



Univerzita Komenského v Bratislave  
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky



Ing. František Horváth

## **Autoreferát dizertačnej práce**

Štúdium vysokoteplotných supravodičov v magnetických poliach

Na získanie akademického titulu *philosophiae doctor*  
v odbore doktorandského štúdia: 4.1.3. Fyzika kondenzovaných látok a akustika

Bratislava 2013

Dizertačná práca bola vypracovaná v dennej forme doktorandského štúdia na Katedre experimentálnej fyziky Fakulty matematiky, fyziky a informatiky Univerzity Komenského v Bratislave.

**Predkladateľ:** Ing. František Horváth  
Katedra experimentálnej fyziky  
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK

**Školiteľ:** Doc. RNDr. Richard Hlubina, DrSc.  
Katedra experimentálnej fyziky  
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK

**Oponenti:** Prof. RNDr. Peter Samuely, DrSc.  
Oddelenie fyziky nízkych teplôt  
Ústav experimentálnej fyziky SAV

Doc. RNDr. Silvester Takács, DrSc.  
Oddelenie fyziky supravodičov  
Elektrotechnický ústav SAV

Doc. RNDr. Pavol Valko, CSc.  
Ústav jadrového a fyzikálneho inžinierstva  
Fakulta elektrotechniky a informatiky STU

Obhajoba dizertačnej práce sa koná ..... o ..... h pred komisiou pre obhajobu dizertačnej práce v odbore doktorandského štúdia 4.1.3. Fyzika kondenzovaných látok a akustika vymenovanou predsedom odborovej komisie Prof. RNDr. Petrom Kúšom, DrSc. na Fakulte matematiky, fyziky a informatiky, Mlynská dolina F2, 842 48 Bratislava.

**Predseda odborovej komisie:**

Prof. RNDr. Peter Kúš, DrSc.  
Katedra experimentálnej fyziky  
Fakulta matematiky, fyziky a informatiky UK

# Obsah

<b>1</b>	<b>Súčasný stav riešenej problematiky</b>	<b>1</b>
1.1	Základné poznatky o vysokoteplotnej supravodivosti . . . . .	1
1.2	Supravodivý stav . . . . .	3
1.3	Oblasť pseudogapu . . . . .	5
1.3.1	Pseudogap ako samostatná termodynamická fáza . . . . .	5
1.3.2	Pseudogap ako roztopený supravodič . . . . .	7
<b>2</b>	<b>Cieľ práce</b>	<b>8</b>
<b>3</b>	<b>Výsledky práce</b>	<b>9</b>
3.1	Mikroskopická teória supravodivosti . . . . .	9
3.2	Fenomenologická teória supravodivosti . . . . .	11
	<b>Záver</b>	<b>16</b>
	<b>English summary</b>	<b>17</b>
	<b>Zoznam prác tvoriacich dizertáciu</b>	<b>19</b>
	<b>Zoznam použitej literatúry</b>	<b>19</b>

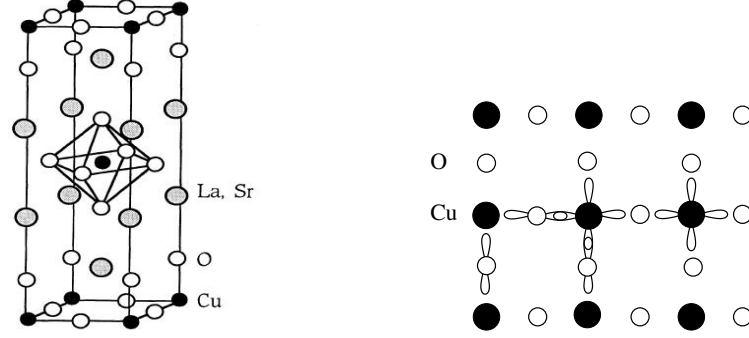
## 1 Súčasný stav riešenej problematiky

### 1.1 Základné poznatky o vysokoteplotnej supravodivosti

V roku 1986 Bednorz a Müller objavili, že zlúčeniny na báze oxidu medi,  $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ , sa stávajú supravodivými pri nečakane vysokých kritických teplotách. Maximálna kritická teplota,  $T_c = 38$  K, bola dosiahnutá pri úrovni dopovania  $x \approx 0.15$  [1]. Onedlho po tomto objave boli nájdené ďalšie zlúčeniny s ešte vyššími kritickými teplotami. Napríklad zlúčenina  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$  dosahovala kritickú teplotu až  $T_c = 92$  K. Boli to prvé materiály, ktoré na prechod do supravodivého stavu stačilo ochladiť na teploty kvapalného dusíka (77 K). Pre porovnanie, konvenčné supravodivé materiály bolo potrebné chladiť kvapalným héliom (3.2 K). V súčasnosti materiál s najvyššou kritickou teplotou  $T_c = 135$  K je  $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ .

Supravodivé materiály na báze oxidu medi, tzv. kupráty, predstavujú obrovskú triedu zlúčenín s pomerne komplikovanou kryštálovou štruktúrou. Ako príklad uvádzame kryštálovú štruktúru zlúčeniny  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$  na obrázku 1. Spoločnou charakteristikou týchto materiálov je jedna alebo viac  $\text{CuO}_2$  rovín, ktoré sú navzájom oddelené vrstvami iných atómov (Ba, La, Y, ...). Zmenou zloženia týchto oddeľovacích vrstiev meníme koncentráciu nosičov náboja v  $\text{CuO}_2$  rovinách, z čoho pochádza ich názov nábojové rezervoáre. Ďalšou spoločnou črtou kuprátov je, že v nedopo-

vanom stave pri nízkych teplotách sú Mottovými izolantmi<sup>1</sup> s antiferomagnetickým usporiadaním. Dopovaním antiferomagnetické usporiadanie zaniká a kupráty sa stávajú supravodivými.



Obrázok 1: *Vľavo*: Objemovo centrovaná tetragonálna kryštalová štruktúra zlúčeniny  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ . Štruktúra  $\text{CuO}_6$  (predĺžený osemsten) je vytvorená okolo každého iónu  $\text{Cu}^{2+}$ . Obrázok je prevzatý z [2]. *Vpravo*: Atómová štruktúra  $\text{CuO}_2$  roviny. Zakaždým iba jeden z  $p$  orbitálov atómu kyslíka ( $p_x$  alebo  $p_y$ ) má konečný prekryv s  $d_{x^2-y^2}$  orbitálom atómu medi.

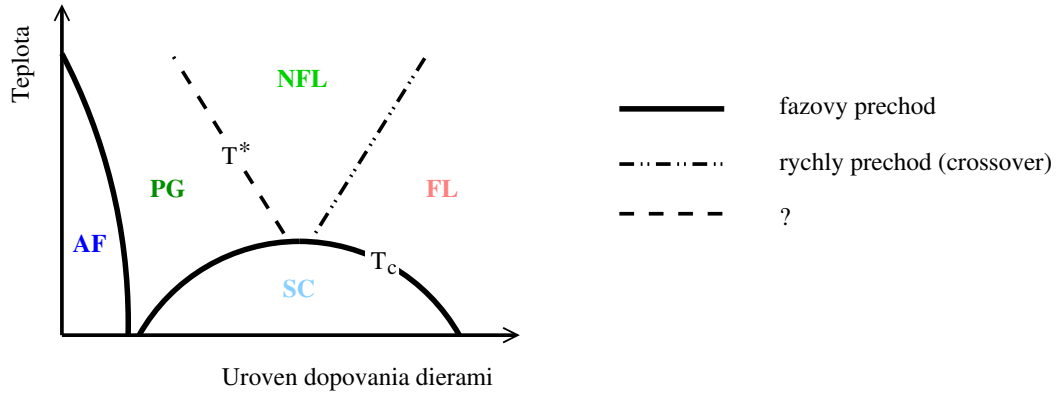
Najjednoduchším modelom, ktorý je relevantný pre vysokoteplotné supravodiče a bol veľmi intenzívne študovaný, je dvojrozmerný jednopásový Hubbardov model [3] v limite silnej väzby. Hamiltonián tohto modelu je definovaný ako

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

kde  $c_{i\sigma}$  ( $c_{i\sigma}^\dagger$ ) je anihilačný (kreačný) operátor, ktorý anihiluje (vytvorí) elektrón so spinom  $\sigma$  v  $i$ -tom mriežkovom bode a  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  je operátor počtu častíc.  $U$  predstavuje odpudivú interakciu medzi dvoma elektrónmi nachádzajúcimi sa v rovnakom mriežkovom bode a  $t_{ij}$  označuje preskovú amplitúdu medzi mriežkovými bodmi  $i$  a  $j$ . Obvykle sa študuje model, v ktorom sa obmedzíme na preskoky medzi najbližšími  $t$  a druhými najbližšími  $t'$  mriežkovými bodmi. V práci [4] autori ukázali, že jednopásový  $t-t'$  Hubbardov model reprodukuje nízko-energetické spektrum komplikovanejšieho trojpásového hamiltoniánu s nasledovnými parametrami  $U = 5.4$  eV,  $t = 0.43$  eV a  $t' = -0.07$  eV.

Vlastnosti kuprátov výrazne závisia od chemického zloženia daného materiálu a od teploty, pričom takéto správanie je pozorované pre všetky zlúčeniny. Rôzne oblasti fázového diagramu sú schematicky znázornené na obrázku 2. Pri veľmi nízkych úrovniach dopovania sa kupráty správajú ako Mottove izolanty s ďalekodosahovým antiferomagnetickým usporiadaním pre teploty rádovo až stovky kelvinov. Zlúčenina ostáva izolantom z dôvodu silných krátkodosahových odpudivých interakcií medzi elektrónmi aj pri vyšších teplotách, kedy tepelné fluktuácie zničia magnetické usporiadanie. Dopovaním sa potlačí antiferomagnetické usporiadanie a dochádza k vzniku supravodivého stavu. Koncentrácia nosičov náboja, pri ktorej kritická teplota dosahuje maximálnu hodnotu, sa v literatúre označuje ako optimálna úroveň dopovania. Oblasti vo fázovom diagrame s

<sup>1</sup>Na rozdiel od pásových izolantov, kde pohyb nosičov náboja je blokovaný Pauliho vylučovacím princípom, v Mottovom izolante je pohyb nosičov náboja blokovaný silnými odpudivými interakciami.



Obrázok 2: Schematický fázový diagram kuprátov v rovine teplota-dopovanie. V obrázku sme použili nasledovné skratky: AF - antiferomagnetický Mottov izolant, PG - oblasť pseudogapu, NFL (non-Fermi liquid) - oblasť “zvláštneho” kovu, FL (Fermi liquid) - oblasť, v ktorej platí teória Fermiho kvapalín, SC - supravodivý stav.  $T_c$  je kritická teplota a  $T^*$  je teplota, pri ktorej sa otvára energetická medzera v “normálnom” stave.

nižšou a vyššou koncentráciou nosičov náboja označujeme ako poddopovaná a predopovaná oblasť. Normálny stav, ktorý sa nachádza v poddopovanej oblasti fázového diagramu pod teplotou  $T^*$ , sa nazýva oblasť pseudogapu. Táto oblasť vykazuje mnoho anomálnych vlastností a v súčasnosti predstavuje najzáhadnejšiu časť fázového diagramu. Podrobnejšiemu popisu vlastností pseudogapu, ako aj rôznych interpretácií jeho vzniku, bude venovaná samostatná časť neskôr. Oblasť fázového diagramu pri optimálnych úrovniach dopovania a pri teplotách vyšších ako teplota supravodivého prechodu vykazuje vlastnosti, ktoré sú v rozpore so štandardnou teóriou popisujúcou interakcie elektrónov v kovoch, t.j. teóriou Fermiho kvapalín. Preto dostala táto oblasť fázového diagramu názov oblasť “zvláštneho” kovu. Z anomálnych experimentálnych výsledkov spomeňme merania teplotnej závislosti elektrického odporu [5], v ktorých sa zistilo, že odpor sa v širokom rozsahu teplôt menil lineárne, hoci podľa Fermiho teórie kvapaliny má odpor mať kvadratickú teplotnú závislosť v limite nízkych teplôt. Merania Hallovhov javu [6] zasa ukázali, že Hallova konštanta  $R_H$  nie je konštantná, ale mení sa v závislosti od teploty. V predopovanej oblasti fázového diagramu majú kupráty vlastnosti podobné normálnym kovom.

## 1.2 Supravodivý stav

Na prvý pohľad nie je supravodivý stav kuprátov veľmi odlišný od supravodivého stavu nízkoteplotných supravodičov. Okrem schopnosti viesť elektrický prúd bez straty energie sa experimentálne potvrdila aj existencia Meissnerovho-Ochsenfeldovho javu [7], pri ktorom dochádza k vypudeniu magnetického poľa z objemu supravodiča. Meraniami magnetického indukčného toku kvantovaného v jednotkách  $h/2e$  [8] sa ukázalo, že nabité objekty v supravodivom stave majú náboj rovný dvom elementárnym nábojom, presne tak ako Cooperove páry v nízkoteplotných supravodičoch. Otázka ohľadom celkového spinu Cooperovho páru bola vyriešená meraniami teplotnej závislosti spinovej

susceptibility, ktoré ukázali, že Cooperove páry sa nachádzajú v singletnom stave [9]. Tiež sa ukázalo, že kupráty sú supravodiče druhého typu, čo znamená, že pri prekročení spodného kritického poľa  $H_{c1}$  magnetické pole preniká objemom supravodiča vo forme vírov, pričom supravodivosť zaniká až pri prekročení horného kritického poľa  $H_{c2}$ . Okrem toho sa zistilo, že vlastnosti kuprátov sú veľmi anizotropné. Hodnoty fyzikálnych veličín závisia od toho, či boli merané v smere rovnobežnom s  $\text{CuO}_2$  rovinami, alebo v smere kolmom na tieto roviny.

Dôležitou charakteristikou supravodivého stavu je energetická medzera  $\Delta(\mathbf{k})$ , ktorá reprezentuje medzeru v energetickom spektre kvázičastíc. Je to komplexná funkcia, ktorá má amplitúdu a fázu. Nízkotepelné supravodiče sú obvykle tzv. konvenčnými supravodičmi, pretože pri prechode do supravodivého stavu narušajú len globálnu kalibračnú symetriu  $U(1)$ . To znamená, že funkcia  $\Delta(\mathbf{k})$  sa nemení pri akejkoľvek operácii symetrie kryštálu. V literatúre sa pre konvenčné supravodiče používa názov *s*-vlnové supravodiče. Prípadná anizotropia funkcie  $\Delta(\mathbf{k})$  môže súvisieť s tvarom Fermiho plochy alebo s párovacou interakciou, ktorá nie je rovnaká na celej Fermiho ploche. Závislosť energetickej medzery v *k*-priestore má vplyv na fyzikálne vlastnosti supravodivého stavu, ktoré súvisia s excitáciou kvázičastíc. V nízkotepelných supravodičoch je energetická medzera obvykle nenulová pozdĺž celej Fermiho plochy a fyzikálne vlastnosti majú pri teplotách  $T/T_c \ll 1$  exponenciálnu teplotnú závislosť. V prípade, že energetická medzera má nulové body, t.j. body, v ktorých je jej amplitúda nulová, sú teplotné závislosti fyzikálnych veličín dané mocninnými zákonmi. Mocninné teplotné závislosti boli pozorované pri meraniach na kuprátoch. Ako príklady spomeňme merania hĺbky vniku [10] a merania tepelnej kapacity [11]. Priame pozorovanie nulových bodov funkcie  $\Delta(\mathbf{k})$  poskytli fotoemisné experimenty [12], pri ktorých sa merala uhlová závislosť energetickej medzery pozdĺž Fermiho plochy.

Pri interpretovaní spomínaných experimentálnych pozorovaní sa okrem anizotropného *s*-vlnového stavu uvažovalo aj o stave s *d*-vlnovou symetriou. Supravodiče s *d*-vlnovou symetriou označujeme ako nekonvenčné supravodiče. Tento pojem pochádza z teórie fázových prechodov, ktorá bola zavedená Landauom a neskôr zovšeobecnená Andersonom. Nekonvenčný supravodivý stav je charakterizovaný tým, že okrem globálnej kalibračnej symetrie  $U(1)$  je narušená aj ďalšia symetria, ako napríklad časová symetria, translačná symetria alebo rotačná symetria kryštálovej mriežky. Narušenie rotačnej symetrie kryštálu vedie k funkcii  $\Delta(\mathbf{k})$  s *d*-vlnovou symetriou. Stav s *d*-vlnovou symetriou, na rozdiel od *s*-vlnového supravodiča, je charakterizovaný funkciou  $\Delta(\mathbf{k})$ , ktorá pri prechode nulovými bodmi zmení znamienko, čo inými slovami znamená nespojitú zmenu fázy o hodnotu  $\pi$ . Tento nekonvenčný stav dokázal uspokojivo vysvetliť experimentálne pozorovania a navyše, *d*-vlnová symetria sa často vyskytuje v teoretických modeloch, ktoré sa používajú na popis supravodivého stavu kuprátov.

Otázka symetrie supravodivého stavu bola definitívne vyriešená pomocou tzv. fázovo citlivých meraní, ktoré boli schopné určiť fázu funkcie  $\Delta(\mathbf{k})$  na rôznych častiach Fermiho plochy [13]. Všetky fázovo citlivé merania potvrdili, že kupráty sú *d*-vlnové supravodiče.

### 1.3 Oblasť pseudogapu

Vznik supravodivého stavu v konvenčných supravodičoch rozumieme ako nestabilitu normálneho stavu voči vytváraniu Cooperových párov. Preto, ak chceme pochopiť supravodivý stav kuprátov, musíme najskôr porozumieť stavu, z ktorého supravodivý stav vzniká, t.j. stavu nad kritickou teplotou. Problémom v kuprátoch však je, že stav nad kritickou teplotou nie je ani zďaleka normálnym stavom, ako ho poznáme v konvenčných materiáloch. Teória Fermiho kvapalín, ktorá sa používa pri popise vlastností normálneho stavu konvenčných materiálov, platí v prípade kuprátov iba pre určité úrovne dopovania. Najviac preskúmanou, no zato najmenej pochopenou časťou fázového diagramu kuprátov, je oblasť s nízkou úrovňou dopovania, tzv. oblasť “pseudogapu”, viď. obrázok 2. V tejto oblasti fázového diagramu boli experimentálne pozorované mnohé anomálne vlastnosti, ktoré sa nedajú vysvetliť na základe teórie Fermiho kvapalín. Názov pseudogap pochádza z existencie energetickej medzery v excitačnom spektre kvázičastíc na častiach Fermiho plochy.

Prvýkrát bola energetická medzera experimentálne pozorovaná pri NMR meraniach, kde sa zistil pokles spinovej susceptibility [14] v poddopovanej oblasti kuprátov pri teplotách nad  $T_c$ . Spinová susceptibilita je úmerná elektrónovej hustote stavov na Fermiho energii, pričom podľa teórie Fermiho kvapalín je hustota stavov v normálnom stave kovov nezávislá od teploty. Tento pokles bol interpretovaný ako vznik energetickej medzery v excitačnom spektre kvázičastíc.

Iné merania, ktoré potvrdili existenciu pseudogapu, boli merania merného tepla [15]. Pre poddopované vzorky autori zistili, že merné teplo klesá s klesajúcou teplotou, pričom pokles začína pri teplotách ďaleko nad  $T_c$ . Keďže elektrónové merné teplo je priamo úmerné hustote stavov na Fermiho energii, pozorovaný pokles v teplotných závislostiach merného tepla možno pripísať “otváraniu” energetickej medzery na Fermiho ploche.

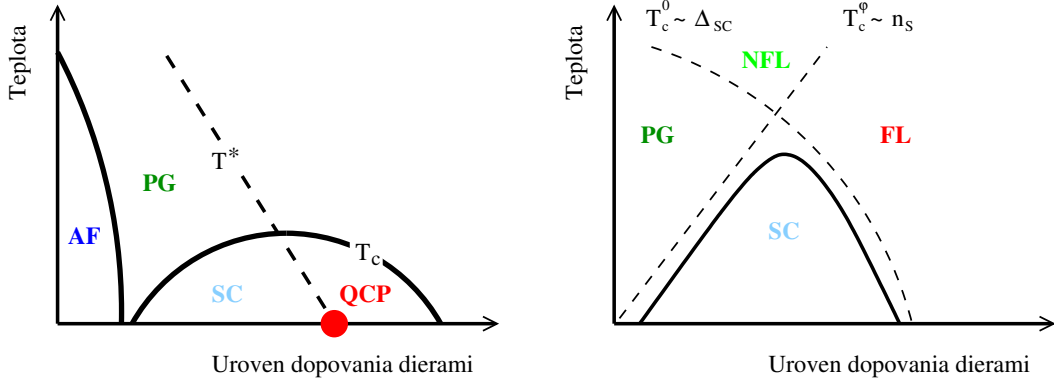
Merania použitím fotoemisnej spektroskopie [16] a skenovacej tunelovej mikroskopie [17], ktoré priamo merajú hustotu stavov na Fermiho energii, odhalili pokles hustoty stavov v blízkosti Fermiho energie pre poddopované materiály pri teplotách nad kritickou teplotou.

Pôvod energetickej medzery v “normálnom” stave a jej súvis s energetickou medzerou v supravodivom stave predstavuje hlavný problém v teórii kuprátov. Stručný prehľad o tejto problematike možno nájsť v článku [18]. V súčasnosti existujú dve triedy teórií: jedna predpokladá, že oblasť pseudogapu je samostatnou termodynamickou fázou, ktorá je od oblasti NFL (pozri obrázok 2) oddelená fázovým prechodom, druhá predpokladá, že pseudogap je normálnym kovom, v ktorom elektróny vytvorili Cooperove páry, ktoré však nie sú fázovo koherentné. V tomto prípade pseudogap nie je samostatnou termodynamickou fázou, ale predstavuje fázovo neusporiadaný supravodič.

#### 1.3.1 Pseudogap ako samostatná termodynamická fáza

V literatúre možno nájsť mnoho odkazov, ktoré popisujú pseudogap ako samostatnú termodynamickú fázou s narušenou symetriou, ktorá súťaží so supravodivým stavom. V prospech každého stavu existujú rozumné argumenty, avšak vo všeobecnosti neexistuje zhoda, ktorý zo stavov sa v poddopovaných kuprátoch realizuje. Predpokladá sa, že teplota  $T^*$  a parameter usporiadania zanikajú v kvantovom kritickom bode (QCP - quantum critical point), umiestnenom v supravodivej

oblasti fázového diagramu, blízko optimálnej úrovne dopovania, vid'. obrázok 3 vľavo. Zatiaľ čo klasické fázové prechody nastávajú pri konečnej teplote a sú riadené tepelnými fluktuáciami, kvantové fázové prechody nastávajú pri nulovej teplote a sú riadené kvantovými fluktuáciami. V blízkosti QCP sa očakáva, že fluktuácie sprostredkujú párovanie elektrónov, čo vedie k vysokoteplotnej supravodivosti. Výzvou pre túto interpretáciu pseudogapu sú dva experimentálne fakty. Za prvé, doteraz nebol experimentálne pozorovaný skok v mernom teple pri teplote  $T^*$ , ako sa očakáva pri väčšine fázových prechodov. Za druhé, neexistuje všeobecný konsenzus, aká symetria je vo fáze pseudogapu spontánne narušená.



Obrázok 3: *Vľavo*: Schematický fázový diagram podľa interpretácie pseudogapu ako samostatnej termodynamickkej fázy. Prerušovaná čiara v tomto prípade reprezentuje fázový prechod a QCP je kvantový kritický bod. *Vpravo*: Schematický fázový diagram podľa interpretácie pseudogapu ako roztopeného supravodiča. Supravodivá fáza je výsledkom dvoch teplotných škál. Párovacej teploty  $T_c^0$ , pod ktorou vznikajú Cooperove páry a teploty  $T_c^\phi$ , pod ktorou dochádza k fázovej koherencii medzi Cooperovými párami. V oblasti, kde  $T_c^\phi < T_c^0$ , fázové fluktuácie spôsobujú vznik pseudogapu.

Najjednoduchším stavom, ktorý naruša translačnú symetriu je vlna nábojovej (spinovej) hustoty. Hustota osciluje okolo priemernej hodnoty s vlnovým vektorom, ktorý sa netransformuje podľa grupy symetrie kryštálovej mriežky [19].

Ďalším možným stavom, ktorý naruša translačnú a rotačnú symetriu kryštálu a navyše aj symetriu voči inverzii času je tzv. DDW stav (*d*-density wave) navrhnutý Chakravartym *et al.* [20]. Tento stav je charakterizovaný lokálnymi prúdmi, ktoré tečú v opačných smeroch v susedných  $\text{CuO}_2$  plaketách v jednej rovine.

Podobný stav s orbitálnymi prúdmi bol navrhnutý Varmom [21]. V každej jednotkovej bunke kryštálu sa vytvoria dve prúdové slučky medzi iónom kyslíku a iónom medi, pričom prúdy v týchto slučkách tečú v opačných smeroch. Takýto stav naruša rotačnú symetriu a symetriu voči inverzii času, nenaruša však translačnú symetriu kryštálu.

Medzi súťažiacimi nestabilitami patria aj modely, v ktorých pseudogap nie je charakterizovaný parametrom usporiadania. V takom prípade pri teplote  $T^*$  nenastáva skutočný fázový prechod a kľúčovú úlohu hrajú fluktuácie súvisiace s vybranou nestabilitou. Usporiadáný stav môže byť stabilizovaný pri nízkych teplotách na úkor supravodivého stavu v prípade, že použijeme napríklad



vonkajšie magnetické pole. Najznámejším modelom je tzv. prúžkovaná fáza (stripe order), v ktorej sa nosiče náboja usporiadajú do čiar, ktoré sú navzájom oddelené antiferomagnetickými doménami. Pri vzniku nábojových prúžkov dochádza k narušeniu rotačnej symetrie, ale kvôli fluktuáčnym efektom nie je narušená translačná symetria. Ak potlačíme fluktuácie, prúžky sa stanú statickými, čo má za následok narušenie translačnej symetrie kryštálu.

V prospech stavov s narušenou translačnou symetriou hovoria nedávno vykonané oscilačné experimenty pri nízkych teplotách a v silných magnetických poliach. V predpokovanej oblasti fázového diagramu [22] naznačujú existenciu veľkej Fermiho plochy<sup>2</sup> s dobre definovanými excitáciami, zatiaľ čo v poddopovanej oblasti [23] experimenty ukázali, že Fermiho plocha prejde výraznou rekonštrukciou. Merania boli interpretované pomocou tzv. malej Fermiho plochy, ktorá prirodzene vzniká ako dôsledok narušenia translačnej symetrie.<sup>3</sup>

### 1.3.2 Pseudogap ako roztopený supravodič

Prvú teóriu komplexne popisujúcu supravodivý stav aj pseudogap predložil Anderson [24], ktorý pri svojom popise použil tzv. RVB (Resonating Valence Bond) stav. Anderson argumentoval, že kvantové fluktuácie v nedopovanej dvojzozmernej mriežke s časticami so spinom  $1/2$  môžu viesť k zániku ďalekodosahového usporiadania, čo má za následok vznik tzv. spinovej kvapaliny. Anderson ďalej predpokladal, že spinová kvapalina je tvorená viazanými elektrónovými párami, ktoré sú v singletnej konfigurácii. Pretože sú všetky body mriežky obsadené, elektrónové páry sa nemôžu pohybovať. Dopovaním vznikajú v mriežke vakancie, čím sa viazané elektrónové páry stanú pohyblivými, čo vedie k vzniku pseudogapu. Znížením teploty pod kritickú teplotu  $T_c$  sa páry stanú fázovo koherentné a systém prejde do supravodivého stavu. Hoci sa experimentálne nepotvrdila existencia spinovej kvapaliny v nedopovanom stave, pseudogap ako roztopený supravodič je jedna z možných interpretácií tejto oblasti fázového diagramu.

K podobným záverom dospeli aj Emery a Kivelson, avšak na základe odlišných úvah. V práci [25] poukázali na skutočnosť, že v supravodičoch existujú dve dôležité energetické (teplotné) škály: energetická medzera  $\Delta$ , ktorá odpovedá energii potrebnej na roztrhnutie Cooperovho páru a fázová tuhosť  $\rho_S$ , ktorá súvisí so schopnosťou supravodiča viesť elektrický prúd bez straty energie a je úmerná koncentrácii supravodivých nosičov náboja  $n_S$ . V konvenčných supravodičoch je energia  $\Delta$  oveľa menšia než  $\rho_S$ , a preto zánik supravodivého stavu súvisí so zánikom Cooperových párov. V kuprátoch sú však tieto dve energetické škály porovnateľné a v poddopovaných materiáloch je dokonca fázová tuhosť menšia. To znamená, že pri zvyšovaní teploty dochádza najskôr k zániku schopnosti supravodiča viesť supravodivý prúd a až následnému zániku Cooperových párov. Tie

<sup>2</sup>Podľa Luttingerovej vety je objem uzavretý Fermiho plochou priamo úmerný koncentrácii nosičov náboja. Po dopovaní kuprátov dierami s koncentráciou  $x$  bude mať teda Fermiho plocha veľkosť rovnú  $(1-x)/2$  násobku plochy prvej Brillouinovej zóny. V takom prípade hovoríme o veľkej Fermiho ploche.

<sup>3</sup>Vznik malej Fermiho plochy v kove si vysvetlíme na jednoduchom príklade: predstavme si jednu  $\text{CuO}_2$  rovinu s dvojzozmernou Bravaisovou mriežkou so štvorcovou primitívnou bunkou s dĺžkou strany  $a$ . Ak je v tejto rovine narušená translačná symetria, potom rozmer primitívnej bunky bude väčší ako  $a^2$ . Napríklad v jednoduchom antiferomagnetickom stave bude mať primitívna bunka plochu  $2a^2$ . Tomu ale zodpovedá prítomnosť nových Braggových odrazov a zmenšenie plochy prvej Brillouinovej zóny na polovicu, čo vedie k vzniku malej Fermiho plochy.

môžu preto existovať aj pri teplotách vyšších ako je kritická teplota, viď. obrázok 3 vpravo. Tieto argumenty boli navyše podporené experimentálnymi pozorovaniami Uemuru [26], ktorý zistil, že pre širokú škálu poddopovaných materiálov je kritická teplota úmerná hustote  $n_S$ .

V prospech tejto interpretácie hovoria nedávne fotoemisné experimenty [27], ktorých výsledky nie sú konzistentné s existenciou jedného QCP v blízkosti optimálnej úrovne dopovania a výsledky získané pri meraní Nernstovho javu [28] v normálnom stave poddopovaných kuprátov.

Na druhej strane, hlavným argumentom proti interpretácii pseudogapu ako roztopeného supravodiča sú magneto-oscilačné experimenty [23], ktoré naznačujú, že objem Fermiho plochy je úmerný dopovaniu. Malá Fermiho plocha totiž prirodzene vzniká ako dôsledok narušenia translačnej symetrie.

## 2 Cieľ práce

Cieľom predkladanej dizertačnej práce je prispieť k lepšiemu pochopeniu normálneho stavu poddopovaných kuprátov, t.j. pseudogapu. Existencia energetickej medzery v oblasti pseudogapu je všeobecne akceptovaný experimentálny fakt. Avšak, ako sme naznačili v predchádzajúcej kapitole, v súčasnosti neexistuje všeobecná zhoda o pôvode tohto stavu. Prikláňajúc sa k interpretácii pseudogapu ako supravodiča, ktorý nie je fázovo koherentný, bude naším cieľom pokúsiť sa vysvetliť tie experimentálne pozorovania, ktoré hovoria v neprospech tejto interpretácie.

Jednou zo základných úloh je vysvetliť pozorovaný rozpor medzi veľkou Fermiho plochou v nulovom magnetickom poli a malou Fermiho plochou v silných magnetických poliach a pri nízkych teplotách. Tento problém bol nedávno riešený v literatúre, kde autori argumentovali, že v silnom magnetickom poli má supravodič vyššiu energiu ako je energia antiferomagnetu, čo znamená, že magnetické pole stabilizuje stav s narušenou translačnou symetriou [29]. Avšak, ich popis vírového stavu bol veľmi približný, vplyv magnetického poľa na supravodivý stav bol jednoducho aproximovaný znížením amplitúdy energetickej medzery z hodnoty v supravodiči bez magnetického poľa na hodnotu, ktorá bola získaná stredovaním hodnoty energetickej medzery v blízkosti jadra víru. Naším cieľom je vylepšiť ich výpočet. V dizertačnej práci budeme riešiť príbuznú úlohu o supravodiči, v ktorom tečú konečné supravodivé prúdy, čím budeme simulovať vplyv magnetického poľa na supravodič. Numerickým výpočtom určíme závislosť energetickej medzery  $\Delta_{\mathbf{k}}$  v Brillouinovej zóne ako funkciu hybnosti Cooperovho páru.

Druhým cieľom dizertačnej práce je študovať anomálne magnetické vlastnosti extrémne poddopovaných vzoriek, v ktorých bol pozorovaný nesúlad medzi závislosťami spodného kritického poľa a hĺbky vniku od úrovne dopovania. S cieľom vysvetliť experimentálne údaje zovšeobecniťme fenomenologickú Ginzburgovu-Landauovu teóriu tak, aby sme zobrali do úvahy zníženú fázovú tuhosť poddopovaných kuprátov. Minimalizovaním modifikovaného funkcionálu získame sadu nových Ginzburgových-Landauových rovníc, ktoré budeme numericky riešiť. V rámci modifikovanej teórie preskúmame termodynamické vlastnosti supravodivého stavu a porovnáme získané výsledky s experimentálnymi údajmi.

## 3 Výsledky práce

### 3.1 Mikroskopická teória supravodivosti

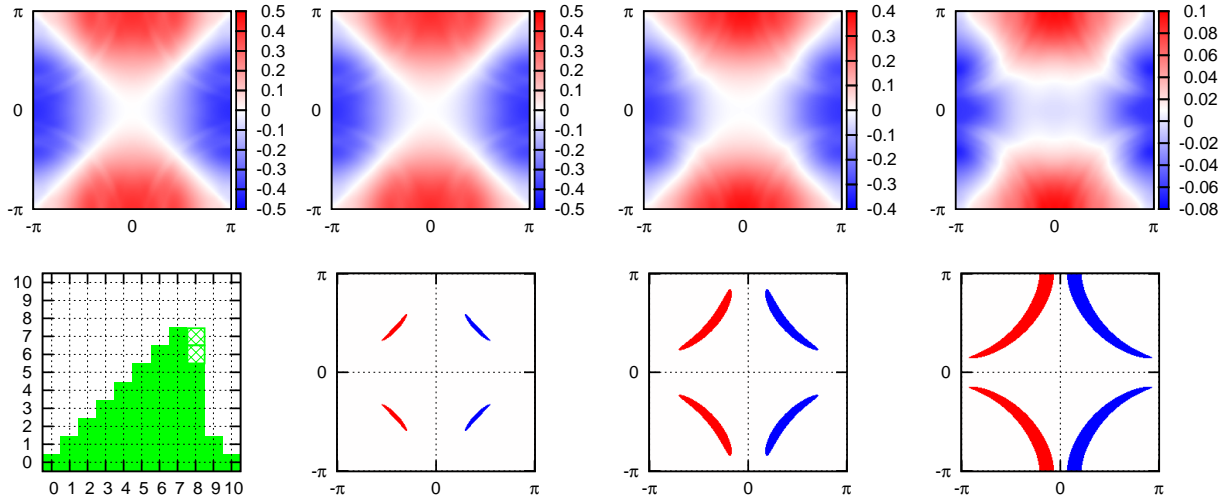
Rozporom medzi pozorovanou veľkou Fermiho plochou v nulovom magnetickom poli [30] a malou Fermiho plochou v silných magnetických poliach a pri nízkych teplotách [23] sa zaoberali Chen *et al.* v práci [29]. Študovali vplyv magnetického poľa na supravodivý stav a porovnávali jeho stabilitu s konkurenčnou antiferomagnetickou fázou s narušenou translačnou symetriou. Ich výsledkom bolo, že magnetické pole môže stabilizovať antiferomagnetické usporiadanie, ktorého energia v magnetickom poli je nižšia ako energia supravodiča, čo by bolo v súlade s pozorovanou malou Fermiho plochou. Nedostatkom práce [29] však bolo, že vplyv magnetického poľa na supravodivý stav bol jednoducho aproximovaný znížením amplitúdy energetickej medzery z hodnoty v supravodiči bez magnetického poľa na hodnotu, ktorá bola získaná stredovaním hodnoty energetickej medzery v blízkosti jadra víru. Naším cieľom bolo preto vylepšiť ich výpočet.

Vplyv magnetického poľa na supravodivý stav supravodičov druhého typu je vo všeobecnosti komplikovaný problém, a preto sme riešili príbuznú úlohu, v ktorej sme študovali vplyv homogénnych supravodivých prúdov na supravodivý stav. Naša idea bola založená na tom, že magnetické pole indukuje vo vzorke supravodivé prúdy, ktoré tečú v okolí vírov, a tým bránia vnikaniu magnetického poľa do jej objemu. Očakávali sme, že študovaním potlačenia supravodivého stavu v prítomnosti konečných prúdov dokážeme simulovať vplyv magnetického poľa na supravodiče.

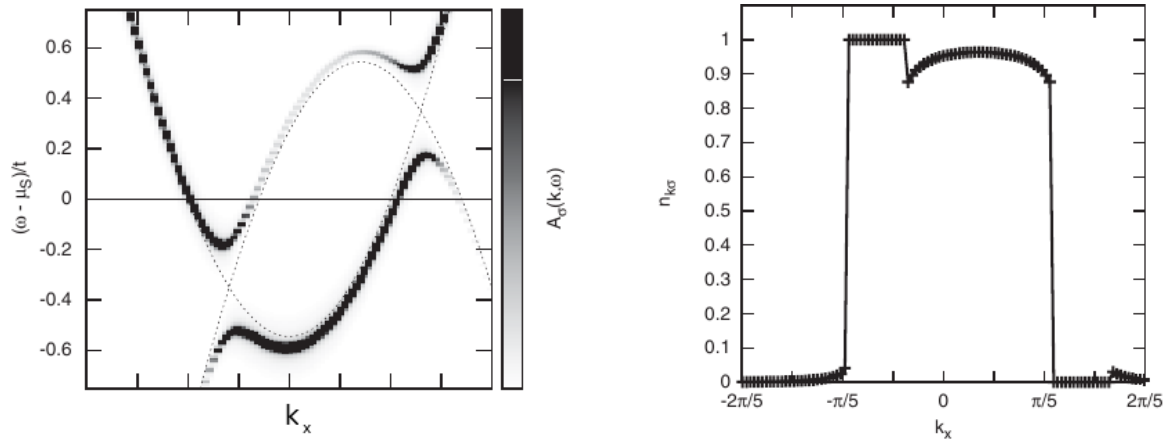
Podobné výpočty vplyvu konečných prúdov na supravodivý stav boli prezentované v práci [31], kde autori skúmali prechod zo supravodivého stavu do normálneho stavu pod vplyvom kritických supravodivých prúdov. Nevýhodou prístupu v práci [31] bolo, že neumožňoval zmenu Cooperovej vlnovej funkcie v prítomnosti konečných supravodivých prúdov. V prítomnosti konečných prúdov totiž dochádza k prerozdeleniu stavov, ktoré sú obsadené kvázičasticami, čo môže následne zmeniť tvar vlnovej funkcie Cooperových párov. V prípade kuprátov, ktoré sú  $d$ -vlnové supravodiče, t.j. existujú smery v  $\mathbf{k}$ -priestore, v ktorých je energetická medzera nulová, prítomnosť konečných prúdov dramaticky mení rozdelenie kvázičastíc v týchto smeroch [31].

Aby sme odstránili tento nedostatok, zovšeobecnil sme variačnú metódu navrhnutú pre popis supravodivého stavu v Hubbardovom modeli s odpudivými interakciami [32] na prípad s konečnou hybnosťou Cooperových párov  $2\mathbf{q}$ . Použitá metóda nevkladá tvar Cooperovej vlnovej funkcie rukou, ale energetická medzera  $\Delta_{\mathbf{k}}$  bola určená self-konzistentným výpočtom. Pretože výpočty boli vykonávané numericky, výsledkom bola diskrétna množina vektorov  $\mathbf{q}$ , pre ktoré sme určili závislosť funkcie  $\Delta_{\mathbf{k}}$  v Brillouinovej zóne, pozri obrázok 4. Následne sme vypočítali základné termodynamické vlastnosti a priebeh elektrónovej spektrálnej funkcie, viď. obrázok 5. Najprekvapujúcejším výsledkom bolo zistenie, že typ fázového prechodu do normálneho stavu závisí od smeru vektora  $\mathbf{q}$ . Získané výsledky sme publikovali v práci [M1].

V budúcnosti by sme chceli využiť mikroskopické výsledky [M1] pri štúdiu stability supravodivého vírového stavu. Úlohou bude vypočítať voľnú energiu vírového stavu a porovnať získané výsledky s energiou iného súťažiacieho stavu s narušenou translačnou invariantnosťou, na popis ktorého použijeme techniku vypracovanú v práci [33].



Obrázok 4: *Horný riadok*: Závislosť energetickej medzery v prvej Brillouinovej zóne pre nasledovné hodnoty hybnosti Cooperových párov:  $\mathbf{q} = (0, 0)$ ,  $(4, 0)$ ,  $(8, 0)$  a  $(10, 0)$  merané v jednotkách  $2\pi/(Na)$ , kde  $a$  je mriežková konštanta a  $N$  je lineárny rozmer študovanej mriežky. *Spodný riadok*: Obsadenie Bogoliubovových kvázičastíc  $f_{\mathbf{k}}^+ = f(E_{\mathbf{k}}^+) = 1$  (červená) a  $f_{\mathbf{k}}^- = f(E_{\mathbf{k}}^-) = 1$  (modrá). Prvý obrázok zľava zobrazuje tie  $\mathbf{q}$ -body, pre ktoré sme dokázali nájsť supravodivé riešenie. Supravodivé riešenia, ktoré sú označené krížikom odpovedajú metastabilným riešeniam, t.j. ich energia je väčšia ako je energia normálneho stavu.



Obrázok 5: *Vľavo*: Priebeh elektrónovej spektrálnej funkcie vypočítanej pre  $\mathbf{q} = (9, 0)$  pozdĺž rezu  $k_y = 3\pi/4$  Fermiho plochou. Prerušované čiary reprezentujú disperzný zákon  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  v normálnom stave. *Vpravo*: Obsadenie elektrónov pre  $\mathbf{q} = (9, 0)$  pozdĺž rezu  $k_y = 3\pi/4$  Fermiho plochou. V tomto prípade dochádza k obsadeniu stavov, ktorých hybnosť je antiparalelná s vektorom  $\mathbf{q}$  na úkor stavov s hybnosťou paralelnou s vektorom  $\mathbf{q}$ . Tieto výsledky sú v súlade s našimi očakávaniami, keďže pre  $q > q_c$ , kde  $q_c$  je maximálna hodnota hybnosti, pre ktorú dokážeme nájsť supravodivé riešenie, supravodivosť zaniká a žiaden prúd vzorkou netečie.

### 3.2 Fenomenologická teória supravodivosti

Fenomenologická Ginzburgova-Landauova (GL) teória našla široké uplatnenie pri skúmaní vlastností supravodivého stavu konvenčných supravodičov. Táto teória sa obvykle používa pri štúdiu problémov, kde sa energetická medzera  $\Delta_{\mathbf{k}}$  mení v priestore, pretože v takých situáciach je použitie mikroskopickej teórie veľmi náročné. Ako príklad môžeme spomenúť štúdium intermediálneho stavu supravodičov I. typu alebo vírového stavu supravodičov II. typu.

Základom GL teórie je výraz pre hustotu voľnej energie [34]

$$\delta\mathcal{F} = \frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \mathbf{A})^2 + \mu_0 H_c^2 \left[ -f^2 + \frac{1}{2}f^4 + \xi^2(\nabla f)^2 + \xi^2 f^2 \left( \nabla\theta + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \right], \quad (2)$$

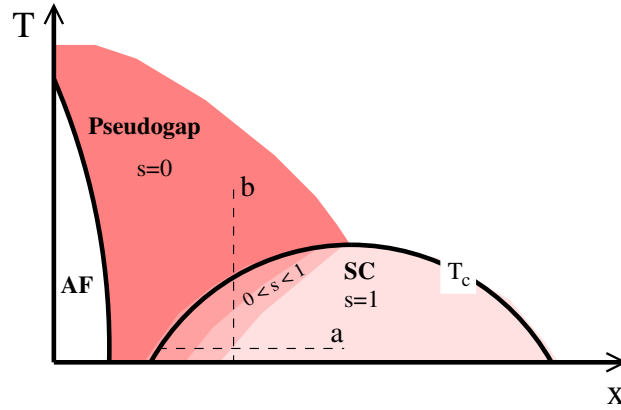
kde sme komplexnú vlnovú funkciu vyjadrili v tvare  $\psi(\mathbf{r}) = \psi_\infty f(\mathbf{r})e^{i\theta(\mathbf{r})}$  a  $\psi_\infty$  je hodnota makroskopickej vlnovej funkcie hlboko vnútri izolovaného supravodiča bez vonkajších aplikovaných polí. Pri pohľade na vzťah (2) si môžeme všimnúť, že amplitúdové fluktuácie (3. člen v hranatej zátvorke) a fázové fluktuácie (4. člen) sú merané rovnakou koherenčnou dĺžkou  $\xi$ . Vyjadrené inými slovami, amplitúdová tuhosť a fázová tuhosť sú rovnaké. To však nemusí byť pravda v prípade poddopovaných kuprátov. Ak pseudogap interpretujeme ako “roztopený” supravodič, potom možno tvrdiť, že pseudogap je vlastne supravodivým stavom s konečnou amplitúdovou tuhosťou, ale bez fázovej koherencie. Na druhej strane, skutočný supravodivý stav pod kritickou teplotou má konečnú amplitúdovú aj fázovú tuhosť. Preto možno očakávať, že tesne pod  $T_c$  bude fázová tuhosť konečná, avšak menšia v porovnaní s amplitúdovou tuhosťou.

Aby sme odlíšili amplitúdovú tuhosť od fázovej tuhosti vo vzťahu (2), zaviedli sme dve koherenčné dĺžky, amplitúdovú koherenčnú dĺžku  $\xi$  a fázovú koherenčnú dĺžku  $\xi_\perp$ , čím sa výraz pre hustotu voľnej energie zmení nasledovne

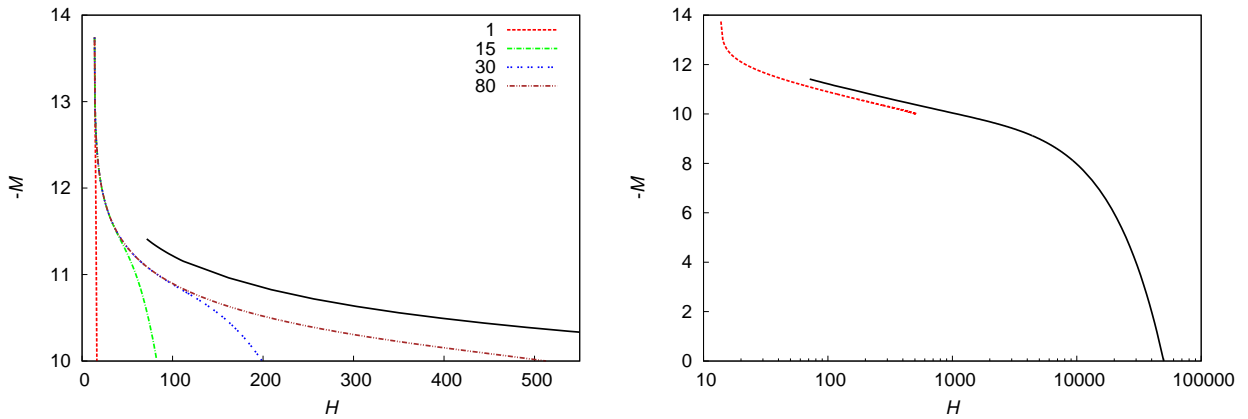
$$\delta\mathcal{F} = \frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \mathbf{A})^2 + \mu_0 H_c^2 \left[ -f^2 + \frac{1}{2}f^4 + \xi^2(\nabla f)^2 + \xi_\perp^2 f^2 \left( \nabla\theta + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \right]. \quad (3)$$

Vo vzťahu (3) sme predpokladali, že koherenčná dĺžka  $\xi_\perp$  je oveľa menšia ako  $\xi$ , čo znamená, že amplitúdové fluktuácie “stoja” viac energie než fázové fluktuácie. Modifikovaná GL teória je teraz charakterizovaná tromi dĺžkovými škálami, hĺbkou vniku  $\lambda$ , amplitúdovou koherenčnou dĺžkou  $\xi$  a fázovou koherenčnou dĺžkou  $\xi_\perp$ . Teória teda má dva bezrozmerné parametre, GL parameter  $\kappa = \lambda/\xi$  a nový parameter  $s = \xi_\perp/\xi$ . Na základe spomenutých úvah predpokladáme, že pri približovaní sa k “normálnemu” stavu,  $T \rightarrow T_c$ , bezrozmerný parameter  $s = \xi_\perp/\xi$  postupne klesá, až nakoniec v bode fázového prechodu je nulový. Na druhej strane, hlboko v supravodivom stave očakávame, že konvenčná GL teória je platná, a preto  $s = 1$ , pozri obrázok 6.

Výsledky, ktoré sme získali použitím modifikovanej GL teórie, sme postupne publikovali v troch článkoch [F1], [F2] a [F3]. Prvý článok [F1] sa venoval štúdiu magnetických vlastností supravodičov druhého typu. Vypočítali sme rovnovážnu magnetizačnú krivku  $M = M(H)$ , pozri obrázok 7, horné kritické pole  $H_{c2}$  a spodné kritické pole  $H_{c1}$ . Okrem toho sme preskúmali závislosť amplitúdy makroskopickej vlnovej funkcie  $f(r)$  a magnetického poľa  $\mathcal{B}(r)$  v okolí jadra víru a zistili sme, že



Obrázok 6: Schematický fázový diagram kuprátov v rovine dopovanie-teplota. V oblasti, kde  $0 < s < 1$  očakávame, že platí modifikovaná GL teória. Čiary (a) a (b) označujú dva rôzne experimentálne testy, pomocou ktorých sme overili predpovede našej teórie.



Obrázok 7: Magnetizačná krivka  $M = M(H)$  vypočítaná pre  $s = 0.1$  a  $\kappa = 50$ . Magnetické pole  $H$  a magnetizácia  $M$  sú merané v jednotkách  $\Phi_0/(4\pi\mu_0\lambda^2)$ . *Vľavo*: Magnetizačná krivka v blízkosti spodného kritického poľa  $H_{c1}$ . Prerušované čiary zobrazujú konvergenciu magnetizačnej krivky v závislosti od počtu susedných bodov v trojuholníkovej mriežke, ktoré berieme do úvahy pri výpočte magnetizácie. Napríklad 1 znamená, že uvažujeme iba najbližších susedov v trojuholníkovej mriežke. Plná čiara reprezentuje numericky vypočítanú približnú magnetizačnú krivku, kde sme trojuholníkovú bunku nahradili Wignerovou-Seitzovou bunkou s polomerom  $d$ , vo vnútri ktorej sme hľadali riešenia modifikovaných GL rovníc. *Vpravo*: Kompletná magnetizačná krivka zložená z presného riešenia v blízkosti  $H_{c1}$  (prerušovaná čiara) a približného riešenia (plná čiara) v logaritmickej škále. Ako je vidieť na obrázku, náš približný výpočet magnetizačnej krivky dobre aproximuje skutočnú magnetizačnú krivku.

obidve funkcie vykazujú neanalytické správanie v limite  $r \rightarrow 0$  pre hodnotu parametra  $s < 1$ , pozri obrázok 9 vpravo v okolí bodu A.

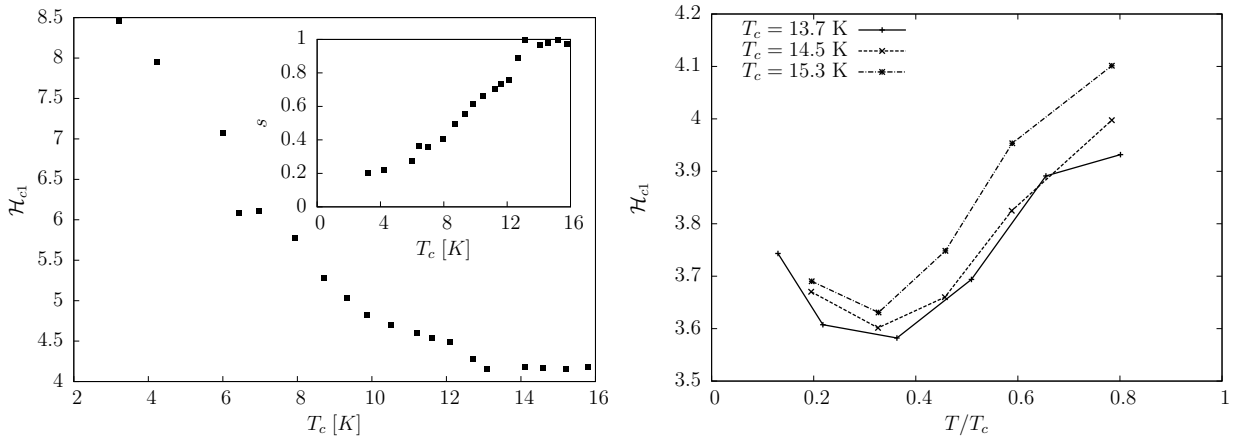
Za účelom experimentálneho overenia našej teórie sme zaviedli bezrozmerné spodné kritické pole

$$\mathcal{H}_{c1} = \frac{4\pi\mu_0\lambda^2 H_{c1}}{\Phi_0}, \quad (4)$$

kde  $\Phi_0 = h/2e$ . Ukázali sme, že  $\mathcal{H}_{c1}$  možno v širokom rozsahu parametrov aproximovať funkciou

$$\mathcal{H}_{c1} = \frac{1}{s(1+s^2)} + \ln \kappa. \quad (5)$$

Porovnaním vypočítanej hodnoty  $\mathcal{H}_{c1}$  z experimentálnych údajov a našej teoretickej predpovede sme ukázali, že modifikovaná GL teória umožňuje prirodzeným spôsobom vysvetliť experimentálne pozorované anomálne správanie  $\mathcal{H}_{c1}$  v blízkosti prechodu do “normálneho” stavu, pozri obrázok 8 vľavo.

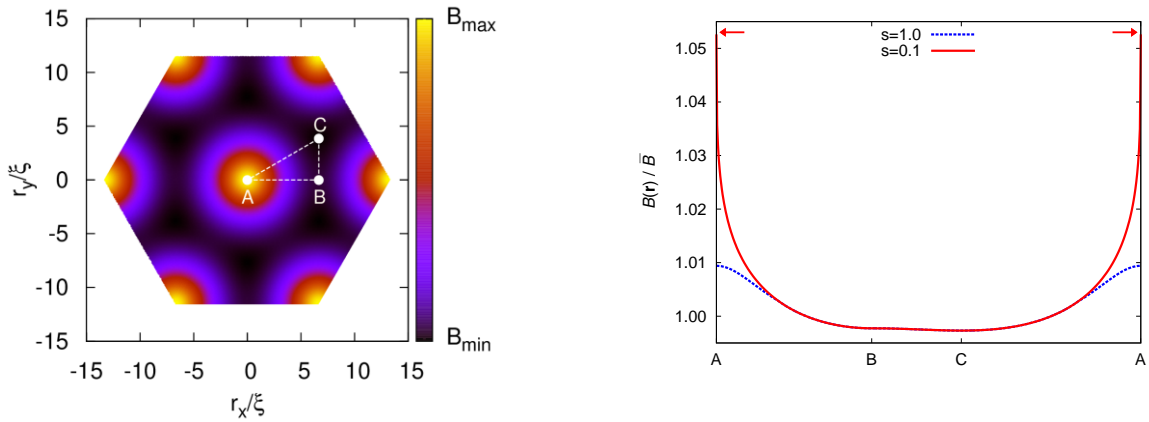


Obrázok 8: *Vľavo*: Závislosť bezrozmerného spodného kritického poľa  $\mathcal{H}_{c1}$  od úrovne dopovania v limite  $T = 0$  (čiara *a* na obrázku 6). Nárast  $\mathcal{H}_{c1}$  v blízkosti prechodu do normálneho stavu možno vysvetliť poklesom parametra  $s$ . Použitím vzťahu (5), kde sme predpokladali  $\ln \kappa = 3.65$ , sme vypočítali závislosť parametra  $s$  pri zmene criticalkej teploty vzorky, pozri vložený obrázok. Parameter  $s$  klesá presne v súlade s našimi očakávaniami. *Vpravo*: Teplotná závislosť  $\mathcal{H}_{c1}$  pre extrémne poddopované vzorky (čiara *b* na obrázku 6). Ako možno vidieť na obrázku,  $\mathcal{H}_{c1}$  narastá pri zvyšovaní teploty, presne v súlade s predpoveďou modifikovanej GL teórie. Naša teória totiž predpovedá, že  $\mathcal{H}_{c1}$  diverguje, ak teplota dosiahne criticalkú teplotu  $T_c$ .

V práci [F2] sme ukázali, že vyjadrenie pre hustotu voľnej energie (3) možno použiť aj na popis pseudogapu. V našej teórii je pseudogap popísaný konečnou hodnotou rovnovážnej makroskopickej vlnovej funkcie  $\psi_\infty$  a zároveň nulovou hodnotou parametra  $s$ . Toto odlišuje našu teóriu od konvenčnej GL teórie, v ktorej hodnota funkcie  $\psi_\infty$  je nenulová iba v supravodivom stave. Na záver sme porovnali našu teóriu s ďalšími experimentálnymi údajmi pre  $\mathcal{H}_{c1}$ . Ukázali sme, že v prípade poddopovaných vzoriek možno závislosť  $\mathcal{H}_{c1}$  od teploty vysvetliť prostredníctvom našej teórie, viď.

obrázok 8 vpravo. Naopak, pre optimálne dopované vzorky sa ukázalo, že platí konvenčná GL teória s parametrom  $s = 1$ , opäť v súlade s našimi očakávaniami.

V poslednom článku [F3] sme sa zaoberali ďalšími experimentálnymi metódami, pomocou ktorých by bolo možné overiť predpovede našej teórie. Zamerali sme sa na dve experimentálne techniky: miónovú spinovú rotáciu a rozptyl neutrónov o malé uhly. Cieľom bolo overiť možnosti týchto techník pri skúmaní neanalytického správania magnetického poľa v blízkosti jadra víru. V prvej časti článku sme vylepšili približný výpočet magnetického poľa vo vírovej mriežke, pozri obrázok 9. Výsledný profil magnetického poľa je kombináciou Wignerovho-Seitzovho riešenia v okolí jadra víru a Londonovského riešenia na okraji trojuholníkovej bunky. Následne sme urobili predpovede, ktoré možno očakávať pri experimentálnych meraniach. Ukázali sme, že v princípe možno použiť obidve techniky na overenie našich predpovedí, pozri obrázok 10, hoci z experimentálneho hľadiska je to extrémne náročná úloha, keďže je potrebné dosiahnuť vysokú presnosť meraní.

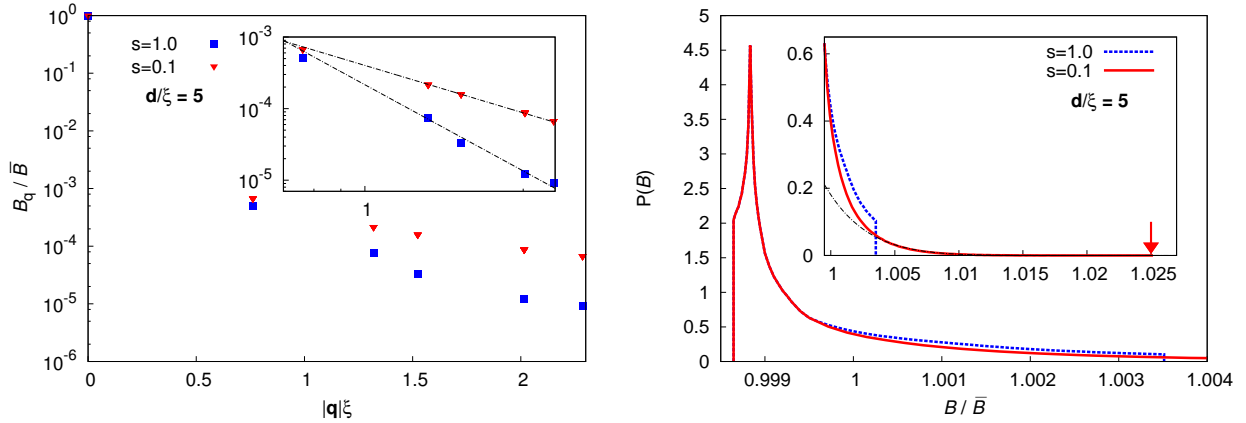


Obrázok 9: *Vľavo*: Závislosť magnetického poľa v trojuholníkovej mriežke s plochou bunky  $\pi d^2$  pre  $s = 1$  a  $d/\xi = 7$ . Body A, B a C reprezentujú jadro víru, sedlový bod a polohu globálneho minima magnetického poľa. *Vpravo*: Pribeh magnetického poľa pozdĺž čiary A-B-C pre  $d/\xi = 7$  a dve hodnoty parametra  $s$ . Šípky označujú maximálnu hodnotu magnetického poľa pre  $s = 0.1$ . Najzaujímavejším výsledkom je neanalytické správanie v blízkosti jadra víru pre  $s = 0.1$ .

Pri práci na modifikovanej GL teórii sme sa stretli s množstvom zaujímavých problémov, z ktorých nie všetkým sme sa mali čas venovať. Častokrát sme sa o nich iba okrajovo zmienili v publikáciách. Preto by sme chceli teraz podrobnejšie spomenúť aspoň niektoré z nich, ako námet pre ďalšiu prácu v budúcnosti.

V práci [F1] sme v závere uviedli, že jednou z experimentálnych techník, pomocou ktorej by sa mohla overiť naša predpoveď pre rozloženie magnetického poľa vo vírovej mriežke, je použitie magnetického silového mikroskopu. Ak by sme chceli určiť, ako magnetické pole pôsobí na hrot magnetického silového mikroskopu, museli by sme najskôr zovšeobecniť výpočet magnetického poľa pre prípad konečnej vzorky, a tým určiť tvar magnetického poľa tesne nad vzorkou [35]. Zo známeho tvaru magnetického poľa by sme potom vypočítali magnetickú silu, ktorá je priamo úmerná gradientu magnetického poľa a pôsobí na hrot mikroskopu. Z doteraz publikovaných výsledkov





Obrázok 10: *Vľavo*: Fourierove komponenty magnetického poľa  $B_{\mathbf{q}}$  v závislosti od veľkosti recipročného vektora  $\mathbf{q}$  pre  $d/\xi = 5$  a dve hodnoty parametra  $s$ . V experimentoch s rozptylom neutrónov o malé uhly sú komponenty  $|B_{\mathbf{q}}|^2$  priamo úmerné rozptýlenej intenzite neutrónového zväzku. Vložený obrázok zobrazuje závislosť  $B_{\mathbf{q}}$  v logaritmickej škále. Čiary reprezentujú teoreticky vypočítanú závislosť  $B_{\mathbf{q}}$ . *Vpravo*: Rozdelenie magnetického poľa  $P(B)$  pre  $d/\xi = 5$  a dve hodnoty parametra  $s$ . Pomocou miónovej spinovej rotácie môžeme merať rozdelenie  $P(B)$ , ktoré odpovedá pravdepodobnosti, že v ľubovľom bode vo vzorke nameriame hodnotu magnetického poľa  $B$ . Vložený obrázok zobrazuje rozdelenie magnetického poľa v blízkosti maximálnej hodnoty poľa, ktorá je označená šípku. Čiara reprezentuje teoreticky vypočítanú závislosť  $P(B)$  pre  $s = 0.1$ .

sa ukazuje, že gradient magnetického poľa v blízkosti jadra víru je výrazne väčší v našej teórii v porovnaní s konvenčnou teóriou. Problémom však môže byť priestorová rozlišovacia schopnosť mikroskopu, ktorá v súčasnosti dosahuje hodnoty desiatky nanometrov. Jadro víru, v okolí ktorého je gradient najväčší, je rovné rádovo iba nanometrom.

Otvoreným problémom zostáva aj teplotná závislosť  $\mathcal{H}_{c1}$  vypočítaná z experimentálnych údajov pre optimálne dopované kupráty publikovaná v práci [F2]. Hodnota  $\mathcal{H}_{c1}$  pri kritickej teplote je takmer o polovicu menšia v porovnaní s hodnotou pri nulovej teplote. Takýto prudký pokles by odpovedal niekoľkonásobnému zmenšeniu hodnoty GL parametra, o ktorom sa vo všeobecnosti predpokladá, že je len veľmi málo závislý od teploty.

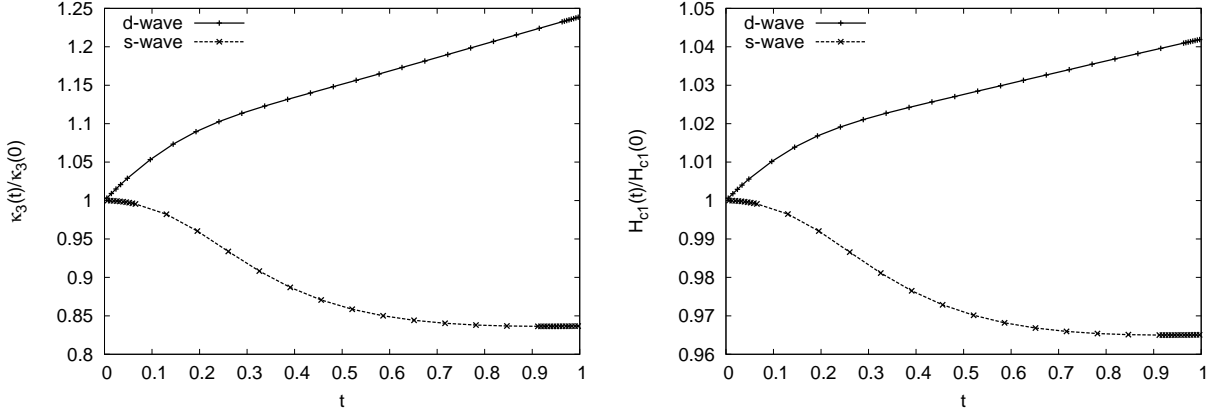
Pozorovanú závislosť sme sa pokúsili vysvetliť na základe zovšeobecnenej GL teórie platnej v blízkosti  $H_{c1}$  a v limite  $\kappa \gg 1$  [34]. Dá sa ukázať, že v tejto teórii zostávajú všetky doteraz uvedené vzťahy v platnosti. Jediným rozdielom je, že GL parameter je nahradený teplotne závislým parametrom

$$\kappa_3(T) = \sqrt{2} \frac{2\pi\mu_0 H_c(T) \lambda^2(T)}{\phi_0}, \quad (6)$$

kde  $H_c(T)$  je termodynamické kritické pole a  $\lambda(T)$  je hĺbka vniku, určené z BCS teórie. Pre bezrozmerné spodné kritické pole potom platí  $\mathcal{H}_{c1} = 1/2 + \ln \kappa_3(T)$ . Pomocou BCS teórie sme vypočítali závislosť  $\kappa_3(t)/\kappa_3(0)$ , pozri obrázok 11 vľavo, a následne sme určili  $\mathcal{H}_{c1}(t)/\mathcal{H}_{c1}(0)$  ako

funkciu redukovanej teploty  $t$ ,<sup>4</sup> pozri obrázok 11 vpravo. Výpočty pre  $s$ -vlnový supravodič sú v kvalitatívnej zhode s tými, ktoré boli prezentované v práci [34], t.j. bezrozmerné spodné kritické pole je len slabo závislé od teploty, pričom pri zvyšovaní teploty klesá. Pre  $d$ -vlnový supravodič sú výpočty v nesúlade s experimentálnymi údajmi, t.j. bezrozmerné spodné kritické pole narastá pri zvyšovaní teploty. Tieto výsledky nás vedú k záveru, že  $d$ -vlnový charakter kuprátov sám osebe nemôže vysvetliť pozorovanú teplotnú závislosť  $\mathcal{H}_{c1}$ .

Iným problémom, ktorý súvisí s už spomínanou experimentálnou závislosťou  $\mathcal{H}_{c1}$ , je experimentálna hodnota  $\mathcal{H}_{c1}$  v limite nízkych teplôt. Odčítaním z obrázku (pozri obrázok 5 v práci [F2]) dostaneme  $\mathcal{H}_{c1}(t = 0) \approx 11.5$ . Použitím konvenčnej GL teórie potom pre hodnotu GL parametra dostaneme  $\kappa \approx 55000$ , čo je jednoznačne nefyzikálna hodnota.



Obrázok 11: *Vľavo:*  $\kappa_3(t)/\kappa_3(0)$  ako funkcia redukovanej teploty  $t = T/T_c$  pre  $d$ -vlnový (plná čiara) a  $s$ -vlnový (prerušovaná čiara) supravodič. Parameter  $\kappa_3$  je definovaný vzťahom (6). *Vpravo:* Bezrozmerné spodné kritické pole  $\mathcal{H}_{c1}(t)/\mathcal{H}_{c1}(0)$  ako funkcia redukovanej teploty  $t = T/T_c$  pre  $d$ -vlnový (plná čiara) a  $s$ -vlnový (prerušovaná čiara) supravodič.

## Záver

V tejto práci sme sa zaoberali štúdiom vysokoteplotných supravodičov v magnetických poliach.

Prvá časť bola venovaná mikroskopickému štúdiu stability supravodivého stavu poddopovaných kuprátov v limite vysokých magnetických polí a nízkych teplôt. Za tým účelom sme zovšeobecнили nedávno navrhnutú variačnú techniku na popis Kohnovej-Luttingerovej supravodivosti v modeloch s odpudivými interakciami na prípad s konečnou hybnosťou Cooperových párov. To nám umožnilo študovať stav  $d$ -vlnového supravodiča nesúceho konečný supravodivý prúd v dvojrozmernom  $t - t'$  Hubbardovom modeli, čím sme simulovali vplyv magnetického poľa na supravodič. Výhodou nášho výpočtu bolo, že sme zobrali do úvahy zmenu párovacej interakcie v prítomnosti konečnej hybnosti Cooperových párov. Navyiac, naša metóda umožňuje zmenu energetickej medzery so zmenou

<sup>4</sup>Pomer  $\mathcal{H}_{c1}(t)/\mathcal{H}_{c1}(0)$  závisí od voľby parametra  $\kappa_3(0)$ , ktorý však nemá vplyv na kvalitatívny priebeh závislosti. V našom prípade sme zvolili  $\kappa_3(0) = 100$ .

hybnosti Cooperových párov, keďže energetická medzera bola určená self-konzistentným výpočtom.

Výpočty sme robili numericky pre diskkrétne hodnoty vektora  $\mathbf{q}$ . Pre každú hodnotu hybnosti Cooperových párov sme numericky riešili self-konzistentnú rovnicu pre energetickú medzeru. Riešením rovnice sme získali závislosť energetickej medzery v celej Brillouinovej zóne, ktorú sme následne použili pri výpočte základných termodynamických vlastností supravodivého stavu. Zaujímavosťou bolo zistenie, že typ prechodu do normálneho stavu závisí od orientácie vektora  $\mathbf{q}$ .

V budúcnosti by sme chceli využiť tieto mikroskopické výpočty pri štúdiu stability supravodivého stavu. Porovnaním kondenzačnej energie supravodiča s inými súťažiacimi stavmi, relevantnými pre poddopované kupráty, by sme chceli overiť nedávne výsledky, ktoré naznačujú, že magnetické pole indukuje stav s narušenou translačnou symetriou.

Druhá časť dizertačnej práce sa zaoberá skúmaním magnetických vlastností supravodičov druhého typu so zníženou fázovou tuhosťou. Motivovaní fenomenológiou poddopovaných kuprátov sme skonštruovali modifikovanú Ginzburgovu-Landauovu teóriu s dvoma koherenčnými dĺžkami. Pre pomer koherenčných dĺžok sme zaviedli bezrozmerný parameter  $s$ , o ktorom sme predpokladali, že v blízkosti rozhrania medzi supravodivým stavom a pseudogapom je malý, ale konečný.

Minimalizovaním modifikovanej hustoty voľnej energie sme získali sadu pohybových rovníc, ktoré sme numericky riešili, čím sme získali závislosť makroskopickej vlnovej funkcie a magnetického poľa vo vírovej mriežke. Následne sme vypočítali termodynamické vlastnosti supravodivého stavu a rovnovážnu magnetizačnú krivku. Prekvapivým výsledkom bolo neanalytické správanie magnetického poľa v blízkosti jadra víru. Okrem toho sme ukázali, že modifikovanú hustotu voľnej energie možno použiť aj na popis pseudogapu. V našej teórii je pseudogap popísaný konečnou hodnotou rovnovážnej makroskopickej vlnovej funkcie a zároveň nulovou hodnotou parametra  $s$ . Skutočný supravodivý stav vzniká, keď hodnota parametra  $s$  je konečná. Porovnaním teórie s experimentálnymi meraniami sme ukázali, že naša teória dokáže prirodzeným spôsobom vysvetliť anomálne správanie bezrozmerného spodného kritického poľa (4) v blízkosti prechodu do normálneho stavu. Tiež sme preskúmali možnosti moderných experimentálnych techník, umožňujúcich veľmi presné merania magnetických polí, pri testovaní predpovedí našej teórie.

V budúcnosti by sme chceli ďalej rozšíriť našu teóriu zahrnutím anizotropie do výrazu pre hustotu voľnej energie. Takto zovšeobecnená teória by reálnejšie popísala supravodivý stav kuprátov, keďže ich vlastnosti sú veľmi anizotropné. Okrem toho by sme chceli preskúmať, či je možné použitím magnetického silového mikroskopu overiť našu predpoveď pre neanalytické správanie magnetického poľa v blízkosti jadra víru.

## English summary

In the present thesis we have studied the high-temperature superconductors in magnetic fields.

In the first part we have studied the microscopic stability of the superconducting state, in the limit of high magnetic fields and low temperatures. To this end, we have generalized the recently developed variational technique for the description of the Kohn-Luttinger superconductivity in repulsive models to the case with a finite momentum of the Cooper pairs  $2\mathbf{q}$ . This enabled us to

study a homogeneous supercurrent-carrying  $d$ -wave superconducting state of the two-dimensional  $t-t'$  Hubbard model. This way we simulated the effect of the magnetic field on the superconducting state. In our calculation we have taken into account the change of the pairing interaction in presence of a finite Cooper-pair momentum. In addition, our technique allows also for the change of the gap function with the finite momentum of the Cooper pairs.

We have studied the evolution of a homogeneous current-carrying superconducting state with increasing Cooper-pair momentum  $2\mathbf{q}$ . Since the calculations were performed numerically, only a discrete grid of  $\mathbf{q}$ -values was available. For the available  $\mathbf{q}$ -values, we have solved the self-consistent equations for superconductivity and we have calculated the basic thermodynamic properties of the superconducting state. The most surprising finding is that the order of the transition to the normal state seems to depend on the direction of  $\mathbf{q}$ .

In the future we plan to use our microscopic results in a study of the competition between the superconducting vortex state and other possible competing states. To this end, we will calculate the free energy in the vortex state and compare with the energies of suitably chosen competing states with particle-hole condensates.

In the second part of the thesis we have studied the magnetic properties of superconductors with reduced phase stiffness. Motivated by the phenomenology of underdoped cuprates we constructed a modified Ginzburg-Landau theory with two coherence lengths. We introduced a dimensionless parameter  $s$  of the two coherence lengths and we postulated that in the vicinity of the transition point between the superconducting state and the pseudogap, the parameter  $s$  is small but finite.

Minimization of the modified free-energy density yields three modified Ginzburg-Landau equations that we have solved numerically. We have calculated the radial dependence of the amplitude of the macroscopic wave function and of the magnetic field in the vicinity of the vortex core and subsequently we have determined the thermodynamic properties of the superconducting state and the magnetization curve. The most interesting feature is the sharp peak of the magnetic field in the vicinity of the vortex core. In addition we have proposed a unified description of the pseudogap and of the superconducting state. The pseudogap region is described by the finite magnitude of the macroscopic wave function and, at the same time, by a vanishing parameter  $s$ . The system becomes truly superconducting only when the parameter  $s$  is finite. We have applied our results to experimental data on underdoped cuprates and we have shown that the anomalous behaviour of the dimensionless magnetic field (4) can be naturally explained within the modified Ginzburg-Landau theory. We have also shown that our prediction of the magnetic field in the vortex state can be, in principle, tested by modern experimental techniques for precise measurements of the magnetic field.

In the future it is possible to further extend our theory, by introducing anisotropy into the expression for the free-energy density. Such a generalized theory would be more realistic in describing the properties of the superconducting state of the cuprates whose properties are highly anisotropic. Moreover it can be interesting to study whether other modern experimental techniques, such as the magnetic force microscopy, have the potential to confirm our prediction of the sharp peak of the magnetic field in the vortex cores.

## Zoznam prác tvoriacich dizertáciu

- [M1] F. Horváth, M. Sigrist, and R. Hlubina  
*Current-carrying state of a nodal correlated superconductor*  
Phys. Rev. B **85**, 184527 (2012)
- [F1] F. Horváth and R. Hlubina  
*Magnetic properties of type-II superconductors with reduced phase stiffness*  
Phys. Rev. B **81**, 134517 (2010)
- [F2] F. Horváth and R. Hlubina  
*Temperature dependence of the lower critical field in underdoped cuprates*  
Phys. Rev. B **83**, 174508 (2011)
- [F3] F. Horváth  
*Experimental tests of the modified Ginzburg-Landau theory for superconductors with reduced phase stiffness*  
Physica C **486**, 9 (2013)

## Zoznam použitej literatúry

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B: Condens. Matter **64**, 189 (1986).
- [2] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 3 (1994).
- [3] J. Hubbard, Proc. R. Soc. London, Ser. A **276**, 238 (1963).
- [4] M. Hybertsen, E. B. Stechel, M. Schlüter and D. R. Jennison, Phys. Rev. B **41**, 11068 (1990).
- [5] H. Takagi *et al.*, Phys. Rev. Lett. **69**, 2975 (1992).
- [6] Z. Z. Wang *et al.*, Phys. Rev. Lett. **36**, 7222 (1987).
- [7] A. Schenck, Physica C **153-155**, 1127 (1988).
- [8] C. E. Gough *et al.*, Nature (London) **326**, 855 (1987).
- [9] M. Takigawa, P. C. Hammel, R. H. Heffner and Z. Fisk, Phys. Rev. B **39**, 7371 (1989).
- [10] W. N. Hardy *et al.*, Phys. Rev. Lett. **70**, 3999 (1993).
- [11] K. A. Moler *et al.*, Phys. Rev. Lett. **73**, 2744 (1994).
- [12] H. Ding *et al.*, Nature (London) **382**, 51 (1996).
- [13] D. A. Wollman *et al.*, Phys. Rev. Lett. **71**, 2134 (1993).
- [14] W. W. Warren *et al.*, Phys. Rev. Lett. **62**, 1193 (1989).
- [15] J. W. Loram, K. A. Mirza, J. R. Cooper and J. L. Tallon, Physica C **282**, 1405 (1997).

- [16] M. R. Norman *et al.*, Nature (London) **392**, 157 (1998).
- [17] O. Fischer *et al.*, Rev. Mod. Phys. **79**, 353 (2007).
- [18] H. Alloul, arXiv:1302.3473.
- [19] M. Vojta, Adv. Phys. **58**, 699 (2009).
- [20] S. Chakravarty *et al.*, Phys. Rev. B **63**, 094503 (2001).
- [21] M. Varma, Phys. Rev. Lett. **83**, 3538 (1999).
- [22] B. Vignolle *et al.*, Nature (London) **455**, 952 (2008).
- [23] N. Doiron-Leyraud *et al.*, Nature (London) **447**, 565 (2007).
- [24] P. W. Anderson, Science **235**, 1196 (1987).
- [25] V. J. Emery and S. A. Kivelson, Nature (London) **374**, 434 (1995).
- [26] Y. J. Uemura *et al.*, Phys. Rev. Lett. **62**, 2317 (1989).
- [27] U. Chatterjee *et al.*, PNAS **108**, 9346 (2011).
- [28] Z. A. Xu *et al.*, Nature (London) **406**, 486 (2000).
- [29] W. Q. Chen *et al.*, Europhys. Lett. **82**, 17004 (2008).
- [30] A. Damascelli *et al.*, Rev. Mod. Phys. **75**, 473 (2003).
- [31] L. Goren and E. Altman, Phys. Rev. Lett. **104**, 257002 (2010).
- [32] J. Mráz and R. Hlubina, Phys. Rev. B **67**, 174518 (2003).
- [33] R. Hlubina, J. Phys.: Condens. Matter **19**, 125214 (2007).
- [34] A. Fetter and P. C. Hohenberg, in *Superconductivity*, edited by R. D. Parks (Marcel Dekker, New York, 1969), Vol. 2, p. 817.
- [35] E. H. Brandt, Phys. Rev. B **71**, 014521 (2005).