vzorkem se pohybuje skvid upevněný na raménku xyz piezoelektrického měniče. Vzdálenost čidla od vzorku může být jenom 50  $\mu$ m, což umožňuje prostorové rozlišení 250 - 1000  $\mu$ m a citlivost od 50 do 1000 fT Hz<sup>-1/2</sup> [34]. Skanovaná plocha je až 50 mm<sup>2</sup>.

Druhým typem jsou mikroskopy pro zobrazení statických polí magnetických materiálů na pokojové teplotě, pro měření hornin, biomagnetizmus nebo nedestruktivní testy založené na měření indukovaných stínících proudů. V tomto případě jsou čidla často YBCO dc skvidy, které jsou udržovány na teplotě 77 K v kryostatu se safírovým okénkem. Při tloušťce okénka 25  $\mu$ m může být vzorek umístěn na vzduchu na skanovacím stolku ve vzdálenosti jenom 50  $\mu$ m od skvidu. Tyto mikroskopy mají citlivost 20 pT Hz<sup>-1/2</sup>. Při 1 s středování mikroskop rozliší magnetické pole vytvořené proudem 10 nA ve vodiči vzdáleném 0,1 mm. Porovnáním získané mapy rozložení hustoty proudu se schématem obvodu je možné najít vadné místo. Při vzdálenosti 0,15 mm je lokalizace ±3  $\mu$ m. Například mapováním proudů v integrovaných obvodech je možné bezkontaktně a nedestruktivně najít a lokalizovat místa elektrického zkratu [54].

Skanovací mikroskopy je možné použít i pro zobrazení vysokofrekvenčních magnetických polí. V takovém mikroskopu je využit hysterezní Nb stejnosměrný skvid a pulzní vzorkovací technika, na rozdíl od běžně používaného bezhysterezního skvidu se zpětnovazební smyčkou. Jeho kmitočtový rozsah je od 0 do 3 GHz a prostorové rozlišení okolo 10  $\mu$ m [55].

#### 16.10.6 Skvidové magnetometry pro biomagnetická měření

Jedním z oborů, ve kterém jsou skvidy nejvíce rozšířeny, je biomagetizmus – měření a analýza velmi slabých lokálních magnetických polí živých organizmů a jejich orgánů (mozek, plíce, srdce) [56]. Tato měření jsou neinvazivní, nepotřebují injekci izotopů, použití gamma záření (x-ray) nebo silná magnetická pole.

Biomagnetická pole mají fyziologický původ nebo pocházejí od magnetických příměsí nebo značkovačů. Praktičnost biomagnetických metod závisí na technice potlačení dominujícího šumu okolního prostředí, zpracování dat v reálném čase a jejich interpretaci. Signály generované živou tkání mají velikost od 1 fT (nervy) do

 $100~{\rm pT}$  (lidské srdce). Nečistoty a používané značkovače dávají signály o velikosti typicky několik nT.

Nízkoteplotní magnetometry s N<br/>b skvidy, chlazené kapalným heliem, mají spektrální hustotu šumu mezi 1 a 10 f<br/>T $\mathrm{Hz}^{-1/2}$ a koleno1/fšumu u 0,1 Hz. Takové<br/>to magnetometry jsou potřeba pro magneto<br/>encefalografii (MEG). Magnetometry s VTS skvidy mají spektrální hustotu šumu mezi 10 a 100 f<br/>T $\mathrm{Hz}^{-1/2}$ a vyšší 1/fšum s kolenem u 10 Hz. Takové<br/>to magnetometry dobře stačí pro diagnózu srdce.

Prakticky všechna biomagnetická měření mají společný problém: jak změřit slabé signály v přítomnosti fluktuujícího geomagnetického pole a civilizačního elektromagnetického smogu (obr. 16.19), který má úroveň 1 nT až 1  $\mu$ T. Tři nejpoužívanější metody potlačení rušivých polí jsou: i) pasivní i aktivní elektromagnetické stínění; ii) magnetické gradiometry; iii) filtrování a středování signálů. Pasivní stínění obyčejně tvoří elektromagneticky stíněné místnosti se stěnami z několika vrstev magneticky měkkých a elektricky dobře vodivých materiálů, ve kterých se indukují stínící proudy, který utlumí vnější šum na kmitočtu okolo 0,1 Hz přinejmenším 100 krát a na kmitočtech nad 100 Hz přinejmenším 10<sup>5</sup> krát. Některé "místnosti" mají i aktivní stínění. Gradiometry potlačí souhlasný signál (homogenní pole) 10<sup>2</sup> až 10<sup>4</sup> krát, s elektronickými korekcemi až 10<sup>6</sup> krát.

Dalším problémem je matematické modelování biomagnetických zdrojů a metody jejich dostatečně přesné lokalizace v prostoru ze změřených magnetických polí, řešením inverzní úlohy. To je klíčová informace pro diagnózu. Dnešní systémy pomocí řady několika set skvidů, umístěných v kryostatu zakončeném helmou, mají prostorové rozlišení, které umožňuje lokalizovat zdroje s přesností řádově mm<sup>18</sup>.

#### 16.10.7 Skvidové magnetometry pro materiálový výzkum

Komerční skvidové magnetometry pro materiálový výzkum jsou navrženy pro studium vzorků v silných magnetických polích, která jsou řádově jednotky tesla. Tato zařízení využívají velký dynamický rozsah skvidů, ale zdaleka ne zcela jejich citlivost. Na nízkých kmitočtech pod 0,1 Hz, se projevuje drift vnějšího magnetického pole a pole supravodivého magnetu, i když je v perzistentním režimu<sup>19</sup>. Příspěvek intrinsického šumu a driftu skvidu je podstatně menší. Nejenom spontánní ale i indukovaný magnetický moment vzorku jsou proto měřeny diferenciálně pomocí nulovací (angl. *auto-zero*) techniky, která drift "zneviditelní". Vzorek je mechanicky přesouván ve snímacích cívkách, konfigurovaných jako gradiometr prvního nebo druhého řádu, obr. 16.22. Homogenní pole v něm neindukuje proud (proudy se odečtou), ale gradient pole ve směru osy gradiometru ano. Při protažení vzorku s magnetickým momentem m se v gradiometru generuje proud, který nezávisí na rychlosti protažení, protože transformátor je ze supravodivého drátu.  $L_i$  je vstupní cívka skvidu.

 $<sup>^{18}</sup>$ Například pro Neuromag vyráběný Elekta Instruments ve spolupráci s Helsinki University of Technology je to 306 skvidů.

 $<sup>^{19} \</sup>rm Zkratováním vývodů supravodivého soleno<br/>idu supravodivým klíčem vznikne uzavřená supravodivá smyčka, ve které te<br/>če setrvalý proud.$ 



Obr. 16.22: Gradiometr prvního řádu, který je součástí supravodivého transformátoru, tvoří soustava dvou stejných opačně orientovaných cívek s plochami  $S_1$  a  $S_2$ .

Přesouvání je časově náročná operace, která omezuje rychlost sběru dat. Proto je možné pozorovat jenom jevy, které jsou pomalejší než perioda přesunutí, řádově kolem 1 sekundy. Potřeba pohybovat vzorkem navíc přináší konstrukční omezení, která vedou k menší citlivosti, horšímu měření teploty a menší stabilitě teploty.

Jsou dva důvody k měření magnetického momentu vzorku pomocí transformátoru toku místo jeho přímé detekce skvidem: i) zvýší se citlivost měření magnetické indukce; ii) skvid je umístěn mimo silné magnetické pole (> 1 mT) solenoidu, které může omezovat či rušit jeho činnost. Protože transformátor je supravodivý, negene-

ruje se v něm tepelný šum, jako se generuje v normálních cívkách. Transformátory toku mohou mít různou konstrukci [57]. Například v axiálním gradiometru, který tvoří dvě cívky navinuté v opačném smyslu (obr. 16.22), homogenní magnetické pole neindukuje žádný proud, zatímco jeho gradient ano.

Pokud chceme co nejvíce využít citlivost skvidu, je vhodné použít techniku podobnou měření magnetického pole mozku: snímat moment nepohyblivého vzorku. Když je vzorek umístěn v jedné z cívek gradiometru, který homogenní pole solenoidu "nevidí", můžeme jeho odezvu v časově proměnném poli číst kontinuálně. Takový magnetometr ale pracuje v polích jen do několika desítek mT. Výhodou této metody je stacionární vzorek v dobře definovaných podmínkách nízkošumového okolí, kmitočtový rozsah od 0 do 1 kHz s kmitočtově i fázově příznivou charakteristikou a přesné měření i řízení teploty vzorku.

#### 16.11 Literatura

- B. D. Josephson, Phys. Lett. 1 251, (1962); The discovery of tunnelling supercurrents, Nobel Lecture, December 12, (1973); Rev. Mod. Phys. 36, 216 (1964).
- [2] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 112, 1900 (1958); in Concepts in Solids, W. A. Benjamin, Inc., New York, (1963).
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108 1175, (1957).
- [4] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20, 1064 (1950).
- [5] P. W. Anderson and J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. 10, 230 (1963); J. M. Rowell, Phys. Rev. Lett. 11, 200 (1963).
- [6] M. Tinkham, in Introduction to superconductivity, McGraw-Hill Book Co., New York, (1996).
- [7] R. C. Jaklevic et al., Phys. Rev. Lett. 12, 159 (1964).
- [8] J. E. Zimmerman and A. H. Silver, Phys. Rev. 141, 367 (1966).

- [9] J. Clarke, M. Hatridge, and M. Moessle, Annu. Rev. Biomed. Eng. 9, 2.1.(2007).
- [10] http://einstein.stanford.edu/

TO

- [11] R. Feynman, in The Feynman lectures on physics, Vol. III, p. 21-14, Addison-Wesley, Palo Alto (1965).
- [12] B. D. Josephson, in Superconductivity, p. 426, ed R. D. Parks, M. Dekker, Inc. New York (1969).
- [13] R. A. Ferrell and R. E. Prange, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 479 (1963); in Superconductivity, p. 298, ed R. D. Parks, M. Dekker, Inc. New York (1969); R. E. Prange, *Phys. Rev.* **131**, 1083 (1963).
- [14] P. W. Anderson, Rev. Mod. Phys. 38, 298 (1966).
- [15] O. Avenel and E. Varoquaux, Phys. Rev. Lett. 55, 2704 (1985); Phys. Rev. Lett. 60, 416 (1988).
- [16] E. Hoskinson and R. E. Packard, Phys. Rev. Lett. 94, 155303 (2005).
- [17] J. Goldstone, Nuovo Cimento 19, 154 (1961).
- [18] Y. Nambu, Phys. Rev. 117, 648 (1960).
- [19] V. Ambegaokar and A. Baratoff, Phys. Rev. Lett. 10, 486 (1963); Phys. Rev. Lett. 11, 104 (1963).
- [20] P. W. Anderson, in Superconductivity, p. 447, ed R. D. Parks, M. Dekker, Inc. New York, (1969).
- [21] P. H. Smith et al. Phys. Rev. Lett. 6, (1961); S. Shapiro, Phys. Rev. Lett. 11, 80 (1963); S. Shapiro, A. R. Janus, and S. Holly, Rev. Mod. Phys. 36, 226 (1964).
- [22] R. C. Jaklevic et al., Phys. Rev. Lett. 12, 159 (1964).
- [23] Y. Sato, A. Joshi, and R. Packard, Phys. Rev. Lett. 98, 195302 (2007).
- [24] A. F. Andreev, Sov. Phys. JETP 19, 1228 (1964).
- [25] J. Johnson, Phys. Rev. 32, 97 (1928).
- [26] H. Nyquist, Phys. Rev. 32, 110 (1928).
- [27] G. A. Ovsyannikov et al., arXiv:cond-mat/9911009v1 [cond-mat.supr-con]
- [28] Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Braunschweig, Germany. www.ptb.de
- [29] M.Yu. Kupriyanov, J. Low Temp. Phys. 106, Nos. 3/4 (1997).
- [30] Institute of Photonic Technology e.V., D-07702 Jena, Germany. www.ipht-jena.de
- [31] PREMA, Mainz-Hechtsheim, Germany. www.prema.com/D/JVSe.htm
- [32] Supracon AG, 07745 Jena, Germany. www.supracon.de
- [33] National Institute for Standards and Technology, USA.
- [34] Hypres, Elmsford, NY10523, USA. www.hypres.com
- [35] R. Deblock *et al.*, Science **301**, 203 (2003).
- [36] J.R. Tucker and M.J. Feldman, Rev. Mod. Phys. 57, 1055 (1985).
- [37] www.iram-institute.org
- [38] sci.esa.int/science-e/www/object/index.cfm?fobjectid=34682.; esamultimedia.esa.int/docs/herschel/HERSCHEL262-LOW-complete.pdf
- [39] adsabs.harvard.edu/abs/2008cosp...37.3099S

- [40] J. Scherbel et al., in Proc. ASC 2000, Virginia Beach, Virginia, Sept. 17-22 (2000).
- [41] I. K. Yanson et al., Soviet Phys. JETP 48, 976 (1965).
- [42] A. Irie et al., Supercond. Sci. Technol. 9, A14-A17 (1996).
- [43] X. Y. Jin et al., Phys. Rev. Lett. 96, 177003 (2006); A. Franz et al., Phys. Rev. B 69, 014506 (2004).
- [44] Science Daily, Nov. 27, 2007.
- [45] IBM, www.research.ibm.com/sup/
- [46] D.K. Brock, RSFQ Technology: Circuits and systems, Hypres, Inc. www.hypres.com/papers/Brock-RSFQ-CirSys-Rev01.pdf
- [47] M. E. Huber et al., IEEE Trans. Appl. Supercond. 11, 4048 (2001).
- [48] T. Morooka et al., Jpn. J. Appl. Phys., L137542 (2003).
- [49] Quantum Design, San Diego, CA 92121-3733 USA. www.qdusa.com
- [50] Tristan Technologies, Inc., San Diego, CA 92121 USA. www.tristantech.com
- [51] STAR Cryoelectronics, Santa Fe, NM 87508-1412 USA. www.starcryo.com
- [52] M. Fardmanesh et al., IEEE Trans. Appl. Supercond. 13, 833 (2003).
- [53] J. R. Kirtley et al., IBM J. Res. Develop. **39-6** (1995) 655.; F. C. Wellstood et al., IEEE Trans. Appl. Supercond. **7** (1997) 3134.; J.R. Kirtley, J.P. Wikswo Jr., Annu. Rev. Mater. Sci. **29** (1999) 117.
- [54] Neocera, Inc. www.neocera.com
- [55] F. C. Wellstood, absimage.aps.org/image/MWS\_MAR07-2006-001665.pdf
- [56] K. Sternickel and A.I. Braginski, Supercond. Sci. Technol. 19, 160 (2006).
- [57] J. Vrba and S. E. Robinson, Methods 25, 249 (2001).

# 17 Makroskopické kvantové javy v supravodivých štruktúrach

M. GRAJCAR

#### 17.1 Úvod

Po vypracovaní kvantovej teórie sa fyzici domnievali, že kvantová fyzika platí len pre mikroskopické častice, akými sú elektróny, protóny či fotóny, kdežto makroskopické objekty sa správajú podľa zákonov klasickej fyziky. Hranica medzi kvantovým a klasickým svetom však nebola nikdy presne určená [1]. Zdá sa, že kvantová mechanika v sebe túto hranicu nemá a teda nemôžeme apriori tvrdiť, že makroskopické objekty sa budú vždy správať klasicky. Pod makroskopickým objektom budeme rozumieť objekt, ktorého vlastnosť, ktorá sa dá merať - nazvime ju pozorovateľná veličina (angl. observable), je mnohonásobne väčšia ako u mikroskopického objektu. V osemdesiatych rokoch sa intenzívne riešil problém, či sa kvantové javy ako tunelovanie a interferencia vlnovej funkcie makroskopického objektu dajú pozorovať na supravodivých štruktúrach. Napriek tomu, že sa v supravodičoch pozorujú kvantové javy na makroskopických škálach, čoho príkladom je samotná supravodivosť, Josephsonov jav, či interferencia vlnovej funkcie Cooperových párov v SQUIDových štruktúrach, dnes už zvyčajne explicitne nehovoríme o makroskopických kvantových javoch. Niekedy sa takéto kvantové javy nazývajú kvantové javy prvého rádu, kde ide o prejavy vlnovej funkcie Cooperovho páru, ktorý je bozónom, tak ako je to u fotónov. Vďaka tomu, že bozóny chcú byť v rovnakom stave, môžeme pozorovať interferenciu a iné vlnové vlastnosti mikroskopických objektov (fotónov, Cooperových párov a pod.) na makrosopických škálach.

Tu treba poznamenať, že to, čo sa nám dnes zdá samozrejmé také samozrejmé vždy nebolo. Napríklad samotná myšlienka tunelovania Cooperových párov sa zdala byť veľmi nepravdepodobnou a mnohí význační fyzici tomu neverili (viď kapitola o slabej supravodivosti, na ktorú táto v mnohom nadväzuje). Napriek tomu sa ukázalo, že Josephsonov jav existuje a Cooperov pár môže tunelovať cez potenciálové bariéry. V tejto kapitole pôjdeme ešte ďalej. Budeme sa pýtať, či je možné, aby cez potenciálovú bariéru pretuneloval objekt, ktorý sa skladá z mnohých mikroskopických objektov.

Prvé výpočty ukázali, že by to naozaj malo byť možné a dokonca merateľné. Leggett ukázal [2], že Josephsonove tunelové štruktúry môžu vykazovať tunelovanie medzi dvoma makroskopickými stavmi a je možné ich pripraviť v superpozícii týchto dvoch stavov. Dnes vieme v špičkových laboratóriách pripravovať takéto supravodivé štruktúry a pri veľmi nízkych teplotách robiť kvantové experimenty, ktoré sa predtým dali robiť len s mikroskopickými objektami. V tejto kapitole sa dozviete, akým spôsobom je možné prejsť od klasického popisu supravodivých štruktúr ku kvantovému a aké experimenty je možné urobiť, aby sa overilo, že malé supravodivé štruktúry sa správajú podľa zákonov kvantovej fyziky. Na záver tejto kapitoly

uvedieme niekoľko príkladov na využitie kvantových supravodivých nanoštruktúr v oblasti kvantových počítačov, moderných detektorov a metrologických štandardov.

#### 17.2 Kvantová mechanika a submikrónové Josephsonove štruktúry

V kapitole o Josephsonovom jave sme predpokladali, že systém sa správa klasicky a teda náboj a fáza na Josephsonovom spoji sú určené presne. Toto však odporuje jednému zo základných princípov kvantovej mechaniky, Heisenbergovmu princípu neurčitosti. Podľa tohto princípu nemôžu mať dve nekompatibilné veličiny, akými sú náboj a fáza v supravodiči, súčasne ostrú hodnotu. Pre makroskopické spoje s rozmermi rádovo mikrometre sú kvantové fluktuácie veľmi malé a sú zanedbateľné voči tepelným fluktuáciam. Avšak submikrónové Josephsonové spoje schladené na veľmi nízke teploty môžu mať tepelné fluktuácie menšie ako kvantové a ich správanie nie je možné popísať klasicky. V takýchto spojoch musíme náboj a fázu uvažovať ako nekompatibilné kvantové premenné, ktoré spĺňajú komutačné vzťahy. Týmto premenným môžeme priradiť operátor, vďaka ktorému môžme vypočítať stredné hodnoty náboja či fázy, ak poznáme stav systému, ktorý je popísaný vlnovou funkciou. V prípade supravodiča má vlnová funkcia tvar

$$\Psi = |\Psi(r,t)| \exp(i\varphi(r,t)) , \qquad (17.1)$$

kde $|\Psi(r,t)|^2$ je úmerné hustote náboja (Cooperových párov) a  $\varphi(r,t)$ je fáza supravodiča. V prípade homogénneho supravodiča môžeme vlnovú funkciu napísať ako súčin vlnových funkcií jednotlivých Cooperových párov, ktoré majú v dôsledku fázovej koherencie rovnakú fázu  $\varphi$ 

$$|\Psi_{\varphi}\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} (|u_{\boldsymbol{k}}| + |v_{\boldsymbol{k}}|e^{i\varphi}c^+_{\boldsymbol{k}\uparrow}c^+_{-\boldsymbol{k}\downarrow})|\Phi_0\rangle .$$
(17.2)

Po roznásobení

$$|\Psi_{\varphi}\rangle = \sum_{n} e^{in\varphi} |\Psi_{n}\rangle , \qquad (17.3)$$

kde  $\Psi_n$  je vlnová funkcia zodpovedajúca supravodivému stavu s presne určeným počtom Cooperových párov rovným n. Ak je teda počet Cooperových párov v supravodiči fixovaný na hodnotu N, potom tomuto stavu zodpovedá vlnová funkcia, ktorú dostaneme zo vzťahu (17.3) pomocou Fourierovej transformácie

$$|\Psi_{\rm N}\rangle = \int_0^{2\pi} d\varphi e^{-iN\varphi} |\Psi_{\varphi}\rangle \ . \tag{17.4}$$

Z Fourierovej analýzy vieme, že priestorové rozloženie nejakej veličiny, ktoré je úzko lokalizované v jednom priestore, je nevyhnutne široké v transformovanom priestore. Úzky impulz so šírkou  $\Delta t$  má široké spektrum vo frekvenčnej oblasti so šírkou  $\Delta f$ . Podobne ako pre  $\Delta t$  a  $\Delta f$  či hybnosť a súradnicu v kvantovej mechanike, bude

aj pre bude aj fázu $\varphi$ a počet Cooperových párovN platiť Heisenbergov vzťah neurčitosti

$$\Delta N \Delta \varphi \frac{1}{2} . \tag{17.5}$$

Tiež môžeme zadefinovať operátory pre fázu a počet Cooperových párov, ktoré sú vo fázovej reprezentácii dané vzťahmi  $\hat{\varphi} \equiv \varphi$  a  $\hat{n} \equiv i\partial/\partial\varphi$ . Zo vzťahov pre vlnovú funkciu Cooperovho páru vidieť, že  $\Psi_n$  a  $\Psi_{\varphi}$  dostaneme jednoduchou zámenou  $N \leftrightarrow \varphi$  a teda rovnako dobre môžeme zadefinovať operátory v nábojovej reprezentácií  $\hat{n} \equiv n$  a  $\hat{\varphi} \equiv -i\partial/\partial n$ . Ľahko sa môžete presvedčiť, že tieto operátory spĺňajú komutačné vzťahy:

$$[\hat{n},\hat{\varphi}] = (\hat{n}\hat{\varphi} - \hat{\varphi}\hat{n}) = i . \qquad (17.6)$$

Vzťah (17.5) platí nielen pre objemový supravodič, ale aj pre Josephsonove spoje, kde  $\Delta \varphi$  je rozdiel fáz na Josephsonovom spoji a  $\Delta N$  je je rozdiel počtu Cooperových párov na jeho elektródach. Teraz ukážeme jednoduchý fyzikálny argument, prečo môžeme fázu makroskopického Josephsonovho spoja považovať za takmer klasickú premennú, t.j. jej kvantové fluktuácie sú zanedbateľné ( $\Delta \varphi \rightarrow 0$ ). Celková energia Josephsonovho spoja sa dá napísať ako súčet Josephsonovej a Coulombovej energie

$$E = -E_{\rm J} \cos \Delta \varphi + E_{\rm C} \Delta N^2 , \qquad (17.7)$$

kde  $E_{\rm J} = \Phi_0 I_{\rm c}/2\pi$  je maximálna Josephsonova energia spoja a  $E_{\rm C} = (2e)^2/2C$  je elektrostatická energia Josephsonovho spoja s kapacitou C, ktorého rozdiel nábojov na elektródach je práve jeden Cooperov pár. Ak  $E_{\rm J} \gg E_{\rm C}$ , je energeticky výhodnejšie, aby fluktuácie fázy boli malé,  $\Delta \varphi \rightarrow 0$ , aj za cenu väčších fluktuácií náboja  $\Delta N$ . Vtedy hovoríme, že fáza je dobre definovanou veličinou (fázový režim) a je výhodné zvoliť fázovú reprezentáciu. Ak  $E_{\rm J} \sim E_{\rm C}$  budú fluktuovať obe veličiny. V prípade, že  $E_{\rm C} \gg E_{\rm J}$  hovoríme o nábojovom režime, keď náboj je dobre definovaný, avšak fáza je neurčitá. V tomto prípade je výhodne zvoliť nábojovú reprezentáciu. Pre makroskopické Josephsonove spoje s rozmermi väčšími ako 1  $\mu$ m je podmienka  $E_{\rm J} \gg E_{\rm C}$  veľmi dobre splnená a platí že  $\Delta \varphi \rightarrow 0$ . Inými slovami, fluktuácie fázy sú zanedbateľné a nemajú vplyv na merané veličiny. So zväčšujúcou sa plochou Josephsonovho spoja S Josephsonova energia rastie, kdežto Coulombova energia klesá, pričom pomer $E_{\rm J}/E_{\rm C}$ je priamo úmerný  $S^2.$  Pre štandardnú hliníkovú technológiu platí  $E_{\rm J}/E_{\rm C} \approx (10^2 \mu m^{-4}) S^2$  a teda  $E_{\rm J}$  je porovnateľná s  $E_{\rm C}$  pre spoje s rozmermi  $\sim 333 \times 333$  nm. Tu treba zdôrazniť, že aj keď je Josephsonov spoj vo fázovom režime to ešte neznamená, že ho môžeme popísať klasicky. V skutočnosti neexistuje ostrá hranica medzi klasickým a kvantovým režimom. Platí už vyšie spomínané pravidlo, že systém môžeme popísať klasicky, ak kvantové fluktuácie sú zanedbateľné voči tepelným fluktuáciam.

Energiu kvantových fluktuácií Josephsonovho spoja môžeme určiť z hamiltoniánu Josephsonovho spoja. Kvantová mechanika dáva návod ako napísať hamiltonián sústavy známy ako kanonické kvantovanie [3, 4]. V prvom kroku musíme napísať lagranžián sústavy pomocou klasickej fyziky. Lagranžián treba nájsť tak, aby

dával správnu pohybovú rovnicu (WS1.39), ktorá bola odvodená pre RCSJ model (pre  $R_N = \infty$ )

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0.$$
(17.8)

Na určenie lagranžiánu Josephsonovho spoja si môžeme pomôcť analógiou s mecha-nikou. V mechanike je Lagrangeova funcia daná rozdielom kinetickej a potenciálnej energie<sup>1</sup>. Dosadením napätia z *ac* Josephsonovej rovnice

$$V = \frac{\Phi_0}{2\pi} \dot{\phi} \ . \tag{17.9}$$

do vzťahu pre Coulombovu energiu dostávame energiu  $K_{\rm C} = CV^2/2 =$  $= (\Phi_0/2\pi)^2 C\dot{\phi}^2/2$ , ktorá je formálne podobná kinetickej energii hmotnej častice. Josephsonova energia  $U_{\rm J} = E_{\rm J}(1 - \cos \phi)$  má zasa tvar potenciálnej energie matematického kyvadla.

V prípade, že vonka-



Obr. 17.1: (a) Izolovaný Josephsonov spoj. Po pripojení makroskopických vodičov už elektróda nebude malá a kapacita spoja vzrastie. (b) Nábojový ostrovček vytvorený z dvoch Josephsonových spojov, tzv. Cooper pair box. Spojené elektródy Josephsonových spojov vytvárajú ostrovček, ktorý je elektricky oddelený od vonkajšieho sveta dvoma tunnelovými bariérami. Ako je zobrazené na obrázku, takýto CPB môže byť galvanicky oddelený odmeracej aparatúry, ak CPB uzatvoríme do supravodivej slučky. Takáto súčiastka sa podobá na rf SQUID. Pretunelovanie jedného Cooperovho páru na ostrovček stojí Coulombovu enrgiu  $E_{\rm C}$ , pričom však získame Josephsonovu energiu  $E_{\rm J}$ . Ak  $E_{\rm C} \gg E_{\rm J}$ , tunelovanie Cooperových parov je potlačené a tuneluje vždy len jeden Cooperov pár.

jší zdroj tlačí cez Josephsonov spoj prúd $I_{\rm e},$ musíme do Lagranžiánu pridať ešte člen, ktorý zodpovedá práci vykonávanej vonkajším zdrojom [5]

$$U_{\rm e} = -\int_{-\infty}^{t} I_{\rm e} V dt = -\frac{\Phi_0}{2\pi} I_{\rm e} \phi . \qquad (17.10)$$

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Lagranžián možno napísať aj pre supravodivý paralelný rezonančný obvod LC, kde cievka je urobená zo supravodiča. Cievočku môžeme urobiť z veľmi tenkého drôtu a tak malú, že jej geometrická indukčnosť  $L_{\rm g}$  bude zanedbateľne malá voči kinetickej indukčnosti  $L_{\rm k}$ , ktorá vyjadruje mieru zotrvačnosti Cooperových párov. Energiu cievky môžeme preto priamo stotožniť s kinetickou energiou Cooperových párov, ktorá je daná vzťahom  $E_{\rm L} = L_{\rm k}\dot{Q}^2/2$ . Energiu kondenzátora  $E_{\rm C} = CQ^2/2$  môžeme zasa stotožniť s potenciálnou energiou elektrického náboja Q. Lagranžián LC obvodu je potom daný vzťahom  $\mathcal{L} = E_{\rm L} - E_{\rm Q}$ , kde zovšobecnenou súradnicou q je náboj Q. Ľahko sa presvedčíte, že Lagrangeová pohybová rovnica je rovnicou harmonického oscilátora s vlastnou frekvenciou  $\omega_0 = 1/\sqrt{LC}$ . Lagrangeov formalizmus sa dá rovnako dobre použiť aj pre nenulovú geometrickú indukčnosť, aj keď tu už analógia s kinetickou energiou nie je taká priamočiara.



Celkový lagranžián Josephsonovho spoja má potom tvar

$$\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = K_{\rm C} - U_{\rm J} = E_{\rm J} \left( \frac{\hbar^2}{4E_{\rm J}E_{\rm C}} \dot{\phi}^2 - (1 - \cos\phi) + \frac{I_{\rm e}}{I_{\rm c}} \phi \right) \ . \tag{17.11}$$

Dosadením tohoto lagranžiánu do Lagrangeovej pohybovej rovnice (17.8) dostávame známu rovnicu pre CSJ model ( $R_N = \infty$ ). Môžeme zadefinovať zovšeobecnenú hybnosť

$$p \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \frac{\hbar^2}{2E_{\rm C}} \dot{\phi} \tag{17.12}$$

a zovšeobecnenú hmotnosť  $M \equiv \hbar^2/2E_{\rm C}$ . Čím je kapacita spoja väčšia, tým je väčšia hmotnosť. Z experimentu vieme, že 'ťažké' objekty sa správajú klasicky a inak to nie je ani v prípade Josephsonovho spoja. Aby sa prejavili kvantové vlastnosti musí byť rozdiel medzi kvantovými energetickými hladinami väčší ako kT. Ako uvidíme nižšie, relevantnou energetickou škálou, ktorá určuje vzdialenosť medzi energetickými hladinami Josephsonovho spoja, je geometrický priemer Josephsonovej a Coulombovej energie  $\sqrt{E_{\rm J}E_{\rm C}}$ .

Z lagranžiánu prejdeme ku klasickému hamiltoniánu, ktorý zapíšeme<br/>² cez počet Cooperových párov na spoji ${\cal N}$ 

$$H(N,\phi) = E_{\rm J} \left(\frac{E_{\rm C}}{E_{\rm J}}N^2 - \cos\phi - \frac{I_{\rm e}}{I_{\rm c}}\phi\right) \ . \tag{17.13}$$

Ku kvantovému hamiltoniánu prejdeme tak, že vo vzťahu (17.13) nahradíme počet Cooperových párovNoperátorom

$$\hat{H}(\phi) = E_J \left( -\alpha \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \cos \phi - \frac{I_{\rm e}}{I_{\rm c}} \phi \right) , \qquad (17.14)$$

kde  $\alpha = E_{\rm C}/E_{\rm J}$ . Tento hamiltonián je hamiltoniánom nelineárneho kvantového oscilátora, čo je dôležité, ak chceme využiť Josephsonov spoj ako efektívne dvojhladinový systém. Aby sme získali odhad energií zodpovedajúcich jednotlivým hladinám oscilátora, urobíme na začiatok priblíženie lineárneho oscilátora. Potenciálnu energiu spoja

$$U(\phi) = -\cos\phi - I_{\rm e}\phi/I_{\rm c} \tag{17.15}$$

rozložíme v blízkosti jej minima $\phi_0=\arcsin(I_{\rm e}/I_{\rm c})$ do Taylorovho radu, ponechajúc iba kvadratický a kubický člen:

$$U(\phi') = E_{\rm J} \frac{\cos \phi_0}{2} {\phi'}^2 - \frac{I_{\rm e}}{I_{\rm c}} \frac{{\phi'}^3}{6} , \qquad (17.16)$$

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Využijeme vzťah<br/>y $p = \partial \mathcal{L} / \partial \dot{\phi}, H = p \dot{\phi} - \mathcal{L}$ a vzťah $p = \hbar N$ , ktorý dostaneme z rovnice (17.9). Hamiltonián je však natoľko jednoduchý, že ho možno rovno 'uhádnuť' a preveriť, že dáva správne pohybové rovnice.
kde $\phi'=\phi-\phi_0$ je odchýlka od rovnovážnej polohy oscilátora. Je výhodné prejsť k novým zovše<br/>obecneným súradniciam

$$q = (\cos \phi_0 / 2\alpha)^{1/4} \phi' , \qquad (17.17)$$

v ktorých hamiltonián nadobúda známy tvar hamiltoniánu nelineárneho kvantového oscilátora

$$H = \hbar\omega_0 \left( -\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 - \beta q^3 \right)$$
(17.18)

s 'vlastnou'<sup>3</sup> frekvenciou  $\omega_0 \approx \sqrt{2E_{\rm C}E_{\rm J}\cos\phi_0}/\hbar = \omega_{\rm J}(1-(I_{\rm e}/I_{\rm c})^2)^{1/4}$ ,<sup>4</sup> kde $\omega_{\rm J}$ je plazmová frekvencia Josephsonovho spoja<sup>5</sup> a

$$\beta = \frac{I_{\rm e}}{6I_{\rm c}} \left(\frac{2\alpha}{\sqrt{1 - (I_{\rm e}/I_{\rm c})^2}}\right)^{3/4}$$

Pre typické parametre hliníkového Josephsonovho spoja s plochou 10  $\mu$ m<sup>2</sup> dostávame<sup>6</sup>  $E_{\rm J} = 10^2$  K a  $E_{\rm C} = 10^{-2}$  K,  $E_{\rm J}/E_{\rm C} \sim 10^4$ . Josephsonov spoj je vo fázovej limite a ani pri teplotách dosahovaných v rozpúšťacích refrigerátoroch  $T \approx 10$  mK neplatí, že  $E_{\rm C} \ll T$ . Napriek tomu je energia Josephsonovho spoja kvantovaná a vzdialenosť medzi hladinami oscilátora je ~ 1 K. Takýto Josephsonov spoj by sa mal pri teplotách 10 mK správať ako kvantový systém. Paradoxne, v prípade malých Josephsonových spojov  $E_{\rm C} > E_{\rm J}$  nie je prakticky možné dosiahnuť tak malú kapacitu, aby  $E_{\rm C} \gg kT$  a spoj sa bude správať klasicky. Dôvodom sú parazitné kapacity prívodných vodičov, ktoré pripájame ku spoju. Riešením tohto problému je vytvorenie malého ostrovčeka Cooperových párov (angl. *Cooper pair box*), ktorý je vytvorený z dvoch submikrónových Josephsonových spojov (obr. 17.1). Kapacita ostrovčeka  $C_{\rm o}$  je potom daná sériovým zapojením malej kapacity spoja  $C_{\rm J}$  a veľkej parazitnej kapacity prívodných vodičov  $C_{\rm p}$ ,  $1/C_{\rm o} = 1/C_{\rm J} + 1/C_{\rm p}$ , vďaka čomu môžme vplyv parazitných kapacít zanedbať, a takýto systém sa bude správať 'kvantovo'.

Vzdialenosti medzi prvými troma hladinami sú približne rovné: [6]

$$\omega_{10} \approx \omega_0 \left( 1 - \frac{5}{36} \frac{\hbar \omega_0}{U_{\rm B}} \right) ,$$
  
$$\omega_{21} \approx \omega_0 \left( 1 - \frac{5}{18} \frac{\hbar \omega_0}{U_{\rm B}} \right) , \qquad (17.19)$$

kde  $U_{\rm B} = 2\sqrt{2}E_{\rm J}(1 - I_{\rm e}/I_{\rm c})^{3/2}$  je výška potenciálovej bariéry (obr. 17.2).

469

11.2

 $<sup>^3</sup>$ frekvencia lineárneho oscilátora ak $\beta=0$ 

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup>Využili sme goniometrickú identitu  $\cos(\arcsin x) = \sqrt{1 - x^2}$ .

 $<sup>{}^{5}\</sup>omega_{\rm J}$  je uhlová frekvencia, t.j.  $\omega_{\rm J} = 2\pi f_{\rm J}$ . Keďže aj v literatúre sa vynecháva slovo uhlová, nebudeme toto slovo explicitne uvádzať. Platí pravidlo, že písmeno  $\omega$  je vyhradené pre uhlovú frekvenciu.

 $<sup>^6</sup>$ Energia sa v literatúre často uvádza v Kelvinoch, milivoltoch či gigahertzoch. Prepočet na Jouly sa ľahko urobí pomocou fundamentálnych konštánt: Boltzmanovej konštanty  $k_{\rm B}$ , elementárneho elektrického náboja e a Plankovej konštanty h.



Obr. 17.2: a)Potenciálová jama a kvantované energetické hladiny Josephsonovho spoja, cez ktorý preteká prúd. Zvyšovaním prúdu sa potencialová jama zmenšuje až pri dosiahnutí kritického prúdu zanikne úplne. Klasicky častica prestane byť lokalizovaná a padá po monotónne klesajúcom potenciáli, čo zodpovedá prepnutiu Josephsonovho spoja do napäťového stavu. Kvantovomechanicky však častica môže pretunelovať skôr, ako prúd dosiahne kritickú hodnotu. b) Tento kvantovomechanický jav je však zvyčajne maskovaný tepelnou aktiváciou prepnutia do napäťového stavu, keď častica dostane dostatočnú energiu na prekonanie potenciálovej bariéry od tepelných či iných fluktuácii. Pri nízkych teplotách a eliminovaní ostatných zdrojov fluktuácií je prepnutie do napäťového stavu spôsobené kvantovomechanickým tunelovaním.

### 17.3 Josephsonov spoj ako analóg atómu

Na Josephsonovom spoji môžeme pozorovať podobné kvantové javy, ktoré boli pozorované na atómoch, ako napríklad spektrálne čiary zodpovedajúce hladinám atómu či alfa rozpad atómového jadra z dôvodu kvantového tunelovania. Podobne ako v atóme, kde energetické hladiny atómu nie sú od seba rovnako vzdialené, tak aj energetické hladiny Josephsonovho spoja nezodpovedajú hladinám lineárneho oscilátora v dôsledku odklonu Josephsonovej potenciálnej energie od parabolického potenciálu. Odklon je tým väčší, čím je prúd  $I_e$  bližšie ku kritickému prúdu spoja, keďže parameter  $\beta$  určujúci nelineárnosť oscilátora rastie. Počet energetických hladín v potenciálovej jame sa zmenšuje a naviac začínajú byť rozmazané v dôsledku kvantového tunelovania. Charakteristický čas, za ktorý systém opustí energetickú hladinu lokalizovaného stavu v potenciálovej jame, je nepriamo úmerný frekvencii lineárneho oscilátora vynásobenej koeficientom prechodu D cez potenciálovú bariéru. V kváziklasickom priblížení

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{q_1}^{q_2} 2m\sqrt{U(q) - E} \, dq\right) \,, \tag{17.20}$$

kde  $q_1$  a  $q_2$  sú body obratu. Dosadením vzťahov (17.15) a  $E = \hbar \omega_p/2$  do rovnice (17.20) dostaneme rýchlosť tunelovania zo základnej energetickej hladiny

$$\Gamma_{\rm tun} \approx \frac{52\omega_0}{2\pi} \sqrt{\frac{U_B}{\hbar\omega_0}} \exp\left(-\frac{7.2U_{\rm B}}{\hbar\omega_0}\right) .$$
(17.21)

Systém môže opustiť základnú energetickú hladinu tiež tepelnou aktiváciou, ktorej rýchlosť je určená Boltzmanovým faktorom

$$\Gamma_{\rm tep} = \frac{\omega_0}{2\pi} \exp\left(-\frac{U_{\rm B}}{k_{\rm B}T}\right) \ . \tag{17.22}$$

Keďže rýchlosť prepnutia Josephsonovho spoja do napäťového stavu v dôsledku tunelovania nezávisí od teploty, bude existovať teplota  $T_{\rm p}$ , nad ktorou bude dominovať tepl<br/>ná aktivácia, t.j.  $\Gamma_{\rm tep} > \Gamma_{\rm tun}$ .  $T_{\rm p}$  odhadneme tak, že<br/> budeme žiadať, aby exponenciálne faktory boli v oboch prípadoch rovnaké

$$T_{\rm p} = \frac{\hbar}{k_{\rm B}} \frac{\omega_0}{7.2} \approx \frac{\hbar}{k_{\rm B}} \frac{\omega_{\rm J}}{2\pi} \left( 1 - \left(\frac{I_{\rm e}}{I_{\rm c}}\right)^2 \right)^{1/4} \,. \tag{17.23}$$

Pre typické hodnoty plazmovej frekvencie Josephsonových spojov $\omega_0=10^{11}$  Hz to zodpovedá teplote $T_{\rm p}\approx 100$  mK. Túto predpoveď kvantovej mechaniky možno experimentálne verifikovať meraním teplotnej závislosti prepínacieho prúdu $I_{\rm pr},$ t.j. prúdu $I_{\rm e}$ kedy sa Josephsonov spoj prepne do napäťového stavu.

Pri teplote absolútnej nuly by sa mal Josephsonov spoj prepnúť presne pri prúde  $I_{\rm e}~=~I_{\rm c}$ avšak v dôsledku kvantového tunelovania sa prepne skôr a naviac bude existovať určité pravdepodobnostné rozdelenie prepínacieho prúdu s nenulovou štandardnou odchýlkou. Ak aj budeme zvyšovať teplotu systému z absolútnej nuly až po $T_{\rm p}$ stredná hodnota prepínacieho prúdu ani štandardná odchýlka sa nebude meniť, lebo je určená kvantovým tunelovaním, ktoré je teplotne nezávislé. Až po zahriatí nad teplotu  $T_{\scriptscriptstyle\rm D}$ sa začne hodnota prepínacieho prúdu zmenšovať. Ešte výraznejšie



Obr. 17.3: Typická štandardná odchýlka pravdepodobnostného rozdelenia prepínacieho prúdu Josephsonovho spoja v kvantovom režime [8].

sa bude zväčšovať štandardná odchýlka<sup>7</sup>. Takto boli urobené prvé experimenty [7],

11.J

 $<sup>^7\</sup>mathrm{V}$ skutočnosti treba naozaj dokázať, že ide naozaj o kvantové tunelovanie, ktoré spôsobí saturáciu prepínacieho prúdu pri teplote  $T^*$ . Efektívna teplota Josephsonovho spoja sa v skutočnosti líši od teploty refrigerátora, ktorú udáva teplomer. Teplomer je makroskopický objekt, ktorý je veľmi dobre tepelne kotvený ku chladiacej platni refrigerátora. Avšak kvantový objekt musí byť veľmi dobre izolovaný od vonkajších objektov, včítane chladiacej platne. Súčasne je pripojený k meraciemu aparátu umiestnenému na izbovej teplote. Sústava filtrov musí zabezpečiť nízku efektívnu

ktoré demonštrovali makroskopické kvantové tunelovanie v Josephsonových spojoch (obr. 17.3). Pekný prehľadový članok, s podrobnosťami o meraní distribúcie prepínacieho prúdu, môže čitateľ nájsť v [8]. Neskôr bola urobená spektroskopia energetických hladín Josephsonovho spoja.

#### Spektroskopia energetických hladín Josephsonovho spoja

Ak na Josephsonov spoj základnom stave zasvietime monochromatickým mikrovlnným žiarením, ktorého frekvencia  $\omega_{\rm mw}$  zodpovedá vzdialenosti medzi energetickými hladinami  $\omega_{10} = (E_1 - E_0)/\hbar$ , pravdepodobnosť obsadenia vyššej energetickej hladiny  $P_1$  sa začne periodicky meniť. Frekvencia oscilácií pravdepodobnosti  $P_1$ , ktorá závisí lineárne od amplitúdy mikrovlnného žiarenia, sa nazýva Rabiho frekvenciou  $\Omega_{\rm R}$ . Keďže Josephsonov spoj je nelineárny,  $\omega_{01} > \omega_{12}, \omega_{21} \dots$  Ak zároveň platí, že  $\Omega_{\rm R} \ll \omega_{01} - \omega_{12}$  môžeme zanedbať vplyv vyších energetických hladín a obmedziť sa len na prvé dve hladiny<sup>8</sup>. Dvojhladinový systém je opísaný sústavou dvoch stacionárnych Schrödingerových rovníc

$$\hat{H}\Psi_0(q) = E_0\Psi_0(q) , 
\hat{H}\Psi_1(q) = E_1\Psi_1(q) .$$
(17.24)

Je vhodné zaviesť Diracov formalizmus

$$|0\rangle \equiv \Psi_0(q) , \qquad (17.25)$$
  

$$|1\rangle \equiv \Psi_1(q) , \qquad (17.25)$$
  

$$\langle m|n\rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_m(q) \Psi_n(q) dq = \delta_{m,n} ,$$

kde  $\Psi_n(q, t) = \Psi_n(q) \exp(-iE_n t/\hbar) = |n\rangle \exp(-iE_n t/\hbar)$ ,  $\delta_{m,n}$  je Kroneckerov symbol,  $\langle m |$  je tzv. bra a  $|n\rangle$  ket vektor. Čísla m a n reprezentujú základný (m, n = 0) alebo vzbudený stav (m, n = 1). Vo všeobecnosti môže byť systém aj v superpozícií týchto stavov

$$|\Psi(t)\rangle = c_0(t)|0\rangle + c_1(t)|1\rangle$$
, (17.26)

teplotu  $T_{\rm ef}$  kvantového systému a treba dokázať, že táto teplota je nižšia ako  $T_{\rm p}$ . To sa dá urobiť naložením vonkajšieho magnetického poľa, ktoré potlačí kritický prúd  $I_{\rm c}$  Josephsonovho spoja a tým aj  $T_{\rm p}$  (pozri vzťah (17.23). Ak je saturácia spôsobená inými ako kvantovými fluktuáciami, ktoré nie sú citlivé na magnetické pole, teplota prechodu do saturácie sa nezmení.

<sup>&</sup>lt;sup>8</sup>Túto podmienku môžeme veľmi hrubo zdôvodniť nasledujúcou úvahou:  $2\pi/\Omega_{\rm R}$  je charakteristický čas, za ktorý je energetická hladina obsadená. Z Heisenbergovho princípu neurčitosti vyplýva, že neurčitosť energie energetickej hladiny je daná vzťahom  $\hbar\Omega_{\rm R}$ . Vďaka tejto neurčitosti môže byť Josephsonov spoj excitovaný na tretiu hladinu ak  $\Omega_{\rm R} > \omega_{10} - \omega_{21}$ . Tu treba poznamenať, že rigorózne odvodenie je komplikovanejšie. V skutočnosti, bez dekoherencie (t.j. bez vplyvu vonkajšieho sveta, ktorý sa prejavuje napr. ako šum a ovplyvňuje dynamiku kvantového objektu) sa energetické hladiny Josephsonovho spoja rozštiepia v dôsledku interakcie medzi energetickými hladinami sprostredkovanej fotónmi mikrovlnného zdroja. Rozštiepenie je rovné práve  $\hbar\Omega_{\rm R}$ , ako bude ukázané nižšie.

spĺňajúc Schrödingerovu rovnicu

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle .$$
 (17.27)

Dosadením (17.26) do rovnice (17.27) a vynásobením zľava bra vektorom <br/>  $\langle 0|$  dostaneme rovnicu

$$c_0(t)H_{00} + c_1(t)H_{01} = i\hbar\dot{c}_0(t) , \qquad (17.28)$$

kde $\dot{c}_0\equiv dc_0(t)/dt$ a $H_{nm}\equiv \langle n|\hat{H}|m\rangle.$ Podobne vynásobením bra vektorom <br/>  $\langle 1|$ dostaneme druhú rovnicu

$$c_0(t)H_{10} + c_1(t)H_{11} = i\hbar\dot{c}_1(t) . \qquad (17.29)$$

Túto sústavu rovníc môzeme zapísať v maticovej forme

$$\hat{H}\begin{pmatrix}c_0\\c_1\end{pmatrix} = i\hbar\begin{pmatrix}\dot{c}_0\\\dot{c}_1\end{pmatrix},\qquad(17.30)$$

kde operátor $\hat{H}$ je teraz<br/>9 matica $2\times 2$ 

$$\hat{H} \equiv \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{pmatrix} .$$
 (17.31)

Aby sme určili prvky matice, potrebujeme zvoliť bázu. V našom prípade zvolíme

$$|0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} |1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}.$$
(17.32)

V tejto báze má matica  $\hat{H}$  diagonálny tvar

$$\hat{H} = \left(\begin{array}{cc} E_0 & 0\\ 0 & E_1 \end{array}\right) \ . \tag{17.33}$$

Ľubovoľnú maticu $2\times 2$ môžeme zapísať pomocou Pauliho matíc

$$\hat{\sigma}_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_3 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(17.34)

a jednotkovej matice $\hat{\sigma}_0.$ Maticu dvojhladinového systému môžeme zapísať ako

$$\hat{H} = \frac{E_0 + E_1}{2}\hat{\sigma}_0 - \Delta\hat{\sigma}_3 , \qquad (17.35)$$

 $<sup>^{9}</sup>$ Nebudeme meniť označenie a budeme používať rovnaké označenie aj pre maticovú formu operátora  $\hat{H},$ tak ako je to zaužívané v ostatnej literatúre.

kde  $\Delta \equiv (E_1 - E_0)/2$ . Člen s jednotkovou maticou nemusíme uvažovať, nakoľko zavisí od výberu nulovej energie a nemá žiadny vplyv na dynamiku systému. Josephsonov spoj, podobne ako ľubovoľný dvojhladinový systém, môzeme teda popísať pseudo-spinovým hamiltoniánom, pomocou Pauliho matíc. Chovanie Josephsonovho spoja je tak ekvivalentné chovaniu spinu v magnetickom poli naloženom v smere osi  $x_3$ . Ak by sme spin v čase t = 0 pripravili v smere osi  $x_1$ , spin by začal precesovať okolo naloženého magnetického poľa v smere osi  $x_3$ , pričom uhlová rýchlosť precesie je daná vzťahom

$$\Omega_{\rm prec} = 2\Delta/\hbar \ . \tag{17.36}$$

Stav Josephsonovho spoja môžeme reprezentovať vektorom, ktorého koniec sa pohybuje po tzv. Blochovej sfére<sup>10</sup>. Treba si však uvedomiť, že analógia medzi Josephsonovým spojom a spinom je na úrovni matematického opisu, obidva systémy sú opísané rovnakou sústavou dvoch lineárnych diferenciálnych rovníc. V žiadnom prípade to neznamená, že ak na Josephsonov spoj naložíme jednosmerné magnetické pole, tak jeho stav bude reprezentovaný precesujúcim vektorom. Na druhej strane správanie sa dvoch systémov opísaných rovnakými diferenciálnymi rovnicami bude zákonite rovnaké. Ak chceme, aby stavový vektor Josephsonovho spoja precesoval, musíme nájsť parameter, ktorý by bol analógom magnetického poľa pre spin. Jedným z parametrov, ktoré vstupujú do hamiltoniánu Josephsonovho spoja (17.14) je prúd pretekajúci Josephsonovým spojom  $I_e$ . Ak cez spoj necháme tiecť okrem veľkého jednosmerného prúdu  $I_{dc}$  aj malý dodatočný prúd<sup>11</sup>  $I_{mw}$ , t.j.  $I_e = I_{dc} + I_{mw}$ , bude celkový hamiltonián

$$H = H_0 + H_{rf} = \begin{pmatrix} E_0 & 0\\ 0 & E_1 \end{pmatrix} + E_J \begin{pmatrix} \langle 0|\varphi|0\rangle & \langle 0|\varphi|1\rangle\\ \langle 1|\varphi|0\rangle & \langle 1|\varphi|1\rangle \end{pmatrix} \frac{I_{mw}}{I_c} , \qquad (17.37)$$

kde  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$  sú vlnové funkcie zodpovedajúce prvým dvom hladinám nelineárneho oscilátora popísaného hamiltoniánom (17.18). Diagonálne prvky  $H_{mw}$  môžeme určiť v prvom ráde poruchovej teórie. Predpokladajme, že  $I_{mw} << I_{dc}$ . Potom platí

$$H_{\rm mw,nn} = E_{\rm n}(I_{\rm rf}) - E_n(I_{\rm rf} = 0) , \qquad (17.38)$$

kde  $E_n(I_{\rm rf})$  sú vlastné energie hamiltoniánu  $H_0$ , avšak pre prúd  $I_{\rm e} = I_{\rm dc} + I_{\rm rf}$ . Nediagonálne prvky určíme zo vzťahu (17.37) tak, že budeme vlnové funkcie aproximovať vlnovými funkciami lineárneho oscilátora  $|0\rangle$  a  $|1\rangle$ . Vyjadrením  $\varphi$  pomocou zovšeobecnenej súradnice q, t.j.  $\varphi = (2\alpha/\cos\varphi_0)^{1/4}q + \varphi_0$  a využitím vzťahov pre lineárny oscilátor

$$\langle 0|q|1\rangle = 1/\sqrt{2} \langle 1|q|0\rangle = 1/\sqrt{2}$$

<sup>&</sup>lt;sup>10</sup>Používa sa tiež výraz Riemannova resp. Poincarého sféra.

 $<sup>^{11}</sup>$ Indexom mw od anglického microwave-mikrovlný už teraz naznačujeme, že pôjde o malý mikrovlnný prúd. Nateraz však uvažujeme malý jednosmerný prúd.

dostaneme malú poruchu voči pôvodnému hamiltoniánu

$$H_{mw} = \begin{pmatrix} \frac{\partial E_0}{\partial I_{mw}} & (\Phi_0/2\pi)\sqrt{E_C/\hbar\omega_0} \\ (\Phi_0/2\pi)\sqrt{E_C/\hbar\omega_0} & \frac{\partial E_1}{\partial I_{mw}} \end{pmatrix} I_{mw} .$$
(17.39)

Celkový Hamiltonián tak bude mať komplikovanejší tvar

$$\hat{H} = (\Omega_3 - \Delta)\hat{\sigma}_3 + \Omega_1\hat{\sigma}_1 , \qquad (17.40)$$

kde $\Omega_1 = \sqrt{\hbar^2/4\Delta C} I_{\rm mw}$  a $\Omega_3 = \gamma \sqrt{\hbar^2/4\Delta C} I_{\rm mw}$ . Parameter $\gamma = \sqrt{2\Delta/3U_{\rm B}}$  je pre typické parametre, keď sú v jame len tri až štyri energetické hladiny, približne rovný 1/4. Vidíme, že malá zmena  $I_{\rm e}$  alebo $I_{\rm c}$  pôsobí na Josephsonov spoj ako naloženie dodatočného magnetického poľa na spin v smere osi  $x_1$  a $x_3$ . Vďaka tomu môžeme manipulovať so stavom Josephsonovho spoja analogicky ako so spinom. Naša analýza je dobrá, len ak je zmena malá. Avšak v prípade rezonancie môžeme urobiť  $I_{\rm mw}$  tak malým, že toto priblíženie je dostatočné. Rezonanciu dosiahneme tak, že namiesto malého jednosmerného prúdu  $I_{\rm mw}$  budeme spoj budiť harmonickým signálom s frekvenciou  $\omega$ . Hamiltonián Josephsonovho spoja bude časovo závislý

$$\hat{H} = (-\Delta + \Omega_3 \cos \omega t)\hat{\sigma}_3 + (\Omega_1 \cos \omega t)\hat{\sigma}_1 . \qquad (17.41)$$

Ak  $\Omega_3 \ll \Delta$ , časovo závislý člen pri operátore  $\hat{\sigma}_3$  spôsobí len malé periodické oscilácie energetických hladín, ktoré zanedbáme. Člen pri  $\hat{\sigma}_1$  spôsobí prechody medzi hladinami, ktoré majú rezonančný charakter. Pre  $\Omega_1 = \Omega_3 = 0$  riešenie hamiltoniánu poznáme

$$|\Psi(t)\rangle = c_0 e^{i\frac{\Delta}{\hbar}t}|0\rangle + c_1 e^{-i\frac{\Delta}{\hbar}t}|1\rangle . \qquad (17.42)$$

Po zapnutí harmonického budenia očakávame, že sa stav systému bude meniť v čase, t.j. konštanty  $c_0(t)$ ,  $c_1(t)$  budú funkciami času. Dosadením (17.42) do časovej Schrödingerovej rovnice dostaneme

$$\begin{pmatrix} 0 & \Omega_1 \cos \omega t \\ \Omega_1 \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0(t)e^{+i\frac{\Delta}{h}t} \\ c_1(t)e^{-i\frac{\Delta}{h}t} \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \dot{c}_0(t)e^{+i\frac{\Delta}{h}t} \\ \dot{c}_1(t)e^{-i\frac{\Delta}{h}t} \end{pmatrix}$$
(17.43)

Táto sústava rovníc môže byť prepísaná pomocou exponenciálnych komplexných funkcií

$$\Omega_1 \left( \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right) e^{-i2\Delta t/\hbar} c_1(t) = i\hbar \dot{c}_0(t)$$
  
$$\Omega_1 \left( \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} \right) e^{+i2\Delta t/\hbar} c_0(t) = i\hbar \dot{c}_1(t)$$
(17.44)

V rezonancii, t.j. ak $\omega=2\Delta/\hbar,$  sústava prejde na jednoduchý tvar

$$\frac{\Omega_1}{2}c_1(t) = i\hbar\dot{c}_0(t) ,$$
  
$$\frac{\Omega_1}{2}c_0(t) = i\hbar\dot{c}_1(t) , \qquad (17.45)$$

1	7	F
4	1	¢

ak zanedbáme rýchlo oscilujúce člen<br/>y $\exp(\pm i4\Delta t/\hbar)^{12}.$ Rovnice 17.45 môžeme prepísať pomocou hamiltoniánu

$$H^R = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\Omega_1}{2} \\ \frac{\Omega_1}{2} & 0 \end{pmatrix}$$
(17.46)

ktorý v rotujúcej súradnicovej sústave, v ktorej os rotácie je  $x_3^R \equiv x_3$ , okolo ktorej rotujú súradnice  $x_1^R, x_2^R$  s Larmorovou frekvenciou  $2\Delta/\hbar$ , nezávisí od času<sup>13</sup>. Vlnová funkcia v rotujúcej sústave

$$\Psi^{R}(t) = \begin{pmatrix} c_{0}(t) \\ c_{1}(t) \end{pmatrix}$$
(17.47)

spĺňa Schrödingerovu rovnicu

$$H^{R}\Psi^{R}(t) = i\hbar \frac{\partial \Psi^{R}}{\partial t} . \qquad (17.48)$$

Riešením tejto sústavy diferenciálnych rovníc sú funkcie

$$c_0(t) = c_- e^{-i\Omega_1 t/2\hbar} + c_+ e^{+i\Omega_1 t/2\hbar} ,$$
  

$$c_1(t) = c_- e^{-i\Omega_1 t/2\hbar} - c_+ e^{+i\Omega_1 t/2\hbar} .$$
(17.49)

Konštanty  $c_-$  a  $c_+$  musia byť určené z počiatočných podmienok. Ak v čase t = 0 bola základná hladina obsadená, t.j.  $c_0(t = 0) = 1$ , potom  $c_- = c_+ = 1/\sqrt{2}$  a pravdepodobnosti obsadenia základnej a excitovanej hladiny periodicky oscilujú

$$P_g = c_0(t)c_0^*(t) = \cos^2(\omega_{\rm R}t/2) = \frac{1}{2} \left(1 + \cos(\omega_{\rm R}t)\right) ,$$
  

$$P_e = c_1(t)c_1^*(t) = \sin^2(\omega_{\rm R}t/2) = \frac{1}{2} \left(1 - \cos(\omega_{\rm R}t)\right) , \qquad (17.50)$$

kde  $\omega_R = \Omega_1/h$  je tzv. Rabiho frekvencia.

Keďže ako spin, tak Josephsonov spoj v dvojhladinovom priblížení môžu pri meraní nadobúdať len dva diskrétne stavy<sup>14</sup> nazývame takéto systémy tiež kvantovým qubitom (angl.*quantum bit*). Qubit, podobne ako bit, môže byť použitý ako základná stavebná jednotka kvantového počítača.

Ostáva nám ešte nájsť analóg Sternového-Gerlachového aparátu pre Josephsonove spoje, ktorý by meral, či je spoj v základnom alebo vzbudenom stave. V skutočnosti žiadny aparát nie je treba. Stačí cez spoj pustiť mikrovlnný prúd s frekvenciou, ktorá zodpovedá prechodom medzi prvou a druhou hladinou. Vďaka nelinearite je  $\omega_{10} - \omega_{21} \approx 0.03\omega_{10}$ , takže ak je Josephsonov spoj v základnom stave, mikrovlný prúd s frekvenciou  $\omega_{21}$  nespôsobí prechody na vyššie hladiny.

 $<sup>^{12}\</sup>mathrm{T\acute{a}to}$  aproximácia sa nazýva rotating wave approximation (RWA).

 $<sup>^{13}</sup>$ Model rotujúcej sústavy je fyzikálne podrobnejšie vysvetlený v časti o meraní relaxačných a čistých defázovacích časov na konkrétnom prípade Ramseyho interferometrie. Nateraz sa uspokojíme s matematickým riešením.

<sup>&</sup>lt;sup>14</sup>priemet spinu Sternovým-Gerlachovým aparátom

Ak je však Josephsonov spoj na prvej excitovanej hladine, mikrovlný prúd spôsobí prechod na tretiu hladinu, kde je pravdepodobnosť vytunelovania systému z potenciálovej jamy veľká a Josephsonov spoj sa prepne do napäťového stavu, ktorý sa ľahko zmeria (obr. 17.5). Samotné meranie Rabiho oscilácií potom prebieha nasledovným spôsobom. Josephsonov spoj je na



Obr. 17.4: Typické Rabiho oscilácie merané na Josephsonových spojoch

začiatku (v čase t=0) v základnom stave  $|0\rangle$ . Cez spoj sa pustí mikrovlný prúd



Obr. 17.5: Po excitovaní častice reprezentujúcej stav Josephsonovho spoja na tretiu hladinu, častica 'vytuneluje' z potenciálovej jamy a Josephsonov spoj sa prepne do napäťového stavu. Napäťový stav sa potom jednoducho detekuje rýchlym voltmetrom.

s frekvenciou  $\omega_{01}$  po dobu  $\Delta t$ . Potom sa zmení frekvencia z  $\omega_{10}$  na  $\omega_{21}$  a zväčší sa amplitúda  $I_{mw}$  tak, aby doba excitácie na druhú hladinu bola dostatočne krátka (chceme v čo najkratšom čase, «  $\Omega_{\rm R}^{-1}$ , zmerať stav, v ktorom sa systém nachádza). Ak bol Josephsonov spoj vo vzbudenom stave  $|1\rangle$ , prepne sa do napäťového stavu. Ak nie, spoj zostane v základnom stave. Ak meranie zopakujeme veľa krát, uvidíme, že pravdepodobnosť prepnutia Josephsonovho spoja do napäťového stavu závisí od doby  $\Delta t$  a amplitúdy mikrovlného prúdu v súlade s predpoveďou kvantovej mechaniky. V skutočnosti sa Rabiho oscilácie budú postupne tlmiť v dôsledku dekoherencie spôsobenej šumami či vplyvom okolia. Napríklad, zdroj jednosmerného prúdu  $I_{\rm dc}$  nie je dokonalý, čo sa prejaví fluktuáciami prúdu. Tie spôsobia fluktuácie frekvencie  $\omega_{10}$ , takže po určitom čase stratíme informáciu o fáze a pravdepodobnosť, že sa systém nachádza v základnom resp. vzbudenom stave, bude rovnaká,  $P_g = P_e = 1/2.$ 

## 17.4 Ovládanie qubitu a kvantová tomografia

V predchádzajúcom paragrafe sme ukázali, že Josephsonov spoj je analógom spinu. Stav spinu je určený jednotkovým stavovým vektorom na trojrozmernej Blochovej sfére (obr. 17.6). Keďže na jednoznačné určenie polohy jednotkového vektora po-

trebujeme v sférických súradnici<br/>ach 2 reálne čísla $\Theta$ a $\varphi$ je výhodné zapísať stavový vektor spinu v tv<br/>are

$$|\Psi\rangle = \cos\frac{\Theta}{2}|0\rangle + e^{i\varphi}\sin\frac{\Theta}{2}|1\rangle . \qquad (17.51)$$

Ak stav spinu (qubitu) nepoznáme, musíme zvoliť určitú stratégiu merania na určenie konštánt $\Theta$ a $\varphi,$ ktorá sa nazýva kvantová tomografia.

V tejto kapitole uvedieme len základnú myšlienku a nebudeme sa venovať zložitejším problémom kvantovej tomografie, ktoré môže čitateľ nájsť napr. v [9, 10]. Prvý problém, s ktorým sa pri určovaní stavu spinu musíme potýkať, je deštrukcia stavu spinu pri meraní. Výsledkom merania v báze  $|0\rangle, |1\rangle$  je digitálna hodnota 0,1, napriek tomu, že stav spinu môže nadobúdať 'nekonečne' veľa hodnôt vvjadrených reálnymi číslami  $\Theta$  a  $\varphi$ . Jediným spôsobom ako určiť stav spinu, je mať k dispozícií 'nekonečnú' množinu rovnako pripravených spinov. Experimentálne nepotrebujeme 'nekonečne' veľa spinov, stačí ak spin pripravíme v istom stave, zmeriame ho a potom ho opäť pripravíme v tom istom stave a zmeriame atd<sup>15</sup>. Experimentálne tiež nepotrebujeme vykonať nekonečne veľa meraní, ktoré by boli potrebné na presné



Obr. 17.6: Blochová sféra. Body na sfére zodpovedajú jednotlivým kvantovým stavom. Severný pól znázorňuje stav $|0\rangle$ , južný pól $|1\rangle$ , priesečníky kladných osí s rovníkom  $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}, (|0\rangle + i|1\rangle)/\sqrt{2}$ 

určenie stavu spinu. Presnosť každého experimentálneho meracieho zariadenia je ohraničená a nemá preto zmysel sa snažiť určiť stav spinu presnejšie zvyšovaním počtu meraní, čo by bolo možné v prípade ideálneho meracieho prístroja. Aby sme mohli určiť stav spinu, musíme mať možnosť s ním manipulovať. Ako sme ukázali, to je možné priložením magnetického poľa v prípade spinu resp. púšťaním mikrovlného prúdu cez Josephsonov spoj. Presunutie stavového vektora na Blochovej sfére na ľubovoľný iný bod Blochovej sféry vyžaduje aplikovanie pulzov magnetického poľa resp. mikrovlného poľa v správnej fáze. Inými slovami, fáza spinu  $\varphi$ a fáza mikrovlného prúdu budú hrať dôležitú úlohu pri určovaní stavu Josephsonovho spoja. Ak cez spoj pustíme mikrovlnný prúd

$$I_{\rm mw} = I_{\rm mw0}\cos(\omega t + \varphi_{\rm mw}) = I_{\rm mwc}\cos\omega t + I_{\rm mws}\sin\omega t , \qquad (17.52)$$

<sup>&</sup>lt;sup>15</sup>Niekto môže namietnuť, že ak pripravíme spin v danom stave už ho nemusíme merať, lebo jeho stav poznáme. To však nie je pravda. Aj spustenie klasického počítača je nič iné ako príprava výstupného registra do určitého stavu aplikovaním mnohých logických operácii. Výsledkom je stav, ktorý až do vyčítania registra nepoznáme a to napriek tomu, že sme ho pripravili. Samotné vyčítanie výstupného registra je vlastne meranie, ktoré však na rozdiel od merania kvantového systému nie je deštruktívne.

zopakovaním predchádzajúceho postupu<sup>16</sup>, kde sme pre jednoduchosť uvažovali prípad  $\varphi_{\rm mw} = 0$ , dostaneme v RWA priblížení (maticový zápis ľavej strany vzťahov (17.46))

$$\hat{H}^{\mathrm{R}} = \left(\frac{\Omega_1}{2}\hat{\sigma}_1 + \frac{\Omega_2}{2}\hat{\sigma}_2 + \frac{\Omega_3}{2}\hat{\sigma}_3\right) = \frac{\mathbf{\Omega}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}}{2} , \qquad (17.53)$$

kde  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \equiv (\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3)$  je vektor operátorov a  $\boldsymbol{\Omega} \equiv (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$  je vektor so zložkami<sup>17</sup>

$$\Omega_1 = E_{\rm J} \sqrt{\frac{E_{\rm C}}{\hbar\omega_0}} \frac{I_{\rm mwc}}{I_{\rm c}} , \ \Omega_2 = E_{\rm J} \sqrt{\frac{E_{\rm C}}{\hbar\omega_0}} \frac{I_{\rm mws}}{I_{\rm c}} , \ \Omega_3 = 0 .$$
 (17.54)

Časový vývoj stavového vektora dostaneme z časovej Schrödingerovej rovnice

$$|\Psi(t+\Delta t)\rangle = e^{-i\hat{H}^{\mathbf{R}}\Delta t/\hbar}|\Psi(t)\rangle . \qquad (17.55)$$

Ak zadefinujeme vektor

$$\boldsymbol{b} \equiv \boldsymbol{\Omega} \Delta t / \hbar \ , \tag{17.56}$$

môžeme vzťah (17.55) prepísať v tvare

$$|\Psi(t+\Delta t)\rangle = e^{-i\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{b}/2}|\Psi(t)\rangle . \qquad (17.57)$$

Mikrovlný prúdový impulz so šírkou <br/>  $\Delta t$ zmení stavový vektor Josephsonovho spoja<br/>  $^{18}$ 

$$|\Psi(t+\Delta t)\rangle = \left(\hat{\sigma}_0 \cos\frac{|\mathbf{b}|}{2} - i\frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{b}|} \sin\frac{|\mathbf{b}|}{2}\right)|\Psi(t)\rangle .$$
(17.58)

Pomocou šírky impulzu a amplitúd  $I_{\rm mwc}$ ,  $I_{\rm mws}$  môžeme pootočiť stavový vektor o ľubovoľný uhol okolo osí  $x_1, x_2, x_3$ . Všeobecný stav (17.51) dostaneme zo základného stavu  $|0\rangle$  pootočením o uhly  $\Theta$  a  $\varphi$  čo môžeme vyjadriť pomocou rotačných matíc

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\Theta}{2} & -\sin\frac{\Theta}{2}\\ \sin\frac{\Theta}{2} & \cos\frac{\Theta}{2} \end{pmatrix} |0\rangle .$$
(17.59)

Porovnaním vzťahov (17.58) a (17.59) dostávame podmienky pre vektor  $\boldsymbol{b}$ , ktoré musia byť splnené, ak chceme stavový vektor  $|0\rangle$  potočiť o uhly  $\Theta$  a  $\varphi$ :

$$|\mathbf{b}| = \Theta$$
,  $b_x = -\Theta \sin \varphi$ ,  $b_y = \Theta \cos \varphi$ . (17.60)

Ak vektor  $|0\rangle$  pootočíme o uhol  $\Theta = \pi/2$ , hovoríme o  $\pi/2$  impulze. Vektor môžeme pootočiť okolo osi  $x_1$  resp.  $x_2$  čomu zodpovedá vektor  $\vec{b} = (\pi/2, 0, 0)$  resp.

<sup>&</sup>lt;sup>16</sup>Využijeme vzťah ( $\Omega_1 \cos \omega t + \Omega_2 \sin \omega t$ ) =  $\Omega_1(\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t))/2 - i\Omega_2(\exp(i\omega t) - \exp(-i\omega t))/2$ . <sup>17</sup>Takýto vektorový zápis je elegantný, ľahko sa pamätá a umožňuje zápis pohybovej rovnice

 $<sup>^{17}</sup>$ Takýto vektorový zápis je elegantný, ľahko sa pamätá a umožňuje zápis pohybovej rovnice analogickej pohybovej rovnici klasického magnetického momentu, ako ukážeme nižšie. Napriek 'sofistikovanému' zápisu ide stále o maticu 2 × 2.

 $<sup>^{18}</sup>$ Využili sme vzťah  $\{\hat{\sigma}_j, \hat{\sigma}_k\} \equiv \hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k + \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_j = 2\hat{\sigma}_0 \delta_{j,k}$ a postup ako pri odvádzaní známej identity  $e^{i\beta\hat{\sigma}_j} = \hat{\sigma}_0 \cos\beta + i\hat{\sigma}_j \sin\beta$ .

 $\vec{b} = (0, \pi/2, 0)$ . Experimentálne sa takýto impulz realizuje vhodným nastavením amplitúdy mikrovlného prúdu a dĺžky trvania impulzu (vzťah (17.56)).  $\pi/2$  pulzu okolo osi  $x_j$  zodpovedá unitárna transformácia

$$U_{x_j,\pi/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{\sigma}_0 - i\hat{\sigma}_j \right) , \qquad (17.61)$$

odkiaľ dostávame

$$U_{x_1,\pi/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix} , \ U_{x_2,\pi/2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} .$$
(17.62)

Predĺžením impulzu na dvojnásobok (dva  $\pi/2$  impulzy dostaneme tzv.  $\pi$  impulz, ktorým dosiahneme preklopenie spinu, t.j.  $|0\rangle \rightarrow |1\rangle$  ( $|1\rangle \rightarrow |0\rangle$ ). Vo všeobecnosti pootočeniu o uhol  $\Theta$  okolo osi  $x_i$  zodpovedá unitárna transformácia

$$U_{x_j,\Theta} = \left(\hat{\sigma}_0 \cos\frac{\Theta}{2} - i\sigma_j \sin\frac{\Theta}{2}\right) . \tag{17.63}$$

Aplikovanim dvoch  $\pi/2$  impulzov, z ktorých druhý je časovo oneskorený o čas  $\tau$ môžeme určiť dekoherenciu qubitu. Bez dekoherencie dva  $\pi/2$  impulzy spôsobia preklopenie spinu bez ohľadu na čas  $\tau$ . Avšak v dôsledku šumov začne poloha spinu fluktuovať a spin začne 'putovať' po Blochovej sfére ako 'opitý námorník'<sup>19</sup>. Bude existovať určitá charakteristická doba, ktorú nazývame dekoherenčnou dobou  $\tau_D$ , keď už nebudeme vedieť povedať, kde sa spin na Blochovej sfére nachádza, pretože sa môže nachádzať na ľubovoľnom bode Blochovej sféry. Naviac môže dochádzať k disipácii energie, keďže spin interaguje s okolím. V takom prípade už stav spinu nie je čistým stavom a nemôže byť reprezentovaný polohou vektora na Blochovej sfére. Pri zmiešanom stave musíme prejsť k opisu pomocou matice hustoty  $\hat{\rho}$ , ktorá je definovaná ako

$$\hat{\rho} \equiv \sum_{i} \rho_{i} |i\rangle \langle i| , \qquad (17.64)$$

pričom časový vývoj matice hustoty sa dá odvodiť zo Schrödingerovej rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t} = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H} . \qquad (17.65)$$

V prípade, že je spin v čistom kvantovom stave

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$$
, (17.66)

čo je pre dvojhladinový systém Hermitovská matica  $2 \times 2$ , kde jej diagonálne členy  $\rho_{00}$ ,  $\rho_{11}$  určujú pravdepodobnosť obsadenia bázových stavov  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$ . Keďže ľubovo-ľná matica  $2 \times 2$  môže byť zapísaná pomocou jednotkovej a Pauliho matíc, môžeme tak zapísať aj maticu hustoty

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left( \hat{\sigma}_0 + \rho_1 \hat{\sigma}_1 + \rho_2 \hat{\sigma}_2 + \rho_3 \hat{\sigma}_3 \right) = \frac{1}{2} \left( \hat{\sigma}_0 + \boldsymbol{\rho} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right) , \qquad (17.67)$$

 $<sup>^{19} \</sup>mathrm{Pozri}$ Feynmanove prednášky z fyziky 1.

kde  $\rho \equiv (\rho_1, \rho_2, \rho_3)$  je v prípade čistého stavu jednotkový vektor reálnych čísel. Ten je vhodné zapísať v sférických súradniciach ako

$$\boldsymbol{\rho} = (\sin\Theta\cos\varphi, \sin\Theta\sin\varphi, \cos\Theta) \ . \tag{17.68}$$

Kvantový stav ľubovoľného dvojhladinového systému je teda určený maticou hustoty, ktorá môže byť vyjadrená pomocou jednotkového vektora  $\rho$ . Stav dvojhladinového systému môžeme vizualizovať ako polohu vektora  $\rho$  na Blochovej sfére ktorej severný a južný pól zodpovedajú bázovým stavom  $|0\rangle$ ,  $|1\rangle$ . Pohyb vektora  $\rho$  spĺňa pohybovú rovnicu (17.65).

Ak prepíšeme hamiltonián  $\hat{H}$ pomocou Pauliho matíc

$$\hat{H} = H_0 \hat{\sigma}_0 + H_1 \hat{\sigma}_1 + H_2 \hat{\sigma}_2 + H_3 \hat{\sigma}_3 , \qquad (17.69)$$

dosadíme ho spolu so vzťahom (17.67) do rovnice (17.65), dostaneme s využitím komutačných vzťahov pre Pauliho matice rovnicu

$$\frac{\partial \boldsymbol{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} (\boldsymbol{H} \times \boldsymbol{\rho}) , \qquad (17.70)$$

ktorá je formálne rovnaká ako pohybová rovnica magnetického momentu  $\rho$  v magnetickom poli  $\mathbf{H} \equiv (H_1, H_2, H_3)$ . Keďže časový vývoj strednej hodnoty pozorovateľnej veličiny A, ktorej je priradený operátor  $\hat{A}$ , sa dá vyjadriť pomocou matice hustoty

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \text{Tr}\{\hat{\rho}(t)\hat{A}\}, \qquad (17.71)$$

bude dynamika pozorovateľnej A analógiou dynamiky magnetického momentu v magnetickom poli. V prípade merania priemetu magnetického momentu spinu v smere osi  $x_j$  je tejto pozorovateľnej priradený operátor

$$\hat{\mu}_j = \mu_{\rm B} \hat{\sigma}_j \ , \tag{17.72}$$

kde  $\mu_{\rm B}$  je Bohrov magnetón. Dosadením (17.72) do (17.71) dostávame

$$\langle \mu_j \rangle = \mu_B \rho_j \,\,, \tag{17.73}$$

čo môžeme prepísať vo vektorovej forme

$$\langle \boldsymbol{\mu}(t) \rangle = \mu_B \boldsymbol{\rho}(t) \ . \tag{17.74}$$

Vidíme, že stredná hodnota magnetického momentu vypočítaná vo formalizme kvantovej mechaniky dáva klasický vzťah pre pohyb magnetického momentu v magnetickom poli. To nám umožňuje vysvetliť správanie sa ľubovoľného dvojhladinového systému na príklade pohybu klasického magnetického momentu v magnetickom poli. Stačí len urobiť priradenie: vektor matice hustoty  $\rightarrow$  magnetický moment, zložky hamiltoniánu vyjadreného pomocou Pauliho matíc  $\rightarrow$  efektívne

magnetické pole. Treba mať však na pamäti, že v prípade merania jedného kvantového systému je výsledkom merania dvojhladinového systému hodnota  $|0\rangle$  alebo  $|1\rangle$ , čo na príklade spinu zodpovedá dvom možným hodnotám magnetického momentu  $\pm \mu_B$ . Stredná hodnota však môže nadobúdať ľubovoľnú hodnotu z intervalu  $(-\mu_B, \mu_B)$ . Tú môžeme merať, len ak meriame mnoho kvantových objektov naraz. Príkladom je meranie magnetického momentu makroskopickej vzorky, ktorá sa skladá z  $N_A \sim 10^{23}$  spinov. Výsledkom merania je stredná hodnota magnetického momentu spinu do bázy meracieho prístroja, ktorú vieme predpovedať z rovníc (17.74) a (17.70). Zápis pomocou matice hustoty nám umožňuje vypočítať strednú hodnotu magnetického momentu aj pri nenulovej teplote, alebo za prítomnosti disipácie. Ak je systém v tepelnej rovnováhe s okolitým prostredím pri teplote T matica hustoty dvojhladinového systému v energetickej báze s hamiltoniánom

$$H = \left(\begin{array}{cc} -\Delta & 0\\ 0 & \Delta \end{array}\right)$$

spĺňa Boltzmanovo rozdelenie populácie hladín

$$\hat{\rho}_T = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{-\Delta/kT} & 0\\ 0 & e^{\Delta/kT} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_0 + \rho_{T3}\hat{\sigma}_3 , \qquad (17.75)$$

kde $Z=e^{-\Delta/kT}+e^{\Delta/kT}$ je partičná suma a

 $\rho_{T3} = (\rho_{T11} - \rho_{T22})/2 = -(1/2) \tanh(\Delta/kT)$ . Vo všeobecnosti je dvojhladinový systém v čistom stave charakterizovaný maticou hustoty (17.67) s pohybovou rovnicou (17.65) ktorú môžeme prepísať na sústavu dvoch rovníc

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} = 0 , \qquad (17.76)$$

$$\frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} = i \frac{2\Delta}{\hbar} \rho_{12} . \qquad (17.77)$$

Bloch fenomenologicky zaviedol dva charakteristické časy  $T_1$  a  $T_2$ , za ktoré sa systém  $\rho_3$  a  $\rho_{12}$  dostane do tepelne rovnovážneho stavu (17.75),

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} = -\frac{1}{T_1} (\rho_3 - \rho_{T3}) , \qquad (17.78)$$

$$\frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} = i \frac{2\Delta}{\hbar} \rho_{12} - \frac{1}{T_2} \rho_{12} , \qquad (17.79)$$

čo sú známe Blochove-Redfieldove rovnice. Fenomenologické zavedenie časov  $T_1$  a  $T_2$  odráža skutočnosť, že zavedenie disipatívnych procesov do kvantovej mechaniky je zložitý problém. Boli vypracované niektoré modely, ktoré umožňujú vypočítať časy  $T_1$  a  $T_2$ . Najznámejší je Caldeirov-Leggettov model, v ktorom spin interaguje s prostredím, ktoré je modelované ako nekonečná množina lineárnych oscilátorov v tepelnej rovnováhe. Celkový hamiltonián takéhoto systému je

$$\hat{H} = -\Delta\hat{\sigma}_3 + \sum_j (\lambda_{\parallel j}\sigma_3 + \lambda_{j\perp}\sigma_{\perp})(a_j + a_j^+) + \sum_j \hbar\omega_j \left(a_j^+ a_j + \frac{1}{2}\right) , \quad (17.80)$$

kde  $\lambda_{j\parallel}$  a  $\lambda_{j\perp}$  sú väzbové energie *j*-teho oscilátora so spinom v smere osi  $x_3$  a v smere kolmom na os  $x_3$ . V dôsledku fluktuácií oscilátorov (kvantových, tepelných, 1/f šumov a pod.), ktoré môžme charakterizovať spektrálnou hustotou  $S_f(\omega)$  bude dochádzať k relaxácii a defázovaniu. Pri relaxácii dochádza k výmene energie medzi spinom a prostredím tak, že spin sa dostane do stavu termodynamickej rovnováhy s prostredím. t.j. pravdepodobnosť obsadenia hladín je daná Boltzmanovou rozdeľovacou funkciou. Za relaxáciu je zodpovedný transverzálny väzbový člen (nediagonálne členy v hamiltoniáne), nakoľko len ten spôsobuje prechody medzi hladinami. Longitudinálny väzbový člen komutuje s hamiltoniánom spinu a preto 'len' mení vzdialenosť medzi hladinami. To však spôsobuje zmenu fázy. Predstavme si precesujúci spin s uhlovou frekvenciou  $2\Delta/\hbar$ . Fáza  $\varphi(t) = 2\Delta t/\hbar$ . Ak vzdialenosť medzi hladinami fluktuuje okolo strednej hodnoty  $\Delta$  veľmi pomaly počas jednej precesie spinu je vhodné fázu zapísať ako  $\varphi(t) = 2\Delta t/\hbar + \delta\varphi(t)$ . Keďže  $\delta\varphi(t)$  sa bude náhodne meniť pre každý spin inak, vzájomná fáza medzi dvoma gubitmi, ktoré mali spočiatku rovnakú fázu, sa stane úplne náhodnou veličinou z intervalu  $\langle 0, 2\pi \rangle$ . Inými slovami, stratíme informáciu o polohe stavového vektora spinu na Blochovej sfére. Pri defázovaní spinu teda nedochádza k výmene energie, ale len k nárastu entropie systému, čo je spôsobené stratou informácie o stave spinu z pohľadu pozorovateľa. ktorý pripravil spin v čistom stave a vykonáva s ním presne definované ideálne unitárne operácie. Informácia (resp. jej časť) bola pre pozorovateľa stratená, nakoľko prostredie získalo časť informácie o stave spinu a spin zasa informáciu o stave prostredia. Relaxačné a defázovacie časy je možné odvodiť, ak poznáme spektrálnu hustotu fluktuácií  $S_f(\omega)$ . Namiesto rigorózneho odvodenia, ktoré môže čitateľ nájsť napr. v [11], 'odhadneme' relaxačné časy z toho, čo už vieme. Josephsonov spoj je napájaný mikrovlnným prúdom z klasického zdroja mikrovlnného napätia, čo sa dosiahne zapojením odporu do série s Josephsonovým spojom. Ak je teplota odporu  $T_R$ , spektrálna hustota fluktuácií prúdu je daná známym vzťahom

$$S_I(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2\pi R} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT_R}\right) . \tag{17.81}$$

Amplitúda fluktuujúceho prúdu je<sup>20</sup>  $I_{\rm f}(\omega) \approx 2\pi S_I(\omega)/T_1$ . Podľa vzťahov (17.60) a (17.56) koherentný prúd s frekvenciou  $\omega = 2\Delta$  zodpovedajúci  $\Omega_2 T_1/\hbar = \pi$  by spôsobil rotáciu o uhol  $\pi$ . Dá sa teda očakávať, že relaxačný čas bude úmerný spektrálnej hustote fluktuácií pri frekvencii  $\omega \approx 2\Delta/\hbar$ 

$$\frac{1}{T_1} = \lambda_\perp^2 S_f(\omega = 2\Delta/\hbar) = \left(\frac{E_{\rm J}}{\hbar} \sqrt{\frac{E_{\rm C}}{\hbar\omega_0}}\right)^2 \frac{S_I(\omega = 2\Delta)}{I_{\rm c}^2} , \qquad (17.82)$$

nakoľko dvojhladinový systém 'nevidí'<sup>21</sup> fotóny s frekvenciami  $\omega$  rôznymi od  $2\Delta/\hbar$ . Defázovací čas  $T_2$  má dve zložky:

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{2T_1} + \frac{1}{T_\Phi} . \tag{17.83}$$

<sup>&</sup>lt;sup>20</sup> Absorpčná krivka dvojhladinového systému je lorentzián so šírkou  $\approx 2\pi/T_1$ . Dvojhladinový systém absorbuje a emituje len fotóny s frekvenciou blízkou  $2\Delta/\hbar$ .

<sup>&</sup>lt;sup>21</sup>Absorpčná krivka je lorentzián so šírkou ~  $1/T_1$ .

<sup>483</sup> 

Jedna je spojená s relaxačným časom a druhá je spojená s pozdĺžnymi fluktu<br/>áciami, ktoré nevedú k relaxácii. Táto druhá zložka sa preto nazýva čistým defázovacím časom<br/>  $T_{\Phi}$ 

$$\frac{1}{T_{\Phi}} = \lambda_{\parallel}^2 S_f(\omega = 0) = \left(\gamma \frac{E_{\rm J}}{\hbar} \sqrt{\frac{E_{\rm C}}{\hbar\omega_0}}\right)^2 \frac{S_I(\omega = 0)}{I_{\rm c}^2} .$$
(17.84)

Vidíme, že interakcia qubitu s prostredím vedie ku dekoherencii. Všimnite si, že aj pri teplote T = 0 nie je spektrálna hustota nulová kvôli kvantovým fluktuáciam a teda aj relaxácia bude nenulová. Pre ohmické prostredie je čistý defázovací čas pri veľmi nízkych teplotách zanedbateľne malý. Avšak v skutočnosti býva zvyčajne kratší ako relaxačný čas. Dôvodom je 1/f šum, ktorý síce teoreticky nie je uspokojivo pochopený, ale experimentálne bol pozorovaný na mnohých periodických dejoch s veľmi dlhou periódou. Na gubitoch bola nameraná zaujímavá korelácia medzi 1/fa kvantovým šumom, čo by mohlo prispieť k pokroku v oblasti teórie šumov [12]. Keďže dekoherenciu nevieme pre supravodivé qubity uspokojivo 'vypočítať', je úlohou experimentu zmerať ich relaxačné a čisté defázovacie časy. Akonáhle poznáme dekoherenčné časy, môžeme predpovedať časový vývoj systému, ktorý je opísaný Blochovými rovnicami. Ak chceme porovnať teoretickú predpoveď s experimentom, potrebujeme experimentálne určiť maticu hustoty systému. Inými slovami, musíme urobiť kvantovú tomografiu systému, ktorého stav nepoznáme. V prípade dvojhladinového systému stačí určiť zložky vektora  $\rho$ . Na to stačí zmerať stredné hodnotv operátorov  $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3,$  keďže platí<sup>22</sup>

$$\rho_j = Tr\{\hat{\sigma}_j\hat{\rho}\} = \langle \sigma_j \rangle . \tag{17.85}$$

V prípade spinu je takéto meranie jednoduché. Stačí rozdeliť množinu spinov pripravených v rovnakom stave na tri podmnožiny a vykonať merania Sternovým-Gerlachovým aparátom v troch rôznych smeroch, v smere osi  $x_1, x_2, x_3$ . V prípade Josephsonovho spoja však máme k dispozícii len meranie strednej hodnoty operátora  $\hat{\sigma}_3$ , čo zjavne nestačí na určenie prvkov matice hustoty. Keďže však vieme manipulovať s qubitom, môžeme namiesto meracieho aparátu pootočiť Blochov vektor a tak určiť jednolivé prvky matice hustoty iba pomocou merania strednej hodnoty  $\hat{\sigma}_3$ . Zjavne, pootočenie Blochovho vektora o uhol  $\pi/2$  okolo osi  $x_1$  resp.  $x_2$  pomocou mikrovlnného impulzu pri zadanej súradnicovej sústave je ekvivalentné pootočeniu súradnicovej sústavy o rovnaký uhol opačného znamienka. Matematicky to môžeme vyjadriť nasledovne. Stavový vektor

$$|\Psi'\rangle = U_{x_i,\pi/2}|\Psi\rangle \tag{17.86}$$

zodpovedá stavu po poototočení vektora  $|\Psi\rangle$  okolo osi  $x_j$  o uhol  $\pi/2$ . Stredná hodnota operátora  $\hat{\sigma}_3$  zodpovedajúca stavu  $\Psi'$  je

$$\langle \hat{\sigma}_3 \rangle = \langle \Psi' | \hat{\sigma}_3 | \Psi' \rangle = \langle \Psi' | U^+_{x_j, \pi/2} U_{x_j, \pi/2} \hat{\sigma}_3 U^+_{x_j, \pi/2} U_{x_j, \pi/2} | \Psi' \rangle .$$
(17.87)

<sup>&</sup>lt;sup>22</sup>Toto tvrdenie možno dokázať nasledovne. Vynásobme rovnicu (17.67) maticou  $\hat{\sigma}_j$ . S využitím vzťahov  $\hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2 \hat{\sigma}_3 = i \hat{\sigma}_0$ ,  $Tr\{\hat{\sigma}_{1,2,3}\} = 0$  dostaneme vzťah (17.85).

Pre pootočenie  $\pi/2$  okolo osi  $x_1$  dostávame

$$\langle \hat{\sigma}_3 \rangle = -\langle \Psi | \hat{\sigma}_2 | \Psi \rangle = -\langle \hat{\sigma}_2 \rangle . \tag{17.88}$$



v smere osi  $x_2$  okolo osi  $x_2$   $\langle \sigma_3 \rangle = -1$ 

Obr. 17.7: Meranie zložiek Blochovho vektora pomocou  $\pi/2$  impulzov a merania vlastných hodnôt operátora  $\hat{\sigma}_3$ .

Podobne pre  $x_2$ :

$$\langle \hat{\sigma}_3 \rangle = \langle \Psi | \hat{\sigma}_2 | \Psi \rangle = \langle \hat{\sigma}_2 \rangle .$$
 (17.89)

Meranie zložiek Blochovho vektora je potom jednoduché. Meraním strednej hodnoty operátora  $\hat{\sigma}_3$  určíme  $\rho_3^{23}$ . Aplikovaním  $\pi/2$  impulzu, ktorý zodpovedá  $b_j = \pi/2$  a následným meraním strednej hodnoty  $\hat{\sigma}_3$  zmeriame  $\rho_j$ , kde j = 1, 2. Tento postup je znázornený na obr. 17.7 a je možné ho rozšíriť na systém N spinov<sup>24</sup>.

Skôr ako tak urobíme, zapíšeme vzťahy pre jeden qubit v kompaktnej forme, ktorá nám pomôže pri prechode kn qubitom:

$$\hat{\rho} = \sum_{j_1=0}^{3} \rho_{j_1} \hat{\sigma}_{j_1} \tag{17.90}$$

kde  $\rho_0 = 1$ . Pre n-qubitov platí

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2^n} \sum_{j_1,\dots,j_n=0}^3 \rho_{j_1,\dots,j_n} \hat{\sigma}_{j_1} \otimes \hat{\sigma}_{j_2} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_{j_n}$$
(17.91)

Na prvý pohľad sa zdá, že potrebujeme určiť  $4^n - 1$  prvkov  $\rho_{j_1, j_2, \dots, j_n}$ , avšak nie všetky sú nezávislé. V skutočnosti stačí určiť 'len'  $3^n$  prvkov<sup>25</sup>

$$\rho_{j_1,j_2,\dots,j_n} = \langle \hat{\sigma}_{j_1} \otimes \hat{\sigma}_{j_2} \otimes \dots \otimes \hat{\sigma}_{j_n} \rangle \tag{17.92}$$

a ostatné sa dajú dopočítať [10].

<sup>&</sup>lt;sup>23</sup>Nech  $P_{|1\rangle}$  je počet meraní stavu  $|1\rangle > s$  vlastnou hodnotou 1 a  $P_{|0\rangle}$  je počet meraní stavu  $|1\rangle > s$  vlastnou hodnotou -1. Potom  $\langle \hat{\sigma}_3 \rangle = (P_{|1\rangle} - P_{|0\rangle})/(P_{|1\rangle} + P_{|0\rangle})$ . <sup>24</sup>Pri tejto jednoduchej analýze sme predpokladali ideálny merací pristroj, ktorý neomylne de-

 $<sup>^{24}</sup>$ Pri tejto jednoduchej analýze sme predpokladali ideálny merací pristroj, ktorý neomylne detekuje vlastnú hodnotu operátora  $\hat{\sigma}_3$ . V skutočnosti tomu tak nie je. Pri väčších systémoch chyba merania môže značne ovplyvniť presnosť určenia prvkov matice hustoty. Preto boli vypracované sofistikované metódy kvantovej tomografie. Nám však išlo len o vysvetlenie základného princípu a čitateľa, ktorý by sa rád dozvedel viac o tejto problematike, odkážeme na [10].

<sup>&</sup>lt;sup>25</sup>Podobne ako u jedného qubitu  $\rho_{3,3,...,3} = (P_{|11...1} - P_{|00...0}))/(P_{|11...1} + P_{|00...0\rangle})$ . Ak chceme určiť napr.  $\rho_{3,1,...,3}$  aplikujeme pred meraním impulz  $U_{x2,\pi/2}$  na qubit 2 okolo osi  $x_2$ .

#### 17.4.1 Meranie relaxačných a čistých defázovacích časov

Meranie relaxačného času je relatívne jednoduché. Dvojhladinový systém sa pripraví vo vzbudenom stave a po čase  $\tau$  sa zmeria pravdepodobnosť obsadenia vzbudeného stavu. V dôsledku relaxácie pravdepodobnosť exponenciálne klesá s časovou konštantou  $T_1$ . Meranie čistého defázovacieho času je komplikovanejšie. Priamo sa dá merať čas  $T_2$  pomocou tzv. Ramseyho interferometrie a čas  $T_{\Phi}$  musíme vypočítať zo vzťahu (17.83), ak poznáme  $T_1$ . Pri Ramseyho interferometri sa aplikujú dva  $\pi/2$  impulzy s frekvenciou  $2\Delta/\hbar$ , ktoré sú od seba časovo vzdialené o hodnotu  $\tau$ , a bezprostredne po aplikovaní druhého impulzu sa urobí meranie. Princíp Ramseyho interferometrie sa dá ľahko vysvetliť na pseudospinovom modeli. Spin v základnom stave je orientovaný v smere magnetického poľa  $H_3$  a prvý  $\pi/2$  impulz spôsobí jeho rotáciu do roviny  $x_1 - x_2$ . Po tomto impulze dôjde k precesii spinu okolo osi  $x_3$  s Larmorovou frekvenciou  $2\Delta/\hbar$ . Ak precesia spinu a frekvencia impulzu sú rovnaké, je výhodné si predstaviť striedavé magnetické pole ako súčet dvoch proti sebe rotujúcich magnetických polí. Vzájomná poloha vektora magnetického poľa a spinu, ktoré rotujú súhlasne, je  $\pi/2$  a s časom sa nemení. Inými slovami, fázový posun medzi týmito dvoma vektormi je konštantný a rovný  $\pi/2$ . V čase sa mení len veľkosť vektora magnetického poľa, ktorá je rovná polovici amplitúdy striedavého magnetického poľa počas impulzu, inak je nulová<sup>26</sup>. Druhá zložka magnetického poľa, rotujúca v opačnom smere, rotuje oproti spinu s dvojnásobnou Larmorovou frekvenciou a jej vplyv môžeme zanedbať (spin bude cítiť strednú hodnotu, ktorá je blízka nule). Je preto vhodné prejsť do rotujúcej súradnicovej sústavy, v ktorej os rotácie je  $x_3$ , okolo ktorej rotujú súradnice  $x_1$ ,  $x_2$  s Larmorovou frekvenciou. V tejto rotujúcej sústave je vektor magnetického poľa a spinu v pokoji, čo zjednodušuje analýzu. Po čase  $\tau$  príde druhý  $\pi/2$  impulz, ktorý iba dokončí rotáciu o celkový uhol  $\pi$ . Spin tak prejde zo základného stavu  $|0\rangle$  do excitovaného stavu  $|1\rangle$ a výsledok merania nebude záviseť od času  $\tau$ . Avšak defázovanie spôsobí pomalé rozchádzanie sa vektora magnetického poľa<sup>27</sup>  $\vec{H}$  a Blochovho vektora spinu. Po určitom čase je poloha Blochovho vektora rovnako pravdepodobná pre ľubovoľný bod na rovníku Blochovej sféry a po aplikovaní druhého impulzu sa môže systém nachádzať v ľubovoľnom bode na Blochovej sfére. Výsledkom merania bude stav  $|0\rangle$ alebo  $|1\rangle$  s rovnakou pravdepodobnosťou. Stredná hodnota magnetického momentu v smere osi  $x_3$  ako funkcia času  $\tau$  bude exponenciálne klesať a bude závisieť od časovej konštanty  $T_{\Phi}$ . Je zjavné, že výsledok merania bude ovplyvnený aj relaxáciou, ktorá spôsobí náhlu zmenu stavu systému do základného stavu. Ramseyho interferometria teda meria časovú konštantu  $T_2$ , ktorá zahŕňa aj relaxačný čas  $T_1$ . Teraz ukážeme jednoduchý výpočet strednej hodnoty operátora  $\hat{\sigma}_3$  meraný Ramseyho interferometriou. Pri dostatočne nízkych teplotách  $kT\ll 2\Delta$ je systém v základnom

 $<sup>^{26}\</sup>mathrm{V}$ experimente sa takéto impulzy vytvárajú pomocou mikrovlnných mixerov. Na vstup sa pripojí 'monochromatický' mikrovlný signál, ktorý sa zopne pomocou 'jednosmerného' napäťového impulzu na výstup. Zopnutie sa v mixeri realizuje pomocou diód. Pri rozopnutom mixeri je útlm signálu -20 až -30 dB. Zvyčajne sa používajú dva zapojené v sérii.

 $<sup>^{27} {\</sup>rm Predpokladáme,}$ že fázová stabilita (koherencia) mikrovl<br/>nného zdroja je oveľa lepšia ako u samotného dvojhladinového systému.

čistom stave, ktorý môžeme popísať maticou hustoty

$$\hat{\rho} = |0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_3) .$$
 (17.93)

Predpokladajme, že  $T_2 \gg \Delta t$ , kde  $\Delta t$  je šírka  $\pi/2$  impulzu. To je možné docieliť vhodnou voľbou amplitúdy mikrovlnného signálu. Aplikovanie takéhoto  $\pi/2$  impulzu zodpovedá unitárnej transformácii (17.62) (môžeme zanedbať dekoherenciu), ktorá pretransformuje maticu hustoty:

$$\hat{\rho}_{\pi/2} = \hat{U}_{\pi/2} \hat{\rho} \hat{U}_{\pi/2}^+ = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_0 - \hat{\sigma}_1) . \qquad (17.94)$$

Počas času  $\tau$  je systém vystavený vplyvu okolia a časový vývoj matice hustoty je daný Blochovými rovnicami (17.78),(17.79). V rotujúcej sústave má druhá rovnica tvar

$$\frac{\partial \rho_{12}}{\partial t} = -\frac{1}{T_2} \rho_{12} , \qquad (17.95)$$

čo vedie k exponenciálne tlmenej funkcii

$$\hat{\rho}_{\tau,\pi/2} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_0 - e^{-\tau/T_2} \hat{\sigma}_1) .$$
 (17.96)

Po čase  $\tau$ aplikujeme druhý  $\pi/2$ impulz a dostávame konečnú maticu hustoty

$$\hat{\rho}_{\pi/2,\tau,\pi/2} = \frac{1}{2} (\hat{\sigma}_0 + e^{-\tau/T_2} \hat{\sigma}_3) .$$
(17.97)

Strednú hodnotu operátora  $\hat{\sigma}_3$  ako funkciu času  $\tau$  dostaneme z rovnice (17.64)

$$\langle \hat{\sigma}_3 \rangle(\tau) = \text{Tr}\{\hat{\rho}_{\pi/2,\tau,\pi/2}\hat{\sigma}_3\} = e^{-\tau/T_2}$$
 (17.98)

Meraním časovej závislosti strednej hodnoty magnetického momentu  $\langle \mu_3 \rangle(\tau) = \mu_B \langle \sigma_3 \rangle(\tau)$  je možné určiť čas  $T_2$ . Schematicky je Ramseyho interferometria znázornená na obr. 17.8.

sfére.

Tieto merania boli urobené na supravodivých qubitoch. Typické ukážky sú na obr. 17.9.

Je dobré si uvedomiť, že každé meranie čistého stavu či dekoherencia je sprevádzané zväčšením entropie  $\Delta S \geq 0$ , ktorá je mierou neurčitosti v poznaní kvantového stavu systému. Entropia kvantového systému je definovaná ako

$$S(\hat{\rho}) = -k \operatorname{Tr}\{\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\} . \tag{17.99}$$



Obr. 17.8: Schematické znázornenie

Ramseyho interferometrie na Blochovej



Obr. 17.9: Meranie časov T1 a T2 typických pre supravodivé qubity. Na paneli (a) je meranie relaxačného času. Na paneli (b) meranie času T2 Ramseyho interferometriou. Na osi x sú znázornené  $\pi/2$  mikrovlnné impulzy.

V prípade čistého kvantového stavu je entropia nulová (nulová neurčitosť)

$$S(\hat{\rho}) = -k \operatorname{Tr}\{\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\} = -k \operatorname{Tr}\{\hat{\rho} \ln 1\} = 0 , \qquad (17.100)$$

čo sa dá ukázať s využitím Taylorovho rozvoja funkcie prirodzeného logaritmu a skutočnosti, že  $\hat{\rho}^n = \hat{\rho}$ , Tr $\{\hat{\rho}\} = 1$ . To znamená, že pre súbor spinov v rovnakom čistom stave poznáme stav každého jedného spinu. Meraním priemetu spinu v smere osi  $x_3$  sa tento súbor spinov zmení na dva súbory v čistom stave, nakoľko spin bude s pravdepodobnosťou  $|c_0|^2$  v stave  $|0\rangle$  a s pravdepodobnosťou  $|c_1|^2$  v stave  $|1\rangle$ . Po meraní už nevieme s istotou povedať, v akom stave je každý jeden spin z pôvodného súboru. Tomuto súboru zodpovedá matica hustoty

$$\hat{\rho}_m = \begin{pmatrix} |c_0|^2 & 0\\ 0 & |c_1|^2 \end{pmatrix}$$
(17.101)

a entropia

$$S(\hat{\rho}_m) = -k(|c_0|^2 \ln |c_0|^2 + |c_1|^2 \ln |c_1|^2)$$
(17.102)

V prípade, že  $c_0$  resp.  $c_1$  sú rovné nule, definujeme  $0 \ln 0 \equiv 0$ , nakoľko stav s nulovou pravdepodobnosťou výskytu nemôže prispievať k celkovej entropii. Keďže  $|c_0|^2 + |c_0|^2 = 1$ , entropia bude nenulová a kladná okrem špeciálneho prípadu, keď čistý stav bude vlastným stavom operátora veličiny, ktorú meriame. V takomto prípade bude súbor opäť v čistom stave a entropia bude nulová. V prípade, že na systéme vykonávame unitárne operácie  $\hat{U}(t)$ , matica hustoty sa mení ako

$$\hat{\rho}(t) = \hat{U}(t)\hat{\rho}(0)\hat{U}^{+}(t) , \qquad (17.103)$$

ktoré zachovávajú vlastnosti  $\hat{\rho}^n = \hat{\rho}$ , Tr $\hat{\rho} = 1$ . Dá sa ukázať, že unitárna transformácia, ktorá je reverzibilná, nemení entropiu systému, t.j.  $\partial S/\partial t = 0$ . Z uvedeného

vyplýva, že zmena entropie systému je nežiadúci jav, ktorá kvantifikuje mieru straty informácie o systéme. Ak by sme takýto systém použili ako qubit, zmena entropie systému znamená chybu vo výpočte. Takéto chyby je ťažké opraviť, lebo, ako sme ukázali, samotné meranie spôsobuje zmenu entropie. Našťastie existujú sofistikované kvantové protokoly, ktoré dokážu chyby opravovať. Týmto sa však nebudeme zaoberať a čitateľa odkážeme na odbornú literatúru [9].

#### 17.5 Rf Squid v kvantovom režime - Schrödingerove mačiatko?

V roku 1983 sa v Tokyu konala konferencia s názvom 'Základy kvantovej mechaniky vo svetle nových technológií' [13]. Zúčastnili sa nej mnohí známi fyzici ako Bohm, Aharonov, Zeilinger, Leggett, Wheeler. Jedným z dôvodov konania sa tejto konferencie bola aj skutočnosť, že rozvoj technológií umožnil uskutočniť experimenty, ktoré by mohli preveriť základy kvantovej mechaniky a dať odpoveď na niektoré otázky, ktoré sa predtým považovali za čisto filozofické. Jednou z nich je otázka, či môže byť makroskopický systém v superpozícii dvoch rozlíšiteľných klasických stavov, t.j. či existuje makroskopická superpozícia stavov. Leggett<sup>28</sup> teoreticky ukázal, že rf SQUID môže za určitých okolností vykazovať makroskopické kvantové javy druhého rádu. Slová druhý rád zdôrazňujú, že ide o vyššiu úroveň kvantových javov ako kondenzácia elektrónov do Cooperových párov či tunelovanie Cooperových párov cez bariéru.

Celková energia rf SQUIDu (Josephsonov spoj uzavretý do supravodivej slučky s indukčnosťou L) je daná súčtom Coulombovej, magnetickej a Josephsonovej energie

$$E = \frac{Q^2}{2C} + \frac{(\Phi_{\rm e} - \Phi)^2}{2L} - E_{\rm J} \cos \phi , \qquad (17.104)$$

kde Josephsonova energia závisí od magnetického toku prechádzajúceho cez slučku,  $\phi = 2\pi \Phi/\Phi_0$ , ktorý môžeme vyjadriť ako rozdiel vonkajšieho magnetického toku a magnetického toku vytvoreného cirkulujúcim prúdom v slučke,  $\Phi = \Phi_e - LI(\Phi)$ . Zopakujeme postup kanonického kvantovania tak, ako sme to urobili pre Josephsonov spoj. Zvolíme fázovú reprezentáciu, v ktorej potenciálna energia je:

$$U(\phi) = E_{\rm J}(1 - \cos\phi) + E_{\rm L} \frac{(\phi - \phi_{\rm e})^2}{2} , \qquad (17.105)$$

kde $E_{\rm L}=\Phi_0^2/4\pi^2 L.$ Podobne ako pre hamiltonián Josephsonovho spoja (17.14) dostávame kvantový hamiltonián rfSQUIDu

$$\hat{H}(\hat{n},\phi) = E_{\rm J} \left( -\alpha \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + 1 - \cos\phi + \frac{1}{2\beta_{\rm L}} (\phi - \phi_{\rm e})^2 \right) , \qquad (17.106)$$

kde  $\beta_{\rm L} = 2\pi L I_{\rm c}/\Phi_0$  je normalizovaná indukčnosť. V prípade rf SQUIDu sa rozmery Josephsonovho spoja navrhujú tak, aby  $\alpha = E_{\rm C}/E_{\rm J} < 1$ . Ak  $\beta_{\rm L}$ 1, potenciál

11.0

 $<sup>^{28}</sup>$ Nositeľ Nobelovej ceny za rok 2003 za priekopnícky prínos do teórie supravodivosti a supratekutosti.

vykazuje pre $\phi_{\rm e}=\pi$ dvojnásobne degenerovaný stav, t.j. dve lokálne minimá s rovnakými energiami. Tieto dve minimá zodpovedajú dvom klasickým stavom, v ktorých perzistentné prúdy v slučke tečú opačným smerom. Keďže ide o makroskopické prúdy > 100 nA, ktoré vytvárajú v slučke magnetický moment ~ 10<sup>10</sup>  $\mu_{\rm B}$ , dajú sa ľahko merať pomocou dc SQUIDu. Rozložením potenciálnej energie do Taylorovho radu v okolí bodu  $\pi$  dostávame vzťah pre jednorozmerný kvartický oscilátor:

$$\hat{H}(\hat{n},\phi) = E_{\rm J} \left( -\alpha \frac{\partial^2}{\partial \phi'^2} - \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{1}{\beta_{\rm L}} \right) \phi'^2 + \frac{1}{24} \phi'^4 - \frac{1}{\beta_{\rm L}} \phi' \phi'_{\rm e} \right) , \qquad (17.107)$$

kde  $\phi \prime = \phi - \pi$ ,  $\phi \prime_e = \phi_e - \pi$ . V bode degenerácie  $\phi \prime_e = 0$  je výška bariéry medzi dvoma minimami  $U_{\rm B} = E_{\rm J}(1 - 1/\beta_{\rm L})$ , ktorá mizne pri $\beta_{\rm L} = 1$ , kedy dostávame jednoduchý vzťah

$$\hat{H}(\hat{n},\phi) = E_0 \left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^4\right) , \qquad (17.108)$$

kde q je nová zovšeobecnená súradnica definovaná ako  $\phi' \equiv \sqrt[6]{24\alpha}q$ , a  $E_0 = \frac{\alpha E_J}{\sqrt[3]{24\alpha}}$  je približne energia základného stavu. Prvé dve excitované vlastné hodnoty energie



Obr. 17.10: a) Dvojjamový potenciál kvartického oscilátora pre  $\beta_{\rm L} > 1$ . Ak je bariéra dostatočne malá, dochádza k pozorovateľnému rozštiepeniu lokalizovaných energetických hladín. Vlnová funkcia je symetrickou a antisymetrickou lineárnou kombináciou lokalizovaných vlnových funcií zodpovedajúcich častici v pravej a ľavej jame. Symetrická kombinácia zodpovedá viac delokalizovanej častici, ktorá má menšiu kinetickú energiu a patrí jej nižšia energetická hladina. Antisymetrickej kombinácii zodpovedá vyššia energetická hladina. b) Potenciál a energetické hladiny čisto kvartického oscilátora,  $\beta_{\rm L} = 1$ . Optimálne parametre supravodivého tokového qubitu ležia medzi týmito dvoma limitnými prípadmi: potenciálová bariéra medzi dvoma minimami je nižšie ako základná hladina.

 $s\acute{u}$ 

$$E_1 \approx 3.8 E_0$$
 ,  $E_2 \approx 7.5 E_0$  . (17.109)

Podobne ako v prípade Josephsonovho spoja máme systém, ktorý sa správa ako nelineárny oscilátor. Ak je $\beta_L>1,$ vzdialenosť medzi základnou a prvou excitovanou

hladinou sa zmenšuje. Vzhľadom na to, že pre merateľné vzorky je  $E_J \sim 100 \text{ GHz}$ , volí sa  $\beta_{\rm L}$  tak, aby  $2\Delta = E_1 - E_0 < 10 \text{ GHz}$ . To umožňuje použiť dostupné prístroje na manipuláciu s takýmto dvojhladinovým systémom pomocou mikrovlnných impulzov. Táto podmienka však znamená, že supravodivá slučka musí byť veľká. Ak priemer slučky označíme d, tak podmienka  $\beta_{\rm L} > 1$  ohraničuje d zdola, d > 1 mm. To je nevýhodné ako z hľadiska vysokej integrácie takýchto prvkov do zložitejších systémov, tak aj z hľadiska dekoherencie, keďže väčšie objekty sú oveľa silnejšie naviazané na okolité prostredie. Tento problém sa dá odstrániť, ak namiesto jedného Josephsonovho spoja použijeme 2, 3 resp. 4 Josephsonove spoje uzavreté do supravodivej slučky, z ktorých jeden je slabší (menší, s menšou Josephsonovou energiou). Dynamika systému je určovaná najslabším spojom a geometrická indukčnosť je nahradená Josephsonovou indukčnosťou väčších spojov. To umožňuje dosiahnuť zodpovedajúcu nelinearitu aj pre slučky s nulovou geometrickou indukčnosťou. Inou alternatívou je možnosť využiť kinetickú indukčnosť veľmi tenkých nanomostíkov.

Ak  $\beta_{\rm L} > 1$ , potenciál vykazuje dve lokálne minimá oddelené potenciálovou bariérov. Klasicky je systém pri nulovej teplote v jednom z miním. Kvantovomechanicky však existuje nenulová pravdepodobnosť tunelovania. Problém môžeme analyzovať úplne všeobecne, ak budeme predpokladať, že výška bariéry je oveľa vyššia ako výška základnej hladiny meraná od lokálnych miním potenciálnej energie. V takom prípade môžeme dno jám aproximovať parabolickým potenciálom a lokalizované vlnové funkcie v ľavej  $\Psi_l(q)$  a pravej  $\Psi_r(q)$  jame budú funkciami lineárneho kvantového oscilátora s energiou nulových kmitov  $E_{r0} = E_{l0}$ . V degenerovanom stave je potenciál symetrický a preto základný stav môžeme popísať jednou vlnovou funkciou  $\Psi_{l0} = \Psi(-q), \Psi_{r0} = \Psi(q)$ . Keďže pravdepodobnosť tunelovania je malá, budú vlastné funkcie celkového hamiltoniánu symetrickou a antisymetrickou kombináciou lokalizovaných vlnových funkcií

$$\Psi_0(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi(q) + \Psi(-q)) , \ \Psi_1(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi(q) - \Psi(-q))$$
(17.110)

Nie je ťažké ukázať, že v dôsledku koherentného tunelovania sa vlnová funkcia delokalizuje, čo je sprevádzané znížením energie základného stavu (pozri napr. [14])

$$E_0 - E_{l0} = -\frac{\hbar}{m}\Psi(0) \left.\frac{\partial\Psi(q)}{\partial q}\right|_{q=0} , \ E_1 - E_{l0} = \frac{\hbar}{m}\Psi(0) \left.\frac{\partial\Psi(q)}{\partial q}\right|_{q=0}$$
(17.111)

V kváziklasickom WKB priblížení možno rozštiepenie energetickej hladiny vyjadriť ako

$$E_1 - E_0 = \frac{\hbar\omega}{\pi} exp\left(-\frac{1}{\hbar}\int\sqrt{2m(E_{l0} - U(q))}dq\right) .$$
(17.112)

Energetické hladiny rf SQUIDu sú znázornené na obr. 17.11. Tu treba čitateľa upozorniť, že v prípade návrhu supravodivých qubitov treba numericky vypočítať rozštiepenie energií z hamiltoniánu (17.106), keďže pre realistické parametre supravodivých qubitov s rozštiepením energetických hladín  $\Delta E \approx 5$  GHz je základná

energetická hladina  $E_0$  nad bariérou. Po asi dvadsiatich rokoch od návrhu tohto experimentu sa naozaj nameralo, že takýto makroskopický systém môže byť v superpozícii dvoch klasicky odlíšiteľných stavov. V časopise Nature sa objavil článok s názvom 'Schrödingerova mačka sa je teraz tučnejšia' [17]. Je naozaj fascinujúce, že bilióny Cooperových párov koherentne tunelujú a vytvárajú makroskopickú superpozíciu stavov. Napriek tomu je názov príliš prehnaný. V skutočnosti sa nejedná o tučnejšiu 'Schrödingerovu mačku' ani 'mačiatko'.

Bilióny Cooperových párov sú totiž bozóny skondenzované do základného stavu, v ktorom sú všetky vnútorné stupne voľnosti vymrznuté a stav systému je popísateľný jednoduchou makroskopickou vlnovou funkciou. Naproti tomu Schrödingerova mačka má mnoho vnútorných stupňov voľnosti a napriek tomu kvantová mechanika pripúšťa superpozíciu stavov živá/mŕtva<sup>29</sup>. V tomto smere teda tieto prvé experimenty nepriniesli žiaden pokrok, avšak otvorili novú cestu. Supravodivé gubity sá ľahko dajú spájať do zložitejších systémov (hovoríme, že sú systém supravodivých qubitov je škálovateľný), keďže sa používa v podstate rovnaká technológia ako pri klasických počítačoch. Tieto systémy budú mať mnoho vnútorných stupňov voľnosti a ide vlastne o postupné budovanie



Obr. 17.11: Prvé dve energetické hladiny rf SQUIDu v závislosti od priloženého magnetického toku pre  $\Phi_0 I_p / \Delta = 100$ .

Schrödingeroveho 'mačiatka'. Bude zaujímave skúmať správanie sa takýchto zložitých umelých kvantových systémov, ktoré môžu nájsť využitie v oblasti citlivých detektorov a kvantových počítačov.

## 17.6 Supravodivý jednopárový tranzistor - nábojový qubit

V prechádzajúcej časti sme spomenuli, že zapojením viacerých Josephsonových spojov do supravodivého prstenca môžeme dosiahnuť dvojnásobne degenerovaný základný stav pre ľubovoľne malú geometrickú indukčnosť prstenca L. Zapojenie dvoch spojov však umožňuje prejsť od tokového k nábojového režimu takéhoto interferometra, ktorý je vlastne dc-SQUIDom bez prívodných vodičov. Dva submikrónové Josephsonove spoje sa umiestnia blízko seba tak, že vytvoria malý supravodivý ostrovček oddelený dvoma tunelovými spojmi od ostatnej časti supravodivého prstenca (obr. 17.1). Ostrovček je tak malý, že Coulombova energia potrebná k tomu, aby Cooperov pár pretuneloval z prstenca na ostrovček je  $E_{\rm C} = (2e)^2/2C_{\rm o} \gg E_{\rm J} \gg kT$ . Na jednej strane teda musíme zaplatiť energiu  $E_{\rm C}$ , aby Cooperov pár pretuneloval z prstence pri tunelovaní Cooperov pár vískavame Josephsonovu energiu  $E_{\rm J}$ . Je energeticky výhodné, aby Cooperov pár koherentne

 $<sup>^{29}</sup>$ Autor bol sám svedkom dosť podráždenej reakcie kvantových optikov pri porovnávaní supravodivého qubitu so Schrödingerovou mačkou, ktoré považovali za veľmi neadekvátne.

tuneloval z prstenca na ostrovček a naspäť. Hamiltonián takéhoto systému je veľmi podobný hamiltoniánu rfSQUIDu s tým, že pridáme Josephsonovu energiu druhého spoja

$$H_{\rm CPB} = -E_{\rm J1}\cos\varphi_1 - E_{\rm J2}\cos\varphi_2 + \frac{(Q-Q_0)^2}{2C_0} + E_{\rm L}\frac{(\varphi_e - \varphi_1 - \varphi_2)^2}{2} , \quad (17.113)$$

kde  $Q_0$  je náboj na ostrovčeku. Ten môže byť nenulový a dokonca ho môžeme spojito meniť priložením napätia na elektródu hradla umiestnenú blízko ostrovčeka. Fyzikálne to funguje tak, že priložené napätie posunie elektróny v izolante oproti kladne nabitej mriežke, čo má rovnaký efekt ako vloženie (indukovanie) náboja  $Q_0$  na ostrovčeku. Tento náboj je úmerný posunutiu, ktoré je spojitou veličinou úmernou priloženému napätiu na elektróde  $V_{\rm g}, Q_0 = Q_{00} + C_{\rm g} V_{\rm g}$ , ktorá môže byť zlomkom náboja elektrónu.  $Q_{00}$  je náboj na ostrovčeku pri nulovom napätí na hradle, ktorý môže byť taktiež nenulový, napríklad kvôli zachyteniu elektrónu na povrchových stavoch a pod. Aj keď tento hamiltonián vyzerá komplikovanejšie ako hamiltonián rf SQUIDu dá sa značne zjednodušiť. Uvažujme prípad veľmi malých prstencov, keď  $L \to 0$  ( $E_{\rm L} \to \infty$ ). Potom ľubovoľne malá odchýlka  $\phi_1, \phi_2$  od podmienky ( $\phi_e - \phi_1 - \phi_2$ )<sup>2</sup> = 0 by viedla k obrovskému zväčšeniu energie a preto budeme žiadať ( $\phi_e = \phi_1 + \phi_2$ )<sup>2</sup>. Zavedieme tiež novú premennú  $\phi = (\phi_2 - \phi_1)/2$ , pomocou ktorej prepíšeme hamiltonián v oveľa jednoduchšom tvare

$$H_{\rm CPB} = -E_{\rm J}(\varphi_{\rm e})\cos(\phi - \phi_0) + \frac{(Q - Q_0))^2}{2C_{\rm o}} , \qquad (17.114)$$

kde

 $\mathbf{a}$ 

$$E_J(\phi_e) = \sqrt{E_{J1}^2 + E_{J2}^2 + 2E_{J1}E_{J1}\cos\phi_e}$$
(17.115)

$$\phi_0 = \arctan\left(\frac{E_{J1} - E_{J2}}{E_{J1} + E_{J2}} \tan\frac{\phi_e}{2}\right) .$$
(17.116)

Ak  $E_{\rm C} \gg E_{\rm J}(\phi_{\rm e})$  je výhodnejšie prejsť k nábojovej reprezentácii. Všeobecnú vlnovú funkciu  $|\Psi\rangle$ , ktorá je riešením hamiltoniánu, môžeme napísať ako superpozíciu nábojových stavov  $N, |\Psi\rangle = \sum c_n |N\rangle$ , kde N je počet Cooperových párov na ostrovčeku, pričom použijeme úspornejší zápis  $|N\rangle \equiv ||\Psi_N\rangle$ . Zo vzťahu (17.4) priamo vyplýva, že

$$e^{i\phi}|N\rangle = |N+1\rangle$$
,  $e^{-i\phi}|N\rangle = |N-1\rangle$ . (17.117)

Našou úlohou je nájsť vlastné energie hamiltoniánu a tie nezávisia od posunutia  $\phi_0$ , podobne ako vlastné energie posunutého lineárneho oscilátora. Preto môžeme  $\phi_0$  položiť nule a prepísať hamiltonián v tvare<sup>30</sup>

$$\hat{H}|\Psi\rangle = -E_{\rm J}(\phi_{\rm e}) \sum_{N} \frac{|N+1\rangle\langle N| + |N-1\rangle\langle N|}{2} + E_{\rm C}(N-Q_0/2e)^2 \,. \tag{17.118}$$

 $^{30}$ Využijeme identity  $\sum_N |N\rangle \langle N|=1$  (ortonormovanosť funkcií  $|N\rangle$ ),  $\cos\phi=(e^{\phi}+e^{-\phi})/2$ , a vzťah (17.117).

Tento elegantný zápis nám umožní vypočítať vlastné energie použitím lineárnej algebry. Vynásobením rovnice (17.118) vlnovou funkciou  $|M\rangle$  a využijúc ortonormovanosť vlnových funkcií nábojových stavov  $\langle N|M\rangle = \delta_{N,M}$  dostávame prvky matice  $\hat{H}$ 

$$H_{NM} = E_C (N - Q_0/2e)^2 \delta_{N,M} - \frac{E_J}{2} (\phi_e) (\delta_{N,M+1} + \delta_{N,M-1}) .$$
(17.119)

Úloha sa previedla na nájdenie vlastných čísel matice. Ak  $E_{\rm J}(\phi_e) \ll E_{\rm C}$ , môžeme sa v blízkosti bodu degenerácie obmedziť na maticu  $2 \times 2$ 

$$\hat{H} = \frac{E_{\rm C}}{2} \begin{pmatrix} 2n_g^2 & -\alpha^{-1} \\ -\alpha^{-1} & 2(1-n_g)^2 \end{pmatrix} , \qquad (17.120)$$

kde $\alpha^{-1}=E_{\rm J}(\phi_e)/E_{\rm C}$  <br/>a $n_{\rm g}\equiv Q_0/2e$ . Vlastné hodnoty energie sú

$$\frac{E_{0,1}}{E_{\rm C}} = \frac{n_g^2 + (n_g - 1)^2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(1 - 2n_g)^2 + \alpha^{-2}} \,. \tag{17.121}$$

Podobne ako pri rf SQUIDe sme opäť dostali dvojhladinový systém s rozštiepením energetických hladín  $2\Delta = E_{\rm J}$ . V bode degenerácie je systém v superpozícii stavov  $|N\rangle$  a  $|N+1\rangle$  Cooperových párov na ostrovčeku [18]. Nábojové qubity, ako nazývame takéto dvojhladinové systémy, však trpia na nábojové fluktuácie prostredia, ktoré sú oveľa väčšie ako tokové fluktuácie. Preto sa v súčasnosti výskum sústreďuje na qubity s parametrom  $\alpha \ll 1$ , typicky  $\alpha = 10^{-1} - 10^{-2}$ . Takéto štruktúry môžu byť použité ako veľmi citlivé detektory náboja. V základnom stave môžeme prúd cez takúto súčiastku vyjadriť ako

$$I = \frac{\partial}{\partial \Phi_e} \langle \Psi_g | \hat{H} | \Psi_g \rangle = \frac{\partial E_0(\Phi_e)}{\partial \Phi_e} = \frac{2\pi}{\Phi_0} \frac{E_{\rm J1} E_{\rm J2}}{2E_{\rm C}} \frac{\sin \phi_{\rm e}}{\sqrt{(1 - 2n_{\rm g})^2 + (E_J(\phi_{\rm e})/E_{\rm C})^2}} .$$
(17.122)

Prúd závisí od priloženého napätia na ostrovček a podobne ako pri polovodičovom tranzistore je možné dosiahnuť na výstupe jeho zosilnenie. Takáto súčiastka sa nazýva supravodivým jedno-Cooper-párovým tranzistorom (z angl. *single Cooperpair tranzistor*), keďže na resp. z ostrovčeka tuneluje vždy len jeden Cooperov pár. Citlivosť takéhoto tranzistora môže teoreticky dosiahnuť kvantovú limitu[19], t.j. jeho citlivosť je limitovaná len fundamentálnymi zákonmi kvantovej mechaniky<sup>31</sup>. Energetické hladiny a prúd jedno-Cooper-párového tranzistora v základnom stave sú zobrazené na obr. 17.12.

 $<sup>^{31}</sup>$ To neznamená, že experimentálne dosahujeme s jedno-Cooper-párovým tranzistorom kvantovú limitu. Teoreticky však možno ukázať, že je to v princípe možné. Podobná súčiastka, jedno-elektrónový tranzistor, nie je kvantovo limitovaný detektor.



Obr. 17.12: a) Základná a prvá excitovaná energetická hladina jedno-Cooperpárového tranzistora v blízkosti bodu degenerácie  $n_g \approx 1/2$  pre parametre  $\phi_e = \pi/2$ ,  $\Phi_0 I_p/\Delta = 100$ . b) Prúd prechádzajúci cez jedno-Cooper-párový tranzistor v závislosti od indukovaného náboja na ostrovčeku  $n_g$ . Všimnite si, že maximálny prúd dosahuje len polovicu kritického prúdu, čo je dôsledok nezanedbateľnej Colombovej energie v hamiltoniáne (17.119).

# 17.7 Kvantová elektrodynamika supravodivého qubitu a rezonátora

Ako sme už spomínali, supravodivé qubity sú náchylné k dekoherencii, ktorá je vyvolaná napr. spontánou emisiou či defázovaním v dôsledku šumov. Aby sme zabránili vplyvu okolia, je výhodné uzavrieť qubit do supravodivého rezonátora. Pri nízkych teplotách môže byť aj rezonátor v kvantovom stave a preto budeme analyzovať systém qubit-rezonátor kvantovomechanicky. V kvantovej optike je známy tzv. Purcellov jav: atómy uzavreté v dutinovom rezonátore majú relaxačný čas  $\tau_R^{rez}$   $F_{\rm P}$  krát kratší ako vo voľnom priestore, kde  $F_{\rm P}$  je tzv. Purcellov faktor [20] pre ktorý platí vzťah

$$F_{\rm P} = \frac{3Q(\lambda/\sqrt{\varepsilon_{\rm r}})^3}{4\pi^2 V_0} \eta^2 \frac{\omega_{\rm r}^2}{4(\omega_{\rm q} - \omega_{\rm r})^2 + \delta\omega_{\rm r}^2} , \qquad (17.123)$$

kde  $\omega_{\rm q} = 2\Delta/\hbar$  je vlastná frekvencia qubitu,  $\omega_{\rm r}$  je vlastná frekvencia rezonátora,  $\lambda$  je vlnová dĺžka vo voľnom priestore,  $\varepsilon_{\rm r}$  je relatívna permitivita prostredia v dutinovom rezonátore s objemom  $V_0$  a  $\eta$  je faktor, ktorý charakterizuje natočenie dipólového momentu atómu (pre náhodne orientované dipólové momenty  $\eta^2 = 1/3$ ). Purcellov jav je to, čo by sme intuitívne očakávali z klasickej elektrodynamiky: rezonátor funguje ako filter, ktorý neprepúšťa frekvencie odlišné od jeho vlastných frekvencií a preto je stimulovaná emisia, a teda aj relaxácia, potlačená. Napríklad rf SQUID (qubit) umiestnený v rezonátore sa dá popísať štandardným hamiltoniánom

$$\hat{H} = \hat{H}_{\rm r} + \hat{H}_{\rm q} + \hat{H}_{\rm I} = \hbar\omega_{\rm r} \left( \hat{a}^{+} \hat{a} + \frac{1}{2} \right) - \epsilon \hat{\sigma}_{3} - \Delta \hat{\sigma}_{1} + g \hat{\sigma}_{3} (\hat{a} + \hat{a}^{+}) , \quad (17.124)$$

1	n	E
Ŧ	9	IJ

kde  $\epsilon = I_{\rm p}(\Phi_{\rm e} - \Phi_0/2), I_p$ je perzistentný prúd v rf<br/> SQUIDe agje väzbová energia rf SQUIDu s rezonátorom, ktorá sa dá vyjadriť pomocou vzáj<br/>omnej indukčnosti $M_{\rm q,r} = k \sqrt{L_{\rm r} L_{\rm q}}$ a amplitúdy váku<br/>ových fluktuácií  $I_{\rm r0} = \sqrt{\hbar \omega_{\rm r}/2L_{\rm r}}$ 

$$g = M_{q,r} I_p I_{r0} . (17.125)$$

Je výhodné prejsť do vlastnej bázy qubitu

$$\hat{H} = \hbar\omega_{\rm r} \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) - \Delta_\epsilon \hat{\sigma}_3 + g(\sin\Theta \ \hat{\sigma}_3 - \cos\Theta \ \hat{\sigma}_1)(\hat{a} + \hat{a}^+) , \qquad (17.126)$$

kde  $2\Delta_{\epsilon} = 2\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}$  je vzdialenosť medzi hladinami a  $\Theta = \arctan \epsilon/\Delta$ . Budeme uvažovať prípad  $\Delta_{\epsilon} \gg \hbar \omega_{\rm r} \gg g$ . Člen  $g \sin \Theta \hat{\sigma}_3$  nespôsobuje prechody medzi hladinami qubitu (spôsobí len 'trasenie' hladín) a preto ho môžeme zanedbať. Podobne ako v prípade rezonátora je vhodné zaviesť zvyšovací a znižovací operátor

$$\hat{\sigma}^+ = |1\rangle\langle 0|, \ \hat{\sigma}^- = |0\rangle\langle 1|, \ , \tag{17.127}$$

ktorý ma nasledujúce vlastnosti

$$\hat{\sigma}^{+}|0\rangle = |1\rangle, \hat{\sigma}^{+}|1\rangle = 0; \quad \hat{\sigma}^{-}|1\rangle = |0\rangle, \hat{\sigma}^{-}|0\rangle = 0.$$
 (17.128)

Vylúčiac členy ktoré nezachovávajú energiu, dostávame pomocou týchto operátorov tzv. Jaynesov-Cummingov hamiltonian [21]

$$H = \hbar\omega_{\rm r} \left( \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) - \Delta_\epsilon \sigma_3 - g_{\rm c} (\hat{a}^+ \hat{\sigma}^- + \hat{a}\sigma^+) , \qquad (17.129)$$

kde $g_c=g\cos\Theta.$  Ak sa obmedzíme na jednofotónové procesy výmeny energie medzi qubitom a rezonátorom, tento hamiltonián bude diagonálnou blokovou maticou, kde na diagonále budú matice $2\times 2$  zodpovedajúce stavom  $|1n\rangle$ ,  $|0(n+1)\rangle$ , kden je počet fotónov v rezonátore:

$$H^{(n)} = \begin{pmatrix} n\hbar\omega_{\rm r} + \Delta_{\epsilon} & g_c\sqrt{n+1} \\ g_c\sqrt{n+1} & n\hbar\omega_{\rm r} - \Delta_{\epsilon} \end{pmatrix} .$$
(17.130)

Pre dané n je možné vypočítať vlastné energie [21]:

$$E_{\pm} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_r \pm 2\sqrt{(\Delta_{\epsilon} - \hbar\omega_r/2)^2 + g_c^2(n+1)} .$$
 (17.131)

Je zaujímavé, že rezonátor a supravodivý qubit budú interagovať aj keď v rezonátore nie je žiaden fotón a energetické hladiny, ktoré sa v bode degenerácie pretínajú, sa rozštiepia (obr. 17.13). Pre fyzikálnu názornosť pretransformujeme hamiltonián (17.129) pomocou transformácie

$$\hat{U} = \exp\left(\frac{g_c}{\delta}(\hat{a}\hat{\sigma}^+ - \hat{a}^+\hat{\sigma}^-)\right) , \qquad (17.132)$$

kde $\delta=2\Delta_{\epsilon}-\hbar\omega_r$ je rozladenie rezonátora a qubitu. Uvažujme prípad $g_c/\delta\ll 1$ , keď môžeme zanedbať absorpciu, tzv. disperzný režim. Potom rozložím U do Taylorovho radu, ponechajúc členy do druhého rádu

$$\hat{U} = 1 + \left(\frac{g_c}{\delta}(a\hat{\sigma}^+ - a^+\hat{\sigma}^-)\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{g_c}{\delta}(a\hat{\sigma}^+ - a^+\hat{\sigma}^-)\right)^2$$
(17.133)

dostávame hamiltonián

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^+ = \left(\hbar\omega_r - \frac{g_c^2}{\delta}\hat{\sigma}_3\right)\hat{a}^+\hat{a} - \left(\Delta_\epsilon + \frac{g_c^2}{2\delta}\right)\hat{\sigma}_3 .$$
(17.134)

Z tvaru hamiltoniánu. bez akéhokoľvek počítania, vidíme tri javy: a) Disperzný posun frekvencie fotónov v rezonátore v dôsledku ich interakcie s qubitom (umelým atómom), b) posun vlastných energií dvojhladinového systému v závislosti od počtu fotónov v rezonátore (prvý člen úmerný  $g_c^2$  vo vzťahu (17.134), tzv. ac Starkov resp. Zeemanov  $jav^{32}$ ) a c) posun vlastných energií dvojhladinového systému v dôsledku interakcie dvojhladinového systému s nulovými osciláciami rezonátora (posledný člen úmerný  $g_c^2$ , tzv. Lambov posun). Disperzný posun frekvencie závisí od stavu qubitu. Ak je qubit v základnom stave,  $-\sigma_3|0\rangle =$  $-1|0\rangle$ , frekvencia fotónov vychádzajúcich z rezonátora bude menšia v po-



Obr. 17.13: Rozštiepenie energetických hladín systému rezonátor-supravodivý qubit pre počet fotónov v rezonátore  $n \ll 1$  [22]. Na x-ovej osi je energia qubitu dodaná qubitu magnetickým tokom  $\epsilon = (\Phi_{\rm e} - \Phi_0/2)I_{\rm p}$ , na y-ovej osi je odladenie od vlastnej frekvencie rezonátora, ktorá je znázornená horizontálnou prerušovanou čiarou. Odtieňami šedej je znázornený fázový posun medzi budiacim prúdom a napätím na rezonátore. Takmer vertikálna prerušovaná čiara zodpovedá energii qubitu. Spojitými čiarami sú znázornené vlastné energie systému podľa vzťahu (17.131). Experimentélne údaje boli merané Oelsnerom na IPHT Jena v Nemecku.

rovnaní s rezonátorom bez qubitu. Ak je však qubit vo vzbudenom stave, -  $\sigma_3|1\rangle = 1|1\rangle$ , frekvencia fotónov bude vyššia. Meraním frekvencie mikrovlného

11.1

 $<sup>^{32} {\</sup>rm Podľa}$ toho, či ide o posun energetických úrovní v dôsledku elektrického resp. magnetického poľa.

signálu prichádzajúceho z rezonátora môžeme určiť stav qubitu [23]. Toto meranie patrí ku kvantovým nedemolujúcim meraniam (QND - quantum nondemolition measurement). Princíp kvantového nedemolujúceho merania sa zvyčajne neprednáša v základných prednáškach z kvantovej mechaniky a preto mu venujeme trocha pozornosti. Tento typ meraní bol študovaný pri pokusoch detekovať gravitačné vlny, ktoré vyžadujú ultracitlivé detektory. Veľmi pekným príkladom rozdielu medzi kvantovým demolujúcim a nedemolujúcim meraním je meranie počtu fotónov v rezonátore. Energiu rezonátora môžeme určiť meraním amplitúdy napätia na rezonátore podľa vzťahu

$$E_{\rm r} = \frac{U_{\rm r}^2}{2Z_{\rm r}\omega_{\rm r}} , \qquad (17.135)$$

kde  $Z_r = \sqrt{L_r/C_r}$ je charakteristická impedancia rezonátora. V prípade, že meriame amplitúdu  $U_r$ aj fázu<sup>33</sup> napätia  $\varphi$  je vhodné zapísať napätie pomocou kvadratúrnych amplitúdq, p

$$U_{\rm r} = U_0 \cos(\omega_{\rm r} t + \varphi_0) = U_q \cos\omega_{\rm r} t + U_p \sin\omega_{\rm r} t . \qquad (17.136)$$

Lagrangián môžeme napísať v tvare

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}LI_{\rm r}^2 - \frac{1}{2}CU_{\rm r}^2 = \frac{LC^2}{2}\dot{U}_{\rm r}^2 - \frac{1}{2}CU_{\rm r}^2 . \qquad (17.137)$$

Ak zvolíme za zovšeobecnenú súradnicu  $q = U_r$ , zovšeobecnená hybnosť bude  $p = \partial L/\partial \dot{q} = M \dot{q}$ , kde  $M = L_r C_r^2$  je zovšeobecnená hmotnosť. V kanonickom kvantovaní q a p spĺňajú Heisenbergov vzťah neurčitosti  $\Delta p \Delta q \geq \hbar/2$ . Sučasné meranie  $U_q$  a  $U_p$  znamená, že ich meriame s rovnakou presnosťou  $\Delta U_q = \Delta U_p$ , ktorá je ohraničená Heisenbergovym vzťahom neurčitosti. V čase t = 0 je  $q(t = 0) = U_q$  a  $p(t = 0) = M \omega_r U_p$  Toto fundamentálne ohraničenie diktované kvantovou mechanikou sa nazýva štandardným kvantovým ohraničením (SQL) (z angl. *Standard Quantum Limit*) pre presnosť merania amplitúdy napätia na rezonátore

$$\Delta U_q^{SQL} = \Delta U_p^{SQL} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\rm r}}} = \frac{1}{C_{\rm r}} \sqrt{\frac{\hbar}{2Z_{\rm r}}} .$$
(17.138)

Zo vzťahu (17.135) dostávame štandardné kvantové ohraničenie pre presnosť merania energie rezonátora

$$\Delta E_{\rm r}^{SQL} = \frac{U_{\rm r}}{Z_{\rm r}\omega_{\rm r}} \Delta U_q^{SQL} = \sqrt{\hbar\omega_{\rm r}E_{\rm r}} = \hbar\omega_{\rm r}\sqrt{n_f} , \qquad (17.139)$$

kde  $n_f$  je počet fotónov v rezonátore. Toto ohraničenie však neznamená, že nemôžeme určiť energiu rezonátora presnejšie. Kvantová mechanika to povoľuje, ak

<sup>&</sup>lt;sup>33</sup>Máme na mysli meranie v samotnom princípe, t.j. merací prístroj získava súčasne informáciu o fáze aj amplitúde signálu. Príkladom je klasický zosilňovač, ktorého výstup môžeme zobraziť na osciloskope.

budeme merať napr. len počet fotónov. Jednoduchým príkladom presného merania počtu fotónov v rezonátore je vyvŕtanie malej dierky v dutinovom rezonátore, pred ktorú sa postaví kamera, v ktorej sa točí film. Každý dopad fotónu na film spôsobí svetlú škvrnu. Ak počkáme dostatočne dlho, môžeme s ľubovoľnou presnosťou určiť počet fotónov. Informácia získavaná o fáze fotónového poľa v rezonátore je nulová, neurčitosť fázy a presnosť merania energie je 'nekonečná'. Avšak na konci merania budú všetky fotóny z rezonátora 'zničené'<sup>34</sup>. Existuje však aj iný, sofistikovanejší spôsob merania, ktorý zmeria počet fotónov rovnako presne, ale zachová všetky fotóny v rezonátore. Stačí použiť namiesto filmu zrkadlo. Fotón sa odrazí naspäť do rezonátora, odovzdajúc hybnosť zrkadlu. Meraním svetelného tlaku, ktorým fotóny pôsobia na zrkadlo, môžeme určiť počet fotónov v rezonátore. Presnosť takéhoto merania je daná vzťahom

$$\Delta E_{\rm m} \frac{\hbar}{\tau_{\rm m}} , \qquad (17.140)$$

kde  $\tau_{\rm m}$  je čas merania. Štandardné kvantové ohraničenie je teda možne prekonať, ak je merací pristroj navrhnutý tak, že je citlivý len na meranú veličinu a necitlivý na kanonicky združenú veličinu. Pri meraní jednej veličiny totiž dochádza k neodvratnému ovplyvňovaniu kanonicky združenej veličiny, ktoré je tým väčšie, čím presnejšie danú veličinu meriame. Ak sa naviac pri meraní nemení meraná veličina, hovoríme o kvantovom nedemolujucom meraní. Keďže meraná veličina, ktorej v Heisenbergovom obraze zodpovedá operátor  $\hat{A}_H(t)$ , sa nemá počas merania meniť, musí platiť

$$\frac{\partial |\hat{A}_H(t)\rangle}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H(t)] = 0 . \qquad (17.141)$$

Postačujúcou podmienkou k tomu, aby meranie bolo QND je, aby operátor meranej veličiny komutoval s Hamiltoniánom sústavy. Táto podmienka je pre systém qubitrezonátor, ktorý je popísaný hamiltonáinom (17.134), splnená keďže

$$[\hat{H}, \hat{\sigma}_3] = 0 . \tag{17.142}$$

Teraz na spine názorne vysvetlíme, čo je QND meranie. Ak meriame spin v nulovom magnetickom poli, Sternov-Gerlachov aparát spĺňa podmienku QND. Nech je stav spinu akýkoľvek, po meraní bude vo vlastnom stave, ktorý meria Sternov-Gerlachov aparát. Každé ďalšie meranie<sup>35</sup> rovnakým aparátom dá už ten istý výsledok, bez ohľadu na to, kedy bude ďalšie meranie vykonané<sup>36</sup>. Ak však vytvoríme dvojhladinový systém, t.j. spin vložíme do magnetického poľa v smere osi 3, situácia sa radikálne zmení. Ak spin pripravíme v čase t = 0 vo vlastnom stave operátora  $\sigma_1$ , t.j. Blochov vektor totožný s jednotkovým vektorom v smere osi 1, Blochov vektor začne

 $<sup>^{34}</sup>$ Fotón je totiž pohltený molekulou chloridu strieborného, pričom sa vytvorí voľný atóm striebra. Ten pri vyvolaní filmu pôsobí ako zárodok, takže po vyvolaní sa objavia svetlé škvrny len na miestach dopadu fotónu.

 $<sup>^{35}\</sup>mathrm{Napr.}$ z dôvodu zvýšenia presnosti akumulovaním signálu.

 $<sup>^{36}\</sup>mathrm{Uvažujeme}$ ideálny, dokonale izolovaný spin.

precesovať okolo osi 3. Ak budeme merať priemet spinu v smere osi 1 Sternovým-Gerlachovým aparátom, výsledok merania bude časovo závislý, a stredná hodnota bude 0. Operátor  $\hat{\sigma}_1$  nekomutuje s hamiltoniánom, ktorý je úmerný  $\sigma_3$ . Ak však budeme merať Sternovým-Gerlachovým aparátom v smere osi 3, po meraní bude spin vo vlastnom stave operátora  $\sigma_3$  a preto v ňom ostane bez ohľadu na to, či vykonáme ďalšie merania tým istým aparátom alebo nie. V takomto prípade môžeme zvýšiť presnosť ďalším meraním<sup>37</sup>. Jednoduchý kvantovomechanický model systému rezonátor-dvojhladinový systém dáva kvalitatívnu predpoveď, že frekvencia signálu sa bude meniť podľa toho, v akom vlastnom stave  $\sigma_3$  sa qubit nachádza. Realistickejší model by zahŕňal aj dekoherenciu qubitu a útlm rezonátora, ktoré však zmenia výsledky len kvantitatívne.

Uvažujme teraz klasický RLC obvod naviazaný na qubit, t.j.  $\hbar\omega_{\rm r}\ll k_{\rm B}T\ll 2\Delta$ . Keďže RLC obvod je klasický makroskopický objekt, jeho vplyv na qubit započítame vo forme oscilujúceho magnetického toku, ktorý je vytváraný oscilujúcim prúdom  $I_{\rm rf}$ v cievke. Ak je amplitúda oscilujúceho magnetického toku dostatočne malá, tak že môžeme zanedbať prechody na vyššiu energetickú hladinu v dôsledku Landauovho-Zenerovho tunelovania, t.j.  $\Delta\gg\sqrt{M_{\rm q,r}I_{\rm q}I_{\rm rf}\hbar\omega_{\rm rf}}$ , energia qubitu bude adiabaticky sledovať energetickú hladinu

$$E_{\pm}(t) = \pm \sqrt{\epsilon^2(t) + \Delta^2}$$
, (17.143)

kde  $\epsilon(t) = I_{\rm q}(M_{\rm q,r}(I_{\rm dc} + I_{\rm rf}\cos\omega_{\rm r}t) - \Phi_{\rm o}/2)$ a $I_{\rm dc}$  je jednosmerný prúd tečúci cez cievku. Keďže qubit je stále vo vlastnom stave hamiltoniánu, môžeme napísať klasický lagranžián rezonátora započítajúc vlastnú energiu qubitu ako dodatočnú potenciálnu energiu:

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{U} = \frac{1}{2} L_{\rm r} \dot{q}^2 - E_{\pm} (\Phi_{dc} + M_{\rm q,r} \dot{q}) - \frac{1}{2} \frac{q^2}{C_{\rm r}}, \qquad (17.144)$$

kde q je náboj na kondenzátore a  $\dot{q}$  je oscilujúci prúd v cievke. Takýto lagranžián by viedol na nelineárne pohybové rovnice

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \left(L_{\rm r} - M_{\rm q,r}^2 \frac{\partial^2 E_-(\Phi_{dc} + M_{\rm q,r}\dot{q})}{\partial \Phi^2}\right) \ddot{q} + \frac{q}{C_{\rm r}} = 0 , \qquad (17.145)$$

avšak pre malé amplitúdy prúdu  $\dot{q}$  ho môžeme linearizovať nahradením  $E_{\pm}(\dot{q})$  Taylorovým rozvojom do druhého rádu okolo  $\Phi_{dc} = M_{q,r}I_{dc}$ . Dostávame jednoduchý

 $<sup>^{37}</sup>$ Aby sme sa vyhli nedorozumeniu, presnejšie špecifikujeme čo máme na mysli pod zvýšením presnosti merania. Detektory zvyčajne nemajú dostatočnú citlivosť a pri meraní jedného kvantového objektu je výsledkom zašumený signál. Zvyčajne nie je možné určiť stav spinu iba z jedného merania. Je preto potrebné 'vytiahnuť' signál zo šumu opakovaním merania a akumulovaním signálu. Signál rastie s počtom meraníN lineárne, kdežto šum iba ako $\sqrt{N}$ . Ak meraním nedemolujeme meranú veličinu, môžeme N urobiť 'nekonečne' veľkým. Ak však každé meranie ovplyvní meranú veličinu, chyba sa bude postupne akumulovať. Ak súčasne meriame aj kanonicky združenú veličinu, každé meranie spôsobuje ovplyvnenie meranej veličiny, čo vedie na štandardné kvantové ohraničenie presnosti merania. To nie je možné prekonať, aj keby sme mali ideálny kvantovo limitovaný detektor.

lagranžián častice v parabolickom potenciáli:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}m^*\dot{q}^2 - \frac{1}{2}k^*q^2 , \qquad (17.146)$$

ktorej efektívna hmotnosť  $m^*$  závisí od zakrivenia energetickej hladiny

$$m^* = \left( L_{\rm r} - M_{\rm q,r}^2 \frac{d^2 E_-(\Phi_{\rm dc})}{d\Phi_{\rm dc}^2} \right).$$
(17.147)

Rezonančná frekvencia rezonátora

$$\omega_{0} = \sqrt{\frac{k^{*}}{m^{*}}} \approx \omega_{\rm r} \left( 1 + \frac{M_{\rm q,r}^{2}}{2L_{\rm r}} \frac{d^{2}E_{-}(\Phi_{\rm dc})}{d\Phi_{\rm dc}^{2}} \right)$$
(17.148)

obsahuje informáciu o tom, na ktorej energetickej hladine sa qubit nachádza.

Obidva prístupy, kvantovomechanický aj semiklasický dávajú rovnaký výsledok: rozdielnu rezonančnú frekvenciu rezonátora v závislosti od stavu qubitu v ňom. Počas celej doby merania je qubit buď na základnej alebo excitovanej hladine. Samotné meranie nespôsobuje prechody medzi hladinami, t.j. nemení stav qubitu a preto ide o QND meranie. Pre názornejší výklad môžeme semiklasický model vysvetliť na mechanickom analógu, ktorý je na obr. 17.14.

Namiesto RLC obvodu si predstavme mechanický lineárny oscilátor, reprezentovaný čiernou guľôčkou pohybujúcej sa po sínusoide, ktorý je prepojený tuhou tyčou so šedou guľôčkou pohybujúcou sa po krivke zodpovedajúvej energetickej hladine qubitu tak, že guľôčky sa môžu voľne pohybovať po tyči vo vertikálnom smere. Mechanický oscilátor musí tlačiť guľôčku hore



11.1

Obr. 17.14: Mechanický analóg qubitu a RLC rezonančného obvodu. Qubit je reprezentovaný šedou gulôčkou, pohybujúcou sa po kvantovaných energetických hladinách. RLC obvod je znázornený čiernou guľôčkou pohybujúcou sa po sínusoide. Výchylka guľôčky zodpovedá prúdu v cievke, ktorý mení magnetický tok qubitom.

kopcom (odovzdáva jej energiu), resp. je tlačený guľôčkou (prijíma energiu), ak sa tá valí dole kopcom. V prípade, že je zakrivenie energetickej hladiny nulové, rezonančná frekvencia rezonátora sa nemení, tak ako sa nezmení rezonančná frekvencia lineárneho oscilátora ak pridáme lineárny člen do potenciálnej energie. Pri nenulovej krivosti energetickej hladiny, po ktorej sa pohybuje šedá guľočka, sa zmení efektívna hmotnosť čiernej guľôčky podobne, ako sa zmení efektívna hmotnosť elektrónu pohybujúceho sa v kryštalickej mriežke<sup>38</sup>.

 $<sup>^{38}\</sup>mathrm{T\acute{a}}$ je tiež úmerná zakriveniu energetických hladín v<br/> k priestore.

Tento analóg nám tiež umožní vysvetliť mechanizmus odoberania (chladenia) a pumpovania energie RLC obvodu pomocou qubitu tzv. Sizyfovským mechanizmom. Pri procese chladenia musíme mať rezervoár, ktorému odovzdáme tepelnú energiu oscilátora a zdroj energie, ktorý toto umožní. Bez vonkajšieho zdroja energie by bol systém v tepelnej rovnováhe s rezervoárom s teplotou  $T_{\rm a}$ . Myšlienka chladenia je veľmi jednoduchá a je zobrazená na obr. 17.16. Jednosmerným prúdom  $I_{dc}$ nastavíme qubit do lineárnej oblasti závislosti  $E(\Phi_{dc})$ kde tepelné fluktuácie prúdu v cievke zvyšujú a znižujú energiu qubitu. Qubit vložíme do elektromagnetického rezonátora s frekvenciou, ktorá zodpovedá maximálnemu rozdielu energetických hladín qubitu v rámci tepelných fluktuácií. V dôsledku Purcellovho javu qubit veľmi rýchlo zrelaxuje do základného stavu vyžiarením modrého fotónu (proces 4'), ak sa vďaka tepelným fluktuáciam ocitne v rezonancii s rezonátorom. V základnom stave má gubit najnižšiu energiu v rámci tepelných fluktuácií, ktoré ho budú 'tlačiť' hore kopcom



Obr. 17.15: a) Fázový posun medzi budiacim prúdom rezonátora a napätím, ktorý je priamo úmerný zmene rezonančnej frekvencie ( $\tan \chi = 2Q\delta\omega/\omega_{\rm r}$ ), v závislosti od normovaného magnetického toku  $f_x = \Phi_{\rm e}/\Phi_0 - 1/2$  cez supravodivý qubit pri rôznych teplotách [24]. b) Teplotná závislosť fázového posunu v bode degenerácie, ktorá má rovnaký priebeh ( $\propto \tanh \Delta/k_{\rm B}T$ ) a fyzikálnu podstatu, ako teplotná závislosť magnetizácie atómov v paramagnetikách. c) Šírka poklesu fázového posunu je úmerná tunelovému rozštiepeniu  $\Delta$ , ktoré je teplotne nezávislé.

po dráhe 1'. Ak na qubit 'zasvietime' mikrovlným signálom s frekvenciou, ktorá zodpovedá najmenšej vzdialenosti energetických hladín qubitu v rámci tepelných fluktuácií, qubit bude excitovaný na vyššiu hladinu (proces 2', absorpcia zeleného fotónu). Na tejto hladine však tepelné fluktuácie budú opäť tlačiť qubit 'hore kop-

RLC obvod musí podobne ako Sizyfos tlačiť qubit 'donekonečna hore kopcom', čo ho stojí energiu. Mechanizmus chladenia možno tiež vysvetliť pomocou energetickej bilancie fotónov. Po vytlačení qubitu 'hore kopcom' po dráhe 1' qubit absorbuje 'zelený' mikrovlnný fotón (fotón s menšou energiou) od mikrovlného zdroja (proces 2'). Qubit sa ocitne na vzbudenej hladine a tepelné fluktuácie musia tlačiť qubit opäť 'hore kopcom' po dráhe 3', pokým nedosiahne bod, kde odovzdá energiu rezonátoru vyžiarením modrého fotónu (proces 4'), čím sa uzavrie cyklus chladenia. Qubit je opäť na základnej hladine, ale systém qubit-RLC obvod vyžiaril väčšiu ener-



Obr. 17.16: Schematické znázornenie Sizyfovského chladenia a pumpovania. Písmená ččervená (nízko energetický), z-zelená (stredno energetický), m-modrá (vysoko energetický) označujú energiu fotónov v gigahertzovej oblasti.

giu ako prijal. Táto energia bola odobratá tepelným fluktuáciam RLC obvodu, ktorý sa ochladil. Ak frekvencia mikrovlnného signálu je vyššia ako rezonančná frekvencia rezonátora, qubit sa bude pohybovať po dráhe 1-2-3-4 a bude koherentne pumpovať energiu do mechanického oscilátora, pričom je možné dosiahnuť stav lasingu. Systém qubit-rezonátor by fungoval ako laser, či presnejšie povedané maser [25].

#### 17.8 Kvantové logické hradlá

V predchádzajúcich častiach sme ukázali, že supravodivý qubit sa správa ako umelý atóm a môžeme na ňom demonštrovať kvantové javy známe z kvantovej optiky. Aby sa však dal použiť na stavbu kvantového počítača, musíme vedieť pomocou neho vytvoriť univerzálne kvantové logické hradlo. Univerzálne hradlá a unitárne operácie s jedným qubitom postačujú na zostrojenie univerzálneho kvantového počítača. Jedným z univerzálnych hradiel je tzv. control not (Cnot) hradlo. Má dva vstupy  $Q^{(1)}$ ,  $Q^{(2)}$  a dva výstupy  $Q^{(1')}, Q^{(2')}$ . Klasické Cnot hradlo s kontrolným bitom (1) má logickú tabuľku Tab. 17.1. Na výstup  $Q^{(1')}$  Cnot hradla sa len skopíruje logická hodnota vstupu  $Q^{(1)}$  bez ohľadu na logickú hodnotu vstupu  $Q^{(1)}$ . Rovnako sa skopíruje logická hodnota vstupu  $Q^{(2)}$  na výstup  $Q^{(2')}$  ak  $Q^{(1)} = 0$ . Ak však  $Q^{(1)} = 1$ , na výstupe  $Q^{(2')}$  sa objaví logická negácia vstupu  $Q^{(2)}$ , t.j.  $Q^{(2')} = Q^{(2)}$ . Takúto klasickú operáciu môžeme zapísať pomocou operácie exkluzívny OR, XOR,



$Q^{(1)}$	$Q^{(2)}$	$Q^{(1')}$	$Q^{(2')}$
0	0	0	0
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0

Tabuľka 17.1: Logická tabuľka hradla Cnot

ktorý sa značí ako $\oplus^{39}$ , ako $Q^{(1')} = Q^{(1)}, Q^{(2')} = Q^{(1)} \oplus Q^{(2)}$ . Kvantové hradlo však môže mať vstupy v superpozícii stavov 0 a 1. Preto vstupy  $Q^{(1)}, Q^{(2)}$ a výstupy  $Q^{(1')}, (Q^{(2')}$ zapíšeme pomocou Diracovej notácie ako  $|AB\rangle$  a  $|A'B'\rangle$ . Po aplikovaní unitárnej c<br/>NOT operácie  $U_{cNOT}$ má platiť

$$A'B'\rangle = U_{cNOT}|AB\rangle \tag{17.149}$$

Žiadame, aby platili vzťahy  $|00\rangle = U_{cNOT}|00\rangle$ ,  $|01\rangle = U_{cNOT}|01\rangle$ ,  $|11\rangle = U_{cNOT}|10\rangle$ ,  $|10\rangle = U_{cNOT}|11\rangle$ . Operácii Cnot môžeme teda priradiť operátor, ktorý reprezentuje matica

$$U_{cNOT} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$
(17.150)

kde $|AB\rangle\equiv|A\rangle\otimes|B\rangle$ je tenzorový súčin vektorov.

$$|0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}, |1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} .$$
(17.151)

Napríklad stav

$$|01\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0\\1\\0\\0 \end{pmatrix}$$
(17.152)

Keďže výstup  $B' = A \oplus B$  závisí od logickej hodnoty A aj B, operáciu cNOT je možné zrealizovať len pomocou dvoch interagujúcich qubitov. Preto je potrebné zrealizovať väzbu medzi dvoma qubitmi. V prípade dvoch Josephsonových spojov resp. nábojového qubitu je možné využiť kapacitnú väzbu [26], ktorá sa realizuje pomocou zdieľaného kondenzátora. Keďže nedávno [27] bolo realizované cNOT hradlo z dvoch induktívne zviazaných tokových qubitov, popíšeme činnosť takéhoto hradla. Výhodou je tiež fyzikálna názornosť, keďže ide o magnetickú väzbu dvoch magnetických dipólov, ktoré sú tvorené perzistentnými prúdmi tečúcimi v supravodivom prstenci [28]. Hamiltonián takejto sústavy je

$$H = -\epsilon^{(1)}\hat{\sigma}_3^{(1)} - \Delta^{(1)}\hat{\sigma}_1^{(1)} - \epsilon^{(2)}\hat{\sigma}_3^{(2)} - \Delta^{(2)}\hat{\sigma}_1^{(2)} + J\hat{\sigma}_3^{(1)}\hat{\sigma}_3^{(2)} , \qquad (17.153)$$

 $^{39}$  Operácia XOR  $(Q^{(1)}\oplus Q^{(2)}$ má logickú hodnotu 1 vtedy a len vtedy, ak logické hodnoty  $Q^{(1)}$  a $Q^{(2)}$ sú rôzne.
kde  $J = \pm M_{12}I_{q1}I_{q2}$  je magnetická väzbová energia medzi dvoma tokovými qubitmi s perzistentnými prúdmi  $I_{q1}, I_{q2}$ , ktorých vzájomná indukčnosť je  $M_{12}$ . Znamienko plus je pre antiferomagnetickú a mínus pre feromagnetickú väzbu. Feromagnetická väzba by zodpovedala dvom supravodivým prstencom umiestnenýcm nad sebou, antiferomagnetická dvom prstencom umiestneným vedľa seba. Technologicky sa najľahšie realizuje antiferomagnetická väzba pomocou kinetickej indukčnosti úzkeho zdieľaného pásika medzi dvoma qubitmi. Maticu operátora cNOT si môžeme predstaviť ako blokovú maticu  $2 \times 2$ , kde nenulové matice sú len na diagonále. Tomu by zodpovedal hamiltonián s $\Delta^{(1),(2)} = 0$ , čo sa síce dá dosiahnuť, ale je to experimentálne náročné. Tunelové rozštiepenie závisí exponenciálne od kritického prúdu, ktorý môžeme kontrolovať magnetickým tokom, ak Josephsonov spoj nahradíme dcSQUIDom. Avšak všetky šumy budú potom ešte výraznejšie vstupovať do dekoherenčných časov. Preto sa v experimente  $\Delta^{(1),(2)}$  nemení, ale magnetickým poľom sa zabezpečí podmienka  $\epsilon^{(1),(2)} \gg \Delta^{(1),(2)}$ . V prvom priblížení môžeme členy úmerné  $\sigma_1^{(1),(2)}$  zanedbať a hamiltonián napísať v tvare

$$H = -\epsilon^{(1)}\hat{\sigma}_{3}^{(1)} - \left(\epsilon^{(2)}\hat{\sigma}_{0}^{(1)} - J\hat{\sigma}_{3}^{(1)}\right)\hat{\sigma}_{3}^{(2)}$$
(17.154)  
$$= - \begin{pmatrix} \epsilon^{(1)} + \epsilon^{(2)} - J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon^{(1)} - \epsilon^{(2)} + J & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon^{(2)} - \epsilon^{(1)} + J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\epsilon^{(1)} - \epsilon^{(2)} - J \end{pmatrix}.$$

Pri tomto zápise je ľahko vidieť, že energia qubitu  $Q^{(2)}$  závisí od stavu qubitu  $Q^{(1)}$ , keďže magnetický tok cez qubit  $Q^{(2)}$  je daný súčtom magnetického toku od vonkajšieho zdroja a magnetického toku, ktorý produkuje perzistentný prúd v qubite  $Q^{(1)}$ . Ak okrem konštantného magnetického toku priložíme aj striedavý magnetický tok s frekvenciou zodpovedajúcou rozdielu energetických hladín stavov  $|10\rangle$  a  $|11\rangle$  (rozdielu energií v treťom a štvrtom riadku matice (17.155)) a amplitúdou zodpovedajúcou  $\pi$  impulzu, stav qubitu  $Q^{(2)}$  sa zmení. Ak bol qubit  $Q^{(2)}$  v stave  $|0\rangle$  jeho stav sa zmení na  $|1\rangle$ , ak bol v stave  $|1\rangle$  zmení sa jeho stav na  $|0\rangle$ . Ak je qubit  $Q^{(1)}$  v stave  $|0\rangle$ , frekvencia striedavého magnetického toku nezodpovedá rozdielu energetických hladín a nemá preto žiadny vplyv na stavy qubitov. Stav qubitu (2) sa preklopí, len ak je controlný qubit (1) v stave  $|1\rangle$ , čo zodpovedá operácií cNOT. Unitárnu transformáciu zodpovedajúcu aplikovaniu striedavého rezonančného magnetického toku na jeden qubit poznáme (pozri 17.58). Napr. pri budení qubitu (2) mikrovlnným poľom zodpovedajúcim  $\mathbf{b} = (-\pi, 0, 0)$ , zodpovedajúca unitárna transformácia má tvar

$$U_{-\pi} = i\hat{\sigma}_1^{(2)} , \qquad (17.155)$$

čo je až na fázu bloková matica na diagonále operácie c<br/>NOT. Aplikovaním $-\pi$ impulzu na systém dvoch interagujúcich qubitov dostávame unitárnu transformáciu,

ktorá je až na fázový posun jedného gubitu identická s operáciou cNOT

$$U_{op} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix} .$$
(17.156)

Ak vypneme interakciu medzi qubitmi, môžeme aplikovaním ďalšieho mikrovlnného pulzu pootočiť len qubit  $Q^{(2)}$  o uhol  $\phi = -\pi/2$  tak, aby sme dostali želaný výsledok.

# 17.9 Deutschov kvantový algoritmus



Obr. 17.17: Implementovanie Deutschovho algoritmu pomocou cNOT a Hadamardových hradiel. Hardware sa skladá z dvoch qubitov. Hradlá sú realizované sériou mikrovlnných impulzov. V tejto časti ukážeme, ako sa dá kvantové hradlo použiť na kvantový výpočet, ktorý pobeží dvakrát rýchlejšie ako v prípade rovnakého klasického hradla. Deutsch postupoval podľa Einsteinovho odporúčania, že problém treba zjednodušiť tak ako sa len dá, avšak ani o trocha viac. Najjednoduchší procesor má jeden vstup a jeden výstup. V prípade klasického procesora vstupom a výstupom je klasický bit, v prípade kvantového procesora qubit. Procesor počíta zložitú funkciu f(x), a našou úlohou je zistiť, aká je to funkcia. Inými slovami, treba určiť logickú

tabuľku. Na to potrebujeme spustiť výpočet dvakrát, raz so vstupným bitom x = 0a raz sx = 1, bez ohľadu na to, či použijeme kvantový alebo klasický procesor. Existujú teda úlohy, ktoré ani kvantový počítač nevie vypočítať rýchlejšie ako klasický. Deutsch si však položil otázku, či neexistuje ľahší problém, kde by sa ukázala výhoda kvantového počítača. Ľahším problémom je napr. overiť, či funkcia f(0) = f(1), alebo či  $f(0) \neq f(1)$ . Klasický procesor musíme opäť spustiť dvakrát. Avšak v prípade kvantového procesora stačí výpočet spustiť len raz. Na to nám stačí zrealizovať Hadamardovo a podmienené cNOT hradlo. Hadamardovo hradlo je vlastne unitárna transformácia jedného qubitu, ktorej zodpovedá unitárny operátor

$$H \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1\\ 1 & -1 \end{pmatrix} , \qquad (17.157)$$

čo zodpovedá po<br/>otočeniu Blochovho vektora qubitu o uhly $\phi=\pi$ a<br/>  $\Theta=-\pi/2$ (vzťah (17.59). Podmienené c<br/>NOT hradlo je unitárna transformácia

$$|x, y \oplus f(x)\rangle = U_{cNOT}^f |x, y\rangle , \qquad (17.158)$$

ktorej výstup je podmienený výsledkom funkcie f(x) a nie samotného x. Deutschov algoritmus potom môžeme implementovať pomocou dvoch qubitov, kde schéma algoritmu je na obr. 17.17.

Napriek tomu, že v kvantovej schéme procesora sú tri Hadamardove hradlá a jedno cNOT hradlo, hardware kvantového procesora je tvorený len dvoma qubitmi. Samotná realizácia algoritmu spočíva v poslaní série mikrovlnných impulzov zodpovedajúcej amplitúdy, frekvencie a časovej dĺžky, ktoré realizujú Hadamardove hradlá, podmienený cNOT, ako aj samotnú funkciu f(x). Ak máme k dispozícii dvojicu zviazaných qubitov, s ktorými vieme manipulovať pomocou mikrovlnných impulzov, môžeme aplikovať taký impulz, ktorý realizuje cNOT operáciu, t.j. f(x) = x, alebo tiež iný impulz, napr.  $f(x) = \tilde{x}$ . Rovnako môžeme realizovať f(x) = 0, alebo f(x) = 1. Teoreticky je možné vypočítať tvar impulzov, ktoré budú realizovať jednotlivé funkcie f(x). Predstavme si, že teoretici ich vypočítajú, avšak chcú preveriť, či vieme realizovať Deutschov algoritmus na supravodivých qubitoch. Preto poskytnú sériu impulzov, ktorá realizuje funkciu, ktorá má vlastnosť f(0) = f(1) (môže to byť f(x) = 0 alebo f(x) = 1, čo sú konštantné funkcie), alebo funkciu  $f(0) \neq f(1)$  (f(x) = x alebo  $f(x) = \tilde{x}$ , tzv. vyvážené funkcie (angl. balanced function). Našou úlohou je zistiť, či séria impulzov prislúcha konštantnej a ktorá vyváženej funkcii aplikovaním iba jednej série impulzov. V klasickom procesore to nie je možné, ašak v kvantovom áno. Na začiatku nastavíme dva qubity do stavu

$$|\Psi_0\rangle = |x_0\rangle|y_0\rangle = |0\rangle|1\rangle . \tag{17.159}$$

Po aplikovaní mikrovlnných impulzov, zodpovedajúcich Hadamardovej unitárnej transformácii, qubity prejdú do stavu

$$|\Psi_1\rangle = |x_1\rangle|y_1\rangle = \frac{|0+1\rangle}{\sqrt{2}}\frac{|0-1\rangle}{\sqrt{2}}$$
 (17.160)

Samotný výpočet je realizovaný mikrovlnným impulzom<sup>40</sup>

$$|\Psi_{2}\rangle = |x_{1}\rangle|y_{1} \oplus f(x_{1})\rangle = \left(\frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}\right) \left(\frac{(|0\rangle - 1\rangle) \oplus f(x_{1})}{\sqrt{2}}\right)$$
$$= \frac{|0\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(0)}{\sqrt{2}} + \frac{|1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(1)}{\sqrt{2}} .$$
(17.161)

Ak f(0) = f(1)

$$\begin{aligned} |\Psi_2\rangle &= \frac{|0\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(0)}{\sqrt{2}} + \frac{|1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(0)}{\sqrt{2}} \\ &= \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(0)}{\sqrt{2}} = \pm \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle)}{\sqrt{2}} . \end{aligned}$$
(17.162)

 $<sup>^{40}</sup>$  Operácie 'násobenia', sčítania, odčítania a XOR dvoch vektorov sú binárne operácie, pre ktoré platí distributívny zákon.

Znamienko + alebo - závisí od toho, či f(0) = 0 alebo f(0) = 1. Avšak celková fáza vlnovej funkcie nie je merateľná. Preto z merania nevieme povedať či f(0) = f(1) = 0 alebo f(0) = f(1) = 0. Ak  $f(0) \neq f(1)$ 

$$\Psi_{2} = \frac{|0\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(0)}{\sqrt{2}} + \frac{|1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle) \oplus f(1)}{\sqrt{2}}$$
$$= \frac{|0\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|f(0)\rangle - |f(1)\rangle)}{\sqrt{2}} + \frac{|1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|f(1)\rangle - |f(0)\rangle}{\sqrt{2}}$$
$$= \pm \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \frac{(|0\rangle - |1\rangle)}{\sqrt{2}} .$$
(17.163)

Aplikovaním posledného Hadamardoveho hradla pretransformujeme prvý qubit do stavu

$$\pm |0\rangle \frac{(|0\rangle - |1\rangle)}{\sqrt{2}} \quad \text{ak } f(0) = f(1) ;$$
  
$$\pm |1\rangle \frac{(|0\rangle - |1\rangle)}{\sqrt{2}} \quad \text{ak } f(0) \neq f(1) .$$
(17.164)

Vzťah (17.164) môžeme zapísať v kompaktnom tvare

$$\Psi_3 = \pm \frac{|f(0) \oplus f(1)\rangle}{\sqrt{2}} \frac{|0\rangle - 1\rangle}{\sqrt{2}} .$$
 (17.165)

Jedným spustením výpočtu funkcie f(x) (aplikovaním jednej operácie  $y \oplus f(x)$ ) sme zistili jej globálnu vlastnosť, t.j. či je funkcia konštantná alebo vyvážená. Informáciu o tom obsahuje qubit (1). Aby si čitateľ uvedomil obrovskú výpočtovú silu, stačí výpočet rozšíriť na n-qubitov. Na n-bitovom procesore, kde  $x = |x_1, x_2, \ldots, x_n\rangle$ , je na zistenie, či je funkcia vyvážená, t.j. či f(x) = 0 pre presne polovicu všetkých možných vstupov a f(x) = 1 pre druhú polovicu, potrebných  $2^n$  spustení výpočtu f(x). Pri n-qubitovom procesore stačí spustiť f(x) len raz. 64-qubitový procesor je schopný spočítať úlohy, ktoré sú mimo možností akéhokoľvek klasického počítača. Spomeňme si na legendu o 'skromnej' odmene, ktorú údajne žiadal vynálezca šachu za svoju hru.  $2^{64}$  je tak obrovské číslo, že za celú históriu Zeme nebolo vypestovaných toľko zrniek pšenice, aby sa táto odmena dala vyplatiť. Klasický počítač, ktorý potrebuje na spustenie jedného výpočtu f(x) 1 ns, by potreboval stovky rokov na zistenie, či je funkcia vyvážená alebo konštantná<sup>41</sup>.

 $<sup>^{41}</sup>$ Aby sme boli korektní, treba povedať, že tento kvantový algoritmus nie je až taký silný oproti klasickým. Použitím Monte Carlo metódy, keď sa náhodne vyberajú vstupy x, je možné už po málo výpočtoch ( $\ll 2^n$ ) s veľkou pravdepodobnosťou určiť, či je funkcia vyvážená alebo konštantná. Existuje však omnoho silnejší algoritmus, tzv. Shorov algoritmus, ktorý dáva exponenciálny nárast vo výkone oproti najlepšiemu známemu klasickému algoritmu. Ide o faktorizáciu veľkých čísel na prvočísla. Keďže moderné kryptovacie algoritmy sú založené práve na faktorizácii veľkých čísel, skonštruovanie kvantového počítača by umožnilo veľmi rýchlo dešifrovať kryptované správy. Okrem toho by kvantový počítač mohol veľmi efektívne riešiť problémy kvantovej fyziky a chémie s aplikáciami nielen vo vedeckých odboroch ako chémia, biológia a medicína, ale aj vo farmaceutickom priemysle.

# 17.10 Záver

V tejto kapitole sme sa zoznámili s makroskopickými kvantovými javmi druhého rádu v supravodivých slaboviazaných štruktúrach. Ukázali sme, ako použiť kanonické kvantovanie na kvantovomechanický popis takýchto štruktúr, ktoré sa pri veľmi nízkych teplotách správajú ako umelé atómy. Tieto sme spojili do zložitejších systémov, ktoré umožňujú konštrukciu univerzálnych hradiel, ktoré by mohli slúžiť ako základná stavebná jednotka kvantových počítačov, ktorých výpočtová sila by bola exponenciálne väčšia ako u doteraz známych klasických počítačov. Táto oblasť sa v súčasnosti veľmi dynamicky rozvíja a dosahuje sa značný pokrok<sup>42</sup>. Prejavy kvantovej mechaniky sa pozorujú na súčiastkach, ktoré sú takmer viditeľné voľným okom (rádovo desiatky mikrometrov), navrhujú sa a realizujú stále zložitejšie systémy niekoľkých zviazaných supravodivých qubitov [30, 31, 27]. Z takýchto systémov sa dajú vyskladať zložitejšie štruktúry, ako napr. kvantový metamateriál. Výhodou je, že vlastnosti umelo vytvorených atómov, a teda aj metamateriálov, sú "insitu" laditeľné pomocou externého elektrického či magnetického poľa. To umožňuje konštrukciu veľmi citlivých detektorov, ktorých presnosť dosahuje kvantovú limitu. Najnovšie experimenty ukázali, že je možné pomocou supravodivých qubitov realizovať jedno-fotónové zdroje [32], ako aj jedno-atómový laser v GHz frekvenčnej oblasti [33]. Pomocou kvantových metamateriálov je zasa možné skonštruovať vysoko efektívny fotodetektor, schopný zaregistrovať jeden fotón v gigahertzovej oblasti [34]. Zaujímavou sa tiež javí možnosť chladenia nanomechanických oscilátorov pomocou supravodivého qubitu [35], ktoré by mohli byť schladené do svojho základného kvantovo-mechanického stavu. Okrem toho, že po vyše 100 rokoch by bol konečne zostrojený mechanický objekt, ktorého pohyb by musel byť popísaný kvantovou mechanikou, takéto mechanické oscilátory môžu byť použité ako veľmi citlivé detektory nielen vo fyzike, ale aj v biológii ako hmotnostné spektrometre bielkovín, biomolekúl či DNA [36]. Mnoho špičkových laboratórií na známych univerzitách v USA, Japonsku a Európe pracuje na týchto problémoch. Už teraz je však zrejmé, že tento výskum je 'behom na dlhé trate'. Najmä zostrojenie kvantového počítača je tak ambiciózna úloha, že možno bude vyžadovať úsilie nielen jednej generácie fyzikov, ak sa nám to vôbec niekedy podarí. Avšak bezpochyby tento výskum určite prinesie nové poznatky a technológie, ktoré nájdu svoje uplatnenie v praxi. Je dosť pravdepodobné, že niektorí z čitateľov sa tiež zúčastnia tohto výskumu v oblasti nízkych teplôt a supravodivosti, ktorý má v Čechách aj na Slovensku svoju tradíciu a dobrú odozvu v zahraničí.

# 17.11 Literatúra

- [1] W. H. Zurek, arXiv:quant-ph/0306072v1.
- [2] A. J. Leggett, A. Garg, Phys. Rev. Lett. 54, 857 (1985).
- [3] M. H. Devoret, Quantum Fluctuations in Electrical Circuits, Les Houches, Session LXIII (1995), (http://qulab.eng.yale.edu/documents/reprints/Houches\_fluctuations.pdf.
- [4] G. Wendin, V.S. Shumeiko, arXiv:cond-mat/0508729.

 $<sup>^{42}</sup>$ Pekné prehľadové články môže čitateľ nájsť v [4, 29].

- [5] L.D. Landau, J.M.Lifšic, Úvod do teoretickej fyziky 1.
- [6] J. M. Martinis et al., Phys. Rev. B 67, 094510 (2003).
- [7] M. H. Devoret et al., Phys. Rev. Lett. 55, 1908 (1985).
- [8] A. Wallraff et al., Review of Scientific Instruments 74, 3740 (2003), (arXiv:condmat/0204527)
- [9] M. A. Nielsen, I. L. Chuang Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [10] Quantum State Estimation, Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin/Heidelberg, (2004), ISBN 978-3-540-22329-0. online http://www.springerlink.com/content/3j58tr52lw2l/
- [12] O. Astafiev et al., Phys. Rev. Lett. 96, 137001 (2006).
- [13] Foundations of quantum mechanics in the light of new technology, Proceedings of the international symposium, Kokubunji, Tokyo, Japan Edited by S. Kamefuchi, August 29-31 1983, ISBN4-89027-001-9.
- $\left[14\right]$ L. D. Landau, J. M. Lifšic, Kvantová mechanika: Nerelativistická teória.
- [15] J. R. Friedman et al., Nature 406, 43 (2000).
- [16] C. H. van der Wal et al., Science 290, 773 (2000).
- [17] G. Blatter, Nature 406, 25 (2000).
- [18] Y. Nakamura et al., Nature 398, 786 (1999).
- [19] A. B. Zorin, Phys. Rev. Lett. 76, 4408 (1996).
- [20] M. Fox, Quantum Optics, An Introduction, Oxford University Press, New York (2006).
- [21] Ch. Gerry, P. Knight, Introductory Quantum Optics, Cambridge University Press, Cambridge (2005).
- $\left[ 22\right]$  G. Oelsner et~al.,zatiaľ nepublikované.
- [23] A. Wallraff et al., Nature **431**, 162 (2004).
- [24] M. Grajcar et al., Phys. Rev. B 69, 060501(R) (2004).
- [25]~ M. Grajcar et al. , Nature Physics 4, 612 (2008).
- [26] T. Yamamoto et al., Nature **425**, 941 (2003).
- [27] J. H. Plantenberg et al., Nature 447, 836 (2007).
- [28] A. Izmalkov et al., Phys. Rev. Lett. 93, 037003 (2004).
- [29] J. Q. You, and F. Nori, Phys. Today 58, 42 (2005).
- [30] M. Grajcar et al., Phys. Rev. Lett. 96, 047006 (2006).
- [31] J. Majer et al., Nature 449, 443, (2007).
- [32] A. A. Houck et al., Nature 449, 328 (2007).
- [33] O. Astafiev et al., Nature 449, 588 (2007).
- $[34]\,$  G. Romero, J. J. Garcia-Ripoll, E. Solano, arXiv:0811.3909v1.
- [35] I. Martin et al., Phys. Rev. B 69, 125339 (2004).
- [36] G. C. Hilton et al., Nature **391**, 672 (1998); Y. T. Yang et al., NanoLetters **6**, 583 (2006).

# 18 Vlastnosti tuhých látok pri nízkych teplotách

## A. Feher, M. Rotter

V tejto kapitole sa budeme zaoberať popisom nízkoteplotných vlastností tuhých látok, najmä ich tepelnou kapacitou, elektrickou a tepelnou vodivosťou. V ich popise ve všeobecnosti zlyháva klasická fyzika a pri znižovaní teploty je stále viac potrebný kvantovo-mechnický formalizmus. Vzhľadom k obrovskému rozsahu tejto témy je tento text treba chápať iba ako úvod do danej problematiky, ktorej sa venuje množstvo špeciálnych monografií a prehľadových prác (viď citovaná literatúra [1-22]. K podrobnejšiemu popisu týchto fyzikálnych vlastností pre supravodičov a kvapalné helium odkazujeme na príslušné kapitoly. Osobitne sa však budeme zaoberať Kapicovým odporom, ktorý je dôležitým ašpektom fyziky nízkých teplôt aj technickej kryogeniky, vznikajúcim pri prenose tepla cez rozhranie dvoch prostredí s odlišnými rýchlosťami zvuku, napr. normálneho kovu a kvapalného hélia.

# 18.1 Tepelná kapacita tuhých látok

Teoretické a experimentálne štúdium teplotnej závislosti tepelnej kapacity tuhých látok pri nízkych teplotách zohralo už z historického hľadiska veľmi dôležitú úlohu pri vzniku kvantovej fyziky. Pokles tepelnej kapacity látok pri znižovaní teploty a veľkosť elektrónového príspevku tepelnej kapacity kovov boli závažné experimentálne poznatky, ktoré klasická teória nedokázala objasniť. Tieto výsledky boli vysvetlené až pomocou kvantovej teórie.

Merania teplotnej závislosti tepelnej kapacity v oblasti nízkych teplôt sú jednou z najefektívnejších metód skúmania tuhých látok i dnes. Výsledky merania tejto makroskopickej termodynamickej veličiny obsahujú v sebe informácie o mikrofyzikálnych javoch prebiehajúcich v tuhej látke a možno ich použiť napríklad pri štúdiu dynamiky mriežky a kooperatívnych javov usporiadania v mriežke, kritických exponentov fázových prechodov pásmovej štruktúry, energetickej medzery supravodičov, energetického spektra magnetických excitácií, hyperjemného štiepenia jadrových energetických hladín atď.

Tepelná kapacita je definovaná ako množstvo tepla, potrebné na ohriatie nejakej látky o jednotku teploty. Špecifická tepelná kapacita je definované vzťahom:

$$C_{x,y...} = \frac{1}{m} \lim_{\Delta T \to 0} \left( \frac{\Delta Q}{\Delta T} \right)_{x,y,..} , \qquad (18.1)$$

kde *m* je hmotnosť látky,  $\Delta Q$  je teplo dodané látke,  $\Delta T$  je zmena teploty spôsobená teplom  $\Delta Q$  a x, y... sú konštantné veličiny v priebehu merania špecifickej tepelnej kapacity. Experimentálne sa zvyčajne stanovuje špecifická tepelná kapacita pri konštantnom tlaku  $C_{\rm p}$ , pretože rozdiel špecifických tepelných kapacít látok pri konštantnom tlaku a konštantnom objeme pri nízkych teplotách je veľmi malý. Napr.

pre čistú meď pri teplote kvapalného hélia (4.2 K) je $C_{\rm p}=90$  J/kg K a $C_{\rm p}-C_{\rm v}$ iba $10^{-9}$  J/kg K. Pokiaľ špecifická tepelná kapacita $C_{\rm p}$ sa vzťahuje k jednotke hmotnosti (g, kg.) hovoríme o mernej tepelnej kapacite, v skratke o mernom teple, ak tepelnú kapacitu vzťahujeme na jeden mól látky, hovoríme o molárnej tepelnej kapacite, v skratke o mólovom teple.

Energia, ktorú prostredníctvom tepla Q dodáme jednému mólu tuhej látke za konštantného objemu, spotrebuje sa celá na zvýšenie vnútornej energie látky U, preto mólové teplo možno vyjadriť vzťahom:

$$C_{x,y..} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{x,y...} = T\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_{x,y...}, \qquad (18.2)$$

kde S je entropia mólu látky.

Ak zohrejeme tuhú látku, teplo sa rozdelí medzi jednotlivé tepelné excitácie súborov častíc, ktoré vytvárajú látku. Podľa typu tepelných excitácií rozoznávame mriežkové teplo  $C_{\rm mr}$ , ktoré je spojené s kmitmi atómov kryštalickej mriežky alebo tzv. fonónové teplo, keďže kmity atómov vieme opišať pomocou kvazičastice fonón, ďalej elektrónové teplo  $C_{\rm el}$ , spojené s pohybom voľných elektrónov a v magnetických látkach je aj magnetické teplo  $C_{\rm mag}$  spojené s prítomnosťou magnetických excitácií. Okrem toho, v niektorých látkach sa objavuje tzv. Schottkyho príspevok k tepelnej kapacite  $C_{\rm Sch}$  spojený s prítomnosťou viac hladinových energetických hladín. Celkové mólové teplo  $C_{\rm tot}$  je možno vyjadriť jednoduchým súčtom príspevkov od jednotlivých súborov kvazičastíc:

$$C_{\rm tot} = C_{\rm mr} + C_{\rm el} + C_{\rm mag} + C_{\rm Sch}$$
 (18.3)

V ďalšom sa budeme zaoberať jednotlivými príspevkami k celkovému mólovému teplu.

#### 18.1.1 Mriežkové teplo

Explicitné vyjadrenie vzťahu (18.2) závisí od toho, čo dosadíme za vnútornú energiu U. V rámci klasickej teórie, vzhľadom k tomu, že každý kmitajúci atóm mriežky prispieva k celkovej energii mriežky hodnotou  $3k_{\rm B}T$ , pre molárnu tepelnú kapacitu v súlade so vzťahom (18.2) vychádza hodnota  $3Nk_{\rm B} = 3R = 24,943$  J/K mol (kde N je Avogadrovo číslo a R je plynová konštanta). Tento výsledok je matematickým vyjadrením Dulongovho a Petitovho pravidla: mólové teplo tuhých látok je konštantná veličina, rovnaká pre všetky látky a nezávislá od teploty. Z experimentu vyplýva, že pri bežných teplotách je hodnota mólového tepla väčšiny tuhých látok (chemických prvkov) naozaj blízka hodnote 24,94 J/K mol a prakticky nezávisí od teploty. Sú však aj výnimky, ako napr. berýlium, bór, kremík atď. Naviac, pri nízkych teplotách mólové teplo všetkých tuhých látok rýchlo klesá a v okolí nulovej absolútnej teploty konverguje k nule. V roku 1907 Einstein aplikoval na kmity atómov v mriežke Planckovu predstavu o kvantovaní energie elektromagnetického poľa. Základom tohto prístupu sú dva postuláty: (i) kryštál pozostávajúci z  $N_{\rm A}$ 

atómov je prezentovaný sústavou rovnakých harmonických oscilátorov, ktoré kmitajú na rovnakej frekvenci<br/>i $\omega_{\rm E}$  nezávislé jeden od druhého; (ii) energia oscilátorov je kvantovaná:

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega_E}{\exp\left\{\frac{\hbar \omega_E}{k_{\rm B}T}\right\} - 1} , \qquad (18.4)$$

kde $\hbar$  je Planckova konštanta (1,05.10^{-34} Js). Celková vnútorná energia mólu tuhej látky je:

$$U = 3N_{\rm A} \langle E \rangle \tag{18.5}$$

a molárna tepelná kapacita:

$$C_{\rm mr} = \frac{\partial U}{\partial T} = 3N_{\rm A}k_{\rm B} \left(\frac{\hbar\omega_{\rm E}}{k_{\rm B}T}\right)^2 \frac{\exp\left\{\frac{\hbar\omega_{\rm E}}{k_{\rm B}T}\right\}}{\left[\exp\left\{\frac{\hbar\omega_{\rm E}}{k_{\rm B}T}\right\} - 1\right]^2} .$$
 (18.6)

Ak zavedieme charakteristickú Einsteinovu teplotu  $\Theta_{\rm E} = \hbar \omega_{\rm E}/k_{\rm B}$ , je pre vysoké teploty  $T >> \Theta_{\rm E}$  podľa (18.6):

$$C_{\rm mr} = 3R \left[ 1 - \frac{1}{12} \left( \frac{\Theta_{\rm E}}{T} \right)^2 + \dots \right] ,$$
 (18.7)

kde $R=N_{\rm A}k_{\rm B}.$  Pre nízke teploty  $T<<\Theta_{\rm E}:$ 

$$C_{\rm mr} = 3R \left[ \left( \frac{\Theta_{\rm E}}{T} \right)^2 \exp\left\{ -\frac{\Theta_{\rm E}}{T} \right\} + \dots \right] . \tag{18.8}$$

Pre vysoké teploty je Einsteinov model v súlade s Dulongovým-Petitovým zákonom, zatiaľ čo pri nízkych teplotách iba kvalitatívne opisuje pokles tepelnej kapacity s teplotou, a veľmi rýchly exponenciálny pokles v blízkosti absolútnej nuly neodpovedal pozorovaným experimentálnym závislosťam. Debay ďalej rozvinul teóriu mólového tepla predpokladom, že látka má vlastnosti elastického kontinua a tuhej látke prislúcha celý súbor (spektrum) frekvencií kmitov z intervalu  $0 \leq \omega \leq \omega_{\rm D}$ , kde $\omega_{\rm D}$ je tzv. Debyova frekvencia, ktorá ohraničuje počet stojatých vĺn. Existencia tejto hraničnej frekvencie súvisí s tým, že v danom prostredí sa nemôže šíriť vlna, ktorej vlnová dĺžka je menšia ako medziatómová vzdialenosť. V rámci tejto teórie možno pre vnútornú energiu mólu tuhej látky odvodiť vzťah:

$$U = 3RT \, 3 \left(\frac{k_{\rm B}T}{\hbar\omega_{\rm D}}\right)^3 \int_0^{\frac{\hbar\omega_{\rm D}}{k_{\rm B}T}} \frac{x^3 dx}{e^{\rm x} - 1} , \qquad (18.9)$$

kde  $x = \hbar \omega / k_{\rm B} T$ . Pre mólové teplo potom platí:

$$C_{\rm mr} = \frac{\partial U}{\partial T} = 3R \left[ 12 \left( \frac{k_{\rm B}T}{\hbar\omega_{\rm D}} \right)^3 \int_0^{\frac{\hbar\omega_{\rm D}}{k_{\rm B}T}} \frac{x^3 dx}{e^{\rm x} - 1} - \frac{3\frac{\hbar\omega_{\rm D}}{k_{\rm B}T}}{e^{\frac{\hbar\omega_{\rm D}}{k_{\rm B}T} - 1}} \right] .$$
(18.10)

Tento vzťah dostal názov Debye<br/>ova rovnica. Analogicky, ako v Einsteinovom modeli, definujeme Deby<br/>ovu teplotu $\Theta_{\rm D} = \hbar \omega_{\rm D}/k_{\rm B}$ . Aj v tomto modeli pre vysoké teploty<br/>  $(k_{\rm B}T \gg \hbar \omega_{\rm D})$ dospejeme k Dulongovmu-Petitovmu zákonu, ale pre nízke teploty<br/>  $(k_{\rm B}T \ll \hbar \omega_{\rm D})$ dostaneme pre mólové teplo:

$$C_{\rm mr} = \frac{12\pi^4 R}{5\left(\frac{\hbar\omega_{\rm D}}{k_{\rm B}}\right)^3} T^3 = \beta T^3 , \qquad (18.11)$$

kde  $\beta$  je konštanta charakteristická pre každú tuhú látku<sup>1</sup>. Vidíme, že v oblasti nízkych teplôt vedie Debyeho rovnica ku kubickej závislosti mólového tepla od teploty, čo je v súlade s experimentom. Pre teploty medzi uvedenými extrémnymi teplotami možno vypočítať integrál v Debayeho rovnici pomocou približných metód. Debyeho teplotu  $\Theta_{\rm D}$  možno pokladať za hranicu medzi vysokými a nízkymi teplotami pre danú lótku. Vý

mi pre danú látku. Výraz (18.11) sa môže používať v teplotnej oblasti  $T \leq 10^{-2} \Theta_{\rm D}$ . Pri teplotách väčších než  $0, 2 \Theta_{\rm D}$ , Debyeho teplota nie je konštantná a je funkciou teploty. Veľká hodnota Debayovej teploty ukazuje na to, že v mriežke pôsobia silné medziatómové sily, a tým ma mriežka veľkú pevnosť. Skutočnosť, že niektoré prvky ako napr. berýlium, bór, kremík, diamant a d'. nespĺňajú Dulongove-Petitove pravidlo už pri izbových teplotách, vysvetľuje sa tak, že pri týchto látkach je charakteristická Debyeho teplota veľmi vysoká,



Obr. 18.1: Fonónové spektra: a/ Einsteinov model, b/ Debayov model, c/ Blackmanov model, d/ skutočné spektrum mriežky sodíka [14].

takže pre ne je izbová teplota už nízkou teplotou. Kým pre olovo  $\Theta_D = 363$  K, pre striebro  $\Theta_D = 483$  K, zatiaľ napr. pre diamant  $\Theta_D = 2270$  K.

V Debyovej teórii sa neuvažuje závislosť rýchlosti šírenia pozdĺžnych a priečnych vĺn od frekvencie. Blackman a ďalší autori významné prispeli ku zlepšeniu

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Takistý výsledok sme dostali pri analýze ideálneho Boseho plynu v úvodnej kapitole; je dôsledkom kvantovej štatistiky bosonov a lineárneho disperzného zákona fonónov. Platí preto napr. pre kvapalné <sup>4</sup>He pri  $T \rightarrow 0$ , ale pri vyšších teplotách už nie, lebo sa uplatnia rotóny s medzerou v energetickom spektre.

teórie kmitov mriežky. Uvažovali skutočné medziatóm<br/>ové sily aj medzi vzdialenejšími atómami. Dospeli k modelu, ktorý viac odráža reálne fon<br/>ónové spektrum, teda závislosť hustoty fonónových stavov na frekvenci<br/>i $g(\nu)$ . Na obr. 18.1 sú porovnané fonónové spektra pre rôzne modely.

#### 18.1.2 Elektrónové teplo

Podobne ako v prípade výpočtu molóveho tepla mriežky na základe klasickej fyziky, zlyháva prístup klasickej fyziky aj pri stanovení príspevku vodivostných elektrónov k molárnej tepelnej kapacite. Preto aj v tomto prípade musíme si na pomoc prizvať kvantovú fyziku. Vzhľadom k tomu, že postup pri výpočte molového tepla súboru N častíc v konštantnom objeme V je všeobecne platný pre súbor akýkoľvek častíc (fonóny, elektróny, magnóny a ď.), najprv ho zrekapitulujeme a potom aplikujeme na výpočet molového elektrónového tepla. Predovšetkým je potrebne určiť veľkosť teplotne závislej časti vnútornej energie U. K tomu je potrebne poznať sústavu energetických hladín prislúchajúcich časticiam systému. V kvantovej štatistike je stav každej častice charakterizovaný elementárnou bunkou fázového priestoru s objemom  $h^3$  (h je Planckova konštanta). Určitému systému odpovedá určité rozdelenie buniek vo fázovom priestore. Pre počet elementárnych buniek, ktorým odpovedá absolútna hodnota hybnosti v intervale p, p + dp platí:

$$D'(p) dp = \frac{V}{h^3} 4\pi p^2 dp .$$
 (18.12)

Vzťah (18.12) možno taktiež chápať ako aj hustotu kvantových stavov na interval hybnosti p, p + dp. Aby sme získali plný počet kvantových stavov pri daných hodnotách hybnosti pre častice s nenulovým spinom s, je treba výraz (18.12) vynásobiť veličinou (2s + 1), pretože stav častice je určený aj počtom nezávislých orientácií jej spinu. Ďalšou základnou charakteristikou súboru častíc je v kvantovej mechanike ich energetické spektrum, tzv. disperzný vzťah  $\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{p})$ , čo umožňuje transformovať funkciu D'(p) do novej funkcie  $D(\varepsilon)$  vzťahom:

$$D'(p) dp = D(\varepsilon) d\varepsilon , \qquad (18.13)$$

čo znamená, že hustotu kvantových stavov na interval hybnosti $p, \ p + dp$  transformujeme na hustotu kvantových stavov na interval energií $\varepsilon, \ \varepsilon + d\varepsilon$ . Ďalšia črta kvantových teórií tepelnej kapacity tuhých látok je použitie kvantových štatistik. Ak označíme stredný počet častíc v elementárnej bunke fázového priestoru funkciou  $f(\varepsilon)$ , potom

$$f(\varepsilon) = \left[\exp\left(\frac{\varepsilon - \mu(T)}{k_{\rm B}T}\right) \pm 1\right]^{-1} , \qquad (18.14)$$

kde  $\mu(T)$  je chemický potenciál systému. V tvare so znamienkom mínus sa  $f(\varepsilon)$  nazýva Boseho-Einsteinova rozdeľovacia funkcia a značí sa  $f_{\rm BE}(\varepsilon)$ . Touto štatistikou sa riadia bozóny. Ak sa počet bozónov nezachováva,  $\mu(T) = 0$ . V tvare so znamienkom plus sa funkcia nazýva Fermiho-Diracova rozdeľovacia funkcia  $f_{\rm FD}(\varepsilon)$ . Pre chemický potenciál fermiónov platí pri nízkych teplotách  $\mu(T) \approx \mu(0) \approx \varepsilon_{\rm F}$ .

Fermiho energetická hladina  $\varepsilon_{\rm F}$  je najvyšší energetický stav obsadený fermiónom pri T = 0 K. Z definície  $f(\varepsilon)$  a  $D(\varepsilon)$  vyplýva, že súčin  $f(\varepsilon) D(\varepsilon)d\varepsilon$  udáva stredný počet častíc systému s energiou v intervale  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon + d\varepsilon$  a teda pre strednú energiu celého systému častíc platí:

$$U = \int_0^\infty \varepsilon f(\varepsilon) D(\varepsilon) d\varepsilon . \qquad (18.15)$$

Parciálnou deriváciou tohto výrazu podľa teploty dostaneme na základe definície (18.2) hľadanú tepelnú kapacitu skúmaného súboru častíc. Poznajúc všeobecný postup pri výpočte molového tepla súboru častíc, aplikujme teraz tento postup na súbor voľných elektrónov. Predpokladajme, že skúmaná látka má objem V a obsahuje N voľných elektrónov, ktorých počet sa nemení a každý má hmotnosť  $m_0$ . Podľa Sommerfeldovej teórie tvoria voľné elektróny v kove ideálny plyn fermiónov a ich disperzný vzťah ma tvar  $\varepsilon = p^2/2m_0$ . Pri započítaní spinu elektrónu s = 1/2 vo vzťahu (18.12) s uvážením transformácie (18.13) a s použitím disperzného vzťahu, možno pre hustotu energetických stavov systému voľných elektrónov v intervale  $\varepsilon$ ,  $\varepsilon + d\varepsilon$  písať:

$$D_0(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m_0}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon . \qquad (18.16)$$

Pri T = 0  $f_{\rm FD}(\varepsilon) = 1$  pre  $\varepsilon \le \varepsilon_{\rm F}$  a  $f_{\rm FD}(\varepsilon) = 0$  pre  $\varepsilon > \varepsilon_{\rm F}$ . Teda:

$$N = \int_0^\infty D_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad a \quad U(0) = \int_0^{\varepsilon_{\rm F}} \varepsilon D_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad . \tag{18.17}$$

Pri T > 0, ale súčasne dostatočne nízkych teplotách, aby elektrónový plyn bol ešte čiastočne degenerovaný t.j.  $k_{\rm B}T \ll \varepsilon_{\rm F}$ , resp.  $T \ll T_{\rm F}$ , kde  $T_{\rm F}$  sa definuje vzťahom  $k_{\rm B}T_{\rm F} = \varepsilon_{\rm F}$ , prechádza časť elektrónov z energetických hladín tesne pod  $\varepsilon_{\rm F}$  na vyššie hladiny tesne nad  $\varepsilon_{\rm F}$ . Tepelná excitácia sa týka len elektrónov s energiami blízkymi  $\varepsilon_{\rm F}$ , ktoré tvoria len malú časť z celkového počtu N voľných elektrónov. Teplotne závislá časť vnútornej energie systému voľných elektrónov je daná rozdielom (18.15) a (18.17):

$$U = \int_0^\infty \varepsilon f_{\rm FD}(\varepsilon, T) D_0(\varepsilon) d\varepsilon - \int_0^{\varepsilon_{\rm F}} \varepsilon D_0(\varepsilon) d\varepsilon . \qquad (18.18)$$

Z čoho pre

$$C_{\rm el} = \int_0^\infty \left(\varepsilon - \varepsilon_{\rm F}\right) \frac{\partial f_{\rm FD}(\varepsilon, T)}{\partial T} \ D_0(\varepsilon) d\varepsilon \ . \tag{18.19}$$

Keďže  $\partial f_{\rm FD}(\varepsilon, T) / \partial T \neq 0$ iba v blízkom okolí  $\varepsilon_{\rm F}$ , môžme  $D_0(\varepsilon)$  nahradiť  $D_0(\varepsilon_{\rm F})$  a túto vyniesť spod znaku integrácie. Z (18.17) a (18.16) vyplýva

$$D_0(\varepsilon_{\rm F}) = \frac{3N}{2} \left[ \left( 3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{3/2} \frac{\hbar^2}{2m_0} \right]^{-1} = \frac{3}{2} \frac{N}{\varepsilon_{\rm F}} = \frac{3}{2} \frac{N}{k_{\rm B}} \frac{1}{T_{\rm F}} .$$
(18.20)

S použitím substitúcií  $x = (\varepsilon - \varepsilon_{\rm F})/k_{\rm B}T$  a  $x_{\rm d} = T_{\rm F}/T$  dostaneme:

$$C_{\rm el} = k_{\rm B}^2 T D_0(\varepsilon_{\rm F}) \int_{-\mathbf{x}_{\rm d}}^{\infty} \frac{x^2 e^{\mathbf{x}} dx}{\left[e^{\mathbf{x}} + 1\right]^2} .$$
(18.21)

Ak dolnú medzu integrál<br/>u $-x_{\rm d}$ nahradíme $-\infty,$  potom integrál sa rovn<br/>á $\pi^2/3$ a molové elektrónové teplo

$$C_{\rm el} = \frac{\pi^2}{3} k_{\rm B}^2 D_0(\varepsilon_{\rm F}) T . \qquad (18.22)$$

Ak skúmame jeden mól kovu, ktorý obsahuje  $N_A$  atómov, a každý atóm prispieva do plynu voľných elektrónov z elektrónmi, potom  $N = zN_A$  a pre molové teplo dostávame:

$$C_{\rm el} = \frac{\pi^2}{2} \frac{zR}{T_{\rm F}} T = \gamma_0 T , \qquad (18.23)$$

kde  $\gamma_0$  je tzv. Sommerfeldová konštanta<sup>2</sup>. Experimenty ukazujú, že pri nízkych teplotách molové teplo elektrónov presne spĺňa lineárny teplotný zákon. Rozdiely medzi teoretickým odhadom a experimentálnou hodnotou  $\gamma$  sa sčasti podarí odstrániť zavedením efektívnej hmotnosti elektrónov a započítaním interakcie elektrónov s elektrónmi, fonónmi a magnónmi.

#### 18.1.3 Magnetické teplo

V látkach môžu existovať rôzne typy magnetického usporiadania (feromagnetické, ferimagnetické, antiferomagnetické atď.). V základnom magnetickom stave pri teplote absolútnej nuly nie sú prítomné žiadne magnetické excitácie. Pri  $T \neq 0$  teplná energia mriežky  $k_{\rm B}T$  môže kreovať magnetické excitácie (spinové vlny), ktoré nazývame magnónmi. Magnóny sa riadia Boseho-Einsteinovou štatistikou a môžu prispievať k celkovému molovému teplu látky.

Ide o tzv. magnónové príp. magnetické molové teplo. Dovolené frekvencie feromagnetických a ferimagnetických spinových vĺn v prípade veľkých vlnových dĺžok sú priamo úmerné druhej mocnine vlnového vektora. Frekvencie spinových vĺn v antiferomagnetikách sú lineárnou funkciou vlnového vektora (analógia s fonónmi). Magnetické teplo, vypočítané podľa postupu uvedenému v predchádzajúcej kapitole, dáva v oblasti nízkych teplôt pre feromagnetické a ferimagnetické magnóny teplotnú závislosť:

$$C_{\rm mag} = \delta T^{3/2} \tag{18.24}$$

a pre antiferomagnetické magnóny závislosť:

$$C_{\rm mag} = \xi \, T^3. \tag{18.25}$$

Pre magnetické látky s energetickou medzerou  $\Delta$  v spektre magnónov, výrazy (18.24) a (18.25) sa násobia exp $(-\Delta/k_{\rm B}T)$ . Veľké hodnoty  $C_{\rm mag}$  sa pozorovali

 $<sup>^2 \</sup>rm Odporúčame porovnať toto konkrétne odvodenie s obecným prípadom ideálneho Fermiho plynu v úvodnej kapitole.$ 

v tepelnej kapacite kovov vzácnych zemín. Napr., v teplotnej oblasti od 4 K do 20 K pre Gd bola experimentálne pozorovaná závislosť  $C_{\rm mag}=24\,T^{3/2}\exp{(-26\,T)}$ , pre Dy $C_{\rm mag}=107\,T^{3/2}\exp{(-31\,T)}$ a pre Ho $C_{\rm mag}=1,5\,T^{3,2}$ . Zvlášť zaujímavé sa javí štúdium magnetického tepla v okolí magnetických fázových prechodov a štúdium rôznych exotických magnetických excitácií v nízkorozmerných magnetických materiáloch pomocou merania magnetického tepla.

## 18.1.4 Príspevok od Schottkyho javu

Ďalší príspevok k celkovému molovému teplu môže byť tzv. Schottkyho príspevok  $C_{\rm Sch}$ , ktorý odpovedá situácii, keď energetický stav častíc v látke sa skladá z dvoch alebo viacerých energetických hladín. Tento jav je najvýznamnejší pri paramagnetických látkach, v ktorých rozštiepenie hladín môže nastať vplyvom kryštálového poľa okolitých iónov, vplyvom dipólovo-dipólovej alebo výmennej interakcie. Výpočet pre prípad dvoch hladín vzdialených od seba o energetickú medzeru  $\Delta$  a s degeneráciou hladín  $n_0$  a  $n_1$  poskytuje pre Schottkyho príspevok:

$$C_{\rm Sch} = N_{\rm A} \left(\Delta\right)^2 n_0 \exp\left(\frac{\Delta}{k_{\rm B}T}\right) \frac{1}{\left\{k_{\rm B}T^2 n_1 \left[1 + \left(\frac{n_0}{n_1}\right) \exp\left(\frac{\Delta}{k_{\rm B}T}\right)\right]^2\right\}} .$$
 (18.26)

Z analýzy vzťahu (18.26) plynie, že pre teploty  $k_{\rm B}T \ll \Delta$  Schottkyho molové teplo rastie exponenciálne s teplotou a pre  $k_{\rm B}T \gg \Delta$  je  $C_{\rm Sch} \sim T^{-2}$ . Úloha sa dá riešiť aj pre viacero hladín. Typickým prejavom Schottkyho príspevku je široké maximum na teplotnej závislosti tepelnej kapacity. Špecifickým prípadom Schottkyho príspevku je tzv. jadrové teplo, ktoré vzniká v dôsledku hyperjemného rozštiepenia hladín jadrového magnetického momentu v efektívnom magnetickom polí, ktoré pochádza od okolitých orbitálnych a vodivostných elektrónov. Tento príspevok bol pozorovaný v kobalte, MnF<sub>2</sub>, v niektorých kovoch vzácnych zemín a ď.

#### 18.1.5 Merné teplo rôznych materiálov

V oblasti nízkych teplôt v **nemagnetických kovoch** s nulovým jadrovým magnetickým momentom sa uplatňuje iba elektrónové a mriežkové molové teplo:

$$C_{\rm tot} = C_{\rm mr} + C_{\rm el} = \beta T^3 + \gamma T$$
 . (18.27)

Napríklad pre Cu pri T = 300 K je  $C_{\rm mr} = 25$  J/mol K a  $C_{\rm el}$  iba 0,17 J/mol K a teplotnú závislosť dobre vystihuje Debyeov model pre mriežkové teplo až po teploty ~  $\Theta_{\rm D}/50$  (viď obr. 18.2). V oblasti nízkych teplôt  $T < 10^{-2}\Theta_{\rm D}$  už musíme brať do úvahy obidva príspevky, ako mriežkový tak aj elektrónový. Zvyčajne sa experimentálna závislosť zakresľuje v súradniciach  $C_{\rm tot}/T$  vs  $T^2$  (viď vsuvka na obr. 18.2). Ak vypočítame koeficienty  $\gamma$  a  $\beta$  podľa rovnice (18.27), môžme získať z  $\gamma_{\rm Cu} = 0, 69$  mJ/molK hustotu elektrónových stavov na Fermiho ploche a z  $\beta$  hodnotu Debyeovej teploty  $\Theta_{\rm D} = 315$  K. Ak vypočítame koeficient  $\gamma$  podľa rovnice (18.22), dostaneme pre Cu hodnotu 0,54 mJ/molK. Rozdiel medzi teoretickou a experimentálnou hodnotou  $\gamma$  je až 28 %.



Obr. 18.2: Molové teplo medi: body - experimentálne hodnoty, krivka - teoretická predpoveď podľa Debyeovho modelu. Vsuvka: nízkoteplotná časť (1,5 - 4 K) molového tepla v súradniciach  $C_{\rm tot}/T$  vs.  $T^2$ .

ónových systémov sa dá opísať modifikovaným vzťahom:

$$C_{el} = \gamma T + \delta T^3 \ln \left( T/T^* \right) , \qquad (18.28)$$

kde $T^{\ast}$ je charakteristická teplota spinových fluktuácií.

V 90-tych rokoch 20. storočia sa objavilo veľké množstvo ťažkofermiónových kovov a zlúčenín ktorých správanie pri nízkych teplotách sa značne odlišovalo od správania predpovedaného teóriou Fermiho kvapaliny a ktoré dostali názov systémy s nefermiovským správaním elektrónového podsystému. Hlavnými prejavmi nefermiovského správania v makroskopických vlastnostiach pri nízkych teplotách je divergencia  $C_{\rm el}/T$  a magnetickej susceptibility a taktiež nekvadratická závislosť merného elektrického odporu v závislosti na teplote.

0.085 CaRuO<sub>3</sub> 0.085 0.086 0.008 0.007 0.0075 2 4 6 8 10 12 14 16 1820 T (K)

Obr. 18.3: Vplyv magnetického poľa na molové teplo CaRuO<sub>3</sub>, systému s nefermiovským správaním.

519

Tieto systematické odchýlky spôsobené vo všeobecnosti elektrónovo-elektrónovou, elektrónovofonónovou a elektrónovomagnónovou interakciou, môžeme zohľadniť zavedením efektívnej hmotnosti elektrónu  $\gamma_{\rm exp}/\gamma_{\rm teor}$  $= m_{\rm e}^*/m_{\rm e}$ . Pre niektoré kovy a zlúčeniny na báze 4f a 5f prvkov tento pomer nadobúda hodnôt blízkych k 100 a viac a takéto kovy a zlúčeniny dostali prívlastok ťažkofermiónové systémy. Patria sem napríklad, CeCuSi<sub>2</sub>  $(m_{\rm e}^* \approx 300 m_{\rm e}),$ UPt<sub>3</sub>, UBe<sub>13</sub> a d. Elektrónové teplo ťažkofermi-



Obr. 18.5: Molové teplo cínu ( $T_{\rm C}=3,73$  K) v normálnom a supravodivom stave pri nízkych teplotách [18].



Obr. 18.4: Molové teplo dvoch vzoriek kremíka s rôznou úrovňou legovania v teplotnej oblasti od 0,5 do 4,2 [17].

 $C_{\rm el} \sim T^{-1+\lambda}$ , kde  $\lambda < 1$ .

Za celkovú tepelnú kapacitu väčšiny **polovodičov** pri nízkych teplotách je zodpovedný mriežkový príspevok. V legovanom kremíku alebo germániu sa pozoruje okrem mriežkového tepla aj elektrónové teplo (viď obr. 18.4) Veľkosť elektrónového tepla je daná obsahom nosičov náboja. Efektívna hmotnosť nosičov, ktorá sa určí z koeficientu  $\gamma$ , súhlasí s údajmi cyklotrónovej rezonancie. Debyova teplota kremíka je zhruba 630 K.

520

Nefermiovské správanie je možno potlačiť aplikáciou vonkajšieho magnetického poľa (obr. 18.3). Doteraz vzniklo viacero teoretických modelov, ktoré sa snažia opísať rôzne fyzikálne mechanizmy, ktoré vedú k nefermiovskému správa-niu, ako napríklad model kondovskej neusporiadanosti, viackanálový Kondov model, model Luttingerovej kvapaliny, správanie v blízkosti kvantového kritického bodu, model Griffithsových fáz a ď. Tieto modely pre teplotnú závislosť elektrónového tepla predpovedajú rôzne závislosti, ako napr.  $C_{\rm el}/T \sim \ln T$  alebo



Obr. 18.6: Elektrónové teplo cínu pod kritickou teplotou  $T_{\rm C}$  [18].

Celková tepelná kapacita **supravodičov** pozostáva z dvoch príspevkov: mriežkového a elektrónového. Experimentálne skúsenosti ukazujú, že na mriežkový príspevok nemá vplyv prechod látky do supravodivého stavu. Aplikáciou kritického magnetického poľa je možne supravodič previesť do normálneho stavu a určiť mriežkový a elektrónový príspevok.

Pre cín v normálnom stave, vzhľadom na nízku hodnotu Debyovej teploty ( $\Theta_D = 195 \text{ K}$ ), vzťah (18.27) platí pre teploty pod 2,5 K (viď obr. 18.5). Prechod zo supravodivého do normálneho stavu v nulovom magnetickom polí je fázový prechod druhého druhu, čo sa prejaví skokom v tepelnej kapacite. Supravodivé Cooperove páry neprispievajú k celkovej tepelnej kapa-

cite a elektrónové teplo v supravodivom stave  $C_{\rm els}$  exponenciálne klesá s teplotou v súlade s predpoveďou teórie BCS:

$$C_{\rm els} = 9.17 \ \gamma T_{\rm C} \exp\left(-\frac{1.5 \ T_{\rm C}}{T}\right) \ .$$
 (18.29)

Na obr. 18.6 je dokumentovaný perfektný súlad teórie s experimentom pre elektrónové teplo cínu pre ktoré A = 9.17 a b = 1.5. Také iste hodnoty A i b boli experimentálne pozorované aj pre vanád.

Podobne, ako aj pri tepelnej vodivosti, mriežkové teplo **amorfných a sklovi**tých látok sa neriadi pri nízkych teplotách Debayovym teplotným zákonom  $T^3$ ale vykazuje závislosť typu  $aT + bT^3$  (viď obr. 18.7), a pri najnižších teplotách teplotnú závislosť  $T^n$ , kde  $n = 1, 2 \sim 1, 3$ . Takéto spávanie teplotnej závislosti tepelnej kapacity pri nízkych a veľmi nízkych teplotách je univerzálne pre väčšinu amorfných a sklovitých látok a vysvetľuje sa prítomnosťou dvojhladinových stavov atómov alebo skupiny atómov, podobne ako aj pri vysvetľovaní neobvyklej teplotnej závislosti tepelnej vodivosti týchto materiálov.

A nakoniec ešte upriamime našu pozornosť na merné teplo **nízkorozmerných štruktúr**. Budeme analyzovať, ako sa bude modifikovať Debyeovské spektrum a nízkoteplotné merné teplo vo vrstevnatých alebo silno anizotropných látkach, ktoré sú charakteristické tým, že interakcia medzi vrstvami je ďaleko menšia ako interakcia vo vrstvách. Do tejto skupiny látok možno zaradiť napr. grafit, vysokoteplotné supravodiče, biopolyméry, a ď. Definujme efektívne malý parameter  $\varphi = \alpha_{\rm I}/\alpha_{\rm II} \ll 1$ , ktorý charakterizuje pomer slabej medzirovinnej interakcie  $\alpha_{\rm I}$ a silnej vnútrorovinnej interakcie  $\alpha_{\rm II}$ .



Obr. 18.7: Tepelná kapacita amorfného SiO<sub>2</sub> v teplotnej oblasti od 25 mK do 10 K.Pre teplotnú oblasť od 0,4 K do 1,7 K platí závislosť  $C = 14,0 T + 15,1 T^3$  a pre oblasť teplôt pod 0,3 K závislosť typu  $T^{1,22}$  [19].

Existencia parametra  $\varphi$  radikálnym spôsobom determinuje oblasť použiteľnosti Debyeovskeho nízkoteplotného priblíženia: namiesto podmienky  $T \leq 10^{-2}\Theta_{\rm D}$ , ktorá platí pre trojdimenzionálne systémy, pre látky s  $\varphi \ll$ 1. oblasť teplôt použiteľnosti zákona  $T^3$  bude:  $T \ll \varphi \Theta_{\rm D} \ll \Theta_{\rm D}$ . Súvisí to s modifikáciou fonónového spektra, v ktorom sa objavuje nízkofrekvenčné maximum. Naviac, v silno anizotropných kryštáloch môžu sa objaviť kmity, podobné kmitom v dvojdimenzionálnych tenkých filmoch, keď kmity sa realizujú kolmo na rovinu vrstvy, t.j. sú sprevádzané ohybom vrstvy (tzv. vlny ohybu). Tieto kmity tiež zmenia fonónové spektrum a modifikujú nízkoteplotné mriežkové teplo:

$C_{\rm mr} \sim T^2$	$\operatorname{pre}$	$\varphi_2 \Theta_{\rm D} \ll T \ll \varphi \Theta_{\rm D},$
$C_{\rm mr} \sim T$	$\operatorname{pre}$	$\varphi \Theta_{\rm D} \ll T \ll \Theta_{\rm D},$
$C_{\rm mr} \sim T^3$	$\operatorname{pre}$	$T \ll \varphi_2 \Theta_{\rm D}$ . (18.30)

Experimentálne výsledky mriežkového tepla grafitu sú v plnej zhode s touto teoretickou predpoveďou.

# 18.1.6 Meranie tepelnej kapacity

Výber najvhodnejšej metódy merania merného tepla závisí od druhu a množstva skúmanej látky, jej tepelnej vodivosti a teplotného intervalu. Doteraz najpoužívanejšou metódou mera-

nia merného tepla je kváziadiabatická pulzná metóda vyznačujúca sa najvyššou absolútnou presnosťou merania. Fyzikálny princíp adiabatickej metódy ja založený na termodynamickej definícii tepelnej kapacity (18.1). V reálnom experimente vždy existujú isté nedokonalosti v adiabatickej izolácii od okolia. Ak sú tieto poruchy malé a dominantnou zložkou je tepelný zvod vzorky na okolie, potom je možné pre korekciu veľkosti  $\Delta Q$  použiť klasické kváziadiabatické priblíženie. To spočíva v meraní časovej závislosti teploty vzorky pred a po impulze tepla, v lineárnej aproximácii týchto tzv. driftov a v následnej extrapolácii driftových priamok do stredu ohrevného intervalu pre získanie korekcie  $\Delta T$ . Korekcia impulzu tepla  $\Delta Q$  pri úniku do vzorky, resp. prítoku parazitného tepla do vzorky počas impulzu, sa

tu nahradzuje zväčšením resp. zmenšením teplotného skoku  $\Delta T$ o extrapolovanú hodnotu (obr. 18.8).

Zabezpečenie dobrých adiabatických podmienok nemusí byť postačujúce pre lineárny charakter driftov teploty vzorky po impulze. Prudký ohrev počas impulzu - predovšetkým pre skúmaný materiál s malou tepelnou vodivosťou - vyvolá značný gradient teploty v systéme ohrievač - vzorka - teplomer. Údaj teplomera neposkytuje rovnovážnu teplotu vzorky a doznievanie nerovnovážneho stavu sa prejaví nelinearitou v drifte teploty vzorky aj niekoľko sekúnd po impulze. Potlačiť



Obr. 18.8: Korekcia  $\Delta T$  lineárnou extrapoláciou driftov do stredu ohrevného intervalu a doznievanie nerovnovážneho stavu.

tento jav možno konštrukciou kalorimetra, tvarom skúmaných vzoriek a geometriou usporiadania ohrievača a teplomera na vzorke. Na obr. 18.9 je znázornené jednoduché experimentálne usporiadanie pre meranie merného tepla kvaziadiabatickou metódou.



Obr. 18.9: Experimentálne usporiadanie pre meranie merného tepla kvaziadiabatickou metódou.

Vychladenie vzorky na štartovaciu teplotu je zabezpečené zopnutím mechanického tepelného spínača (pre teploty pod 1 K sa používa supravodivý spínač). Impulz tepla sa generuje elektrickým ohrievačom a teplota vzorky sa monitoruje pomocou teplomera. Vzorka je upevnená na závesoch s minimálnou tepelnou vodivosťou a je umiestnená vo vysokom vákuu. Okrem kvaziadiabatickej pulznej metódy, veľmi časti sa používa relaxačná metóda, pri ktorej vzorka je v kontakte s rezervoárom tepla prostredníctvom tzv. linku (z angl. thermal link). Matematický model relaxačnej metódy je založený na teplotne rovnovážnej rovnici jednorozmerného systému teplomer vzorka - ohrievač:

$$C(T)\frac{\partial T}{\partial t} = P - K(T)\frac{\partial T}{\partial t} \ , \ \ (18.31)$$

kde P je ohrevný výkon, K(T) je in-

tegrálna tepelná vodivosť linku, pričom  $K(T) = \lambda(T)S/l$  - tepelná vodi-

vosť linku prierezu S a dĺžky l. Rovnica hovorí, že časová zmena tepla vo vzorke je daná rozdielom výkonu vzorke dodávaného a vzorke odoberaného prostredníctvom linku. Riešením rovnice (18.31) dospejeme k výrazom pre teplotu vzorky počas pulzu tepla:

$$T = T_0 + \frac{P\tau}{C} \left( 1 - e^{-\Delta t/\tau} \right)$$
 (18.32)

a pre tepelnú kapacitu

$$C = \frac{P\tau}{T - T_0} \left( 1 - e^{-\Delta t/\tau} \right) , \qquad (18.33)$$

kde  $\Delta t$  je doba pulzu,  $T_0$  je štartovacia teplota a  $\tau = C/K$ . Ak časová konštanta  $\tau$  spĺňa podmienku  $\Delta t \ll \tau$ , potom rovnica (18.33) prejde do tvaru:

$$C = \frac{P\Delta t}{T - T_0} , \qquad (18.34)$$

a teda možnosť použiť adiabatickú aproximáciu. Vychádzajúc z (18.32) po ukončení pulzu tepla (P = 0) dostaneme pre priebeh teploty po pulze vzťah:

$$T(t) = T_0 + \Delta T e^{-t/\tau} , \qquad (18.35)$$

kde  $\Delta T = T_{\rm f} - T_0$  ( $T_{\rm f}$  je konečná teplota). Cez experimentálne namerané body závislosti teploty vzorky na čase po ukončení pulzu tepla sa metódou najmenších štvorcov preloží teoretická driftová krivka (18.35) a určia sa tak neznáme parametre  $\Delta T$  a  $\tau$ . Variáciou relaxačnej metódy je tzv. dual-slope metóda, ktorá využíva sklony obidvoch kriviek a to krivky ohrevnej aj ochladzovacej. Okrem týchto metód merania merného tepla ešte treba spomenúť striedavú metódu, pri ktorej vzorka je ohrievaná striedavým výkonom. Užitočné údaje o tepelnej kapacite rozličných látok pri nízkych teplotách sú k dispozícií v literatúre [12, 20, 21, 22].

#### 18.2 Elektrická vodivosť

Štúdium elektrickej vodivosti resp. elektrického odporu patrí k základným metódam skúmania tuhých látok a poskytuje spravidla prvé informácie o ich elektrónovej štruktúre. Rozvoj výskumu v oblasti prenosu elektrického náboja nastal hlavne po rozpracovaní základov kvantovej teórie, ktorá umožnila prechod od klasického modelu voľných elektrónov navrhnutého Drudem k opisu kvantovo-mechanickému, ktorý okrem elektrickej vodivosti kovov umožnil postupne vysvetliť tiež fyzikálnu podstatu elektrickej vodivosti v zložitejších elektrónových štruktúrach, akými sú polokovy, polovodiče a supravodiče. Napriek značným úspechom, ktoré boli doteraz v oblasti štúdia elektrickej vodivosti dosiahnuté, existuje ešte veľa otvorených problémov, ku ktorým môžeme zaradiť vlastnosti elektrónov a transport náboja v nízkorozmerných systémoch, v silne korelovaných systémoch, napr. sústavách s tzv. ťažkými fermiónami, v nekonvenčných supravodičoch a pod. Otvorené otázky však možno nájsť aj v systémoch s relatívne dobre známou elektrónovou štruktúrou. Podrobný opis transportu elektrického náboja môžme nájsť v klasických učebniciach z fyziky tuhých látok [1, 2, 3], alebo vo viac špecializovaných monografiách o elektrickej vodivosti látok [4, 5, 6]. V tomto učebnom texte sa obmedzíme iba na základne informácie o chovaní elektrického odporu látok pri nízkych teplotách.

Začnime stručným historickým prehľadom. V roku 1897 anglický fyzik Thomson, vedúci Cavendishovho laboratória v Cambridge, objavil prvú elementárnu časticu - elektrón. Na základe tohto objavu Drude a Lorentz dospeli k predstave, že v kovoch sa nachádzajú voľné elektróny, ktoré sú zodpovedné za ich elektrické vlastnosti. Prenos elektrického náboja v kovoch je spôsobený tokom voľných elektrónov, ktoré sa pohybujú v dôsledku pôsobenia vonkajšieho elektrického poľa. Pri pohybe elektrónov nastáva ich rozptyl na tepelných kmitoch mriežky, na iných elektrónoch a na poruchách mriežky, a preto sa zavádza relaxačná doba  $\tau$ , počas ktorej sa elektrón považuje za voľný. Ak je stredná rýchlosť elektrónu v, potom relaxačnej dobe odpovedá stredná voľná dráha elektrónu  $l = v \tau$ . Drude roku 1900 odvodil vzťah pre mernú elektrickú vodivosť:

$$\sigma = \frac{ne^2l}{mv} = \frac{ne^2\tau}{m} , \qquad (18.36)$$

kde n je počet všetkých voľných elektrónov v objemovej jednotke kovu, e je náboj elektrónu a m je hmotnosť elektrónu. Podľa Maxwellovej-Boltzmannovej štatistiky je stredná kvadratická rýchlosť elektrónu priamo úmerná teplote T.

Za predpokladu, že stredná voľná dráha elektrónu nezávisí od teploty a rovná sa približne vzdialenosti medzi atómami, bude merný elektrický odpor  $\rho \sim T^{1/2}$ , čo bolo v rozpore s experimentom. Lorentz riešil problém elektrickej vodivosti kovov znova v roku 1905. Použil pritom Boltzmannovu transportnú rovnicu a jednoduchý model zrážok elektrónov s atómami mriežky.

V roku 1928 Sommerfeld postupoval podľa Lorentzovej teórie, no namiesto Maxwellovej-Boltzmannovej štatistiky použil Fermiho-Diracovu štatistiku na opis vlastností elektrónového plynu v kovoch. Sommerfeld neskúmal skutočný mechanizmus interakcie elektrónov s mriežkou, ale iba zaviedol relaxačnú dobu ako funkciu energie elektrónu. Výsledný vzťah, ku ktorému dospel, ma rovnaký tvar ako vzťah (18.36), len namiesto  $\tau$  je  $\tau_{\rm F}$ , teda k elektrickej vodivosti prispievajú iba elektróny s energiami v blízkosti Fermiho hladiny. Úloha výpočtu elektrickej vodivosti sa tým zjednodušila na výpočet strednej voľnej dráhy  $l_{\rm F} = \nu_{\rm F} \tau_{\rm F}$ . Týmto problémom sa zaoberal Bloch, ktorý urobil kvantovomechanickú analýzu rozptylu elektrónov na kmitoch mriežky opísaných Debyeovym modelom, avšak neuvažoval elektrónovo - elektrónovú interakciu a vplyv defektov mriežky. Blochov vzťah pre teplotnú závislosť elektrického odporu je veľmi blízky poloempirickej formule, ktorú použil Grüneisen na základe experimentálnych výsledkov:

$$\rho = A \frac{T^5}{\Theta_{\rm D}} \int_0^{\frac{\Theta_{\rm D}}{T}} \frac{x^5 dx}{(e^{\rm x} - 1)(1 - e^{-\rm x})} , \qquad (18.37)$$

5	ົ	5
J	4	J

kde A je charakteristická konštanta pre daný kov, T je absolútna teplota a  $\Theta_{\rm D}$  je Debayeova charakteristická teplota. Nordheim v roku 1931 upravil formulu Blocha-Grüneisena zavedením tieniaceho potenciálu. V ostatnom čase sa najčastejšie používa pre výpočet elektrickej vodivosti kovov vzťah, ktorý v roku 1957 odvodil Kubo. Pri výpočte teplotnej závislosti elektrickej vodivosti sa používá Hartreeho-Fockova aproximácia a metóda dvojnásobnej časovej teplotnej závislosti Greenovej funkcie.

#### 18.2.1 Matthiessenove pravidlo

Merný elektrický odpor kovov pri nízkych teplotách pochádza z viacerých rozptylových mechanizmov vodivostných elektrónov. Predpokladá sa aditívnosť jednotlivých rozptylových mechanizmov, takže celkový merný elektrický odpor kovu možno vyjadriť v tvare súčtu príspevkov od rôznych interakcii (tzv. Matthiessenove pravidlo):

$$\rho = \rho_0 + \rho_{\rm i}(T) , \qquad (18.38)$$

pričom

$$\rho_{\rm i}(T) = \rho_{\rm ef}(T) + \rho_{\rm ee}(T) + \rho_{\rm em}(T) , \qquad (18.39)$$

kde  $\rho_0$  je zvyškový merný odpor a  $\rho_i(T)$  intrinzický merný odpor, vyjadrujúci teplotnú závislosť elektrického odporu, pričom sa môže skladať z viacerých príspevkov s rôznou teplotnou závislosťou. V (18.39)  $\rho_{\rm ef}(T)$  reprezentuje elektrónovo-fonónový rozptyl,  $\rho_{\rm ee}(T)$  odpovedá elektrónovo-elektrónovemu rozptylu a  $\rho_{\rm em}(T)$  pochádza od rozptylu vodivostných elektrónov na magnetickej štruktúre. Zvyškový merný elektrický odpor  $\rho_0$  je limitnou hodnotou, ku ktorej konverguje meraný odpor ak ho extrapolujeme k T = 0 K. V uzkom teplotnom intervale môže byť tento príspevok považovaný za nezávislý od teploty. Zvyškový merný elektrický odpor  $\rho_0$ je určený chemickým a fyzikálnym stavom daného kovu. Pod chemickým stavom kovu rozumieme prítomnosť cudzích atómov a ich jednotlivé zastúpenie a rozloženie v kovovej mriežke a pod fyzikálnym stavom rozumieme prítomnosť lokalizovaných napätí v mriežke, ktoré môžu pochádzať od dislokácií, vakancií a intersticiálnych atómov. Vzhľadom k tejto skutočnosti a berúc do úvahy že merný elektrický odpor pri izbovej teplote  $\rho_{300}$  pochádza predovšetkým od rozptylu elektrónov na tepelných kmitoch mriežky, môžeme podľa pomeru  $\rho_{300}/\rho_0$  usudzovať na celkový obsah prímesí a prítomnosť mechanických napätí vo vzorke. Z praktických dôvodov za hodnotu  $\rho_0$  sa berie merný odpor pri teplote 4,2 K a pomer  $\rho_{300}/\rho_{4,2}$  je označovaný ako RRR (z angl. Residual Resistivity Ratio). Napr. pre čistú meď (99,999 %) je  $RRR \sim 1000$ , pre elektrolitickú meď je pomer  $\sim 50$ , pre najčistejšie kovy okolo  $10^4$ , ale pre amorfné materialy iba  $\sim 1$ . RRR je užitočným kritériom čistoty a kvality vzorky.

#### 18.2.2 Rozptyl elektrónov na fonónoch

Pre vysvetlenie teplotnej závislosti elektrického odporu musíme uvažovať rozptyl vodivostných elektrónov na kmitoch mriežky, ktorý prispieva k intrinzickému odporu členom  $\rho_{\rm ef}(T)$ . Pri nízkych teplotách je možne malé kmity iónov kovu previesť na súbor lineárnych harmonických kvantových oscilátorov a excitované stavy zo základného energetického stavu opísať pomocou kvázičastic - fonónov. Fonóny sú

kolektívne excitácie mriežky a podriaďujú sa Boseho-Einsteinovej štatistike. V Blochovej teórii sa kmity mriežky opisujú na základe Debyeovho modelu a predpokladá sa, že interakcia elektrónov s fonónmi je slabá a obidva podsystémy (elektrónový a fonónový) sa nachádzajú v stave tepelnej rovnováhy.

Elektrón s vlnovým vektorom  $k_1$  po zrážke s fonónom, ktorý má vlnový vektor q, môže prejsť do iného stavu s vlnovým vektorom  $k_2$ . Pravdepodobnosť takého prechodu bude nenulová, ak budú splnené výberové pravidlá:

$$E(\mathbf{k}_1) \pm E(\mathbf{q}) = E(\mathbf{k}_2) ,$$
 (18.40)

$$k_1 \pm q + 2\pi a = k_2$$
, (18.41)

v ktorých sa použijú buď horné alebo dolné znamienka. Vektor  $\boldsymbol{a}$  je vektor reciprokej mriežky,  $E(\boldsymbol{k}_1)$  a  $E(\boldsymbol{k}_2)$  sú energie elektrónu v stave  $\boldsymbol{k}_1$  resp. stave  $\boldsymbol{k}_2$  a  $E(\boldsymbol{q})$  je energia fotónu v stave  $\boldsymbol{q}$ . Rozptylové procesy, pri ktorých je  $\boldsymbol{a} = 0$ , nazývame normálne procesy (N-procesy). Rovnica (18.40) vyjadruje zákon zachovania energie a vzťah (18.41) s  $\boldsymbol{a} = 0$  vyjadruje zákon zachovania hybnosti. Rozptylové procesy, pri ktorých je  $\boldsymbol{a} \neq 0$  nazývame reverznými procesmi (U-procesmi). Závažným nedostatkom Blochovej teórie je zanedbanie U-procesov. Pri nízkych teplotách ( $T \ll \Theta_{\rm D}$ ) Blochov vzťah sa redukuje na závislosť  $\rho_{\rm ef}(T) \sim T^5$  a pri vysokých teplotách ( $T \gg \Theta_{\rm D}$ ) sa predpokladá lineárna závislosť  $\rho_{\rm ef}(T) \sim T$ .

#### 18.2.3 Rozptyl elektrónov na elektrónoch

Ďalším nedostatkom Blochovej teórie bolo nezapočítanie vzájomnej interakcie medzi elektrónmi, pretože sa predpokladalo, že pri zrážkach elektrónov medzi sebou sa zachováva hybnosť. Vzhľadom k tomu, že prúdová hustota je priamo úmerná celkovej hybnosti elektrónov, takéto zrážky medzi elektrónmi by neviedli ku vzniku elektrického odporu. Za vznik merného elektrického odporu pri elektrónovo-elektrónovom rozptyle sú zodpovedné U-procesy. Elektrónovo-elektrónový rozptyl sa odohráva medzi elektrónmi, ktorých energie ležia v intervale  $k_{\rm B}T$  v okolí Fermiho hladiny. Počet elektrónov, ktoré sa môžu zúčastniť rozptylu je úmerný  $k_{\rm B}T n_{\rm F}$ , pričom  $n_{\rm F}$  je hustota elektrónových stavov na Fermiho ploche. Počet voľných stavov, do ktorých sa môžu elekróny rozptýliť, je taktiež úmerný  $k_{\rm B}T n_{\rm F}$ , preto celková pravdepodobnosť rozptylu je ~  $[k_{\rm B}T n_{\rm F}]^2$ . Na základe tejto úvahy Landau a Pomerančuk dospeli ku kvadratickej teplotnej závislosti elektrického odporu od elektrónovo-elektrónového rozptylu t.j.  $\rho_{\rm ee}(T) \sim T^2$ . Príspevok s touto teplotnou závislosťou bol pozorovaný v elektrickom odpore prechodných paramagnetických kovoch pri teplotách pod 10 K.

V 90-tych rokoch 20. storočia sa objavilo veľké množstvo tzv. ťažkofermiónových zlúčenín, v ktorých efektívna hmotnosť elektrónu  $m^*$  bola desiatky krát väčšia ako hmotnosť voľného elektrónu m. Veľká efektívna hmotnosť súvisí so silnou interakciou medzi vodivostnými elektrónmi, preto tieto systémy dostali názov aj systémy so silne korelovanými elektrónmi. Typickými predstaviteľmi silne korelovaných systémov sú zlúčeniny na báze 4f – a 5f – prvkov. V týchto systémoch zlyhávala kvázičasticová koncepcia Landauho modelu Fermiho kvapaliny a zavádzajú sa kolektívne excitacie Fermiho kvapaliny. Hlavnými prejavmi tzv. nefermiovského správania v makroskopických vlastnostiach pri nízkych teplotách je divergencia  $C_{\rm el}/T$ 

 $(C_{\rm el}$  je elektrónová tepelná kapacita) alebo magnetickej susceptibility a taktiež nekvadratická teplotná závislosť merného elektrického odporu  $\rho_{\rm ee}$  [7]. Doteraz vzniklo viacero teoretických modelov, ktoré sa snažia opísať rôzne fyzikálne mechanizmy, ktoré vedú k nefermiovskému správaniu, avšak doteraz nevznikla ucelená teória, ktorá by univerzálne opísala nefermiovské správanie elektrónového podsystému. Doteraz známe modely (model kondovskej neusporiadanosti, viackanálový Kondov model, správanie v blízkosti kvantového kritického bodu, model Luttingerovej kvapaliny a model Griffithsovych fáz) poskytujú rôzne teplotné závislosti merného elektrického odporu, ale pre všetky modely  $\rho_{\rm ee}(T) \sim T^{\alpha}$ , pričom  $\alpha < 2$ . Napríklad, pre viackanálový Kondov model  $\alpha = 1/2$ .

#### 18.2.4 Rozptyl elektrónov na magnetickej štruktúre

Výmenná interakcia medzi lokalizovanými magnetickými momentmi a vodivostnými elektrónmi vedie k rozptylovým procesom, ktoré sú závisle na veľkosti spinového momentu iónov. V paramagnetickom stave, pre ktorý všetky orientácie spinov majú rovnakú pravdepodobnosť, príspevok k elektrickému odporu od rozptylu vodivostných elektrónov na neusporiadanej magnetickej štruktúre je teplotne nezávislý:

$$\rho_{\rm em}^{\rm p} = \frac{3\pi m^* J^2 (g-1)^2 S(S+1)}{8\hbar e^2 E_{\rm F} V} , \qquad (18.42)$$

kde $m^*$  je efektívna hmotnosť vodivostných elektrónov, J je konštanta výmennej interakcie, g je Landeho faktor, S je celkový spin i<br/>ónu aV je molárny objem. Tento príspevok sa pozoruje pred<br/>ovšetkým v paramagnetickej oblasti u kovov vzácnych zemín a je zodpovedný za vysoké hodnoty merného odporu tých<br/>to prvkov. Obr. 18.10 ukazuje postup pri stanovovaní magnetického príspev<br/>ku  $\rho_{\rm em}^{\rm p}$ v paramagnetickej oblasti.

Pri prechode kovu do magneticky usporiadaného stavu, teda v látkach s feroalebo antiferomagnetickým usporiadaním, rozptyl vodivostných elektrónov na magnetických excitáciach (feromagnónoch alebo antiferomagnónoch) vedie k teplotnej závislosti elektrického odporu, ktorá je rôzna pre rôzne energetické spektra magnetických excitácií. Pre feromagnetické usporiadanie zo spektrom kvázičastic bez energetickej medzery (napr. pre Fe) merný elektrický odpor vyvolaný rozptylom vodivostných elektrónov na spinových vlnách - feromagnónoch má teplotnú závislosť  $\rho_{\rm em}^{\rm f}(T) \sim T^2$ . V kovoch vzácnych zemín je silná magnetická anizotropia, ktorá je zodpovedná za vznik energetickej medzery  $\Delta E$  v spektre feromagnónov a ktorá modifikuje kvadratickú teplotnú závislosť:

$$\rho_{\rm em}^{\rm f} = T^2 e^{-\Delta E/k_{\rm B}T} \ . \tag{18.43}$$

Pre antiferomagnetické usporiadanie sa očakáva teplotná závislosť  $T^4,$ a pre spektrum s energetickou medzerou:

$$\rho_{\rm em}^{\rm af} = T^4 e^{-\Delta E/k_{\rm B}T} \ . \tag{18.44}$$

Rozptyl vodivostných elektrónov na magnetickej štruktúre je veľmi citlivý na zmeny v excitačnom spektre magnetických kvázičastíc, čo umožňuje určiť typ kvázičastíc,



Obr. 18.10: Teplotná závislosť elektrického odporu samária s uvedením jednotlivých príspevkov.

energetickú medzeru ale aj teploty, pri ktorých dochádza k zmenám v magnetickej štruktúre. Ako príklad citlivosti elektrického odporu na zmeny magnetickej štruktúry možno uviesť správanie teplotnej závislosti elektrického odporu Dy.

Dysprózium sa usporiadava z paramagnetického stavu do antiferomagnetického s helikálnou spinovou štruktúrou pre Neélovej teplote  $T_{\rm N} = 180 \, {\rm K}$  a do feromagnetického stavu pri Curieho teplote  $T_{\rm C} = 92$  K. Na teplotnej závislosti elektrického odporu (obr. 18.11) sa pozorujú dve výrazne anomálie, ktoré sú spojené s magnetickými fázovými prechodmi: anomália "tvaru hrbu", typická pre prechod do antiferomagnetického stavu a prudký pokles odporu v Curieho teplote. Dokonca bol pozorovaný aj efekt "zamŕzania" helikálnej spino-



Obr. 18.11: Teplotná závislosť elektrického odporu dysprózia. Šípkami sú označené teploty magnetických fázových prechodov.

vej štruktúry, ktorý sa prejavil

v hysterézii elektrického odporu pri ochladzovaní a ohreve vzorky. Sú aj názory, že elektrický odpor je rovnako citlivý na zmeny magnetickej štruktúry, ako metóda neutrónovej difrakcie.

### 18.2.5 Kondov jav

V tridsiatych rokoch minulého storočia viacerí experimentálni fyzici pozorovali na krivke teplotnej závislosti elektrického odporu čistých diamagnetických kovov ako napr. Cu, Ag a Au minimum pri nízkych teplotách. Neskoršie sa ukázalo, že predmetné minimum je spôsobené prítomnosťou veľmi malého množstva prímesných iónov magnetickým momentom, ako napr. Fe, Mn, V, Co a Ni. V roku 1964 Kondo publikoval prácu, v ktorej minimum v teplotnej závislosti elektrického odporu diamagnetických kovov s malým obsahom magnetickej prímesi vysvetlil na základe interakcie vodivostných elektrónov diamagnetického kovu s lokalizovanými magnetickými momentmi prímesných iónov. Vodivostný elektrón s vlnovým vektorom k a spinom +1/2 prejde do stavu s vlnovým vektorom q a spinom -1/2. Spin i-teho atómu magnetickej prímesi prejde do stavu so spinom  $S_i + 1$ . Následne vodivostný elektrón prejde do stavu  $(\mathbf{k}', +1/2)$  a zároveň i-ty atóm prímesi zmenší svoj spin o jednotku a prejde do stavu  $S_i$  a nakoniec sa elektrón vráti do počiatočného stavu  $(\mathbf{k}, \pm 1/2)$ . Tento rozptyl Kondo opísal pomocou tzv. s - d hamiltoniánu a pomocou poruchovej teórie vypočítal pravdepodobnosť takéhoto prechodu na jednotku času, berúc do úvahy členy druhého rádu. Z pravdepodobnosti prechodu možno vypočítať elektrický odpor spojený s týmto rozptylom:

$$\rho_{\rm s-d} = c \left[ A + B J_{s-d} \ln \left( \frac{k_{\rm B} T}{D} \right) \right] , \qquad (18.45)$$

kdec je koncentrácia magnetických prímesí, A a B sú konštanty a D je šírka vodivostného pásu. Ak výmenná interakcia  $J_{\rm s-d}<0,$ t.j. s-dinterakcia je antiferomagnetická, tak bude  $\rho_{\rm s-d}$ rásť s klesajúcou teplotou. Logaritmický rast odporu je prejavom dynamickej povahy magnetického spinového systému a dostal názov kondovský odpor $\rho_{\rm K}$ . Celkový merný odpor je teda:

$$\rho = \rho_0 + \rho_{\rm i}(T) + \rho_{\rm K} . \qquad (18.46)$$

Vzťah pre kondovský odpor (18.45) však zlyháva pri veľmi nízkych teplotách, pretože pri  $T \rightarrow 0$   $\rho_{\rm K} \rightarrow \infty$ , čo je v rozpore s experimentom. Nagaoka ukázal, že poruchová teória zlyháva pre  $T < T_{\rm K}$ , pričom  $T_{\rm K}$  je tzv. Kondova teplota, ktorá v prvom priblížení odpovedá teplote minima v elektrickom odpore. Tento nesúlad medzi teóriou a experimentom pri veľmi nízkych teplotách riešil Anderson zavedením tzv. škalovania do kondovského problému a neskoršie aj Wilson aplikáciou metódy známej ako numerická renormalizácia. Ukázal, že pri veľmi nízkych teplotách magnetický moment prímesneho iónu je úplne odtienený spinmi elektrónov v kove. Kondovský odpor možno potlačiť aj aplikáciou vonkajšieho magnetického poľa. Kondov jav sa pozoroval aj v amorfných látkach a supravodičoch. Krivky na obr. 18.12 ilustrujú Kondov jav v amorfnej zliatine. V ostatnom období Kondov



Obr. 18.12: Teplotná závislosť elektrického odporu amorfných zliatin Fe-Ho-B v okoli Kondovej teploty.

jav prežíva renesanciu predovšetkým v oblasti ťažkofermionovej fyziky, vysokoteplotných supravodičov, nefermiovského správania elektrónového podsystému a pri štúdiu Kondovej rezonancie v kvantových mezoskopických systémoch.

#### 18.2.6 Vplyv magnetického poľa na transport náboja

Ak umiestnime vzorku, ktorou preteká elektrický prúd, do magnetického poľa, zmení sa hodnota jej elektrického odporu. Tento jav nazývame magnetoodporovým javom, alebo stručne magnetorezistencia. Prvu zmienku o pozorovaní tohto javu uverejnil ešte v roku 1857 britský fyzik lord Kelvin. Keď zmenu elektrického odporu spôsobí magnetické pole, ktoré je kolmé k prechádzajúcemu prúdu, hovoríme o priečnej magnetorezistencii (angl. *transversal magnetoresistence*) a ak prúd a magnetické pole sú rovnobežné, ide o magnetorezistenciu pozdĺžnu (angl. *longitudinal magnetoresistence*). Kvantitatívnou mierou magnetorezistencie je pomer:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho(0)} = \frac{\rho(H) - \rho(0)}{\rho(0)} , \qquad (18.47)$$

v ktorom  $\rho(0)$  je elektrický odpor vzorky bez prítomnosti magnetického poľa a  $\rho(H)$  jeho odpor v magnetickom poli. Pre odhad magnetorezistencie je výhodné použiť tzv. Kohlerove pravidlo, podľa ktorého je:

$$\frac{\Delta\rho}{\rho(0)} = F\left[\frac{H}{\rho(0)}\right] \,, \tag{18.48}$$

kde F je funkcia, ktorá pre daný kov závisí od vzájomnej orientácie magnetického poľa H a prúdu j a od orientácie kryštalografických osí, ak ide o monokryštál.

Kohlerove pravidlo platí len približne a pre kovy s vysokou anizotrópiou merného odporu môžu vzniknúť značné odchýlky od tohto pravidla.

Chovanie priečnej magnetorezistencie môžeme rozdeliť do troch skupín. Do prvej skupiny patria kovy, v ktorých pri zvyšovaní intenzity magnetického poľa merný odpor postupne smeruje k nasýteniu. Zväčšenie merného odporu býva zvyčajne o niekoľko desiatok percent oproti hodnote v nulovom magnetickom poli. Do druhej skupiny patria kovy, pri ktorých sa merný odpor kvadraticky zväčšuje s rastom magnetického poľa a nakoniec do tretej skupiny patria kovy, ktoré vykazujú čiastočne vlastnosti prvej a čiastočne druhej skupiny. Pri priečnej magnetorezistencie na polykryštalických vzorkách sa pozoruje oblasť lineárnej závislosti odporu od intenzity magnetického poľa, tzv. Kapicov zákon. Pozdĺžna magnetorezistencia je zvyčajne menej výrazná ako priečna magnetorezistencia a pri všetkých kovov smeruje k nasýteniu.

Magnetorezistenciu kovov nie možné vysvetliť pomocou modelu voľných elektrónov, pretože tento model vedie k nulovej magnetorezistencii. Magnetorezistencia môže iba vzniknúť vtedy, ak predpokladáme, že vodivostné elektróny nemajú rovnakú efektívnu hmotnosť, rýchlosť a relaxačnú dobu, teda používame pásmový model.

Štúdium magnetorezistencie je dôležité hlavne z toho dôvodu, že umožňuje skúmať štruktúru energetických pásiem látok, ako tvar plôch s konštantnou energiou v  $\boldsymbol{k}$ -priestore, alebo pri zišťovaní, v ktorých smeroch Brillouinovej zóny sa nachádzajú minimá energie.

Je treba odlišovať magnetorezistenciu u látok, v ktorých existuje spontánna magnetická polarizácia (kovové feromagnetiká, ferity a iné) a magnetorezistencia súvisí s touto spontánnou magnetickou polarizáciou.

Fert a Grünberg (Grünberg sa narodil 18 maja 1939 v Plzni a v roku 1946 sa jeho rodičia museli vysťahovať do Nemecka) objavili v roku 1988 jav, pre ktorý sa vžilo označenie obrovská magnetorezistencia, v skratke GMR (z angl. Giant MagnetoResistence). Efekt zmeny elektrického odporu je radu až 100 %. Za objav GMR udelila Fertovi a Grünbergovi Kráľovská švédska akadémia vied v roku 2007 Nobelovu cenu za fyziku. Najjednoduchší systém, v ktorom môže vzniknúť GMR, pozostáva z vrstvy nemagnetického kovu, umiestnenej medzi dvoma vrstvami magnetického kovu. Ak sú obe vonkajšie magnetické vrstvy magnetickým poľom zmagnetizované rovnakým smerom, väčšina elektrónov bude mať paralelný spin a bude sa ľahko pohybovať cez tuto sendvičovú štruktúru. Celkový odpor v takomto prípade bude nízky. Ak sú však magnetizácie oboch vrstiev orientované proti sebe, všetky elektróny budú v stave s antiparalelným spinom v jednej z oboch vrstiev. To znamená, že žiaden z elektrónov sa nemôže ľahko pohybovať cez sendvič a celkový odpor bude vysoký. Opísaná trojvrstvová štruktúra je základom moderných čítacích hláv pevných diskov. Prvé čítacie hlavy na báze GMR sa objavili v roku 1997 a dnes sa používajú prakticky všade.

V roku 1993 pozorovali dve skupiny fyzikov v perovskitoch typu  $A_{1-x}B_xMnO_3$  (A=La, Pr, Nd, Sm a B=Ca, Sr, Ba) tzv. kolosálnu magnetorezistenciu - CMR (z angl. *Colossal MagnetoResistence*), pričom veľkosť efektu dosiahla až 100 000 %.

Fyzikálny mechanizmus vzniku magnerezistencie tu je celkom odlišný a súvisí s fázovým prechodom medzi vodivým feromagnetickým usporiadaním iónov Mn a nevodivým antiferomagnetickým usporiadaním iónov Mn.

Pri skúmaní merného odporu bizmutu Šubnikov a de Haas v roku 1930 pozorovali periodické zmeny merného odporu v závislosti od magnetického poľa, pričom amplitúda oscilácií bola závislá od teploty a od intenzity magnetického poľa. Podobné oscilácie sa pozorovali aj pri štúdiu závislosti magnetickej susceptibility od intenzity magnetického poľa (tzv. de Haasov-van Alphenov jav), a neskôr aj pri skúmaní tepelnej vodivosti, Hallovho napätia a termoelektrickej sily. Vznik oscilácií je dôsledkom kvantovania energie voľných elektrónov v magnetickom poli. Zvlášť zaujímavý je tzv. kvantový Hallov jav, o ktorom sa pojednáva v kapitole Kvantový transport elektrónov.

# 18.2.7 Klasické rozmerové javy

Matthiessenove pravidlo platí pre vzorky s rozmermi väčšími ako stredná voľná dráha elektrónu. Vzniká otázka, ako sa tento výraz zmení, ak budeme zmenšovať napr. jeden rozmer vzorky. Keď stredná voľná dráha elektrónu l bude porovnateľná s jednym z rozmerov vzorky, napr. jej hrúbkou, prejaví sa nový mechanizmus rozptylu vodivostných elektrónov - rozptyl na povrchu vzorky (v tomto prípade už to bude tenká vrstva), čo sa prejaví zväčšením merného odporu:

$$\rho = \rho_0 + \rho_i(T) + \rho_p , \qquad (18.49)$$

kde  $\rho_{\rm p}$  je časť merného odporu, ktorá prislúcha rozptylu elektrónov na povrchu vrstvy. Rozptyl elektrónov na povrchu vrstvy môže mať difúzny charakter, pri ktorom elektróny po zrážke s povrchom nemajú nijaký význačný smer, alebo zrkadlový, keď uhol dopadu sa rovná uhlu odrazu. Fuchs odvodil výraz pre príspevok k mernej vodivosti od rozptylu elektrónov na povrchu vrstvy pre prípad, keď tento rozptyl nie je celkom difúzny, ale že určitá časť p elektrónov sa odráža od povrchu zrkadlovo (pre difúzny rozptyl p = 0, pre zrkadlový p = 1):

$$\frac{\sigma_{\rm F}}{\sigma_{\rm M}} = 1 - \frac{3}{8t}(1-p) \text{ pre } t \gg 1 ,$$
 (18.50)

$$\frac{\sigma_{\rm F}}{\sigma_{\rm M}} = \frac{3t}{4} \frac{(1+p)}{(1-p)} \ln \frac{1}{t} \quad \text{pre} \quad t \ll 1 \;, \tag{18.51}$$

kde $\sigma_{\rm F}$ je merná vodivosť tenkej vrstvy s hrúbkou d,  $\sigma_{\rm M}$ je merná vodivosť masívnej vzorky at=d/l. Pre polykryštalické tenké vrstvy sa používa Mayadasov-Shatzkeho model, v ktorom sa uvažuje aj rozptyl elektrónov na hraniciach kryštalických zŕn. Vznik zložitých magnetických štruktúr v kovoch zo skupiny vzácnych zemín sa prejavuje aj na elektrických vlastnostiach ich tenkých vrstiev. Doteraz sme uvažovali klasický rozmerový jav ( $l\approx d$ ), ale ak hrúbku vrstvy alebo priemer drôtu možno zrovnať s vlnovou dĺžkou elektrónu  $\lambda$ , začnú sa prejavovať kvantové rozmerové javy, ktoré sú opísané v kapitole Kvantový transport elektrónov.

#### 18.2.8 Elektrická vodivosť polovodičov

Základný rozdiel medzi polovodičmi a kovmi je v tom, že koncentrácia nosičov náboja v polovodičoch nemusí byť konštantná a môže sa vplyvom rôznych vonkajších činiteľov meniť. Na elektrickej vodivosti polovodičov sa podieľajú voľné elektróny a diery. Dierové a elektrónové prúdy, zapríčinené elektrickým poľom, sa nazývajú ohmické prúdy. Okrem týchto prúdov môže v polovodiči vzniknúť elektrický prúd aj iným spôsobom.

Príčinou elektrického prúdu môže byť aj nerovnomerné rozloženie koncentrácie voľných nosičov náboja v polovodiči, ktoré zapríčiňuje difúziu voľných nosičov náboja z miest o vyššej koncentrácii do miest s nižšou koncentráciou. Difúziou vznikajúci presun voľných nosičov náboja predstavuje vlastne elektrický prúd, ktorý nazývame difúznym prúdom. Elektrický prúd pretekajúci polovodičom má preto vo všeobecnosti ako ohmickú, tak difúznu zložku. Teplotná závislosť elektrického odporu pre čisté polovodiče je daná vzťahom:

$$\rho \approx T^{-3/2} e^{\mathrm{E}_{\mathrm{G}}/\mathrm{k}_{\mathrm{B}}\mathrm{T}},$$
(18.52)

kde  $E_{\rm G}$  je energetická medzera, ktorá obvykle má hodnotu od 0.5 do 2 eV pre čistý polovodič. Pri nízkych teplotách teda dominuje exponenciálna závislosť elektrického odporu polovodiča od teploty, čo sa využíva predovšetkým v odporovej termometrií (viď. kapitola o termometrii).

# 18.3 Tepelná vodivosť

Štúdium fyzikálnych vlastnosti látok pri nízkych teplotách vyžaduje značný stupeň tepelnej izolácie skúmaných materiálov od vonkajšieho okolia, preto z hľadiska nízkoteplotného výskumu je nesmierne dôležité pochopiť všetky formy prenosu tepla. Obecne, teplo sa môže prenášať prúdením, žiarením a vedením. V ďalšom sa budeme zaoberať iba vedením tepla tuhými látkami. Pre hlbšie štúdium odporúčame predovšetkým Bermanovu monografiu [8] a užitočné údaje o koeficientoch tepelnej vodivosti rôznych materiálov je možne nájsť v [9, 10, 11, 12].

Ak v dvoch rôznych miestach tuhej látky sú rôzne teploty, dôjde k toku tepla medzi týmito miestami. Pokiaľ rozdiel teplôt je malý, hustota tepelného toku q je priamo úmerná gradientu teploty:

$$q_{\rm i} = \lambda_{\rm ij} \ \frac{\partial T}{\partial X_{\rm j}} , \quad i, j = 1, 2, 3 , \qquad (18.53)$$

kde $\lambda_{\rm ij}$  je tenzor tepelnej vodivosti <br/>aT je absolútna teplota. Pre izotrópnu látku platí:

$$\boldsymbol{q} = -\lambda \operatorname{grad} \boldsymbol{T} , \qquad (18.54)$$

kde $\lambda$ je merná tepelná vodivosť (v ďalšom iba tepelná vodivosť). Celkovú tepelnú

vodivosť tuhej látky  $\lambda$ v prvom priblížení možno vyjadriť v tvare:

$$\lambda = \lambda_{\rm e} + \lambda_{\rm f} + \lambda_{\rm m} , \qquad (18.55)$$
$$\frac{1}{\lambda} = W_{\rm e} = W_{\rm e}^{\rm h} + W_{\rm e}^{\rm p} + W_{\rm e}^{\rm e} + W_{\rm e}^{\rm f} + W_{\rm e}^{\rm m} , \qquad (18.56)$$

$$\frac{\lambda_e}{\lambda_f} = W_f = W_f^h + W_f^p + W_f^e + W_f^f + W_f^m , \qquad (18.57)$$

$$\frac{1}{\lambda_{\rm m}} = W_{\rm m} = W_{\rm m}^{\rm h} + W_{\rm m}^{\rm p} + W_{\rm m}^{\rm e} + W_{\rm m}^{\rm f} + W_{\rm m}^{\rm m} .$$
(18.58)

Horné indexy pri tepelnom odpore W =  $1/\lambda$  zodpovedajú jednotlivým rozptylovým mechanizmom: h - na hraniciach zŕn a vzorky, p - na prímesiach a poruchách mriežky, e - na elektrónoch, f - na fonónoch a m - na magnetickej sústave (viď. obr. 18.13). Inak povedané, platí aditívnosť zložiek tepelnej vodivosti, pochádzajúcej od nezávislých nosičov tepla: elektrónov, fonónov a magnetických kvazičastíc. V ďalšom sa budeme zaoberať jednotlivými zložkami tepelnej vodivosti.



Obr. 18.13: Schematický náčrt prenosu tepla v tuhých látkach.

# 18.3.1 Elektrónová zložka

Teória elektrónovej tepelnej vodivosti je súčasťou elektrónovej teórie kovov. Jedným z významných výsledkov tejto teórie bol Wiedemannov-Franzov zákon, ktorý hovorí, že pomer elektrickej a tepelnej vodivosti  $\sigma/\lambda$ rôznych kovov pri danej teplote je približne rovnaký. Konštanta  $L=\lambda/\sigma T$ sa nazýva Lorenzovo číslo a podľa teórie voľných elektrónov, založenej na Fermiho-Diracovej štatistike, je:

$$L_0 = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_{\rm B}}{e}\right)^2 = 2,445.10^{-8} \quad W\Omega/K \;. \tag{18.59}$$

Pri nižších teplotách je  $L_0$  v dobrom súhlase s experimentálnymi výsledkami. S klesajúcou teplotou sa zvyčajne Lorenzovo číslo zmenšuje, čo ukazuje na to, že relaxačný čas pri prenose elektrického náboja nemusí byť rovnaký, ako relaxačný čas pri

transporte náboja. V teplotnom intervale , kde sa uplatňuje len zvyškový elektrický odpor  $\rho_0$ , prevláda elastický rozptyl vodivostných elektrónov na prímesiach a nehomogenitách mriežky, takže hodnota Lorenzovho čísla je opäť blízka teoretickej hodnote  $L_0$ . V zliatinách, kde sa uplatňuje aj fonónová zložka tepelnej vodivosti a v kovoch s magnetickým usporiadaním je závislosť L od teploty zložitejšia.

V oblasti najnižších teplôt dominantným rozptylovým procesom je rozptyl elektrónov na prímesiach a nehomogenitách mriežky a elektrónová tepelná vodivosť je priamo úmerná absolútnej teplote. Zvyšovaním teploty rastie počet fonónov a do hry vstupuje elektrónovo-fonónový rozptyl, ktorý poskytuje tepelný odpor priamo úmerný  $T^2$ .

Ďalší rozptylový mechanizmus, ktorý prichádza do úvahy pri transporte tepla elektrónmi, je elektrónovo-elektrónový rozptyl, ktorému odpovedá tepelný odpor úmerný absolútnej teplote. Prejav tohto mechanizmu v tepelnej vodivosti nebol doteraz dôveryhodne experimentálne dokázaný.

Pozorovanie rozptylu vodivostných elektrónov na hraniciach vzorky je taktiež experimentálne veľmi náročne, pretože teória poskytuje lineárnu teplotnú závislosť elektrónovej tepelnej vodivosti, ktorá sa veľmi ťažko sa separuje od príspevku, spôsobeného rozptylom elektrónov na prímesiach a nehomogenitách mriežky s tou istou teplotnou závislosťou, čo vyžaduje realizovať experiment na superčistých (99,9999 %) a veľmi kvalitných monokryštáloch.

Poslednou zložkou elektrónovej tepelnej vodivosti, ktorou sa budeme zaoberať, je odpor spôsobený rozptylom vodivostých elektrónov na magnetickej sústave. Rôzne teoretické prístupy poskytujú odlišne predpovede pre tento tepelný odpor. Očakáva sa lineárna alebo kvadratická teplotná závislosť tepelného odporu v závislosti od typu spektra magnetických excitácií. Intenzívne sa študovala, ako teoreticky tak aj experimentálne, elektrónová tepelná vodivosť tzv. slabomagnetických kovov, kde spinové fluktuácie sú popísané pomocou kvázičastice paramagnón. Pre elektrónový tepelný odpor spôsobený interakciou vodivostných elektrónov so s paramagnónmi bola teoretický získaná lineárna teplotná závislosť, ktorá bola experimentálne pozorovaná v tepelnej vodivosti aktinoidov pri nízkych teplotách.

#### 18.3.2 Fonónová zložka

Teória fonónovej zložky tepelnej vodivosti v kovoch a zliatinách je v základných rysoch založená na teórii tepelnej vodivosti izolátorov, ktorú vypracoval Debye na základe predstavy pružných harmonických vĺn. V reálnych kryštáloch dochádza k odchýlkam od harmoničnosti kmitov mriežky, čo vedie k interakcií medzi fonónmi, t.j. k výmene energie medzi nimi a vytvoreniu rovnovážneho stavu. Teplotný gradient aplikovaný na kryštál naruší rovnovážne rozdelenie v súbore fonónov. Interakčné procesy, ktoré pôsobia v súbore fonónov, budú prebiehať tak, aby priviedli súbor fonónov znovu do rovnovážneho stavu. Výsledkom týchto tendencií je vznik ustáleného nerovnovážneho stavu, pri ktorom sa prenáša teplo fonónmi. Debayova teória tepelnej vodivosti izolátorov ale vo viacerých smeroch neodrážala fyzikálnu realitu, preto bola tato teória neskoršie modifikovaná Peierlsom, Klemensom, Callawayom a Carruthersom.

Najjednoduchší typ interakcií medzi fonónmi sú tzv. trojfonónové procesy pri

ktorých fonón s vlnovým vektorom  $q_1$  a frekvenciou  $\nu_1$  interaguje s fonónom s vlnovým vektorom  $q_2$  a frekvenciou  $\nu_2$ , pričom vzniká tretí fonón s parametrami  $q_3$  a  $\nu_3$ . Pri tomto procese sa musí zachovávať energia:

$$h\nu_1 + h\nu_2 = h\nu_3 \tag{18.60}$$

a musí platiť

$$q_1 + q_2 = q_3 + 2\pi a, \tag{18.61}$$

kde a je vektor recipročnej mriežky. Zrážky fonónov, pri ktorých a = 0 neprispievajú k tepelnému odporu, pretože po takejto zrážke sa smer toku energie nemení. Sú to tzv. normálne procesy, ktoré hrajú dôležitú úlohu pri vytváraní rovnovážneho stavu. Ak  $a \neq 0$ , smer toku energie sa po každej zrážke mení (tzv. reverzné alebo U-procesy). Práve tieto reverzné procesy sú zodpovedné za vznik tepelného odporu. Okrem trojfonónových procesov môžu prichádzať do úvahy aj štvorfonónové procesy, ktoré analyzoval Pomerančuk.

V ďalšom sa obmedzíme iba na vymenovanie základných rozptylových mechanizmov, ktoré pôsobia pri prenose tepla fonónmi.

Rozptyl fonónov na hraniciach vzorky a hraniciach zŕn vedie k teplotnej závislosti:

$$W_{\rm f}^{\rm h} \sim T^{-3} \ .$$
 (18.62)

Pri nízkych teplotách ( $T \ll \Theta_{\rm D}$ ) rozptyl fonónov na bodových defektoch, na lineárnych poruchách, na náhodne orientovaných plošných defektoch a na dislokáciách poskytuje výslednú závislosť:

$$W_{\rm f}^{\rm p} \sim \beta T + \gamma T^0 + \delta T^{-1} + \varepsilon T^{-2} , \qquad (18.63)$$

kde  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$  a  $\epsilon$  sú teplotné nezávislé konštanty. Pri teplotách  $T > \Theta_{\rm D}$  všetky tieto rozptylové mechanizmy vedú k teplotne nezávislému tepelnému odporu. V kovoch pri nízkych teplotách sa najviac uplatňuje rozptyl fonónov na elektrónoch:

$$W_{\rm f}^{\rm e} \sim T^{-2} \ .$$
 (18.64)

Pri teplotách značne vyšších než Debye<br/>ova teplota $\Theta$ rozp<br/>tyl fonónov na fonónoch (trojfonónové procesy) vedie k tepelnemu odporu:

$$W_{\rm f}^{\rm r} \sim T$$
 . (18.65)

Pri nízkych teplotách ( $T \ll \Theta_{\rm D}$ ) vedie tento rozp<br/>tyl k tepelnému odporu:

$$W_{\rm f}^{\rm f} \sim T^{\rm n} e^{-\Theta_{\rm D}/{\rm mT}} , \qquad (18.66)$$

kde n = -3 a m = 2. Tento rozptyl sa však v kovoch vôbec neuplatňuje. Nakoniec, ešte pri prenose tepla fonónmi sa môže uplatňovať rozptyl fonónov na usporiadanej magnetickej sústave spinov. Teplotná závislosť tepelného odporu v dôsledku rozptylu fonónov na magnetických excitáciach je rôzna pre rôzne typy magnetických excitácií (fero-, feri- a antiferomagnóny). V súčasnosti tento problém sa intenzívne študuje predovšetkým na nízkorozmerných systémoch. Identifikovať tento rozptyl možno pomocou aplikácie magnetického poľa, ktoré potláča magnetické excitácie.

#### 18.3.3 Transport tepla magnetickým podsystémom

Magnetická sústava môže ovplyvňovať prenos tepla v látkach dvoma spôsobmi. Jeden spôsob vedie k zníženiu celkovej tepelnej vodivosti, pretože vznikajú nové zdroje rozptylu (elektrónová - magnónová a fonónová - magnónová interakcia). Druhý spôsob vedie k príspevku k celkovému tepelnému toku, pretože excitácie magnetickej sústavy môžu byť nosičmi tepelného toku.

Jedným z rozptylových procesov, ktoré sa môžu uplatňovať pri prenose tepla magnetickou sústavou, je rozptyl magnónov na hraniciach vzorky a zŕn a rozptyl na prímesiach. Rozptyl magnetických excitácii na hraniciach vzorky a zŕn vedie k teplotnej závislosti:

$$W_{\rm m}^{\rm h} \sim T^{-3/2}$$
 (18.67)

a bol pozorovaný na dvojrozmernom feromagnetiku  $CuCl_2((CH_3NH_3)Cl)_2$  pri teplotách pod 1.5 K. Rozptyl magnónov na dislokáciách poskytuje tepelný odpor:

$$W_{\rm m}^{\rm p} \sim T^{-2}$$
 . (18.68)

V magnónovej zložke tepelnej vodivosti kovov sa očakáva najvýraznejšie prejav magnónovej - elektrónovej interakcie, pre ktorú bola predpovedaná závislosť typu:

$$W_{\rm m}^{\rm e} \sim T^{-{\rm n}}$$
, (18.69)

pričom n = 2 pre antiferomagnetické usporiadanie a 1,5 < n < 2 pre feromagnetický kov. Rozptyl magnónov na elektrónoch bol experimentálne pozorovaný napr. na zliatinách Ni<sub>70</sub>Fe<sub>30</sub>, Fe<sub>68</sub>Co<sub>32</sub> a ď.

Dôležitým rozptylovým mechanizmom, ktorý sa uplatňuje pri prenose tepla magnetickou sústavou v magnetických izolátoroch je rozptyl magnónov na fonónoch, pre ktorý taktiež platí:

$$W_{\rm m}^{\rm f} \sim T^{-2} , \qquad (18.70)$$

čo sa pozorovalo na antiferomagnetickom  $MnF_2$  a ferimagnetickom  $5Fe_2O_3 \cdot 3Y_2O_3$ . V magnetických izolátoroch sa pozoruje aj prejav magnónovej-magnónovej interakcie. Teoretická predpoveď pre teplotnú závislosť tepelného odporu spôsobeného týmto mechanizmom je veľmi nejednoznačná a poskytuje širokú škálu mocninových závislosti:

$$W_{\rm m}^{\rm m} \sim T^{\rm n}$$
, (18.71)

kde pre n rôzne teórie poskytuje rôzne hodnoty od -2 až po 2. Počet prác venovaných magnetickej zložke tepelnej vodivosti neustále narastá, ale väčšina z nich sa dotýka nízkorozmerných magnetických izolátorov. Otázka magnónovej tepelnej vodivosti v kovoch ostáva naďalej otvorená, pretože separácia jednotlivých zložiek tepelnej vodivosti v kovoch je oveľa komplikovanejšia než v izolátoroch.

#### 18.3.4 Separácia a analýza jednotlivých zložiek tepelnej vodivosti v rôznych materiáloch

Z úvah v predchádzajúcich troch kapitolách by sa na prvý pohľad mohlo zdať, že separácia jednotlivých zložiek tepelnej vodivosti je neriešiteľná úloha. Pri opise

každej zložky tepelnej vodivosti sa vyskytuje najmenej päť rozptylových procesov, ktoré môžu ovplyvniť prenos tepla v tuhej látke. Okrem toho medzi rozptylovými mechanizmami sa často vyskytujú také, ktoré pre tepelný odpor od rôznych rozptylových mechanizmov poskytujú rovnaké teplotné závislosti. Situácia sa ale značne zjednoduší, keď uvážime, že v kovoch je fonónová zložka veľmi malá (podobne ako elektrónová v izolátoroch), ďalej že magnónová zložka a rozptyl na mag-



Obr. 18.14: Tepelná vodivosť rôznych vzoriek medi pri nízkych teplotách [9].

netickej sústave sa môže vyskytnúť iba v látkach s magnetickým usporiadaním, a nakoniec že každý rozptylový mechanizmus je dominantný iba v istej teplotnej oblasti. Po tejto úvahe počet možných rozptylových mechanizmov v istej teplotnej oblasti sa redukuje na jeden až tri.

Spočiatku sa budeme zaoberať separáciou fonónovej zložky tepelnej vodivosti **kovov**. Pri veľmi nízkych teplotách, keď fonónový tepelný odpor, vyvolaný rozptylom fonónov na elektrónoch kvadraticky rastie s poklesom teploty, fonónová zložka tepelnej vodivosti čistých kovov je zanedbateľná vzhľadom k elektrónovej zložke. Pri veľmi nízkych teplotách v kovoch absolútne dominantnou je elektrónová zložka tepelnej vodivosti, ktorá smerom od nízkych teplôt nahor najskôr rastie lineárne s teplotou (prevláda rozptyl elektrónov na prímesiach a poruchách mriežky), dosahuje maximálnu hodnotu a potom klesá, čo je spôsobené rozptylom elektrónov na fonónoch (tepelný odpor je priamo úmerný štvorcu teploty):

$$\lambda_{\rm e} = \frac{1}{W_{\rm e}^{\rm p}} + \frac{1}{W_{\rm e}^{\rm f}} = \alpha T + \beta T^{-2} , \qquad (18.72)$$

kde $\alpha$  <br/>a $\beta$ sú teplotne nezávisle konštanty. Na obr. 18.14 sú uvedené teplotne závis-

losti tepelnej vodivosti niekoľkých vzoriek medi rôznej čistoty (RRR sa mení od 3000 do 10) pri nízkych teplotách. Kvalitnejšie vzorky majú vyššie RRR a sa vyznačuju väčšou hodnotou tepelnej vodivosti v maxime, pričom maximum sa posúva k nižším teplotám.

Podobná situácia zo zanedbaním fonónovej zložky v kovoch nastáva aj pri vysokých teplotách, keď fonónová tepelná vodivosť je určená fonónovofonónovými U-procesmi, počet ktorých narastá so vzrastajúcou teplotou, zatiaľ čo elektrónová zložky tepelnej vodivosti zostáva pri týchto teplotách takmer konštantná. Teda o fonónovej zložke v tepelnej vodivosti má význam uvažovať iba v oblasti teplôt medzi veľmi nízkymi a vysokými teplotami. Napríklad, pre čistú meď fonónová zložka je iba 3 % z celkovej tepelnej vodivosti v teplotnom intervale od (50 -200) K.

V **zliatinách** je fonónová zložka čo do veľkosti porovnateľná s elektrónovou zložkou tepelnej vodivosti.

Úplne iná situácia je v veľmi čistých supravodičoch (obr. 18.15), v ktorých pri prechode kovu do supravodivého stavu vznikajú spárované dvojice elektrónov - tzv. Cooperove páry, ktoré neprenášajú teplo. Pri dostatočne nízkej teplote sa teplo v supravodičoch sa prenáša len fonónmi, ktoré sa rozptyľujú na hraniciach vzorky a tepelná vodivosť klesá s treťou mocninou teploty. Preto veľmi čisté supravodiče sa používajú ako tepelné vypínače pri veľmi nízkych teplotách (pozri kapitolu o dosiahovaní a meraní nízkych teplôt), pretože pomer tepelnej vodivosti v normálnom a supravodivom stave môže dosiahnuť pri

Obr. 18.15: Tepelná vodivosť čistého olova: • vo vonkajšom magnetickom poli v normálnom stave pod prechodovou teplotou  $T_{\rm C} = 7, 2 \text{ K}; \circ$  bez magnetického poľa v supravodivom stave [13].



Obr. 18.16: Vplyv rozptylu fonónov na izotopických prímesiach v germániu: A - obohatené <sup>74</sup>Ge, B - normálne Ge [14].
50

20

10

Fepelná vodivosť (10<sup>2</sup> W/mK)

0.3

0,1

0,05

(C) [14].

teplote 0,1 K až  $10^5$ . Keď je kov v sup-

100

ravodivom stave, veľmi zle vedie teplo, ale po rozrušení supravodivého stavu

vonkajším magnetickým poľom vytvorí sa dobrý tepelný kontakt.

> Tepelná vodivosť veľmi čistých **polovodičov** (napr. germánia alebo kremíka) pochádza iba od fonónov. V oblasti najnižších teplôt sa uplatňuje rozptyl fonónov na hraniciach vzorky ( $\lambda \sim T^3$ ), pri teplote asi 15 až 20 K sa pozoruje maximum tepelnej vodivosti a pri ďalšom zvyšovaní teploty sa prejavuje rozptyl fonónov na izotopických primesiach ( $\lambda \sim T^{-1,5}$ ) (obr. 18.16). V tepelnej vodivosti dopovaných polovodičov typu n sa uplatňuje aj elektrónová zložka a na chovanie teplotnej závislosti tepelnej vodivosti má vplyv aj rozptyl fonónov na elektrónoch a prímesiach.

> Teplotná závislosť nemagnetických **izolátorov** pri nízkych teplotách tiež vykazuje maximum za ktoré je zodpovedný rozptyl fonónov na hraniciach vzorky a zín ( $\lambda \sim T^3$ ) a fonónovo-fonónový reverzný rozptyl ( $\lambda \sim T^{n}\exp(-\Theta_{\rm D}/mT)$ ). Na obr. 18.17. je znázornený vplyv rozmerov vzorky na rozptyl fonónov na hraniciach vzorky zafíru, ktorý vzhľadom na strednú voľnú dráhu fonónov je dominantný už od 20 K a nižšie. Ideálny

experimentálny objekt pre skúmanie fonónovofonónových procesov v izolátoroch je tuhe hélium, v ktorom bol pozorovaný v blízkosti maxima aj prejav normálnych fonónovo-fonónových procesov a tzv. druhý zvuk.

Reálny kryštál vždy však obsahuje určité množstvo bodových defektov (prímesí, vakancií, intersticiálov) a dislokácií. Ich príspevok v jednotlivých častiach nízkoteplotného maxima v tepelnej vodivosti je znázornený na obr 18.18.

10 20 Teplota (K)

Obr. 18.17: Vplyv rozme-

rov na tepelnú vodivosť

zafíru: priemer vzorky v

mm: 3 (A), 1,55 (B) a 1,02

Prenos tepla v sklovitých a amorfných látkach je oveľa horší ako v monokryštáloch alebo v polykryštáloch, pretože stredná voľná dráha fonónov je veľmi malá. Zvláštnosťou teplotnej závislosti tepelnej vodi-



Obr. 18.18: Schematické znázornenie teplotných oblastí, v ktorých dominujú jednotlivé rozptylové procesy v izolátoroch [15].

vosti amorfných a sklovitých látok je, že nízkoteplotná strana veľmi nevýrazného maxima nesleduje závislosť  $T^3$ , ale vykazuje univerzálnu teplotnú závislosť tepelnej vodivosti, ktorá sa pozoruje pre všetky materiály tohto typu, a to  $T^n$ , kde 1,5 < n < 1,9 (obr. 18.20). Sú

visí to pravdepodobne s tunelovaním atómov, prípadne skupiny atómov medzi dvoma rovnovážnymi polohami s prakticky identickými energiami a rozptylom fonónov na týchto tunelových módoch. Existuje však aj exotickejšie vysvetlenie na základe fraktalových teórií.

# 18.3.5 Meranie tepelnej vodivosti

Metódy merania mernej tepelnej vodivosti môžme rozdeliť na stacionárne a nestacionárne metódy. Pri stacionárnej metóde merania tepelnej vodivosti a za predpokladu axiálneho šírenia tepla vo vzorke vo vzorke valcovitého tvaru možno mernú tepelnú vodivosť vyjadriť v tvare:





542

Obr. 18.20: Teplotná závislosť tepelnej vodivosti rôzných amorfných a sklovitých látok pri nízkych teplotách [16].

kde  $\dot{Q}$  je tepelný tok cez vzorku, l je vzdialenosť medzi držiakmi teplomerov, S je prierez vzorky a  $\Delta T = T_2 - T_1$ je teplotný rozdiel pozdĺž osi vzorky. Meranie jednej hodnoty mernej tepelnej vodivosti sa realizuje nasledovne. Po ustálení tepelnej rovnováhy (údaje teplomerov sú konštantne v čase) vytvoríme dolným ohrievačom (obr. 18.19) na skúmanej vzorke teplotný rozdiel v rozmedzí 5 až 10 % hodnoty strednej teploty vzorky. Po ustálení teplomerov odčítame hodnoty dolného teplomera  $T_2$  a horného teplomera  $T_1$ . Potom vypneme dolný ohrievač a zapneme horný ohrievač, pričom regulujeme príkon do horného ohrievača tak, aby teplota

horného konca vzorky  $T_1$  zostala konštantná.

Po dosiahnutí rovnovážneho stavu stanovíme hodnotu dolného teplomeru  $T'_2$ . Ak  $T'_2 = T_1$ , potom na vzorke nevzniká teplotný rozdiel od parazitných prítokov tepla. Mernú tepelnú vodivosť vypočítame podľa vzťahu (18.73) a priradíme jej strednú teplotu:  $T_s = (T_1 + T_2)/2$ . Jednou z modifikácií tejto metódy je aj tzv. porovnávacia metóda merania tepelnej vodivosti pri ktorej sa používa referenčná vzorka s tým istým tepelným tokom ako cez meranú vzorku.

Pri nestacionárnej metóde sa rozloženie teploty vo vzorke mení v čase. Používa sa predovšetkým metóda teplotnej vlny, pri ktorej na jednom konci dlhého valca aplikujeme sínusovú zmenu teploty a meriame vo vzdialenosti x od konca tyče útlm a fázový posuv teplotnej vlny a metóda impulzného ohrevu, pri ktorej aplikujeme impulzný ohrev na jednu stranu vzorky, ktorá má tvar tenkej doštičky, pomocou lasera a meriame čas dosiahnutia polovice maximálnej teploty na druhej strane vzorky.

## 18.4 Kapicův odpor

Při přechodu tepla rozhraním mezi kapalinou a pevnou látkou vzniká na rozhraní teplotní rozdíl. Protéká li jednotkovou plochou rozhraní tepelný tok Q, vzniká zde rozdíl teplot  $\delta T = R_{\rm K} \dot{Q}$ , vyvolaný přídavným tepelným odporem rozhraní. Tento tepelný odpor poprvé popsal Kapica v roce 1941 při analýze experimentů s přenosem tepla v supratekutém <sup>4</sup>He, proto je označován jako Kapicův odpor  $R_{\rm K}$ . Další experimenty ukázaly, že tento jev není vázán pouze na supratekutou fázi <sup>4</sup>He (He II). Teplotní skok je pozorován na rozhraní pevné fáze a kvantových kapalin  ${}^{4}$ He, <sup>3</sup>He a jejich směsi, mezi dvěma kvantovými médii, např. mezi pevným a kapalným <sup>4</sup>He i na rozhraní mezi dvěma různými pevnými látkami. V mnoha případech byla pozorován vzrůst Kapicova odporu s klesající teplotou  $R_{\rm K} \propto T^{-3}$ . V oblasti velmi nízkých teplot se Kapicův odpor stává obtížně překonatelnou překážkou k dosažení tepelné rovnováhy. Zesílit tepelný tok mezi dvěma prostředími lze zpravidla jen zvětšením obsahu plochy rozhraní mezi nimi. Zvětšení plochy rozhraní lze dosáhnout zvýšením jeho drsnosti, skládanou fólií nebo nejlépe vrstvou napečeného (sintrovaného) prášku s co nejmenším rozměrem zrna. Teorii vzniku Kapicova odporu formuloval v roce 1952 Chalatnikov [23].

## 18.4.1 Impedanční nepřizpůsobení



Za obecný mechanismus výměny tepla přes rozhraní mezi pevnou látkou a kapalinou považoval Chalatnikov přenos energie mezi rezervoáry fononů. Použil klasické výrazy pro šíření a

Obr. 18.21: Lom zvukové vlny na rozhraní kapaliny a pevné látky.

lom zvukových vln. Typické rychlosti zvuku a velikosti akustické impedance jsou však v pevné fáze mnohem větší než v kapalině. Proto je přenos tepla rozhraním s klesající teplotou stále obtížnější, hovoříme o impedančním nepřizpůsobení (angl. *acoustic mismatch*).

Posoudíme-li lom akustické vlny na rozhraní podle Snellova zákona v analogii s lomem světelné vlny

$$\sin \alpha_{\rm l} / \sin \alpha_{\rm s} = v_{\rm l} / v_{\rm s}, \qquad (18.74)$$

jak je zřejmé z obr. 18.21, dochází k

výraznému totálnímu odrazu zvukových vln v pevné látce.

Kritický vrcholový úhel  $\alpha_l^c$  kužele, který vymezuje směry fononů, jež mohou rozhraním proniknout, je velmi malý. Pro typickou rychlost zvuku v pevné látce  $v_s \sim 5$  km/s a rychlost prvního zvuku v kapalném <sup>4</sup>He (pro T < 1 K), kde  $v_l = 238$  m/s, nebo v kapalném <sup>3</sup>He, kde  $v_l = 183$  m/s, dostaneme  $\alpha_l^c < 3^\circ$ , viz [24]. Pravděpodobnost, že fonony dopadající na rozhraní ze všech směrů rozhraním proniknou, odpovídá prostorovému úhlu kritického kuželu

$$f = \pi \sin^2(\alpha_{\rm l}^{\rm c})/2\pi = 1/2(v_{\rm l}/v_{\rm s})^2.$$
(18.75)

Pro uvedené hodnoty rychlosti zvuku je  $f < 10^{-3}$ .

Další překážkou pro přenos tepla rozhraním je velký rozdíl impedancí pro šíření zvuku v kapalině  $Z_1 = \rho_1 v_1$  a v pevné fázi  $Z_s = \rho_s v_s$ . Koeficient přenosu t je pro prakticky kolmý dopad dlouhovlnných fononů dán výrazem

$$t = \frac{4Z_{\rm l}Z_{\rm s}}{(Z_{\rm l} + Z_{\rm s})^2} \sim \frac{4Z_{\rm l}}{Z_{\rm s}} = \frac{4\rho_{\rm l}v_{\rm l}}{\rho_{\rm s}v_{\rm s}}.$$
(18.76)

Dosadíme-li za hustotu mědi $\rho_{\rm s}=8,9\times10^3~{\rm kgm}^{-3}$ a za hustotu kapalného $^4{\rm He}$ <br/> $\rho_{\rm l}=145~{\rm kgm}^{-3},$  případně pro $^3{\rm He}$ <br/> $\rho_{\rm l}=82~{\rm kgm}^{-3},$  je $t\sim2\times10^{-3}.$ Z tohoto odhadu vyplývá, že jen<br/> velmi malá část ( $ft\sim10^{-5}$ ) dopadajících fononů rozhraním pronikne. Z Debye<br/>ova modelu [2] lze pro hustotu fononů odvodit vztah

$$U/V = \frac{3k^4 T^4}{2\pi^2 v_1^3 \hbar^3} \frac{\pi^4}{15}.$$
 (18.77)

Polovina fononů v kapalině směřuje k rozhraní s plochouAa vytváří tedy tok energie

$$\dot{Q} = 1/2ft(U/V)v_1A = \frac{3k^4T^4}{2\pi^2 v_1^3\hbar^3} \frac{\pi^4}{15} \frac{1}{2} \frac{4\rho_1 v_1^4 A}{\rho_s v_s^3} = \frac{\pi^2 k^4 \rho_1 v_1}{5\hbar^3 \rho_s v_s^3} AT^4.$$
(18.78)

V tepelné rovnováze protéká stejný tok z pevné látky do kapaliny. Při malém rozdílu teplot $\delta T=T_{\rm l}-T_{\rm s}$  protéká rozhraním rozdílový tok $\dot{Q}_{\rm r}$ 

$$\dot{Q}_{\rm r} = \frac{d\dot{Q}}{dT}\delta T = \frac{4\pi^2 k^4 \rho_{\rm l} v_{\rm l}}{5\hbar^3 \rho_{\rm s} v_{\rm s}^3} A T^3 \delta T.$$
(18.79)

Kapicův odpor rozhraní s obsahem ploch<br/>yAje tedy podle vztahu (18.4) dán vztahem

$$R_{\rm K} = \frac{\delta T}{\dot{Q}_{\rm r}} = \frac{5\hbar^3 \rho_{\rm s} v_{\rm s}^3}{4\pi^2 k^4 \rho_{\rm l} v_{\rm l}} \frac{1}{AT^3}.$$
 (18.80)

V obr. 18.22 převzatém z [24] jsou shrnuty výsledky měření Kapicova odporu v teplotách pod 1 K. V grafu jsou vyznačeny teoretické hodnoty vypočtené podle vztahu (18.79). Je zřejmé, že ačkoli se v mnohých měřeních dosahuje dobrá shoda v teplotní závislosti  $R_{\rm K} \propto T^{-3}$ , velikost  $R_{\rm K}$  je často řádově menší než teoretický odhad.



Obr. 18.22: Výsledky určení Kapicova odporu (vztaženého na jednotkovou plochu rozhraní) mezi různými pevnými látkami a  ${}^{4}\text{He}$ či  ${}^{3}\text{He}$  [24].

Naměřená hodnota Kapicova odporu na rozhraní mědi a <sup>4</sup>He vede na teplotní spád  $\delta T = R_K \dot{Q}_r / A \simeq 1,2$  mK při 100 mK, prochází-li rozhraním o ploše A =0,1 m<sup>3</sup> tepelný tok  $\dot{Q}_r =$ 1  $\mu$ W. Podle Chalatnikovova vztahu (18.79) by podle obr. 18.22 rozdíl teplot dosáhl  $\delta T \simeq$ 4,8 mK. Výrazpější rozdíl mezi

Výraznější rozdíl mezi teoretickým odhadem a experimentrální hodnotou vzniká na rozhraní mědi a  ${}^{3}$ He. Při 20 mK by tepelný tok  $\dot{Q}_{\rm r}$  =  $0, 1 \mu W$ rozhraním o ploše A $0,1 m^3$ = podle vztahu (18.79)vyvolal teplotní rozdíl  $\delta T \simeq 14 \text{ mK}, \text{ což překra-}$ čuje podmínku odvození vztahu (18.79). V experimentu se však naměří pouze  $\delta T \simeq 0, 6$  mK, viz obr. 18.22.

Při výpočtu použitá plocha rozhraní A =

0, 1 m<sup>3</sup> odpovídá využití spečených (sintrovaných) měděných prášků. Prášky o velikostí zrna kolem 1 µm umožňují získat výměnnou plochu až 1 m<sup>2</sup>/g. Ještě větší rozvinutí plochy rozhraní se dosahuje použitím spečených stříbrných nebo platinových prášků se zrnem menším než 1 µm [26, 27, 28]. Kvůli dosažení shody předpovědi modelu akustického nepřizpůsobení a změřených hodnot Kapicova odporu byla zavedena řada korekcí. Za přenos tepla ze strany pevné látky jsou zodpovědné příčné fononové vlny, jejichž rychlost je poněkud menší než uvažovaná rychlost zvuku, v supratekuté kapalině je třeba uvažovat rychlost nulového zvuku. Tyto korekce však nevysvětlí anomální snížení Kapicova odporu ani změnu teplotní závislosti, jak je často pozorována.

Anomálně malé hodnoty Kapicova odporu dosahované při zvětšování výměnné plochy využitím spečených kovových prášků stimulovaly vytvoření modelu, v němž byla uvažována role kmitů mřížky v omezené geometrii zrn a jejich spojovacích krčků a z druhé strany kmitů atomů kapaliny v pórech mezi zrny. Rozměrům zrn a rychlosti zvuku v nich odpovídají frekvence v oblasti GHz. S použitím Einsteinova modelu kmitů mřížky s určitou frekvencí fononů  $\omega_E/k \simeq 10-20~m{\rm K}$  [29] byla získána pod 10 $m{\rm K}$ mírnější teplotní závislost Kapicova odporu než předpovídá model akustického nepřizpůsobení,  $R_K \propto T^{-1}$ . Použije-li se však i pro danou oblast reálnější Debyevo rozdělení hustoty fononů, výsledek vede opět na závislost  $R_K \propto T^{-3}$  a k hodnotám blízkým klasickým.

# 18.4.2 Anomální (magnetický) Kapicův odpor

Významný předěl ve studiu fyzikální podstaty Kapicova odporu přinesly práce (např. [30]), které se zabývaly anomálním chováním tepelného kontaktu mezi paramagnetickými solemi a <sup>3</sup>He. Další studium závislosti Kapicova odporu mezi pevnou



Obr. 18.23: Kapicův odpor rozhraní <sup>546</sup> mezi stříbrným sintrem a <sup>3</sup>He [31]. Plné tečky jsou výsledkem měření  $R_K$  bez přítomnosti magnetického pole, kroužky odpovídají měření v magnetickém poli. Plné trojúhelníčky jsou příspěvky  $R_{\rm K}^{\rm mag}$  odvozené z těchto měření. Spojitá křivka znázorňuje teoreticky odvozenou teplotní závislost  $R_{\rm K}^{\rm mag}$  [29].

látkou ve formě stříbrného sintru a <sup>3</sup>He [31] na magnetickém poli a na teplotě v oboru 1-5 mK vedly k představě dvou nezávislých kanálů přenosu tepla rozhraním: (i) klasického fononového mechanismu s tepelnou vodivostí  $h_{\rm fon}$  a (ii) magnetického kanálu  $h_{\rm mag}$ , takže můžeme psát

$$1/R_K = h_{\rm fon} + h_{\rm mag}$$
. (18.81)

Měřený Kapicův odpor vzrůstal s rostoucím magnetickým polem až k hodnotě  $B \simeq 0,2$  T a dále na poli nezávisel. Teorie předpokládá, že tepelná výměna magnetickým kanálem se uskutečňuje díky magnetické dipolární vazbě mezi magnetickými momenty atomů <sup>3</sup>He a magnetickými

momenty v pevné látce. Časově proměnné magnetické pole fluktuujících momentů <sup>3</sup>He interaguje s časově proměnným polem magnetických momentů atomů kmitajících kolem rovnovážných poloh v mřížce. Mohou jimi být atomy přechodových prvků v paramagnetických solích nebo magnetické příměsi ve stříbrných, měděných nebo platinových prášcích a také loka-

lizované atomy paramagnetických nečistot adsorbovaných na povrchu pevné látky [29] (kyslík v různých formách: např.  $O_2, O_2^-, O, O^-$ ). Přiložené magnetické pole způsobí zafixování magnetických momentů v pevné látce a tím znemožní tepelnou výměnu magnetickým kanálem.

Atomy normálního kapalného <sup>3</sup>He se chovají jako Fermiho kapalina, lokalizované magnetické momenty v pevné látce jsou popsány jako dvouhladinový systém s Gaussovou distribuční funkcí. Dipolární interakce ve formalizmu druhého kvantování vede k výrazům analogickým kontaktní interakci. Numerické řešení vede k předpovědi minima tepelného odporu rozhraní při teplotě  $T_{\rm min} = \Delta k/2, 5$ , kde  $\Delta$  označuje střední hodnotu energetického rozdílu hladin v dvouhladinovém systému. Pro typickou hustotu nečistot dostaneme  $T_{\rm min} \simeq 2 - 3$  mK. Pro teploty vyšší než  $T_{\rm min}$  je  $R_{\rm K}^{\rm mag}$  lineární funkcí teploty. Pro teploty nižší než  $T_{\rm min}$  je tepelná vodivost magnetického kanálu silně závislá na distribuční funkci dvouhladinového systému, pro jednoduché Gaussovo rozdělení lze odvodit  $R_{\rm K}^{\rm mag} \propto T^{-2}$ . Dobrou shodu těchto výsledků s experimentem demonstruje obr. 18.23.

Z grafu 18.22 a z dalších studií je zřejmé, že velikost Kapicova odporu závisí výrazně též na charakteru povrchu pevné látky. Zdrsnění povrchu vede zpravidla ke zmenšení Kapicova odporu i při započtení zvětšení plochy rozhraní. Jak ukázal Nakayama [29], Kapicův odpor zásadně ovlivní již monoatomární vrstva adsorbovaného kyslíku v různé iontové či molekulární konfiguraci. Evidentní je i zvětšení Kapicova odporu již při malé příměsi <sup>4</sup>He v lázni <sup>3</sup>He. Adsorbovaná vrstva <sup>4</sup>He zvětší vzdálenost magnetické dipolární interakce a tím oslabí magnetický kanál tepelné vodivosti. Adsorbované atomy podléhají velkým silám vazby s povrchovými atomy pevné látky a tak je možné předpokládat, že vrstva má charakter pevného helia. Analýza některých experimentů tento předpoklad potvrzuje.

Je zřejmé, že další krok k pochopení fyzikálních mechanismů podílejících se na Kapicově odporu je podmíněn lepší znalostí povrchů pevné látky a možností přípravy dokonale čistých povrchů, nejlépe měřením "in situ" ve vysokovakuových aparaturách.

## 18.5 Literatúra

 N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, Solid state physics, Holt Rinehart and Winston, New York (1976).

- [2] Ch. Kittel, Introduction to solid state physics, Wiley, New York (1976); Úvod do fyziky pevných látek, Academia (1985).
- [3] H.M. Rosenberg, The solid state, Clarendon Press, Oxford (1984).
- [4] J.S. Dugdale, The electrical properties of metals and alloys, Edward Arnold, London (1977).
- [5] G.T. Meaden, Electrical resistance of metals, Heywood, London (1966).
- [6] L. Solymar, D. Walsh, Electrical properties of materials. Seventh edition, Oxford University Press, New York (2004).
- [7] A.J. Schofield, Cont. Phys. 40, 95 (1999).
- [8] R. Berman, Thermal conduction in solids, Clarendon Press, Oxford (1976).
- [9] O. Madelung, G.K. White, Landolt-Börnstein Vol.III/15c, Springer, Berlin (1991).
- [10] P.G. Klemens, R.K. Williams, Internat. Metal Rev. 31, 197 (1986).
- [11] G. Hartwig, Polymer properties at room and cryogenic temperatures, Plenum Press, New York (1994).
- [12] J. Jelínek, Z. Málek, Kryogenní technika, SNTL, Praha (1982).
- [13] J.L. Olsen, Proc. Phys. Soc. A65, 518 (1952).
- [14] Š. Jánoš, Fyzika nízkych teplôt, Alfa, Bratislava (1980).
- [15] G.K. White, P. Meeson, Experimental Techniques in Low-Temperature Physics, Clarendon Press, Oxford (2002).
- [16] R.B. Stephens, Phys. Rev. B 8, 2896 (1973).
- [17] P.P. Keesom, G. Seidel, *Phys. Rev.* **113**, 33 (1959).
- [18] W.S. Corak, C.B. Satterthwaite, Phys. Rev. 102, 662 (1956).
- [19] L.E. Wenger, K. Amaya, C.A. Kukkonen, Phys. Rev. B 14, 1327 (1976).
- [20] Y.S. Touloukian, E.H. Buyco, Thermophysical properties of matter, Vol.4 Specific Heat -Metallic Elements and Alloys, Plenum Press, New York (1970).
- [21] Y.S. Touloukian, E.H. Buyco, Thermophysical properties of matter, Vol.5 Specific Heat -Nonmetallic Solids, Plenum Press, New York (1970).
- [22] N.E. Phillips, Crit. Rev. Solid State Sci. 2, 467 (1971).
- [23] I.M. Chalatnikov, ZHETF 22, 687 (1952).
- [24] O.V. Lounasmaa, Principles and Methods Below 1 K, Academic Press (1974).
- [25] F. Pobell, Matter and Methods at Low Temperatures, Springer Verlag (1992).
- [26] D.S. Betts, An Introduction to Millikelvin Technology, Cambridge University Press (1989).
- [27] G.A. Vermeulen, G. Frossati, Cryogenics 27, 139 (1987).
- [28] E.A. Schuberth, E.D. Adams, Y. Takano, Cryogenics 39, 799 (1999).
- [29] T. Nakayama, Progress in Low Temp. Physics XII, 115 (1989).
- [30] J.H. Bishop, D.W. Cutter, C. Mota, J.C. Wheatley, J. Low Temp. Phys. 10, 379 (1973).
- [31] D.D. Osheroff, R.C. Richardson, Phys. Rev. Lett. 54, 1178 (1985).



Obr. 18.19: Schéma experimentálneho priestoru  ${}^{3}He_{2}$  kryostatu na meranie tepelnej vodivosti stacionárnou metódou. Dole je detailne znázornená konštrukcia držiaka teplomerov.

# 19 Jaderný magnetizmus

## J. KURIPLACH, B. SEDLÁK

Při teplotách blízkých pokojovým je velké množství vlastností látek – například vlastnosti elektrické a magnetické – určeno charakterem elektronových stavů a způsobem jejich obsazování v závislosti na vnějších podmínkách. Skutečnost, že i atomová jádra jsou elektricky a magneticky aktivní se v okolí pokojových teplot až na výjimky projevuje jen malými korekcemi. Při dostatečně nízkých teplotách (zpravidla v submilikelvinové oblasti) mohou však elektrické a magnetické vlastnosti atomových jader být pro některé elektrické, magnetické či tepelné vlastnosti látek určující. Významnou roli zde často hraje jaderný magnetizmus, jehož studium se tak stává důležitou součástí fyziky nízkých teplot.

# 19.1 Fyzikální základy jaderného magnetizmu

Následující výklad základních pojmů a poznatků o jaderném magnetizmu je v podstatě stručnější verzí analogické části prvního vydání skript Fyzika nízkých teplot [1], na něž je na příslušných místech odkazováno a kde lze také nalézt odkazy na literaturu k podrobnějšímu studiu.

# 19.1.1 Základní parametry atomových jader

Základní vlastnosti atomového jádra jsou určeny jeho hmotností a elektrickým nábojem, přičemž hodnoty těchto veličin jsou dány počtem protonů Z a neutronů N, z nichž je uvažované jádro složeno. Náboj jádra je celistvým násobkem náboje protonu; ten je roven *elementárnímu náboji e* a podle adjustace 1998<sup>1</sup> má hodnotu  $e = 1,602\,176\,462(63) \times 10^{-19}$  C. Celkový náboj jádra je tedy roven eZ.

Veličina A = Z + N se nazývá hmotnostní číslo a umožňuje přibližně vyjádřit hmotnost jádra pomocí hmotností volných protonů a neutronů. Skutečná hmotnost jádra je však vždy menší o tzv. hmotnostní defekt, který je vyjádřením značné energie vzájemné vazby mezi nukleony v jádře.

Jednotlivá jádra daného prvku se mohou lišit počtem neutronů; mluvíme pak o různých *izotopech* daného prvku. V přírodě je známo asi 280 stabilních izotopů, některé prvky však mají jeden či více izotopů nestabilních, charakterizovaných jejich *poločasem rozpadu*. Relativní zastoupení jednotlivých stabilních izotopů daného prvku je na Zemi zpravidla konstantní a je tudíž pro tento prvek charakteristické; mluvíme o *přirozeném izotopickém složení*, udávaném obvykle v procentech.

Kromě hmotnosti a náboje jsou nukleony charakterizované vlastním momentem hybnosti – *spinem*, a s ním spojeným *magnetickým dipólovým momentem*. Přirozeným důsledkem je, že každý izotop v daném stavu je charakterizován výsledným spinem, magnetickým dipólovým momentem a v některých případech i *elektrickým kvadrupólovým momentem*, který charakterizuje míru asymetrie rozložení náboje v objemu atomového jádra. Vlastnostmi těchto veličin se nyní budeme zabývat.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>*Review of Modern Physics* **72**, 351 (2000).

**Jaderný spin** představuje celkový moment hybnosti daného jádra a může být chápán jako "vektorový součet" orbitálních a spinových momentů hybnosti jednotlivých nukleonů. Jelikož současné znalosti struktury atomového jádra vždy neumožňují určit stavy jednotlivých nukleonů v jádře a tedy ani jeho výsledný moment hybnosti  $J_N$ , který musí být proto pro daný stacionární stav jádra stanoven experimentálně. Jeho vlastnosti ovšem podléhají obecným kvantově mechanickým zákonitostem, plynoucím z komutačních relací operátoru momentu hybnosti. Operátor celkového momentu hybnosti daného jádra  $\hat{J}_N$  se obvykle se vyjadřuje prostřednictvím bezrozměrného kolineárního operátoru  $\hat{I}$ 

$$\hat{J}_{\rm N} = \hbar \hat{I},\tag{19.1}$$

reprezentujícího *jaderný spin*<sup>2</sup>. Absolutní hodnota obou veličin je určena *kvantovým číslem jaderného spinu I*, které může nabývat celých a polocelých hodnot 0, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, ..., přičemž platí

$$|\hat{J}_{\rm N}| = \hbar \sqrt{I(I+1)} , \quad |\hat{I}| = \sqrt{I(I+1)} .$$
 (19.2)

Jelikož  $\hat{J}$  i  $\hat{I}$  komutují se svými složkami, jsou stacionární hodnoty například jejich z-ových složek  $J_{N,(z,m)}$  a  $I_{z,m}$  určeny t.zv. magnetickým kvantovým číslem m, nabývajících jedné z 2I + 1 hodnot  $I, I - 1, I - 2, \ldots, -(I - 1), -I$ . Platí tedy

$$J_{\rm N,(z,m)} = \hbar m , \quad I_{z,m} = m ,$$
 (19.3)

odkud plyne, že maximální možná hodnota těchto složek je  $J_{N,(I,I)}$  respektive  $I_{I,I}$ . Z experimentu plynou některé další závěry o hodnotách jaderného spinu:

1. Jaderné spiny stabilních izotopů v základním stavu mají relativně malé hodnoty:  $I \leq 7$ . Znamená to, že momenty hybnosti jednotlivých nukleonů v jádře jsou do značné míry vykompenzované.

**2.** Jádra obsahující sudý počet protonů a neutronů – tzv. sudo-sudá jádra – mají v základním stavu vždy nulový spin.

3. Jádra s lichým hmotnostním číslem mají vždy polocelý spin.

**4.** Existují jen čtyři stabilní izotopy, <sup>2</sup>H, <sup>6</sup>Li, <sup>10</sup>B, <sup>14</sup>N, které mají sudé hmotnostní číslo a lichý počet protonů i neutronů. Všechna tato jádra mají v základním stavu celé hodnoty spinu, pro něž v daném pořadí postupně platí I = 1, 1, 3, 1.

Magnetický dipólový moment vykazují jádra s nenulovým spinem. Podobně jako u jiných kvantově mechanických soustav, například u elektronových obalů atomů [3], je i zde možné vyjadřovat magnetický moment jádra pomocí vztahu k jadernému spinu. Označíme-li tedy (Ampérův) magnetický moment jádra symbolem  $\mu_N$ , můžeme zavést *jaderný gyromagnetický poměr*  $\gamma_N$  jako charakteristickou konstantu pro daný stacionární stav jádra, která vyjadřuje poměr příslušných složek magnetického momentu a jaderného spinu a může nabývat kladných i záporných

 $<sup>^2</sup>$ Jeho vlastní hodnoty, dané kvantovými čísly Iam,vyjadřují moment hybnosti jádra v jednotkách $\hbar.$ 

hodnot. Obecně řečeno, v současné době je třeba – stejně jako v případě jaderného spinu – hodnotu  $\gamma_{\rm N}$  určovat experimentálně. S ohledem na (19.1) a (19.3) zřejmě postupně platí pro velikost magnetického momentu  $|\boldsymbol{\mu}_I|$ , pro stacionární hodnoty jeho z-ové složky  $\mu_{I,m}$  a pro maximální hodnotu této složky  $\mu_{I,I}$ 

$$|\boldsymbol{\mu}_I| = \gamma_{\rm N} \hbar \sqrt{I(I+1)} , \quad \mu_{I,m} = \gamma_{\rm N} \hbar m , \quad \mu_{I,I} = \gamma_{\rm N} \hbar I .$$
(19.4)

Veličina  $\mu_{I,I} = \gamma_{\rm N} \hbar I$  je v literatuře nazývána *jaderný magnetický moment*. Pro popis jaderného magnetizmu je výhodné zavést mikroskopickou jednotku zcela analogickou Bohrovu magnetonu  $\mu_{\rm B}$ , tzv. *jaderný magneton*  $\mu_{\rm N}$ , definovaný vztahem

$$\mu_{\rm N} = \frac{e\hbar}{2m_{\rm p}} \ . \tag{19.5}$$

Z definičních vztahů je zřejmé, že poměr velikostí Bohrova a jaderného magnetonu je dán poměrem hmotností elektronu a protonu, který je přibižně roven 1834. Pro velikost jaderného magnetonu tedy vychází  $\mu_{\rm N} \doteq 5,0505 \times 10^{-27} \, {\rm JT}^{-1}$ . Magnetický moment jader se rovněž velmi často vyjadřuje pomocí bezrozměrné veličiny zcela analogické Landéovu faktoru pro elektronový obal atomu (viz čl. 19.6.2). Touto veličinou je tzv. *jaderný g-faktor* označovaný symbolem  $g_{\rm N}$ , který udává poměr magnetického momentu daného jádra (vyjádřeného v jaderných magnetonech) a jeho momentu hybnosti (vyjádřeného v jednotkách  $\hbar$ ); z rovnic 19.4 a 19.5 dostáváme pro jaderný *g*-faktor vztah

$$g_{\rm N} = \gamma_{\rm N} \frac{\hbar}{\mu_{\rm N}} = \frac{\mu_{I,I}}{I\mu_{\rm N}} . \tag{19.6}$$

Elektrický kvadrupólový moment je veličina, která aproximuje odchylky rozdělení náboje v objemu jádra od kulové symetrie. Vzhledem k tomu, že elektrický dipólový moment libovolného jádra ve stacionárním stavu je (díky určitosti parity – viz např. [3]) nulový, je kvadrupólový moment prvním nenulovým členem v multipólovém rozvoji. Z klasické elektrodynamiky víme (viz např. [8]), že elektrický kvadrupólový moment je symetrický tenzor druhého řádu s nulovou stopou. Tato vlastnost je nezávislá na volbě souřadnic. V hlavní soustavě souřadnic, v níž jsou nediagonální složky nulové, proto pro jeho určení obecně stačí dvě nezávislé složky. V případě osově symetrického rozložení náboje, je-li osa symetrie totožná s osou z hlavní soustavy souřadné, dostaneme pro diagonální složky podmínku

$$Q_{xx} = Q_{yy} = -Q_{zz} . (19.7)$$

Experimenty i podrobný teoretický rozbor ukazují [2], že jádra ve stacionárním stavu, tj. s definovanou paritou a hodnotou momentu hybnosti, musí mít symetrické rozložení náboje, s osou symetrie totožnou se směrem kvantování jaderného spinu, přičemž jádra se spinem 0, 1/2 mají kvadrupólový moment nulový. Vezmemeli uvedenou osu symetrie za osu z pevné soustavy souřadné, můžeme podle (19.7)

kvadrupólový moment jádra charakterizovat jedinou diagonální složkou. V jaderné fyzice je zvykem vztahovat kvadrupólový moment k elementárnínu náboji, tj. vyjadřovat jej ve tvaru eQ. Sama veličina Q má pak rozměr plochy a obvykle se vyjadřuje v jednotkách barn  $[b] = 10^{-28} m^2$ .

V tabulce 19.1 jsou uvedeny parametry izotopů nejčastěji používaných ve fyzice nízkých teplot podle [3], přičemž vodítkem pro výběr uváděných experimenálně zjištěných hodnot elektromagnetických momentů, byla dosažená přesnost výsledku. Pro podrobnější poučení o této problematice odkazujeme na citovaný pramen.

## 19.1.2 Interakce izolovaného jádra s časově neproměnným magnetickým polem

Jelikož v klasické elektrodynamice je potenciální energie magnetického dipólu rovna záporně vzatému skalárnímu součinu dipólového momentu a magnetické indukce, je možné podle principu korespondence vyjádřit hamiltonián této interakce ve tvaru

$$\hat{\boldsymbol{H}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_I \cdot \boldsymbol{B}_0 \ . \tag{19.8}$$

Zvolíme-li soustavu souřadnic s osou z ve směru magnetického pole  $B_0$ , lze výraz (19.8) zjednodušit jen na z-ovou složku skalárního součinu

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{z} = -\hat{\mu}_{I,z}B_{0} = -\gamma_{\mathrm{N}}\hbar\hat{I}_{z}B_{0} \tag{19.9}$$

a vyjádřit hodnoty interakční energi<br/>e $E_m$  příslušné jednotlivým stacionárním stavům, s daným magnetickým kvantovým číslem, ve tvaru

$$E_m = -\gamma_N \hbar m B_0 . \qquad (19.10)$$

Tento soubor vlastních hodnot energie příslušný 2I + 1 vlastním hodnotám magnetického kvantového čísla m se nazývá Zeemanův multiplet. Jeho jednotlivé energetické hladiny  $E_m$  jsou ekvidistantní a vzdálenost sousedních hladin  $E_m$  činí

$$\Delta E_m = |\gamma_N| \hbar B_0 . \tag{19.11}$$

Kvantově mechanickou pohybovou rovnici operátoru jaderného spinu  $\hat{I}$ , vloženého do magnetického pole, lze jednoduše vyjádřit v Heisenbergově reprezentaci<sup>3</sup> Platí

$$-i\hbar \frac{d\boldsymbol{I}^*}{dt} = [\hat{\boldsymbol{H}}^*, \hat{\boldsymbol{I}}^*] , \qquad (19.12)$$

 $<sup>^{3}</sup>$ V častěji používané Schrödingerově reprezentaci se používá pevná (nepohyblivá) souřadná soustava v daném Hilbertově prostoru; operátor příslušející dané veličině je pak časově nezávislý, zatímco stavový vektor (vlnová funkce) popisující stav daného objektu je obecně časově závislý. Ekvivalentní Heisenbergově reprezentaci naopak odpovídá časově proměnná (rotující) soustava souřadná, takže operátor dané veličiny je obecně časově závislý a stavový vektor na čase nezávisí. Pro podrobnější informace o této problematice viz například [?]. Operátory vystupující v rovnicích (19.12) až (19.14) jsou vyjadřovány v Heisenbergově reprezentaci, což je vyznačeno hvězdičkou u znaku operátoru.

Tabuľka 19.1: V případě nestabilních izotopů je doba života reprezentována poločasem rozpadu. Uvedená znaménka magnetických a elektrických momentů byla zjištěna experimentálně; není-li znaménko uvedeno, nebylo experimentálně určeno.

Izotop	Přir. ob-	Doba	Spin,	Mag. moment	El. kvadr.
1	sah [%]	života	(parita)	$[\mu_{\rm N}]$	moment [b]
1 т т	00.005	· 1·1 /	1/0(+)		1
<sup>1</sup> H 211	99,985	stabilni	1/2,(+)	+2,79284734(3)	nula
<sup>4</sup> H 311	00,015	stabilni	1,(+)	+0,857438228(9)	+0,00286(2)
<sup>o</sup> He	00,013	stabilni	1/2,(+)	+2,1274972(3)	nula
<sup>0</sup> Li 71.	07,2	stabilni	1,(+)	+0,8220473(6)	+0,00274
'Li	92,7	stabilní	3/2,(-)	+3,2564625(4)	-0,0406
<sup>15</sup> C	1,108	stabilní	1/2,(-)	+0,7024118(14)	nula
<sup>17</sup> O	00,015	stabilní	5/2,(+)	-1,89379(9)	+0,2578
$^{19}F$	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	+2,628868(8)	nula
<sup>27</sup> Al	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	5/2,(+)	+3,6415069(7)	$+0,\!1402(10)$
$^{50}V$	00,250	$\operatorname{stabiln}$ í	6,(+)	+3,3456889(14)	+0.21(4)
$^{51}V$	99,75	$\operatorname{stabiln}$ í	7/2,(-)	+5,1487057(2)	+0,043(5)
$^{54}Mn$	-	$312  \mathrm{dni}$	3,(+)	+3,2819(13)	+0,33(3)
$^{55}Mn$	100	$\operatorname{stabiln}$ í	5/2,(-)	+3,46871790(9)	+0,33(1)
$^{57}$ Fe	$02,\!245$	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(-)	+0,0907638(1)	nula
$^{57}\mathrm{Co}$	—	$271 \ \mathrm{dn}$ í	7/2,(-)	+4,720(10)	+0.52(9)
$^{59}$ Co	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	7/2,(-)	+4,627(9)	+0,41(1)
$^{60}$ Co	_	$5,27   {\rm let}$	5,(+)	+3,799(8)	+0,44(5)
<sup>61</sup> Ni	1,13	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2,(-)	-0,75002(4)	+0,05(12)
$^{63}\mathrm{Cu}$	69,09	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2,(+)	+2,2273456(14)	-0,211(4)
$^{65}\mathrm{Cu}$	30,91	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2,(-)	+2,3817(3)	-0,195(4)
$^{69}$ Ga	60,0	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2,(-)	+2,01659(5)	+0,168(5)
$^{71}$ Ga	40,0	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2,(-)	+2,56227(2)	+0,106(3)
$^{103}$ Rh	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2(-)	-0,8840(2)	nula
$^{107}$ Ag	$51,\!83$	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2(-)	-0.11367965(15)	nula
$^{109}$ Ag	48,17	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2(-)	-0,1306906(2)	nula
$^{113}$ In	04,3	$\operatorname{stabiln}$ í	9/2,(+)	+5,5289(2)	+0,80(4)
$^{115}$ In	95,7	$4.10^{14}$ r.	9/2,(+)	+5,5408(2)	+0,81(5)
$^{115}$ Sn	00,4	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	-0,91883(7)	nula
$^{117}$ Sn	07,7	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	-1,00104(7)	nula
$^{119}$ Sn	08,6	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	-1,04728(7)	nula
$^{141}\mathrm{Pr}$	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	5/2,(+)	+4,2754(5)	-0,059(4)
$^{159}\mathrm{Tb}$	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2,(+)	+2.014(4)	+1.432(8)
$^{169}\mathrm{Tm}$	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	-0,2310(15)	nula
$^{195}$ Pt	35,3	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(-)	+0,60952(6)	nula
$^{197}\mathrm{Au}$	100,0	$\operatorname{stabiln}$ í	3/2(+)	+0,148158(8)	+0,547(16)
$^{203}$ Tl	29,5	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	+1,62225787(12)	nula
$^{205}$ Tl	70,5	$\operatorname{stabiln}$ í	1/2,(+)	+1,63821461(12)	nula

kde  $\hat{H}^*$  je hamiltonián typu (19.8) a pravá strana představuje komutátor uvedených operátorů. Po dosazení dostáváme pro z-ovou složku operátoru  $\hat{I}^*$  výraz

$$-i\frac{d\hat{I}_z^*}{dt} = \gamma_{\rm N}[\hat{\boldsymbol{H}}^*, \hat{\boldsymbol{I}}^*]_z = -\gamma_{\rm N}\hbar[(\hat{\boldsymbol{I}}^* \cdot \boldsymbol{B}_0), \hat{\boldsymbol{I}}^*]_z$$
(19.13)

a po vyčíslení komutátoru konečný výsledek

$$\frac{d\hat{I}_z^*}{dt} = \gamma_{\rm N}(\hat{I}_x^* B_{0,y} - \hat{I}_y^* B_{0,x}) = \gamma_{\rm N}(\hat{I}^* \times B_0)_z \ . \tag{19.14}$$

V případě magnetického pole orientovaného ve směru osy z je derivace na levé straně rovnice nulová a složka  $\hat{I}_z$  je tudíž konstantní; její velikost může být tedy měněna jen složkami pole kolmými k ose z. Dále je zřejmé, že analogická rovnice musí platit i pro střední hodnotu z-ové složky jaderného spinu a podle (19.4) také pro střední hodnotu příslušné složky jaderného magnetického momentu  $\langle \mu_{I,z} \rangle$ , tedy

$$\frac{d\langle \mu_z \rangle}{dt} = \gamma_{\rm N} (\langle \boldsymbol{\mu}_I \rangle \times \boldsymbol{B}_0)_z \ . \tag{19.15}$$

 ${\rm V}$ rámci klasické fyziky je alternativním popisem chování magnetického dipólu v magnetickém poli pohybová rovnice

$$\frac{d\boldsymbol{\mu}_I}{dt} = \gamma_{\rm N}(\boldsymbol{\mu}_I \times \boldsymbol{B}_0) , \qquad (19.16)$$

plynoucí z 2. impulsové věty (viz např. [8]). Pro případ časově neproměnného pole je ji možné jednoduše řešit transformací do rotující soustavy souřadné; řešením známá Larmorova precese magnetického momentu kolem směru pole  $B_0$  s frekvencí, pro níž platí

$$\omega_0 = |\gamma_{\rm N}| B_0 \tag{19.17}$$

#### a která se nazývá Larmorova frekvence.

Na tomto místě je třeba si všimnout pozoruhodného výsledku a to, že kvantově mechanická pohybová rovnice (19.15) a klasická rovnice (19.16) mají stejný tvar. Pro případ jádra se spinem 3/2 jsou oba přístupy demonstrovány na obr. 19.1. V části *a* znázorňuje obrázek Larmorovu precesi. Úhel precese  $\vartheta$ , na jehož hodnotě závisí interakční energie dipólu s magnetickým polem, může být libovolný a je určen počátečními pomínkami. Elementární kvantový popis, zobrazený v části *b* obrázku, připouští jen diskrétní energie odpovídající jednotlivým stacionárním hodnotám *z*-ové složky momentu hybnosti. Přechod mezi sousedními hladinami, odpovídající změně energie  $E_z$  podle (19.11), odpovídá absorpci či emisi kvanta elektromagnetického záření o Larmorově frekvenci  $\omega_0$ , neboť podle (19.17) platí

$$\Delta E_m = |\gamma_N| \hbar B_0 = \hbar \omega_0 . \qquad (19.18)$$

5	5	5
J	J	J



Obr. 19.1: (a) Larmorova precese, (b)-levá část: Zeemanův multiplet s nulovou kvadrupólovou interakcí, (b)-pravá část: Zeemanův multiplet se započtenou kvadrupólovou interakcí.

#### 19.1.3 Interakce jádra s časově neproměnným elektrickým polem

Pro jádra ve stacionárním stavu je rozložení náboje v jádře osově symetrické, s osou symetrie totožnou s kvantovací osou momentu hybnosti. Něktrá jádra však mají nenulový kvadrupólový moment. Z klasické elektrodynamiky víme, že interakční energii  $E_{\rm Q}$  objektu charakerizovaného daným kvadrupólovým momentem s daným elektrickým polem, lze v souřadné soustavě, jejíž osy jsou totožné s hlavními osami tenzoru gradientu tohoto pole, vyjádřit vztahem, v němž vystupují jen diagonální složky obou tenzorů

$$E_{\rm Q} = \frac{1}{2} (V_{xx}Q_{xx} + V_{yy}Q_{yy} + V_{zz}Q_{zz}) . \qquad (19.19)$$

Je zřejmé, že pro pole kubické symetrie, pro něž platí  $V_{xx} = V_{yy} = V_{zz}$ , je interakční energie nulová díky nulovosti stopy tenzoru kvadrupólového momentu.

Pro popis chování jádra s nenulovým kvadrupólovým momentem v poli nižší symetrie je však již nezbytné použít kvantovou mechaniku, což v prvním kroku znamaná nahradit výraz (19.19) pro inteakční energii jeho kvantovou analogií. Lze očekávat, že hledaný hamiltonián  $\hat{H}_{\rm Q}$  bude možné vyjádřit pomocí vlastního kvadrupólového momentu jádra a operátoru jaderného spinu, jehož velikost se pro daný stacionární stav jádra zachovává. Postup vedoucí ke konkrétnímu tvaru hamiltoniánu je složitější a přesahuje rámec tohoto textu. Odkazujeme proto na speciálnější literaturu – např. [2, 4] a uvedeme jen výsledek. Platí

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{Q}} = \frac{eQ}{4I(2I-1)\}V_{zz}\left[\left(3\hat{I}_{z}^{2} - |\hat{\boldsymbol{I}}|^{2}\right) + \eta(\hat{I}_{x}^{2} - \hat{I}_{y}^{2})\right],(19.20)}$$

kde  $\hat{I}_x$ ,  $\hat{I}_y$  a  $\hat{I}_z$  jsou složky operátoru jaderného spinu a veličina

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \ . \tag{19.21}$$

je tzv. parametr asymetrie gradientu elektrického pole. V případě osově symetrického gradientu pole $\eta=0.$ 

#### 19.1.4 Interakce jádra s magnetickým a elektrickým polem

Nechť na dané jádro působí současně homogenní magnetické pole  $B_0$  a elektrické pole. Pro zjednodušení budeme předpokládat, že elektrické pole je osově symetrické, přičemž osa jeho symetrie z' svírá s osou z, ležící ve směru magnetického pole  $B_0$ , úhel  $\vartheta$ . Výsledný hamiltonián má pak tvar

$$\hat{\boldsymbol{H}} = -\gamma_{\rm N} \hbar \hat{I}_{\rm z} B_{0,{\rm z}} m + \frac{eQ}{4I(2I-1)} V_{{\rm z}',{\rm z}'} \left[ 3\hat{I}_{z}^{2} - |\hat{\boldsymbol{I}}|^{2} \right] .$$
(19.22)

Nalezení příslušných vlastních hodnot energie je obecně značně komplikované, jelikož každý typ interakce může mít jinou osu kvantování. Problém se výrazně zjednoduší, vezmeme-li v úvahu častou situaci, kdy kvadrupólová interakce tvoří jen malou poruchu k magnetické Zeemanově interakci. Hamiltonián pak lze snadno transformovat do směru kvantování jaderného spinu a nalézt jeho vlastní hodnoty pomocí poruchového počtu. V přiblížení prvního řádu platí (viz například [2, 4])

$$E_m = -\gamma_N \hbar B_{0,z} m + \frac{eQ}{4I(2I-1)} V_{z',z'} \frac{3\cos^2 \vartheta - 1}{2} \left[ 3m^2 - I(I+1) \right] .$$
(19.23)

Mají-li obě interakce společnou osu kvantování (tj.  $\vartheta = 0$ ), platí tento výsledek pro libovolný poměr jejich vzájemné velikosti.

Obecně je z výsledku (19.23) vidět, že příspěvek kvadrupólové interakce závisí na čtverci magnetického kvantového čísla a porušuje ekvidistantnost Zeemanova multipletu. Uplatnění kvadrupólového příspěvku závisí na velikosti úhlu  $\vartheta$  a platí-li podmínka  $3\cos^2 \vartheta - 1 = 0$ , kvadrupólová interakce se neuplatní. Konkrétní situace pro případ I = 3/2 je zobrazena v pravé části obr. 19.1b (viz také čl. 19.3.3).

## 19.2 Jaderný paramagnetizmus

Budeme studovat chování soustavy  $N_0$  identických jader, vystavených působení časově neproměnných magnetických a elektrických polí popsaných veličinami  $B_0$ ,  $V_{zz}$ a  $\eta$ . Budeme předpokládat, že jádra jsou kvazivolná, tj. že jen velmi slabě interagují navzájem, nebo s dalšími objekty. Tyto předpoklady dobře odpovídají fyzikální situaci, kdy vyšetřujeme chování látky (obsahující prvek s danými jádry) v homogenním, stacionárním vnějším magnetickém poli  $B_e$ . Polarizací elektronových stavů se v látce v místě jader vytvoří lokální magnetické pole  $B_0$ , obecně různé od  $B_e$ , a rovněž lokální elektrické pole dané symetrie, popsané parametry Q,  $V_{zz}$ ,  $\eta \neq \vartheta^4$ .

 $<sup>^4</sup>$ Vzájemný vztah lokálního a externího pole v látkách představuje, obecně řečeno, značně složitý problém, který se obvykle řeší na na různých úrovních. Na atomové úrovni je řešen zavedením

Zatím se omezíme jen na přímou dipól-dipólovou interakcí mezi jadernými magnetickými momenty. Důležitým důsledkem její existence je, že v určitém přiblížení lze, v makroskopickém měřítku, danou soustavu atomových jader považovat za samostatnou termodynamickou soustavu, která může být ve stavu vnitřní rovnováhy charakterizována spinovou teplotou  $T_{\rm s}$ . Soustava stupňů volnosti elektronových stavů v uvažované látce<sup>5</sup> může být ovšem také považována za samostatnou termodynamickou soustavu, která je ve stavu termodynamické rovnováhy charakterizována "obyčejnou" teplotou T. Uvidíme, že za určitých podmínek se může spinová teplota od teploty mřížky výrazně lišit, avšak díky tzv. (jaderné) spin mřížkové interakci, o níž bude podroněji pojednáno v 19.7.1, může soustava jaderných spinů a mřížky dosáhnout stavu termynamické rovnováhy  $T_{\rm s} = T$ .

Budeme se zabývat paramagnetizmem soustavy jaderných spinů ve stavu termodynamické rovnováhy. Pro zjednodušení budeme předpokládat elektrickou kvadrupólovou interakci za mnohem slabší než magnetickou a omezíme se na osově symetrické pole, s osou symetrie ve směru pole  $B_0$ , orientovaného ve směru osy z. Hodnoty vlastní energie každého jádra budou pak dány hamiltoniánem (19.22) pro tento speciální případ. Za dané (spinové) teploty se každé jádro nachází v jednom ze stavů, jemuž přísluší určitá hodnota z-ové složky magnetického momentu  $\mu_{I,m} = \gamma_{\rm N}\hbar m$ ; střední hodnoty zbylých složek jsou nulové. Tento závěr vyplývá z komutačních relací operátoru momentu hybnosti a může být také demonstrován klasickou představou o Larmorově precesi. Pro soustavu vyšetřovaných jader můžeme zavést statickou jadernou magnetizaci  $M_0$  jako celkový magnetický moment jader, připadající na jednotku objemu. Její hodnota bude dána rovnovážnou populací jednotlivých hladin "kvazizeemanovského" multipletu (19.22). Střední hodnota vzálenosti jeho sousedních hladin může být charakterizována tzv. *interakční teplotou*  $T_{\rm int}$ , definovanou vztahem

$$\Delta E_z = |\gamma_{\rm N}| \hbar B_0 = k_{\rm B} T_{\rm int} , \qquad (19.24)$$

v němž  $k_{\rm B}$  značí Boltzmannovu konstantu. Jelikož jsou uvažovaná jádra kvazivolná, je možné pro výpočet magnetizace  $M_0$  použít Langevinovu-Brillouinovu teorii. Lze tedy psát vztah (viz např. [7])

$$M_0 = N_0 g_{\rm N} \mu_{\rm N} \sum_m m \rho_m \;, \tag{19.25}$$

v němž  $\rho_m$  značí pravděpodobnost obsazení dané hladiny multipletu a sumace probíhá přes všechny možné hodnoty m od -I do I. Ve stavu termodynamické rovnováhy je tato pravděpodobnost dána diagonálními členy statistického operátoru,

makroskopických polí v látkách, která reprezentují střední hodnoty mikroskopických polí působících na jednotlivé atomy a která vystupuji v materiálových vztazích klasické elektrodynamiky viz např. [8]. Pokud jde o lokální pole působící na atomová jádra v látce, je třeba uvažovat další příspěvky; především interakce s elektrony vlastního atomu a vzájemnou interakci mezi jádry – viz stať 19.3.

 $<sup>^5\</sup>mathrm{Bez}$ ohledu na mikroskopickou strukturu dané látky obvykle mluvíme o (krystalové) mřížce.

které mají tvar Gibbsova rozdělení. Tedy platí (viz např. [8])

$$\varrho_m = Z^{-1} \exp\{-E_m/k_{\rm B}T\} , \qquad (19.26)$$

kde ${\cal Z}$ je statistická suma soustavy

$$Z = \sum_{m} \exp\{-E_m/k_{\rm B}T\} .$$
 (19.27)

Statickou susceptibilit<br/>u $\chi_0$ lze pak podle (19.25) a (19.26) vyjádřit obvyklým vztahem

$$\chi_0 = \frac{\mu_0 M_0}{B_0} = \mu_0 N_0 \frac{g_{\rm N} \mu_{\rm N}}{B_0} \sum_m \frac{m}{Z} \exp\left\{\frac{-E_m}{k_{\rm B}T}\right\} = \mu_0 N_0 \frac{g_{\rm N} \mu_{\rm N}}{B_0} B_I\left(\frac{-E_m}{k_{\rm B}T}\right) ,$$
(19.28)

kde  $B_I(-E_m/k_{\rm B}T)$  je Brillouinova funkce (viz [7, 10]). Speciálně, jsou-li hodnoty  $E_m$  symetrické vůči |m|, je možné Brillouinovu funkci vyjádřit v kompaktním tvaru

$$B_I(y) = \frac{2I+1}{2I} \coth\left(\frac{2I+1}{2I}y\right) - \frac{1}{2I} \coth\left(\frac{y}{2I}\right) , \qquad (19.29)$$

v němž  $y = (Ig_{\rm N}\mu_{\rm N}B_0)/(k_{\rm B}T).$ 

Při dostatečně vysokých teplotách  $T \gg T_{int}$ , kdy se populace jednotlivých hladin Zeemanova multipletu málo liší a Brillouinovu funkci lze dobře aproximovat prvními dvěma členy jejího rozvoje v mocninnou řadu; pro susceptibilitu dostaneme

$$\chi_0 = \mu_0 N_0 \frac{g_N^2 \mu_N^2 I(I+1)}{k_B T} = \frac{C}{T} , \qquad (19.30)$$

což je známý *Curieův zákon*, v němž *C* značí *Curieovu konstantu*<sup>6</sup>. Pro získání konkrétní představy o teplotním oboru platnosti této "vysokoteplotní aproximace" uvádíme, že pro pole  $B_0$  řádu 1 T se interakční teplota pro jednotlivá jádra pohybuje v řádech (0, 1 - 10) mK.

Znalost statistické sumy pro danou soustavu (a tedy i pro námi vyšetřovanou soustavu  $N_0$  jaderných spinů) umožňuje určit všechny její termodynamické veličiny (viz např. [10]). Pro volnou energii F platí

$$F = -k_{\rm B}TN_0\ln Z \tag{19.31}$$

a s využitím statistické sumy podle (19.27) lze vyjádřit například entropi<br/>i $\tilde{S}$  soustavy. Dostaneme

$$\tilde{S} = -\frac{\partial F}{\partial T} = \frac{k_{\rm B} N_0}{Z} \sum_m \left[ \frac{E_m}{k_B T} + \ln Z \right] \exp\left\{ -\frac{E_m}{k_B T} \right\}.$$
(19.32)

 $<sup>^6\</sup>mathrm{Připomeňme,}$ že takto zavedená magnetická susceptibilita, stejně jako jiné podobné veličiny, nemá v soustavě SI fyzikální rozměr, neboť vyjadřuje vzájemnou úměrnost dvou veličin stejného rozměru.

Ve speciálním případě čistě magnetické interakce s ekvidistantními hladinami, lze aplikovat analogický postup jaký vedl ke vztahu (19.29) a vyjádřit entropii v konkrétnějším tvaru

$$\tilde{S} = k_{\rm B} N_0 \left[ \ln \sinh\left(\frac{2I+1}{2I}y\right) - \ln \sinh\left(\frac{y}{2I}\right) \right] + k_{\rm B} N_0 \frac{g_{\rm N} \mu_{\rm N} I B_0}{k_{\rm B} T} \left[\frac{2I+1}{2I} \coth\left(\frac{2I+1}{2I}y\right) - \frac{1}{2I} \coth\left(\frac{y}{2I}\right) \right] .$$
(19.33)

Podobně lze určit i příspěvek jaderných spinů k měrnému teplu při konstantním objemu  $C_{\rm V}$ , který je dán parciální derivací vnitřní (střední) energie U podle teploty. Pro vniřní energii platí analogicky k (19.25)

$$U = \sum_{m} \varrho_m = Z^{-1} \sum_{m} E_m \exp\left\{\frac{E_m}{k_{\rm B}T}\right\} , \qquad (19.34)$$

takže pro vyjádření měrného tepla dostaneme výchozí vzorec

$$C_{\rm V} = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_{\rm V} \,. \tag{19.35}$$

Z analýzy výsledku vyplývá, že měrné teplo  $C_{\rm V}$  je nemonotonní funkcí teploty s maximem při  $T = T_{\rm int}$ ; v této teplotní oblasti může jaderný příspěvek v celkovém měrném teple látky dominovat.

# 19.3 Hyperjemné interakce

V předchozím textu byly vysvětleny základní (statické) interakce, které mohou působit na jádra atomů. Pokud jsou atomy zabudovány v pevných látkách, působí na ně kromě "vnějších" elektrických a magnetických polí také pole vytvářená elektronovým obalem příslušného atomu a také okolních atomů a jader. Tato "vnitřní" neboli mikroskopická pole jsou v mnohých případech nezanedbatelná. Jádra tak představují malé "sondy" v pevných látkách a vypovídají o prostředí, v jakém jsou umístěny. Pro tato mikroskopická pole se používá název *hyperjemná pole* a interakce, které je způsobují, se nazývají *hyperjemné interakce*<sup>7</sup>.

Nejprve vysvětlíme, jaký je původ interakcí působících na jádra atomů v pevných látkách a popíšeme interakce mezi jádry obecně. Následně se zaměříme na popis interakcí a uspořádání ve vybraných látkách. Budeme používat některých pojmů z oblasti magnetizmu a odkazujeme proto čtenáře na učební texty [12, 13], kde je možné zjistit přesný význam použitých termínů a veličin.

 $<sup>^7 {\</sup>rm Tato}$ terminologie má původ ve spektroskopii atomů, kde hyperjemné interakce způsobují tzv. hyperjemné štěpení čar ve spektru.

#### 19.3.1 Magnetické interakce jádra s elektrony vlastního atomu

V principu existují tři typy takových interakcí. Hamiltoniány popisující takové interakce zde nebudeme podrobně odvozovat a pro detailní diskusi odkazujeme na učební text [14].

Jako první uvedeme interakci jaderného momentu se spinem elektronu, která je v souřadnicové reprezentaci elektronu popsána hamiltoniánem

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{d} = -\frac{\mu_{0}}{4\pi} g_{N} \mu_{N} g_{s} \mu_{B} \left[ (\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}) - 3(\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{n})(\hat{\boldsymbol{s}} \cdot \boldsymbol{n}) \right] \frac{1}{r^{3}} , \qquad (19.36)$$

kde předpokládáme, že jádro je v počátku soustavy souřadné, elektron v bodě  $\boldsymbol{r}$ a dále zavádíme jednotkový směrový vektor  $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$ . Veličina  $\hat{\boldsymbol{s}}$  je operátor elektronového spinu a  $g_{\rm s} \doteq 2$  je tzv. spinový g-faktor elektronu (magnetický moment elektronu spojený se spinem je  $-g_{\rm s}\mu_{\rm B}\hat{\boldsymbol{s}}/\hbar$ ). Vztah (19.36) představuje z klasického hlediska interakční energii dvou magnetických momentů, jejichž vzájemná poloha je popsána vektorem  $\boldsymbol{r}$ . Tento vztah lze také alternativně přepsat pomocí gyromagnetických poměrů jádra a elektronu do tvaru

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\rm d} = -\frac{\mu_0}{4\pi} \gamma_{\rm N} \gamma_{\rm s} \left[ (\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \hat{\boldsymbol{s}}) - 3(\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{n}) (\hat{\boldsymbol{s}} \cdot \boldsymbol{n}) \right] \frac{1}{r^3} , \qquad (19.37)$$

přičemž jsme zavedli spinový gyromagnetický poměr elektronu jako  $\gamma_{\rm s} = g_{\rm s} \mu_{\rm B} / \hbar$ .

Při interakci s atomovými vlnovými funkcemi bude hamiltonián nulový pro všechny funkce odpovídající s stavům elektronů. Navíc zaplněné slupky mají celkový spin nulový a jejich příspěvek k interakci bude také nulový. Obecně lze tedy hamiltonián (19.36) uvést do tvaru

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{d}}^{\prime} = \hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{\mathcal{A}}_{\mathrm{d}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} , \qquad (19.38)$$

přičemž čárka u symbolu  $\hat{H}_d$  označuje, že nyní je hamiltonián v reprezentaci momentu hybnosti částečně zaplněné p, d nebo f slupky s celkovým spinem  $\hat{S}$ , a veličina  $\mathcal{A}_d$  je symetrický tenzor druhého řádu s nulovou stopou, který je úměrný kvantově-mechanické střední hodnotě  $\langle r^{-3} \rangle$  pro danou slupku. Jelikož příspěvek p elektronů k magnetizmu atomů v pevných látkách je obvykle zanedbatelný, je možné se omezit pouze na slupky d a f.

Orbitální moment elektronu může rovněž interagovat s jaderným momentem a přispívat tak k hyperjemnému poli na jádře. Hamiltonián takové interakce můžeme zapsat následujícím způsobem:

$$\hat{H}_{l} = \frac{\mu_{0}}{2\pi} g_{\rm N} \mu_{\rm N} g_{l} \mu_{\rm B} \frac{\hat{I} \cdot \hat{l}}{r^{3}} , \qquad (19.39)$$

kde  $\hat{\boldsymbol{l}}$  je operátor orbitálního momentu hybnosti elektronu a  $g_{\rm l} = 1$  je orbitální g-faktor elektronu (magnetický moment elektronu spojený s orbitálním momentem hybnosti je  $-g_{\rm l}\mu_{\rm B}\hat{\boldsymbol{l}}/\hbar$ ). Z hlediska klasické teorie magnetizmu lze vztah (19.39)

pochopit tak, že elektron pohybující se kolem jádra vytváří proudovou smyčku, která generuje v místě jádra magnetické pole<sup>8</sup>. Hamiltonián (19.39) lze opět přepsat pro částečně zaplněnou slupku (p, d nebo f) v reprezentaci celkového orbitálního momentu hybnosti  $\hat{L}$  jako

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{1}^{\prime} = A_{1} \, \hat{\boldsymbol{I}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}} \, . \tag{19.40}$$

Skalární veličina  $A_1 (\propto \langle r^{-3} \rangle)$  nyní popisuje velikost interakce. V atomech tranzitivních d kovů orbitální moment "zamrzá" (viz článek 19.6.2) a platí tedy  $\langle \hat{L} \rangle \approx 0$ . Tento typ interakce je tedy obykle významný pouze pro atomy s nezaplněnými f slupkami.

Oba předchozí příspěvky k magnetické interakční energii jádra pocházejí od elektronů s orbitálním kvantovým číslem l > 0. Nyní si ukážeme, že elektrony ve stavu s (tj. l = 0), které mají sféricky symetrickou vlnovou funkci centrovanou v místě jádra, mohou být také původcem hyperjemného pole na jádře. V mnoha případech dokonce tento příspěvek dominuje nad příspěvky již diskutovanými. Příslušný hamiltonián lze v souřadnicové representaci vyjádřit ve tvaru

$$\hat{H}_{\rm F} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{8\pi}{3} g_{\rm N} \mu_{\rm N} g_{\rm s} \mu_{\rm B} (\hat{I} \cdot \hat{s}) \,\delta^3(\boldsymbol{r}) \,, \qquad (19.41)$$

kde  $\delta^3(\mathbf{r})$  je trojrozměrná Diracova  $\delta$ -funkce, přičemž předpokládáme, že jádro je v bodě  $\mathbf{r} = 0$ . Tato interakce se obvykle nazývá Fermiho kontaktní interakce. Vztah (19.41) nemá přímočaré fyzikální zdůvodnění a k jeho odvození je třeba využít kromě kvantové mechaniky i magnetostatiku. Tuto interakci lze díky přítomné  $\delta$ -funkci chápat tak, že elektron a jádro interagují (mají "kontakt") pouze v místě jádra ( $\mathbf{r} = 0$ ).

Pro zaplněnou slupku s by však byl celkový příspěvek nulový, což je zejména pro magnetické atomy v rozporu s pozorováním. Důvodem je polarizace vnitřních slupek výměnnou interakcí s magnetickými slupkami, takže se vlnové funkce s elektronů téže slupky pro různé orientace spinů liší. Potom je možné hamiltonián (19.41) vyjádřit ve tvaru

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\rm F}' = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{4\pi}{3} g_{\rm N} \mu_{\rm N} g_{\rm s} \mu_{\rm B} (\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{n}_{\rm s}) \left[ |\psi_{s\uparrow}(0)|^2 - |\psi_{s\downarrow}(0)|^2 \right] , \qquad (19.42)$$

v němž jsme označili  $\mathbf{n}_{s}$  směr osy kvantování spinu,  $\psi_{s\uparrow} a \psi_{s\downarrow}$  jsou vlnové funkce s elektronů se spinem  $\uparrow a \downarrow$ , přičemž jejich hodnoty bereme v místě jádra ( $\mathbf{r} = 0$ ). Operátor  $\mathbf{H}'_{\rm F}$  působí nyní pouze v prostoru 2I + 1 stavů jaderného spinu. Pokud je v atomu více s slupek, je třeba sečíst všechny jejich příspěvky (19.42). Navíc je vhodné si uvědomit, že rozdíl  $|\psi_{s\uparrow}(0)|^2 - |\psi_{s\downarrow}(0)|^2$  je úměrný velikosti magnetického momentu slupky (d nebo f), která vnitřní slupky s polarizuje.

Dosavadní úvahy se týkaly převážně izolovaných atomů. Pokud jsou atomy součástí pevné látky, situace se stává složitější, neboť v důsledku interakcí mezi elektrony vnějších elektronových slupek se mění vlnové funkce elektronů ve výše uvažovaných slupkách. Navíc je nutno často vzít v úvahu pásovou strukturu studované

 $<sup>^8 {\</sup>rm Podobným}$ způsobem můžeme dospět ke spin-orbitální interakci pro elektrony, která se uplatňuje v atomech.

látky, tj. delokalizovaný charakter některých elektronových stavů. I přesto je možné určit s relativně dobrou přesností parametry již zmíněných interakcí na základě znalosti elektronové struktury vypočtené z prvních principů. V takových případech mohou být vypočtené hyperjmené parametry konfrontovány s experimentem a je možné testovat adekvátnost použitých teoretických postupů a výpočetních metod. Z druhé strany je také možno využít vypočtené parametry k interpretaci experimentálních dat nebo k jejich predikci. Tato problematika však již vychází za rámec tohoto učebního textu. Rovněž zde nebudeme diskutovat relativistickou teorii interakcí, kterou je nutné aplikovat pro dosažení dobrého kvantitativního souhlasu vypočtených hyperjemných polí s experimentem.

V paramagnetických, i v magneticky uspořádaných látkách hraje podstatnou roli také dipól-dipólová interakce jádra s magnetickými momenty atomů v jeho okolí. Tuto interakci můžeme na základě analogie se vztahem (19.36) vyjádřit vztahem

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{da}^{\prime} = \frac{\mu_0}{4\pi} g_{\rm N} \mu_{\rm N} \sum_{i} \left[ (\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{\mu}_i) - 3(\hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{n}_i)(\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{n}_i) \right] \frac{1}{r_i^3} , \qquad (19.43)$$

v němž sčítáme přes všechny atomy s momenty  $\mu_i$  a s polohovými vektory  $r_i$  ( $n_i = r_i/r_i$ ) v okolí zvoleného jádra, o němž předpokládáme, že je umístěno v počátku souřadné soustavy.

Pro shrnutí výkladu o magnetických hyperjemných interakcích uvedeme, že z hlediska jádra se všechny předchozí magnetické interakce jeví jako interakce jaderného magnetického momentu s určitým efektivním magnetickým polem. To znamená, že výsledný hamiltonián můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\hat{H}_{\rm mag} = \hat{H}'_{\rm s} + \hat{H}'_{\rm l} + \hat{H}'_{\rm F} + \hat{H}'_{\rm da} = -\hat{\mu}_I \cdot \hat{B}_{\rm hf} , \qquad (19.44)$$

v němž  $\hat{B}_{\rm hf}$  je operátor tzv. hyperjemného pole, který závisí na "okolí" daného jádra. Odtud lze již také lépe pochopit v jakém smyslu jsou jádra "sondami" v pevných látkách a jak mohou reflektovat svoje okolí – jak jsme se o tom zmínili na počátku výkladu o hyperjemných interakcích.

#### 19.3.2 Elektrická kvadrupólová interakce jádra s jeho okolím

Další způsob, jak jádra interagují se svým okolím, je elektrická kvadrupólová interakce, která je obecně popsána hamiltoniánem (19.20). Budeme nyní diskutovat, jaký je možný původ gradientu elektrického pole na jádrech v pevných látkách.

Z hlediska vývoje této problematiky je nejprve vhodné uvést, že původní představa o vzniku elektrického pole na jádrech byla taková, že elektrická pole bodových nábojů iontů v okolí referenčního jádra deformují či polarizují v původně neporušené podobě sféricky symetrický elektronový obal referenčního iontu (atomu). To vyvolá významné zesílení gradientu elektrického pole v místě jádra oproti původnímu gradientu. Dále byl uvažován malý příspěvek od samotného referenčního iontu či jeho nejbližšího okolí, v důsledku možné asféricity lokálního nábojového rozložení. Formálně lze toto pojetí vyjádřit např. pro složku  $V_{zz}$  gradientu elektrického pole pomocí vztahu

$$V_{zz} = (1 - \gamma_{\infty})V_{zz}^{(m)} + (1 - R)V_{zz}^{(i)} , \qquad (19.45)$$

Б	c	9
Э	υ	э

kde  $V_{zz}^{(\mathrm{m})}$  a  $V_{zz}^{(\mathrm{i})}$  jsou příspěvky ke gradientu pocházející od mřížky bodových nábojů a od samotného iontu. Koeficienty  $\gamma_{\infty}$  a R popisují již zmíněnou polarizaci elektronového obalu referenčního iontu, přičemž na základě experimentu a modelových výpočtů pro různé krystalické látky se ukazovalo, že velikost koeficientu  $\gamma_{\infty}$  (tj.  $|\gamma_{\infty}|$ ) by měla být řádově  $10^1 - 10^2$ .

Další výzkumy v osmdesátých letech 20. století na základě výpočtů z prvních principů ovšem prokázaly, že příspěvek  $V_{zz}^{(i)}$  dominuje, přičemž je ho možné s vyhovující přesnosti určit z rozložení elektronové hustoty získané na základě výpočtu elektronové struktury dané látky. Příspěvek od mřížky potom představuje menší část výsledného gradientu. Navíc polarizaci elektronového obalu, která je popsána výše zavedenými parametry  $\gamma_{\infty}$  a R, není nutné uvažovat. Asféricita nábojového rozložení je způsobena přenosem náboje mezi atomy a chemickou vazbou v pevných látkách, což znamená, že ke gradientu elektrického pole na jádrech příspívají zejména elektrony vnějších atomových slupek, které se podílejí na vazbě. Elektrony vnitřních slupek jsou ovlivněny prostředím pevné látky jen málo a jejich příspěvek ke gradientu je zanedbatelný. Asféricita nábojového rozložení atomů pevných látek v okolí jader však není postačující ke vzniku nenulového gradientu, protože symetrie okolí jádra klade další podmínky na jednotlivé složky tenzoru gradientu elektrického pole. Jak jsme již zmínili v čl. 19.1.2, například pro kubickou symetrii okolí jádra jsou všechny složky tenzoru nulové. Obecně tedy můžeme řící, že gradient elektrického pole na jádrech reflektuje lokální symetrii a odráží nábojové rozložení elektronů podílejících se na vazbě. Podstatným aspektem je i to, že gradient elektrického pole je možné počítat s vyhovující přesností teoreticky z prvních principů, což usnadňuje pochopení experimentálních výsledků.

#### 19.3.3 Velikost hyperjemných interakcí

Z hlediska možnosti experimentálního pozorování projevů diskutovaných interakcí je důležité znát jejich velikost. Uvedeme zde proto několik příkladů jader, jejich parametrů a na ně působících hyperjemných interakcí a porovnáme je s velikostí dalších interakcí působících na atomové úrovni.

Jako první uvedeme stabilní jádro izotopu <sup>57</sup>Fe. Tento izotop je jediným ze stabilních izotopů železa, který má nenulový spin (I = 1/2 – viz tabulka 19.1), a je ho tedy možné použít ke studiu hyperjemných interakcí v látkách obsahujících železo, kterých v pozemském prostředí nalezneme nepřeberné množství, ať už jsou přirozeného či umělého původu. Přirozený výskyt <sup>57</sup>Fe mezi ostatními stabilními izotopy Fe je pouze 2,1 atomových %. Magnetický moment jádra je  $\mu_{I,I}$ (<sup>57</sup>Fe)  $\doteq$  +0,09  $\mu_N$ a tedy  $g_N$ (<sup>57</sup>Fe)  $\doteq$  +0,18 (podle vztahu (19.6)). Jaderný gyromagnetický poměr je potom  $\gamma_N$ (<sup>57</sup>Fe)  $\doteq$  8,69 × 10<sup>6</sup> rad s<sup>-1</sup> T<sup>-1</sup>. Kvadrupólový moment jádra Q(<sup>57</sup>Fe) = 0, neboť I = 1/2. Jako zajímavost uvedeme, že i přesto, že je kvadrupólový moment nulový, je možné studovat elektrické kvadrupólové interakce tohoto jádra pomocí Mössbauerovy spektroskopie, protože excitovaný stav jádra (14,4 keV) má spin 3/2 a tedy i nenulový kvadrupólový moment [14]. Energetická vzdálenost mezi dvěma hladinami m = -1/2 a m = +1/2 jaderného dubletu jádra <sup>57</sup>Fe v magnetickém poli např. 1 T je  $\Delta E \doteq 8,3 \times 10^{-29}$  J, což odpovídá 5,2 × 10<sup>-10</sup> eV a interakční teplotě 6,0  $\mu$ K (viz vztah (19.24)). Tomu dále podle vztahu (19.17) odpovídá Larmorova (rezonanční) frekvence  $\nu_0 = \omega_0/2\pi \doteq 1,4$  MHz. Ve feromagnetickém železe, které má kubickou prostorově centrovanou mřížku, je experimentálně zjištěná hodnota hyperjemného pole na jádře <sup>57</sup>Fe za pokojové teploty přibližně 33 T. Pro takovou hodnotu pole dostáváme nové hodnoty rozštěpení jaderného dubletu  $\Delta E \doteq 2,7 \times 10^{-27}$  J  $\doteq 1,7 \times 10^{-8}$  eV a  $T_{\rm int} \doteq 0,2$  mK, přičemž rezonanční frekvence vzroste na cca 45 MHz.

Získané hodnoty rozštěpení jaderného dubletu jsou zjevně o mnoho řádů menší ve srovnání s energiemi interakcí, které se uplatňují na atomové úrovni. Tak například ionizační energie jednoho 4s elektronu izolovaného neutrálního atomu Fe (tj. energie nutná k úplnému odloučení tohoto elektronu od atomu) je ~7.9 eV. Kohezní energie krystalu železa, která vypovídá o energii chemických vazeb v pevné fázi Fe, případající na jeden atom je potom ~4.3 eV. Magnetický moment připadající na jeden atom ve feromagnetickém krystalu železa je ~2,2  $\mu_{\rm B}$  a interakční energie takového momentu v poli 1 T je 2,0 × 10<sup>-23</sup> J, tj. 0,12 meV, což je stále o šest řádů více než pro jaderný moment, jak jsme uvedli výše. Z toho jasně vyplývá, že za běžných okolností nemohou hyperjemné interakce podstatně ovlivnit vlastnosti pevných látek.



Obr. 19.2: Hyperjemné hladiny jádra <br/>  $^{141}\mathrm{Pr}$ v poli 100 mT podél os<br/>yzv závislosti na gradientu elektrického pole <br/>s $\eta$  = 0,5.

Uvedené hodnoty interakčních teplot poskytují přibližnou informaci o tom, do jakých teplot potřebujeme ochladit jaderný subsystém, abychom mohli pozorovat odlišnou populaci různých jaderných hladin (v našem případě  $m = \pm 1/2$ ), neboli polarizaci jaderného subsystému. To je důležité pro některé experimentální metody metody jako např. jaderná orientace. Pokud bychom chtěli pozorovat polarizaci jader <sup>57</sup>Fe ve feromagnetickém Fe, museli bychom ho ochladit na teplotu  $\sim 1$  mK a nižší. Jak látky ochlazovat na takové teploty je předmětem kapitoly 2. těchto skript.

Jádrem <sup>141</sup>Pr (I = 5/2), jediným stabilním izotopem praseodymu, se budeme podrobněji zabývat v článku 19.6. Nyní uvedeme jeho jaderné para-

metry a prozkoumáme jeho energetické spektrum v případě, že na ně působí různé hyperjemné interakce. Jaderný magnetický moment je  $\mu_{I,I}(^{141}\text{Pr}) \doteq +4,28 \ \mu_{\text{N}}$  a  $g_{\text{N}}(^{141}\text{Pr}) \doteq +1,71$ . Kvadrupólový moment je sice nenulový, ale není velký;  $Q(^{141}\text{Pr}) \doteq -0,06$  b, což naznačuje nepříliš velký vliv elektrické kvadrupólové interakce pro toto jádro. Pro posouzení vlastností podstatných pro jadernou magnetickou rezonanci ještě uvedeme gyromagnetický poměr  $\gamma_{\text{N}}(^{141}\text{Pr}) \doteq 8,2 \times 10^7 \text{ rad s}^{-1} \text{T}^{-1}$ 

(rezonanční frekvence v poli 1 T by tedy byla  $\nu_0 \doteq 13$  MHz).

Pro ilustraci štěpení jaderných hladin jsou v obrázku 19.2 zobrazeny hyperjemné hladiny jádra <sup>141</sup>Pr v poli 100 mT v závislosti na velikosti gradientu elektrického pole, které má velký parametr asymetrie  $\eta = 0.5$ . Vidíme, že hyperjemné štěpení je celkově velice malé a nepřesahuje v teplotní škále 1 mK. To indikuje, že jádra <sup>141</sup>Pr je třeba chladit na teploty pod 1 mK, abychom mohli pozorovat rozdíl v populacích jednotlivých hladin a také případné jaderné uspořádání.

## 19.3.4 Interakce mezi jadernými momenty

Při popisu interakcí působících na jádra v pevných látkách jsme dosud záměrně vynechali interakce mezi samotnými jádry. Pro zkoumání možného uspořádání jaderných magnetických momentů je však důležité vědět, jaké jsou možné interakce mezi jadernými momenty a jaká je velikost takových interakcí. V následujícím se budeme zabývat podrobněji situací, kdy elektronový systém magnetizmus nevykazuje<sup>9</sup> a není jej proto třeba explicitně uvažovat. Navíc také nebudeme uvažovat jadernou kvadrupólovou interakci, neboť se nyní budeme převážně zabývat látkami s kubickým uspořádáním. Potom lze hamiltonián jaderného subsystému obecně zapsat ve tvaru

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{nuc}} = \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{dip}} + \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{RK}} + \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{pdip}} + \hat{\boldsymbol{H}}_{\text{Z}} , \qquad (19.46)$$

v němž jednotlivé členy na pravé straně postupně znamenají dipól-dipólovou interakci, izotropní výměnou (Rudermanovu–Kittelovu) interakci, tzv. pseudodipólovou interakci a interakci s vnějším magnetickým polem (tzv. Zeemanův člen), která je dána vztahem (19.8), vysčítaným přes všechna jádra v systému.

Dipól-dipólovou interakci můžeme popsat na základě analogie s interakcí magnetických momentů v klasické teorii magnetizmu pomocí vztahu (viz také (19.43))

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{dip} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}^3} \left[ (\hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,i} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,j}) - 3(\hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,i} \cdot \boldsymbol{r}_{ij})(\hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,j} \cdot \boldsymbol{r}_{ij})/r_{ij}^2 \right] , \qquad (19.47)$$

v němž  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$  a operátor jaderného magnetického momentu a spinu pro příslušné jádro jsou svázány vztahem  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_I = \gamma_{\rm N} \hbar \hat{\boldsymbol{I}} = g_{\rm N} \mu_{\rm N} \hat{\boldsymbol{I}}$  (viz (19.4)), přičemž součet probíhá přes všechny dvojice *i* a *j* jader v systému.

Rudermanovu–Kittelovu (RK) interakci lze zapsat ve tvaru, kterým se obvykle popisuje výměnná interakce mezi magnetickými ionty či atomy v pevných látkách (viz níže), kde však spiny elektronové nahradíme spiny jadernými a rovněž ještě sčítáme přes všechny dvojice jader, tj.

$$\hat{H}_{\rm RK} = -\sum_{i < j} J_{I,ij}(r_{ij}) \, \hat{I}_i \cdot \hat{I}_j \,, \qquad (19.48)$$

kde  $J_{I,ij}$  je výměnný integrál, který nyní popisuje "výměnnou" interakci mezi jadernými spiny. Tato interakce je v kovech zprostředkována vodivostními elektrony. Přesněji řečeno vodivostní elektrony (typu s) jsou polarizovány magnetickými jádry

 $<sup>^9\</sup>mathrm{Přesněji}$ řečeno, je diamagnetický.

$$J_I(r) \propto \frac{x \cos x - \sin x}{x^4} \quad \text{pro } x > 0, \qquad (19.49)$$

kde  $x = 2k_{\rm F}r$  a  $k_{\rm F}$  je velikost Fermiho vlnového vektoru  $(E_{\rm F} = \hbar^2 k_{\rm F}^2/2m_{\rm e})$ . Výměnný integrál je tedy oscilující a v absolutní hodnotě klesající funkcí vzdálenosti mezi jádry (atomy), takže podle vzdálenosti může být interakce mezi dvěma momenty feromagnetická nebo antiferomagnetická. Při zkoumání konkrétního materiálu je třeba závislost  $J_I(r)$  určit z prvních principů, tj. na základě vypočtené elektronové struktury. Podrobná diskuse této problematiky však vychází za rámec tohoto učebního textu a proto odkazujme zvídavé čtenáře na originální práci [15], nebo na monografii [12].

S interakcemi typu RK se lze setkat i v dalších oblastech magnetizmu pevných látek (často se také označuje jako Rudermanova-Kittelova-Kasuyova-Yosidova (RKKY) interakce). V případě lokalizovaných elektronů d a f atomových slupek lze odvodit analogicky tvar jejich vzájemné interakce na různých atomech, která je zprostředkována vodivostními elektrony. Tato interakce má tvar stejný jako je uvedeno ve vztahu (19.48), kde však místo operátorů jaderných spinů vystupují spiny (obecně momenty hybnosti) elektronové. Takové interakce budeme potřebovat zejména ve stati (19.6), kde vyložíme princip hyperjemně zesíleného jaderného magnetizmu. V následujícím textu budeme interakce typu RK, působící mezi jadernými spiny, označovat jako RK interakci a interakci mezi elektronovými spiny (či elektronovými momenty hybnosti) jako interakci RKKY.

Pseudodipólová interakce, jejíž původ je podobný jako interakce RK, tj. je zprostředkována vodivostními elektrony. V tomto případě však je (namísto Fermiho kontaktní interakce) interakce mezi jádrem a vodivostními elektrony popsána jako dipól-dipólová interakce jaderného a elektronového spinu podle vztahu (19.36). Výsledný tvar příslušného hamiltoniánu – který bychom dostali stejně jako v případě RK interakce – aplikací poruchového počtu druhého řádu, je velice podobný vztahu (19.47) a může být vyjádřen výrazem

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\text{pdip}} = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{i < j} B_I^{\text{pdip}}(r_{ij}) \left[ (\hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,i} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,j}) - 3(\hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,i} \cdot \boldsymbol{r}_{ij})(\hat{\boldsymbol{\mu}}_{I,j} \cdot \boldsymbol{r}_{ij})/r_{ij}^2 \right], \quad (19.50)$$

v němž faktor  $1/r^3$  je nahrazen komplikovanější funkcí  $B_I^{\text{pdip}}(r)$ . Její tvar zde nebudeme vypisovat, neboť i v případech jednoduché elektronové struktury je složitý. Poznamenejme však, že interakce rovněž osciluje a její velikost v kovech závisí na vzdálenosti; pro větší r jako  $1/r^3$  [16], obdobně jako výměnný integrál  $J_I(r)$  (viz (19.49)). Nyní již můžeme přejít k diskuzi uspořádání jaderných momentů ve vybraných látkách.

# 19.4 Uspořádání jaderných magnetických momentů v kovech

Obecně je problematika zkoumání uspořádání jaderných momentů velice živá, i když experimentálně náročná, a věnuje se jí pouze několik experimentálních pracovišť na světě. Tento zájem je dán tím, že kromě dosahování v běžném světě naprosto neobvyklých nízkých teplot (v oblasti nK a pK), které v daném časovém období vždy leží na hranici experimentálních a technických možností, je také možné studovat magnetická uspořádání lokalizovaných momentů, jejichž vzájemné interakce při velmi nízkých teplotách nejsou "narušovány" (nebo jen minimálně) dalšími interakcemi v systému, tj. krystalovou mříží a elektrony. Taková magnetická uspořádání slouží jako "prototypy", na kterých je možné detailně testovat teoretické postupy a předpovědi.

Nejprve zmíníme kategorií kovových materiálů se silnou výměnnou interakcí mezi jadernými momenty, tudíž i silnou interakcí mezi jádry a vodivostními elektrony. Takové systémy vykazují velmi krátkou spin-mřížkovou relaxační dobu  $T_1$  (viz článek 19.7.1) a není tedy možné ochlazovat pouze jaderný subsystém. Experimenty potom probíhají v oblastech  $\mu$ K teplot a vyšších a předpokládané teploty uspořádání rovněž leží v této teplotní oblasti. Zkoumány byly **skandium** (stabilní izotop <sup>45</sup>Sc, I = 7/2), **thallium** (stabilní izotopy <sup>203</sup>Tl a <sup>205</sup>Tl, pro oba I = 1/2) a **indium** ve sloučenině AuIn<sub>2</sub> s kubickou strukturou (izotop <sup>115</sup>In, I = 9/2, neboť <sup>197</sup>Au má výrazně menší moment než <sup>115</sup>In). Kromě AuIn<sub>2</sub>, které vykazuje feromagnetické uspořádání jaderných momentů s kritickou teplotou 35  $\mu$ K, se v dalších zmíněných materiálech zatím nepodařilo jaderné uspořádání uspokojivě prokázat [17]. Uvažuje se také o experimentálním studiu **platiny**.

Druhou kategorií kovových materiálů jsou ty, které mají slabou výměnnou interakci mezi jadernými momenty a lze tedy z důvodu dlouhé spin-mřížkové relaxační doby chladit jaderný subsystém, který je pak charakterizován spinovou teplotou  $T_s$ , přičemž mřížka se může nacházet na teplotě podstatně vyšší než ( $\mu$ K). Do doby dokončení tohoto textu byly zkoumány následující kovové materiály z této kategorie: měď, stříbro a rhodium, o kterých se zmíníme více v následujícím výkladu. V posledních letech se také objevily výzkumy jaderného uspořádání v lithiu, což z něj vzhledem k jeho supravodivosti při velmi nízkých teplotách činí velice zajímavý systém pro další studium [18]. Yttrium a zlato jsou dalšími perspektivními materiály pro studium jaderného uspořádání, kterým je také v poslední době věnována pozornost [17].

**V případě mědi**, která má dva stabilní izotopy <sup>63</sup>Cu a <sup>65</sup>Cu – oba se spinem I = 3/2 – se ukazuje, že jde o jaderné antiferomagnetikum s (Néelovou) teplotou uspořádání  $T_{\rm N} = 58$  nK. Pro ilustraci uvedeme velikost interakcí pro případ dvou nejbližších sousedů (označených např. jako 1 a 2) v kubické plošně centrované mřížce mědi s mřížkovým parametrem *a*. Pokud zapíšeme interakční hamiltonián ve tvaru  $\hat{I}_1 \cdot \mathcal{A}_{12}(r_{12}) \cdot \hat{I}_2$ , kde  $\mathcal{A}_{12}$  je interakční tenzor a polohový vektor  $r_{12} = r_2 - r_1 =$ 

(a/2, a/2, 0), lze psát

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{12}\hbar^2 &= \left(\mathcal{A}_{12}^{\text{ex}} + \mathcal{A}_{12}^{\text{dip}}\right)\hbar^2 \doteq \\ & \doteq \left(\begin{array}{ccc} -12, 6 & -2, 0 & 0\\ -2, 0 & -12, 6 & 0\\ 0 & 0 & -9, 4 \end{array}\right)k_{\text{B}} + \left(\begin{array}{ccc} 12, 7 & 38, 1 & 0\\ 38, 1 & 12, 7 & 0\\ 0 & 0 & -25, 4 \end{array}\right)k_{\text{B}} \approx \\ & \approx \left(\begin{array}{ccc} 0 & 36 & 0\\ 36 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -35 \end{array}\right)k_{\text{B}}, \end{aligned}$$
(19.51)

přičemž jsme rozepsali celkový tenzor interakce na dvě části mající původ jednak ve výměnné interakci ( $\mathcal{A}_{12}^{ex}$ ) a jednak v interakci dipól-dipólové ( $\mathcal{A}_{12}^{dip}$ ). Příspěvek  $\mathcal{A}_{12}^{ex}$ zahrnuje oba typy výměnné interakce; RK i pseudodipólovou. Numerické hodnoty v maticích ve vztahu (19.51) byly získány na základě výpočtů z prvních principů a jsou uvedeny v jednotkách nK. Připomínáme ještě, že tenzor isotropní interakce (např. typu RK) by měl pouze diagonální elementy, které by byly všechny stejné. Vidíme tedy, že ani příspěvek  $\mathcal{A}_{12}^{ex}$  není zcela isotropní, což je způsobeno pseudodipólovou interakcí, která není zcela zanedbatelná. Velice zajímavé je to, že dipóldipólová interakce ( $\mathcal{A}_{12}^{dip}$ ) spíše dominuje nad interakcí výměnnou. Výsledný tenzor interakce nemá diagonální elementy a interakce mezi jadernými momenty v mědi je tedy silně anizotropní s velkým příspěvkem dipól-dipólové interakce. To je vcelku překvapivý závěr, protože dipól-dipólové interakce je obvykle považována za menší příspěvek k celkovému interakčnímu hamiltoniánu.

V mědi byla dále studována magnetická uspořádání za různých podmínek (teplota, velikost a směr magnetického pole) pomocí měření magnetické susceptibility a zejména neutronového rozptylu. Například pro magnetické pole rovnoběžné s jednou z kubických os krystalu, existují celkem tři různá antiferomagnetická uspořádání v závislosti na velikosti pole, které však nesmí být větší než ~0.25 mT.

**Stříbro** má také dva stabilní izotopy <sup>107</sup>Ag a <sup>109</sup>Ag, přičemž oba mají spin I = 1/2 a téměř shodný magnetický moment. Pro stříbro je dominující interakcí mezi jádry izotropní výměna typu RK, následovaná dipól-dipólovou interací. Pseudodipólová interakce nebyla vypočtena, ale předpokládá se, že její vliv je menší než v mědi. Stříbro je také jaderné antiferomagnetikum, avšak s podstatně nižší Néelovou teplotou ( $T_{\rm N} = 560$  pK) než má měď; to je v současnosti nejnižší známá teplota uspořádání pro jaderný systém, i když byly dosaženy i nižší teploty, o čemž se zmíníme ještě při popisu experimentů pro rhodium.

Magnetický fázový diagram stříbra, který byl zkonstruován na základě výsledků experimentů jaderné magnetické rezonance  $(NMR)^{10}$ , je ukázán na obr. 19.3. Relativní entropií v tomto obrázku máme na mysli hodnotu molární entropie vztaženou k maximální molární entropii pro spinový systém s I = 1/2, která nabývá hodnoty  $\mathcal{R} \ln 2$  kde ( $\mathcal{R}$  je univerzální plynová konstanta). Na diagramu je zajímavé to, že jde

 $<sup>^{10}\</sup>mbox{Podrobnější výklad této metody se nachází ve stati 19.7.$ 

diagram magnetické pole versus entropie a nikoli teplota, jak je obvyklé. Důvodem je, že v nenulových polích v uspořádaném stavu je měření teploty velice obtížné. Nicméně je vždy možné určit entropii v případech, kdy systém přechází z paramagnetického do uspořádaného stavu (viz experimentální body v obrázku 19.3), na základě vztahu mezi entropií a polarizací jaderného subsystému, kterou je možné určit přímo z NMR měření komplexní susceptibility (viz např. [17] a vztahy (19.81) a (19.82)).

Polarizace p jaderného subsystému (s osou kvantování  $n_s$ ) je definována jako termodynamická střední hodnota  $\langle I \cdot n_s \rangle_T / I$ . Entropie potom souvisí s polarizací podle vztahu

$$\tilde{S}/\mathcal{R} = \ln 2 - \frac{1}{2} [(1+p)\ln(1+p) + (1-p)\ln(1-p)]$$
(19.52)

platného pro I = 1/2.



Obr. 19.3: Magnetický fázový diagram stříbra při nízkých teplotách pro kladné i záporné teploty. Zkratky AF, F a P označují po řadě antiferomagnetickou, feromagnetickou a paramagnetickou fázi.

Neobvyklý průběh rozhraní ('boule' i intervalu polí  $20-60 \ \mu T$ ) mezi paramagnetickou a antiferomagnetickou fází však zůstává záhadou. Antiferomagnetický charakter uspořádání byl určen na základě tvaru statické susceptibility odvozené rovněž z měření NMR. Neutronový rozptyl potom potvrdil tyto závěry a pomohl určit přesněji typ uspořádání. Obr. 19.3 také zahrnuje případ tzv. *záporných teplot*, které probírány v následující stati 19.5.

**Rhodium** (stabilní izotop <sup>103</sup>Rh, I = 1/2) bylo v nedávné době velice intenzivně studováno. Právě v kovovém rhodiu byla dosažena dosud nejnižší teplota pro jaderný subsystém, a to  $\approx 100$  pK. Na druhé straně se přes všechno úsilí nepodařilo spolehlivě prokázat existenci magnetického uspořádání; tento kov má rovněž jako

stříbro a měď tendenci k antiferomagnetickému uspořádání. Mezijaderné interakce jsou slabší než ve stříbře, ale dominuje rovněž RK interakce. V tomto případě však je interakce s prvními a druhými nejbližšími sousedy přibližně stejné velikosti, avšak opačného znaménka, což by mohlo vysvětlit velice nízkou teplotu uspořádání, která ještě nebyla dosažena. Rhodium je také supravodivé pod  $\approx 210~\mu{\rm K}$  (kritické pole je 3,4  $\mu{\rm T}$ ), což umožňuje studovat vliv supravodivého stavu na jaderné momenty a obráceně.

# 19.5 Záporné teploty

Velice zajímavou oblastí ve fyzice nízkých teplot je dosahování tzv. záporných teplot. Na první pohled vypadá pojem "záporná teplota" nesmyslně, neboť třetí termodynamická věta nám říká, že nulová teplota je nedosažitelná, natož abychom mohli dosáhnout teplot záporných. "Záporných teplot" lze však docílit v jaderném subsys-

tému polarizovaných jader ve smyslu změny populace jaderných hladin, která formálně záporným teplotám odpovídá. Princip si ukážeme na případu ekvidistantních jaderných hladin rozštěpených vnějším polem. Populace hladin  $\rho_m$ je dána Boltzmannovým rozdělením (19.26). Pokud nyní "rychle" obrátíme směr magnetického pole, bude nyní pro nové rozdělení, které označíme  $\varrho^*$ , platit  $\varrho_m^* = \varrho_{-m}$ . Na tuto situaci se formálně můžeme dívat i tak, že zaměníme T za -T,



Obr. 19.4: Demonstrace obsazení jaderných hladin pro kladné a záporné teploty pro spin I = 1/2.

neboli $\varrho_m^*(T)=\varrho_m(-T)$ . Nové rozdělení odpovídá rozdělení původnímu, ve kterém jsme provedli formální záměnu  $T\to -T$ , což vysvětluje proč se pro takové systémy vžil název záponá teplota.

Na obr. 19.4 jsou znázorněny různé stavy jaderného subsystému pro I = 1/2 v magnetickém poli při různých teplotách. Energie jaderné hladin jsou podle vztahu (19.10)  $-\gamma_N \hbar m B_0$ . Při vysokých teplotách ( $T = +\infty$ ) jsou obě hladiny obsazeny stejně. Při teplotách srovnatelných s interakční teplotou pro daný systém (v obrázku označených jako T > 0) má nižší hladina větší populaci než hladina vyšší. Pokud se blížíme k nulové teplotě (T = +0) je obsazena pouze spodní hladina. Po rychlém překlopení směru magnetického pole potom bude obsazena pouze vyšší hladina (T = -0). V experimentu potom samozřejmě nastávají situace, kdy je vyšší hladina obsazena více než nižší (T < 0). Konečně v případě vyrovnání populací hladin potom můžeme hovořit o teplotě  $T = -\infty$ .

V praxi lze takové dostatečně rychlé otočení směru magnetického pole realizovat v případech, kdy je možné směr magnetického pole obrátit za dobu kratší než je spin-spinová relaxační doba  $(T_2)$ . Ve stříbře a rhodiu je  $T_2 \approx 10$  ms a je možné v experimentu stavy se zápornou teplotou studovat. Na druhou stranu v mědi je  $T_2$  na úrovni 0.1 ms, takže stavy se zápornou teplotou se nepodařilo v experimentu uskutečnit.

Při záporných teplotách lze pozorovat zajímavé jevy. Například ve stříbře se jaderné uspořádaní stává feromagnetickým, zatímco při kladných teplotách je antiferomagnetické; viz obr. (19.3)). Na závěr bychom měli zmínit i teplotní rekord pro záporné teploty, který byl dosažen pro rhodium a činí -750 pK.

# 19.6 Jaderný magnetizmus lanthanoidů

Další kategorií látek, kde je možné pozorovat uspořádaní jaderných momentů jsou látky jevící tzv. hyperjemně zesílený jaderný magnetizmus. Nejznámějším představitelem je sloučenina  $PrNi_5$ , ve které je teplota přechodu do uspořádaného feromagnetického stavu 0,4 mK. To je teplota o několik řádů vyšší ve srovnání s teplotami uspořádání v mědi či stříbře, které jsme diskutovali ve stati 19.4. Fyzikální princip magnetického uspořádání je však v těchto dvou typech systémů odlišný. Abychom tomuto novému principu porozuměli, budeme se nejprve zabývat obecnými vlastnostmi iontů s nezaplněnými 4f slupkami, pro které byl tento typ jaderného magnetizmu pozorován, a také vysvětlením působení tzv. krystalového pole na takové ionty.

#### **19.6.1** Základní vlastnosti 4*f* iontů

Atomy, jež mají atomové číslo v rozsahu 57 až 71, se nazývají lanthanoidy (často také vzácné zeminy, pokud k nim přidáme ještě Sc a Y). Do skupiny lanthanoidů patří i praseodym, který je často studován v souvislosti s hyperjemně zesíleným jaderným magnetizmem. Lanthanoidy mají 4f elektrony a kromě La a Lu, které jsou na počátku a konci této skupimy atomů, mají tuto slupku neuzavřenou, a proto obecně vykazují magnetizmus, který se v určitých ohledech významně liší od magnetizmu 3d atomů. Atomy vzácných zemin existují v pevných látkách obvykle ve formě trojmocných iontů, např.  $Pr^{3+}$ .

Při vyšetřování elektronové struktury 4f slupky těchto trojmocných iontů je důležité připomenout Hundova pravidla, která určují, jak se tyto slupky zaplňují s ohledem na výsledný spinový (S) a orbitální moment hybnosti (L) celé slupky, které se vytvářejí ze spinových a orbitálních momentů jednotlivých elektronů podle zákonů o skládání momentů hybnosti. Stav iontu popsaný kvantovými čísly S a Lse nazývá *term*. Podle prvního pravidla se vzrůstajícím počtem elektronů obsažených ve slupce platí zásada maximálního výsledného spinu takové slupky. V rámci maximálního S se dále uplatňuje pravidlo maximálního výsledného orbitálního momentu. To znamená, že např. pro iont  $Pr^{3+}$ , který má celkem dva 4f elektrony, je maximální S = 1 a maximální L = 5. Pro iont  $Gd^{3+}$  (sedm 4f elektronů) bychom podle stejných pravidel obdrželi S = 7/2 a L = 0.

Pro lanthanoidy se uplatňuje tzv. LS-vazba, což znamená, že spinový (S) a orbitální (L) moment slupky se skládají díky spin-orbitální vazbě na celkový moment (J = L + S) celé slupky. Výsledný stav popsaný kvantovými čísly S, L a J se nazývá multiplet, přičemž odpovídající skupinu stavů označíme jako  $\{|LSJM_J\rangle\}$  s  $M_J$  jako magnetickým kvantovým číslem odpovídajícím momentu hybnosti J. Podle posledního Hundova pravidla platí, že J = |L - S| a J = L + S po řadě pro slupky zaplněné méně a více než z poloviny. Pro již zmíněné ionty  $Pr^{3+}$  a  $Gd^{3+}$  tedy obdržíme J = 4 a J = 7/2. Podle tzv. spektroskopické notace  $\binom{2S+1}{L_J}$  pak můžeme zapsat základní multiplety těchto iontů po řadě jako  ${}^{3}H_{4}$  a  ${}^{8}S_{7/2}$ .

Z celkového momentu hybnosti slupky je také možné odvodit její výsledný magnetický moment

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_J = -\mu_{\rm B} (g_{\rm l} \hat{\boldsymbol{L}} + g_{\rm s} \hat{\boldsymbol{S}}) / \hbar = -g_J \mu_{\rm B} \hat{\boldsymbol{J}} / \hbar , \qquad (19.53)$$

kde  $g_J$  je tzv. Landéův faktor. Znaménko '--' se v tomto vztahu objevuje díky zápornému náboji elektronu (tj. moment hybnosti a magnetický moment mají opačný směr). Vztah určující  $g_J$  lze odvodit pomocí Wignerova-Eckartova teorému (viz např. [5]); zde uvedeme pouze výsledek

$$g_J = \frac{3}{2} + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} .$$
(19.54)

Pro diskutované ionty  $Pr^{3+}$  a  $Gd^{3+}$  dostáváme  $g_J(Pr^{3+}) = 0.8$  a  $g_J(Gd^{3+}) = 2$ . V druhém případě je tedy magnetický moment iontu čistě spinového původu, neboť L = 0. Hamiltonián interakce 4f iontů s magnetickým polem  $B_0$  (orientovaným ve směru z) potom bude

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathbf{z},J} = g_J \hat{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{B}_0 , \qquad (19.55)$$

přičemž zde opět upozorňujeme na změnu znaménka, nyní ve srovnání se vztahem (19.8). V závěru tohoto článku ještě poznamenáme, že, pokud by na trojmocné ionty lanthanoidů působilo pouze magnetické pole, statická magnetická susceptibilita souboru iontů byla dána vztahy (19.28), (19.29) a (19.30), ve kterých bychom nahradili  $g_{\rm N} \rightarrow g_J, \mu_{\rm N} \rightarrow \mu_{\rm B}$  a  $I \rightarrow J$ .

#### 19.6.2 Krystalové pole a jeho singletní základní stav

Z hlediska atomů či iontů, které vytvářejí pevnou látku (krystal) a které si do určité míry zachovávají svoji identitu i uvnitř pevné látky, je možné se dívat na působení jejich okolí jako na působení jistého pole, které se nazývá krystalové pole. Toto pole zahrnuje převážně elektrostatické působení (valenčních či vodivostních) elektronů a okolních iontů a reflektuje lokální symetrii. Takovýto přístup je vhodné aplikovat na neuzavřené, tj. magnetické vnitřní slupky 4f (a případně 3d) elektronů v atomech. Působení krystalového pole na uzavřené slupky je obvykle malé.

Krystalové pole v okolí zvoleného referenčního iontu můžeme z hlediska klasické fyziky obecně rozvinout do řady sférických harmonik  $(Y_{kq})$  (viz např. [19])

$$V_{\rm KP}(\boldsymbol{r}) = \sum_{k,q} V_{kq}(r) Y_{kq}(\boldsymbol{n}) , \qquad (19.56)$$

kde předpokládáme, že iont je umístěn v počátku soustavy souřadné a n = r/r. Indexy  $k = 0, 1, 2, \ldots$  a  $q = -k, -k + 1, \ldots, k$ .  $V_{kq}(r)$  jsou radiální kq složky krystalového pole, které závisí pouze na vzdálenosti od jádra. Obecně rozvoj (19.56) představuje multipólovou interakci studované neuzavřené slupky iontu s polem v jeho okolí. Z hlediska kvantové mechaniky je možné na vztah (19.56) nahlížet jako na operátor krystalového pole vyjádřený v souřadnicové reprezentaci. V následujícím výkladu budeme potřebovat tento operátor v reprezentaci  $\{|LSJM_J\rangle\}$ multipletu pro zvolený 4f iont. Nebudeme zde sledovat celou proceduru odvození takového operátoru a poznamenáme pouze, že odvození je složitějsí variantou odvození operátoru interakce kvadrupólového momentu jádra s gradientem elektrického

pole (viz vztah (19.20)), neboť i zde se jedná o interakce kvadrupólů a momentů vyššího řádu. Výsledný hamiltonián krystalového pole působícího na 4fiont je tedy

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{KP}}(\hat{\boldsymbol{J}}) = \sum_{k,q} B_{kq} \, \hat{O}_{kq}(\hat{\boldsymbol{J}}) \ . \tag{19.57}$$

V tomto vztahu koeficienty  $B_{kq}$  představují tzv. parametry krystalového pole a  $\hat{O}_{kq}$  jsou tzv. Stevensovy ekvivalentní operátory, které jsou funkcí složek operátoru  $\hat{J}$ . Operátory  $\hat{O}_{kq}$  jsou tabulovány např. v práci [19].

Jako příklad uvedeme operátor krystalového pole4fiontu s hexagonálním okolím (např. $\rm Pr^{3+}$ v $\rm Pr$ nebo $\rm PrNi_5)$ 

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{KP}}^{(\mathrm{hex})} = B_{20}\hat{O}_{20} + B_{40}\hat{O}_{40} + B_{60}\hat{O}_{60} + B_{66}\hat{O}_{66} , \qquad (19.58)$$

který využijeme k několika vysvětlujícím poznámkám. Za prvé je třeba si uvědomit, že je zde součet omezen do členů šestého řádu, což je dáno tím, že nábojové rozložení f elektronů (tj. l = 3) nemůže mít multipólové momenty vyšší než šestého řádu (2l). Dále lze vidět, že vztah (19.58) obsahuje členy pouze pro sudá k – díky definované paritě vlnových funkcí 4f elektronů. Nakonec je třeba zdůraznit, že v rámci těchto podmínek určuje dále nenulové koeficienty  $B_{kq}$  v rozvoji (19.57) pouze symetrie; například v případě hexagonálním (s osou symetrie podél osy z) zůstávají pouze čtyři nenulové, jak je vidět ze vztahu (19.58). Pro ilustraci uvedeme ještě tvar ekvivalentního operátoru pro k = 2, q = 0. Platí

$$\hat{O}_{20} = \left[3\hat{J}_z^2 - |\hat{J}|^2\right]/\hbar^2 , \qquad (19.59)$$

což je analogické vztahu (19.20) pro kvadrupólovou interakci jádra s gradientem elektrického pole v případě  $\eta=0$ . To znamená, že první člen v hamiltoniánu (19.58) také odpovídá kvadrupólové interakci iontu s gradientem elektrického pole. Na rozdíl od jádra má však4fiont i multipóly vyšších řádů, které nejsou zanedbatelné.

Výše uvedené úvahy o působení krystalového pole na 4f ionty jsme činili za předpokladu tzv. slabého krystalového pole. To značí, že jeho velikost je podstatně menší než velikost spin-orbitální interakce, kterou jsme v předchozím článku diskutovali v souvislosti se vznikem multipletů u 4f iontů a také, že celkový moment hybnosti 4f slupky zůstává integrálem pohybu. V případě 3d atomů tranzitivních kovů je situace opačná a hovoříme o silném krystalovém poli. Multiplety tedy ne-existují a navíc se uplatňuje zamrzání orbitálního momentu, tj.  $\langle \hat{L} \rangle \approx 0$ , takže magnetizmus 3d iontů je převážně spinového původu. Spin-orbitální interakce pak způsobuje pouze slabou vazbu spinového momentu na mřížku, kdežto pro 4f ionty je tato vazba obvykle velice silná.

Na obr. 19.5 jsou znázorněny hladiny a odpovídající stavy iontu  $Pr^{3+}v$  krystalovém poli ve sloučenině  $PrNi_5$ . Okolí iontu  $Pr^{3+}$  má hexagonální symetrii a platí tedy pro něj hamiltonián (19.58). Koeficienty  $B_{20}$ ,  $B_{40}$ ,  $B_{60}$  a  $B_{66}$  lze v principu

odhadnout na základě výpočtů z prvních principů, nicméně hodnoty získané experimentálně<sup>11</sup> poskytují přesnější představu o krystalovém poli působícím na iont  $Pr^{3+}$  v  $PrNi_5$ . Z obrázku vidíme, že dvě nejnižší hladiny jsou nedegenerované (tj. singletní), další dvě hladiny jsou dvakrát degenerované (dublety) a pak následuje jeden singlet a jeden dublet. Máme tedy celkem devět stavů (2J + 1 = 9) a celkem šest hladin, z nichž některé jsou degenerované.

Obr. 19.5 ukazuje

dále na jeden zajímavý jev: základní stav iontu  $Pr^{3+} |\psi_0\rangle$  $= (|3\rangle - |-3\rangle)/\sqrt{2}$ je singletní. Zároveň si můžeme ověřit, že  $\langle \psi_0 | \hat{\boldsymbol{J}} | \psi_0 \rangle = 0.$  To je základní vlastnost singletních stavů. V nulovém vnějším magnetickém poli bude také magnetický moment iontu nulový. Ionty se singletním základním stavem se nazývají Van Vleckovské ionty a při nízkých teplotách vyka-



Obr. 19.5: Hladiny a stavy iontu  $Pr^{3+}$  v krystalovém poli v PrNi<sub>5</sub>. Singlety (dublety) představují vodorovné tenké (silné) čáry. Hladina s energií 0 odpovídá základnímu stavu.

zují teplotně nezávislou magnetickou susceptibilitu. Obecně mohou mít podle tzv. Kramersova teorému [19] singletní základní stav pouze 4f ionty se sudým počtem 4f elektronů, tj. kromě zmíněného  $Pr^{3+}$  to mohou být ionty  $Pm^{3+}$ ,  $Tb^{3+}$ ,  $Ho^{3+}$  a  $Tm^{3+}$ . Iont  $Eu^{3+}$  (šest 4f elektronů) jsme záměrně vynechali, neboť má J = 0 a promethium (Pm) nemá žádný stabilní izotop, takže jeho studium je problematické.

I když je základní stav Van Vleckovských iontů nemagnetický, může v systémech, které takové ionty obsahují, dojít ke spontánnímu uspořádání magnetických momentů iontů. Mezi ionty totiž existuje výměnná interakce RKKY typu – podobně jako interakce mezi jadernými momenty diskutovaná v článku 19.3.4 – zprostředkovaná vodivostními elektrony, což můžeme zapsat analogickým vztahem

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{RK}} = -\sum_{i < j} J_J(r_{ij}) \, \hat{\boldsymbol{J}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{J}}_j \,, \qquad (19.60)$$

Pokud je taková interakce dostatečně silná, což lze přibližně vyjádřit podmínkou -

$$J_{\rm ex}\Lambda_{\alpha} \ge 1 , \qquad (19.61)$$

<sup>&</sup>lt;sup>11</sup>Použijeme zde hodnoty získané pomocí nepružného neutronového rozptylu v článku A. Amato et al., *Solid State Communications* **82**, 767 (1992).

<sup>575</sup> 

pro  $\alpha = x, y$  a z – k magnetickému uspořádání dojde. V relaci (19.61) je

$$J_{\rm ex} = \sum_{i>0} J_J(r_{0i}) , \qquad (19.62)$$

což je sumární výměnný integrál pro výměnnou interakci působící na referenční i<br/>ont (označený '0'), tj. sčítá se přes všechny i<br/>onty interagující s referenčním i<br/>ontem. Veličiny  $\Lambda_{\alpha}$  jsou potom definovány jako

$$\Lambda_{\alpha} = 2 \sum_{i=1}^{2J} \frac{|\langle \psi_i | \hat{J}_{\alpha} | \psi_0 \rangle|^2}{E_i - E_0} , \qquad (19.63)$$

přičemž sčítáme přes všechny vlastní stavy  $|\psi_i\rangle$  (s energiemi  $E_i$ ) hamiltoniánu krystalového pole kromě základního stavu s energií  $E_0$ .

Jak uvidíme v následujícím článku, existuje možnost spontánního magnetického uspořádání i v systémech se singletním základním stavem a slabou výměnnou interakcí mezi ionty, kdy podmínka (19.61) není splněna.

#### 19.6.3 Hyperjemně zesílený jaderný magnetizmus

Uvažujme 4f iont se singletním základním stavem v krystalovém poli spolu s jeho jádrem, na které působí hyperjemné interakce a zároveň přepokládejme, že na celý systém působí magnetické pole ( $B_0$ ). Hamiltonián takového systému (iont + jádro) v magnetickém poli zapíšeme jako součet čtyř členů

$$\hat{\boldsymbol{H}}^{(i+j)} = \hat{\boldsymbol{H}}_{KP}(\hat{\boldsymbol{J}}) + g_J \mu_B \hat{\boldsymbol{J}} \cdot \boldsymbol{B}_0 + \hat{\boldsymbol{H}}_{hf}(\hat{\boldsymbol{I}}, \hat{\boldsymbol{J}}) - \mu_N g_N \, \hat{\boldsymbol{I}} \cdot \boldsymbol{B}_0 \,. \tag{19.64}$$

Člen  $\hat{H}_{\text{KP}}(\hat{J})$  je nám již dobře známý hamiltonián krystalového pole (viz vztah (19.57)) a interakci iontu a jádra s magnetickým polem jsme již diskutovali dříve (viz vztahy (19.8) a (19.55)). Hamiltonián  $\hat{H}_{\text{hf}}(\hat{I}, \hat{J})$ , popisuje hyperjemné interakce jádra, které závisí nejenom na jaderném spinu  $\hat{I}$ , ale i na momentu  $\hat{J}$  slupky 4f; to můžeme pro magnetickou interakci nahlédnout z hamiltoniánů (19.38), (19.40), (19.42) a související diskuze. Nyní však potřebujeme mít interakční hamiltonián vyjádřen v reprezentaci celkového momentu hybnosti slupky  $\hat{J}$ , přičemž v případě kontaktní interakce uvažujeme, že polarizace vnitřních slupek (a tedy i související hyperjemné pole) je úměrné  $\langle \hat{J} \rangle$ . Celkový hamiltonián hyperjemné interakce můžeme potom zapsat následujícím výrazem

$$\hat{H}_{\rm hf}(\hat{I}, \hat{J}) = A_{\rm 4f} \, \hat{J} \cdot \hat{I} + \hat{H}_{\rm Q}(\hat{I}, \hat{J}) , \qquad (19.65)$$

kde  $A_{4f}$  je konstanta pro daný iont a jádro. Pro účely následujícího výkladu se omezíme na případ izotropní hyperjemné magnetické interakce (srov. (19.38)), která obvykle popisuje uspokojivě realitu v kovových materiálech.

Ve vztahu (19.65) vystupuje jako druhý člen hamiltonián elektrické kvadrupólové interakce. Jak již bylo uvedeno v článku 19.3.2 o této interakci obecně, je
gradient elektrického pole na jádře převážně způsoben anizotropií nábojového rozložení vlastního atomu, s dalšími možnými příspěvky od mřížky. Pro lanthanoidy rozdělíme gradient elektrického pole na jádře na dva příspěvky, a to od 4f slupky vlastního atomu, která obecně vykazuje anizotropii nábojového rozložení, a od ostatních elektronů a iontů v dané látce. Hamiltonián prvního příspěvku má poměrně komplikovaný tvar [19], který zde nebudeme uvádět, závisí na operátorech  $\hat{I}$  a  $\hat{J}$ . Hamiltonián druhého příspěvku je potom dán vztahem (19.20). Pro kvadrupólovou interakci tedy můžeme psát

$$\hat{H}_{Q}(\hat{I},\hat{J}) = \hat{H}_{Q}^{(4f)}(\hat{I},\hat{J}) + \hat{H}_{Q}(\hat{I}), \qquad (19.66)$$

přičemž značení hamiltoniánů na pravé straně odpovídá po řadě dvěma příspěvkům uvedeným výše.

Posledním typem interakce, který potřebujeme zahrnout do našich úvah, je nepřímá výměnná interakce mezi ionty. Tuto interakci jsme uvedli v obecném vztahu (19.60). V aproximaci středního pole, kterou budeme dále používat, a za předpokladu feromagnetické interakce mezi ionty ( $J_{\rm ex} > 0$ ), můžeme příslušný interakční hamiltonián pro referenční iont zapsat jako

$$\hat{\boldsymbol{H}}_{\mathrm{RK}}^{(4f)} = -J_{\mathrm{ex}} \, \hat{\boldsymbol{J}} \cdot \langle \hat{\boldsymbol{J}} \rangle \,. \tag{19.67}$$

V principu bychom měli ještě uvážit také nepřímou výměnnou interakci mezi jádry samotnými (viz vztah (19.48)); ta se však ukazuje být zanedbatelnou ve srovnání s interakcí mezi ionty, která se efektivně uplatňuje i pro jádra – jak uvidíme níže. Celkový hamiltonián našeho systému (jádro + iont), který se nachází v magnetickém poli, s uvážením výměnné interakce mezi ionty, tedy bude  $\hat{H}^{(i+j)} + \hat{H}^{(4f)}_{RK}$ .

Obvyklý postup při teoretickém zkoumání hyperjemně zesíleného jaderného magnetizmu je považovat zeemanovké členy, hyperjemnou interakci a výměnnou interakci v celkovém hamitoniánu jako poruchu k hamiltoniánu krystalového pole. V druhém řádu poruchové teorie lze pak pro efektivní jaderný hamiltonián, v rámci teorie středního pole, za předpokladu axiální symetrie krystalového pole (ve směru osy z) a s uvážením nenulové teploty celého systému iontů a jader, odvodit tento vztah

$$\hat{H}_{\text{eff}}^{(j)} = \sum_{\alpha} \left[ -\frac{g_{\text{N}}\mu_{\text{N}}}{\hbar} (1+K_{\alpha})B_{\alpha}\hat{I}_{\alpha} - J_{\text{ex},\alpha}^{(j)}\hat{I}_{\alpha}\langle\hat{I}_{\alpha}\rangle_{T} - \frac{1}{2}\hat{I}_{\alpha}^{2}\frac{\Lambda_{\alpha}A_{4f}^{2}}{1-J_{\text{ex}}\Lambda_{\alpha}} + \frac{1}{2}J_{\text{ex},\alpha}^{(j)}\langle\hat{I}_{\alpha}\rangle_{T}^{2} - \frac{1}{2}\frac{\Lambda_{\alpha}(g_{J}\mu_{\text{B}}B_{\alpha})^{2}}{\hbar^{2}(1-J_{\text{ex}}\Lambda_{\alpha})} \right] + \hat{H}_{\text{Q}}(\hat{I}) + \hat{H}_{\text{Q}}^{\prime(4f)}(\hat{I}) , \quad (19.68)$$

v němž index  $\alpha$  běží přes všechny kartézské složky  $x,\,y$  a z.

Vysvětlíme nyní podrobněji význam jeho jednotlivých členů. První člen představuje interakci s vnějším magnetickým polem, přičemž bezrozměrná veličina (srov. (19.92))

$$K_{\alpha} = \frac{g_{J}\mu_{\rm B}}{g_{\rm N}\mu_{\rm N}} \frac{\Lambda_{\alpha}A_{4f}}{1 - J_{\rm ex}\Lambda_{\alpha}}$$
(19.69)

5	7	7
~	•	•

se nazývá Knightův posuv<sup>12</sup>. Pro Van Vleckovské ionty nabývá obvykle hodnoty  $10 \div 100$ , což znamená, že vnější magnetické pole je na jádře mnohonásobně zesíleno díky polarizaci nezaplněné 4f slupky (tj. k singletnímu základnímu stavu se přimíchávají excitované stavy). Z tohoto důvodu se tento typ jaderného magnetizmu nazývá hyperjemně zesíleným jaderným magnetizmem, neboť k zesílení dochází v důsledku hyperjemné interakce.

Druhý člen v hamiltoniánu (19.68) odpovídá efektivní výměnné interakci mezi jádry, která je zprostředkována vodivostními elektrony v důsledku hyperjemné interakce jader s 4f slupkou. Efektivní výměnný parametr  $J_{\text{ex},\alpha}^{(j)}$  popisující tuto interkaci v aproximaci středního pole je svázán s parametrem  $J_{\text{ex}}$  vztahem

$$J_{\text{ex},\alpha}^{(j)} = \left(\frac{g_{\text{N}}\mu_{\text{N}}}{g_{J}\mu_{\text{B}}}\right)^{2} K_{\alpha}^{2} J_{\text{ex}}(1 - J_{\text{ex}}\Lambda_{\alpha}) .$$
(19.70)

Parametr  $J_{\text{ex},\alpha}^{(j)}$  je obecně anizotropní (srov. (19.67)). Na základě znalosti řádových velikostí  $K_{\alpha}$  a poměru  $\mu_{\text{N}}/\mu_{\text{B}}$  (viz článek 19.1.1) vidíme, že  $J_{\text{ex},\alpha}^{(j)}/J_{\text{ex}} \ll 1$ .  $\langle \hat{I}_{\alpha} \rangle_T$  je termodynamická střední hodnota  $\langle \hat{I}_{\alpha} \rangle$  vypočtená na základě Boltzmannova rozdělení jaderných hladin (19.26).

Další člen v hamiltoniánu (19.68) je tzv. pseudokvadrupólová interakce, která vzniká v důsledku magnetické hyperjemné interakce. Podobnost s kvadrupólovou interakcí spočívá ve výskytu členů úměrných  $\hat{I}^2_{\alpha}$  (viz (19.20)). Do vztahu však nevstupuje kvadrupólový moment jádra a proto to není skutečná kvadrupólová interakce; její velikost však není zanedbatelná.

Čtvrtý a pátý člen v efektivním jaderném hamiltoniánu nejsou spinově závislé a hrají roli pouze při výpočtu dalších termodynamických veličin jako je měrné teplo a magnetická susceptibilita. Šestý a sedmý člen potom představují kvadrupólovou interakci, přičemž

$$\hat{H}_{Q}^{\prime(4f)}(\hat{I}) = \langle \psi_{0} | \hat{H}_{Q}^{(4f)}(\hat{I}, \hat{J}) | \psi_{0} \rangle .$$
(19.71)

Po teoretickém výkladu principů hyperjemně zesíleného jaderného magnetizmu přejdeme k magnetickému uspořádání ve Van Vleckovských systémech. Takové uspořádání bylo pozorováno v následujících látkách: Pr, PrNi<sub>5</sub>, PrCu<sub>6</sub>, PrPt<sub>3</sub> a PrTl<sub>3</sub>. Existují i další systémy, kde byly pozorovány indikace uspořádání, které však nebylo přesvědčivě prokázáno. V posledním článku této stati se budeme podrobněji zabývat chováním sloučeniny PrNi<sub>5</sub> při nízkých teplotách, která je nejznámějším a také nejvíce probádaným představitelem skupiny Van Vleckovských systémů.

#### 19.6.4 Magnetické uspořádání v PrNi<sub>5</sub>

PrNi<sub>5</sub> je sloučenina s hexagonální krystalovou strukturou, která je ukázána na obr. 19.6. Prostory mezi atomy Pr jsou vyplněny atomy Ni, což je patrné zejména při pohledu podél hexagonální osy. Zajímavé je, že ačkoliv nikl je v pevné fázi feromagnetický s magnetickým momentem ca 0,6  $\mu_{\rm B}$  na atom, PrNi<sub>5</sub> je bez vlivu vnějšího

 $<sup>^{12}\</sup>mathrm{Dále}$  budeme význam této veličiny diskutovat v článku 19.7.4.

magnetické pole nemagnetické. V poli potom při nízkých teplotách vykazuje paramagnetizmus Van Vleckova typu. Z tohoto důvodu se  $PrNi_5$  také často používá jako vhodná látka pro (jadernou) adiabatickou demagnetizaci (viz kapitola 2).

Pro numerické řešení hamiltoniánu iont  $Pr^{3+}$  + jádro <sup>141</sup>Pr potřebujeme hodnoty různých parametrů. Struktura hladin a stavů i<br/>ontu $\mathrm{Pr}^{3+}$ v krystalovém poli PrNi5 je spolu s parametry krystalového pole znázorněna na obr. 19.5. Parametry jádra <sup>141</sup>Pr jsme uvedli dříve v článku 19.3.3 a k tomu dodáme, že $A_{4f}\hbar^2 \doteq 4.5~\times$  $10^{-6}$  eV a v teplotní škále potom dostáváme  $A_{4f}\hbar^2/k_{\rm B} = 53$  mK. Velikost výměnné interakce mezi ionty  $Pr^{3+}$  je charakterizována konstantou  $J_{ex}$ , přičemž experimentálně bylo zjištěno, že  $J_{\rm ex}\hbar^2 \doteq 8.6 \times 10^{-5}$  eV, takže v teplotní škále dostáváme  $J_{\rm ex}\hbar^2/k_{\rm B} \doteq 1.0$ 



Obr. 19.6: Vyobrazení krystalové struktury sloučeniny PrNi<sub>5</sub>. Tmavší a větší (světlejší a menší) koule představují atomy Pr (Ni).

K. Kritérium (19.61) pro uspořádání magnetických momentů iontů  $Pr^{3+}$  splněno není, protože  $\Lambda_x k_B/\hbar^2 = \Lambda_y k_B/\hbar^2 \doteq 0,20 \text{ K}^{-1}$  a  $\Lambda_z k_B/\hbar^2 \doteq 0,12 \text{ K}^{-1}$ , jak je možné odvodit z parametrů krystalového pole. Knightův posuv je anizotropní a platí, že  $K_x = K_y \doteq 10,9$  a  $K_z \doteq 6,1$ , což znamená, že magnetické pole na jádře <sup>141</sup>Pr je zesíleno přibližně 6× až 11× v závislosti na jeho směru. Další parametry hamiltoniánu (19.68) můžeme odvodit s použitím vztahů v předchozím článku a dále lze podrobnější informace získat z literatury [20].

Numerické výpočty s uvážením hamiltoniánů  $\hat{H}^{(i+j)} + \hat{H}_{RK}^{(4f)}$  a  $\hat{H}_{eff}^{(j)}$  vedou v souhlasu s experimentem k feromagnetickému uspořádání při teplotě ~ 0,45 mK. To je dokumentováno na obr. 19.7, kde nalezneme vypočtené závislosti magnetického momentu systému iont + jádro (model 'i+j') ve směru os  $x (m_x)$  a  $z (m_z)$  v závislosti na teplotě. Pro porovnání jsou uvedeny i výsledky výpočtů provedených na základě efektivního jaderného hamiltoniánu (model 'j').

Pro nulové vnější pole leží magnetické momenty v bazální rovině hexagonální mřížky (obr. 19.7a). Při nízkých teplotách pod teplotou uspořádání je velikost magnetického momentu systému iont + jádro 0,027  $\mu_{\rm B}$ . Je však dobré si uvědomit, že elektronový (iontový) příspěvek k magnetickému momentu dominuje, neboť platí

$$\frac{g_J \mu_{\rm B} \langle J_\alpha \rangle_T}{g_{\rm N} \mu_{\rm N} \langle \hat{I}_\alpha \rangle_T} \approx K_\alpha .$$
(19.72)

V tom spočívá rozdíl mezi systémy se zesíleným jaderným magnetizmem a systémy diskutovanými v předchozím článku (Cu, Ag, Rh), kdy jsou zdrojem výsledného magnetického momentu pouze magnetické momenty jáder.

Pokud je magnetické pole orientováno ve směru os<br/>yz (obr. 19.7b), existuje i složka <br/>  $m_z$ v tomto směru, která se zvětšuje s rostoucí velikostí pole, je však několik<br/>rát



Obr. 19.7: Závislost magnetického momentu ve směru os x a z v závislosti na teplotě pro různé velikosti magnetického pole orientovaného podél os (a) x a (b) z krystalu PrNi<sub>5</sub>. Plné (čárkované) křivky představují výsledky pro 'i+j' ('j') model.

menší než  $m_x$ . Přechod do uspořádaného magnetického stavu se projevuje malým maximem na křivkách  $m_z(T)$ . Z obrázku také můžeme vyvodit závěr, že výpočty založené na přibližném hamiltoniánu  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(j)}$  jsou méně přesné, neboť pro orientaci pole ve směru osy z se zjevně odlišují od hodnot získaných pomocí hamiltoniánu  $\hat{H}_{\text{eff}}^{(i+j)} + \hat{H}_{\text{RK}}^{(4f)}$ .

Obr. 19.8 pro srovnání ukazuje měřené závislosti magnetizace vzorku PrNi<sub>5</sub> při magnetizaci podél dvou již diskutovaných směrů magnetického pole [20]. Kvalitativně závislosti souhlasí dobře s odpovídajícími závislostmi uvedenými v obr. 19.7, což potvrzuje adekvátnost použitých modelových výpočtů. Měření byla prováděna na orientovaných monokrystalech PrNi<sub>5</sub> při teplotách  $\geq 0,3$  mK ve dvoustupňovém demagnetizačním kryostatu na bázi PrNi<sub>5</sub>. Magnetizace byla měřena skvidovým magnetometrem (viz kapitola 16), a proto je v obr. 19.8 udávána v násobcích (500) kvanta  $\Phi_0$  magnetického toku, neboť zařízení nebylo možno přesně zkalibrovat.

Z obrázků také můžeme dedukovat výraznou anizotropii magnetických vlastností PrNi<sub>5</sub> při nízkých teplotách. Zatím jsme se nezmínili o vlivu kvadrupólové interakce, která nebyla pro získání výsledků v obr. 19.7 uvažována. Ukazuje se ale, že tato interakce hraje v některých případech významnou roli. Je to například velikost anizotropního pole ( $B_A$ ), tj. kdy se momenty z bazální roviny plně obrátí do směru osy z při magnetizaci podél této osy. V případě bez kvadrupólové interakce je totiž  $B_A \doteq 96$  mT, kdežto pokud je tato interakce zahrnuta výpočet dává  $B_A \doteq 49$  mT, což je výrazně menší hodnota. Anizotropní pole je i při takto nízkých teplotách měřitelná veličina a její určení by po srovnání s modelovými výpočty přispělo k přesnějšímu odhadu velikosti této interakce a obecně ke zpřesnění modelu jaderného magnetizmu v PrNi<sub>5</sub>. Další zajímavou otázkou je role možných magnetických momentů atomů niklu. Obecně je akceptováno, že tato role je zanedbatelná, i když



Obr. 19.8: Měřená závislost magnetizace ve směru os x a z v závislosti na teplotě pro různé velikosti pole v PrNi<sub>5</sub>.

vždy našlo vysvětlení takových dat bez uvážení magnetizmu Ni atomů.

Další směr ve výzkumu jaderného magnetizmu pro látky příbuzné PrNi<sub>5</sub> představuje "magneticky zředěný" systém  $Pr_{1-x}Y_xNi_5$ , kde jsou ionty  $Pr^{3+}$  substituovány nemagnetickými ionty yttria (Y<sup>3+</sup>). Studium takového systému poskytuje informaci o závislosti výměnné interakce na střední vzdálenosti mezi ionty  $Pr^{3+}$ . Pro x = 0,2 byl skutečně pozorován pokles teploty uspořádání na cca 0,1 mK. Ukazuje se také, že pro větší koncentrace yttria by mohlo docházet k uspořádání typu spinového skla místo feromagnetického.

## 19.7 Základní vlastnosti NMR v pevných látkách

Jaderná magnetická rezonance  $(NMR)^{13}$  je mocnou spektroskopickou metodou, používanou (kromě základního fyzikálního výzkumu) v materiálovém výzkumu, chemii, biologii a v poslední době zejména v medicíně. Zde se budeme zabývat pouze těmi aspekty, které mají přímý vztah k nízkoteplotní fyzice pevných látek a kapalin; pro obecnější poučení odkazujeme na citovanou literaturu [2, 4, 7].

### 19.7.1 Relaxace jaderné magnetizace

V úvodu kapitoly jsme se zabývali chováním soustavy jaderných spinů v časově neproměnných polích. Předpokládali jsme, že vyšetřovaná soustava jaderných spinů je sama ve stavu termodynamické rovnováhy a také, že tato soustava je ve stavu termodynamické rovnováhy s látkou (tj. s "mřížkou", reprezentovanou především všemi stupni volnosti elektronových stavů látky), v níž jsou uvažovaná jádra přítomna. Stav takové soustavy v termodynamické rovnováze byl popsán v 19.2; statická jaderná susceptibilita byla dána vztahy (19.28) a (19.30), přičemž vektor jaderné

<sup>&</sup>lt;sup>13</sup>Standardně používaná zkratka NMR pochází z anglického názvu Nuclear Magnetic Resonance. Vedle tradičního českého názvu jaderná magnetická rezonance (JMR) se často používá i název nukleární magnetická rezonance.



magnetizace  $M_0$  měl nenulovou jen z-ovou složku, obvykle nazývanou podélnou složkou jaderné magnetizace).

Nyní přejdeme k fenomenologickému popisu procesů ustavování termodynamické rovnováhy, nastávajících při časových změnách vnějších podmínek, především při časových změnách působících elektomagnetických polí. Budeme uvažovat speciální uspořádání, charakteristické pro standardní NMR experiment, kdy je soustava jaderných spinů v daném makroskopickém množství látky vložena do vnějšího magnetického pole  $B_0$ , které je orientováno v kladném směru osy z pravoúhlé souřadné soustavy. Změní-li se náhle například velikost vnějšího pole, původní magnetizace se stane nerovnovážnou a soustava jaderných spinů bude přecházet do nového rovnovážného stavu s obecně jinou hodnotou podélné složky magnetizace. Tento proces se nazývá *podélnou relaxací* a vzhledem k tomu, že je spojen se změnou interakční energie jaderných spinů s vnějším polem, která se obvykle realizuje díky změnám energie elektronových stavů atomů v krystalové mřížce, mluvíme také o relaxaci *spin-mřížkové*<sup>14</sup>.

V nerovnovážném stavu může mít soustava jaderných spinů i za výše uvedených podmínek nenulové příčné složky magnetizace (tj. složku *x*-ovou a *y*-ovou). Tyto složky relaxují k nule - a jak uvidíme dále - tento proces, tzv. *příčná relaxace*, nemusí být doprovázen výměnou energie s krystalovou mřížkou.

Podélná (spin-mřížková) relaxace. Elementární popis spočívá ve využití standardní relaxační rovnice, podle níž je časová změna okamžité hodnoty podélné složky jaderné magnetizace  $M_z(t)$  úměrná rozdílu mezi touto hodnotou a její rovnovážnou hodnotou  $M_0$ . Je zvykem vyjadřovat uvedenou podmínku ve tvaru

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = -\frac{M_z(t) - M_0}{T_1} , \qquad (19.73)$$

kde veličina  $T_1$ , která má rozměr času, se nazývá *podélná relaxační doba*, nebo také spin-mřížková relaxační doba. Tato rovnice je snadno integrovatelná a jejím řešením je možné vyjádřit konkrétní časový průběh jaderné magnetizace za předpokladu znalosti počátečních podmínek  $M_z(0)$ . Platí

$$M_z(t) = M_0 - [M_0 - M_z(0)] \exp\left\{-\frac{t}{T_1}\right\} .$$
(19.74)

**Příčná relaxace.** Protože příčné složky v daném uspořádání relaxují k nule, relaxační rovnice typu (19.73) budou mít tvar

$$\frac{dM_x(t)}{dt} = -\frac{M_x(t)}{T_2} , \quad \frac{dM_y(t)}{dt} = -\frac{M_y(t)}{T_2} .$$
 (19.75)

Podobně jako v případě podélné relaxace, z relaxačních rovnic (19.75) plyne exponenciální časová závislost okamžitých hodnot jaderné magnetizace. Parametr  $T_2$  se nazývá příčná nebo spin-spinová relaxační doba.

 $<sup>^{14}\</sup>mathrm{Je}$ zvykem tento termín užívat i tehdy, jde-li o látky nekrystalické či kapalné.

Relaxační jevy jaderné magnetizace jsou výrazem konkrétní vnitřní struktury daného systému a studium těchto jevů je tudíž významným nástrojem studia struktury látek. Patrně nejužívanější metodou studia jaderných relaxací je jaderná magnetická rezonance<sup>15</sup>. Některé konkrétní výsledky významné pro fyziku nízkých teplot budou probrány ve stati 19.7.5; na tomto místě se omezíme jen na několik poznámek týkajících se obecných vlastností relaxačních dob  $T_1$  a  $T_2$ .

Experimentální výsledky jednoznačně prokázaly, že relaxační rovnici (19.73) lze spolehlivě použít na podélnou relaxaci jaderné magnetizace v látkách jen ve vysokoteplotním přiblížení daném podmínkou  $T \gg T_{\rm int}$  (viz čl. 19.2). Podélná složka jaderné magnetizace pak relaxuje v souladu se vztahem (19.74), přičemž relaxační doba je teplotně závislá. Při nižších teplotách, zejména v pevných látkách, relaxaci podélné složky jaderné magnetizace popsat jedinou exponenciálou s jednou relaxační zpravidla nelze.

Dále je třeba si uvědomit, že k relaxaci příčných složek magnetizace může přispívat jednak spin-mřížková interakce a jednak spin-spinová interakce uvnitř jaderného spinového systému. Spin-mřížková interakce přispívá tím, že v nerovnovážném stavu převažují přechody jaderných spinů mezi jednotlivými hladinami Zeemanova multipletu v jednom směru. Tyto přechody pak vedou nejen ke změnám podélné složky magnetizace, ale ovliňují také stupeň nerovnováhy uvnitř spinového systému a tím i příčné složky magnetizace. Spin-spinová interakce přispívá tím, že vytváří fluktující lokální pole v místě jednotlivých jader a tím vytváří lokální změny příčných složek magnetizace, přičemž tyto změny zachovávají celkovou energii spinového systému a tedy i podélnou složku magnetizace.

Díky uvedeným procesům je zřejmé, že relaxace příčných složek nemůže být pomalejší než relaxace složky podélné; musí tedy vždy platit  $T_2 \leq T_1$ . V pevných látkách – zejména při nízkých a velmi nízkých teplotách – obvykle platí $T_2 \ll T_1$ , přičemž rozdíl může být i několik řádů. Znamená to tedy, že může nastat rovnovážný stav uvniř soustavy jaderných spinů, zatímco rovnováha mezi ním a mřížkou ještě zdaleka není ustavena. Má tedy reálný smysl zavádět pojem spinové teploty, rozdílné od teploty mřížky.

#### 19.7.2 Fenomenologický popis NMR

Již v článku 19.1.2 bylo poukázáno na možnost přechodu jaderných spinů mezi jednotlivými hladinami Zeemanova multipletu indukovaného časově proměnným elektromagnetickým polem o Larmorově frekvenci  $\omega_0$  – viz (19.17). Tento jev, skýtající značné možnosti pro přesné měření gyromagnetických poměrů jader, byl nazván jadernou magnetickou rezonancí.

Historicky první experiment tohoto typu, realizovaný na svazku atomů stříbra, je známý *Raabiho experiment*, (viz např. [9]). Výsledky prvních experimentů NMR jader vodíku v kondezovaných látkách byly publikovány v roce 1946 dvěma na sobě nezávislýmí pracovními skupinami vedenými E. M. Purcellem a F. Blochem; pro podrobnější popis těchto experimentů odkazujeme na literaturu [1, 2]. Dále se

 $<sup>^{15}</sup>$ Existují ovšem i přímé (nerezonanční) metody; například metody využívající staticky orientovaná jádra v milikelvinových replotách [1].

budeme zabývat formulací základních (klasických i kvantových) rovnic, popisujících jev jaderné magnetické rezonance (NMR), především v kondenzovaných soustavách.

**Fenomenologický popis** je reprezentován *Blochovými rovnicemi*, které popisují chování vektoru jaderné magnetizace M (srovn. čl. 19.2) látky, obsahující vyšetřovaná atomová jádra, na něž působí *mikroskopické* magnetické pole  $B^{-16}$ . Blochovy rovnice, které respektují jednak gyromagnetické chování jader v magnetickém poli, charakterizované pohybovou rovnicí typu (19.16), jednak jaderné relaxační jevy v látkách, charakterizované relaxačními rovnicemi (19.73) a (19.75), mají za uvedených předpokladů zřejmý tvar

$$\frac{dM_{x,(y)}(t)}{dt} = \gamma_{\rm N}(\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{B})_{x,(y)} - \frac{M_{x,(y)}(t)}{T_2} , \qquad (19.76)$$

$$\frac{dM_z(t)}{dt} = \gamma_{\rm N} (\boldsymbol{M} \times \boldsymbol{B})_z - \frac{M_z(t)}{T_1} . \qquad (19.77)$$

Blochovy rovnice představují ovšem jen určitou aproximaci pro chování reálných soustav; limitu jejich platnosti určuje jednak aproximativní charakter relaxačních členů (který byl diskutován v předchozím článku) a jednak skutečnost, že obsahují fenomenologicky zavedené parametry  $T_1$ ,  $T_2$  a mikroskopické pole  $\boldsymbol{B}$ , jejichž fyzikální interpretaci nemohou poskytnout. Z praktického hlediska je však jejich význam nezastupitelný, především pro jednoduchý a názorný popis experimentálních technik NMR.

#### 19.7.3 Experimentání technika NMR

Popíšeme některé základní postupy, kterými je možné snímat spektra NMR a které mohou být značně rozmanité, přímé či nepřímé. Omezíme se na přímé metody, kdy je na jádra vedle statického magnetického pole aplikováno také pole radiofrekvenční o frekvencích blízkých Larmorově frekvenci. Podle způsobu jeho aplikace rozdělujeme tyto metody na kontinuální a pulzní.

Kontinuální metoda snímání spekter NMR<sup>17</sup> zpravidla pracuje v podmínkách odpovídajících tzv. stacionárnímu řešení Blochových rovnic, které platí za předpokladu, že sama soustava vyšetřovaných jaderných spinů je ve stavu termodynamické rovnováhy a je také ve stavu termodynamické rovnováhy s mřížkou. Takový stav zřejmě nastane, budou-li změny velikostí amplitud a směrů přiložených magnetických polí dostatečně pomalé ve vztahu k relaxačním dobám  $T_1, T_2$ . Za těchto podmínek na vyšetřovanou soustavu jaderných spinů působí jednak (tzv. podélné) kvazistacionární magnetické pole  $B_0 \equiv (0, 0, B_0)$  a jednak (tzv. příčné pole), tedy pole v rovině kolmé k ose z, které je lineárně polarizované a harmonicky proměnné s konstantní (respektive velmi pomalu se měnící) amplitudou a frekvencí  $\omega$ .

Standardní postup řešení Blochových rovnic je založen na transformaci problému do rotující souřadné soustavy – viz napřílad [2, 4, 7]. Přikládané příčné pole,

 $<sup>^{16}</sup>$ Toto mikroskopické pole působící na jádra v látce je obecně výsledkem řady příspěvků a může významně lišit od makroskopického vnějšího pole působícího na zkoumanou látku – viz 19.3.

<sup>&</sup>lt;sup>17</sup>Tato metoda byla použita ve výše uvedených prvních experimentech NMR.

orientované obvykle ve směru os<br/>y $\boldsymbol{x}$ inerciální laboratorní soustavy, může být zapsáno ve tvaru

$$B_x(t) = 2B_1 \cos \omega t \tag{19.78}$$

a může být chápáno jako superpozice dvou kruhově polarizovaných složek o úhlových frekvencích  $\omega$  a  $-\omega$ . Jestliže tedy úhlová frekvence jedné z nich je blízká Larmorově frekvenci jaderné magnetizace, je frekvence druhé Larmorově frekvenci značně vzdálena. Její vliv na chování jaderné magnetizace může být zanedbán a Blochovy rovnice mohou být řešeny jen pro jednu kruhově polarizovanou složku  $B_1$ , pro niž znaménko úhlové frekvence souhlasí se znaménkem Larmorovy precese a která je dána vztahem

$$\boldsymbol{B}_1 = B_1(\boldsymbol{i}\cos\omega t - \boldsymbol{j}\sin\omega t) , \qquad (19.79)$$

kde i a j jsou jednotkové vektory ve směru souřadných os x a y. Řešení pro střídavou x-ovou složku magnetizace  $M_x$  pak lze vyjádřit pomocí amplitud magnetizace v rotující soustavě  $M'_x(\omega)$  a  $M''_y(\omega)$ , z nichž první z nich je ve fázi s  $B_1$  a druhá je fázově posunuta o  $\pi/2$ . Platí (viz opět [2, 4, 7])

$$M_x = M'_x(\omega)\cos\omega t - M''_u(\omega)\sin\omega t . \qquad (19.80)$$

Alternativně k magnetizaci  $M_x$  se tranverzální řešení častěji vyjadřuje pomocí susceptibilit  $\chi'(\omega) = \mu_0 M'(\omega)/2B_1$  a  $\chi''(\omega) = \mu_0 M''(\omega)/2B_1$ . Platí pro ně

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{2} \omega_0 \chi_0 T_2 \frac{-T_2^2(\omega - \omega_0)}{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_N^2 B_1^2 T_1 T_2} , \qquad (19.81)$$

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{2} \ \omega_0 \chi_0 T_2 \ \frac{1}{1 + T_2^2 (\omega - \omega_0)^2 + \gamma_N^2 B_1^2 T_1 T_2} \ , \tag{19.82}$$

v nichž  $\chi_0$  značí statickou jadernou susceptibilitu, která je v obvyklém případě jaderného paramagnetizmu dána vztahem (19.30). Pro podélnou složku jaderné magnetizace  $M_z$  plyne z Blochových rovnic za uvedených podmínek vzorec

$$M_z = M_0 \; \frac{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)}{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)^2 + \gamma_N^2 B_1^2 T_1 T_2} \;. \tag{19.83}$$

Z (19.81), (19.82) a (19.83) vyplývá, že vyšetřovaná soustava závisí na amplitudě pole  $B_1$  a nechová se tedy lineárně díky faktoru  $\gamma_N^2 B_1^2 T_1 T_2$ . V případě malých amplitud  $B_1$ , kdy platí  $\gamma_N^2 B_1^2 T_1 T_2 \ll 1$  může být tento faktor zanedbán; pro susceptibility pak platí

$$\chi'(\omega) = \frac{1}{2} \,\omega_0 \chi_0 T_2 \,\frac{-T_2^2(\omega - \omega_0)}{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)} \,, \tag{19.84}$$

$$\chi''(\omega) = \frac{1}{2} \ \omega_0 \chi_0 T_2 \ \frac{1}{1 + T_2^2(\omega - \omega_0)} \ . \tag{19.85}$$

5	Q	5
J	0	J

Výsledkem jsou tedy křivky Lorenzova typu, které lze reprezentovat komplexní susceptibilitou

$$\bar{\chi}(\omega) = \chi'(\omega) - i\chi''(\omega) , \qquad (19.86)$$

jejíž složky splňují známé Kramersovy-Kronigovy relace, přičemž parametr  $T_2$  charakterizuje jejich tzv. poloviční šířku  $\delta \omega = 2/T_2$ , vymezující odlehlost extrémů na křivce  $\chi'(\omega)$  a současně pokles maximální hodnoty křivky  $\chi''(\omega)$  na polovinu.

Dosud jsme mlčky předpokládali, že podélné pole je identické pro všechna jádra studovaného vzorku. V reálném experimentu to není splnitelné a je vždy nutné počítat se změnou pole  $B_0$  v objemu vzorku, která se popisuje určitou distribuční funkcí, charakterizující četnost jader s danou Larmorovou frekvencí  $\omega_0$ . V obecném případě je pak tvar spektra dán konvolucí této distribuční funkce a spektra daného řešením Blochových rovnic. Pouze v mezním případě, kdy je šířka distribuční funce mnohem menší než vlastní šířka spektra, se naměřený průběh spektra blíží řešení Blochových rovnic; v opačném extému velmi široké distribuční funkce odpovídá naměřený tvar spektra průběhu distribuční funkce. Mimo uvedené extrémní situace se často užívá (dosti umělý) předpoklad, že distribuční funkce má tvar Lorentzovy křivky charakterizované parametrem  $T_d$ . Potom – jak plyne z matematické analýzy – výsledkem konvoluce je opět Lorentzova křivka charakterizovaná "relaxační" dobou  $T^*$ , pro níž platí

$$\frac{1}{T^*} = \frac{1}{T_2} + \frac{1}{T_d} \ . \tag{19.87}$$

Vlastní experiment snímání spektra NMR musí vyhovovat podmínkám kontinuálního řešení Blochových rovnic. Vzorek vložený do podélného magnetického pole  $B_0$  a vysokofrekvenční cívky, která je součástí rezonančního obvodu o frekvenci odpovídající Larmorově frekvenci, se v kolmém směru ozáří vysokofrekvenčním polem vhodné úrovně. Pole  $B_0$  se dostatečně pomalu mění tak, aby podmínky experimentu odpovídaly stacionárnímu řešení Blochových rovnic a současně se vhodnými technikami měří změny parametrů cívky ovlivněné NMR. Pro podrobnější poučení o konkrétních otázkách experimentálním techniky odkazujeme na literaturu [1, 2, 4, 7].

**Pulzní metody** detekce NMR se zásadně liší od kontinuální metody tím, že vysokofrekvenční excitační pole se na vzorek přikládá ve formě krátkých pulzů (pro jejichž délku  $\tau$  musí platit  $\tau \ll T_1, T_2^*$ ). Signál NMR se pak sleduje v intervalech mezi těmito *excitačními pulzy* jako vysokofrekvenční napětí s časově závislou amplitudou, která je úměrná amplitudě příčné složky jaderné magnetizace. Proti původní kontinuální metodě mají pulzní metody řadu výhod. Mezi hlavní z nich patří: (i) slabý signál NMR se detekuje v čase, kdy na vzorek nepůsobí silné excitační vysokofrekvenční pole; (ii) celé spektrum lze sejmout při jedné konstantní hodnotě podélného statického pole  $B_0$  a excitační frekvence<sup>18</sup>; (iii) signál NMR ve formě časové odezvy lze snadno digitalizovat a dále akumulovat jednolivé odezvy za účelem zvýšení citlivosti a zárověň využít výsledná spektra v digitální formě pro počítačové zpracování. Díky těmto vlastnostem se v současné době pulzní metody používají

 $<sup>^{18}\</sup>mathrm{S}$ výjimkou speciálních typů pevných látek vykazujících extrémně široká spektra.

téměř výhradně. Probereme někreré jejich základní varianty, zejména s ohledem na použití ve fyzice nízkých teplot.

Dříve než přistoupíme ke konkrétnímu popisu, je třeba si uvědomit dvě jejich společné vlastnosti. Pro řešení Blochových rovnic mají pulzní metody další výhodu v tom, že během působení krátkých pulzů lze zanedbat relaxační členy a řešit pohybové rovnice typu (19.16) a naopak v době mimo pulzy řešit jen relaxační rovnice typu (19.73), (19.75).

Metoda volné precese vychází ze speciálního typu řešení Blochových rovnic, kdy na vyšetřovanou soustavu jaderných spinů působí jednak konstantní podélné magnetické pole  $B_0$  a v příčné rovině (například ve směru osy x) v časovém intervalu  $(0, \tau)$  pulz střídavého pole  $B_x$  (19.78) o frekvenci  $\omega_0$  splňujicí podmínku Larmorovy precese (19.17); pro délku pulzu  $\tau$  nechť platí  $\tau \ll T_1, T_2^*$  a amplituda  $B_1$  nechť splňuje podmínku  $\gamma_N B_1 \tau = \pi/2$  (mluvíme o tzv.  $\pi/2$  pulzu).

Zavedeme nyní rotující souřadnou soustavu (x', y', z'), rotující kolem osy z', přičemž tato osa je totožná s osou z pevné soustavy, v jejímž směru působí statické magnetické pole  $B_0$ . Bude-li tato soustava (x', y', z') rotovat úhlovou rychlostí  $\omega'_0 = -\gamma B_0$ , bude v ní působit zdánlivé pole, které podle (19.17) vykompenzuje statické pole  $B_0$ . V rotující soustavě bude tedy na jadernou magnetizaci působit jen "účinná" kruhově polarizovaná složka pole  $B_x$ , jejíž magnetická indukce  $B_1$  bude mít trvale směr osy x'. Jaderná magnetizace, která byla původně v rovnovážném stavu orientována ve směru osy z', bude po zapnutí pulzu precedovat úhlovou rychlostí  $\omega_0$ , takže se po dobu trvání pulzu otočí o úhel  $\pi/2$  a bezprostřeně po ukončení pulzu bude orientována ve směru osy y' (viz obr. 19.9a.)



Obr. 19.9: Metoda volné precese; (a) precese vektoru jaderné magnetizace v rotující soustavě souřadné, (b) průběh signálu volné precese.

V následujícím čase se budou uplatňovat relaxační mechanismy, jejichž působením se vektor jaderné magnetizace bude navracet do své rovnovážné polohy a jeho příčná složka bude exponenciálně klek nule. V obvyké situsat aci, kdy se uplatní nehomogenita statického pole, bude pokles dán vztahem  $M_{\perp}$  ~  $\exp\{-t/T^*\}$ ; na tomto poklesu se tedy uplatní dva relaxační mechanismy charakterizované parametry  $T_{\rm d}$  a  $T_2$ . První z nich reprezentuje vliv nehomogenity pole  $B_0$  v jejímž důsledku různé jaderné momenty

precedují různými rychlostmi, takže se postupně rovnoměrně rozprostírají v rovině precese a výsledná magnetizace klesá k nule – viz obr. 19.9b. Druhý mechanismus je popsán vztahy (19.75) a je dán vnitřními interakcemi v jaderném systému. Zpra-

19.1

vidla bývá vliv nehomogenity dominantní, takže i když příčná magnetizace klesne k nule, není ještě soustava jaderných spinů v termodynamické rovnováze.

Experimentálně se precedující příčná složka jaderné magnetizace detekuje napětím indukovaným v cívce s osou ležící v příčné rovině, v níž je umístěn vzorek. Detekované napětí se tudíž přirozeně nazývá *signálem volné precese*. V literatuře se často označuje zkratkou FID (z angl. *Free Induction Decay*).

Signál volné precese obsahuje v podstatě stejnou informaci o studovaném objektu jako spektrum získané kontinuální metodou, neboť Fourierovou transformací tohoto signálu lze získat spektra odpovídající výsledku získanému kontinuální metodou. Pro mnoho typů látek platí  $T_{\rm d} \ll T_2$ , takže tvar změřeného spektra často odpovídá distribuci lokálního statického pole působícího na jádra. Je-li možné tuto distribuci modelovat křivkou Lorentzova typu, tvar signálu FID je pak exponenciální funkcí času. Často je však realističtejší distribuce Gausova typu, signál FID pak ovšem nemá exponenciální průběh.

Metoda spinového echa používá analogické uspořádání jako metoda volné precese s tím rozdílem, že kromě pulzu  $\tau_1$  splňujícího podmínku  $\gamma B_1 \tau_1 = \pi/2$  a aplikovaného v časovém intervalu  $(0, \tau_1)$ , se po uplynutí doby  $t_w < T_2$  aplikuje druhý pulz  $\tau_2$  dvojnásobné délky, tj.  $\tau_2 = 2\tau_1$ , pro který tedy platí  $\gamma B_1 \tau_2 = \pi$ . Mluvíme proto o tzv. pulzu  $\pi$ ; pro oba pulzy musí samozřejmě platit  $(\tau_1, \tau_2) \ll (T_1, T_2^*)$ .

Jak bylo již řečeno, po odeznění signálu FID není soustava jaderných spinů v termodynamické rovnováze, přičemž rychlost relaxace její příčné složky je dána relaxační dobou  $T_2$  a rychlost relaxace podélné složky relaxační dobou  $T_1$ . Metoda spinového echa umožňuje monitorovat příčnou složku aplikací druhého pulzu  $(\pi)$ , který překlopí rovinu (x', y') kolem osy x', čímž se změní směr precese jednotlivých spinů. V důsledku toho začnou "rychlejší" spiny dohánět spiny "pomalejší" a

po uplynutí doby  $t_w < T_2$  budou vektory příčné složky jednotlivých jaderných momentů seřazeny ve směru osy y' (podobně jako v okamžiku ukončení prvního pulzu) a ve vzorku vznikne nenulová makroskopická magnetizace, která v přijímací cívce indukuje vysokofrekvenční signál nazývaný *spinové echo*. Rychlost jeho nárůstu a poklesu je – podobně jako u signálu volné precese – určena relaxační dobou  $T_2^*$ . Jeho amplituda odpovídá okamžité amplitudě příčné složky jaderné magnetizace, jejíž rychlost poklesu k nule



Obr. 19.10: Schéma metody dvouimpulzového echa.

určuje relaxační doba  $T_2$ . Při opakování experimentu pro různé hodnoty odlehlosti obou pulzů  $t_w$  je tedy možné monitorovat tuto relaxační dobu – viz obr. 19.10<sup>19</sup>.

 $<sup>^{19}</sup>$ Vedle vyložené metody dvou<br/>impulzového echa existuje multipulzní (tzv. Carrova-Purcellova metoda), která umožňuje proměřit příčnou relaxační dobu v rámci jedné série – viz např. [2],[4].

Metody měření podélné relaxační doby. Pro měření relaxační doby  $T_1$ existuje v pulzní spektroskopii NMR řada možností. Uvedeme dvě z nich. První je určitou modifikací metody volné precese, spočívající v přidání dalšího " $\pi/2$  pulzu" v čase  $t_w$ , v němž je signál volné precese již utlumen, ale jaderná magnetizace není ještě v termodynamické rovnováze s mřížkou. Druhý pul<br/>z $\pi/2$ otočí původně podélsložku nou

jaderné magnetizace do příčné roviny. V přijímací cívce se tedy (podobně jako u metody volné precese) po skončení pulzu indukuje signál, jehož počáteční amplituda je úměrná původně podélné složce magnetizace a který se bude utlumovat jako signál volné precese (FID) – jak je znázorněno na obr. 19.11. Opakováním měření pro různé hodnoty  $t_{\rm w}$  je – podobně jako v případě spinového echa – možné proměřit celou relaxační křivku.

Relaxační doba  $T_1$  v některých ko-



vech je velmi vhodným parametrem pro měření teploty, zejména v milikelvinové a submilikelvinové oblasti, kde je pr-

vořadým požadavkem, aby termometrické zařízení přivádělo do daného experimentálního prostoru minimální množství tepla. Na druhé straně, vzhledem k tomu, že vzájemné interakce mezi jadernými momenty v látkách jsou velmi slabé, lze soustavu jaderných magnetických momentů v kovech (i při výše uvedených velmi nízkých teplotách) obvykle považovat za paramagnetickou, včetně platnosti Curieova zakona (19.30) – viz stať 19.4. Jelikož jaderná magnetizace má v oblasti velmi nízkých teplot vysokou hodnotu, takže v experimentech NMR nejsou zpravidla problémy s detekcí signálu.



Obr. 19.12: K metodě měření  $T_1$  metodou vzorkovacích pulzů.



Obr. 19.11: K metodě měření podélné relaxační doby  $T_1$  dvojicí pulzů  $\pi/2$ .

Díky uvedené situaci lze pro termometrické účely využít modifikaci předešlé metody, v níž se následné "<br/>  $\pi/2$  pulzy" nahradí extrémně krátkými tzv. vzorkovacími pulzy<sup>20</sup>. Metoda tedy pracuje takto: první ( $\pi/2$ pulz) otočí jadernou magnetizaci do příčné roviny. Následně soustava relaxuje, tj. postupně narůstá podélná složka magnetizace. Jesliže aplikujeme vzorkovací pulz, který otočí magnetizaci jen o malý úhel zpět do příčné roviny, vznikne v přijímací cívce signál volné precese, jehož počáteční ampli-

<sup>&</sup>lt;sup>20</sup>V anglické literatuře "tipping pulses".

tuda je úměrná podélné složce magnetizace. Lze tedy sestavit pulzní sérii, která sestává z jednoho počáteního pulzu  $\pi/2$ , následovaného řadou vzorkovacích pulzů aplikovaných v pravidelných časových intervalech - jak ukazuje obr. 19.12.

## 19.7.4 Mikrofyzikální popis NMR

Adekvátními prostředky pro deklarovaný úkol jsou kvantová mechanika a statistika. Navážeme na 19.1.2, kde bylo ukázáno, že interakce jádra s daným spinem a gyromagnetickým poměrem, vloženého do statického magnetického pole  $B_0$ , orientovaného ve směru osy z, může být popsána vztahy (19.8) až (19.11). Dále z rovnice (19.15) vyplynulo, že z-ová složka magnetíckého pole memůže měnit z-ovou složku magnetického momentu.

Budeme nyní uvažovat obecnější situaci, kdy na jaderný spin, kromě statického pole  $B_0$ , působí v rovině (x, y) kruhově polarizované pole (19.79). Hamiltonián soustavy může být nyní vyjádřen vztahem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t) ,$$
 (19.88)

v němž  $\hat{H}_0$  je hamiltonián (19.8) a pro  $\hat{H}_1$  platí

$$\hat{\boldsymbol{H}}_1(t) = -\hat{\boldsymbol{\mu}}_I \cdot \boldsymbol{B}_1 = -\gamma_{\rm N} B_1(\hat{I}_x \cos \omega t + \hat{I}_y \sin \omega t) . \qquad (19.89)$$

Užijeme-li známé "snižovací" a "zvyšovací" operátory  ${}^{(-)}\hat{I} = \hat{I}_x - i\hat{I}_y$  a  ${}^{(+)}\hat{I} = \hat{I}_x + i\hat{I}_y$ mající tu vlastnost, že při působení na vlastní funkci operátoru snižují, respektive zvyšují, magnetické kvantové číslo o jedničku, můžeme hamiltonián přepsat do tvaru

$$\hat{\mathbf{H}}_{1}(t) = -\gamma_{\rm N} B_{1} \frac{1}{2} \left( {}^{(-)}\hat{I} \exp(i\omega t) + {}^{(+)}\hat{I} \exp(-i\omega t) \right) .$$
(19.90)

Za předpokladu  $B_1 \ll B_0$  lze vliv operátoru  $\hat{H}_1(t)$  stanovit pomocí časově závislého poruchového počtu. Výsledkem je pravděpodobnost přechodu  $P_{m,m'}$  mezi stavy charakterizované kvantovými čísly m a m'. V Diracově formalismu lze výsledek napsat ve tvaru (viz např. [5])

$$P_{m,m'} \sim |\langle m | \hat{\boldsymbol{H}}_1 | m' \rangle|^2 . \qquad (19.91)$$

Díky tvaru hamiltoniánu (19.90), v němž vystupují operátory  $(-)\hat{I}$  a  $(+)\hat{I}$ , je zřejmé, že v prvním přiblížení budou nenulové jen maticové elementy pro něž bude platit  $m' = m \pm 1$ ; magnetické pole  $B_1$  je tedy podle tohoto výsledku schopné indukovat jen přechody mezi sousedními hladinami Zeemanova multipletu<sup>21</sup>, přičemž v důsledku symetrie maticových elementů, budou pravděpodobnosti přechodu v obou směrech stejné. Je samozřejmé předpokládat, že pravděpodobnost přechodu závisí na frekvenci pole  $B_1$ , která bude mít maximum v situaci, kdy energie absorbovaného či emitovaného fotonu bude mít energii rovnou rozdílu energií sousedních

 $<sup>^{21}</sup>$ Díky tomu, že tento závěr byl získán aplikací poruchového počtu v prvním přiblížení, platí jen za podmínky platnosti  $B_1 \ll B_0$ . Pokud tato podmínka není splněna, je možné pozorovat i "vícekvantové" přechody; podrobněji bude o těchto otázkách pojednáno v následující stati 19.8.

Zaklauni viastnosti Nivitt v pevnych latkach

hladin Zeemanova multipletu (19.11), což odpovídá podmínce  $\omega = \omega_0$  pro Larmorovu frekvenci (19.17).

Použitím aparátu kvantové mechaniky jsme ukázali, že časově proměnné příčné magnetické pole může vyvolat přechody mezi jednotlivými hladinami Zeemanova multipletu izolovaného jádra, vloženého do statického magnetického pole. Dospěli jsme tak ke stejnému výsledku, ze kterého jsme vycházeli při fenomenologickém popisu NMR, čímž jsme získali východisko pro mikrofyzikální popis tohoto jevu v makroskopických soustavách. Nadále tedy budeme z mikrofyzikálního hlediska vyšetřovat vlastnosti jevu NMR v kondenzovaných látkách, takže standardně budeme vyšetřovat chování vektoru jaderné magnetizace zavedeného v 19.2. Nebudeme však předpokládat, že jaderná magnetizace reprezentuje soustavu kvazivolných jader, která je ve stavu termodynamické rovnováhy s mřížkou, ale naopak budeme uvažovat soustavu jader atomů tvořících kondenzovanou látku a připustíme, že jejich magnetizace M(t) není v rovnovážném stavu a může být časově závislá.

Ukázali jsme, že magnetické (a případně elektrické) jaderné momenty atomů pevné látky jsou podrobeny působení složité soustavy interakcí. Kromě vnějšího makroskopického magnetického (a případně elektrického) pole, jednotlivé jaderné magnetické momenty interagují vzájemně mezi sebou a interagují také s orbitálními a spinovými momenty vlastního i sousedních atomů. Pokud jde o jádra s nenulovým elektrickým kvadrupólovým momentem, přichází v úvahu i interakce s lokálním elektrickým polem působícím v místě jádra. Je zřejmé, že tato lokální mikroskopická pole nejsou časově nezávislá. Obecně řečeno, můžeme předpokládat, že za daných vnějších podmínek (jako je teplota, tlak, vnější elektrická a magnetická pole aj.) jsou tato pole, pro jádra lokalizová v krystalograficky a magneticky ekvivalentních polohách, reprezentována jednak jejich určitou střední hodnotou a jednak časově proměnnou složkou, fluktující kolem této střední hodnoty.

Střední hodnota mikrospického magnetického pole je reprezentována tzv. hyperjemným polem  $\mathbf{B}_{hf}$  (19.44), které se vektorově sčítá s makroskopickým polem a způsobí frekvenční posuv NMR spektra, neboť pro Larmorovu frekvenci bude nyní platit  $\omega_0 = \gamma_N |\mathbf{B}_{hf} + \mathbf{B}_0|$ . Vlastnosti tohoto posuvu mohou dát důležité informace o mikrostrukruře zkoumané látky.

**Knightův posuv** je nazván po svém objeviteli, který zjistil, že frekvence NMR izotopu <sup>63</sup>Cu v kovové mědi je nezávisle na velikosti použitého statického magnetického pole přibližně o 0,23 % vyšší než rezonanční frekvence tohoto izotopu v diamagnetické nekovové látce CuCl. Ve stupnici magnetického pole může být velikost tohoto posuvu vyjádřena rozdílem rezonančního pole  $B_0$  volných jader a vnějšího rezonančního pole  $B_{0,K}$  ve zkoumaném kovu, tedy  $\Delta B_0 = B_0 - B_{0,K}$ . Později bylo zjištěno, že takový posuv je charakteristický pro všechny kovové látky, přičemž v prostých (netranzitivních) kovech je zpravidla teplotně nezávislý a vzrůstá při přechodu od lehkých kovů k těžším. Naopak v tranzitivních kovech jeví posuv zpravidla výraznou teplotní závislost a může mít i různá znaménka – srovn. čl. 19.6.3. Experimentální zkušenost dále ukazuje, že veličina  $\Delta B_0$  je úměrná rezonančnímu

591

19.1

poli  $B_{0,K}$ . Je proto výhodnější vyjadřovat Knightův posuv bezrozměrnou veličinou

$$K = \frac{\Delta B_0}{B_{0,\rm K}} \,. \tag{19.92}$$

Kovy jsou charakterizovány především vysokou elektrickou a tepelnou vodivostí. Netranzitivni kovy jeví teplotně nezávislý paramagnetizmus, na němž se podílí především vodivostní elektrony – viz například [8, 10, 6]. Ukázalo se, že v lehkých netranzitivních kovech je i Knightův posuv důsledkem přímé interakce jader s vodivostními elektrony, které jsou polarizovány vnějším magnetickým polem. Jelikož jsou vodivostní elektrony v těchto kovech především ve stavu s, má hlavní podíl na jejich interakci s jádry Fermiho kontaktní interakce – viz 19.3. Jelikož má tento hamiltonián charakter interakce daného jádra s určitým efektivním hyperjemným polem (19.44), je principiálně možné z uvedených operátorů jeho střední hodnotu vypočítat.

Při řešení tohoto problému je ovšem třeba vzít v úvahu, že vodivostní elektrony v kovech jsou kvazivolné. Standardně se při popisu jejich stavu zanedbává jejich vzájemná interakce a vliv mřížky se aproximuje periodickým elektrickým polem. Stav jednoho elektronu se pak popisuje vlnovou funkcí Blochova typu ve tvaru rovinné vlny s modulovanou amplitudou  $u_k$ , odrážející periodicitu krystalové mřížky. Obvykle se zapisuje ve tvaru (viz např. [10])

$$\psi_{\boldsymbol{k},\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\psi_{\mathrm{s}}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}) , \qquad (19.93)$$

kde  $\boldsymbol{k}$  značí vlnový vektor a  $\psi_{\rm s}$  spinovou funkci.

Z těchto jednoelektronových funkcí je dále třeba sestavit funkci mnohoelektronovou, podobně jako v případě výpočtu magnetické susceptibility vodivostních elekronů - (viz např. [6, 10]),

$$\chi_{\rm e}^{\rm s} = \mu_0^2 (\gamma_{\rm e} \hbar)^2 \varrho(E_{\rm F})/4$$
 (19.94)

a následně vypočítat hledanou střední hodnotu hyperjemného pole za předpokladu, že na elektrony působístatické pole  $B_0$ . Při tomto středování je ovšem třeba vzít v úvahu, že četnost obsazení jednotlivých stavů bude závislá na orientaci spinu jen v blízkosti Fermiho plochy, takže ve výsledku bude vystupovat jen střední hodnota amplitudy vlnové funkce  $u_k$  počítaná přes všechny stavy na Fermiho ploše. S využitím hamiltoniánu (19.42) lze určit střední hodnotu efektivního pole  $\langle B_{\rm ef} \rangle$  - viz [2, 4, 6, 8]

$$\langle B_{\rm ef} \rangle = \frac{\mu_0}{4\pi} g_{\rm e} \mu_{\rm B} \frac{8\pi}{3} \langle s_z(\boldsymbol{r}) \rangle = \frac{2}{3} \chi_{\rm e}^{\rm s} \boldsymbol{B}_0 \langle |\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}(0)|^2 \rangle_{\rm F} , \qquad (19.95)$$

z níž lze jednoduše vyjádřit relativní velikost posuvu a tedy Knightův posuv

$$K = \frac{2}{3} \chi_{\rm e}^{\rm s} \langle |u_{k}(0)|^{2} \rangle_{\rm F} . \qquad (19.96)$$

Velikost Knightova posuvu podle tohoto vzorce je s ohledem na použitý model vodivostních elektronů teplotně nezávislá.

Ve skutečnosti je ovšem situace složitější. Kromě přímé interakce vodivostních elektronů, k posuvu vždy přispívá polarizace vnitřních zaplněných s slupek; jejich vliv se obvykle započítává pomocí faktoru  $R_s$ , takže konečný výsledek má tvar

$$K = \frac{2}{3} \chi_{\rm e}^{\rm s} \langle |u_{\boldsymbol{k}}(0)|^2 \rangle_{\rm F} (1 + R_{\rm s}) , \qquad (19.97)$$

přičemž korekční konstanta  $R_{\rm s}$  roste s rostoucím hmotnostním číslem. Pro kvantitativní posouzení souhlasu uvedených vztahů s experimentem je nezbytné přímé měření susceptibility vodivostních elektronů. Takové měření bylo realizováno metodou elektronové paramagnetické rezonance v některých lehkých kovech; o získaných výsledcích je možné se poučit v citované literatuře [2, 4, 6].

Název Knightův posuv byl původně zaveden pro shora vyšetřovaný teplotně nezávislý posuv spekter NMR, způsobený interakcí jader s vodivostními elektrony. V současné době má však tento termín obecnější význam. Je používán například i v případě těžších kovů, kdy k teplotně závislému lokálnímu hyperjemnému poli přispívají i elektrony s nenulovým orbitálním momentem – srovn. extrémní situaci lanthanoidů 19.6.3, či dokonce situaci nekovových vysokoteplotních supravodičů 19.8.2.

Podélná relaxace silně interagujících spinů (Gorterův vzorec) je příkladem vlivu fluktuace lokálních polí na jaderné relaxace pro případ, kdy lze pro jaderný systém zavést spinovou teplotu  $T_{\rm s}$ , obecně různou od teploty mřížky. Zavedení spinové teploty odlišné od teploty mřížky je možné jen tehdy, ustaví-li se termodynamická rovnováha uvnitř spinové soustavy mnohem rychleji než rovnováha s mřížkou. Tato podmínka bývá často splněna právě v pevných látkách díky obvykle silné spin-spinové interakci, jejímž výrazem je  $T_2 \ll T_1$ . V dané situaci lze podélnou složku jaderné magnetizace v nerovnovážném stavu s mřížkou vyjádřit obvyklým vztahem  $M_z = \chi_0 B_0$ , v němž však susceptibilita  $\chi_0$  i magnetizace  $M_z$ nejsou (ve smyslu Curieova zákona) nepřímo úměrné teplotě mřížky T, ale spinové teplotě  $T_{\rm s}$ , tedy  $M_z \sim 1/T_{\rm s}$ . Zavedeme-li tedy pro další úvahy veličiny  $\beta_{\rm s} = 1/k_{\rm B}T_{\rm s}$  a  $\beta_0 = 1/k_{\rm B}T$ , můžeme místo definičního vztahu pro spin-mřížkovou relaxaci (19.73) pro naši situaci psát

$$\frac{d\beta_{\rm s}}{dt} = \frac{\beta_0 - \beta_{\rm s}}{T_1} \ . \tag{19.98}$$

Uvažujme nyní soustavu jaderných spinů v látce a předpokládejme platnost podmínky  $T_2 \ll T_1$ . Označme energie jejích jednotlivých stacionárních stavů  $|\alpha\rangle$  symbolem  $E_{\alpha}$ . Střední hodnota energie této soustavy  $\bar{E}$  může být vyjádřena pomocí těchto vlastních hodnot a pravděpobností  $p_{\alpha}$  obsazení těchto stavů:

$$\bar{E} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} p_{\alpha} . \qquad (19.99)$$

V průběhu relaxačního procesu jsou ovšem pravděpodobnosti  $p_{\alpha}$ časově závislé. Pro jejich časovou změnu musí platit tzv. základní kinetická rovnice, která v podstatě

požaduje, aby časová změna pravděpodobnosti populace daného stavu  $p_{\alpha}(t)$  byla rovna algebraickému součtu počtu přechodů (za jednotku času) z jiných stavů do uvažovaného stavu  $|\alpha\rangle$  a přechodů opačným směrem, tj. aby platilo

$$\frac{dp_{\alpha}(t)}{dt} = \sum_{\alpha'} \left[ W_{(\alpha' \to \alpha)} p_{\alpha'}(t) - W_{(\alpha \to \alpha')} p_{\alpha}(t) \right] .$$
(19.100)

Po derivaci (19.99) podle času a využitím (19.100) dostaneme po formální úpravě symetričtější konečný výsledek

$$\frac{d\bar{E}}{dt} = \frac{\bar{E}}{d\beta_{\rm s}} \frac{\beta_{\rm s}}{dt} = \sum_{\alpha,\alpha'} E_{\alpha} \left( p_{\alpha'} W_{(\alpha'\to\alpha)} - p_{\alpha} W_{(\alpha\to\alpha')} \right) 
= \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\alpha'} (E_{\alpha} - E_{\alpha'}) \left[ p_{\alpha'} W_{(\alpha'\to\alpha)} - p_{\alpha} W_{(\alpha\to\alpha')} \right] .$$
(19.101)

Pro určení pravděpodobností populace  $p_{\alpha}$  je třeba použít statistické metody podobným způsobem, který jsme pro vyjádření statické susceptibility použili v 19.2. Po rozvoji statistické sumy a použití vysokoteplotního přiblížení v rozvoji statistické sumy získáme vztah

$$p_{\alpha'}W_{(\alpha'\to\alpha)} - p_{\alpha}W_{(\alpha\to\alpha')} \doteq -W_{(\alpha'\to\alpha)}(E_{\alpha'} - E_{\alpha})(\beta_0 - \beta_s)$$
(19.102)

a po dosazení do (19.101) s využitím (19.98) dostaneme

$$\frac{d\beta_{\rm s}}{dt} = (\beta_0 - \beta_{\rm s}) \frac{1}{2} \frac{\sum_{\alpha',\alpha} W_{(\alpha' \to \alpha)} (E_{\alpha'} - E_{\alpha'})^2}{\sum_{\alpha} E_{\alpha}^2} = \frac{\beta_0 - \beta_{\rm s}}{T_1}$$
(19.103)

a tedy

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{2} \frac{\sum_{\alpha',\alpha} W_{(\alpha'\to\alpha)} (E_{\alpha'} - E_{\alpha'})^2}{\sum_{\alpha} E_{\alpha}^2} .$$
(19.104)

To je hledaný *Gorterův vzorec*, při jehož odvození byla díky aproximaci v rozvoji statistické sumy předpokládána vysokoteplotní aproximace. Ve skutečnosti je však možné očekávat jeho obecnější platnost, neboť ponechání většího počtu členů v rozvoji by vedlo k relaxaci popisovanou větším počtem relaxačních dob; za předokladu skutečné existence spinové teploty by měla celá spinová soustava relaxovat exponenciálně s jedinou relaxační dobou  $T_1$ .

#### 19.7.5 Spin-mřížková relaxace v kovech

V prostých (netranzitivních) kovech tvoří interakce jader s vodivostními elektrony zpravidla dominantní složku hyperjemných interací. Ukázali jsme, že projevem podélné složky takto vznikajícího hyperjemného pole je Knightův posuv a projevem fluktuací jeho transvezální složky je mechanismus spin-mřížkové interakce reprezentovaný relaxační dobou  $T_1$ , danou Gorterovým vzorcem (19.104). Naznačíme nyní její konkrétnější vlastnosti.

$$\frac{1}{T_1} = \left(\frac{\mu_0}{4\pi}\right)^2 \frac{16}{9} \pi^3 \hbar^3 \gamma_{\rm e}^2 \gamma_{\rm N}^2 \langle |u_k(0)|^2 \rangle_{\rm F}^2 \varrho^2(E_{\rm F}) k_{\rm B} T , \qquad (19.105)$$

v němž  $\gamma_e = g_e \mu_B / \hbar$  značí gyromagnetický poměr kvazivolných elektronů, a  $\rho(E_F)$  hustotu stavů na Fermiho ploše.

Užitím výrazu pro Knightův posuv (19.96) lze ze získaného výsledku vyloučit střední hodnotu vlnové funkce  $\langle |u_{\mathbf{k}}(0)|^2 \rangle_{\rm F}$  a vyjádřit vzájemnou souvislost mezi Knightovým posuvem a relaxační dobou. Dostaneme

$$T_1 K^2 T = \frac{4\chi_e^{s^2}}{\mu_0^2 \pi \hbar^3 k_{\rm B} \gamma_e^2 \gamma_N^2 \varrho^2(E_{\rm F})} .$$
(19.106)

Konečně použitím výrazu pro susceptibilitu elektronového plynu kvazivolných elektronů (19.94) lze získat vztah

$$T_1 K^2 T = \frac{\hbar}{4\pi k_{\rm B}} \frac{\gamma_{\rm e}^2}{\gamma_N^2} .$$
 (19.107)

nazývaný Korringovým vzorcem.

Na první pohled by bylo možné očekávat že relaxační doby vypočtené pomocí Korringova vzorce z Knightova posuvu budou delší než skutečně měřené hodnoty, neboť Korringův vzorec nepostihuje všechny relaxační mechanismy působící v reálných kovech, skutečnost je však opačná. Obecně se touto problematikou nebudeme dále zabývat a v této věci odkazujeme na literaturu [2, 4, 7].

## 19.8 Využití NMR ve fyzice nízkých a velmi nízkých teplot

Metoda NMR aplikovaná na jádra různých izotopů je v současné době hojně užívána ve fyzice kondenzovaných látek a v materiálovém výzkumu, přičemž z mnoha důvodů je často třeba snímat spektra při nízkých teplotách. V dnešní době se pro teno účel standardně užívají komerční spektrometry pracující pulzními metodami s Fourierovou transformací, které je třeba v některých případech upravit pro daný účel. Podobně pro chlazení vzorku se v dnešní době standardně užívají komerční kryostaty, které obvykle pracují do teplot čerpaného <sup>4</sup>He – podrobněji např. v [7]. Při využívání NMR v subkelvinových teplotách dominuje obvykle složitá chladící

technika a vlastní technika NMR bývá zpravidla individuálně přizpůsobována konkrétním potřebám. Úkolem této stati je soustředit se na vybrané ryze nízkoteplotní aplikace, které demostrují použitelnost a užitečnost metody NMR v této oblasti.

Jednu z nich přinesl objev slabé supravodivosti a na ní založená konstrukce skvidových magnetometrů (viz kapitola 16), které umožnily dříve netušené zvýšení citlivosti měření magnetických veličin a magnetických vlastností látek, včetně alternativní možnosti detekce signálu NMR, s citlivostí – na rozdíl od standardní radiofrekveční metody založené na zákonu elektromagnetické indukce – nezávislé na Larmorově fekvenci. V obvyklém uspořádání skvidové detekce NMR se sledují změny podélné složky jaderné magnetizace (resp. susceptibility) vzorku (19.83). v závislosti na velikosti podélného pole  $B_0$  či excitační frekvence  $\omega$ , v podmínkách odpovídajících kontinuální metodě, při pomalém průchodu rezonancí.

Jako konkrétní příklad použítí skvidové detekce NMR uvedeme výsledky studia "vícekvantových" přechodů podle práce [21], která vedle původních výsledků



Obr. 19.13: Skvidové NMR spektrum izotopu $^{19}{\rm F}$ v teflonu [21].

vlastních experimentů, obsahuje kritickou diskusi historie problému, i vlastní teoretické postupy. Je ukázáno, že vícekvantové přechody jsou důsledkem vzájemné interakce mezi jádry, na které se vedle přímé dipól-dipólové mohou v různých typech látek podílet v různé míře další, vesměs nepřímé interakce – viz stať 19.3.4. Jejich intenzita na frekvencích  $(2\omega_0, 32\omega_0, 42\omega_0)$ postupně klesá v poměru  $(B_0^{-2}, B_0^{-4}, B_0^{-6})$ , přičemž jejich vybuzení vyžaduje vyšší úroveň vysokofrekvenčního

pole. Na obr. 19.13 je uvedeno typické skvidové spektrum sejmuté při poli  $B_0$ =3,48 mT. Základní "dovolené" spektrum, odpovídající Larmorově frekvenci, leží na frekvenci  $f_0$ =139,6 Hz a je následováno dvěma dalšími spektry, která odpovídají dvoufotononým a třífotonovým přechodům; plná křivka prezentuje expermentální záznam v reálném čase, čárkovaná křivka reprezentuje počítačovou simulaci třemi křivkami Gausova typu [21]. Následně byly vícefotonové přechody v nízkých polích detekovány i radiofrekvenční metodou [22].

## 19.8.1 Fyzika <sup>3</sup>He

Spektroskopie NMR nemůže být aplikována na izotop <sup>4</sup>He, který má nulový spin. O to větší význam má však pro fyziku <sup>3</sup>He, v níž se uplatňuje jak pro studium normální kapalnou fáze (která reprezentuje příklad Fermiho kapaliny), především však pro studium jeho supratekutých a pevných fází, pro něž NMR představuje principiální experimentální metodu. Specifikou experimentu NMR v <sup>3</sup>He jsou teploty kolem 1 mK a nižší <sup>22</sup>, což klade specifické nároky na konstrukci potřebného

 $<sup>^{22}\</sup>rm{Fyzikální}$  principy dosahování těchto teplot pomocí kombinace rozpouštěcích refrigerátorů  $^3\rm{He}$ – $^4\rm{He}$ v kombinaci s jadernou demagnetizací či Pomerančukovou celou jsou diskutovány

zařízení. Jako zdroj statického magnetického pole se zpravidla užívaji supravodivé cívky Helmholtzova typu doplněné o korekci pro zvýšení homogenity až do řádu $10^{-5}$ . Používaná pole se nejčastěji pohybují v intervalu $10^{-2}-10^{-1}~{\rm T}$ , čemuž odpovídá Larmorova frekvence v řádech desetin a jednotek MHz. Pro snímání spekter se používají jak kontinuální, tak pulzní metody; zvolené metodě musí být ovšem přizpůsobena excitační a přijímací technika.

Magnetizmus atomu <sup>3</sup>He v základním stavu je dán jeho jaderným magnetickým momentem spojeným s nenulovým jaderným spinem. Ve fyzice <sup>3</sup>He je obvykle užíván termín *spin* a označení "**S**" i pro magnetizaci vzorku. Tak například kvantově mechanická pohybová rovnice jaderné magnetizace v Heisenbergově reprezentaci (19.12) se alternativně zapisuje ve tvaru

$$-i\hbar \frac{d\hat{\boldsymbol{S}}^*}{dt} = [\hat{\boldsymbol{H}}^*, \hat{\boldsymbol{S}}^*] . \qquad (19.108)$$

Kapalné <sup>3</sup>He představuje jaderné paramagnetikum s velmi nízkou susceptibilitou  $\chi_{\rm N} \leq 10^{-7}$ , kterou lze měřit buď staticky pomocí skvidového magnetometru (který však detekuje celkovou susceptibilitu kapaliny – viz například [23]), nebo pomocí NMR, která měří přímo susceptibilitu repezentovanou jadernými momenty – viz (19.28); v obou případech je však podmínkou úspěchu kalibrace aparatur, což je obvykle velmi složitý úkol.

Jako příklad uvedeme základní charakteristiky a výsledky velmi podrobného studia teplotní závislosti magnetické susceptibility kapalného <sup>3</sup>He v závislosti na teplotě při různých tlacích [24]. Spektra NMR byla snímána kontinuální metodou v magnetickém poli 0,1 T na frekvenci 3,3 MHz. Homogenita magnetického pole ve vzorku byla nižší než přirozená šířka spektra NMR (která je menší než 10<sup>-8</sup> T); tvar snímaného spektra byl tedy určen touto nehomogenitou. Jelikož naměřená hodnota spin-mřížkové relaxační doby  $T_1 \sim 30$  s byla nezávislá na tlaku a teplotě, bylo možné snímat spektra při definovaných konstantních parametrech buzení, takže intenzita signálu (i plocha spektrání čáry) byly úměrné velikosti susceptibility. Naměřené teplotní a tlakové závislosti jsou uvedeny na obr. 19.14.

Zatímco obr. 19.14*a* podrobněji zobrazuje průběh susceptibility v oblasti vyšších teplot, obr. 19.14*b* naopak více zdůrazňuje oblast nižších teplot a navíc závislost odpovídající Curieovu zákonu je v tomto grafu lineární. Z obou obrázků je zřetelně patrné, že pro teploty nižší než ~ 0,7 mK přestává Curieův zákon platit a susceptibilita kapalného <sup>3</sup>He začíná být teplotně nezávislá, což odpovídá modelu Fermiho kapaliny. V jistém smyslu zde nastává situace podobná Pauliho susceptibilitě volných elektronů a vzniká tudíž otázka, zda by se ve spektrech NMR kapalného <sup>3</sup>He neměl projevovat posuv analogický Knightovu posuvu. Ve skutečnosti není ovšem podobnost obou systémů úplná; zatímco v případě vodivostních elektronů jde o interakci elektronových spinů, v případě jader <sup>3</sup>He jde o inteakci jadených spinů s nimiž je spojen o tři řády menší magnetický moment – případný posuv by tudíž měl neměřitelnou velikost.

v samostatné kapitole 2.



Obr. 19.14: (a): Teplotní závislost veličiny  $\chi_{\rm N} T/C$  pro různé tlaky. (b): Závislost veličiny  $\chi_{\rm N}/C$  na převrácené hodnotě teploty pro různé tlaky podle [24]. Čárkovaná křivka odpovídá dřívějším výsledkům [25], čerchované křivky odpovídají výsledkům [26] při tlaku 27,6 atm a tlaku nasycených par (tnp). Pořadí křivek pro jednotlivé tlaky je v obou částech obázku stejné; 1 atm = 101 325 Pa. Hodnoty Fermiho teploty  $T_{\rm F}$  byly počítány z naměřených susceptibilit.

Jak jsme viděli, spektra normálního kapalného <sup>3</sup>He lze standardně popsat Blochovými rovnicemi (19.77) s danými hodnotami relaxačních dob. V případě supratekutého <sup>3</sup>He se však ukázalo, že to možné není. Příčinou je vzájemná koherence chování jednotlivých Cooperových párů v makroskopickém měřítku, jehož výsledkem je makroskopická hodnota (anizotropního) efektivního dipól-dipóloveho pole působícího na jednotlivá jádra, bez jehož započtení není popis spektra možný, neboť operátor  $\hat{\mathbf{S}}$  typu (19.8) a ani pohybová rovnice (19.16) nemůže obsahovat jen vnější makroskopické pole<sup>23</sup>. Důsledkem této situace jsou zcela nové a velmi neobvyklé vlastnosti spekter NMR, kromě jiného i existence *podélné jaderné rezonance*, kdy vnější vysokofrekvenční pole a vnější statická pole jsou rovnoběžná. Vlastnostmi NMR v supratekutém <sup>3</sup>He se podrobně zabývá kapitola 6, neboť metoda NMR je základní pro experimentální studium supratekutých fází <sup>3</sup>He.

## 19.8.2 Supravodiče

Při letmém pohledu by se mohlo zdát, že spektroskopie NMR jako typicky mikroskopická metoda nemůže být použitelná ke studiu jevu supravodivosti, jehož základní vlastnosti reprezentují projevy kvantové mechaniky v makroskopickém měřítku. Ukážeme, že navzdory uvedené diametrálně odlišné povaze může být metoda NMR v řadě případů dobře použitelná k měření základních parametrů supravodičů, i k posouzení kvality konkrétních vzorků. Základním zdrojem informací bývá při-

 $<sup>^{23}{\</sup>rm V}$ mnoha ohledech je situace podobná v magneticky uspořádáných látkách, kde na jádra působí efektivní hyperjemné pole [7], jež je výsledkem koherence lokálních polí elektronového obalu atomu, úměrné spontánní magnetizaci magnetické podmřížky a často nabývá hodnot vyšších než dosažitelná makroskopická pole.

tom měření teplotní závislosti Knightova posuvu, spin-mřížkové relaxační doby, případně příčné relaxační doby. Na druhé straně existují určitá omezení v použitelnosti této metody plynoucí především z existence Meissnerova jevu, umožňujícího vnik statického i vysokofrekvenčního pole jen do tenké vrstvy na povrchu supravodiče. Dalším specifikem je, že supravodiče při překročení kritického pole  $B_c$ přecházejí do normálního stavu. Pro supravodiče I. druhu jsou hodnoty  $B_c$  velmi nízké, typicky  $(10^{-3} - 10^{-1})$  T. Pro aplikaci NMR je proto žádoucí upřednostňovat určité typy vzorků – např. malé částice či tenké vrstvy. V následujících odstavcích si podrobněji všimneme několika vybraných příkladů; pro podrobnější poučení o použití NMR v supravodičích odkazujeme na přehledové práce [27, 28].

Klasické supravodiče I. druhu. Studium Knightova posuvu a spin-mřížkové

relaxační doby v těchto materiálech, včetně jejich teplotních závislostí, je samozřejmě možné bez výše uvedených omezení nad kritickou teplotou  $T_{\rm c}$  a polem  $B_{\rm c}$ , což samo o sobě může dát řadu užitečných informací o jejich elektronové struktuře, stejně jako u nesupravodivých materiálů. Při přechodu pod kritickou teplotu však nastávají dramatické změny ve vlastnostech NMR spekter. Knightův posuv by měl pod kritickou teplotou klesat a při teplotě absolutní nuly zcela vymizet, neboť podle BCS teorie tvoří vodivostní elektrony Cooperovy páry v singletních stavech. Na základě výsledků prvních experimentů provedených na některých kovových supravodičích I. druhu, ve snaze prověřit BCS teorii byl však vysloven názor, že tomu tak obecně není, že totiž Knightův posuv sice pod kritickou teplotou klesá, ale zcela nevymizí - viz obr. 19.15, kde jsou uvedeny výsledky měření teplotní



Obr. 19.15: Výsledky měření teplotní závislosti Knightova posuvu hliníkové vrstvy [29] ve srovnání s teoretickou křivkou [30].

závislosti poměru Knightova posuvu získané na tenké 200 Å vrstvě hliníku v normálním a supravodivém stavu v magnetickém poli 0,38 T [29]. Šipkami jsou na obrázku dále vyznačeny hodnoty Knightova posuvu vanadu, cínu a rtuti při absolutní nule (měřené jinými autory) a čárkovaně je vyznačena teoretická závislost počítaná v dané době podle BCS teorie [30].

V pozdějších diskusích tohoto problému byl vysloven názor, že pozorovaný rozpor nemusí demonstrovat nedostatek BCS teorie, ale může být spíše důsledkem rozmanitosti příspěvků ke Knightovu posuvu v důsledku přítomnosti nečistot či poruch ve vzorcích, nebo nedokonalostí v podmínkách experimentálního uspořá-

dání – například nepřesná orientace magnetického pole vůči rovině tenké vrstvy může způsobit přechod některých jeho částí do normálního stavu. Pozdější experiment stejných autorů [31], provedený na novém vzorku tenké vrstvy hliníku, při jehož přípravě bylo zamezeno vzniku paramagnetických center nestechiometrických oxidů hliníku, tento názor potvrdil; výsledek je uveden na obrázku 19.16.



Obr. 19.16: Teplotní závislost Knightova posuvu v tenké vrstvě velmi čistého hliníku [31].

teplotou by měla být kratší než v normálním stavu nad kritickou teplotou a že při nízkých teplotách (menších než ~  $T_{\rm c}/2$ ) by měla být úměrná  $\exp\{-2\Delta/k_{\rm B}T\}$ . Z kapitol o supravodivosti víme, že enegetická mezera je sice obecně teplotně závislá, při nízkých teplotách se ale již příliš nemění. V Masudově experimentu [32] bylo měření relaxační doby  $T_1$  realizováno na práškovém hliníku v pulzním režimu tak, že relaxace jader probíhala v supravodivém stavu, zatímco vlastní měření NMR probíhalo ve stavu normálním. Toho bylo docíleno tak, že nejdříve bylo aplikováno pole  $B_0 = 0.4$ T, které přivedlo vzorek do normálního stavu, na dobu podstatně delší než  $T_1$ , aby se jaderná magnetizace polarizovala do rovnovážného stavu. Následně bylo pole  $B_0$  vypnuto a vzorek

600

Na základě uvedených (a řady dalších) experimentů lze shrnout, že měření teplotní závislosti Knightova posuvu v kovových supravodičích se hodí jak k posouzení vlastností a kvality vzorků, tak i k prověřování platnosti teorií supravodivosti.

Měření teplotní závislosti spinmřížkové relaxační doby může dát cenné informace o mechanismu supravodivosti daného vzorku, neboť umožňuje přímé určení energetické mezery  $\Delta$ . Jako příklad uvedeme další klasický experiment na hliníku [32], který vychází z výpočtů založených na BCS teorii a prvních experimentálních výsledků [33]. Ty ukazovaly na to, že relaxační doba  $T_1$  těsně pod kritickou



Obr. 19.17: Výsledky měření relaxační doby  $T_1$  v práškovém vzorku hliníku při teplotě 1,178 K [32] ve srovnání s teoretickou křivkou.

přešel do supravodivého stavu, v němž jaderná magnetizace mohla volně relaxovat po určitou proměnnou dobu  $\tau$ . Pak bylo opět zapojeno pole  $B_0$ , aby bylo možné detekovat signál NMR v nomálním stavu. Popsaná procedura se opakovala pro zvolený počet hodnot parametru  $\tau$ , dostatečný pro vzorkování relaxačního procesu.

Na obr. 19.17 jsou uvedeny výsledky měření ve srovnání s teoretickou křivkou podle [33]. Výsledek demonstruje souhlas experimentu a teorie BCS pro hodnotou energetické mezery  $\Delta = 3.2 k_{\rm B} T_{\rm c}$ .

Vysokoteplotní supravodiče. Jelikož jde o supravodiče II. druhu s vysokými hodnotami kritického pole i teploty, lze ve většině případů použít standardní komerční pulzní spektrometry s Fourierovou transformací ve spojení s dusíkovým či heliovým kryostatem. Jako příklad použití metody NMR v této oblasti uvedeme výběr výsledků studia teplotní závislosti Knightova posuvu v YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> podle [34], kde jsou studována spektra izotopů <sup>17</sup>O a <sup>65</sup>Cu v různých krystalografických konfiguracích a valencích. K měření byly použity práškové vzorky obohacené izotopem kyslíku <sup>17</sup>O, jejichž částice byly magneticky orientovány ve směru osy c (orientace

os a a b jednotlivých částic v kolmé rovině zůstala ovšem náhodná). K měření NMR byl použit standardní pulzní spektrometr a externí pole  $B_0 = 9,03$  T.

Ve struktuře YBa<sub>2</sub>Cu<sub>4</sub>O<sub>8</sub> existují dva typy poloh pro ionty mědi (viz kapitola 14), a to jednak v řetězcích CuO (ionty typu Cu(1)) a jednak v supravodivých bazálních rovinách CuO<sub>2</sub> (ionty typu Cu(2)). Analogicky lze typizovat i polohy iontů kyslíku: ionty O(1) vytváří s Cu(1) řetězce ve směru osy b, zatímco ionty O(2), O(3) jsou lokalizovány v rovinách CuO<sub>2</sub> a ionty O(4) tvoří můstky mezi řetězci a rovinami.

Na obrázku 19.18 jsou uvedeny výsledky měření teplotní závislosti Knightova posuvu izotopu $^{65}{\rm Cu}(2)$ na



Obrázek 19.19 prezentuje teplotní závislost Knightova posuvu spekter izotopu kyslíku <sup>17</sup>O v izotopicky kyslíkem obohaceném vzorku, měřeném za různých podmínek, ve srovnání s výše uvedeným posuvem <sup>65</sup>K<sub>ab</sub>. Podivuhodné je, že všechny složky Knightova posuvu různého charakteru, uvedené v obrázku, klesají s klesající teplotou stejným způsobem k nule, v souladu s BCS teorií. Na druhé straně některé



Obr. 19.18: Teplotní závislost Knightova posuvu izotopu  ${}^{65}$ Cu(1) pro různé orientace vnějšího pole: • -  ${}^{65}K_c$  pro  $\boldsymbol{B_0} \parallel c$ , plné  $\nabla$  -  ${}^{65}K_{ab}$  pro  $\boldsymbol{B_0} \perp c$ , podle [34].



Obr. 19.19: Teplotní závislost Knightova posuvu izotopů  $^{17}$ O a  $^{65}$ Cu pro různé polohy a valence (v redukovaných horizontálních stupnicích) podle [34].

další složky Knightova posuvu izotopu  $^{65}\mathrm{Cu}$  (zde neuváděné), s klesající teplotou k nule neklesají. Rovněž měření teplotní závislosti relaxační doby  $T_1$ , provedená v citované práci, ukázala, že – na rozdíl od kovů – zde vždy neplatí Korringův vztah.

### 19.8.3 Nízkoteplotní termometrie

Použití jaderné magnetizace jako termometrické veličiny, měřené pomocí NMR, je založeno jednak na platnosti Curieova zákona (19.30) pro jadernou magnetizaci a jednak na Korringově vzorci (19.107) mezi spin-mřížkovou relaxační dobou a absolutní teplotou. V jaderné termometrii se tento vzorec obvykle vyjadřuje ve tvaru

$$TT_1 = \kappa , \qquad (19.109)$$

nazývá se korringovým vztahem a veličina  $\kappa$  se nazývá Korringova konstanta. Jak uvidíme, jedním z podstatných kritérrí pro výběr vhodného termometrického materiál je požadavek její teplotní nezávislosti.

Jako nejvhodnější termometrický materiál (viz např. [35]) se jeví izotop <sup>195</sup>Pt v čisté kovové platině<sup>24</sup>; při požadavku přesnosti  $10^{-2}$  pro platnost Curieova zákona ve tvaru (19.30), t.j. s využitím jen prvního členu v rozvoji Brillouinovy funkce, plyne pro platinu požadavek  $B_0/T = 400$  T/K, což pro pole  $B_0 = 4$  mT odpovídá teplotě ~ 10 mK. V principu je možné měřit jadernou magnetizací kontinuálnímí i pulzními metodami.

Použití kontinuální metody vychází z kontinuálního řešení Blochových rovnic - viz článek 19.7.3; speciálně, ze vztahu (19.82) lze jednoduše vyjádřit amplitudu absorpční složky transverzální magnetizace  $M''(\omega)$ . V rezonanci, tj. v případě  $\omega =$ 

 $<sup>^{24}{\</sup>rm Kromě}$  právě citované práce je možné se o vlastnostech jiných materiálů, i o kritériích jejich výběru, poučit v [1].

 $\omega_0$ , pro ni platí

$$M''(\omega_0) = M_0(T) \frac{\gamma_{\rm N} B_1 T_2}{1 + \gamma_{\rm N}^2 B_1^2 T_1 T_2} = M_0(T) \frac{\omega_1 T_2}{1 + \omega_1^2 T_1 T_2} , \qquad (19.110)$$

kde  $\omega_1 = \gamma_N B_1$  a  $M_0(T) = \chi_0(T) B_0$  je statická jaderná magnetizace, splňující Curieův zákon (19.30). Zavedeme-li veličinu  $T_{\rm SK}$  s rozměrem teploty

$$T_{\rm SK} = \gamma_{\rm N}^2 B_1^2 \kappa T_2 = \omega_1^2 \kappa T_2 , \qquad (19.111)$$

lze magnetizaci  $M''(\omega_0)$  vyjádřit ve tvaru

$$M''(\omega_0) = M_0(T) \ \frac{T}{\kappa \omega_1} \ \frac{T_{\rm SK}}{T + T_{\rm SK}} \ . \tag{19.112}$$

Konečně, uplatníme-li pro magnetizaci  $M_0$  Currieův zákon (19.30), dostaneme důležitý výsledek

$$M''(\omega_0) = \frac{\omega_1 T_2 C}{T + T_{\rm SK}} , \qquad (19.113)$$

udávající teplotní závislost měřené veličiny  $M''_y$ . Tento výsledek ukazuje, že vysokofrekvenční pole má vliv nejen na amplitudu měřené magnetizace, ale deformuje i teplotní stupnici danou Curieovým zákonem (19.30). Použitá úroveň vysokofrekvenčního pole musí být tedy co nejnižší nejen s ohledem na ohřev vířivými proudy, ale také s ohledem na nasycování termometru vysokou hodnotou parametru  $T_{\rm SK}$ ; v případě termometru <sup>195</sup>Pt lze při nízkých teplotách úroveň pole snížit až na  $10^{-8}$ T, při níž se vliv  $T_{\rm SK}$  projeví až při teplotách nižších než 50  $\mu$ K (za předpokladu dostatečné stability aparatury [35]). Hlavní nevýhodou kontinuální metody NMR termometrie však je nutnost kalibrace nejen vůči teplotě, ale i vůči úrovni vysokofrekvenčního pole, což je hlavní důvod, proč je tato metoda v praxi jen zřídka používána. V protikladném postavení je naopak pulzní NMR termometrie, která má patrně v milikelvinové a mikrokelvinové oblasti dominantní postavení.

Hlavním důvodem je možnost využit při měření metodu vzorkovacích pulzů – viz obr. 19.12 v článku 19.7.3 – umožňující současně změřit statickou jadernou magnetizaci, splňující Curieův zákon, a spin mřížkovou relaxační dobu  $T_1$ , která v kovech splňuje Korringův vztah. Při užití této metody, následuje po odeznění úvodního excitačního pulzu  $\pi/2$  signál volné precese, jehož počáteční amplituda je úměrná statické magnetizaci  $M_0$ . Následující vzorkovací pulzy (které otáčí vektor magnetizace o malý úhel  $\vartheta$  zpět do příčné roviny) vyvolávají vznik signálů s počáteční amplitudou

$$\Delta M_{\vartheta} = M_0 \sin \vartheta \simeq M_0 \vartheta = M_0 \omega_1 t_{\rm p} = M_0 \gamma_{\rm N} B_1 t_{\rm p} , \qquad (19.114)$$

které sledují relaxační dobu  $T_1$ .

Podobně jako při aplikaci kontinuální metody NMR, je ovšem nutné i zde, při volbě parametrů pulzní série, brát ohled na to, aby detekovaný signál NMR

603

19.0

v požadované míře reprezentoval fyzikální parametry měřeného vzorku a také i na minimalizaci ohřevu systému excitačními pulzy. Za situace obvyklé pro kovy při nízkých teplotách, kdy platí  $T_1 \gg T_2$ , přičemž  $T_2$  je teplotně nezávislá, lze formulovat podmínky, zaručující systematickou chybu při měření teploty menší než 1%, které lze shrnout do následujících bodů:

(1). Pro pokrytí celého spekra signálu NMR spektrem excitačního pulzu je nezbytné volit délku excitačního pulzu  $t_{\rm p,max} \leq 2T_2$ . (Jelikož v případě platiny bývá neza-nedbatelné nehomogenní rozšíření, je třeba použít alternativní podmínku  $t_{\rm p,max} \leq 2T_2^* \sim 1500 \ \mu s \ [35]$ ).

(2). Nehomogenita a stabilita vnějšího pole $B_0$  by měla být nižší než šířka NMR spekra.

(3). Případné změny teploty způsobené excitačními pulzy by měly být dostatečně malé, aby neovlinily příliš spin-mřížkovou relaxaci; splnění této podmínky při aplikaci pulzní techniky NMR je komplikováno tím, že je třeba rozlišovat mezi rovnovážnou teplotou T celého systému a okamžitou teplotou vodivostních elektronů  $T_{\rm e}$ , která je určující pro rychlost relaxačního procesu<sup>25</sup>, a která se mění v průběhu excitačního pulzu díky malé tepelné kapacitě soustavy vodivostních elektronů. Podrobnější diskuse [35] ukazuje, že po skončení excitačního pulzu  $\pi/2$ , který je obvykle charakterizován úrovní excitace  $\gamma_{\rm N}B_1 \sim 1/(2T_2)$ , pro teplotu vodivostních elektronů dostáváme

$$T_{\rm e}(a) \le 10^{-3} \kappa / 2T_2$$
 (19.115)

a pro teplotu po ukončení krátkého vzorkovacího pulzu, pro jehož excitační úroveň obvykle platí  $\gamma_{\rm N}B_1 \le 10/(2T_2),$ vychází

$$T_{\rm e}(b) \le 0.1\kappa/2T_2$$
, (19.116)

přičemž se změny těchto teplot ustavují s charakteristickou dobou  $\tau\approx 10^{-8}$ s, tedy s dobou mnohem kratší než doby trvání pulzů  $t_{\rm p}$ ; pro platinový teploměr platí $T_{\rm e}(a)\sim 1$  mK,  $T_{\rm e}(b)\sim 0.2$ K.

Jak bylo již řečeno, platina se jeví jako nejvhodnější materiál pro termometrii velmi nízkých teplot. Její použitelnost do co nejnižších teplot klade značné nároky na čistotu, především na přítomnost paramagnetických příměsí; zejména je třeba vyloučit zvýšení nepřímé mezijaderné vazby prostřednictvím vodivostních elektronů, které může vést k jadernému uspořádání – srovn. stať 19.4. Kritériem je co nejnižší hodnota Korringovy konstanty a také její teplotní nezávislost. Pro snížení vlivu skinefektu se zpravidla neužívá kompaktní vzorek – optmimální se jeví vzorek složený z monodisperzních, vzájemně izolovaných částic o velikosti srovnatelné s hloubkou vniku.

Přesto, že jaderná magnetizace i spin mřížková relaxační doba jsou "absolutní" termoměrné veličiny, je v praxi třeba i puzní NMR termometr kalibrovat, neboť v praxi nelze s dostatečnou přesností určit kvantitativní vztah mezi měřenou jadernou magnetizací vzorku a napětím indukovaným ve snímací cívce. Výhodou je,

 $<sup>^{25}</sup>$ Při použití kontinuální techniky je díky dlouhodobému působení vysokofrekvenčního pole dostatek času k ustavení rovnovážného stavu, při němž je $T=T_{\rm e}.$ 

že pulzní NMR termometr umožňuje relizovat kalibraci bez dalšího externího termometru tím, že se současně při dané konstantní teplotě  $T_{\rm cal}$  změří relaxační doba  $^{\rm (cal)}T_1$  a napětí na snímací cívce  $U_{\rm cal}$ , odpovídající magnetizaci vzorku při této kalibrační teplotě. Změříme-li pak také napětí U(T), odpovídajíci magnetizaci vzorku  $M_0(T)$  při měřené teplotě T, můžeme s využitím Korringovy relace (19.109), tuto teplotu určit ze zřejmého vztahu

$$T = \frac{\kappa}{(\text{cal})T_1} \frac{U_{\text{cal}}}{U(T)} .$$
(19.117)

Již několik desetiletí jsou komerčně dostupné samostatné pulzní NMR termometry řady PLM [36]; v posledních letech různé firmy nabízejí i adaptery k osobním počítačům, včetně potřebného programového vybavení.

#### 19.9 Literatura

- [1] R. S. Šafrata, Fyzika nízkých teplot, Matfyzpress, Praha (1998).
- [2] A. Abragam, Nuclear magnetism, Cambridge University Press (1991).
- [3] N. J. Stone, Table of Nuclear Magnetic Dipole and Electric Quadrupole Moments, Oxford University (www.nndc.bnl.gov/publications/preprints/nuclear-moments.pdf) (2001).
- [4] C. P. Slichter, Principles of Magnetic Resonance, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York (1978).
- [5] J. Formánek, Úvod do kvantové teorie, Academia, Praha (2004).
- [6] H. Kuzmany, Solid state spectroscopy, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York (1998).
- [7] H. Štěpánková, Základy jaderné magnetické rezonance, Karolinum, Praha (2010).
- [8] B. Sedlák, I. Štoll, Elektřina a magnetizmus, Academia, Praha (2002).
- [9] J. Brož, V. Roskovec, Základní fyzikální konstanty, SPN, Praha (1988).
- [10] Ch. Kittel, Úvod do fyziky pevných látek, Academia, Praha (1985).
- [11] M. Odehnal, Československý časospis pro fyziku A33, 209 (1983).
- [12] D. C. Mattis, The Theory of Magnetism Made Simple, World Scientific, Singapore (2009).
- [13] S. Krupička, Fyzika feritů a příbuzných magnetických kysličníků, Academia, Praha (1969).
- [14] B. Sedlák, R. N. Kuzmin, Jaderné rezonanční metody ve fyzice pevných látek, Státní pedagogické nakladatelství, Praha (1978).
- [15] M. A. Ruderman, Ch. Kittel, Physical Review 96, 99 (1954).
- [16] N. Bloembergen, T. J. Rowland, Phys. Rev. 97, 1679 (1955).
- [17] A. S. Oja, O. V. Lounasmaa, Rev. Mod. Phys. 69, 1 (1997).
- [18] K. I. Juntunen, J. T. Tuoriniemi, J. Low Temp. Phys. 141, 235 (2005).
- [19] A. Abragam, B. Bleaney, Electron Paramagnetic Resonance of Transition Ions, Clarendon Press, Oxford (1970).
- [20] J. Kuriplach, J. Šebek, R.M. Mueller, J. Low Temp. Phys. 120, 401 (2000);
   J. Šebek, R.M. Mueller, R. Simons, J. Kuriplach, J. Low Temp. Phys. 120, 435 (2000).
- [21] M. Kohl, M. Odehnal, M. Petříček, R. Tichý, S. Šafrata J. Low Temp. Phys. 72, 345 (1988).
- [22] L. Skrbek, J. Sebek, S. Safrata, Fiz. Nizk. Temp. 15, 882 (1989).

- [23] J. C. Wheatley, Rev. Mod. Phys. 47, 444 (1975).
- [24] A. L. Thomson, H. Meyer, E. D. Adams, Phys. Rev. 128, 509 (1962).
- [25] A. C. Anderson, H. Hart, J. C. Wheatley, ??????Ohio State Univ. Press (1960).
- [26] W. M. Fairbank, W. B. Ard, G. K. Walters, Phys. Rev. 95, 566 (1954).
- [27] M. Weger, Pure and Applied Chemistry 32, 325 (1972).
- [28] Physical Properties of High Temperature superconductors II, ed. D. M. Ginsberg (kap. 5, C.H. Penningthon, C.P. Slichter: NR Studies of  $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ), World Scientific (1996).
- [29] R. H. Hammond, G.M. Kelly, Rev. Mod. Phys. 36, 185 (1964).
- [30] K. Yosida, Phys. Rev. 110, 769 (1958).
- [31] R. H. Hammond, G.M. Kelly, Phys. Rev. Lett. 18, 156 (1967).
- [32] Y. Masuda, A. G. Redfield, Phys. Rev. 125, 159 (1962).
- [33] L. C. Hebel, C. P. Slichter, Phys. Rev. 113, 1504 (1962).
- [34] M. Bankay, M. Mali, J. Roos, B. Brinkmann, Phys. Rev. B 50, 6416 (1994).
- [35] G. Eska, J. Low Temp. Phys. 73, 207 (1994).
- [36] Picowatt (RV-Elektroniikka Oy), www.picowatt.fi.

# 20 Elektronový transport v kvantových systémech

P. Středa

Elektrony mají duální charakter. Na jedné straně vykazují vlastnosti charakteristické pro vlnu, na druhé straně se chovají jako částice konečných rozměrů. Jejich kvantově-mechanickým popisem je tedy vlnový balík, který lze charakterizovat dvěma základními parametry: vlnovou délkou  $\lambda$  majoritní vlny a velikostí vlnového balíku, reprezentovanou koherentní délkou  $\lambda_{\phi}$ .

Klasickou analogií koherentní délky je střední vzdálenost, kterou částice urazí mezi dvěma po sobě následujícími neelastickými srážkami. Ty jsou vyvolány interakcí částice s dynamickými fluktuacemi prostředí, například s fonony, jejichž četnost roste s teplotou. Představu o teplotní závislosti koherentní délky  $\lambda_{\phi}$  lze získat na základě čistě klasické úvahy. Předpokládejme, že je elektron v čase t = 0 lokalizován v bodě  $\mathbf{r} = (0, 0, 0)$ . S rostoucím časem se od své počáteční polohy



Obr. 20.1: Schematické znázornění vlnového balíku.

vzdaluje. Předpokládejme, že díky elastickému rozptylu, který nenarušuje koherenci, koná v prostoru náhodný pohyb. Ten lze popsat pomocí difúzní rovnice a rovnice kontinuity, které mají pro homogenní systémy následující obecný tvar:

$$\boldsymbol{j} = eD \, \boldsymbol{\nabla} n(t, \boldsymbol{r}) \quad ; \quad e \, \frac{dn(t, \boldsymbol{r})}{dt} = \operatorname{div} \boldsymbol{j} \qquad \Rightarrow \qquad \frac{dn(t, \boldsymbol{r})}{dt} = D \,\Delta \, n(t, \boldsymbol{r}) \;,$$
(20.1)

kdeeoznačuje absolutní hodnotu náboje elektronu, D je difúzní koeficient, j je proudová hustota a $n(t, \boldsymbol{r})$  je pravděpodobnost, že se částice v časet bude nacházet v poloze $\boldsymbol{r}$ . Řešením je distribuční funkce

$$n(t, \mathbf{r}) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp\left\{-\frac{r^2}{4Dt}\right\} , \qquad (20.2)$$

která reprezentuje klasický popis rozplývání vlnového balíku s časem, jevu známého z kvantové mechaniky. Při neelastické srážce částice změní energii. Vzhledem k jejímu vlnovému charakteru je změna energie doprovázena změnou vlnové délky  $\lambda$  a dojde tak ke ztrátě koherence. Označme dobu, za kterou v průměru dojde k jedné neelastické srážce elektronu jako  $\tau_{\phi}$ . Při nízkých teplotách lze předpokládat, že se jedná o srážky kvazielastické, které jen málo mění energii elektronu. Ty jsou však možné pouze tehdy, jsou-li v těsné blízkosti stavu elektronu stavy neobsazené. Jsou

tedy omezeny na oblast energetického intervalu  $k_{\rm B}T$  v okolí Fermiho meze a  $\tau_{\phi}$  je tedy nepřímo úměrné  $k_{\rm B}T$ . Času  $\tau_{\phi}$  odpovídá pološířka elektronové distribuční funkce (20.2), kterou lze ztotožnit s velikostí vlnového balíku. Pro koherentní délku  $\lambda_{\phi}$  dostaneme

$$\lambda_{\phi}^2 \equiv 4D\tau_{\phi} \quad ; \quad \tau_{\phi} \sim \frac{\hbar}{2k_{\rm B}T} \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_{\phi} \sim \sqrt{\frac{\hbar D}{k_{\rm B}T}} \quad . \tag{20.3}$$

Uvedený model dobře charakterizuje velmi neuspořádané systémy, ve kterých je pohyb elektronů možno považovat za difúzní a koherentní délka  $\lambda_{\phi}$  je mnohem větší, než střední volná dráha elektronu  $\lambda_e$ . Ta je definována jako střední vzdálenost, kterou elektron urazí, než je změnu směru jeho pohybu vyvolanou elastickými srážkami možno považovat za náhodnou. Výše popsaný model je velmi zjednodušený. Obecně závisí doba mezi neelastickými srážkami na všech excitacích, které se v daném prostředí mohou vyskytovat a jsou ovlivňovány jak rozměrovými efekty tak i vzájemnou interakcí elektronů. Popsaná teplotní závislost je však schopna alespoň kvalitativně vysvětlit podstatnou část měřených závislostí na neuspořádaných kovových systémech za velmi nízkých teplot.

Difúzní koeficient D úzce souvisí s vodivostí  $\sigma$ . Vyjádříme-li gradient elektronové hustoty jako součin hustoty stavů na Fermiho mezi  $g(E_{\rm F})$  a gradientu chemického potenciálu  $\mu$ , můžeme difúzní rovnici psát v následujícím tvaru

$$\boldsymbol{j} = e D \boldsymbol{\nabla} n(\boldsymbol{r}) = e^2 D g(E_{\rm F}) \frac{\boldsymbol{\nabla} \mu}{e} \equiv \sigma \boldsymbol{\mathcal{E}} \quad ; \quad \frac{\boldsymbol{\nabla} \mu}{e} \to \boldsymbol{\mathcal{E}} , \qquad (20.4)$$

kde elektrické pole  $\mathcal{E}$  bylo ztotožněno s  $\nabla \mu/e$ . Tato substituce je v souladu se závěrem obecné teorie elektronového transportu, že lineární odezva na elektrické pole musí být stejná jako odezva na gradient chemického potenciálu. Této ekvivalence bude v následujícím výkladu často využíváno. Vztah mezi vodivostí  $\sigma$  a difúzním koeficientem D definovaný rovnicí (20.4) je obvykle nazýván jako Einsteinova relace. V systému částic nesoucích elektrický náboj vyvolá elektrické pole vždy nenulový gradient nábojové hustoty a elektrické pole je tedy vždy doprovázeno gradientem chemického potenciálu. Připomeňme, že měřený napěťový rozdíl je dán rozdílem elektro-chemického potenciálu, tedy na  $\mathcal{E} + \nabla \mu/e$ . Vzhledem k ekvivalenci lineární odezvy systému na obě složky gradientu elektro-chemického potenciálu postačí analyzovat odezvu pouze na jednu z nich, i když odpovídající teoretické popisy bývají formálně velmi odlišné.

Velikost vlnového balíku popisujícího elektron se zvětšuje s klesající teplotou. Svědčí o tom experimenty založené na sledování interferenčních jevů, typických pro koherentní systémy. Neelastické srážky mění energii elektronu, jeho vlnovou délku, a jedním z důsledků jejich potlačování je rostoucí vliv interference na elektronový transport s klesající teplotou. Projevy vlnového charakteru elektronů jsou potlačovány i jejich vzájemnou interakcí. Vzhledem k tomu, že se jedná o nabité částice, je to především coulombická interakce. Ta vede k efektivní lokalizaci elektronů, jinými slovy ke zmenšování koherentní délky. Důsledkem je například Wignerova krystalizace, při které elektronový plyn přejde do krystalického stavu. Typickým projevem je i tzv. coulombická blokáda.

Kvantový charakter elektronového transportu se silně projeví, vyřízneme-li ze systému, ve kterém má elektron koherentní délku  $\lambda_{\phi}$ , vzorek o rozměrech srovnatelných s $\lambda_{\phi}$ . V takovém případě mluvíme o mezoskopických systémech. Již z definice je zřejmé, že jde o systémy, ve kterých je silně potlačen neelastický rozptyl, a tedy i disipace energie. Nelze tedy použít principu lokální rovnováhy, který je výchozím předpokladem pro popis nerovnovážných procesů v makroskopických systémech. K disipaci energie bude tedy zřejmě docházet především až v elektrických přívodech, které jsou makroskopických rozměrů. Adekvátním popisem je teorie Landauera-Büttikera, která popisuje elektronový transport jako rozptylový problém a elektrický proud je určován jako odezva systému na rozdíl chemických potenciálů mezi přívody. Typickými projevy vlnového charakteru elektronů v mezoskopických systémech je slabá lokalizace a Aharonův-Bohmův jev, které jsou důsledkem interferenčních jevů.

Pokud jsou některé rozměry vzorku srovnatelné s vlnovou délkou  $\lambda$ , je energetické spektrum elektronů silně modifikováno rozměrovým kvantováním. Rozdíl energií  $\Delta E$  mezi nejbližšími hladinami roste s klesajícími rozměry vzorku. Pokud bude  $\Delta E$  větší, než je tepelná energie  $k_{\rm B}T$ , bude také transport elektronů rozměrovým kvantováním ovlivněn. Základním projevem je kvantování konduktance, která je definována jako převrácená hodnota odporu vzorku. Také kvantování energie elektronů magnetickým polem bude mít při nízkých teplotách významný efekt, jehož důsledkem je i kvantový Hallův jev.

Cílem této kapitoly není podrobný a důsledný výklad výše zmíněných jevů, ale vysvětlení jejich fyzikální podstaty na základě jednoduchých modelových systémů.

## 20.1 Nízkorozměrné elektronové systémy

Systémy malých rozměrů, ve kterých hraje významnou roli rozměrové kvantování, se vyskytují i v přírodě. Jsou to například velmi tenké krytalky ve tvaru niti, tzv. whiskery (angl. *whiskers*), makromolekuly a především uhlíkové struktury –fulereny, uhlíkové trubičky (angl. *carbon nanotubes*), uhlíkové jedno a víceatomové vrstvičky (angl. *graphene*). Významné jsou uměle vytvářené systémy, které umožňují získávat struktury požadovaných vlastností. Základem jsou tenké vodivé vrstvičky, z nichž se pomocí litografických metod "vyřezávají" požadované struktury.

Nejtenčími vodivými vrstvičkami jsou dvojrozměrné elektronové systémy, které jsou vytvářeny na rozhraní dvou nevodivých materiálů. První struktura s dvojrozměrným elektronovým plynem byla vytvořena zdokonalením součástky Si-MOS FET, polem řízeného transistoru. Tato vrstevnatá struktura je tvořena vhodně dopovaným křemíkem, který je při nízkých teplotách nevodivý. Ten je pokryt vrstvou izolátoru SiO<sub>2</sub> a dále i kovovou vrstvou, hradlem (angl *gate*). Je-li na hradlo vloženo dostatečně velké napětí, elektrické pole napříč vrstevnatým systémem vytvoří na rozhraní mezi křemíkem a izolátorem trojúhelníkovou potenciálovou jámu, ve které dojde k hromadění nositelů náboje – elektronů či děr. Ty se mohou pohybovat

volně podél rozhraní, ale ve směru kolmém jsou vázány ve stavech daných tvarem potenciálové jámy. Ve směru kolmém jsou energetické stavy kvantovány, s energií odpovídající vázaným módům ( $E_n$ , n = 0, 1,...). Vlastní energii elektronů pak můžeme psát ve tvaru

$$E_{\rm n}(\mathbf{k}) \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + E_{\rm n} , \qquad (20.5)$$

kde  $m^*$  je efektivní hmotnost a  $\mathbf{k} \equiv (k_x, k_y)$  označuje dvojrozměrný vlnový vektor. Vliv periodického potenciálu je zahrnut v přiblížení efektivní hmotnosti, které je možno použít tehdy, je-li vlnová délka elektronů  $\lambda = 2\pi/k$  mnohem větší než mřížková konstanta. Tato podmínka je splněna v okolí hran energetických pásů a je tedy aplikovatelná především na polovodičové materiály. Obecně nemusí být efektivní hmotnost izotropní, jak je pro zachování jednoduchosti předpokládáno. Pokud je koncentrace nositelů dostatečně nízká, aby byly obsazeny pouze stavy s nejnižší energií vázaného modu  $E_0$ , mluvíme o dvojrozměrném elektronovém plynu. V případě, že jsou obsazeny i stavy s vyššími energiemi vázaných módů, jde o tzv. kvazidvojrozměrné systémy. Podobné elektronové systémy lze realizovat i v celé řadě dalších vrstevnatých struktur.



Obr. 20.2: a) Schéma průběhu hran pásů zakázaných energií napříč heterostrukturou Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs. Prázdné kroužky označují neionizované příměsové hladiny, + ionizované donory a - ionizované akceptory. b) Detail okolí trojúhelníkové potenciálové jámy tvořené hranou vodivostního pásu. Čárkovaně je znázorněna vlnová funkce nejnižšího transverzálního módu s energií  $E_0$ .

Významné místo v přípravě dvojrozměrných elektronových systémů zaujímá technologie molekulární epitaxe, která umožňuje kontrolovaný růst vrstevnatých struktur po jednotlivých atomových rovinách. Vhodným dopováním lze na rozhraní dvou polovodičů s různou šířkou pásů zakázaných energií vytvořit také trojúhelníkovou potenciálovou jámu, jak je znázorněno na obr. 20.2. Vzhledem k tomu, že rozhraní je téměř dokonalé – atomové roviny jednoho z polovodičů jsou vystřídány rovinami druhého – mají nositelé náboje vysokou pohyblivost. Na rozhraní mezi GaAs a  $Al_xGa_{1-x}As$  bylo dosaženo nejvyšších hodnot elektronové pohyblivosti,

řádu 10<sup>7</sup> cm<sup>2</sup>V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> pro elektronové koncentrace ~10<sup>11</sup> cm<sup>-2</sup>. Přidáním kovové vrstvy, podobně jako u součástky typu MOS FET, lze přiloženým napětím měnit hloubku potenciálové jámy, a tedy i koncentraci nositelů. Vzhledem k tomu, že pás zakázaných energií Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As je mnohem širší než pás v GaAs, je elektronový plyn umístěn v atomových vrstvách GaAs a jeho efektivní hmotnost je dána prostředím GaAs,  $m^* = 0,067 m_0$ . Vrstvičku GaAs tvořeného několika atomovými vrstvami lze také umístit mezi vrstvy Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As a tím vytvořit dvojrozměrný plyn s jiným tvarem potenciálové jámy. Na rozdíl od jednorozměrných i třírozměrných systémů nezávisí hustota stavů na energii. Je dána konstantou  $2m^*/(h\hbar)$ , ve které faktor 2 reprezentuje spinovou degeneraci.

Litografické metody, především kombinace optické a elektronové litografie, umožňují selektivní odleptávání vrstevnatých struktur a vytváření vodivých struktur nejrůznějších tvarů majících charakteristické rozměry několika desítek nanometrů. Různé tvary vodivých struktur lze vytvořit i pomocí vytvarovaného hradla. Přiložením vhodného napětí lze z oblasti pod hradlem vytlačit elektronový plyn a tak formovat vodivou strukturu na polovodičovém rozhraní. Byly to právě dvojrozměrné systémy na bázi vrstevnatých struktur tvořených  $Al_xGa_{1-x}As$  a GaAs, na kterých byla demonstrována většina jevů kvantového transportu v té nejčistší podobě.

Pro získání představy, jak malé musí být vzorky, aby na nich byl pozorovatelný vliv rozměrového kvantování, uvažujme čtvercový vzorek o hranách délky L, vyříznutý z dvojrozměrného elektronového systému. Vlastní hodnoty energie takové (nekonečně hluboké) dvojrozměrné potenciálové jámy jsou

$$E(\mathbf{n}_{\mathbf{x}},\mathbf{n}_{\mathbf{y}}) = \frac{\hbar^2 \pi^2 (\mathbf{n}_{\mathbf{x}}^2 + \mathbf{n}_{\mathbf{y}}^2)}{2m^* L^2} , \qquad (20.6)$$

kde n<sub>x</sub> a n<sub>y</sub> nabývají celočíselných hodnot. Vlivem konečných rozměrů vzorku dochází ke kvantování původně spojitého spektra,  $(k_x, k_y) \rightarrow \pi (n_x, n_y)/L$ . Průměrná vzdálenost mezi energetickými hladinami je přibližně dána výrazem:

$$\Delta E \sim \frac{\hbar^2 \pi}{2m^* L^2} \,. \tag{20.7}$$

Pro elektronový plyn v GaAs a jámu o straně  $L = 0,1 \ \mu\text{m}$  je  $\Delta E \sim 0,089 \text{ meV}$ . Vzhledem k tomu, že tepelná energie  $k_B T \sim 0,086 \text{ meV} \cdot T[\text{K}]$ , lze usoudit, že pro takový systém ochlazený na teplotu 1 K, lze vliv rozměrového kvantování pozorovat na vzorcích o rozměrech cca 100 nm. Vzorky o rozměrech větších než 1  $\mu\text{m}$  lze pak spíše považovat za vzorky makroskopické.

Velmi malá efektivní hmotnost elektronů v GaAs umožňuje pozorovat projevy kvantového transportu ve strukturách relativně velkých rozměrů. Například šířka potenciálové jámy s dvojrozměrným elektronovým plynem může být i 10 nm, tedy obsahovat několik desítek atomových vrstev GaAs. Materiály, v nichž je efektivní hmotnost elektronů větší, vyžadují vytvářet struktury menších rozměrů.

Jediným známým přírodním systémem s dvojrozměrným elektronovým plynem je graphene, jednoatomová vrstvička atomů uhlíku s krystalovou strukturou včelí

plástve. Stočením do trubičky o průměru několika nanometrů vznikne jednorozměrný systém, kvantový drát. Na rozdíl od uměle vytvářených struktur na bázi polovodičů si udržují svůj nízkorozměrný charakter až do pokojových teplot.

V rámci fyziky nízkých teplot je třeba se zmínit i o dvojrozměrném elektronovém plynu indukovaném na povrchu kapalného <sup>4</sup>He vloženým napětím [1, 2], podrobněji popsaném v kapitole o iontech v kvantových kapalinách. Pokud není vložené napětí příliš vysoké, dojde k vytvoření elektronové vrstvičky nad povrchem helia a hmotnost elektronů odpovídá v tomto případě hmotnosti volných elektronů,  $m_0$ . Typické koncentrace elektronů jsou řádu několika jednotek  $10^8$  cm<sup>2</sup>. Dominantními interakcemi jsou interakce s dynamickými excitacemi na povrchu kapalného helia a s atomy heliového plynu nad kapalinou. Snižováním teploty dochází k potlačování četnosti srážek a při teplotě pod 0.1 K je tlak nasycených heliových par prakticky nulový a jediným srážkovým mechanismem zůstávají tepelně excitované výškové variace povrchu supratekutého <sup>4</sup>He, což jsou kapilární povrchové vlny (angl. *ripp*lons). Za těchto podmínek je dosahováno extrémně vysoké pohyblivosti, až  $10^8$  $cm^2V^{-1}s^{-1}$ . Díky silnému vlivu coulombické interakce se však elektrony chovají více méně jako klasické částice a při dostatečně nízkých teplotách vytvářejí hexagonální krystalickou strukturu [3]– jde o jev Wignerovy krystalizace. Při překročení kritické hodnoty vkládaného napětí se elektrony vnoří do kapaliny a vznikají poměrně silně lokalizované povrchové stavy tvořící dvojrozměrný elektronový systém s velmi nízkou pohyblivostí.

## 20.2 Transport jako srážkový problém

Nejjednodušším systémem vykazujícím transportní vlastnosti je kvantový drát, o jehož průřezu předpokládáme, že je nanometrických rozměrů. Pro studium jeho transportních vlastností je nutno jeho konce spojit s baterií elektrickými přívody, které jsou dobrými kovovými vodiči makroskopických rozměrů. Hustota stavů v přívodech je tedy mnohem větší než v samotném vzorku a přívody spolu s kontakty lze považovat za rezervoáry nosičů náboje, elektronů. Rozdíl chemických potenciálů na kontaktech, přesněji elektro-chemických potenciálů, vyvolá tok elektronů, daný tendencí celého systému docílit celkové rovnováhy a vyrovnat hodnoty potenciálů v přívodech. Elektrony mohou vzorkem projít nebo se odrazit od rozptylových center uvnitř vzorku a vrátit se zpět do přívodu, kterým se do vzorku dostaly.

Kvantově-mechanický popis takového procesu vyžaduje existenci oblastí, pro které jsme schopni přesně definovat elektronové stavy. Z toho důvodu se pro popis transportu reálný systém nahrazuje systémem, ve kterém jsou mezi studovaný vzorek s potenciálovými nehomogenitami a elektrické kontakty vloženy tzv. ideální přívody, jak je znázorněno na obr. 20.3a. Jsou to homogenní kvantové dráty o stejném průřezu jako studovaný drát, ve kterých nedochází k rozptylu elektronů, jsou to tedy ideální vodiče.

Vlastní stavy ideálních vodičů jsou v r-reprezentaci dány součinem rovinné vlny ve směru osy drátu (řekněme ve směru  $\hat{x}$ ) a transverzálních modů  $\chi_n(y, z)$ 

$$\Psi_{n,k_{x}}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ik_{x}x} \chi_{n}(y,z) . \qquad (20.8)$$


Obr. 20.3: Schéma elektronového transportu jako srážkového problému. Na obrázku c) jsou zobrazena energetická spektra v ideálních přívodech. Silně jsou vyznačeny obsazené stavy.

Vlastní hodnoty energie  $E_n(k_x)$  a střední hodnoty rychlosti  $v_n(k_x)$  jsou dány vztahy

$$E_{\rm n}(k_{\rm x}) = \frac{\hbar^2 k_{\rm x}^2}{2m^*} + E_{\rm n} \qquad ; \qquad v_{\rm n}(k_{\rm x}) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE_{\rm n}(k_{\rm x})}{dk_{\rm x}} = \frac{\hbar k_{\rm x}}{m^*} \,. \tag{20.9}$$

Energetické spektrum je složeno z větví, které jsou funkcí  $k_{\rm x}$ . Jejich minima jsou určena transversálními mody danými tvarem potenciálové jámy, která definuje i průřez vodiče. Ze symetrie vzhledem k inverzi času obecně vyplývá, že energie je sudou funkcí  $k_{\rm x}$  na rozdíl od rychlosti, která je funkcí lichou. Z levého kontaktu, rezervoáru, se do studovaného vzorku dostávají elektrony s kladnou rychlostí,  $k_{\rm x} > 0$ , zatímco elektrony vstupující zprava mají rychlost opačnou a  $k_{\rm x} < 0$ .

Uvažujme elektron v levém ideálním přívodu ve stavu charakterizovaném vlnou  $|n, k_x\rangle$  s kladnou hodnotou  $k_x$ , který se tedy pohybuje zleva doprava. Potenciálové fluktuace uvnitř vzorku jsou zodpovědné za elastický rozptyl elektronu, jak je schematicky znázorněno na obr. 20.3b pro případ jednorozměrného vodiče s potenciálem V(x). Elektronová vlna částečně projde vzorkem do stavu daného lineární

kombinací vlastních funkcí  $|n', k'_x\rangle$  pravého ideálního přívodu. Vzhledem k tomu, že uvažujeme pouze elastický rozptyl, jde o stavy se stejnou energií jako má vlna přicházející,  $E_n(k_x)$ . Vlna odcházející pravým přívodem bude mít následující obecný tvar

$$\Psi_{\mathbf{n},k_{\mathbf{x}}}^{(2)}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \sum_{\mathbf{n}'} t_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} e^{ik_{\mathbf{x}}^{(\mathbf{n}')}x} \chi_{\mathbf{n}'}(y,z) \qquad ; \qquad E_{\mathbf{n}}(k_{\mathbf{x}}) = E_{\mathbf{n}'}(k_{\mathbf{x}}^{(\mathbf{n}')}) ,$$
(20.10)

kde  $k_x^{(n')} > 0$  označuje vlnové číslo stavu v n'-té větvi energetického spektra, který má stejnou energii jako vlna přicházející,  $|n, k_x\rangle$ . Transmisní amplitudy  $t_{n,n'}$  jsou dány rozptylem přicházející vlny do stavů  $|n', k_x^{(n')}\rangle$  a index 2 označuje, že se jedná o stav v pravém ideálním přívodu. Část přicházející vlny se odrazí zpět a vlnová funkce v levém ideálním přívodu, označená indexem 1, bude složena z vlny přicházející a odražené

$$\Psi_{\mathbf{n},k_{\mathbf{x}}}^{(1)}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left\{ e^{ik_{x}x} \chi_{\mathbf{n}}(y,z) + \sum_{\mathbf{n}'} r_{\mathbf{n},\mathbf{n}'} e^{-ik_{\mathbf{x}}^{(\mathbf{n}')}x} \chi_{\mathbf{n}'}(y,z) \right\} , \qquad (20.11)$$

kde stavy  $|\mathbf{n}', k_{\mathbf{x}}^{(\mathbf{n}')}\rangle$  v tomto případě označují vlastní stavy v levém ideálním přívodu se zápornou hodnotou vlnového čísla  $k_{\mathbf{x}}^{(\mathbf{n}')}$ . Reflexní amplitudy  $r_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}$  i transmisní amplitudy  $t_{\mathbf{n},\mathbf{n}'}$  jsou dány řešením Schödingerovy rovnice, které vyhovuje asymptotickým tvarům vlnových funkcí v ideálních přívodech danými vztahy (20.10) a (20.11). Amplitudy jsou obecně komplexní čísla, protože při rozptylu může docházet ke změně fáze vlnové funkce.

Pravděpodobnost $T_{\rm n}(k_{\rm x}),$ že dopadající elektron ve stavu $|{\rm n},k_{\rm x}\rangle$ projde vzorkem, je pak dána následujícím vztahem

$$T_{\rm n}(k_{\rm x}) = \sum_{\rm n'} |t_{\rm n,n'}|^2 = \sum_{\rm n'} |t_{\rm n',n}|^2 . \qquad (20.12)$$

Pro vlnu přicházející ke vzorku zprava se amplitudy rozptýlených vln mohou obecně lišit, ale díky symetrii vzhledem k časové inverzi, pravděpodobnost průchodu na směru nezávisí

$$T_{\rm n}(k_{\rm x}) = T_{\rm n}(-k_{\rm x}).$$
 (20.13)

Poznamenejme, že pro uvažovaný elastický rozp<br/>tyl je závislost pravděpodobnosti  $T_n(k_x)$ na vlnovém čísl<br/>e $k_x$ dána hodnotou $k_x$  pro danou energii a pravděpodobnost<br/>t $T_n(k_x)$  je tedy funkcí energie  $E_n(k_x), T_n(k_x) = T_n(E_n(k_x)).$ 

Za předpokladu, že chemický potenciál  $\mu_1$  v levém kontaktu je větší než  $\mu_2$  v kontaktu pravém, je obsazení stavů v ideálních přívodech schematicky zobrazeno na obr. 20.3c. Za teploty absolutní nuly jsou stavy až do energie  $\mu_2$  plně obsazené a stavy s energií větší než  $\mu_1$  jsou prázdné. V energetickém intervalu  $\Delta \mu = \mu_1 - \mu_2$ , mezi hodnotami chemických potenciálů  $\mu_2$  a  $\mu_1$ , je obsazení stavů v ideálních přívodech odlišné. V levém ideálním přívodu jsou všechny stavy s kladnou hodnotou

Dalisticky kalial a kvalitovalli koliuuktalice

rychlosti obsazeny až po energii danou chemickým potenciálem  $\mu_1$  a obsazení stavů s opačnou rychlostí je dáno pravděpodobností zpětného rozptylu studovaným vzorkem. V pravém ideálním přívodu zůstávají stavy se zápornou rychlostí prázdné a pravděpodobnost obsazení stavů s kladnou hodnotou rychlosti je dána pravděpodobností  $T_n(k_x)$ , že elektron studovaným vzorkem projde. Za nenulové teploty je obsazení stavů modifikováno Fermiho-Diracovou rozdělovací funkcí  $f_0(E-\mu)$  a celkový elektrický proud J je dán rozdílem proudu elektronů, které projdou vzorkem zprava a zleva

$$J = \frac{e}{2\pi} \sum_{n} \int_{0}^{+\infty} [f_0(E_n(k_x) - \mu_1) - f_0(E_n(k_x) - \mu_2)] T_n(k_x) v_n(k_x) dk_x, \quad (20.14)$$

kdeeoznačuje absolutní hodnotu náboje elektronu.

V lineárním přiblížení pro případ nízkých teplot, t.j. za předpokladu, že  $\Delta \mu$  i  $k_{\rm B}T$  jsou natolik malé, aby bylo možno v těchto energetických intervalech zanedbat dispersi pravděpodobnosti průchodu a nahradit ji hodnotou na Fermiho mezi,  $T_{\rm n}(k_{\rm x}) \rightarrow T_{\rm n}(E_{\rm F})$ , dostaneme

$$J = \frac{e}{2\pi} \sum_{n} \int_{E_{n}}^{+\infty} \frac{df_{0}}{d\mu} \Delta \mu T_{n}(E_{F}) \frac{v_{n}(k_{x})}{\frac{dE_{n}(k_{x})}{dk_{x}}} dE = \frac{e^{2}}{h} \sum_{n} T_{n}(E_{F}) \frac{\Delta \mu}{e} .$$
 (20.15)

Tento vztah platí pro libovolný disperzní zákon, tedy jakoukoliv funkční závislost energie  $E_n(k_x)$  na vlnovém čísle  $k_x$ .

Měřený napěťový rozdíl U mezi kontakty je dán rozdílem elektro-chemických potenciálů,  $U \equiv \Delta \mu/e$ . Pro konduktanci G, definovanou jako převrácená hodnota celkového odporu, dostaneme

$$G \equiv \frac{J}{U} = \frac{eJ}{\Delta\mu} = \frac{e^2}{h} \mathcal{T}(E_{\rm F}) \qquad ; \qquad \mathcal{T}(E_{\rm F}) \equiv \sum_{\rm n} T_{\rm n}(E_{\rm F}) = \operatorname{Tr}(tt^+) ,$$
(20.16)

kde t označuje matici amplitud  $t_{n,n'}$ . Takto definovaná konduktance se obvykle nazývá dvouterminálovou konduktancí, protože studovaný vzorek má pouze dva elektrické kontakty, terminály. Je přímo úměrná transmisnímu koeficientu  $\mathcal{T}(E_F)$ , který je bezrozměrnou veličinou. Konstanta úměrnosti je dána poměrem základních fyzikálních konstant, absolutní hodnotou náboje elektronu e a Planckovy konstanty h. Její převrácenou hodnotu lze tedy považovat za kvantově-mechanickou jednotku odporu

$$\frac{h}{e^2} = 25\,812,807\pm0,005\,\Omega\,. \tag{20.17}$$

### 20.3 Balistický kanál a kvantování konduktance

Uvažujme vzorek ve formě ideálního kvazijednorozměrného vodiče, který neobsahuje žádná rozptylová centra. V takovém případě nedochází ke zpětnému rozptylu a

pravděpodobnosti  $T_n(k_x)$  průchodu vzorkem jsou rovny jedné – jde o tzv. balistický transport. Transmisní koeficient nabývá celočíselných hodnot,  $\mathcal{T}(E_F) \to i$ , kde *i* je celé číslo dané počtem větví energetického spektra, které procházejí Fermiho energií  $E_F$ , tzv. vodivých kanálů. Transmisní koeficient má v závislosti na energii schodovitou závislost s celočíselnou výškou stupňů. Za předpokladu, že rozdíly chemických potenciálů  $\Delta \mu$  i teploty  $\Delta T$  mezi elektrickými kontakty jsou dostatečně malé, lze proud J určit jako lineární odezvu na oba rozdíly. Rozvojem Fermiho-Diracových funkcí v obecné vztahu (20.15) dostaneme

$$J = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df_0}{d\mu} \mathcal{T}(E) \left(\frac{E-\mu}{T} \Delta T + \Delta \mu\right) dE , \qquad (20.18)$$

kde T a  $\mu$  označují průměrnou teplotu a chemický potenciál. Za předpokladu, že  $\Delta T = 0$ , je dvouterminálová konduktance dána následujícím výrazem:

$$G(\mu,T) \equiv \frac{eJ}{\Delta\mu} = \frac{e^2}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df_0}{d\mu} \mathcal{T}(E) dE$$

V limitě  $T\to 0$ se výraz redukuje na tvar daný vztahem (20.16) a konduktance nabývá kvantových hodnot

$$G = \frac{e^2}{h}i$$
. (20.19)

Konduktance balistického vodiče je dána pouze počtem větví energetického spektra, které procházejí Fermiho energii.

Kvantování konduktance bylo poprvé ověřeno na vzorku ve formě bodového kontaktu [4]. Dvojrozměrný elektronový plyn v heterostruktuře GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As byl rozdělen pomocí hradla na dvě části spojené štěrbinou, jak je zobrazeno na schématu vloženém do obr. 20.4. Záporné napětí vložené na hradlo vytlačí elektronový plyn z oblasti pod hradlem. Je-li dostatečně vysoké, vytlačí i elektrony z oblasti štěrbiny. Pozvolným snižováním jeho hodnoty se štěrbina otvírá. Vý-

sledný efekt je stejný, jako kdyby se zvyšovala Fermiho energie a rostl tak počet větví energetického spektra, které ji protínají. Závislost konduktance na napětí vloženém na hradlo má pak schodovitý tvar, jak je vidět z experimentálních dat na





Obr. 20.4: Konduktance bodového kontaktu v závislosti na hradlovém napětí (gate voltage) pro heterostrukturu GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As s dvojrozměrným elektronovým plynem (2DEG) měřená za teploty T = 4,2 K.

Unikátním, téměř do-

konalým, jednorozměrným kvantovým drátem jsou uhlíkové trubičky, jejichž konduktance si zachovává kvantovou hodnotu  $2e^2/h$  až do pokojových teplot [5]. Na rozdíl od klasických vodičů, konduktance ideálních kvantových drátů, a tedy ani celkový odpor, nezávisí na délce vodiče. Je určena maximální schopností jednoho vodivého kanálu, větve energetického spektra, vést elektrický proud. Minimální odpor každého z kanálů je určen právě kvantověmechanickou jednotkou elektrického odporu  $h/e^2$ .

Ze vztahu (20.18) lze odvodit i závislost termoelektrické síly  $S(\mu, T)$  na che-



Obr. 20.5: Vypočtená závislost konduktance G (plná čára) a termoelektrické síly S (čárkovaná čára) na chemickém potenciálu  $\mu$  pro balistický vodič s ekvidistantními energiemi transverzálních modů,  $E_m = m \hbar \Omega \ (k_{\rm B}T/\hbar \Omega = 0,05)$ . Díky uvažované spinové degeneraci mají stupně v konduktanci výšku  $2e^2/h$ .

mickém potenciálu. Ta je určena podmínkou, že proud vzorkem je nulový (J=0),ze které plyne

$$S(\mu,T) \equiv \frac{\Delta\mu}{e\Delta T} = -\frac{k_{\rm B}}{e} \frac{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{df_0}{d\mu} \mathcal{T}(E) \frac{E-\mu}{k_{\rm B}T} dE}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \frac{df_0}{d\mu} \mathcal{T}(E) dE} .$$
 (20.20)

Za předpokladu, že rozdíl energií vázaných modů je mnohem větší než tepelná energie  $k_{\rm B}T$ , vykazuje závislost termoelektrické síly na energii oscilace s maximy pro energie právě rovné energiím vázaných modů. Jsou-li transversální mody spinově degenerovány, i = 2m, kde m je celé číslo, nabývají maxima následujících kvantovaných hodnot

$$S_m^{\max} = -\frac{k_{\rm B}}{e} \frac{\ln(2)}{m + \frac{1}{2}} \approx -\frac{60}{m + \frac{1}{2}} \quad (\mu {\rm V}{\rm K}^{-1}) .$$
 (20.21)

c	-1	
n		
U	л	
_		

Charakteristická závislost konduktance a termoelektrické síly na chemickém potenciálu, který definuje elektronovou koncentraci, je na obr. 20.5. Podobný schodovitý průběh jako konduktance G má i elektronová tepelná konduktance daná vztahem  $(\pi k_{\rm B}/e)^2 TG/3$ , který je důsledkem platnosti Wiedemannova-Franzova zákona.

Na bodových kontaktech byly ověřovány i popsané vlastnosti termoelektrické síly a tepelné konduktance. Odchylky experimentálně měřených hodnot maxim termoelektrické síly od hodnot daných vztahem (20.21) byly zhruba desetiprocentní [6]. Také hodnoty tepelné konduktance byly v souhlase s teoretickou předpovědí [7]. Je třeba se zmínit, že i za nízkých teplot může být termoelektrická síla v některých materiálech modifikována tzv. fononovým unášením, které nebylo bráno v úvahu.

Základním předpokladem pro popis balistického transportu elektronů bylo, že nositeli náboje jak v proudových přívodech tak i ve vzorku, jsou elektrony. Situace se změní, pokud jeden z přívodů bude supravodivý. Nositeli náboje v něm jsou Cooperovy páry, tvořené dvěma elektrony s opačným spinem i momentem. Na rozhraní mezi elektronovým plynem a supravodičem pak dochází k tzv. Andreeevovu odrazu, dikutovan0m v kapitolách o slabé supravodivosti a suratekutém <sup>3</sup>He. Aby elektron vstupující do supravodiče mohl vytvořit Cooperův pár musí přibrat další elektron. Ten vznikne excitací v blízkosti Fermiho meze, při které se vytvoří pár elektronu a díry. Z důvodu zachování celkové hybnosti má díra opačný moment než vyexcitovaný elektron, díra se vrací balistickým kanálem, pryč od supravodivého přívodu a tím zvyšuje celkový proud kanálem. Bylo by tedy možno očekávat, že konduktance bude dvakrát větší než v případě, že oba přívody budou nesupravodivé. Ačkoliv bylo zvýšení konduktance na různých strukturách se supravodivými přívody pozorováno, teoretická předpověď zdvojnásobení konduktance v případě balistického vodiče či bodového kontaktu nebyla experimentálně potvrzena.

### 20.4 Konduktance a elektrický odpor

V reálných kvantových vodičích většinou dochází ke zpětnému rozptylu s nenulovou pravděpodobností  $R_n(k_x)$ , která snižuje konduktanci. Ze zákona zachování toku elektronů vyplývá, že součet pravděpodobností průchodu a odrazu musí být roven jedné,  $T_n(k_x) + R_n(k_x) = 1$ . Je-li počet vodivostních kanálů pod Fermiho mezí roven celému číslu *i*, musí součet transmisního a reflexního koeficientu nabývat právě této hodnoty

$$i = \mathcal{T} + \mathcal{R}$$
;  $\mathcal{R} \equiv \sum_{n} R_{n}(E_{\rm F})$ . (20.22)

Celkový odpor vzorku daný převrácenou hodnotou konduktance můžeme zapsat v následujícím tvaru

$$\frac{1}{G} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\mathcal{T}} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{i} + \frac{h}{e^2} \frac{\mathcal{R}}{i\mathcal{T}} .$$
(20.23)

První člen na pravé straně rovnice odpovídá odporu balistického vodiče a lze jej chápat jako vstupní či kontaktní odpor. Jinými slovy, reprezentuje odpor rozhraní mezi makroskopickými proudovými přívody a balistickým vodičem. Druhý člen představuje vnitřní odpor systému určený rozptylem elektronů na potenciálových fluktuacích uvnitř studovaného vzorku. Pokud bychom byli schopni k ideálním přívodům

připojit potenciálové kontakty, poměr napěťového rozdílu mezi nimi a proudu by reprezentoval právě vnitřní odpor.

Pro dva vzorky v sérii lze očekávat, že v klasickém případě, kdy koherentní délka  $\lambda_{\phi}$  je menší než délka vzorků, bude celkový vnitřní odpor dán součtem vnitřních odporů obou vzorků. Pokud však bude  $\lambda_{\phi}$  větší než jejich celková délka, lze očekávat, že díky interferenci dojde ke zvýšení celkového vnitřního odporu.

Nejjednodušším systémem, na kterém lze výše uvedená tvrzení ilustrovat, je jednorozměrný vodič se dvěma rozptylovými centry. Budeme předpokládat, že jejich vzdálenost je d a každé z nich má jiné rozptylové charakteristiky. Ke stanovení konduktance je třeba určit amplitud<br/>u $t_{1,2}$ transmitované vlny, která má tvar daný vztahem (20.8). Elektron přicházející zleva k prvnímu rozptylovému centru je reprezentován funkcí  $\exp(ik_x x)$ , kde  $k_x x$  reprezentuje fázi dopadající vlny. Amplituda vlny prošlé prvním centrem bude mít amplitudu  $t_1$ . Ta dorazí k druhému rozptylovému centru a ta část, která projde, bude mít amplitudu  $t_1t_2$ . Odražená vlna, která má amplitudu  $t_1r_2$  se vrací k prvnímu rozp<br/>tylovému centru zprava, kterým buď projde, nebo se odrazí a vrátí se k druhému rozptylovému centru s amplitudou  $t_1r_2r'_1$ . Apostrof u  $r'_1$  zdůrazňuje, že se jedná o odraz vlny přicházející k rozptylovému centru zprava. Vlna prošlá i druhým centrem bude mít amplitudu  $t_1r_2r'_1t_2$ . Na rozdíl od vlny, která prošla systémem na první pokus, urazila tato vlna navíc vzdálenost 2d. Tím se změnila její fáze o  $2k_{\rm x}d$  a amplituda této prošlé vlny se tedy bude lišit o fázový faktor  $\exp(2ik_{\rm x}d)$ . Odražená část vlny bude stejný proces opakovat. Pro amplitudu  $t_{1,2}$  transmitované vlny dostaneme

$$t_{1,2} = t_1 t_2 \left[ 1 + r_2 r_1' e^{2ik_{\mathbf{x}}d} + (r_2 r_1')^2 e^{4ik_{\mathbf{x}}d} + \cdots \right] = \frac{t_1 t_2}{1 - r_2 r_1' e^{2ik_{\mathbf{x}}d}} .$$
(20.24)

Amplitudy vlnových funkcí (t, r a r') jsou obecně komplexní čísla, která vždy můžeme psát ve tvaru  $r \exp(i\theta)$ , kde r označuje absolutní hodnotu amplitudy a její čtverec má význam prav děpodobnosti průchodu nebo odrazu. Označíme-li pravděpodobnosti průchodu jednotlivými rozptylovými centry jako  $T_1 = |t_1|^2$  a  $T_2 = |t_2|^2$  a dále pravděpodobnosti odrazu jako  $R_1 = |r_1'|^2$  a  $R_2 = |r_2|^2$ , dostaneme pro pravděpodobnost, že se elektron dostane přes obě rozptylová centra, následující vztah

$$T_{1,2} = |t_{1,2}|^2 = \frac{T_1 T_2}{1 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos(2k_{\rm x}d + \theta) + R_1 R_2}, \qquad (20.25)$$

kde $\theta$ je změna fáze daná komplexním charakterem amplitud. Pokud bychom ignorovali vlnový charakter elektronu, považovali jej za klasickou částici, která s pravděpodobností  $T_1 = 1 - R_1$  a  $T_2 = 1 - R_2$  prochází bariérami reprezentovanými rozptylovými centry, dostali bychom následující klasický výsledek

$$T_{1,2}^{(\text{klas})} = \frac{T_1 T_2}{1 - R_1 R_2} \,. \tag{20.26}$$

Z porovnání obou výrazů vyplývá, že interference má nezanedbatelný vliv na pravděpodobnost průchodu, a tedy i na konduktanci.

Konduktance je silně závislá na fázi  $\phi \equiv 2dk_x$ . Pro odhad průměrného vlivu interference na měřený odpor je třeba provést středování přes tyto fáze. Uvažujme soubor vzorků které se liší pouze hodnotou fáze, která nabývá náhodných hodnot. Pro průměrnou hodnotu odporu  $\langle 1/G \rangle$  takového souboru dostaneme

$$\left\langle \frac{1}{G} \right\rangle = \frac{h}{e^2} \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} \frac{d\phi}{T_{1,2}} = \frac{h}{e^2} \frac{1 + R_1 R_2}{T_1 T_2} = \frac{h}{e^2} \left[ 1 + \frac{R_1}{T_1} + \frac{R_2}{T_2} + 2\frac{R_1}{T_1}\frac{R_2}{T_2} \right]. \quad (20.27)$$

Proč se přes fáze nestředuje konduktance ale odpor, který je přímo úměrný napětí? Důvodem je, že sériově zapojenými vodiči prochází stejný proud, zatímco spád napětí na nich závisí právě na fázi. Fyzikálně správné středování přes napěťové rozdíly odpovídá středování přes fáze.

Odvozený vztah má podobnou strukturu jako vztah (20.23). První člen na pravé straně rovnice reprezentuje odpor jednorozměrného balistického vodiče, tedy vstupní či kontaktní odpor, a zbylé členy definují vnitřní odpor vzorku daný jeho rozptylovými vlastnostmi. Poslední člen na pravé straně rovnice reprezentuje průměrný vliv interference. Pokud bychom použili pro pravděpodobnost průchodu klasický výraz, tento člen by jako jediný ve vztahu pro celkový odpor chyběl a vnitřní odpor by byl dán aditivními příspěvky obou vnitřních odporů,  $R_1/T_1 + R_2/T_2$ , jak je obvyklé u klasických systémů. Pro kvazijednorozměrné systémy s libovolným počtem vodivostních kanálů je odvození vztahu pro celkový odpor formálně mnohem komplikovanější, ale vede ke stejným obecným závěrům.

### 20.5 Jev lokalizace v kvazijednorozměrných vodičích

Vnitřní odpor definovaný v předcházející kapitole podílem reflexního a transmisního koeficientu má význam standardně definovaného odporu  $\rho$ . Díky vlnovému charakteru elektronů, který vyvolává interferenci rozptylovaných vln, není však aditivní veličinou. Je-li vzorek složen ze dvou částí o vnitřních odporech  $\rho_1$  a  $\rho_2$ , celkový vnitřní odpor  $\rho$  není dán prostým součtem  $\rho_1 + \rho_2$ . V analogii se vztahem (20.27) dostaneme pro čistě jednorozměrný systém následující vztah

$$\rho = \rho_1 + \rho_2 + \frac{e^2}{h} 2\rho_1 \rho_2 \qquad ; \qquad \rho_1 \equiv \frac{h}{e^2} \frac{R_1}{T_1} \quad ; \quad \rho_2 \equiv \frac{h}{e^2} \frac{R_2}{T_2} . \tag{20.28}$$

Uvedený vztah lze použít k odvození závislosti odporu vodiče na jeho délce. Pravděpodobnosti průchodu a odrazu,  $T_1$  a  $R_1$ , nechť charakterizují odpor  $\rho(L)$  vodiče délky L a pravděpodobnosti  $T_2$  a  $R_2$  nechť charakterizují odpor  $\rho(\Delta L)$  vodiče o délce  $\Delta L$ . Pokud  $\Delta L$  bude velmi malé, lze aplikovat pro odpor krátké sekce  $\rho(\Delta L)$  lineární přiblížení v rozvoji dle  $\Delta L$  a poměr  $R_2/T_2$  aproximovat výrazem  $\Delta L/L_0$ . Materiálová konstanta  $L_0$  definuje klasický měrný odpor vztahem  $h/(e^2L_0)$ . Pro odpor v závislosti na L pak dostaneme následující diferenciální rovnici

$$\lim_{\Delta L \to 0} \frac{\rho(L + \Delta L) - \rho(L)}{\Delta L} = \frac{d\rho(L)}{dL} = \frac{\frac{h}{e^2} + 2\rho(L)}{L_0} \quad ; \quad \rho(\Delta L) \approx \frac{h}{e^2} \frac{\Delta L}{L_0} \,. \quad (20.29)$$

Její řešení má tvar

$$\rho(L) = \frac{1}{2} \frac{h}{e^2} \left[ e^{2L/L_{\text{lok}}} - 1 \right] , \qquad (20.30)$$

kde  $L_{\rm lok}$  je tzv. lokalizační délka, která je pro uvažovaný jednorozměrný systém právě rovna  $L_0.$ 

Pro kvazijednorozměrný vodič je situace komplikovanější. Bylo ukázáno, že i v takovém případě roste odpor exponenciálně, pokud vodič je dostatečně dlouhý, aby jeho konduktance byla menší než  $e^2/h$ . Vzhledem k tomu, že vodivostní kanály jsou v podstatě paralelní vodiče, lze předpokládat, že odpor krátké sekce bude nepřímo úměrný počtu vodivostních kanálů *i*, tedy že  $\rho(\Delta L) \sim \Delta L/(i L_0)$ . Závislost odporu na délce má pak stejný tvar jako v jednorozměrném případě s tím, že lokalizační délka je i-násobkem lokalizační délky jednoho vodivostního kanálu,  $L_{\rm lok} \sim i L_0$ .

Závěrem lze konstatovat, že díky interferenci odpor exponenciálně roste s délkou vodiče. Dochází k lokalizaci elektronů a systém přestává být vodivý. Předpokladem však je, že nedochází k neelastickému rozptylu a uvažovaný systém je zcela koherentní,  $\lambda_{\phi} \sim L$ . To je však podmínka prakticky nerealizovatelná. Na vodiče při dané teplotě je třeba nahlížet jako na systémy tvořené řadou nekoherentně svázaných segmentů, přičemž procesy v každém z nich je možno považovat za plně koherentní. Délku segmentů lze tedy ztotožnit s koherentní délkou  $\lambda_{\phi}$ . Měřené hodnoty odporů pak odpovídají součtu odporů jednotlivých segmentů. Ty mají různé rozptylové charakteristiky závislé na fázi vlnových funkcí. Naměřený vliv interference je tak zprůměrovaný přes fázové faktory jednotlivých segmentů. Pro průměrný odpor segmentu lze pak použít vztah (20.30), ve kterém je L nahrazeno  $\lambda_{\phi}$ .

První experimentální potvrzení jevu lokalizace vyvolané interferencí v kvazijednorozměrných vodičích bylo pozorováno na tenkých kovových drátech  $Au_{60}Pd_{40}$  o průměrech řádu několika stovek Å(10 Å=1 nm) [8], viz obr. 20.6. Odpor makroskopických kovových vzorků obecně klesá s teplotou a díky poklesu četnosti fononů je úměrný  $T^5$ . Při dostatečně nízké teplotě dosáhne tzv. zbytkového odporu, který je teplotně nezávislý (viz kapitola o vlastnostech pevných látek při nízkých teplotách). Na tenkých drátech  $Au_{60}Pd_{40}$  byl však v této oblasti, pod teplotou cca 15 K, pozorován nárůst odporu. I když byl velmi malý, řádu několika promile celkového odporu, jedná se evidentně o jev lokalizace.

V uvedeném případě se jedná o slabou lokalizaci splňující podmínku, že koherentní délka je mnohem menší než lokalizační délka,  $\lambda_{\phi}/L_{\rm lok} \ll 1$ . Vztah (20.30) lze aplikovat pouze na plně koherentní segmenty, tedy na části vzorku mající délku  $\lambda_{\phi}$ . Rozvojem exponenciální závislosti v mocninou řadu poměru  $\lambda_{\phi}/L_{\rm lok}$ a zachováním pouze členů rozvoje do druhého řádu včetně, lze odpor vodiče délky L aproximovat následujícím výrazem

$$\rho(L) = \frac{h}{e^2} \frac{L}{L_{\text{lok}}} \left[ 1 + \frac{L}{L_{\text{lok}}} + \cdots \right] \approx \rho_0(L) \left[ 1 + \frac{\lambda_\phi}{L_{\text{lok}}} \right] \quad ; \quad \rho_0(L) \equiv \frac{h}{e^2} \frac{L}{L_{\text{lok}}}, \tag{20.31}$$

ve kterém  $\rho_0(L)$  označuje klasický zbytkový odpor daný elastickými srážkami, který je úměrný délce vodiče. Odpovídající difúzní koeficient je možno v takovém případě



Obr. 20.6: Závislosti odporu drátů  $Au_{60}Pd_{40}$  různých průměrů na teplotě (na levém obrázku je závislost pro drát o průměru cca 890 Å).

považovat za teplotně nezávislý. Pro silně neuspořádané kovové systémy lze pro teplotní závislost koherentní délky  $\lambda_{\phi}$  použít vztah (20.3). Kvantová korekce k odporu je pak úměrná  $1/\sqrt{T}$ , což je v kvalitativním souhlasu s měřenými závislostmi (viz obr. 20.6).

Pro diskutovaný případ slabé lokalizace, kdy kvantová korekce k elektrickému odporu je malá, dostaneme použitím vztahu (20.31) následující výraz pro střední hodnotu kvantové korekce ke konduktanci koherentního segmentu

$$\langle \Delta G(L \approx \lambda_{\phi}) \rangle \equiv \frac{1}{\rho(\lambda_{\phi})} - \frac{1}{\rho_0(\lambda_{\phi})} \approx -\frac{e^2}{h}.$$
 (20.32)

Poznamenejme, že tento výraz platí i pro kvazijednorozměrné vodiče a lze jej aplikovat i na dvojrozměrné systémy konečné šířky. Podstatným rysem režimu slabé lokalizace je univerzálnost kvantových korekcí ke konduktanci. Jsou nezávislé na materiálu vodiče, což bylo experimentálně ověřeno.

# 20.6 Lokalizace v kvazidvojrozměrných vodičích a vliv slabého magnetického pole

Při interferenčních jevech hraje podstatnou roli fáze vlnové funkce, kterou lze ovlivňovat magnetickým polem B. To vstupuje do Hamiltoniánu prostřednictvím vektorového potenciálu A a pro elektron s hmotností  $m_0$  v prostředí charakterizovaném

potenciálem  $V(\mathbf{r})$  dostaneme

$$H = \frac{1}{2m_0} \left( \boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A} \right)^2 + V(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( -i\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{\hbar}\boldsymbol{A} \right)^2 + V(\vec{r}) \quad ; \quad \boldsymbol{B} \equiv rot\boldsymbol{A} \; .$$
(20.33)

V klasické fyzice nemá magnetické pole vliv na energii částic. Lze tedy předpokládat, že v limitě velmi slabých polí, kdy je vektorový potenciál  $\boldsymbol{A}$  pomalu se měnící funkcí  $\boldsymbol{r}$ , by měl být jeho vliv na energii zanedbatelný i při kvantovém popisu. Uvědomíme-li si, že vlastní stavy pro nulové magnetické pole lze vždy vyjádřit jako lineární kombinaci rovinných vln  $\exp(i\boldsymbol{kr})$ , můžeme aproximovat vlastní funkce v nenulovém poli stejným rozvojem, s tím, že budeme rovinné vlny modifikovat dodatečným fázovým faktorem

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rightarrow e^{i\left(\mathbf{k}-2\pi\frac{e}{h}\mathbf{A}\right)\mathbf{r}}$$
 (20.34)

Snadno se lze přesvědčit, že jsou vlastními funkcemi Hamiltoniánu, pokud zanedbáme členy odpovídající gradientu vektorového potenciálu. Vlnový vektor k definuje energii elektronů, která není v tomto přiblížení ovlivněna přítomností magnetického pole. Prostřednictvím vektorového potenciálu ovlivňuje pole pouze fázi vlnové funkce.

Vliv fluktuací potenciálu lze popsat v analogii s chováním elektronu jako klasické částice. Ta se pohybuje po drahách, které jsou deformovány vlivem rozptylu se srážkovými centry reprezentujícími potenciálové nehomogenity. Při kvantověmechanickém popisu je elektron reprezentován vlnou sledující v prostoru různé dráhy, podobně jako klasická částice. Podstatným rozdílem je existence fáze vlny,  $(\mathbf{k} - e\mathbf{A}/\hbar) \cdot \mathbf{r}$ , kde  $\mathbf{r}$  i  $\mathbf{k}$  mají směr rovnoběžný s tečnou v daném bodě dráhy. Fáze vlny, která je zodpovědná za vznik interferenčních jevů, se podél dráhy postupně mění.

Uvažujme dvojrozměrný elektronový systém vložený do slabého magnetického pole orientovaného kolmo na systém. Elektron se z bodu daného polohovým vektorem  $\mathbf{r}_1$  může dostat do bodu  $\mathbf{r}_2$  po různých drahách  $C_{\alpha}$ , viz obr. 20.7. Amplituda vlnové funkce v bodě  $\mathbf{r}_2$  je, v analogii s rozptylovým problémem, transmisní amplitudou  $t_{1\to 2}$ , která je dána součtem amplitud reprezentujících různé dráhy  $\alpha$ 

$$t_{1\to 2} = \sum_{\alpha} t_{\alpha} e^{i\Delta\phi_{\alpha}} \quad ; \quad \Delta\phi_{\alpha} = \int_{C_{\alpha}} \left( \boldsymbol{k} - 2\pi \frac{e}{h} \boldsymbol{A} \right) d\boldsymbol{l} , \qquad (20.35)$$



Obr. 20.7: Elektronové dráhy  $C_{\alpha}$ .

kde  $\Delta \phi_{\alpha}$  je dána dráhovým integrálem a reprezentuje změnu fáze vlnové funkce danou pohybem elektronu po dráze  $C_{\alpha}$ . Pravděpodobnost výskytu elektronu v bodě  $r_2$  je dána čtvercem absolutní hodnoty amplitudy

$$|t_{1\to2}|^2 = \sum_{\alpha} |t_{\alpha}|^2 + \sum_{\alpha,\beta}^{\alpha\neq\beta} \left( t_{\alpha} t_{\beta}^* e^{i(\Delta\phi_{\alpha} - \Delta\phi_{\beta})} + t_{\alpha}^* t_{\beta} e^{-i(\Delta\phi_{\alpha} - \Delta\phi_{\beta})} \right) .$$
(20.36)

První člen odpovídá klasickému výsledku, že pravděpodobnost výskytu v daném bodě je dána součtem pravděpodobností, že se elektron dostane do bodu  $r_2$  po drahách  $C_{\alpha}$ . Druhý člen je silně oscilující funkcí rozdílu fází a v případě náhodného pohybu elektronu se jeho hodnota blíží nule, protože rozdíly fází nabývají náhodných hodnot. V tomto případě vlnový charakter elektronu nemá vliv na pravděpodobnost dosažení bodu  $r_2$ .

Vliv vlnového charakteru elektronu se však projeví v případě, že počáteční a koncový bod jsou shodné,  $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ . Dráhy pak mají tvar uzavřených smyček  $O_{\alpha}$ , po kterých se může elektron pohybovat ve směru či proti směru hodinových ručiček, což budeme značit indexem (±). Zanedbáme-li silně oscilující člen dostaneme

$$|t_{1\to1}|^2 = \sum_{\alpha} \left( |t_{\alpha}^{(+)}|^2 + |t_{\alpha}^{(-)}|^2 \right) + \sum_{\alpha} |t_{\alpha}^{(+)}| |t_{\alpha}^{(-)}| \left( e^{i\left(\Delta\phi_{\alpha}^{(+)} - \Delta\phi_{\alpha}^{(-)}\right)} + e^{-i\left(\Delta\phi_{\alpha}^{(+)} - \Delta\phi_{\alpha}^{(-)}\right)} \right) , (20.37)$$

$$\Delta \phi_{\alpha}^{(+)} - \Delta \phi_{\alpha}^{(-)} = \oint_{O_{\alpha}^{(+)}} \left( \mathbf{k} - 2\pi \frac{e}{h} \mathbf{A} \right) d\mathbf{l} - \oint_{O_{\alpha}^{(-)}} \left( \mathbf{k} - 2\pi \frac{e}{h} \mathbf{A} \right) d\mathbf{l} =$$
$$= 4\pi \frac{e}{h} \oint_{O_{\alpha}^{(+)}} \mathbf{A} d\mathbf{l} = 4\pi \frac{e}{h} \int_{O_{\alpha}^{(+)}} \operatorname{rot} \mathbf{A} d\mathbf{s} = 4\pi \frac{e}{h} B S_{\alpha} \equiv 4\pi \frac{\Phi_{\alpha}}{\Phi_{0}}, \quad (20.38)$$

kde  $S_{\alpha}$  je plocha vymezená smyčkou  $O_{\alpha}$ ,  $\Phi_{\alpha} = S_{\alpha} \cdot B$  je magnetický tok smyčkou a  $\Phi_0 = h/e$  je kvantum magnetického toku. Poznamenejme, že při změně směru integrace podél dané dráhy se změní i znaménko vlnového vektoru  $\mathbf{k}$  a odpovídající příspěvek k fázovému rozdílu  $\Delta \phi_{\alpha}^{(+)} - \Delta \phi_{\alpha}^{(-)}$  je tak nulový. Hledaný výraz pro pravděpodobnost, že se elektron vrátí na místo, kde se již vyskytoval je

$$t_{1\to1}|^2 = \sum_{\alpha} \left( |t_{\alpha}^{(+)}|^2 + |t_{\alpha}^{(-)}|^2 \right) + 2\sum_{\alpha} |t_{\alpha}^{(+)}| |t_{\alpha}^{(-)}| \cos\left(4\pi \frac{\Phi_{\alpha}}{\Phi_0}\right) .$$
(20.39)

Protože je vliv magnetického pole na amplitudy  $t_\alpha$ v uvažovaném přiblížení zanedbán, jsou amplitudy invariantní vůči časové inverzi a platí

$$t_{\alpha}^{(+)}(t_{\alpha}^{(-)})^* = (t_{\alpha}^{(+)})^* t_{\alpha}^{(-)} = |t_{\alpha}^{(+)}| \, |t_{\alpha}^{(-)}| = |t_{\alpha}^{(+)}|^2 = |t_{\alpha}^{(-)}|^2 \,.$$
(20.40)

Pravděpodobnost návratu elektronu do stejného bodu, a tedy vytvoření smyčky (vlastně lokalizovaného stavu), je díky interferenci dvakrát větší než pravděpodobnost odpovídající klasickému popisu. To je důvod, proč je hodnota klasické konduktance větší, než hodnota kvantové konduktance, která bere v úvahu interferenci, tedy vliv fází. Jak je dále z výrazu vidět, nenulové magnetické pole snižuje pravděpodobnost návratu a potlačuje tak elektronovou lokalizaci. Je třeba připomenout, že se jedná o případ slabých magnetických polí, která nejen že neovlivňují energii elektronu, ale nemění ani jeho dráhu. O elektronových drahách se předpokládá, že jsou dány pouze rozptylem na fluktuacích potenciálu a transmisní amplitudy  $t_{\alpha}$  nejsou ovlivněny přítomností magnetického pole. Pojem slabé magnetické pole je však relativní. Uvedené předpoklady mohou být splněny i pro pole obvykle považovaná za silná, pokud jsou studované systémy silně neuspořádané, t.j. mají dostatečně velký zbytkový odpor.

Podobně jako v případě kvazijednorozměrných vodičů, je na reálné plošné vodiče třeba nahlížet jako na systémy tvořené souborem nekoherentně svázaných, plně koherentních oblastí o rozměrech řádu koherentní délky  $\lambda_{\phi}$ . Pro izotropní systémy lze předpokládat, že tyto oblasti mají tvar disku. Pro odhad kvantové korekce ke konduktanci uvažujme koherentní oblast ve tvaru mezikruží o vnitřním poloměru  $R_{\min}$  a vnějším poloměru  $R_{\max}$ , tzv. Corbino disk. Konduktance takového vzorku je dána poměrem celkového proudu J procházejícího mezikružím a vloženým napětím  $U_0$ . Označíme-li vodivost vzorku jako  $\sigma$ , platí pro elektrostatický potenciál  $\phi(\mathbf{r})$ , jehož gradient reprezentuje sílu působící na jednotkový kladný náboj, následující rovnice

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \sigma \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) \quad ; \quad \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) = -\boldsymbol{\nabla}\phi(\boldsymbol{r}) \quad ; \quad div \, \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta\phi(\boldsymbol{r}) = 0 \; , \; (20.41)$$

kde  $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$  a  $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})$  označují proudovou hustotu a elektrické pole. Řešením jsou následující vztahy

$$\phi(\boldsymbol{r}) = -\frac{U_0 \ln(r/R_{\min})}{\ln(R_{\max}/R_{\min})} \quad ; \quad \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \sigma \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}) = \frac{\boldsymbol{r}}{r^2} \frac{\sigma U_0}{\ln(R_{\max}/R_{\min})} . \quad (20.42)$$

Pro konduktanci dostaneme

$$G \equiv \frac{J}{U_0} = \frac{1}{U_0} \oint j(\mathbf{r}) \, d\mathbf{s} = \frac{2\pi\sigma}{\ln(R_{\rm max}/R_{\rm min})} \,.$$
(20.43)

Protože kvantové korekce mohou vzniknout pouze v oblasti, kde dochází k interferenci, je přirozené ztotožnit  $R_{\max}$  se střední koherentní délkou  $\lambda_{\phi}$ . Poloměr  $R_{\min}$  vymezuje oblast, která je tak malá, že pro ni nelze definovat konečnou vodivost  $\sigma$ . Takovou oblastí je prostor, ve kterém se v podstatě nevyskytují rozptylová centra. Poloměr  $R_{\min}$  lze tak ztotožnit se střední volnou dráhou elektronu danou elastickým rozptylem,  $\lambda_e$ .

Pro případ slabé lokalizace, tedy v limitě  $L_{\text{lok}} \gg \lambda_{\phi}$ , mají kvantové korekce ke konduktanci univerzální charakter daný vztahem (20.32). Pro kvazidvojrozměrný vodič dostaneme

$$\langle \Delta G \rangle = \frac{2\pi\sigma}{\ln(\lambda_{\phi}/\lambda_e)} - \frac{2\pi\sigma_0}{\ln(\lambda_{\phi}/\lambda_e)} \approx -\frac{e^2}{h},$$
 (20.44)

С	0	5
υ	4	J



Obr. 20.8: a) Teplotní závislost odporu vrstviček  $Au_{60}Pd_{40}$  s různým stupněm neuspořádanosti. b) Závislost vodivosti vrstviček Cu na teplotě v nulovém magnetickém poli a v poli 6 T.

kde $\sigma_0$ označuje klasickou vodivost. Pro hodnoty vodivosti $\sigma$ a měrného odporu $\rho,$ které zahrnují vliv interference dostaneme

$$\sigma = \sigma_0 - \frac{e^2}{2\pi h} \ln(\lambda_\phi/\lambda_e) \qquad ; \qquad \rho \equiv \frac{1}{\sigma} \cong \rho_0 + \rho_0^2 \frac{e^2}{2\pi h} \ln(\lambda_\phi/\lambda_e) , \quad (20.45)$$

kde $\rho_0=1/\sigma_0$ reprezentuje měrný odpor v klasické limitě.

Jev lokalizace, růst odporu s klesající teplotou, byl pozorován na tenkých vodivých vrstvách připravených z nejrůznějších materiálů, ať kovových, či polovodičových. Podmínky, za kterých byly odvozeny výše uvedené vztahy pro slabou lokalizaci, však nejlépe splňují silně neuspořádané systémy, jako jsou například napařené či naprášené kovové vrstvičky nebo tak zvané polovodičové  $\delta$ -vrstvy. Takové systémy jsou dostatečně neuspořádané, aby pohyb elektronů v nich mohl být považován za difúzní, a teplota ani magnetické pole nemají vliv na elektronovou koncentraci. Za předpokladu, že i difúzní koeficient je teplotně nezávislý, je závislost koherentní délky na teplotě daná vztahem (20.3),  $\lambda_{\phi} \sim 1/\sqrt{T}$ . Kvantové korekce dle vztahu (20.45), jak k odporu tak i k vodivosti, by tedy



Obr. 20.9: Závislost odporu filmu nanokrystalického diamantu na magnetickém poli B pro různé teploty.

měly mít logaritmickou teplotní závis-

lost. Tento závěr byl experimentálně poprvé ověřen na tenkých vrstvách Au $_{60}\rm{Pd}_{40}$ [8], viz obr. 20.8a.

Potlačování lokalizace magnetickým polem potvrzují například měření na Cu vrstvičkách, jak je vidět ze závislostí vodivosti na obr. 20.8b, převzatých z práce [9]. Přestože použité magnetické pole 6 T je relativně vysoké, díky velké neuspořádanosti vrstviček neovlivňuje energii elektronů, a z tohoto hlediska je lze považovat za slabé. Uvedené závislosti se omezují na poměrně úzký teplotní interval. Na vrstvičkách indiových oxidů [10] však byla logaritmická teplotní závislost pozorována v širokém teplotním intervalu, 1 až 100 K.

Velmi silná lokalizace, i její potlačování magnetickým polem, byla pozorována na tenkých vrstvách (~ 0,8 µm) dusíkem dopovaného polykrystalického diamantu [11], viz obr. 20.9. Vrstvy byly připraveny chemickou depozicí a velikost krystalků byla rozměrů cca 16 nm. V tomto případě však teplotní závislosti odporu nemají jednoduchou logaritmickou závislost, která je obvykle pozorována na velmi neuspořádaných kovových systémech.

Fyzikální podstatou jevu lokalizace je skutečnost, že díky interferenci je pravděpodobnost vytváření lokalizovaných stavů vyšší, než při klasickém popisu. Její projevy však slábnou, pokud vytváření uzavřených smyček pohybujícím se elektronem, je ze statistického hlediska málo pravděpodobné. Je to případ trojrozměrných systémů, ve kterých je vliv interference na elektronový transport zanedbatelný. Výjimkou jsou samozřejmě systémy, ve kterých jsou v jednom směru vazby mezi elektrony v krystalografických rovinách velmi slabé. Takový systém se pak spíše chová jako soubor slabě vázaných dvojrozměrných systémů.

### 20.7 Aharonovův — Bohmův jev

V předcházející kapitole bylo ukázáno, že interference se projevuje, mají-li elektronové dráhy tvar uzavřených smyček. Toho je možno docílit i tvarem vodiče znázorněném na obr. 20.10a. Nechť smyčka vymezující plochu S i přívody ke kontaktům jsou připravené z jednorozměrných vodičů a leží v rovině kolmé k magnetickému poli **B**. Elektron vstupující do smyčky zleva bude pokračovat horním vodičem po dráze  $C^{(+)}$  nebo spodním vodičem po dráze  $C^{(-)}$ . Pro jednoduchost předpokládejme, že pak přímo projde i spojem s výstupním vodičem až do elektrického přívodu 2. Amplituda vlny odcházející ze smyčky je dána součtem transmisních amplitud, které závisejí na cestě

$$t_{1\to2} = t_0^{(+)} e^{-i\frac{2\pi}{\Phi_0} \int A \, dl} + t_0^{(-)} e^{-i\frac{2\pi}{\Phi_0} \int A \, dl} , \qquad (20.46)$$

kde $t_0^{(\pm)}$ jsou transmisní amplitudy pro případ nulového magnetického pole. Protože integrace podél dráhy  $C^{(+)}$ má opačný směr než integrace podél dráhy  $C^{(-)}$ , dostaneme pro konduktanci následující vztah

$$G \equiv \frac{e^2}{h} |t_{1\to2}|^2 = \frac{e^2}{h} \left[ |t_0^{(+)}|^2 + |t_0^{(-)}|^2 + 2|t_0^{(+)}| |t_0^{(-)}| \cos\left(\theta + 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) \right], \quad (20.47)$$

kde  $\theta$  reprezentuje rozdíl fází v případě nulového magnetického pole a  $\Phi = BS$  je magnetický tok smyčkou. Konduktance osciluje v závislosti na magnetickém poli mezi nulou a kvantovou hodnotou  $e^2/h$ . Perioda oscilací je dána kvantem magnetického toku  $\Phi_0 = h/e$ . Stejná perioda oscilací je samozřejmě pozorovatelná i při měření odporu. Je-li vodič kvazijednorozměrný je celková konduktance dána součtem konduktancí všech vodivostních kanálů. Pokud je plocha smyčky mnohem větší než průměr vodiče, je rozdíl fází pro jednotlivé kanály zanedbatelný a oscilace konduktance zůstanou zachovány. Ukázka experimentálního pozorování tohoto, tzv. Aharonova-Bohmova jevu, je na obr. 20.10b. Jde o výsledky měření na systému připraveném z tenkých zlatých vodičů, převzaté z práce [12].



Obr. 20.10: a) Schéma vodiče se smyčkou. b) Periodická závislost konduktance na magnetickém toku smyčkou pro Au-vodič průřezu<br/>  $70\times20$  nm, T=50 mK.

Fyzikální podstatou Aharonova-Bohmova jevu je kvantování stavů uzavřenou smyčkou, které je důsledkem vlnového charakter elektronu. Ty musí splňovat podmínku, že změna fáze vlnové funkce podél smyčky musí být celočíselným násobkem  $2\pi$ . Každý elektronový stav tvoří proudovou smyčku, která vymezuje plochu s celočíselným počtem magnetických kvant  $\Phi_0 = h/e$ . Fyzikální podstata je tedy stejná jako v případě kvantování toku supravodivou smyčkou (viz kapitoly o supravodivosti), s tím rozdílem, že supravodivý stav reprezentuje kolektivní chování Cooperových párů majících jedinou fázi. Vzhledem k tomu, že páry nesou náboj 2e, jednotka pro kvantování magnetického toku je poloviční,  $\Phi_0/2 = h/2e$ .

Elektrické přívody spojující vodivou smyčku s elektrickými kontakty, rezervoáry elektronů, fixují Fermiho energii. Se změnou magnetického toku smyčkou se mění energie stavů ve smyčce způsobená jejich kvantováním, a počet stavů na Fermiho mezi daný počtem vodivostních kanálů se mění. Energetickým změnám stavů ve smyčkách s velkým počtem vodivostních kanálů, jako jsou smyčky kovových vodičů, odpovídají fluktuace počtu kanálů. Snaha systému minimalizovat svoji energii vede k tomu, že amplituda těchto fluktuací odpovídá přibližně změně počtu vodivostních kanálů o jeden. Výsledné změny konduktance  $\Delta G = e^2/h$  pak zhruba odpovídají amplitudě Aharonových-Bohmových oscilací, jak je vidět na obr. 20.10b.

Perioda oscilací h/e je základní pozorovanou periodou. Ta vyplynula ze zjednodušeného modelu, ve kterém jsme předpokládali, že elektron se pohybuje pouze po



Obr. 20.11: a) Aharonovy-Bohmovy oscilace pro různé síly rozptylového centra v jednom rameni smyčky za teploty 0,1 K. b) Oscilace odporu hořčíkové trubičky na magnetickém poli s periodou  $\Phi_0/2 = h/2e$  za teploty 1 K.

dvou nejpřímějších drahách mezi elektrickými kontakty. Pokud vezmeme v úvahu, že v bodech větvení elektron se stejnou pravděpodobností vstoupí do kterékoliv z výstupních větví, a že v obou ramenech smyčky, horní i dolní, existují rozptylová centra, elektron má na výběr mnoho drah různých délek. Pro jednorozměrný vodič je pak konduktance dána následujícím vzorcem [13]

$$G = \frac{2e^2}{h} \frac{A_1 + A_2 \cos(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}) + A_3 \sin(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0})}{A_4 + A_5 \cos(2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0}) + A_6 \cos(4\pi \frac{\Phi}{\Phi_0})}, \qquad (20.48)$$

kde koeficienty  $A_i$  (i = 1,...,6) jsou dány transmisními a reflexními amplitudami reprezentujícími rozptylová centra ve smyčce. Ve výrazu se kromě členů se základní periodou  $\Phi_0$  objevil i člen s periodou poloviční,  $A_6 \cos(4\pi \Phi/\Phi_0)$ , který je důsledkem započtení mnohonásobných odrazů.

Instruktivní je experiment na smyčce o průměru cca 1  $\mu$ m, připravené pomocí kovových hradel z elektronového plynu v heterostruktuře AlGaAs/GaAs [14]. V jednom rameni bylo vytvořeno umělé rozptylové centrum reprezentované potenciálem bodového hradla. Jeho síla tak mohla být měněna vnějším napětím. S postupnou změnou síly rozptylu přecházely oscilace se základní periodou v oscilace s poloviční periodou, které pak opět přecházely v oscilace s periodou základní, jak je vidět z obr. 20.11a.

Aharonovy-Bohmovy oscilace byly poprvé pozorovány na tenké trubičce z hořčíku napařeném na křemenném vlákně o průměru cca 1,5  $\mu$ m v magnetickém poli orientovaném rovnoběžně s osou trubičky [15], viz obr. 20.11b. V tomto případě jsou oscilace se základní periodou potlačeny a pozorovaná perioda je poloviční,  $\Phi_0/2$ . Příčinou je geometrie vzorku a silně neuspořádaná kovová vrstvička s množstvím

629

20.1

poruch reprezentujících rozptylová centra. Díky geometrii vzorku nejsou plochy vymezené elektronovými smyčkami vždy orientovány kolmo k magnetickému poli. Uzavírají plochy různých velikostí i když jejich průmět do roviny kolmé ke směru magnetického pole je stejný. Ukazuje se, že tato skutečnost vede k posílení vlivu oscilací s poloviční amplitudou  $\Phi_0/2$ , podobně jako v případě potlačování jevu lokalizace magnetickým polem, viz vztah (20.39).

Ke kvantování ektronových stavů na uzavřených drahách dochází i v plošných, kvazidvojrozměrných, systémech. Tam se elektronové smyčky vytvářejí díky rozptylu, uzavírají plochy různých velikostí a jsou zodpovědné za popsaný jev lokalizace. Velikosti ploch uzavřených elektronovými smyčkami jsou dány konkrétní geometrií rozptylového potenciálu. Důsledkem je, že se v závislosti na vloženém magnetickém poli objeví aperiodické oscilace konduktance. Jsou to tak zvané univerzální fluktuace konduktance, jejichž amplituda nezávisí na materiálu vodiče a je řádu  $e^2/h$  [12], viz obr. 20.12.



Obr. 20.12: Univerzální fluktuace konduktance pro kvazidvojrozměrný Au-vodič v závislosti na magnetickém poli B, naměřené při teplotě T = 50 mK.

# 20.8 Kvantový Hallův jev — celočíselný

Hallův jev se standardně měří na vzorcích ve tvaru dlouhého tenkého pásku. V případě, že je na vzorek aplikováno magnetické pole  $\boldsymbol{B}$  orientované kolmo na rovinu pásku, působí na pohybující se elektron Lorentzova síla ve směru kolmém jak na magnetické pole, tak i na směr pohybu elektronu. V případě, že páskem teče elektrický proud, rovnoběžný s osou pásku, musí být Lorentzova síla působící ve směru kolmém, kompenzována jinou silou, elektrickou, aby celková síla působící na nositele náboje byla nulová. Tato podmínka existence stacionárního stavu má, pro pásek šířky w v rovině x - y, magnetické pole ve směru osy  $\hat{z}$  a proud J podél osy pásku ve směru  $\hat{x}$ , následující tvar

$$\left(\boldsymbol{j} \times \boldsymbol{B}\right)_{\mathrm{v}} - e \, n_{\mathrm{e}} \, \mathcal{E}_{\mathrm{y}} = 0 \,, \qquad (20.49)$$

kde  $\mathbf{j} \equiv (j_x, 0, 0)$  označuje proud připadající na jednotku šířky,  $j_x \equiv J/w$ ,  $\mathcal{E}_y$  je elektrické pole napříč páskem a  $n_e$  je plošná koncentrace elektronů definovaná jako počet elektronů připadající na jednotkovou plochu pásku. Pro Hallův odpor, definovaný jako poměr napětí mezi hranami pásku  $U_{\rm H} \equiv w \mathcal{E}_y$  a celkového proudu

J, dostaneme

$$R_{\rm H} \equiv \frac{U_{\rm H}}{J} = \frac{\mathcal{E}_{\rm y}}{j_{\rm x}} = -\frac{B}{en_{\rm e}}.$$
 (20.50)

Hallův odpor je úměrný magnetickému poli a nepřímo úměrný plošné elektronové koncentraci. Vzhledem k tomu, že nezávisí na disipaci energie, která určuje pouze spád napětí podél směru proudu, stalo se měření Hallova jevu užitečnou metodou pro určování koncentrace nositelů náboje v polovodičových systémech.

V roce 1980 došlo k překvapivému objevu, za který byla von Klitzingovi udělena v roce 1985 Nobelova cena. Na vzorku s dvojrozměrným elektronovým plynem připraveným na bázi Si-MOS FET vykázal Hallův odpor v závislosti na magnetickém poli stupňovitou závislost, místo očekávané závislosti lineární. Později byl stejný jev, ale s daleko výraznějšími stupni, naměřen na dvojrozměrných elektronových systémech v heterostrukturách AlGaAs/GaAs [16], viz obr. 20.13. V oblastech prodlev nabývá Hallův odpor kvantových hodnot  $h/(e^2i)$ , kde *i* je celé číslo. Současně vymizí i podélný odpor, nebyl pozorován spád napětí ve směru proudu. Ten nabývá nenulových hodnot pouze v oblastech, kde Hallův odpor v závislosti na magnetickém poli má nenulovou směrnici. Ve slabých polích, kde Hallův odpor vykazuje standardní lineární závislost, lze pozorovat pokles odporu s rostoucím magnetickým polem, tzv. negativní magnetorezistenci. Je to projev potlačování lokalizace elektronových stavů magnetickým polem, jak jsme již diskutovali výše.

Vztah pro Hallův odpor (20.50) zůstává v platnosti i pro případ, že vodivý pásek je dvojrozměrným elektronovým systémem, pokud magnetické pole je dostatečně slabé, aby neovlivňovalo energii elektronů. V případě silných magnetických polí však dochází ke kvantování energetického spektra. Pro nekonečně dlouhý pásek homogenního dvojrozměrného plynu má jednoelektronový Hamiltonián následující tvar

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[ \mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^2 + V_{\rm o}(y) + g\,\mu_{\rm B}Bs_{\rm z} \qquad , \qquad \mathbf{A} = (-By, 0, 0) \,. \tag{20.51}$$

Šířku vzorku definuje omezující potenciál  $V_{\rm o}(y)$ , který má tvar široké potenciálové jámy nabývající nulové hodnoty uvnitř pásku. Člen  $g \mu_{\rm B} B s_{\rm z}$  reprezentuje interakci elektronového spinu  $s_{\rm z} = \pm 1/2$  s magnetickým polem *B* charakterizovanou energií Zeemanova rozštěpení  $g \mu_{\rm B} B$ , kde  $\mu_{\rm B} = e\hbar/(2m_0)$  je Bohrův magneton a *g* je materiálově závislý Landéův faktor spektroskopického rozštěpení. Landauův nesymetrický výběr vektorového potenciálu  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  umožňuje separaci proměnných a vlastní funkce lze pak psát ve tvaru součinu rovinné vlny ve směru  $\hat{x}$  a vázaného modu ve směru  $\hat{y}$ , tzv. "spaghetti" stavů.

V oblasti, kde je omezující potenciál nulový, jsou vázané mody dány vlastními funkcemi harmonického oscilátoru  $\phi_n(y)$  a vlastní funkce jsou

$$\Psi_{n,k_{x}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik_{x}x} \phi_{n} \left(\frac{y - Y(k_{x})}{l_{B}}\right) \quad ; \quad \phi_{n}(t) \equiv \frac{H_{n}(t)}{\sqrt{l_{B}\sqrt{\pi} 2^{n} n!}} e^{-\frac{t^{2}}{2}} , \quad (20.52)$$

kde  $H_n(t)$  jsou Hermitovy polynomy. Magnetická délka  $l_B$  definující šířku vlnové funkce ve směru  $\hat{y}$  a poloha hmotnostního centra harmonických oscilátorů, těžiště



Obr. 20.13: Celočíselný kvantový Hallův jev. Závislost podélného odporu  $\rho_{\rm xx}$ a Hallova odporu  $\rho_{\rm xy}$  na magnetickém poli naměřená na heterostruktuře AlGaAs/GaAs s elektronovou pohyblivostí 52 000 cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> při teplotě 66 mK. Maxima v podélném odporu jsou označena čísly, která odpovídají kvantovým číslům Landauových hladin, n. Šipky označují orientaci spinu elektronů.

 $Y(k_x)$ , jsou dány následujícími výrazy:

$$l_{\rm B} \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} \quad ; \quad Y(k_{\rm x}) \equiv \frac{\hbar}{eB} k_{\rm x} = l_{\rm B}^2 k_{\rm x} . \tag{20.53}$$

Poznamenejme, že ve směru  $\hat{z}$  předpokládáme existenci potenciálové jámy a tak nízkou elektronovou koncentraci, že je obsazen pouze její nejnižší vázaný mód. V tomto případě dvojrozměrného elektronového plynu není třeba vlastní funkci toho modu explicitně uvádět. Energetické spektrum je diskrétní, sestává z tzv. Landauových hladin, a nezávisí na vlnovém čísle  $k_{\rm x}$ 

$$E_{n,s_{z}}(k_{x}) = \hbar\omega_{c} \left(n + \frac{1}{2}\right) + g^{*}\mu_{B}Bs_{z} \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \cdots, \ \omega_{c} = \frac{eB}{m^{*}}, \ (20.54)$$

kde  $\omega_c$  je cyklotronová frekvence. Ze<br/>emanův člen  $g^* \mu_B B s_z$  nemá pro pochopení podstaty kvantového Hallova je<br/>vu podstatný význam. V zájmu jednoduchosti výkladu nebude proto v následujícím výkladu brán v úvahu.

Pokud jsou všechny stavy v dané n-té Landauově hladině obsazené, odpovídající příspěvek k plošné hustotě elektronů je konstantní

$$n_{\rm e}^{(\rm n)}(\mathbf{r}) \equiv |\Psi_{\rm n,k_x}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{\rm n}^2 \left(\frac{y - Y(k_{\rm x})}{l_{\rm B}}\right) dk_{\rm x} = = \frac{1}{2\pi l_{\rm B}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_{\rm n}^2 \left(\frac{y - y'}{l_{\rm B}}\right) dy' = \frac{eB}{h} = \frac{B}{\Phi_0} .$$
(20.55)

Z toho plyne, že i hustota stavů v Landauově hladině je eB/h a na jeden stav připadá jedno kvantum magnetického toku  $\Phi_0 = h/e$ . Je tedy vhodné zavést plnicí faktor  $\nu$ , který je definován jako počet obsazených stavů připadajících na jedno kvantum magnetického toku. Formálním dosazením do vztahu (20.50) pro Hallův odpor dostaneme

$$n_{\rm e} = \nu \frac{eB}{h} = \nu \frac{B}{\Phi_0} \implies R_{\rm H} = -\frac{B}{en_{\rm e}} = -\frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu}.$$
 (20.56)



Obr. 20.14: Energie Landauových stavů v závislosti na poloze center  $Y(k_x)$ , silné linie. Krátké vodorovné čárky znázorňují lokalizované stavy.

Pokud je plně zaplněno *i* Landauových hladin a ostatní jsou prázdné, je plnicí faktor celočíselný a právě roven  $i, \nu \rightarrow i$ . Hallův odpor by v tomto případě nabýval kvantových hodnot daných poměrem kvantové jednotky odporu  $h/e^2$  a celého čísla. Avšak pro danou koncentraci elektronů je plnicí faktor nepřímo úměrný magnetickému poli a Hallův odpor dle výše uvedeného vztahu je lineární funkcí magnetického pole jako v klasickém případě a nevysvětluje naměřenou schodovitou závislost.

Pozorovaná existence prodlev Hallova odporu v závislosti na magnetickém poli vyžaduje detailnější rozbor vlastností energetického spektra. Předpokládejme, že v blízkosti hran pásku je omezující potenciál pomalu se měnící funkcí y, a to tak, že na intervalu daném magnetickou délkou  $l_{\rm B}$  jej lze považovat za konstantní,  $(dV_{\rm o}/dy)l_{\rm B} \ll \hbar\omega_{\rm c}$ . V takovém případě lze změnu energie aproximovat střední hodnotou omezujícího potenciálu

$$E_{\mathrm{n}}(k_{\mathrm{x}}) = \hbar\omega_{\mathrm{c}}\left(\mathrm{n} + \frac{1}{2}\right) + \langle \mathrm{n}, k_{\mathrm{x}}|V_{\mathrm{o}}(y)|\mathrm{n}, k_{\mathrm{x}}\rangle = \hbar\omega_{\mathrm{c}}\left(\mathrm{n} + \frac{1}{2}\right) + V_{\mathrm{o}}\left(Y(k_{\mathrm{x}})\right) .$$
(20.57)

ſ	э	6	)	6	)
r	ſ		ì		ĥ
•	,	٩,	,	5	,

Degenerace energetického spektra v $k_{\rm x}$ je tak částečně sejmuta. Vzhledem k tomu, že poloha těžiště elektronů  $Y(k_x)$  je lineární funkcí  $k_x$ , vztah (20.53), můžeme větve energetického spektra znázorňovat jako funkci těžiště, viz obr. 20.14. Obecně platí, že jakýkoliv rostoucí (klesající) potenciál  $V_{o}(y)$  vyvolá příspěvek k energii, který je rostoucí (klesající) funkcí  $Y(k_x)$ , i když odpovídající funkční závislost  $k_x$  má složitější tvar než v popsaném případě pomalu se měnícího potenciálu. Vzhledem k tomu, že střední hodnota rychlosti ve směru  $\hat{x}$  je dána derivací energie podle  $k_{\rm x}$ , viz vzorec (20.9), mají elektrony nenulovou rychlost pouze v blízkosti hran vzorku. Díky Lorentzově síle mají rychlosti elektronů u protilehlých hran pásku opačný směr. Tyto, tzv. hranové stavy, vytvářejí pro elektrony jednosměrné vodivostní kanály, které jsou prostorově odděleny, jak je znázorněno na obr. 20.15a. Jejich klasický ekvivalent je znázorněn na obr. 20.15b. Klasická nabitá částice se v magnetickém poli pohybuje po kruhové dráze. U hran však naráží na stěnu reprezentující hranu pásku, odráží se od ní, a důsledkem je pohyb částice podél hran vzorku. Podél hran teče elektrický proud i ve stavu termodynamické rovnováhy. Jsou to tzv. demagnetizační proudy, které snižují celkový diamagnetický moment indukovaný magnetickým polem. V klasické limitě přesně kompenzují diamagnetický moment elektronů uvnitř vzorku.

V případě ideálního systému s konstantním potenciálem uvnitř vzorku se v energetické oblasti mezi Landauovými hladinami vyskytují pouze elektrony v hranových stavech lokalizovaných v blízkosti hran pásku. U každé z hran se vyskytují pouze stavy, jejichž střední hodnota rychlosti má stejné znaménko. Přechody mezi hranovými stavy při jedné hraně, které mohou být vyvolány rozptylem, nemohou vést ke zpětnému rozptylu, který je podstatný pro existenci elektrického odporu. Nedokáží změnit velikost proudu podél hrany. Přechody do hranových stavů na protilehlé hraně, které se vyznačují opačným směrem rychlosti, jsou potlačeny, pokud je



Obr. 20.15: a) Dráhy elektronů na Fermiho mezi. Hranové stavy reprezentují přímé linie v blízkosti hran vzorku, uzavřené křivky znázorňují lokalizované stavy. Tečkované kružnice vymezují oblasti disipace energie za předpokladu, že  $\mu_1 > \mu_2$ . b) Dráhy elektronu jako klasické částice.

šířka vzorku podstatně větší než magnetická délka  $l_{\rm B}$ . Důvodem je, že překryv vlnových funkcí lokalizovaných u protilehlých hran vzorku je v takovém případě zanedbatelný. Popsané vlastnosti odpovídají situaci, kdy Fermiho energie leží v oblasti mezi Landauovými hladinami. Obvykle se tento režim nazývá režimem kvantového

Hallova jevu. Situace se změní, pokud Fermiho energie leží v některé z Landauových hladin. V hladině se pak vyskytují jak obsazené, tak i neobsazené stavy, což umožňuje přechody elektronů mezi stavy reprezentovanými vlnovým číslem  $k_x$ . Se změnou  $k_x$  je spojena změna polohy těžiště  $Y(k_x)$  a elektrony tedy mohou putovat napříč vzorkem. Tím jsou umožněny přechody mezi protilehlými hranami pásku a tedy i zpětný rozptyl, který vždy vede k nenulové hodnotě odporu.

V režimu kvantového Hallova jevu se díky nulovému zpětnému rozptylu dvojrozměrný elektronový systém o konečné šířce, byť makroskopických rozměrů, chová jako balistický vodič s celočíselným počtem vodivostních kanálů. Ten je dán počtem větví energetického spektra protínajících Fermiho energii, který je právě roven počtu Landauových hladin pod Fermiho energií, *i*. Konduktance je pak dána vztahem (20.19) a nabývá kvantových hodnot  $e^2i/h$ . Neexistence zpětného rozptylu zaručuje, že rozdíl chemických potenciálů podél hran je nulový,  $\mu_3 = \mu_4 = \mu_1$  a  $\mu_5 = \mu_6 = \mu_2$ , viz obr. 20.15a. Spád napětí ve směru proudu je nulový a podélný odpor vymizí. Z toho vyplývá, že proud je veden bez energetických ztrát, tedy bez disipace energie. V tomto režimu nabývá Hallův odpor kvantových hodnot. Za předpokladu, že  $\mu_1 > \mu_2$ , elektrony se pohybují ve směru  $\hat{x}$ , elektrický proud  $J = (e^2/h) i (\mu_1 - \mu_2)/e$  teče opačným směrem, dostaneme

$$R_{\rm H}^{\rm (Q)} \equiv -\frac{\mu_3 - \mu_5}{eJ} = -\frac{\mu_4 - \mu_6}{eJ} = -\frac{\mu_1 - \mu_2}{eJ} = -\frac{h}{e^2} \frac{1}{i} \,. \tag{20.58}$$

Poznamenejme, že v případě kdy jsou nositeli náboje díry nabývají kvantové hodnoty Hallova odporu kladných hodnot. Pokud se Fermiho mez nachází v Landauově hladině je zpětný rozptyl umožněn, podélný odpor ( $\mu_3 - \mu_4$ )/(eJ) = ( $\mu_5 - \mu_6$ )/(eJ) je nenulový a hodnoty Hallova odporu nabývají hodnot v rozmezí daném jeho nejbližšími kvantovými hodnotami. Píky v závislosti podélného odporu  $\rho_{xx}$  na obr. 20.13 odpovídají podmínkám, za kterých se Fermiho mez nachází právě ve



Obr. 20.16: Závislost hustoty stavů g(E) rozšířených Landauových hladin na energii.

středu některé z Landauových hladin. V nejvyšších polích lze rozlišit Landauovy hladiny s různou orientací spinu, zatímco ve slabších polích dávajících menší hodnotu Zeemanovy energie se překrývají.

V reálných strukturách, díky různým poruchám, není potenciál uvnitř vzorku konstantní. Fluktuace potenciálu vedou k rozšíření Landauových hladin na energetické pásy, ve kterých dochází k jevu lokalizace, jak je schematicky znázorněno na obr. 20.16. Jde o silnou lokalizaci, kdy koherentní délka  $\lambda_{\phi}$  je větší než lokalizační délka  $L_{\text{lok}}$ . Fyzikální podstata vzniku lokalizovaných stavů je však stejná jako v již

diskutovaném případě slabé lokalizace, kdy  $\lambda_{\phi} \ll L_{\text{lok}}$ . Lokalizované stavy se objeví v energetickém pásu mezi Landauovými hladinami, jak je znázorněno na obr. 20.14.

V případě silných magnetických polí a pomalu se měnícího potenciálu V(x, y) uvnitř vzorku si tyto lokalizované stavy můžeme představit jako vnitřní hranové stavy, viz obr. 20.15a. Elektrony se pohybují po ekvienergetických drahách, vrstevnicích, definovaných rovnicí

$$E = \hbar\omega_{\rm c} \left( {\rm n} + \frac{1}{2} \right) + V(x, y) . \qquad (20.59)$$

Pokud vzdálenosti mezi drahami jsou podstatě větší než magnetická délka  $l_{\rm B}$ , je pravděpodobnost přechodu mezi lokalizovanými stavy zanedbatelná. Přechod elektronů mezi stavy na protilehlých hranách vzorku není v takovém případě možný, stejně jako tomu bylo v případě konstantního potenciálu uvnitř vzorku.

Pro existenci širokých prodlev Hallova odporu v závislosti na magnetickém poli je přítomnost lokalizovaných stavů podstatná. Pokud by neexistovaly, udržovala by se Fermiho mez pro velké intervaly magnetických polí v Landauově hladině. V okamžiku naplnění či vyprázdnění všech stavů v hladině by se Fermiho hladina velmi rychle zachytila v sousední Landauově hladině. Lokalizované stavy umožňují, aby se Fermiho energie nacházela v širokém intervalu magnetických polí právě v oblasti mezi Landauovými hladinami, tedy v režimu kvantového Hallova jevu. Pokud by však fluktuace potenciálu byly příliš silné, mohl by být jeho vliv na energetické spektrum elektronů podstatnější než vliv magnetického pole. V takovém případě by systém vykazoval klasickou závislost Hallova odporu na magnetickém poli, podobně jako při teplotách, pro něž je tepelná energie větší než energetický rozdíl mezi Landauovými hladinami,  $k_{\rm B}T > \hbar\omega_{\rm c}$ .

Uvedený popis kvantového Hallova jevu by mohl vést k závěru, že elektrický proud teče pouze po hranách pásku. Ve skutečnosti tomu tak není. Odchylky chemických potenciálů v blízkosti hran pásku od rovnovážných hodnot vyvolají změnu koncentrace nositelů, a tedy i náboje. Ta je zodpovědná



Obr. 20.17: Schematické znázornění závislosti energie Landauových stavů na poloze center  $Y(k_x)$  v režimu kvantového Hallova jevu. Plná čára znázorňuje obsazené stavy, čárkovaná prázdné. Průběh Fermiho energie je zobrazen tečkovaně.

za vznik elektrického pole napříč páskem, a následně i gradientu elektrostatického potenciálu. Odpovídající lokální změny energie si lze představit tak, že Landauovy hladiny v závislosti na poloze budou mít nenulový sklon a elektronové stavy nenulovou střední hodnotu rychlosti. Z požadavku nábojové neutrality zajišťujícího, že uvnitř vzorku musí být koncentrace elektronů rovna jejich rovnovážné koncentraci, plyne, že Fermiho energie bude mít napříč vzorkem stejný sklon jako Landauovy hladiny.

Změny elektronové koncentrace u hran vzorku mají vliv i na hranové stavy. Ty jsou modifikovány coulombickou interakcí elektronů s kladným nábojem pozadí, která je zodpovědná za tvorbu omezujícího potenciálu. Rozbor založený na podmínce minimalizace coulombické energie vede k závěru, že na Fermiho energii existují oblasti s nulovou dispersí hranových stavů [17], jak je znázorněno na obr. 20.17. Vzhledem k tomu, že konduktance balistického vodiče, tedy vodiče, ve kterém je potlačen zpětný rozptyl, nezávisí na tvaru energetické disperze  $E_n(k_x)$ , diskutovaná modifikace energetického spektra nevede ke změně konduktance a tedy ani Hallova odporu. Energie  $\mu_1^*$  a  $\mu_2^*$  na obr. 20.17 jsou dány nejen změnou elektronové koncentrace, ale i indukovaným elektrickým polem. Jde o elektrochemické potenciály, jejichž rozdíl odpovídá měřenému napětí. Je to i v souladu s obecnou zákonitostí, že v lineárním přiblížení dává odezva jak na gradient chemického potenciálu, tak i na elektrické pole, stejný výsledek.

Režim kvantového Hallova jevu je nedisipativní. Protože celkový odpor měřený mezi proudovými přívody není nulový, musí někde docházet k disipaci energie. Ukazuje se, že je to právě v blízkosti proudových kontaktů, a to v místech, kde je rozdíl potenciálů největší, viz obr. 20.15a. Disipovaná energie se přeměňuje v tepelnou energii mřížky, což vede k lokálnímu zvýšení teploty. Jednou z metod, kterou byla tato skutečnost experimentálně ověřena, bylo využití fontánového jevu [18], který jsme diskutovali v kapitole o supratekutém <sup>4</sup>He . Díky tomuto jevu je tloušťka <sup>4</sup>He filmu, kterým je vzorek pokryt, větší v místech s vyšší teplotou. Změny tloušťky filmu byly detekovány optickými metodami. V analogii s kvazijednorozměrnými systémy lze tedy i kvantový Hallův odpor považovat za vstupní, kontaktní odpor.

S rostoucím proudem roste Hallovo napětí, tedy i sklon Landauových hladin a lze očekávat, že existuje kritická hodnota proudu, při jejímž překročení systém z režimu kvantového Hallova jevu vypadne. To nastane tehdy, dojde-li k excitacím umožňujícím přechody elektronů mezi stavy nakloněných Landauových hladin. Hrubý odhad lze získat použitím Landauovy představy o kritické rychlosti proudění, diskutované v kapitole o supratekutém <sup>4</sup>He. Nejběžnějšími excitacemi elektronů v pevných látkách jsou fonony. Lze tedy předpokládat, že kritická proudová hustota  $j_c \equiv ev_{\rm D}n_{\rm e}$  bude mít hodnotu určenou podmínkou, že driftová rychlost elektronů  $v_{\rm D}$  dosáhne rychlosti zvuku uv daném materiálu. V režimu kvantového Hallova jevu si plně obsazenými Landauovými hladinami je elektronová hustota $n_{\rm e} = ieB/h$ a pro kritickou proudovou hustotu dostaneme

$$j_{\rm c} = e u n_{\rm e} = i \frac{e^2}{h} B u$$
 (20.60)

Měřené hodnoty kritických proudů jsou obvykle v souladu s uvedeným vztahem. Pro představu, v polovodičích je  $u \sim 2000 \text{ m s}^{-1}$  a pro  $i = 1 \text{ a } B \sim 7 \text{ T}$ , je  $j_c \sim 1 \text{ A m}^{-1}$ . Při překročení kritického proudu začnou elektrony spontánně vyzařovat fonony, podobně jako letadlo při překročení rychlosti zvuku.

Kvantový Hallův odpor je dán celočíselným zlomkem univerzální konstanty  $h/e^2$ . Naměřené hodnoty jsou tedy nezávislé na dalších charakteristikách systému a na materiálu použitém pro přípravu dvojrozměrného elektronového systému. To je důvod, proč celočíselný kvantový Hallův jev našel uplatnění v metrologii jako standard elektrického odporu.

# 20.9 Zlomkový kvantový Hallův jev

Již v roce 1982 došlo při měření kvantového Hallova jevu k dalšímu překvapení. Tsui, Störmer a Gossard v závislostech na magnetickém poli objevili prodlevu s hodnotou Hallova odporu  $R_H=3h/e^2$ odpovídající podmínkám, při kterých je zaplněna nejnižší Landauova hladina pouze z jedné třetiny [19], i $\rightarrow$ 1/3. Coulombickou interakci jako fyzikální příčinu existence naměřeného zlomkového Hallova jevu odhalil Laughlin, který spolu se Störmerem a Tsuiem za tento objev obdržel v roce 1998 Nobelovu cenu. Objev byl umožněn pokrokem v technologii přípravy dvojrozměrných elektronových systémů, které vykazovaly stále větší elektronovou pohyblivost. S postupem času byla pozorována série prodlev v Hallově odporu odpovídající hodnotám

$$R_{\rm H}^{\rm (Q)} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu} \,, \tag{20.61}$$

kde plnicí faktor  $\nu$  nabýval hodnot daných poměrem dvou celých čísel, přičemž jmenovatel byl lichý. Jako v případě celočíselného Hallova jevu byl v oblasti prodlev pozorován pokles podélného odporu. Díky dokonalosti studovaných dvojrozměrných systémů, ve kterých byly výrazně potlačeny potenciálové fluktuace, byla snížena hustota lokalizovaných stavů a prodlevy odpovídající celočíselnému Hallovu jevu byly mnohem užší ve srovnání s méně dokonalými systémy, na kterých byl pozorován pouze celočíselný Hallův jev. Typický příklad zlomkového kvantového Hallova jevu, převzatý z práce [20], je na obr. 20.18.

Hamiltonián pro $N_{\rm e}$ interagujících elektronů má tvar

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{i=1}^{N_e} \left[ \boldsymbol{p}_i + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i) \right]^2 + \sum_{i=1}^{N_e} \left[ V(\boldsymbol{r}_i) + \sum_{j < i}^{N_e} \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|} \right] , \qquad (20.62)$$

kde  $V(\mathbf{r})$  je potenciál kladného pozadí zajišťující nábojovou neutralitu celého systému. V téměř ideálních dvojrozměrných systémech je možno kladný náboj pozadí považovat za homogenně rozprostřený v prostoru. Standardní postup při řešení mnohačásticového problému vychází z vlastních funkcí jednočásticového Hamiltoniánu z nichž se sestavuje Slaterův determinant jako nulové přiblížení. Vzhledem k tomu, že coulombická interakce závisí na rozdílech souřadnic, je vhodné použít pro vektorový potenciál tzv. symetrický výběr,  $\mathbf{A} = B(-y/2, x/2, 0)$ . Vlastní funkce pak mají v polárních souřadnicích následující tvar

$$\Psi_{n_{r},m}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{l_{B}} \sqrt{\frac{n_{r}!}{(n_{r}+m)!}} \left(\frac{r}{l_{B}\sqrt{2}}\right)^{|m|} L_{n_{r}}^{|m|} \left(\frac{r^{2}}{2l_{B}^{2}}\right) e^{-\frac{r^{2}}{4l_{B}^{2}}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} , \quad (20.63)$$



Obr. 20.18: Zlomkový kvantový Hallův jev. Závislost podélného odporu $\rho_{\rm xx}$ a Hallova odporu $\rho_{\rm xy}$ na magnetickém poli naměřená na heterostruktuře AlGaAs/GaAs s elektronovou pohyblivostí 300 000 cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup>s<sup>-1</sup> při teplotě 400 mK.

kde $r=\sqrt{x^2+y^2},\ L^{\alpha}_{\rm n}(t)$ jsou Laguerrovy polynomy a ${\rm n_r}=0,1,\cdots$ je radiální kvantové číslo. Orbitální celé číslo m, které definuje kvantové hodnoty orbitálního momentu $\hbar {\rm m},$ musí splňovat podmínku  $2{\rm n_r}+|{\rm m}|-{\rm m}\geq 0$ . Na rozdíl od vlastních funkcí (20.52) pro nesymetrický Landauův výběr jsou tyto funkce lokalizované ve všech směrech. Energetické spektrum je nezávislé na výběru vektorového potenciálu  $\boldsymbol{A}$ a je tedy tvořeno diskrétními Landau<br/>ovými hladinami

$$E_{n_{r}}(m) = \hbar\omega_{c}\left(n_{r} + \frac{|m| - m + 1}{2}\right) \equiv \hbar\omega_{c}\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad (20.64)$$

kde n je index Landauovy hladiny.

V dalším výkladu se pro jednoduchost omezíme na nejnižší Landauovu hladinu s n = 0, pro kterou n<sub>r</sub> = 0, orbitální číslo nabývá pouze nezáporných hodnot (m = 0, 1, · · ·),  $L_0^{\rm m}(t) = 1$  a vlastní funkce mají následující tvar

$$\Psi_{0,\mathrm{m}}(z) = \frac{1}{l_{\mathrm{B}}} \sqrt{\frac{1}{2\pi \,\mathrm{m}! \, 2^{\mathrm{m}}}} z^{\mathrm{m}} e^{-\frac{|z|^2}{4}} \qquad ; \qquad z \equiv \frac{r}{l_{\mathrm{B}}} e^{i\phi} \,. \tag{20.65}$$

Vlnová funkce pro $N_{\rm e}$ elektronů, daná Slaterovým determinantem, má v tomto případě tvar Jastrowových funkcí

$$\Psi_{0}(\boldsymbol{r}_{1},...,\boldsymbol{r}_{N_{e}}) = C \begin{vmatrix} 1 & z_{1} & z_{1}^{2} & \dots \\ 1 & z_{2} & z_{2}^{2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \prod_{i=1}^{N_{e}} e^{-\frac{|z_{i}|^{2}}{4}} = C \prod_{j
(20.66)$$

kde C je normalizační faktor. Rozdíl  $z_j - z_k$  reprezentuje odpuzování elektronů. Vyjadřuje skutečnost, že dva elektrony se nemohou vyskytovat na stejném místě.

V případě plně obsazené Landauovy hladiny je elektronová hustota konstantní, viz vzorec (20.55), a ideálně odstiňuje homogenní kladné pozadí. Není-li plně obsazena, elektronové stavy by měly být rozprostřeny řidčeji po prostoru, měly by se tedy více odpuzovat a tak lépe odstiňovat kladné pozadí. Laughlin navrhl popsat takový stav Jastrowovými funkcemi (20.66), ve kterých je rozdíl  $z_j - z_k$  nahrazen jeho mocninou, která zaručuje silnější odpuzování elektronů. Ta musí nabývat lichých hodnot, aby byla zaručena antisymetričnost mnohaelektronového stavu

$$\Psi_0(\boldsymbol{r}_1,...,\boldsymbol{r}_{N_{\rm e}}) = C \prod_{j<\mathbf{k}}^{N_{\rm e}} (z_j - z_k)^{2p+1} \prod_{i=1}^{N_{\rm e}} e^{-\frac{|z_i|^2}{4}}.$$
 (20.67)

Lze očekávat, že tato substituce povede ke snížení hustoty náboje v porovnání s případem plně obsazené Landauovy hladiny.

Máme-li k dispozici  $N_{\rm e}$  elektronů, zaplňují postupně jedno-částicové stavy s m = 0, 1, 2, ...,  $N_{\rm e} - 1$ . Plocha zaplněná elektrony bude reprezentována poloměrem daným nejvyšší mocninou souřadnice  $z_{\rm j}$ , tedy mocninou m<sub>p</sub>  $\equiv (2p + 1)(N_{\rm e} - 1)$ . Je tedy dána plochou, kterou vymezuje jednočásticový stav  $|0, m_{\rm p}\rangle$  s vlastní funkcí definovanou vztahem (20.65),

$$\langle 0, \mathbf{m}_{\mathbf{p}} | \pi r^{2} | 0, \mathbf{m}_{\mathbf{p}} \rangle = \frac{1}{l_{\mathrm{B}}^{2} \mathbf{m}_{\mathbf{p}}! \, 2^{\mathbf{m}_{\mathbf{p}}}} \int_{0}^{+\infty} r \, dr \, \frac{1}{2\pi} \int_{0}^{2\pi} d\phi \, \pi r^{2} \, \left(\frac{r^{2}}{l_{\mathrm{B}}^{2}}\right)^{\mathbf{m}_{\mathbf{p}}} e^{-\frac{r^{2}}{2l_{\mathrm{B}}^{2}}} = (20.68)$$

$$= \frac{2\pi l_{\mathrm{B}}^{2}}{\mathbf{m}_{\mathbf{p}}!} \int_{0}^{+\infty} x^{\mathbf{m}_{\mathbf{p}}+1} e^{-x} \, dx = \frac{2\pi l_{\mathrm{B}}^{2}}{\mathbf{m}_{\mathbf{p}}!} \, \Gamma(\mathbf{m}_{\mathbf{p}}+2) = 2\pi l_{\mathrm{B}}^{2} \left[ (N_{\mathrm{e}}-1) \left(2\mathbf{p}+1\right)+1 \right] \, ,$$

kde $\Gamma(m_p+2)=(m_p+1)!.$ Počet elektronů připadající na plochu, kterou prochází jedno kvantum magnetického toku, plnicí faktor $\nu$ , je tedy pro makroskopické systémy a nejnižší Landauovu hladinu dán následujícím vztahem :

$$\nu = \lim_{N_{\rm e} \to +\infty} \frac{2\pi \, l_{\rm B}^2 \, N_{\rm e}}{\langle 0, m_{\rm p} | \pi r^2 | 0, m_{\rm p} \rangle} = \frac{1}{2{\rm p}+1} \,. \tag{20.69}$$

Pro tyto plnicí faktory je homogenní kladné pozadí dobře odstíněno a lze očekávat, že základní stav bude dobře aproximován funkcemi Jastrowova typu. Bylo prokázáno, že excitované stavy jsou odděleny od tohoto základního stavu energetickou mezerou. Ta je však menší, než v případě plně zaplněných Landauových hladin, kdy excitační energie je dána cyklotronovou energií  $\hbar\omega_c$ . To je příčinou, proč se zlomkový Hallův jev pozoruje na dokonalejších dvojrozměrných systémech s vysokou elektronovou pohyblivostí. Budeme-li vycházet z plně zaplněné Landauovy hladiny a výše uvedený postup aplikovat na díry, dostaneme stabilní základní stav pro plnicí faktory

$$\nu = 1 - \frac{1}{2p+1} = \frac{2p}{2p+1}$$
 (20.70)

Uvedené hodnoty plnicích faktorů jsou v souhlase s řadou hodnot Hallova odporu v pozorovaných prodlevách. Pro vysvětlení dalších experimentálně pozorovaných zlomkových plnicích faktorů je teoretický popis složitější.

Snahou teorie je nejen popsat a nalézt fyzikální příčiny pozorovaných vlastností, ale také nalézt dostatečně jednoduchý popis. To obvykle vede k zavedení slabě interagujících kvazičástic, do jejichž vlastností je zahrnut podstatný vliv interakce. Jaké kvazičástice by mohly přicházet v úvahu lze usoudit z hustoty rozložení náboje odpovídající jednoelektronovému popisu, jak je schematicky znázorněno na obr. 20.19a pro tzv. spaghetti stavy (angl. spaghetti states) dané vztahem (20.52). Je zřejmé, že při částečném zaplnění stavů Landauovy hladiny je kladný potenciál pozadí nerovnoměrně odstiňován. Důsledkem je výrazné zvýšení celkové energie o energii coulombickou. První z ideí bylo rozprostřít náboj elektronů rovnoměrně v prostoru, jinými slovy, přidělit Landauovým stavům zlomkový náboj. Takto zavedené kvazičástice by pak měly zlomkový náboj, například pro třetinové zaplnění Landauovy hladiny, by všechny stavy byly obsazeny, ale každý z nich by nesl náboj e/3. Odstínění pozitivního náboje by bylo ideální. S nábojem však bylo třeba rozdělit rovnoměrně i spin. Takové kvazičástice pak nejsou ani bozony ani fermiony, jsou to anyony řídící se nestandardní anyonovou statistikou, což bylo hlavní příčinou proč takové kvazičástice nebyly širokou fyzikální komunitou akceptovány.



Obr. 20.19: a) Rozložení hustoty náboje v nejnižší Landauově hladině zaplněné z jedné třetiny bez započtení coulombické interakce. Plnou čarou jsou znázorněny obsazené stavy, tečkovanou prázdné stavy. Každá z čárkovaných silokřivek znázorňuje kvantum magnetického toku  $\Phi_0$ . b) Schéma kompozitního fermionu, elektronu svázaného se dvěma kvanty magnetického toku.

Úspěšné bylo teprve zavedení kvazičástic nazývaných kompozitní fermiony. Vychází z experimentálního pozorování, že v případě polovičního zaplnění Landauovy hladiny se systém chová téměř jako kov v nulovém magnetickém poli. Jde-li o nejnižší Landauovu hladinu, n = 0, můžeme například vytvořit kvazičástici, kompozitní fermion, složenou z jednoho elektronu a dvou kvant magnetického toku, znázorněnou na obr. 20.19b. Dvě kvanta magnetického toku reprezentují magnetické pole  $B_0$ , a kompozitní fermion tedy cítí pouze magnetické pole dané rozdílem aplikovaného pole B a pole  $B_0$ . Redukované pole  $\Delta B = B - B_0$  kvantuje stavy kompozitních fermionů stejně jako stavy elektronů volných, což vede ke vzniku Landauových hladin. Odpovídající cyklotronová frekvence je však menší, dána redukovaným polem,

 $\omega_{\rm CF} = e\Delta B/m_{\rm CF}^*$ . Díky interakci mezi elektrony je efektivní hmotnost kompozitních fermionů obvykle větší než elektronů v nulovém magnetickém poli.

Vztah mezi plnicím faktorem pro kompozitní fermiony  $\nu_{\rm CF}$ a faktorem  $\nu<1$ je dán následující rovností

$$\nu = \frac{n_{\rm e}}{\frac{eB}{h}} = \frac{n_{\rm e}}{\frac{e(B_0 + \Delta B)}{h}} = \frac{\nu_0}{1 + \frac{\Delta B}{B_0}} = \frac{\nu_{\rm CF}}{1 + \frac{\nu_{\rm CF}}{\nu_0}} \quad ; \quad \nu_0 \equiv \frac{n_{\rm e}}{\frac{eB_0}{h}} , \tag{20.71}$$

kde  $n_{\rm e}$  je plošná koncentrace elektronů. V případě, že budou plně obsazeny Landauovy hladiny kompozitních fermionů,  $\nu_{\rm CF} = 1, 2, \ldots$ , bude elektronová nábojová hustota homogenní a kladný náboj pozadí bude optimálně kompenzován. V takových případech lze očekávat vznik režimu kvantového Hallova jevu. Odpovídající hodnoty plnicích faktorů  $\nu$  definuje vztah (20.71) s  $\nu_{\rm CF}$  nabývajícím celočíselných hodnot. Vezmeme-li v úvahu i elektronovou-děrovou symetrii ( $\nu \rightarrow 1 - \nu$ ) dostaneme pro nejnižší Landauovu hladinu, pro kterou  $\nu_0 = 1/2$ , následující kvantové hodnoty Hallova odporu

$$R_{\rm H}^{\rm (Q)} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad , \quad \nu = \frac{1}{3}, \frac{2}{5}, \frac{3}{7}, \frac{4}{9}, \frac{5}{11}, \dots, \frac{2}{3}, \frac{3}{5}, \frac{4}{7}, \frac{5}{9}, \frac{6}{11}, \dots \quad . \quad (20.72)$$

Tyto zlomkové hodnoty plnicích faktorů jsou plně v souhlasu s pozorovanými hodnotami, viz obr. 20.18. Musíme však mít na paměti, že započtení interakce je pouze přibližné a dobře platí pouze pro ty plnicí faktory, které se příliš neliší od plnicího faktoru ve středu Landauovy hladiny. Pro vysvětlení dalších pozorovaných hodnot zlomkového Hallova odporu je třeba vytvářet kompozitní fermiony vyššího řádu, sestavené z doposud uvažovaných kompozitních fermionů a kvant magnetického toku. Za podmínek, že je obsazeno více Landauových hladin, tvoří plně obsazené hladiny homogenní pozadí a zlomkový Hallův jev je možno pozorovat pro plnicí faktory dané vztahem (20.72), navýšené o počet plně obsazených hladin.

Zavedení kompozitních fermionů umožňuje aplikovat všechny představy spojené s režimem celočíselného Hallova jevu, jako je například existence hranových a lokalizovaných stavů, i na případ zlomkového Hallova jevu. Čím je systém dokonalejší, neuspořádanosti ubývá, tím více zlomkových hodnot je možno pozorovat. Na druhé straně se však prodlevy v Hallově odporu zužují a pro dokonale homogenní systémy lze předpokládat, že Hallův odpor poroste lineárně s magnetickým polem,  $R_{\rm H} = (h/e^2)(1/\nu)$ . Lze tedy očekávat, že na dokonalých vzorcích bude pozorována stejná závislost, jakou již v roce 1897 pozoroval na kovových páskách sám objevitel Hallova jevu jako student posledního ročníku na universitě Johna Hopkinse v Baltimore.

### 20.10 Rezonanční tunelování

Současné technologie umožňují vytvářet v polovodičových strukturách hluboké potenciálové jámy o rozměrech řádu několika desítek nanometrů. Ty mají diskrétní energetické spektrum a jejich obsazením vzniknou vlastně umělé atomy, tzv. kvantové tečky. Napojíme-li takový atom na proudové přívody tak, aby mezi přívody a atomem vznikly potenciálové bariery, lze pomocí měření odporu studovat rozložení hladin. Překryv mezi vlnovými funkcemi elektronů v přívodech a "atomovými"



Obr. 20.20: a) Schéma tunelovací struktury s umělým atomem kontrolovaným hradlovým napětím  $V_{\rm g}$ . b) Potenciálový profil tunelovací struktury s vyznačenými hladinami umělého atomu.

energii tunelujícího elektronu.

ciálových bariérách,

dina objeví, dojde k tunelování elektronů. Transmisní koeficient, který určuje konduk-V případě, že se v intervalu  $\Delta \mu$  nachází pouze jedna hladina, jde o tunelovací strukturu, která má jednorozměrný charakter. Transmisní koeficient T(E) je pak dán již dříve odvozeným vztahem (20.25), který popisuje rozptyl na dvou poten-

$$T(E) = \frac{T_1 T_2}{1 - 2\sqrt{R_1 R_2} \cos(2k_{\rm x} d + \theta) + R_1 R_2}, \qquad (20.73)$$

kde $T_1 = 1 - R_1$ a $T_2 = 1 - R_2$ jsou pravděpodobnosti průchodu potenciálovými bariérami označenými indexy 1 a 2, d označuje jejich vzdálenost a vlnové číslo  $k_x$ reprezentuje energii procházejícího elektronu. Pro uvažovaný případ elektronového tunelování se předpokládá že  $T_1$  i  $T_2$  jsou mnohem menší než 1. Využitím aproximace  $\sqrt{R_1R_2} \approx 1 - (T_1 + T_2)/2$  a rovnosti  $\cos \phi = \cos^2 \phi/2 - \sin^2 \phi/2$  dostaneme

$$T(E) = \frac{T_1 T_2}{(1 - \sqrt{R_1 R_2})^2 + 4\sqrt{R_1 R_2} \sin^2(\phi/2)} \approx \frac{4T_1 T_2}{(T_1 + T_2)^2} \frac{1}{1 + 16\frac{\sin^2(\phi/2)}{(T_1 + T_2)^2}},$$
(20.74)

kde  $\phi \equiv 2k_x d + \theta$ . Maximum tunelovací pravděpodobnosti dostaneme za podmínky rezonance, kdy  $\phi = \phi_r$  je celistvým násobkem  $2\pi$ . To odpovídá energii E právě rovné energii některé z "atomových" hladin $E_{\rm n}.$ Je-li $\delta\phi$ malou odchylkou od hodnoty $\phi_{\rm r}$ odpovídající energetickému rozdílu $\delta E=E-E_{\rm n},$ dostaneme

$$2\sin(\delta\phi/2) \approx \delta\phi = \frac{\delta\phi}{\delta k_{\rm x}} \frac{\delta k_{\rm x}}{\delta E} \left(E - E_{\rm n}\right) = \frac{2d}{\hbar v} \left(E - E_{\rm n}\right) , \qquad (20.75)$$

C	4	ิก
ю	4	-3

funkcemi vede nejen k posunu hladin, ale i k jejich rozšíření. Omezíme se proto na případ malého překryvu, kdy pravděpodobnosti průchodu elektronu bariérami jsou mnohem menší než jedna, tedy když konduktance  $G \ll e^2/h$ . V takovém případě mluvíme o elektronovém tunelování. Hradlo v blízkosti umělého atomu umožňuje vložením napětí  $V_{\rm g}$  měnit hloubku potenciálové jámy, tedy hodnotu potenciálového minima  $V_0$ , a tak měnit i polohu hladin vzhledem k chemickému potenciálu v přívodech. Schéma takové struktury je znázorněno na obr. 20.20. Je zřejmé, že pokud se v energetickém intervalu  $\Delta \mu = \mu_1 - \mu_2$  nenachází žádná z hladin, bude pravděpodobnost průchodu elektronů nulová. Teprve když se v tomto intervalu hlatanci struktury bude tedy silně závislý na kde  $v = (\delta E / \delta k_x) / \hbar$  je střední hodnota rychlosti tunelujícího elektronu. V blízkosti rezonance má tedy transmisní koeficient v závislosti na energii Lorenzovský tvar

$$T(E) \approx \frac{T_{\max}}{1 + \left(\frac{E - E_n}{\Gamma}\right)^2} ; \quad T_{\max} \equiv \frac{4T_1 T_2}{(T_1 + T_2)^2} ,$$
 (20.76)

s pološířkou $\Gamma,$ 

$$\Gamma \equiv \frac{\hbar v}{4d} \left( T_1 + T_2 \right) \qquad ; \qquad \tau \equiv \frac{\hbar}{\Gamma} . \tag{20.77}$$

Veličina  $\Gamma$ reprezentuje i pološířku energetického stavu mezi potenciálovými bariérami, kde je elektron zachycen po dobu $\tau$ . Jedná se o tzv. dobu prodlení (angl. dwell time), která reprezentuje lokalizaci elektronu. S klesajícími hodnotami pravděpodobností  $T_1$  a  $T_2$  se doba prodlení prodlužuje. V případě  $T_1 = T_2 = 0$  je pak elektron plně lokalizován v "atomu" ve stavu s přesně definovanou energií $E_{\rm n}$ .

Rozdíl napětí  $U = \Delta \mu / e$  vyvolá tunelovací proud J daný transmisním koeficientem T(E). Vezmeme-li v úvahu spinovou degeneraci hladin, dostaneme

$$J = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} [f_0(E,\mu_1) - f_0(E,\mu_2)] T(E) dE , \qquad (20.78)$$

kde  $f_0(E,\mu)$ je Fermiho-Diracova rozdělovací funkce. V limit<br/>ě $eU\equiv\Delta\mu\ll\Gamma$ platí Ohmův zákon

$$J \rightarrow \frac{2e^2}{h} U \int_{-\infty}^{+\infty} \left( -\frac{df_0(E,\mu)}{dE} \right) T(E) dE \qquad \rightarrow \qquad \frac{2e^2}{h} T(\mu) U , \qquad (20.79)$$

přičemž pravý výraz odpovídá limitě nulové teploty. V závislosti na napětí  $V_{\rm g}$  vloženém na hradlo, které způsobuje posun "atomových" hladin, procházejí energetickým intervalem  $\Delta \mu$  jednotlivé hladiny, a konduktance G = J/U vykazuje řadu rezonancí daných závislostí transmisního koeficientu na energii.

Pokud je rozdíl chemických potenciálů  $\Delta \mu$  srovnatelný s šířkou hladiny Γ, Ohmův zákon přestane platit. Za podmínky, že rozšířená hladina bude zcela ležet v intervalu  $\Delta \mu$ , dosáhne tunelovací proud maximální hodnoty  $J_{\text{max}}$  nezávislé na aplikovaném napětí U. Dosazením výrazu (20.76) pro transmisní koeficient do vztahu (20.78) dostaneme

$$J_{\max} \quad \to \quad \frac{2e}{h} \,\pi \,\Gamma \,T_{\max} \,, \tag{20.80}$$

pokud však  $\Delta \mu$  nebude tak velké, aby k tunelovacímu proudu přispívalo více hladin.

Popsaný postup lze zobecnit i na vícerozměrné systémy, například na tunelování elektronů vrstevnatými strukturami. Uvažujme polovodič n-typu s kvadratickým disperzním zákonem  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ . Nechť se uvnitř něho nachází dvojrozměrný elektronový plyn orientovaný paralelně s rovinou y - z, oddělený od polovodičového

prostředí potenciálovými bariérami. Ve směru  $\hat{x}$  má pak energetické schéma stejný průběh jako v jednorozměrném případě znázorněném na obr. 20.20b. V analogii se vztahem (20.78) dostaneme pro proudovou hustotu ve směru  $\hat{x}$ 

$$j_{\mathbf{x}} = 2e \int_{0}^{+\infty} \frac{\hbar k_{\mathbf{x}}}{m^*} T(k_{\mathbf{x}}) \left[ f_0 \left( E_{\mathrm{C1}} + E(\boldsymbol{k}), \mu_1 \right) - f_0 \left( E_{\mathrm{C2}} + E(\boldsymbol{k}), \mu_2 \right) \right] \frac{d\boldsymbol{k}}{2\pi^3}, \quad (20.81)$$

kde  $T(k_x)$  je transmisní koeficient,  $E_{C1}$  a  $E_{C2}$  označují energie hran vodivostních pásů polovodičů, které slouží jako proudové přívody.



Obr. 20.21: Schematické znázornění posunu energie vázaného módu, lokalizovaného mezi barierami (vodorovná silná čárka), s růstem napětí  $U = (\mu_1 - \mu_2)/e$ .

Jako příklad bude popsána tunelovací struktura vykazující silně nelineární voltampérovou charakteristiku. Předpokládejme, že tunelovací bariéry vymezují velmi úzkou potenciálovou jámu, pro kterou leží energie nejnižšího transverzálního modu ve směru  $\hat{x}$  nad Fermiho mezí. S rostoucí velikostí aplikovaného napětí  $U = \Delta \mu/e$ vzrůstá i energetický rozdíl mezi hranami vodivostních pásů vlevo a vpravo od tunelovací struktury,  $\Delta \mu \equiv E_{C1} - E_{C2}$ , jak je znázorněno na obr. 20.21. To vede i k posunu energie transverzálního modu. Pro zjednodušení předpokládejme, že s růstem  $\Delta \mu$  se chemický potenciál  $\mu_2$  dostane pod úroveň hrany vodivostního pásu  $E_{C1}$  dříve, než klesne energie transverzálního modu pod  $\mu_1$ , jak je znázorněno na obr. 20.21a. Pro nulovou teplotu lze v takovém případě obecný vztah (20.81) upravit do následujícího tvaru

$$j_{\rm x} = \frac{e}{h} \int_{E_{\rm C1}}^{\mu_1} \frac{2m^*}{h\hbar} (\mu_1 - E) T(E) dE , \qquad (20.82)$$

kde  $T(E) \equiv T(k_x)$  je dán řešením popsaného jednorozměrného problému a  $2m^*/\hbar\hbar$  je dvojrozměrná hustota stavů. Nenulový tunelovací proud bude pozorován tehdy, když se rezonanční hladina dostane do oblasti mezi energiemi  $E_{C1}$  a  $\mu_1$ , jak je znázorněno na obr. 20.21b. Pokud se v této oblasti nachází pouze jedna hladina má transmisní koeficient Lorenzovskou závislost na energii danou vztahem (20.76)

s maximem pro energii danou polohou rezonanční hladiny  $E_r$ . Za předpokladu, že  $\Gamma \ll \mu_1 - E_{C1}$ , dostaneme v analogii se vztahem (20.80)

$$j_{\rm x} = \frac{e}{h} \pi \Gamma T_{\rm max} \frac{2m^*}{h\hbar} (\mu_1 - E_{\rm r}) \qquad , \qquad E_{\rm r} \epsilon (\mu_1, E_{\rm C1}) , \qquad (20.83)$$

ve kterém  $2m^*(\mu_1 - E_r)/(\hbar\hbar)$  je plošná koncentrace elektronů mezi barierami. Výsledná volt-ampérová charakteristika má pak charakteristický průběh daný posunem rezonanční hladiny přes energetický interval ( $\mu_1, E_{C1}$ ), který je úměrný aplikovanému napětí U. Lineární nárůst proudu s napětím je nakonec následován výrazným poklesem, který odpovídá situaci kdy rezonanční hladina klesne pod úroveň dna vodivostního pásu levého přívodu, tedy pod  $E_{C1}$ , jak je znázorněno na obr. 20.21c.

### 20.11 Coulombická blokáda

Popsané rezonanční tunelování nebralo v úvahu existenci náboje elektronu. Ukazuje se, že právě díky coulombické interakci může podobné vlastnosti vykazovat i tunelování "umělými atomy" o velkém počtu elektronů, které jsou obvykle nazývány jako kovové či elektronové ostrůvky. Lze očekávat, že tunelování bude silně ovlivněno především tehdy, když doba prodlení elektronu v ostrůvku bude dostatečně dlouhá, aby jej bylo možno považovat za téměř lokalizovaný. Pak lze předpokládat, že elektronový náboj v ostrůvku bude s velkou pravděpodobností vždy dán celočíselným násobkem náboje elektronu.

Popis tunelovacího experimentu znázorněného na obr. 20.20 je možno modifikovat následujícím způsobem. Volnou energii  $F(N_{\rm e})$ ostrůvku s $N_{\rm e}$ elektrony můžeme zapsat v následujícím tvaru

$$F(N_{\rm e}) = U(N_{\rm e}) + \sum_{\rm i=1}^{N_{\rm e}} E_{\rm i} ,$$
 (20.84)

kde  $E_i$  jsou energie obsazených stavů v kvantové jámě vymezující ostrůvek. Veličina  $U(N_e)$ , tzv. nabíjecí energie, reprezentuje energii vyvolanou coulombickou interakcí. Tu můžeme vyjádřit stejným způsobem jako energii nabíjeného kondenzátoru s kapacitou C,

$$U(N_{\rm e}) = \int_{0}^{-eN_{\rm e}} \left[\frac{Q'}{C} + \phi_{\rm ext}\right] dQ' = eN_{\rm e} \left(\frac{eN_{\rm e}}{2C} - \phi_{\rm ext}\right) , \qquad (20.85)$$

kde  $\phi_{\text{ext}}$  je elektrostatický potenciál vyvolaný nábojem v okolí ostrůvku, který lze spojitě měnit napětím  $V_{\text{g}}$  vloženým na hradlo. O kapacitě C předpokládáme, že je konstantní alespoň v uvažovaném energetickém intervalu.

Absolutního minima coulombické energie by bylo dosaženo, pokud by nabíjecí energie daná vztahem (20.85) nabývala nulové hodnoty. To však není možno vždy splnit, protože předpokládáme, že uvnitř ostrůvku se může vyskytovat pouze náboj daný celistvým násobkem náboje elektronu -e. Odchylka náboje  $\Delta Q$  v ostrůvku od ideální hodnoty odpovídající minimu coulombické energie má tedy v závislosti na spojitě se měnícím potenciálu  $\phi_{\text{ext}}$  pilovitou závislost znázorněnou na obr. 20.22a. Největší odchylky jsou dány poloviční hodnotou elektronového náboje  $\pm e/2$ . To odpovídá situaci kdy z energetického hlediska je pro systém stejně nevýhodné obsahujeli ostrůvek o jeden elektron více, či nikoliv. Systém je z tohoto hlediska velmi nestabilní a lze očekávat, že i malé napětí  $U = \Delta \mu / e$ , aplikované na strukturu vyvolá elektrický proud. Pro odpovídající vnější potenciál  $\phi_{\rm ext} \sim V_{\rm g}$  bude pak transmisní koeficient, a tedy i konduktance, nabývat maximálních hodnot, jak je znázorněno na obr. 20.22b. V opačném případě, když  $\Delta Q = 0$  nemá ostrůvek z energetického hlediska důvod se



Obr. 20.22: Závislost  $\Delta Q$  (a) a konduktance G (b) na vnějším elektrostatickém potenciálu  $\phi_{\text{ext}}$ elektronového ostrůvku, který je úměrný napětí na hradle  $V_{\text{g}}$ .

elektronu zbavit ani další přijmout, je průchod proudu blokován. Lokalizace elektronu v ostrůvku je tak coulombickou interakcí posílena. Lze očekávat, že v limitě malých napětí U bude konduktance G v závislosti na hradlovém napětí  $V_{\rm g} \sim \phi_{\rm ext}$ vykazovat řadu píků, podobně jako v již popsaném případě rezonančního tunelování.

Pravdě<br/>podobnost výskytu  $N_{\rm e}$ elektronů v ostrůvku je dána grand-kanonic<br/>kou rozdělovací funkcí

$$P(N_{\rm e}) = c_{\rm n} \, e^{-\frac{F(N_{\rm e}) - N_{\rm e}\mu}{k_{\rm B}T}} \,, \tag{20.86}$$

kde $\mu$ označuje chemický potenciál <br/>a $c_{\rm n}$ je normalizační konstanta. Polohy maxim tunelovacího proudu j<br/>sou dány podmínkou, že pravděpodobnost výskytu $N_{\rm e}$ elektronů v ostrůvku je stejná jako pravděpodobnost, že v ní bude o jeden elektron méně. Ze vztahu (20.86) pak plyne

$$F(N_{\rm e}) - F(N_{\rm e} - 1) = \mu \quad \Rightarrow \quad E_{N_{\rm e}}^* \equiv E_{N_{\rm e}} + \left(N_{\rm e} - \frac{1}{2}\right) \frac{e^2}{C} = \mu + e\phi_{\rm ext},$$
 (20.87)

kde  $E_{N_e}^*$  je energie hladiny v ostrůvku modifikovaná coulombickou energií při jejím obsazení elektronem. V limitě malých napětí U, konduktance v závislosti na

externím potenciálu  $\phi_{\text{ext}} \sim V_{\text{g}}$  tedy osciluje s periodou danou rozdílem energií neobsazených stavů,  $\Delta E$ , navýšenou o nabíjecí energii  $e^2/C$ . Tunelovací proces je schematicky znázorněn na obr. 20.23. Ačkoliv spinová degenerace umožňuje obsazení hladin dvěma elektrony, coulombická interakce neumožňuje průchod dvou elektronů současně. Elektrony tak mohou tunelovat ostrůvkem pouze postupně. Dokud elektron neuvolní v ostrůvku místo, je průchod dalšího zablokován.



Obr. 20.23: Schéma tunelování elektronu ovlivněné coulombickou interakcí. Obsazení stavů v ostrůvku je znázorněno plnými kroužky. Při navýšení počtu elektronů v ostrůvku o jeden, dojde k posunu dna jámy o nabíjecí energii  $e^2/C$ , jak je znázorněno na schématu b).

Coulombické blokáda umožňuje pozorovat výrazné oscilace konduktance i při tunelování ostrůvky s relativně velkým počtem elektronů, ve kterých je rozdíl energetických hladin daný rozměrovým kvantováním srovnatelný s tepelnou energií  $k_{\rm B}T~=$ 0,086 T[K] meV. Jako příklad uveďme výsledky získané na tunelovací struktuře připravené na bázi dvojrozměrného elektronového plynu v heterostruktuře GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As [21], viz obr. 20.24. Rozměry ostrůvku byly cca 0,1×1,0  $\mu{\rm m},~e^2/C~\sim$ 0,5 meV a rozdíl energií hladin,



Obr. 20.24: Závislost konduktance tunelovací struktury na hradlovém napětí  $V_{\rm g}$ .

 $\Delta E \sim E_{i+1} - E_i$ , daných rozměrovým kvantováním v ostrůvku, byl řádu 0,05 meV.

Podmínkou pro existenci coulombické blokády je, aby kapacita systému byla dostatečně malá. Pokud však zvýšíme aplikované napětí U nad kritickou hodnotu,  $eU > \Delta E + e^2/C$ , coulombická blokáda bude potlačena a oscilace vymizí. V případě, že  $\Delta E \gg e^2/C$  má tunelování čistě rezonanční charakter.
Obr. 20.25: a) Schéma jednoelektronového tranzistoru. b) Oblasti stability dané coulombickou blokádou. Šrafované jsou oblasti nenulové konduktance.

## 20.12 Jednoelektronový tranzistor a turniket

Jevu coulombické blokády lze využít ke konstrukci elektronických součástek založených na tom, že elektrony tunelují postupně, pěkně jeden po druhém. Za zakladatele oboru je považován moskevský elektro-inženýr Licharev [22]. Základní součástkou je jednoelektronový tranzistor. V závislosti na aplikovaném napětí  $U = (\mu_1 - \mu_2)/e$  a na hradlovém napětí  $V_{\rm g}$  se ostrůvek dostává do režimu coulombické blokády, nebo do režimu nenulového tunelovacího proudu, jak je schematicky znázorněno na obr. 20.25.



Obr. 20.26: a) Voltampérové charakteristiky pro  $V_{\rm g} = 0$  zajišťující coulombickou blokádu při nízkém napětí U a pro  $V_{\rm g}$ , které režim blokády vylučuje. b) Voltampérové charakteristiky pro dvě frekvence střídavého napětí na hradle  $V_{\rm g}$ .

Voltampérové charakteristiky tunelovací struktury závisejí na velikosti  $V_{\rm g}$ . Pro strukturu připravenou na bázi dvojrozměrného elektronového plynu v heterostruktuře AlGaAs/GaAs [23] jsou na obr. 20.26a. Pro hradlové napětí  $V_{\rm g} = 0$  zajišťující

coulombickou blokádu pro malé hodnoty napětí U je voltampérová charakteristika silně nelineární.

V případě střídavého hradlového napětí o vhodné amplitudě a frekvenci f se ve voltampérových charakteristikách objevují prodlevy, viz obr. 20.26b, odpovídající proudu daného frekvencí f

$$J = e f$$
. (20.88)

Pro tunelovací strukturu obsahující několik ostrůvků, viz obr. 20.27, lze pak docílit pomocí fázového posuvu střídavých napětí na hradlech jednotlivých ostrůvků velmi



Obr. 20.27: Schéma jednoelektronového turniketu.

přesného splnění výše uvedeného vztahu (20.88). Na takové součástce, elektronovém turniketu, lze dosáhnout při počítání procházejících elektronů přesnosti až  $10^{-8}$  [24]. Ke konstrukci turniketů se obvykle využívá kovových materiálů, například hliníku s tunelovacími bariérami tvořenými jeho oxidem. Nenulový proud lze dostat i v případě nulového napětí U. Takový systém se pak obvykle nazývá elektronovou pumpou. Díky nenulovým kapacitám je však rozsah aplikovatelných frekvencí omezen shora a dosahované proudy jsou řádu pA. To je hlavní důvod, proč elektronových turniketů není stále využíváno v metrologii jako standardu elektrického proudu.

## 20.13 Literatura

- [1] C. C. Grimes, Surf. Sci. 73, 379 (1978).
- [2] E. Y. Andrei, Ed., Two Dimensional Electron Systems on Helium and Other Cryogenic Substrates, Academic Press, New York (1991).
- [3] C. C. Grimes, G. Adams, Phys. Rev. Lett. 42, 795 (1979).
- [4] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 848; *Phys. Rev.* **B 38**, 3625 (1988).
- [5] S. Frank. P. Poncharal, Z. L. Wang, W. H. de Heer, Science 280, 1744 (1998).
- [6] S. Yamada, M. Yamamoto, Semicond. Sci. Technol. 7, B289 (1992).
- [7] H. van Houten, L. W. Molenkamp, C. W. J. Beenakker, C. T. Foxon, Semicond. Sci. Technol. 7, B215 (1992).
- [8] N. Giordano, Phys. Rev. B 42, 5635 (1980).
- [9] F. Komori, S. Kobayashi, Y. Ootuka, W. Sasaki, J. Phys. Soc. Jpn. B 50, 1051 (1981).
- [10] Z. Ovadyahu, Y. Imry, Phys. Rev. B 24, 7439 (1981).
- [11] J. J. Mareš, P. Hubík, J. Kryštofík, D. Kindl, M. Fanta, M. Nesládek, O. Williams, D. M. Gruen, Appl. Phys. Lett. 88, 092107 (2006).
- [12] S. Washburn, R. A. Webb, Advances in Physics 35, 375 (1986).
- [13] Y. Gefen, Y. Imry, M. Ya. Azbel, Phys. Rev. Lett. 52, 129 (1984).
- [14] A. Yacoby, R. Schuster, M. Heiblum, Phys. Rev. B 53, 9583 (1996).

- [15] D. Yu. Sharvin, Yu. V. Sharvin, JETP Lett. 34, 272 (1981).
- [16] K. von Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980); K. von Klitzing, Rev. Mod. Phys. 58, 519 (1986).
- [17] D. B. Chklovskii, K. A. Matveev, B. I. Shklovskii, *Phys. Rev.* B 47, 12605 (1993); R. J. F. van Haren, F. A. P. Blom, J. H. Wolter, *Phys. Rev. Lett.* 74, 1198 (1995).
- [18] U. Klass, W. Dietsche, K. von Klitzing, K. Ploog, Z. Phys. B Condensed Matter 82, 351 (1991); Physica B 169, 363 (1993).
- [19] D. C. Tsui, H. L. Störmer, A. C. Gossard, Phys. Rev. Lett. 48, 1559 (1982).
- [20] R. Willett, J. P. Eisenstein, H. L. Störmer, D. C. Tsui, A. C. Gossard, J. H. English, Phys. Rev. Lett. 59, 1776 (1987).
- [21] Y. Meir, N. S. Wingreen, P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. 66, 3048 (1991).
- [22] D. V. Averin, K. K. Likharev, Quantum Effects in Small Disordered Systems, Elsevier, Amsterdam (1990).
- [23] L. P. Kouwenhoven, A. T. Johnson, N. C. van der Vaart, C. J. P. M. Harmans, C. T. Foxon, *Phys. Rev. Lett.* 67, 1626 (1991).
- [24] M. W. Keller, J. Martinis, N. M. Zimmerman, A. H. Steinbach, Appl. Phys. Lett. 69, 1804 (1996).

## Obsah

1	Ideá	ilní a slabě interagující Boseovy a Fermiho plyny	<b>5</b>
	1.1	Úvod	5
	1.2	Kvantově mechanický popis mnohočásticových systémů	6
	1.3	Nejdůležitější vztahy fenomenologické termodynamiky	11
	1.4	Ideální Boseův plyn	12
		1.4.1 Boseova-Einsteinova kondenzace	13
		1.4.2 Termodynamická limita	16
		1.4.3 Goldstoneův teorém	18
	1.5	Slabě interagující Boseův plvn	20
	1.6	Boseův plyn – shrnutí	26
	1.7	Boseova-Einsteinova kondenzace a supratekutost	27
	1.8	Ideální Fermiho plyn	30
		1.8.1 Ideální Fermiho plyn - shrnutí	32
	1.9	Poznámky k slabě neideálnímu Fermiho plynu	33
	1.10	Závěr	35
	1.11	Literatura	35
0	ъ		0 <b>7</b>
2	Dos	ahovani a mereni nizkych teplot	37
	2.1		37
	2.2	Plynovy teplomér	39
	2.3	Primarni teploméry	40
		2.3.1 Sumový teploměr	41
		2.3.2 Jaderný orientační teploměr	43
	<u> </u>	2.3.3 Teploméry s coulombickou blokaci	44
	2.4	Sekundární teploméry	45
		2.4.1 Kovové rezistivní teploměry	46
		2.4.2 Polovodičové teploměry	47
		2.4.3 Kapacitní teploméry	50
	~ ~	2.4.4 Termočlánky	51
	2.5	Z historie dosahování kryogenních teplot	51
	2.6	Dosahování dusíkových a heliových teplot	54
	2.7	$Směsi {}^{3}He - {}^{4}He $	58
	2.8	Rozpouštěcí refrigerátory	60
	2.9	Adiabatická demagnetizace	63
		2.9.1 Adiabatická demagnetizace paramagnetických solí	64
		2.9.2 Jaderná adiabatická demagnetizace	64
		2.9.3 Adiabatické tavení pevného <sup>4</sup> He v kapalném <sup>3</sup> He $\therefore$ .	68
	2.10	Dosahování nízkých teplot bez použití kry okapalin $\ .\ .\ .$ .	70
		2.10.1 Kryogenerátory	70
		2.10.2 Pulzní trubice	72
		2.10.3 Pevnolátkové chladiče	73
	2.11	Literatura	73

3	Vlas	stnosti normálneho kvapalného <sup>3</sup> He	75
	3.1	Kvapalné <sup>3</sup> He ako ideálny degenerovaný Fermiho plyn ?	77
	3.2	Pauliho paramagnetizmus	
		kvapalného <sup>3</sup> He <sup>-</sup>	80
	3.3	Tranšportné vlastnosti kvapalného <sup>3</sup> He	82
	3.4	Landauova teória kvapalného <sup>3</sup> He	83
	3.5	Literatúra	89
4	Tuh	é hélium	90
	4.1	Kvantový kryštál	90
	4.2	Tuhé ${}^{3}\text{He}$	92
		4.2.1 Môže mať kryštál vyššiu entropiu než kvapalina? Pomeranču-	
		kova predpoveď a chladiaca metóda.	92
		4.2.2 Kryštalizačný teplomer	94
		4.2.3 Jadrový magnetizmus <sup>3</sup> He $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	98
	4.3	Tunelovanie atómov v kryštáloch hélia	100
		4.3.1 Kvantová difúzia	101
		4.3.2 Nulové vakancie	104
		4.3.3 Supersolid	105
		4.3.4 Torzný oscilátor a supratekutosť	109
	4.4	Literatúra	110
<b>5</b>	Sup	ratekuté <sup>4</sup> He	112
	5.1	Rovnovážný fázový diagram	112
	5.2	Vybrané fyzikální vlastnosti supratekutého <sup>4</sup> He	114
	5.3	Supratekutý film kapalného helia	116
	5.4	Základní teoretické představy o supratekutosti <sup>4</sup> He	117
	5.5	Úvod do Landauovy teorie supratekutosti <sup>4</sup> He	118
	5.6	Landauovo kritérium supratekutosti	119
	5.7	Termodynamika He II	121
	5.8	Hydrodynamika He II	123
	5.9	Vlnové procesy v He II	124
		5.9.1 První zvuk	126
		5.9.2 Druhý zvuk	126
		5.9.3 Třetí zvuk	127
		5.9.4 Čtvrtý zvuk	128
	5.10	Kvantově mechanický popis He II	128
	5.11	Kvantování cirkulace v He II	130
		5.11.1 Kvantovaný vír v He II	131
		5.11.2 Experimentální důkaz kvantování cirkulace v He II	132
	5.12	Rotuiící He II	133
	5.13	Vnitřní tření	135
	5.14	Nukleace a interakce kvantovaných vírů v He II	136
		5.14.1 Nukleace kvantovaných vírů	136
		v	

-			Jusan
		5.14.2 Interakce mezi vírv	137
	5.15	Vizualizace kvantovaných vírů v He II	138
	5.16	Literatura	139
6	Sup	ratekuté fázy hélia-3	141
0	6 1	Základná vlastnosti supratekutých fáz <sup>3</sup> He	1/1
	6.2	Spekrum excitécií v supratekutých fázach ${}^{3}\text{He}$	1/18
	0.2 6.3	Dynamika avaitácii a andrajovovské raflavia v supratakutom <sup>3</sup> Ha B	140
	0.5 6.4	Spinové dynamika v supratekutom <sup>3</sup> He B	156
	65	Dozdĺžna jadrové magnetické rezonancia	150
	0.5	$\Gamma$ ozdížila jadrova magneticka rezonancia	157
	0.0	Merenetické supertelectent entre entre le le le server entre	100
	0.1	Dragneticka supratekutost a stavy s konerentnou precesiou spinov	100
	0.8	Procesy magnetickej relaxacie v supratekutom "He-B	102
	0.9	Spinovo precesujuce viny	104
	6.10 c.11	Perzistentne precesujuca domena v <sup>°</sup> He-B	100
	0.11	Boseova-Einsteinova kondenzacia magnonov v supratekutom <sup>°</sup> He	168
	6.12	Rozhranie medzi A a B fazami supratekutého <sup>9</sup> He	170
		$6.12.1 \text{ Nukleachý problém} \dots \dots$	170
	6.13	Rotující supratekuté <sup>3</sup> He	171
		6.13.1 Hladina rotujícího vzorku	171
		6.13.2 Kvantované víry nebo vírové listy?	172
		6.13.3 Vírové struktury v rotujícím <sup>3</sup> He-A	174
		6.13.4 Kvantované víry v rotujícím <sup>3</sup> He-B $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	178
		6.13.5 Supratekutá Kelvinova-Helmholtzova nestabilita	181
	6.14	Literatúra	184
7	Kva	ntová kavitace a kvantové vypařování	186
	7.1	Standardní teoretický popis kavitace	186
	7.2	Stavová rovnice a spinodální limit	188
	7.3	Experimentální studium kavitace v kapalném heliu	189
	7.4	Kvantové vypařování	192
	7.5	Literatura	194
3	Iont	y v supratekutém heliu	195
	8.1	Struktura iontů	195
	8.2	Lokalizace nabitých částic u hladiny He	196
	8.3	Pohyblivost iontů	199
	8.4	Dvojrozměrná krystalizace	200
	8.5	Detekce a nukleace kvantovaných vírů	203
	8.6	Landauova kritická rychlost	205
	87	Ionty v supratekutém <sup>3</sup> He	206
	8.8	Literatura	200
	0.0		401

9	Chla	adné atomové plyny	208
	9.1	Úvod	209
	9.2	Přehled experimentálních technik	210
		9.2.1 Uvěznění atomů v pasti	211
		9.2.2 Laserové chlazení	213
		9.2.3 Detekce	216
	9.3	Neinteragující bosony v pasti	217
		9.3.1 Hustota stavů	217
		9.3.2 Základní termodynamické vlastnosti	219
		9.3.3 Rozdělení hustoty a rychlosti	221
	9.4	Interagující bosony v pasti	222
		9.4.1 Grossova–Pitajevského rovnice	222
		9.4.2 Viriální teorém a energetické škály	224
		9.4.3 Thomasova–Fermiho aproximace	226
		9.4.4 Kolektivní excitace	228
	9.5	Rotující kondenzáty a víry	231
		9.5.1 Víry v homogenním Boseově plynu	232
		9.5.2 Víry v uvězněném plynu	234
		9.5.3 Stabilita víru	235
	9.6	Feshbachova rezonance	237
		9.6.1 Dvoukanálový model	238
	9.7	Neinteragující fermiony v pasti	240
		9.7.1 Rozdělení hustoty a rychlosti	242
	9.8	Homogenní Fermiho plyn s přitažlivou interakcí	243
		9.8.1 BCS teorie	243
		9.8.2 Renormalizace vazbové konstanty	245
		9.8.3 Přechod BCS–BEC	246
		9.8.4 Výsledky v aproximaci středního pole	247
	9.9	Aproximace lokální hustoty	250
		9.9.1 Příklady použití	251
	9.10	Optické mřížky	252
		9.10.1 Blochovy oscilace	253
		9.10.2 Bosony v optické mřížce	254
		9.10.3 Fázový přechod supratekutina–izolant	257
		9.10.4 Fermiony v optické mřížce	258
	9.11	Literatura	259
10	Krv	ogenní dvnamika tekutin a kvantová turbulence	260
	10 1	Úvod do proudění a turbulence klasických tekutin	260
	10.2	Možnosti využití kryogenního helja pro studium klasické turbulence	263
	10.2	Supratekutá hydrodynamika, kvantované víry a jejich dynamika	266
	10.4	Kvantová turbulence v protiproudu normální a supratekuté složky	269
	10.1	Kvantová turbulence vyvolaná prouděním supratekuté složky	271
	10.6	Turbulence v He II generovaná mechanicky mřížková turbulence	273
	10.0		-10

	Jusan
10.7. Kvantová turbulence v limitě pulové teploty	275
$10.8$ Kvantová turbulence v ${}^{3}$ He B v přítomnosti normální složky	210
10.0 Towar	219
$10.9 \text{ Lavel} \dots \dots$	202
	202
11 Supratekuté hélium ako kozmologické laboratórium ?	<b>284</b>
11.1 Supratekuté hélium - modelový systém pre kozmológiu $\ .\ .\ .$	284
11.2 Kibbleův-Zurkův mechanismus vzniku defektů při fázovém přechodu	
druhého druhu	285
11.3 Kibbleův-Zurkův mechanismus v kondenzovaných látkách 	287
11.3.1 Kibbleův-Zurkův mechanismus v supratekutém <sup>3</sup> He-B .	287
11.3.2 Kibbleův-Zurkův mechanismus v supratekutém He II	290
11.4 Supratekuté <sup>3</sup> He-B a analóg Unruhovho javu	291
11.4.1 Spinová supratekutosť v <sup>3</sup> He-B a simulácia horizontu udalos	tí 294
11.5 Literatúra	296
12 Supratekutost barevných kvarků	298
12 Jupitatekutost barevinjen kvarku	200
	290
12.2 $\operatorname{Fazovy}$ diagram QOD	304 205
	303
12.2.2 Shine interagujici mnonokvarkový system (nonOFL)	300
12.2.3 Slabe interagujici mnonokvarkovy system (CFL)	308
12.3 Experimentalni projevy supratekutosti barevnych kvarku	310
13 Základy supravodivosti	313
13.1 Ideálna vodivosť	315
13.2 Ideálny diamagnetizmus	316
13.3 Supravodiče I. a II. typu	318
13.4 Demagnetizačný faktor	320
13.5 Termodynamika supravodičov	321
13.6 BCS teória	323
13.6.1 Izotopický jav	324
13.6.2 Dvojica elektrónov s príťažlivou interakciou	324
13.6.3 Príťažlivá interakcia sprostredkovaná fonónmi	327
13.6.4 BCS rovnica supravodivej energetickej medzerv	329
13.6.5 Kritická tenlota $T_{\rm c}$ a energetická medzera $\Lambda$	331
13.6.6 Shrnutie	332
13.7 Termodynamická veličiny	222
13.8 Supravodivosť so silnou väzbou	234
13.0 Bagmodzorowá supravodivosť	226 226
19. 10 Tunologonia	აას ვიი
$10.101 \text{unelevalue} \qquad \dots \qquad $	000 040
13.10.1 Tunelovanie medzi dvomi systemami voinych elektronov	340
15.10.2 Iunelovanie medzi systemom volnych elektronov a BCS sup-	941
ravodicom	341

13.10.3 Tunelovanie medzi systémom voľný	ch	ele	ekti	rón	ov	a k	váz	i d	voj-
rozmerným systémom	•	•	·	•	•	•	•	•	•
13.10.4 Tunelovanie v prípade anizotropne	ej (	ene	erg	etic	ckę	j m	ledz	zery	V
13.11Teória Ginzburga a Landaua	•	•	·	•	•	•	·	•	•
13.11.1 Kvantovanie magnetického toku		•					•	•	•
13.11.2 Ginzburgove-Landauove rovnice		•					•	•	•
13.12 Rovnica Londonovcov a hĺbka vniku $\lambda_{\rm L}$	•						•	•	•
13.13Koherenčná dĺžka		•							•
13.14Dva typy supravodičov		•							
13.15Literatúra	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Supravodivé materiály									
14.1 Supravodivé chemické prvky									
14.2 Binárne zliatiny a chemické zlúčeniny .									
14.3 Chevrelove fázy									
14.4 Kovalentné supravodiče									
14.5 Exotické a nekonyenčné supravodiče									
14.6 Vysokoteplotní kupráty									
14.6.1 Krystalová a magnetická struktura	a.	•	•	•	•	•	•	•	•
14.6.2 Transport elektronů	~								
14.7 Shrnutí	•	•	•	•	•	•	•	•	•
14.8 Literatura	•	•	•	•	•	•	•	•	•
Elektrodynamické vlastnosti supravodičů	1								
15.1 Kvantované víry v "klasických" supravodi	ičío	$^{\rm ch}$	dru	ιhé	ho	dru	ıhu	L	
15.1.1 Upínání vírů a relaxace									•
15.1.2 Model kritického stavu									
15.1.3 Tepelně excitovaná relaxace.									
15.1.4 Tečení supravodivých vírů									
15.2 Specifika vysokoteplotních supravodičů									
15.2.1 Supravodivý stav VTS									
15.3 Supravodivé víry ve vysokoteplotních supr	rav	vod	ičí	$^{\mathrm{ch}}$					
15.4 Magnetizační procesy									
15.4.1 Vliv anizotropie									
15.5 Pohyb vírů ve vysokoteplotním supravodi	iči								
15.5.1 Teplotní excitace – čára ireverzibil	lity			_		_			
15.5.2 Křivka tání mřížky vírů							•	•	
15.6 Upínání vírů	-	•	·	·	•	·	•	•	•
15.6.1 Bodové poruchy	•	•	•	•	•	•	•	•	•
15.6.2 Volká dofekty	•	•	·	·	·	·	•	·	•
15.6.2 Korolovaná dofakty	•	•	·	·	·	·	•	•	•
15.7 Polovneo	•	•	·	·	·	·	•	•	•
15.9 Cranulánní gunnara diža	•	•	·	·	·	·	•	•	•
15.0 Granularili supravodice	•	•	·	•	·	·	•	·	•
10.9 Literatura									

	0.05
Josephsonovy jevy a jejich aplikace	4
16.1 Josephsonovy jevy	. 4
16.1.1 Feynmanovo odvození Josephsonových jevů	. 4
16.1.2 Odvození Josephsonových jevů pomocí Hamiltonových rovn	nic
pro Cooperovy páry	. 4
16.2 Josephsonovy jevy v supratekutém heliu	. 4
16.3 Fyzikální vlastnosti Josephsonových přechodů	. 4
16.3.1 Kalibrační invariance (lokální vnitřní symetrie)	. 4
16.3.2 Vliv statického magnetického pole na přechod	. 4
16.3.3 Závislost kritického proudu přechodu na teplotě	. 4
16.3.4 Elektrodynamika rozdílu fází v Josephsonově přechodu	. 4
16.3.5 RCSJ model Josephsonova přechodu	. 4
16.3.6 Volt-ampérové charakteristiky přechodu	. 4
16.3.7 Josephsonův přechod ozářený mikrovlnami - Shapirovy sch	nody4
16.4 Makroskopická kvantová interference	. 4
16.5 Supravodivá smyčka s jedním přechodem	. 4
16.6 Vybrané fyzikální vlastnosti malých kontaktů supravodičů a normá	ál-
ních kovů	. 4
16.6.1 Proud rozhraním normálního kovu a supravodiče (Andreevi	ův
odraz)	. 4
16.7 Tepelný šum	. 4
16.8 Malé přechody a Coulombická blokáda	. 4
16.9 Vybrané aplikace Josephsonových jevů	. 4
16.9.1 Technologie přípravy Josephsonových přechodů	. 4
16.9.2 Josephsonův standard napětí	. 4
16.9.3 Přijímače sub-mm záření	. 4
16.9.4 Generátory mikrovlnného záření	. 4
16.9.5 Supravodivé digitální obvody a převodníky	
16 10Skvidy – supravodivé kvantové interferenční detektory	
16 10 1 Steinosměrný skvid	
16 10 2 Střídavý skuld	
16 10 3 Skyidový zesilovač	
16 10 4 Technologie výroby skyldů	•
16 10 5 Skanovací skujdový mikroskop	•
16.10.6 Skuidová magnetometry pro biomagnetická měření	• •
16.10.7 Skyidové magnetometry pro biomagnetická merem	• -
16.111 itoroturo	• -
	• 4
Makroskopické kvantové javy v supravodivých štruktúrach	4
17.1 Úvod	. 4
17.2 Kvantová mechanika a submikrónové Josephsonove štruktúry	. 4
17.3 Josephsonov spoj ako analóg atómu	. 4
17.4 Ovládanie qubitu a kvantová tomografia	. 4
17.4.1 Meranie relaxačných a čistých defázovacích časov	. 4

	17.5	Rf Squ	id v kvantovom režime - Schrödingerove mačiat	ko	?				489
	17.6	Suprav	odivý jednopárový tranzistor - nábojový qubit			•			492
	17.7	Kvante	ová elektrodynamika supravodivého qubitu a rez	zon	áto	ora	,		495
	17.8	Kvante	ové logické hradlá     .    .			•			503
	17.9	Deutsc	hov kvantový algoritmus			•			506
	17.10	)Záver				•			509
	17.11	lLiterat	úra						509
18	Vlas	stnosti	tuhých látok pri nízkych teplotách						511
	18.1	Tepeln	á kapacita tuhých látok						511
		18.1.1	Mriežkové teplo						512
		18.1.2	Elektrónové teplo						515
		18.1.3	Magnetické teplo						517
		18.1.4	Príspevok od Schottkyho javu						518
		18.1.5	Merné teplo rôznych materiálov						518
		18.1.6	Meranie tepelnej kapacity						522
	18.2	Elektri	cká vodivosť						524
		18.2.1	Matthiessenove pravidlo						526
		18.2.2	Rozptyl elektrónov na fonónoch						526
		18.2.3	Rozptyl elektrónov na elektrónoch						527
		18.2.4	Rozptyl elektrónov na magnetickej štruktúre .						528
		18.2.5	Kondov jav						530
		18.2.6	Vplyv magnetického poľa na transport náboja						531
		18.2.7	Klasické rozmerové javy						533
		18.2.8	Elektrická vodivosť polovodičov						534
	18.3	Tepeln	$\stackrel{i}{ ext{a}}$ vodivosť						534
		18.3.1	Elektrónová zložka						535
		18.3.2	Fonónová zložka						536
		18.3.3	Transport tepla magnetickým podsystémom .						538
		18.3.4	Separácia a analýza jednotlivých zložiek tepel	lne	i v	vod	ivo	osti	
			v rôznych materiáloch						538
		18.3.5	Meranie tepelnej vodivosti						542
	18.4	Kapiců	v odpor						543
		18.4.1	Impedanční nepřizpůsobení						543
		18.4.2	Anomální (magnetický) Kapicův odpor						546
	18.5	Literat	úra						547
	<b>.</b> .	,							
19	Jade	erný m	agnetizmus						550
	19.1	Fyziká	lní základy jaderného magnetizmu		•	•	•	•	550
		19.1.1	Základní parametry atomových jader $~~.~~.~~$		•	•	•	•	550
		19.1.2	Interakce izolovaného jádra s časově neproměnn	ým	n m	ag	net	ic-	
			kým polem		•	•	•	•	553
		19.1.3	Interakce jádra s časově neproměnným elektrich	kýı	n Į	pol	em		556
		19.1.4	Interakce jádra s magnetickým a elektrickým p	ole	em		•	•	557

		Obsail
19.2	Jaderný paramagnetizmus	557
19.3	Hyperiemné interakce	560
2010	19.3.1 Magnetické interakce jádra s elektrony vlastního atomu	561
	19.3.2 Elektrická kvadrupólová interakce jádra s jeho okolím .	563
	19.3.3 Velikost hyperjemných interakcí	564
	19.3.4 Interakce mezi jadernými momenty	566
19.4	Uspořádání jaderných magnetických momentů v kovech	568
19.5	Záporné teploty	571
19.6	Jaderný magnetizmus lanthanoidů	572
	19.6.1 Základní vlastnosti $4f$ iontů	572
	19.6.2 Krystalové pole a jeho singletní základní stav	573
	19.6.3 Hyperjemně zesílený jaderný magnetizmus	576
	19.6.4 Magnetické uspořádání v PrNi <sub>5</sub>	578
19.7	Základní vlastnosti NMR v pevných látkách	581
	19.7.1 Relaxace jaderné magnetizace	581
	19.7.2 Fenomenologický popis NMR	583
	19.7.3 Experimentání technika NMR	584
	19.7.4 Mikrofyzikální popis NMR	590
	19.7.5 Spin-mřížková relaxace v kovech	594
19.8	Využití NMR ve fyzice nízkých a velmi nízkých teplot	595
	19.8.1 Fyzika <sup>3</sup> He	596
	19.8.2 Supravodiče	598
	19.8.3 Nízkoteplotní termometrie	602
19.9	Literatura	605
20 Fla	ktronový transport v kvantových systémach	607
20 Elei		007 COO
20.1	Nizkorozmerne elektronove systemy	609
20.2	Iransport jako srazkovy problem	012 C15
20.3	Balisticky kanal a kvantovani konduktance	015 C10
20.4	Konduktance a elektricky odpor	618 CD0
20.5	Jev lokalizace v kvazijednorozmerných vodicích	620
20.0	Lokalizace v kvazidvojrozmerných vodicích a vliv slabeno magnetic	;- 699
20.7	Abaranaria Dahrainian	022 697
20.7	Anaronovuv — Donnuv jev	620
20.8	Rvantový Hallův jev  celociselny	000
20.9		000
20.1 20.1	Onezonanom tunelovam	042 646
20.1 20.1	Pladnoalaltranový tranzistor a turnikat	040 640
20.1	2Jeunoelektronovy tranzistor a turniket	049 650
20.1	oliteratura	050