

Физика поверхности

Алексей Юрьевич Аладышкин

доктор физико-математических наук

ведущий научный сотрудник Института физики микроструктур РАН (Нижний Новгород)

*ведущий научный сотрудник Центра перспективных методов мезофизики и нанотехнологий
Московского физико-технического института (Долгопрудный)*

*профессор межфакультетской базовой кафедры «Физика наноструктур и нанoeлектроника»
Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского (Нижний Новгород)*

Электронная почта: aladyshkin.au@mipt.ru

* Поверхностные волны и поверхностные состояния

Основы кристаллографии. Релаксация и реконструкция

Поверхностные электронные состояния Тамма-Шокли

Скин-эффект. Поверхностные электромагнитные волны

Кристаллическая и многослойная рентгеновская оптика

Поверхностная, прикраевая и доменная сверхпроводимость

Димеризация и переход Пайерлса

* Экспериментальные методы исследования поверхности

Методы электронной дифракции. Дифракция медленных и быстрых электронов

Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия: STM, STS, SP-STM

Основы рентгеноструктурного анализа

Сканирующая силовая микроскопия: AFM, MFM, KPFM и др.

Сканирующая лазерная микроскопия

Сканирующая полевая микроскопия: SHPM, SQUID-микроскопия

Сканирующая ближнепольная оптическая и СВЧ микроскопия

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением

Лекция 1

Скин-эффект

Поверхностные электромагнитные волны

Микроскопические уравнения Максвелла в вакууме

Уравнения, описывающие электромагнитные поля в вакууме, обычно записываются в виде

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}_{micro}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{micro}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}_{micro}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}_{micro}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{H}_{micro}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{E}_{micro}(\mathbf{r}, t) = 4\pi \rho_{micro}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H}_{micro}(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где $\mathbf{E}_{micro}(\mathbf{r}, t)$ – микроскопическое электрическое поле и $\mathbf{H}_{micro}(\mathbf{r}, t)$ – микроскопическое магнитное поле;

$$\mathbf{j}_{micro}(\mathbf{r}, t) = \sum_n e_n \mathbf{v}_n \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t)] \quad \text{и} \quad \rho_{micro}(\mathbf{r}, t) = \sum_n e_n \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}_n(t)],$$

есть микроскопические источники тока и заряда, при этом суммирование производится по всем источникам заряда e_n .

Уравнения Максвелла в веществе

Для описания характеристик электромагнитного поля в веществе микроскопические поля $\mathbf{E}_{micro}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{H}_{micro}(\mathbf{r}, t)$ усредняют, во-первых, по состояниям электронов в атомах и статистическому распределению теплового движения атомов и, во-вторых, по физически бесконечно малому объёму, получая, таким образом, *макроскопические* характеристики

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \overline{\langle \mathbf{E}_{micro}(\mathbf{r}, t) \rangle} = \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) - 4\pi \mathbf{P}(\mathbf{r}, t),$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \overline{\langle \mathbf{H}_{micro}(\mathbf{r}, t) \rangle} = \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) + 4\pi \mathbf{M}(\mathbf{r}, t).$$

Здесь $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ – локальное электрическое поле, $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ – локальная поляризация и $\mathbf{D}(\mathbf{r}, t)$ – локальная электрическая индукция; $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ – локальная магнитная индукция, $\mathbf{M}(\mathbf{r}, t)$ – локальная намагничённость и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ – локальная напряжённость магнитного поля. После усреднения микроскопических уравнений Максвелла в вакууме получаем макроскопические уравнения Максвелла для описания электромагнитного поля в веществе

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 4\pi \rho(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0.$$

М. И. Рязанов, *Электродинамика конденсированного вещества*, М.: Наука. – 1984.

Уравнения Максвелла для гармонических полей

Далее мы будем рассматривать отклик системы на электромагнитное поле, изменяющееся во времени по гармоническому закону:

$$\mathbf{B} \sim e^{-i\omega t}, \quad \mathbf{H} \sim e^{-i\omega t}, \quad \mathbf{E} \sim e^{-i\omega t} \quad \text{и} \quad \mathbf{D} \sim e^{-i\omega t}.$$

В этом случае все производные по времени ($\partial/\partial t$) во всех уравнениях заменяются на множитель $-i\omega$, где $\omega = 2\pi f$ – угловая частота электромагнитной волны. В этом случае реакцию среды на электромагнитное поле можно описать путем введения частотно зависящей диэлектрической проницаемости $\varepsilon(\omega)$ и магнитной проницаемости $\mu(\omega)$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad \text{и} \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, \omega) = \mu(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega).$$

В этом случае уравнения Максвелла могут быть записаны в следующем виде

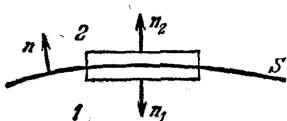
$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{i\omega}{c} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \mu(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\operatorname{div} (\varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)) = 4\pi \rho(\mathbf{r}, \omega),$$

$$\operatorname{div} (\mu(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)) = 0.$$

Граничные условия для уравнений Максвелла



1. Граничные условия для вектора D

$$\oint \mathbf{D} \cdot d\mathbf{S} = 4\pi Q \implies S \cdot (D_{n_2} + D_{n_1}) = 4\pi Q \implies D_{2,n} - D_{1,n} = 4\pi Q_{\text{пов}}$$

2. Граничные условия для вектора B

$$\oint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = 0 \implies S \cdot (B_{n_2} + B_{n_1}) = 0 \implies B_{2,n} - B_{1,n} = 0$$

3. Граничные условия для вектора E

$$\oint \mathbf{E} \cdot d\mathbf{l} = 0 \implies L \cdot (E_{\tau_2} + E_{\tau_1}) = 0 \implies E_{2,\tau} - E_{1,\tau} = 0$$

4. Граничные условия для вектора H

$$\oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = \frac{4\pi}{c} I \implies L \cdot (H_{\tau_2} + H_{\tau_1}) = \frac{4\pi}{c} I \implies H_{2,\tau} - H_{1,\tau} = \frac{4\pi}{c} I_{\text{пов}}$$

Таким образом, при анализе электромагнитных полей в неоднородных средах уравнения Максвелла должны быть дополнены известными граничными условиями

$$\mathbf{E}_{1,\parallel} - \mathbf{E}_{2,\parallel} = 0,$$

$$D_{1,\perp} - D_{2,\perp} = 4\pi Q_{\text{пов}},$$

$$\mathbf{H}_{1,\parallel} - \mathbf{H}_{2,\parallel} = \frac{4\pi}{c} I_{\text{пов}},$$

$$B_{1,\perp} - B_{2,\perp} = 0,$$

где $i_{\text{пов}}$ – плотность поверхностного тока, $Q_{\text{пов}}$ – плотность поверхностного заряда.

При отсутствии поверхностных токов и зарядов получаем

$$\mathbf{E}_{1,\parallel} - \mathbf{E}_{2,\parallel} = 0 \quad \text{и} \quad \varepsilon_1 \mathbf{E}_{1,\perp} - \varepsilon_2 \mathbf{E}_{2,\perp} = 0,$$

$$\mathbf{H}_{1,\parallel} - \mathbf{H}_{2,\parallel} = 0 \quad \text{и} \quad \mu_1 \mathbf{H}_{1,\perp} - \mu_2 \mathbf{H}_{2,\perp} = 0.$$

Волновое уравнение для комплексных амплитуд

Покажем, что поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$ в однородной среде в области вне источников ($\mathbf{j} = 0$ и $\rho = 0$) подчиняются универсальному волновому уравнению.

Применим операцию *rot* к первому уравнению Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{i\omega}{c} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

и получим

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -\operatorname{rot} \left(\frac{i\omega}{c} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \right) = -\frac{i\omega}{c} \varepsilon(\omega) \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega).$$

С учётом второго уравнения Максвелла $\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = (i\omega/c) \mu(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega)$ получаем

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon(\omega) \mu(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega).$$

Поскольку $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{H} = \nabla \operatorname{div} \mathbf{H} - \Delta \mathbf{H} = -\Delta \mathbf{H}$ в области вне источников, получаем

$$\Delta \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) + k^2(\omega) \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0,$$

где

$$k(\omega) = \frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon(\omega) \mu(\omega)}$$

есть волновой вектор электромагнитной волны.

Волновое уравнение для поля $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ выводится аналогично

$$\Delta \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) + k^2(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = 0.$$

Связь проводимости и диэлектрической проницаемости

Предположим, что локальная плотность наведённого тока \mathbf{j} линейно зависит от локального электрического поля \mathbf{E} , что соответствует закону Ома

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$$

в дифференциальной форме, $\sigma(\omega)$ – удельная проводимость на переменном токе.

С одной стороны, возникающий ток можно трактовать как изменение поляризации среды за счёт изменения вектора электрической индукции, что позволяет записать первое уравнение Максвелла в виде

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = 0 - \frac{i\omega}{c} \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega).$$

С другой стороны, тот же электрический ток можно трактовать как микроскопический ток в вакууме ($\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$), что позволяет записать первое уравнение Максвелла в альтернативном виде

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) &= \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{i\omega}{c} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{i\omega}{c} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \\ &= -\frac{i\omega}{c} \left(1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega} \right) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega). \end{aligned}$$

Сравнивая правые части полученных соотношений, заключаем, что

$$\varepsilon(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}.$$

Проводимость газа свободных электронов

Запишем уравнение Ньютона для почти свободного электрона

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = e\mathbf{E} - \frac{\mathbf{p}}{\tau},$$

где $\mathbf{p} = m^* \mathbf{v}$ – импульс электрона, $e\mathbf{E}$ и $-\mathbf{p}/\tau$ есть сила со стороны электрического поля и сила вязкого трения. Здесь m^* и $e = -|e|$ есть эффективная масса и заряд свободного электрона, τ – характерное время релаксации импульса (время свободного пробега). Предположим, что изменение всех величин во времени происходит по закону $e^{-i\omega t}$, тогда

$$\mathbf{v} = \frac{e\tau}{m^*} \frac{1}{(1 - i\omega\tau)} \mathbf{E} \quad \text{и} \quad \mathbf{j} = en\mathbf{v} = \frac{ne^2\tau}{m^*} \frac{1}{(1 - i\omega\tau)} \mathbf{E},$$

здесь n есть средняя плотность числа электронов проводимости в кристалле.

Определим локальную комплексную проводимость электронного газа

$$\sigma(\omega) \equiv \frac{\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega)}{\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)} = \sigma_0 \frac{1}{1 + (\omega\tau)^2} + i\sigma_0 \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}$$

есть проводимость электронного газа на переменном токе, $\sigma_0 = ne^2\tau/m^*$ – проводимость электронного газа с конечным временем свободного пробега на низких частотах ($\omega\tau \ll 1$) в теории Друде. Для свободного электронного газа (без учёта столкновений, $\omega\tau \gg 1$) получаем, что проводимость имеет чисто мнимый (индуктивный) характер

$$\sigma(\omega) = i \frac{ne^2}{m^*\omega}.$$

Диэлектрическая проницаемость газа свободных электронов

Подставим выражение для комплексной проводимости электронного газа в формулу для диэлектрической проницаемости

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m^*} \frac{1}{(1 - i\omega\tau)} \rightarrow \varepsilon(\omega) = 1 + i \frac{4\pi\sigma(\omega)}{\omega}$$

и получим высокочастотную диэлектрическую проницаемость газа свободных электронов

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{i}{\omega} \frac{4\pi ne^2\tau}{m^*} \frac{1}{(1 - i\omega\tau)} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)},$$

где

$$\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi ne^2}{m^*}}$$

есть плазменная частота (частота собственных продольных колебаний пространственного заряда в однородной плазме в отсутствие магнитного поля).

Оценим плазменную частоту по порядку величины для типичной концентрации электронов в твёрдом теле ($n \simeq 10^{22} \text{ см}^{-3}$, $e = 4.8 \cdot 10^{-10} \text{ ед. СГС}$, $1 \text{ ед. СГС} = \text{г}^{1/2} \text{ см}^{3/2} \text{ с}^{-1}$)

$$f_p = \frac{\omega_p}{2\pi} = \sqrt{\frac{1}{\pi} \frac{ne^2}{m}} \simeq \sqrt{\frac{10^{22} \text{ см}^{-3} \times 23 \cdot 10^{-20} \text{ г см}^3 \text{ с}^{-2}}{3.14 \times 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}}} \simeq 0.9 \cdot 10^{15} \text{ Гц.}$$

Плазменная частота для типичных металлов лежит в оптическом диапазоне частот.

Нормальный скин-эффект

Рассмотрим «грязный» изотропный металл, находящийся в высокочастотном электромагнитном поле и предположим, что применимо обычное выражение для тока проводимости:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad \text{при} \quad \delta \gg \ell.$$

Запишем уравнения Максвелла для полей внутри немагнитного металла в виде

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{4\pi}{c} \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \quad \text{и} \quad \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega).$$

В первом уравнении мы пренебрегли токами смещения, что представляется разумным для металлов с хорошей проводимостью при не слишком больших частотах; во втором уравнении мы положили $\mu = 1$.

Предположим, что металл занимает полупространство $x > 0$ и волна падает нормально на его поверхность, причём вектор \mathbf{E} направлен по оси y , а \mathbf{H} – по оси z . Запишем систему скалярных уравнений для компонент E_y и H_z

$$-\frac{\partial H_z}{\partial x} = \frac{4\pi}{c} \sigma(\omega) E_y \quad \text{и} \quad \frac{\partial E_y}{\partial x} = \frac{i\omega}{c} H_z.$$

Будем искать решение для волн внутри металла в виде

$$H_z(x) = H_{\parallel,0} e^{ikx} \quad \text{и} \quad E_y(x) = E_{\parallel,0} e^{ikx},$$

где $H_{\parallel,0}$ и $E_{\parallel,0}$ есть амплитуды магнитного и электрического поля на поверхности металла.

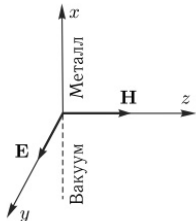


Рис. 7.1

Комбинируя уравнения

$$-ik H_{\parallel,0} = \frac{4\pi}{c} \sigma(\omega) E_{\parallel,0} \quad \text{и} \quad ik E_{\parallel,0} = \frac{i\omega}{c} H_{\parallel,0},$$

находим условие существования решения в виде плоской бегущей волны

$$k^2 = 4\pi i \frac{\omega \sigma(\omega)}{c^2}.$$

Подставим в это соотношение формулу для высокочастотной проводимости металла

$$\begin{aligned} k &= \sqrt{\frac{4\pi i \omega \sigma(\omega)}{c^2}} = \sqrt{\frac{4\pi \omega \sigma_0}{c^2}} \sqrt{\frac{i}{1 + (\omega\tau)^2} - \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}} \simeq \\ &\simeq \sqrt{\frac{4\pi \omega \sigma_0}{c^2}} \cdot \left\{ \begin{array}{ll} 1/\sqrt{2} + i/\sqrt{2}, & \omega\tau \ll 1, \\ i/\sqrt{\omega\tau}, & \omega\tau \gg 1. \end{array} \right\} = k_1 + ik_2. \end{aligned}$$

Подставляя полученное значение волнового вектора в предполагаемое решение $e^{ikx - i\omega t}$, мы видим, что амплитуда электромагнитного поля по мере проникновения вглубь металла убывает по закону $e^{-k_2 x}$ – иными словами, переменное поле проникает лишь в поверхностный слой металла на глубину порядка $1/k_2$. Это явление называется скин-эффектом (**англ. skin effect**). Определим глубину проникновения электромагнитного поля как проникновения как

$$\delta \equiv \frac{1}{\text{Im } k} = \begin{cases} \sqrt{c^2/2\pi\omega\sigma_0} = (c/\omega_p) \sqrt{2/\omega\tau}, & \omega\tau \ll 1 \\ \sqrt{c^2\tau/4\pi\sigma_0} = (c/\omega_p), & \omega\tau \gg 1 \end{cases}$$

Сверхпроводимость: двухжидкостная модель

Уравнения Ньютона для нормальных и «сверхпроводящих» электронов

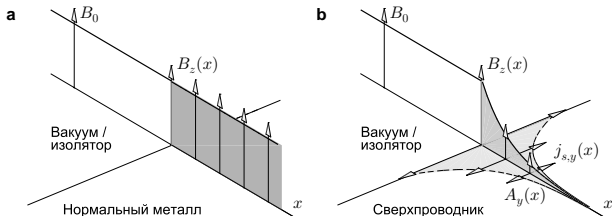
$$m^* \frac{d\mathbf{v}_n}{dt} = e\mathbf{E} - \frac{m^* \mathbf{v}}{\tau_n} \quad \text{и} \quad 2m^* \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = 2e\mathbf{E} \quad (\tau_s = \infty).$$

Проводимость системы нормальных и «сверхпроводящих» электронов

$$\sigma = \frac{e^2 n_n}{m^*} \frac{\tau_n}{(1 + i\omega\tau_n)} + \frac{e^2 n_s}{m^*} \frac{1}{i\omega}.$$

Проводимость системы с бесконечно большим временем свободного пробега имеет расходимость (полюс) на нулевой частоте!

Глубина скин-слоя в пределе ($\omega\tau_s \gg 1$) определяет лондоновскую глубину проникновения магнитного поля в массивный сверхпроводник:

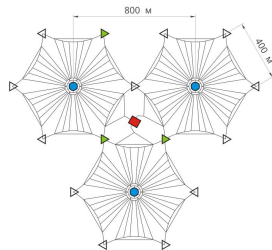


$$\delta = \frac{c}{\omega_p} \Big|_s = \sqrt{\frac{m^* c^2}{4\pi e^2 n_s}} \equiv \lambda_L.$$

Скин-эффект и проблема связи с подводными лодками

[https://ru.wikipedia.org/wiki/Голиаф_\(радиостанция\)](https://ru.wikipedia.org/wiki/Голиаф_(радиостанция))

«Голиаф» (г. Кальбе, Третий рейх, 1943 → г. Горький, 1952)



«Голиаф» стал первой радиостанцией диапазона сверхдлинных волн мощностью 1000 кВт. Радиостанция использовалась в интересах Кригсмарине для радиосвязи с подводными лодками из так называемых «волчьих стай».

Диапазон частот: от 15 до 60 кГц

Диапазон длин волн: от 20 до 5 км

Полоса пропускания: от 30 до 1200 Гц (фактически азбука Морзе в АМ-режиме)

Максимальное расстояние для связи: 9800 км на глубине погружения 8-12 м

Скин-эффект и поверхностный импеданс

Для описания отражения электромагнитных волн и расчета потерь часто вводят поверхностный импеданс

$$Z_s \equiv \frac{4\pi}{c} \frac{E_{\parallel}(0)}{H_{\parallel}(0)} = R_s - iX_s,$$

где R_s – поверхностное сопротивление, X_s – поверхностный реактанс.

Используем уравнение Максвелла

$$\text{rot } \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H} \implies \frac{\partial E_y}{\partial x} = \frac{i\omega}{c} H_z(x).$$

Это позволяет переписать соотношение для поверхностного импеданса в следующем виде

$$Z_s \equiv \frac{4\pi i\omega}{c^2} \frac{E_{\parallel}(0)}{E'_{\parallel}(0)} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\omega}{k}.$$

В области нижних частот $k \simeq \sqrt{2\pi\omega\sigma_0/c^2} (1 + i)$, поэтому

$$Z_s \simeq \frac{4\pi}{c} \frac{\omega}{\sqrt{2\pi\omega\sigma_0} (1 + i)} \simeq \sqrt{\frac{2\pi\omega}{c^2\sigma_0}} (1 - i).$$

Следовательно, $R_s = X_s$ и пропорциональны квадратному корню из частоты.

Граничное условие Леонтовича $\mathbf{E}_{\parallel} = Z_s[\mathbf{H} \times \mathbf{n}]$

Аномальный скин-эффект

А. А. Абрикосов, *Основы теории металлов*. – М.: Наука. – 1987.

Для чистых металлов при низких температурах выполняется соотношение $\ell \gg \delta$ и тогда связь между плотностью тока и электрическим полем может быть нелокальной

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = \int K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}', \omega) d^3 r',$$

что вынуждает рассматривать сложные интегро-дифференциальные уравнения.

Концепция неэффективности: электроны, двигающиеся почти вдоль поверхности образца, способны взаимодействовать с электромагнитным полем и обеспечивать экранировку.

$$n_{\text{эфф}} \sim n \cdot \frac{\delta}{\ell} \implies \sigma_{\text{эфф}} \sim i \frac{\sigma_0}{k\ell}.$$

Подставим полученную оценку в дисперсионное соотношение для электромагнитных волн в режиме нормального скин-эффект

$$k^2 = \frac{4\pi i \omega \sigma}{c^2} \implies k^2 = \frac{4\pi i \omega \sigma_{\text{эфф}}}{c^2} = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \cdot i \frac{\sigma_0}{k\ell}$$

Отсюда следует, что

$$k = \left(\frac{c^2 \ell}{4\pi \omega \sigma} \right)^{1/3} \implies \delta_{\text{ан}} = \frac{1}{\text{Im } k} \sim (\ell \delta^2)^{1/3}.$$

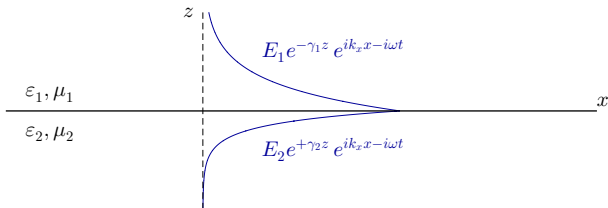
Вывод: за счёт уменьшения эффективной концентрации электронов электромагнитное поле проникает вглубь чистого металла на большие расстояния!

Условие существования поверхностной электромагнитной волны (поверхностного плазмона-поляритона)

М. И. Рязанов, *Электродинамика конденсированного вещества*. – М.: Наука. – 1984. – §26.

Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*. – М.: Физматлит. – 2005 – §88.

Рассмотрим поверхность раздела двух сред ($z = 0$). Пусть диэлектрические и магнитные проницаемости сред 1 ($z > 0$) и среды 2 ($z < 0$) равны $\varepsilon_1(\omega)$, $\mu_1(\omega)$ и $\varepsilon_2(\omega)$, $\mu_2(\omega)$, соответственно.



Будем предполагать, что решения для полей в средах 1 и 2 имеют следующий вид

$$\mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_1 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \gamma_1 z - i\omega t} \quad \text{и} \quad \mathbf{H}_1(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}_1 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \gamma_1 z - i\omega t} \quad \text{для} \quad z > 0, \quad (1a)$$

$$\mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_2 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \gamma_2 z - i\omega t} \quad \text{и} \quad \mathbf{H}_2(\mathbf{r}, t) = \mathbf{H}_2 e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \gamma_2 z - i\omega t} \quad \text{для} \quad z < 0, \quad (1b)$$

где $\mathbf{q} = \{q_x, q_y\}$ – волновой вектор волны в плоскости границы раздела, γ_1 и γ_2 – декременты затухания волны в первой и второй средах, соответственно. Будем считать, что для рассматриваемого диапазона частот $\varepsilon_{1,2}(\omega) \neq 0$ и $\mu_{1,2}(\omega) \neq 0$.

Для полей в первой пространственно-однородной среде справедливы уравнения

$$\varepsilon_1(\omega) \operatorname{div} \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{и} \quad \mu_1(\omega) \operatorname{div} \mathbf{H}_1(\mathbf{r}, t) = 0,$$

которые для предполагаемых зависимостей полей от координат и времени эквивалентны соотношениям

$$\operatorname{div} \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, t) = i q_x E_{1,x} + i q_y E_{1,y} - \gamma_1 E_{1,z} = 0, \quad (2a)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H}_1(\mathbf{r}, t) = i q_x H_{1,x} + i q_y H_{1,y} - \gamma_1 H_{1,z} = 0. \quad (2b)$$

Для полей во второй среде имеем $\varepsilon_2(\omega) \operatorname{div} \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = 0$ и $\mu_2(\omega) \operatorname{div} \mathbf{H}_2(\mathbf{r}, t) = 0$. Эти соотношения для предполагаемых зависимостей полей от координат и времени эквивалентны

$$\operatorname{div} \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, t) = i q_x E_{2,x} + i q_y E_{2,y} + \gamma_2 E_{2,z} = 0, \quad (3a)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H}_2(\mathbf{r}, t) = i q_x H_{2,x} + i q_y H_{2,y} + \gamma_2 H_{2,z} = 0. \quad (3b)$$

Вычтем уравнение (3a) из уравнения (2a)

$$\begin{aligned} (i q_x E_{1,x} + i q_y E_{1,y} - \gamma_1 E_{1,z}) - (i q_x E_{2,x} + i q_y E_{2,y} + \gamma_2 E_{2,z}) = \\ = i \mathbf{q} \cdot (\mathbf{E}_{1,\parallel} - \mathbf{E}_{2,\parallel}) - (\gamma_1 E_{1,z} + \gamma_2 E_{2,z}) = 0. \end{aligned}$$

Это соотношение с учётом граничных условий для плоскости $z = 0$ и при условии отсутствия поверхностного заряда может быть записано в виде

$$(\gamma_1 E_{1,z} + \gamma_2 E_{2,z}) = 0 \quad \text{или} \quad \left(\gamma_1 \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega)} + \gamma_2 \right) E_{2,z} = 0.$$

Вычтем уравнение (3b) из уравнения (2b) и получим

$$\begin{aligned} (i q_x H_{1,x} + i q_y H_{1,y} - \gamma_1 H_{1,z}) - (i q_x H_{2,x} + i q_y H_{2,y} + \gamma_2 H_{2,z}) = \\ = i \mathbf{q} \cdot (\mathbf{H}_{1,\parallel} - \mathbf{H}_{2,\parallel}) - (\gamma_1 H_{1,z} + \gamma_2 H_{2,z}) = 0. \end{aligned}$$

Это соотношение с учётом граничных условий для плоскости $z = 0$ и при условии отсутствия поверхностного тока может быть записано в виде

$$(\gamma_1 H_{1,z} + \gamma_2 H_{2,z}) = 0 \quad \text{или} \quad \left(\gamma_1 \frac{\mu_2(\omega)}{\mu_1(\omega)} + \gamma_2 \right) H_{2,z} = 0.$$

Таким образом, поверхностная электромагнитная волна на границе раздела двух сред существует при условии

$$\left(\gamma_1 \frac{\mu_2(\omega)}{\mu_1(\omega)} + \gamma_2 \right) H_{2,z} = 0 \quad \text{и} \quad \left(\gamma_1 \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega)} + \gamma_2 \right) E_{2,z} = 0.$$

Анализ условий существования поверхностной электромагнитной волны

Запишем условия существования поверхностной волны

$$\left(\gamma_1 \frac{\mu_2(\omega)}{\mu_1(\omega)} + \gamma_2 \right) H_{2,z} = 0 \quad \text{и} \quad \left(\gamma_1 \frac{\varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega)} + \gamma_2 \right) E_{2,z} = 0.$$

1. Для поверхностной волны невозможна конфигурация $E_{1,z} \neq 0$, $E_{2,z} \neq 0$ и $H_{1,z} \neq 0$, $H_{2,z} \neq 0$. В самом деле, из полученных уравнений следует

$$\gamma_1 \frac{\mu_2}{\mu_1} + \gamma_2 = 0 \quad \text{и} \quad \gamma_1 \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} + \gamma_2 = 0,$$

Система уравнений имеет решение при $\mu_2/\mu_1 = \varepsilon_2/\varepsilon_1$. Однако γ_1 и γ_2 предполагаются положительными, поэтому необходимо одновременное выполнение $\varepsilon_2/\varepsilon_1 < 0$ и $\mu_2/\mu_1 < 0$. Для частот оптического диапазона $\mu_1 = \mu_2 \simeq 1$, поэтому такого решения не существует.

2. Поскольку в оптической области частот $\mu_1 \simeq 1$ и $\mu_2 \simeq 1$ и декременты затухания γ_1 и γ_2 строго положительны, выражение $\gamma_1 \mu_2/\mu_1 + \gamma_2$ не может быть равным нулю. Следовательно, для поверхностной волны $H_{1,z} = 0$ и $H_{2,z} = 0$ (так называемая *TM*-волна).

3. Для поверхностной электромагнитной волны нормальная компонента электрического поля может быть и отличной от нуля. Если $E_{2,z} \neq 0$, то

$$\gamma_1 \varepsilon_2(\omega) = -\gamma_2 \varepsilon_1(\omega),$$

для выполнения которого необходимо $\varepsilon_1(\omega)\varepsilon_2(\omega) < 0$. Это значит, что если одной средой является диэлектрик, то второй средой должен быть металл при $\omega < \omega_p$.

4. Поля в первой и второй средах должны удовлетворять волновым уравнениям

$$\left\{ \Delta + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1(\omega) \right\} \mathbf{E}_1(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad \text{и} \quad \left\{ \Delta + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2(\omega) \right\} \mathbf{E}_2(\mathbf{r}, \omega) = 0.$$

Подстановка предполагаемых решений в виде (1a) и (1b) даёт два условия

$$-q^2 + \gamma_1^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1(\omega) = 0 \quad \text{и} \quad -q^2 + \gamma_2^2 + \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2(\omega) = 0.$$

5. Возведем в квадрат равенство $\gamma_1 \varepsilon_2(\omega) = -\gamma_2 \varepsilon_1(\omega)$ и получим

$$\gamma_1^2 \varepsilon_2^2(\omega) = \gamma_2^2 \varepsilon_1^2(\omega).$$

Подставим $\gamma_1^2 = q^2 - \omega^2 \varepsilon_1(\omega)/c^2$ и $\gamma_2^2 = q^2 - \omega^2 \varepsilon_2(\omega)/c^2$ из уравнений п. 3 и получим дисперсионное соотношение для поверхностной H -волны

$$\left(q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_1(\omega) \right) \varepsilon_2^2(\omega) = \left(q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon_2(\omega) \right) \varepsilon_1^2(\omega),$$

откуда следует связь продольного волнового вектора и частоты (дисперсионное соотношение)

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \cdot \frac{\varepsilon_1(\omega) \varepsilon_2(\omega)}{\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega)}.$$

Очевидно, что для существования локализованного решения необходимо, чтобы кроме условия $\varepsilon_1(\omega) \varepsilon_2(\omega) < 0$, выполнялось более жёсткое ограничение $\varepsilon_1(\omega) + \varepsilon_2(\omega) < 0$.

Структура поверхностной электромагнитной волны

Выберем ось x параллельно волновому вектору волны (т. е. $q_x = q$ и $q_y = 0$). Напомним, что для поверхностной TM -волны $H_{1,z} = 0$ и $H_{2,z} = 0$. Из уравнения (3b) следует $H_{2,x} = 0$, следовательно, и $H_{1,x} = 0$. Нам остается единственная возможность считать, что магнитное поле поверхностной H -волны направлено по оси y . Из первого уравнения Максвелла вытекает общее соотношение между компонентами поля

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \left(-\frac{\partial H_y}{\partial z} \right) \mathbf{e}_x + \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} \right) \mathbf{e}_z = -i \frac{\omega \varepsilon(\omega)}{c} (E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y + E_z \mathbf{e}_z).$$

Принимая во внимание предполагаемый вид решения $H_{1,y} = H_0 e^{iqx - \gamma_1 z}$, получаем

$$\gamma_1 H_0 \mathbf{e}_x + iq H_0 \mathbf{e}_z = -i \frac{\omega \varepsilon_1(\omega)}{c} (E_{1,x} \mathbf{e}_x + E_{1,y} \mathbf{e}_y + E_{1,z} \mathbf{e}_z),$$

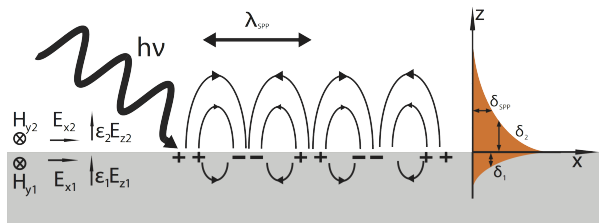
где H_0 – магнитное поле на границе раздела. Легко видеть, что электрическое и магнитное поля в первой среде при $z = 0$ могут быть записаны как

$$\mathbf{E}_1 = \left(+i \frac{c}{\omega} \frac{\gamma_1}{\varepsilon_1(\omega)} H_0 \right) \mathbf{e}_x + 0 \cdot \mathbf{e}_y + \left(-\frac{c}{\omega} \frac{q}{\varepsilon_1(\omega)} H_0 \right) \mathbf{e}_z \quad \text{и} \quad \mathbf{H}_1 = H_0 \mathbf{e}_y.$$

Аналогично можно получить выражения для электрического и магнитного полей во второй среде при $z = 0$

$$\mathbf{E}_2 = \left(-i \frac{c}{\omega} \frac{\gamma_2}{\varepsilon_2(\omega)} H_0 \right) \mathbf{e}_x + 0 \cdot \mathbf{e}_y + \left(\frac{c}{\omega} \frac{q}{\varepsilon_2(\omega)} H_0 \right) \mathbf{e}_z \quad \text{и} \quad \mathbf{H}_2 = H_0 \mathbf{e}_y.$$

В соответствие с граничными условиями мы получили, что тангенциальные компоненты электрического и магнитного поля меняются непрерывно. Заметим, что нормальная компонента электрического поля имеет разрыв, однако комбинация $\epsilon(\omega) E_z(\mathbf{r}, \omega)$ изменяется непрерывно.



https://en.wikipedia.org/wiki/Surface_plasmon

Определим декременты затухания поверхностной электромагнитной волны

$$\gamma_1 = \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1(\omega)} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \cdot \frac{\epsilon_1(\omega) \epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)} - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_1(\omega)} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1^2(\omega)}{|\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)|}}$$

и

$$\gamma_2 = \sqrt{q^2 - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_2(\omega)} = \sqrt{\frac{\omega^2}{c^2} \cdot \frac{\epsilon_1(\omega) \epsilon_2(\omega)}{\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)} - \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_2(\omega)} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_2^2(\omega)}{|\epsilon_1(\omega) + \epsilon_2(\omega)|}}$$

Поверхностная электромагнитная волны на интерфейсе «металл–воздух»

Рассмотрим поверхностную волну на интерфейсе «металл–воздух» в приближении свободного электронного газа. Итак, подставляя $\varepsilon_1(\omega) = 1$ и $\varepsilon_2(\omega) = 1 - \omega_p^2/\omega^2$ в соотношение для продольного волнового вектора, получаем

$$q^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \cdot \frac{(\omega^2 - \omega_p^2)}{(2\omega^2 - \omega_p^2)},$$

Перегруппируем слагаемые и приведем зависимость частоты от волнового вектора к виду биквадратного уравнения

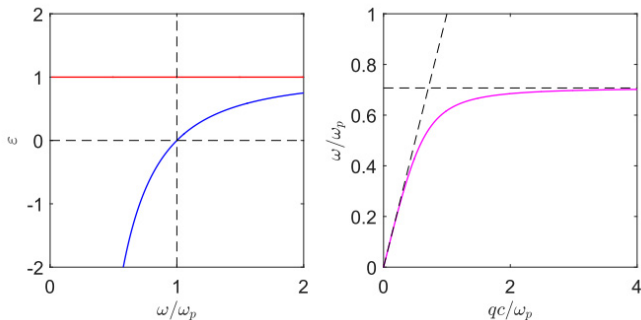
$$\left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^4 - \left(\frac{\omega}{\omega_p}\right)^2 \left\{1 + 2\left(\frac{qc}{\omega_p}\right)^2\right\} + \left(\frac{qc}{\omega_p}\right)^2 = 0,$$

решение которого имеет вид

$$\omega = \omega_p \cdot \sqrt{\frac{1}{2} + \left(\frac{qc}{\omega_p}\right)^2} - \sqrt{\frac{1}{4} + \left(\frac{qc}{\omega_p}\right)^4} \simeq \begin{cases} qc, & qc \ll \omega_p, \\ \omega_p/\sqrt{2}, & qc \gg \omega_p. \end{cases}$$

Заметим, что решение со знаком «+» перед внутренним корнем отброшено из-за того, что для него не выполняется условие $\varepsilon_2(\omega) < 0$. Для больших частот поверхностное решение имеет частоту в $\sqrt{2}$ раз меньшую частоты объёмной плазменной волны. Это позволяет отличить поверхностные волны от объёмных продольных волн.

Используя соотношение $\mathbf{v}_g = d\omega/d\mathbf{q}$, легко показать, что групповая скорость поверхностной плазмонной волны при малых q близка к скорости света ($v_g = c$ при $qc \ll \omega_p$) и при увеличении волнового числа стремится к нулю («медленная» волна).



Вычислим декременты затухания поверхностной волны на границе раздела «металл – воздух» в пределе $\omega \ll \omega_p$, когда $\epsilon_1(\omega) \ll |\epsilon_2(\omega)|$

$$\gamma_1 \simeq \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{1}{|\epsilon_2(\omega)|}} \simeq \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\omega^2}{\omega_p^2}} \simeq \frac{\omega^2}{c\omega_p} \quad \text{и} \quad \gamma_2 \simeq \frac{\omega}{c} \sqrt{|\epsilon_2(\omega)|} \simeq \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\omega_p^2}{\omega^2}} \simeq \frac{\omega_p}{c}.$$

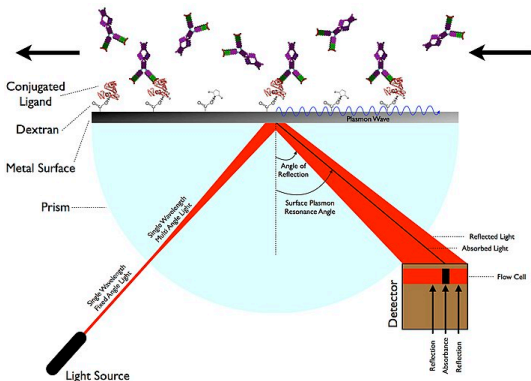
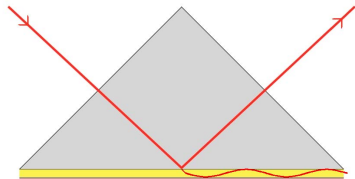
Величина γ_2 для металла ожидаемо соответствует глубине скин-слоя на высоких частотах.

Возбуждение поверхностных плазмонов. Сенсоры

Для эффективного возбуждения медленных поверхностных плазмонов внешним излучением (например, лазером) необходимо обеспечить условие синхронизма (равенства частот и импульсов). Для этого часто используют диэлектрические призмы, чтобы замедлить скорость света.

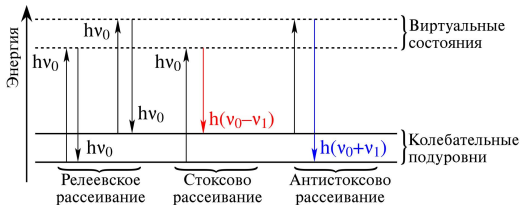
Особая чувствительность поверхностных плазмонов к качеству поверхности и присутствию «загрязнений» позволят разрабатывать схемы детектирования адсорбатов, биологических молекул и проч.

Конфигурация Kretschmann–Raether



Surface-enhanced Raman scattering (SERS)

Комбинационное рассеяние света (эффект Рамана) – неупругое рассеяние излучения на молекулах вещества, сопровождающееся заметным изменением частоты излучения.



Было экспериментально обнаружено, что интенсивность комбинационного рассеяния сильно возрастает (до 10^{10} раз) для адсорбатов на металлических поверхностях (серебро, платина и др.) из-за усиления электрического поля и возбуждения поверхностных плазмонов вблизи поверхности. SERS-техника позволяет детектировать отдельные молекулы.

Fleischmann, Hendra and McQuillan, *Raman Spectra of Pyridine Adsorbed at a Silver Electrode*. Chem. Phys. Lett., vol. 26, p. 163 (1974).

Лекция 2

Особенности отражения электромагнитных волн рентгеновского диапазона

Кристаллическая и многослойная рентгеновская оптика

Коэффициент отражения от плоской поверхности

Коэффициент отражения электромагнитной волны по мощности от плоской границы раздела для случая нормального падения определяется формулой Френеля

$$\mathcal{R} = \left| \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right|^2 = \left| \frac{\sqrt{\varepsilon_1} - \sqrt{\varepsilon_2}}{\sqrt{\varepsilon_1} + \sqrt{\varepsilon_2}} \right|^2,$$

где ε_1 и ε_2 – диэлектрические проницаемости двух сред. Диэлектрическая проницаемость вещества на высоких частотах без учёта столкновений описывается соотношением (см. лекцию 1)

$$\varepsilon = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad \text{при} \quad \omega \gg \omega_p \quad \text{и} \quad \tau \rightarrow 0,$$

где $\omega_p \equiv \sqrt{4\pi n_{эл} e^2 / m_0}$ – плазменная частота ($\omega_p \sim 10^{15} \div 10^{16} \text{ с}^{-1}$), $n_{эл}$ – средняя концентрация электронов в твёрдом теле.

Коэффициент отражения от границы раздела между веществом и вакуумом ($\varepsilon = 1$) равен

$$\mathcal{R} = \left| \frac{1 - \sqrt{1 - \omega_p^2/\omega^2}}{1 + \sqrt{1 - \omega_p^2/\omega^2}} \right|^2 \simeq \frac{1}{16} \frac{\omega_p^4}{\omega^4} \quad \text{при} \quad \omega \gg \omega_p.$$

Промежуточный вывод: коэффициент отражения должен резко уменьшаться по мере увеличения частоты.

Электромагнитные поля в веществе на высоких частотах

На высоких частотах ($\omega \gg \omega_p$) магнитную восприимчивость μ можно считать равной единице, что позволяет отождествлять \mathbf{B} и \mathbf{H} . Будем считать, что рассеяние электромагнитных волн происходит без изменения частоты.

Введём комплексные амплитуды $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}$ и $\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) e^{-i\omega t}$, которые характеризуют отклик на конкретной частоте. Комплексные амплитуды удовлетворяют уравнениям Максвелла

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) \quad \text{и} \quad \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = -\frac{i\omega}{c} \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega),$$

где диэлектрическая проницаемость считается модулированной на атомных масштабах

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \omega) = 1 - \frac{4\pi n_{эл}(\mathbf{r}) e^2}{m_0 \omega^2}.$$

Из этих уравнений можно получить уравнение, связывающее комплексные амплитуды для векторов $\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$ и $\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\mathbf{r}, \omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega)$

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = k_0^2 \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega). \quad (*)$$

где $k_0 = \omega/c$ – модуль волнового вектора электромагнитной волны в вакууме. Примем во внимание, что

$$\operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = 0 \quad \text{и} \quad \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \varepsilon(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) - \frac{4\pi e^2 n_{эл}(\mathbf{r})}{m_0 \omega^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega).$$

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \left(\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) + \frac{4\pi e^2 n_{эл}(\mathbf{r})}{m_0 \omega^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \right) = \\ &= -\Delta \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) + \operatorname{rot} \operatorname{rot} \left(\frac{4\pi e^2 n_{эл}(\mathbf{r})}{m_0 \omega^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \right). \quad (**) \end{aligned}$$

Запишем соотношения (*) и (**) в следующем виде

$$\Delta \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) + k_0^2 \mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \operatorname{rot} \operatorname{rot} \left(\frac{4\pi e^2 n_{эл}(\mathbf{r})}{m_0 \omega^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) \right).$$

Поскольку в правой части уравнения имеется малый безразмерный параметр

$$\chi = -\frac{e^2 n_{эл}(\mathbf{r})}{m_0 \omega^2} \quad \text{и} \quad |\chi| \ll 1,$$

решение этого уравнения можно искать в виде разложения по малому параметру χ

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) + \mathbf{D}^{(2)}(\mathbf{r}, \omega) + \dots$$

Первое слагаемое нулевого порядка является решением уравнения

$$\Delta \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{r}, \omega) + k_0^2 \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{r}, \omega) = 0.$$

Решение этого уравнения есть электрическое поле падающей волны

$$\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, \omega) = \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}_0 \mathbf{r}} \quad \text{и} \quad \mathbf{D}^{(0)}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{\mathbf{E}^{(0)}(\mathbf{r}, \omega)}{\varepsilon(\mathbf{r}, \omega)},$$

где \mathbf{E}_0 – амплитуда этой волны, $k_0 = \omega/c$ – волновой вектор волны в вакууме.

Слагаемые $\mathbf{D}^{(n)}$, пропорциональные n -й степени χ , представляют собой поправки, возникающие при n -кратном рассеянии.

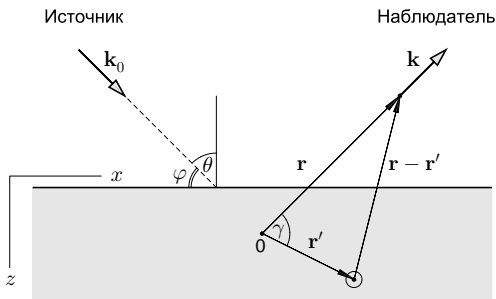
Приближение однократного (борновского) рассеяния

Уравнение для определения поправки первого порядка малости

$$\Delta \mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) + k_0^2 \mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = \text{rot rot} \left(\frac{4\pi e^2 n_{\text{эп}}(\mathbf{r})}{m_0 \omega^2} \mathbf{E}_0 e^{ik_0 r} \right).$$

Частное решение уравнения можно записать в виде свёртки функции Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ трёхмерного уравнения Гельмгольца и функции источников, стоящих в правой части уравнения

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) &= \iiint G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \text{rot rot} \left(\frac{4\pi e^2 n_{\text{эп}}(\mathbf{r}')}{m_0 \omega^2} \mathbf{E}_0 e^{ik_0 r'} \right) d\mathbf{r}' = \\ &= -\frac{4\pi e^2}{m_0 \omega^2} \iiint \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_0 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \text{rot rot} \left(n_{\text{эп}}(\mathbf{r}') \mathbf{E}_0 e^{ik_0 r'} \right) d\mathbf{r}', \end{aligned}$$



Далее мы будем интересоваться структурой поля в дальней волновой зоне ($|r| \gg \lambda$), тогда на больших расстояниях от образца

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = \sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr' \cos \gamma} = r \cdot \sqrt{1 - 2 \left(\frac{r'}{r}\right) \cos \gamma + \left(\frac{r'}{r}\right)^2} \simeq r - r' \cos \gamma = r - \mathbf{r}' \cdot \mathbf{n},$$

где γ – угол между векторами \mathbf{r} и \mathbf{r}' , $\mathbf{n} = \mathbf{r}/|\mathbf{r}|$ – единичный вектор в направлении рассеянной волны. Поскольку мы рассматриваем упругое рассеяние без изменения частоты, то $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = \omega/c$.

Учитывая, что в точке наблюдения векторы электрической индукции и напряженности электрического поля совпадают, получим

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) &= -\frac{e^2}{m_0 \omega^2} \frac{e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}}{r} \times \iiint e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \left(n_{\text{эл}}(\mathbf{r}') \mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}'} \right) d\mathbf{r}' = \\ &= \frac{e^2}{m_0 \omega^2} \frac{e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}}{r} [\mathbf{k} \times [\mathbf{k} \times \mathbf{E}_0]] \iiint n_{\text{эл}}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}'} d\mathbf{r}', \end{aligned}$$

где

$$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$$

есть вектор рассеяния, который равен разности волновых векторов \mathbf{k} рассеянной волны, которую в дальней зоне можно считать локально плоской, и падающей волны \mathbf{k}_0 .

Промежуточный вывод: амплитуда рассеянной волны пропорциональна фурье-образу от электронной плотности образца.

Приближение сплошной среды

При зеркальном отражении абсолютная величина вектора рассеяния, перпендикулярная отражающей поверхности, равна

$$|q_z| \equiv |k_z - k_{0,z}| = 2k_0 \cos \theta = \frac{2\pi}{\lambda/(2 \cos \theta)}$$

поэтому роль «эффективной» длины волны играет величина

$$\lambda_{\text{эфф},\perp} = \frac{\lambda}{\cos \theta} = \frac{\lambda}{\sin \varphi},$$

где $\varphi \equiv \pi/2 - \theta$ – угол скольжения. При малых углах скольжения ($\varphi \ll 1$) «эффективная» длина волны может стать существенно больше постоянной решётки, и тогда основной вклад в рассеяние будут вносить крупномасштабные изменения восприимчивости, а не изменения электронной плотности на атомарных масштабах.

В приближении «малоуглового» рассеяния рассмотрим отражение плоской монохроматической волны от однородного полупространства с идеальной плоской поверхностью

$$n_{\text{эл}}(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } z < 0, \\ n_0 & \text{при } z \geq 0, \end{cases}$$

где плоскость $z = 0$ соответствует поверхности образца. Очевидно, что

$$E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = A_0(r) n_0 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_x x'} dx' \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_y y'} dy' \int_0^{\infty} e^{-iq_z z'} dz',$$

где $A_0(r) = e^2 k_0^2 E_0 / (m_0 \omega^2) \cdot e^{ik_0 r} / r$ есть амплитуда рассеянной волны в точке наблюдения.

Зеркальное отражение от плоской поверхности

При взятии интеграла по переменным x' и y' можно воспользоваться интегральным представлением дельта-функции

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_x x'} dx' = 2\pi\delta(q_x) \quad \text{и} \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iq_y y'} dy' = 2\pi\delta(q_y).$$

При взятии интеграла по z' удобно формально ввести слабое затухание γ , а после взятия интеграла устремить это затухание к нулю, что позволяет получить оценку главного значения расходящегося интеграла

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \int_0^{\infty} e^{-iq_z z' - \gamma z'} dz' = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{e^{-iq_z z' - \delta z'} \Big|_0^{\infty}}{(-ik_z - \gamma)} = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{1}{(iq_z + \gamma)} = \frac{1}{iq_z}.$$

Следовательно, амплитуда электрического поля для отражённой от полупространства волны равна

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = A_0(r) n_0 \frac{(2\pi)^2}{iq_z} \delta(q_x) \delta(q_y).$$

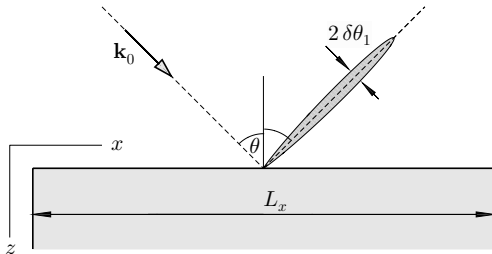
Таким образом, максимум амплитуды рассеянной волны соответствует нулевым значениям продольных компонент вектора рассеяния: $q_x = 0$ и $q_y = 0$. Принимая во внимание сохранение модуля волнового вектора при рассеянии, заключаем, что рассеяние от полупространства существует только в зеркальном направлении: $k_x = k_{0,x}$, $k_y = k_{0,y}$ и $k_z = -k_{0,z}$.

Зеркало конечных размеров: дифракционная расходимость

$$\int_{-L_x/2}^{+L_x/2} e^{-iq_x x'} dx' = \frac{2 \sin(q_x L_x/2)}{q_x} \quad \text{и} \quad \int_{-L_y/2}^{+L_y/2} e^{-iq_y y'} dy' = \frac{2 \sin(q_y L_y/2)}{q_y}.$$

Следствия соотношения неопределенностей:

$$\delta q_x = \frac{2\pi}{L_x} \quad \text{и} \quad \delta q_y = \frac{2\pi}{L_y}.$$



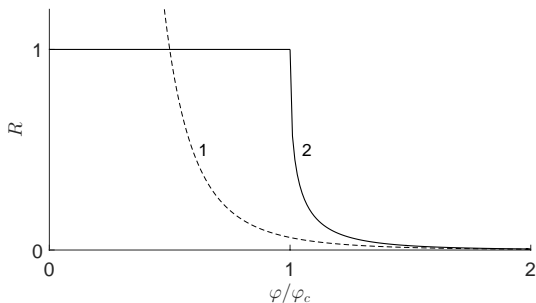
Оценим полуширину главного «лепестка» диаграммы направленности

$$\delta\theta \simeq \frac{\lambda}{L_x} \frac{1}{\cos\theta},$$

где $L_x \cos\theta$ – размер зеркала, видимый со стороны наблюдателя.

Можно показать, что коэффициент отражения электромагнитной волны рентгеновского диапазона от плоской поверхности в малоугловом приближении ($\theta \rightarrow \pi/2$ или $\varphi \rightarrow 0$) без учёта дифракционных искажений определяется соотношением

$$\mathcal{R} = \left(\frac{\pi e^2 n_0}{m_0 \omega^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\cos^4 \theta} = \left(\frac{\pi e^2 n_0}{m_0 \omega^2} \right)^2 \cdot \frac{1}{\sin^4 \varphi}.$$



Полученное соотношение для коэффициента отражения предсказывает расходимость при малых углах скольжения: $R \sim 1/\varphi^4$. Такая сингулярность свидетельствует о нарушении приближения однократного рассеяния, которое было использовано для описания процессов рассеяния от среды с диэлектрической проницаемостью меньшей единицы.

Полное внешнее отражение

Предположим, что плоскость падения совпадает с плоскостью $x-z$. Запишем волновое уравнение $\Delta \mathbf{E} + k^2(\omega) \mathbf{E} = 0$ (см. лекцию 1) для y -компоненты электрического поля в немагнитной среде

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} E_y + \frac{\partial^2}{\partial z^2} E_y + k^2 E_y = 0, \quad \text{где} \quad k^2 = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \varepsilon(\omega, z) \mu(\omega) = k_0^2 \varepsilon(\omega, z)$$

Поскольку в силу симметрии задача допускает разделение переменных и зависимость от продольной x -координаты должна иметь вид бегущей волны с волновым вектором $k_0 \sin \theta$, получаем дифференциальное уравнение с переменными коэффициентами

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + k_0^2 (\varepsilon(\omega, z) - \sin^2 \theta) E_y = 0.$$

Поскольку диэлектрическая проницаемость веществ в рентгеновском диапазоне всегда меньше единицы, то должен существовать такой угол падения, при котором выражение

$$k_0^2 (\varepsilon(\omega, z) - \sin^2 \theta)$$

станет отрицательным. Как известно, уравнение вида

$$E_y'' - \kappa^2 E_y = 0, \quad \text{где} \quad \kappa^2 = k_0^2 (\sin^2 \theta - \varepsilon(\omega, z)) > 0$$

описывает появление экспоненциально затухающих вглубь образца волн ($E_y \sim e^{-\kappa z}$) с нулевым потоком мощности внутри образца. Следовательно, коэффициент отражения от полупространства для малых углов скольжения должен быть равен единице!

Задача об отражении электромагнитной волны от среды с произвольной диэлектрической проницаемостью может быть решена точно для любых углов (см. Ландау и Лифшиц, т. 8, задача 2 к §86). Коэффициент отражения по мощности от среды с плоской поверхностью и диэлектрической проницаемостью ε , близкой к единице ($1 - \varepsilon \ll 1$), для случая наклонного падения равен

$$\mathcal{R} = \frac{(\varphi - \sqrt{\varphi^2 - (1 - \varepsilon)})^4}{(1 - \varepsilon)^2},$$

где φ – угол скольжения. Определим критический угол скольжения

$$\varphi_c \equiv \sqrt{1 - \varepsilon} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_0}{m_0 \omega^2}}$$

из условия обращению подкоренного выражения в нуль.

Легко видеть, что при $\varphi = \varphi_c$ реализуется режим полного внешнего отражения ($\mathcal{R} = 1$). В пределе $\varphi \gg \varphi_c$ можно получить выражение (кривая 2 на стр. 10)

$$\mathcal{R} = \frac{(\varphi - \sqrt{\varphi^2 - \varphi_c^2})^4}{\varphi_c^4} \implies \mathcal{R} \simeq \frac{1}{16} \left(\frac{\varphi_c}{\varphi}\right)^4 \simeq \frac{1}{16} \left(\frac{4\pi e^2 n_0}{m_0 \omega^2}\right)^2 \frac{1}{\varphi^4} \quad \text{при } \varphi \gg \varphi_c,$$

которое совпадает с формулой, полученной в приближении однократного рассеяния, в пределе $\varphi \ll 1$.

Отражение от шероховатой поверхности*

Предположим, пространственное распределение электронной концентрации имеет вид

$$n_{эл}(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } z < \xi(x, y), \\ n_0 & \text{при } z \geq \xi(x, y), \end{cases}$$

где случайная функция $z = \xi(x, y)$ описывает шероховатую границу раздела между веществом и вакуумом. Считая случайную поверхность статистически однородной, для корреляционной функции рассмотрим следующее выражение

$$\langle \xi(x, y) \xi(x', y') \rangle = \sigma^2 \exp\left(-\frac{(x-x')^2}{\ell^2} - \frac{(y-y')^2}{\ell^2}\right),$$

где параметр σ характеризует стандартное отклонение поверхности от среднего значения и типичную высоту неровности; ℓ есть средний латеральный размер шероховатостей. Отсюда следует, что

$$\langle \xi^2(x, y) \rangle = \langle \xi(x, y) \xi(x, y) \rangle = \sigma^2.$$

Находим фурье-образ электронной плотности и амплитуду электрического поля

$$\begin{aligned} E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) &= A_0(r) \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_x x' - iq_y y'} dx' dy' \int_{\xi(x, y)}^{\infty} n_{эл}(z') e^{-iq_z z'} dz' = \\ &= A_0(r) \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_x x' - iq_y y'} dx' dy' \int_0^{\infty} n_0 e^{-iq_z z'} e^{-iq_z \xi(x, y)} dz'. \end{aligned}$$

После интегрирования по переменной z' получаем

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{A_0(r)n_0}{iq_z} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_x x' - iq_y y'} e^{-iq_z \xi(x, y)} dx' dy'.$$

Предположим, что амплитуда шероховатостей мала, а их характерный латеральный масштаб достаточно велик. Это позволяет считать, что $|q_z \xi(x, y)| \ll 1$, и разложить экспоненту в подынтегральном выражении в ряд Тейлора с точностью до квадратичных по ξ слагаемых

$$e^{-iq_z \xi(x, y)} \simeq 1 - iq_z \xi(x, y) - \frac{1}{2} q_z^2 \xi^2(x, y).$$

В этом случае электрическое поле отражённой волны можно записать в виде

$$\mathbf{E}^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = \frac{A_0(r)n_0}{iq_z} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_x x' - iq_y y'} dx' dy' \times \left(1 - iq_z \xi(x', y') - \frac{q_z^2 \xi^2(x', y')}{2} \right);$$

следовательно, *средняя интенсивность* рассеянного шероховатой поверхностью излучения будет определяться соотношением

$$\langle |\mathbf{E}^{(1)}|^2 \rangle = \frac{|A_0(r)|^2 n_0^2}{q_z^2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_x x' - iq_y y' + iq_x x'' + iq_y y''} \times \\ \left\{ 1 + q_z^2 \langle \xi(x', y') \xi(x'', y'') \rangle - \frac{q_z^2}{2} \langle \xi^2(x', y') \rangle - \frac{q_z^2}{2} \langle \xi^2(x'', y'') \rangle \right\} dx' dy' dx'' dy''.$$

Легко видеть, что средняя интенсивность рассеянного излучения имеет два основных вклада.

1. Компоненту, которая описывает **почти зеркальное отражение** электромагнитной волны от шероховатой поверхности, при $L_x \rightarrow \infty$ и $L_y \rightarrow \infty$ можно записать в следующем виде

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{E}^{(1)}|^2 \rangle_{\text{зерк}} &= \frac{|A_0(r)|^2 n_0^2}{q_z^2} (1 - q_z^2 \sigma^2) \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_x(x' - x'')} dx' dx'' \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_y(y' - y'')} dy' dy'' \\ &= \frac{|A_0(r)|^2 n_0^2}{q_z^2} (1 - q_z^2 \sigma^2) \cdot (2\pi)^2 L_x L_y \delta(q_x) \delta(q_y). \end{aligned}$$

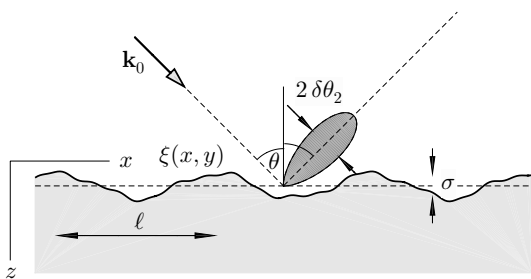
В рассматриваемом приближении слабой шероховатости коэффициент отражения от шероховатой поверхности в $(1 - q_z^2 \sigma^2)$ раз меньше коэффициента отражения от идеальной границы раздела.

2. Компоненту, которая описывает **незеркальное (диффузное) рассеяние** электромагнитной волны от шероховатой поверхностью, можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{E}^{(1)}|^2 \rangle_{\text{дифф}} &= |A_0(r)|^2 n_0^2 \sigma^2 \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dx' dy' dx'' dy'' \times \\ &\quad \times \exp \left(-iq_x(x' - x'') - iq_y(y' - y'') - \frac{(x' - x'')^2}{\ell^2} - \frac{(y' - y'')^2}{\ell^2} \right). \end{aligned}$$

После вдвумчового интегрирования при $L_x \rightarrow \infty$ и $L_y \rightarrow \infty$ получаем

$$\langle |\mathbf{E}^{(1)}|^2 \rangle_{\text{дифф}} = |A_0(r)|^2 n_0^2 \sigma^2 \pi \ell^2 L_x L_y \exp \left(-\frac{(q_x^2 + q_y^2) \ell^2}{4} \right).$$



Отметим, что при $\ell \rightarrow \infty$ можно показать, что

$$\begin{aligned} \langle |E^{(1)}|^2 \rangle_{\text{дифф}} &= |A_0(r)|^2 n_0^2 \sigma^2 \lim_{\ell \rightarrow \infty} \left\{ \pi \ell^2 L_x L_y \exp \left(-\frac{(q_x^2 + q_y^2) \ell^2}{4} \right) \right\} = \\ &= (2\pi)^2 |A_0(r)|^2 n_0^2 \sigma^2 L_x L_y \delta(q_x) \delta(q_y). \end{aligned}$$

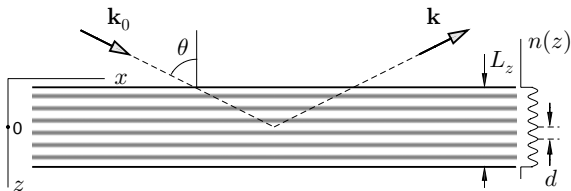
Следовательно, полное отражение от почти плоской поверхности будет описываться соотношением

$$\begin{aligned} \langle |E^{(1)}|^2 \rangle_{\text{зерк}} + \langle |E^{(1)}|^2 \rangle_{\text{дифф}} &= |A_0(r)|^2 n_0^2 \frac{(1 - q_z^2 \sigma^2)}{q_z^2} \cdot (2\pi)^2 L_x L_y \delta(q_x) \delta(q_y) + \\ &+ (2\pi)^2 |A_0(r)|^2 n_0^2 \sigma^2 L_x L_y \delta(q_x) \delta(q_y) = \frac{|A_0(r)|^2 n_0^2}{q_z^2} \cdot (2\pi)^2 L_x L_y \delta(q_x) \delta(q_y) \end{aligned}$$

и соответствовать зеркальному отражению той же интенсивности, что и от идеальной отражающей поверхности.

Отражение от многослойных структур в приближении однократного рассеяния

Рассмотрим отражение рентгеновского излучения от периодической структуры:



Профиль электронной плотности запишем в простейшем виде

$$n_{\text{эл}}(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } |z| > L_z/2; \\ n_0 + \Delta n_1 \cos Kz & \text{при } |z| < L_z/2, \end{cases}$$

где L_z – полная толщина, d – период, $K = 2\pi/d$ – вектор модуляции.

Считая, что отражающая поверхность неограничена в латеральной плоскости, находим амплитуду электрического поля рассеянной волны как фурье-образ от локальной электронной плотности

$$E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = A_0(\mathbf{r}) \int_{-L_x/2}^{L_x/2} e^{-iq_x x'} dx' \int_{-L_y/2}^{L_y/2} e^{-iq_y y'} dy' \int_{-L_z/2}^{L_z/2} n_{\text{эл}}(z') e^{-iq_z z'} dz'.$$

В пределе $L_x \rightarrow \infty$ и $L_y \rightarrow \infty$ имеем

$$E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = A_0(r)(2\pi)^2 \delta(q_x) \delta(q_y) \int_{-L_z/2}^{L_z/2} n_{\text{эл}}(z') e^{-iq_z z'} dz'.$$

Вычислим интеграл по z - координате и получим

$$E^{(1)}(\mathbf{r}, \omega) = A_0(r)(2\pi)^2 \delta(q_x) \delta(q_y) \times \left\{ \frac{2n_0}{q_z} \sin \frac{q_z L_z}{2} + \frac{\Delta n_1}{(q_z - K)} \sin \frac{(q_z - K)L_z}{2} + \frac{\Delta n_1}{(q_z + K)} \sin \frac{(q_z + K)L_z}{2} \right\}.$$

Первое слагаемое соответствует зеркальному отражению от однородной среды со средней электронной плотностью n_0 . Второе и третье слагаемые, пропорциональные амплитуде модуляции электронной плотности Δn_1 , имеют резонансный характер и достигают максимума при $q_z \simeq \pm K$.

Принимая во внимание, что вектор рассеяния равен $|q_z| = 2k_0 \cos \theta$, запишем условие резонансного рассеяния в виде

$$2k_0 \cos \theta = K \quad \text{или} \quad 2d \cos \theta = \lambda,$$

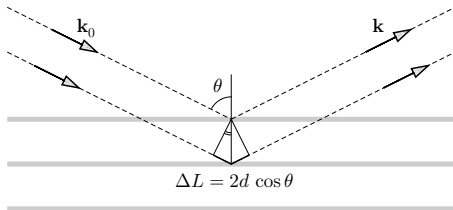
которое представляет собой условие дифракции Брэгга-Вульфа на одномерной решётке с гармонической модуляцией плотности.

Обобщение на случай распределения электронной плотности с несколькими фурье компонентами (замена $K \rightarrow mK$):

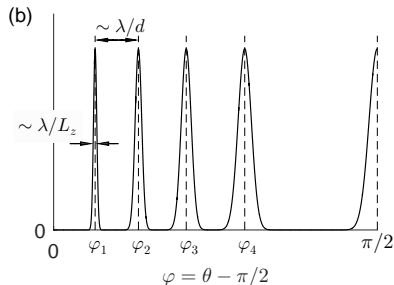
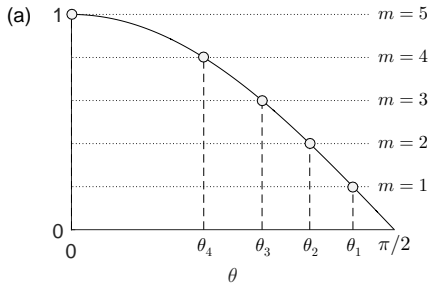
$$2k_0 \cos \theta = mK \quad \text{или} \quad 2d \cos \theta_m = m\lambda, \quad \text{где} \quad m = 1, 2, \dots$$

Геометрическая интерпретация условия дифракции Брэгга-Вульфа на одномерной решётке

$$2d \cos \theta_m = m\lambda \quad \text{или} \quad 2d \sin \varphi_m = m\lambda, \quad \text{где} \quad m = 1, 2, \dots$$



Пример графического решения уравнения Брэгга-Вульфа (построение для $\lambda/d = 0.4$)



Обсудим зависимость параметров рассеянной волны от толщины идеальной многослойной структуры. Амплитуда резонансного слагаемого определяется множителем

$$a(q_z) = \frac{\Delta n_m}{(q_z \pm Km)} \sin \frac{(q_z \pm Km)L_z}{2}.$$

Отметим, что при выполнении условия точного резонанса $q_z = \pm Km$ (*)

$$a(q_z) = \frac{\Delta n_m L_z}{2} \sim N.$$

Следовательно, при увеличении толщины многослойной структуры амплитуда электрического поля будет возрастать пропорционально числу слоёв $N = L_z/d$. Коэффициент отражения от многослойной структуры, который определяется квадратом модуля поля, увеличивается в N^2 раз по сравнению с коэффициентом отражения от одиночной плёнки, что непосредственно связано с конструктивной интерференцией волн, отражённых разными слоями.

Запишем условие резонанса m -го порядка (*) в виде

$$|q_z| = mK \quad \text{или} \quad 2k_z = \frac{2\pi m}{d} \quad \text{или} \quad k_z = \frac{\pi m}{d}, \quad \text{где} \quad m \in \mathbb{Z}.$$

Отметим, что первый интерференционный пик ($m = 1$) лежит на границе зоны Бриллюэна одномерной структуры: $k_z = \pi/d$.

Модель однократного рассеяния предсказывает бесконечное усиление амплитуды электрического поля рассеянной волны при $L_z \rightarrow \infty$, что противоречит здравому смыслу. Физическая причина расходимости заключается в пренебрежении затуханием падающей электромагнитной волны по мере её проникновения в многослойную структуру.

Отказ от борновского приближения и переход к приближению медленно меняющихся амплитуд

Рассмотрим волновое уравнение, которое для плоскослоистой среды и s-поляризации падающего излучения имеет вид (с. 11)

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + k_0^2 (\varepsilon(z) - \sin^2 \theta) E_y = 0.$$

Рассмотренное нами гармоническое приближение для локальной электронной концентрации соответствует периодическому распределению диэлектрической проницаемости вида

$$\varepsilon(z) = 1 - \frac{4\pi e^2 n_{эл}(z)}{m_0 \omega^2} = \varepsilon_0 + 2\varepsilon_1 \cos Kz,$$

где $\varepsilon_0 = 1 - 4\pi e^2 n_0 / (m_0 \omega^2)$ и $\varepsilon_1 = -4\pi e^2 \Delta n_1 / (m_0 \omega^2)$.

Для определённости будем считать, что $\varepsilon_1 > 0$.

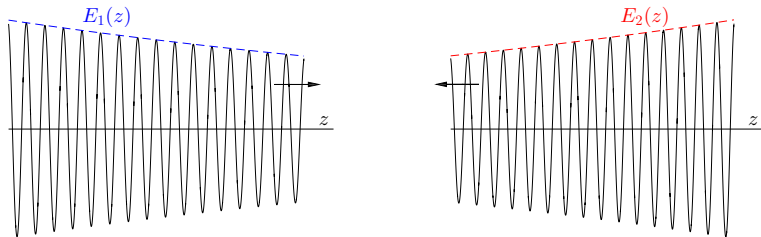
Волновое уравнение представляет собой уравнение Маттье, описывающее параметрический резонанс. Будем искать решение волнового уравнения в виде двух встречных неоднородных плоских волн

$$E_y(z) = E_1(z) e^{iKz/2} + E_2(z) e^{-iKz/2},$$

предполагая, что комплексные амплитуды $E_1(z)$ и $E_2(z)$ являются медленными функциями z-координаты (огibaющие).

Графическое представление вида предполагаемого решения

$$E_y(z) = E_1(z) e^{iKz/2} + E_2(z) e^{-iKz/2}$$



Подставим модельную зависимость $\varepsilon(z)$ и предполагаемый вид решения в уравнение Матвея и после перегруппировки слагаемых получим

$$e^{iKz/2} \left\{ iK \frac{dE_1}{dz} + k_0^2 (\varepsilon_0 - \sin^2 \theta) E_1(z) + k_0^2 \varepsilon_1 E_2(z) - \frac{K^2}{4} E_1(z) \right\} +$$

$$e^{-iKz/2} \left\{ -iK \frac{dE_2}{dz} + k_0^2 (\varepsilon_0 - \sin^2 \theta) E_2(z) + k_0^2 \varepsilon_1 E_1(z) - \frac{K^2}{4} E_2(z) \right\} +$$

$$+ k_0^2 \varepsilon_1 e^{3iKz/2} E_1(z) + k_0^2 \varepsilon_1 e^{-3iKz/2} E_2(z) = 0 \quad (*).$$

- Умножим все слагаемые уравнения (*) на $e^{-iKz/2}$ и проинтегрируем по толщине.
- Умножим все слагаемые уравнения (*) на $e^{+iKz/2}$ и проинтегрируем по толщине.
- Такие процедуры позволяют избавиться от быстроосциллирующих компонент и перейти к укороченным уравнениям для огибающих

Получаем укороченные уравнения

$$iK \frac{dE_1}{dz} + k_0^2 (\varepsilon_0 - \sin^2 \theta) E_1(z) + k_0^2 \varepsilon_1 E_2(z) - \frac{K^2}{4} E_1(z) = 0 \quad \text{и}$$
$$-iK \frac{dE_2}{dz} + k_0^2 (\varepsilon_0 - \sin^2 \theta) E_2(z) + k_0^2 \varepsilon_1 E_1(z) - \frac{K^2}{4} E_2(z) = 0.$$

Для удобства анализа введём параметр «расстройка»

$$\delta \equiv k_0^2 (\varepsilon_0 - \sin^2 \theta) - \frac{K^2}{4},$$

который характеризует отклонение параметров системы от условий точного брэгговского резонанса ($\delta = 0$ при $2d \cos \theta = \lambda$).

Запишем укороченные уравнения для амплитуд встречных волн в следующем виде

$$iK \frac{dE_1}{dz} + \delta \cdot E_1(z) + k_0^2 \varepsilon_1 E_2(z) = 0 \quad \text{и} \quad -iK \frac{dE_2}{dz} + \delta \cdot E_2(z) + k_0^2 \varepsilon_1 E_1(z) = 0.$$

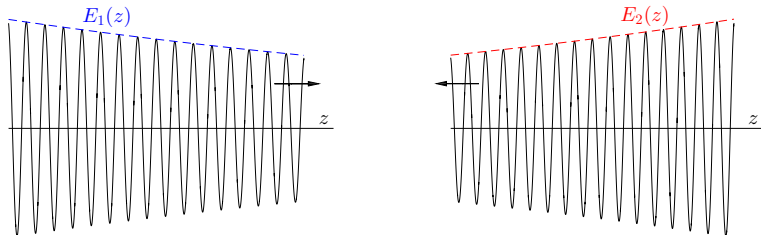
Дифференциальные уравнения первого порядка описывают перераспределение энергии между проходящей и отражённой волнами, интенсивность которого пропорциональна амплитуде модуляции диэлектрической проницаемости. Этот эффект описывается последними слагаемыми, которые не позволяют расцепить систему уравнений на два независимых уравнения.

Решение системы укороченных уравнений

Будем искать решение укороченных уравнений в виде экспоненциальных решений

$$E_1(z) = A_1 e^{i\gamma z} \quad \text{и} \quad E_2(z) = A_2 e^{i\gamma z},$$

где $\gamma > 0$ – параметр, описывающий пространственное изменение амплитуд встречных волн.



После подстановки получаем систему уравнений для определения декремента затухания γ и соотношения между амплитудами A_1 и A_2

$$(\delta - K\gamma) A_1 + k_0^2 \varepsilon_1 A_2 = 0 \quad \text{и} \quad k_0^2 \varepsilon_1 A_1 + (\delta + K\gamma) A_2 = 0.$$

Нетривиальные решения однородной системы линейных уравнений существуют при условии равенства нулю детерминанта соответствующей матрицы

$$(\delta - K\gamma) \cdot (\delta + K\gamma) + k_0^2 \varepsilon_1 \cdot k_0^2 \varepsilon_1 = 0.$$

Решая квадратное уравнение относительно γ , получаем

$$\gamma_{1,2} = \pm \frac{k_0^2 \varepsilon_1}{K} \sqrt{\frac{\delta^2}{k_0^4 \varepsilon_1^2} - 1}.$$

Рассмотрим два случая.

1. Если $|\delta| > k_0^2 \varepsilon_1$, то $\gamma_{1,2}$ – вещественные и тогда одно из возможных решений

$$E_y(z) = A_1 e^{i\gamma_1 z} e^{iKz/2} + A_2 e^{i\gamma_1 z} e^{-iKz/2} = A_1 e^{i(K+\gamma_1)z/2} + A_2 e^{-i(K-\gamma_1)z/2}.$$

Следовательно, в многослойной структуре могут распространяться модулированные бегущие волны, переносящие энергию от поверхности многослойной структуры к подложке. Это будет соответствовать резкому падению коэффициента отражения при существенном отклонении от условий брэгговского резонанса.

2. Если $|\delta| < k_0^2 \varepsilon_1$, то решениями дисперсионного уравнения являются мнимые величины: $\gamma_{1,2} = \pm i\gamma^*$, где

$$\gamma^* = \frac{k_0^2 \varepsilon_1}{K} \sqrt{1 - \frac{\delta^2}{k_0^4 \varepsilon_1^2}}.$$

В этом случае одно из возможных решений имеет вид

$$E_y(z) = A_1 e^{-\gamma^* z} e^{iKz/2} + A_2 e^{-\gamma^* z} e^{-iKz/2}.$$

Следовательно, вблизи брэгговского резонанса ($|\delta| < k_0^2 \varepsilon_1$) в многослойной структуре могут существовать лишь экспоненциально нарастающие и затухающие решения с мнимым волновым вектором, что будет соответствовать режиму почти полного отражения электромагнитной волны от многослойной структуры.

Неоднородные поверхностные электронные волны в многослойной периодической структуре

Обсудим вопрос о распределении электрического поля внутри многослойной структуры для случая малой отстройки от брэгговского резонанса ($|\delta| < k_0^2 \varepsilon_1$).

Будем предполагать, что толщина сверхрешётки существенно превышает длину экстинкции: $L_z \gg \lambda^2 / (2\pi d \varepsilon_1)$. Это допущение позволяет нам рассматривать только затухающие при $z \rightarrow \infty$ решения вида

$$E_1(z) = A_1 e^{-\gamma^* z} \quad \text{и} \quad E_2(z) = A_2 e^{-\gamma^* z}$$

и пренебречь волнами, нарастающими при $z \rightarrow \infty$.

Используя дисперсионное соотношение находим амплитуды встречных волн

$$A_2 = -\frac{(\delta - i K \gamma^*)}{k_0^2 \varepsilon_1} A_1 = -e^{-i\varphi^*} A_1,$$

где

$$\varphi^* = \operatorname{arctg} \left(\frac{K \gamma^*}{\delta} \right) = \operatorname{arctg} \left\{ \left(\frac{k_0^2 \varepsilon_1}{\delta} \right) \sqrt{1 - \left(\frac{\delta}{k_0^2 \varepsilon_1} \right)^2} \right\}$$

есть фазовый множитель.

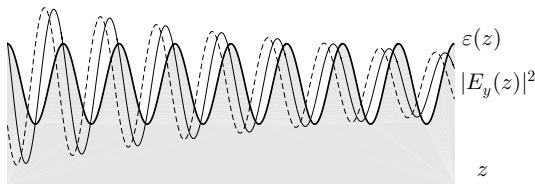
Получаем электрическое поле внутри многослойной структуры

$$\begin{aligned} E_y(z) &= E_1(z) e^{iKz/2} + E_2(z) e^{-iKz/2} = A_1 e^{-\gamma^* z} \left(e^{iKz/2} - e^{-i\varphi^*} e^{-iKz/2} \right) = \\ &= 2A_1 e^{-\gamma^* z} e^{-i\varphi^*/2} \cos\left(\frac{Kz}{2} + \frac{\varphi^*}{2}\right). \end{aligned}$$

Квадрат модуля электрического поля представляет собой затухающую стоячую волну

$$|E_y(z)|^2 = 2|A_1|^2 e^{-2\gamma^* z} \left(1 + \cos(Kz + \varphi^*)\right),$$

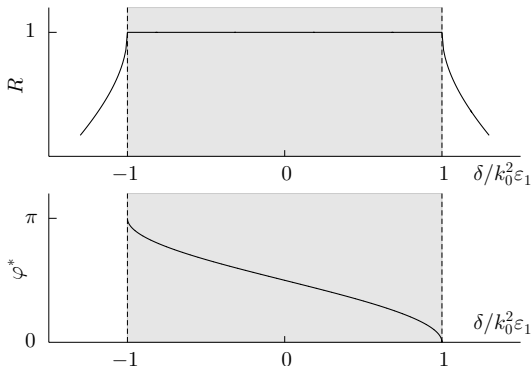
при этом фаза φ^* определяет сдвиг пучностей $|E_y(z)|^2$ относительно максимумов диэлектрической проницаемости $\varepsilon(z)$. Полученное решение в виде поверхностной электромагнитной волны является аналогом поверхностных электронных состояний Тамма-Шокли.



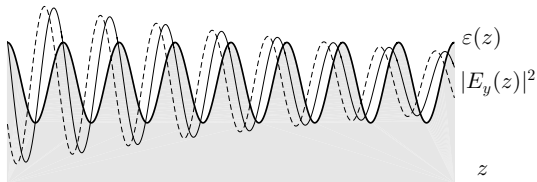
Следовательно, незначительным отклонением угла падения от условия точного брэгговского резонанса можно непрерывным образом изменять φ от нуля (при $\delta/k_0^2 \varepsilon_1 = 1$) до π (при $\delta/k_0^2 \varepsilon_1 = -1$), что позволяет изменять взаимное расположение пучностей электрического поля и распределения электронной плотности

«Столик» Дарвина

Схематическое представление зависимости коэффициента отражения и фазового сдвига от нормированной расстройки вблизи брэгговского резонанса в отсутствие поглощения



Неоднородные электромагнитные волны в системе с периодической модуляцией электронной плотности



Параметр

$$L_{\text{экс}} \equiv \frac{1}{\gamma^*}, \quad \text{где} \quad \gamma^* = \frac{k_0^2 \varepsilon_1}{K} \sqrt{1 - \frac{\delta^2}{k_0^4 \varepsilon_1^2}},$$

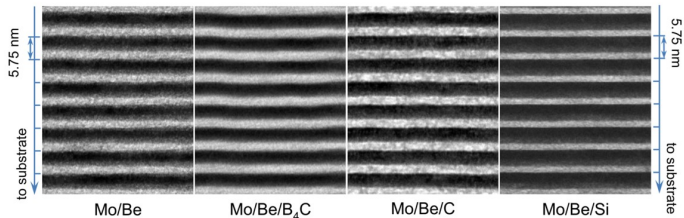
называется длиной экстинкции и описывает масштаб локализации неоднородных волн вблизи поверхности в системе без затухания. Длина экстинкции при выполнении условия точного брэгговского резонанса (при $\delta = 0$) $L_{\text{экс}} = K/(k_0^2 \varepsilon_1) = \lambda^2/(2\pi d \varepsilon_1)$ может быть много больше периода структуры d и длины волны, поскольку амплитуда первой фурье-гармоники ε_1 много меньше единицы.

Метод укороченных уравнений учитывает самовоздействие и позволяет избавиться от расходимости при выполнении резонансного брэгговского условия.

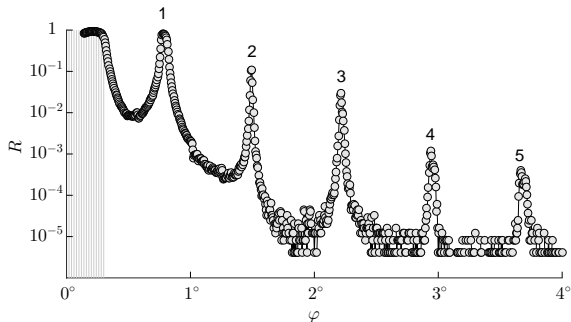
Таким образом, приближение однократного рассеяния справедливо для многослойных структур в пределе малой толщины ($L_z \ll L_{\text{экс}}$).

Многослойные рентгеновские зеркала

TEM: тёмные полосы – Mo, светлые полосы – Be



$\theta - 2\theta$ скан: измерение под углом зеркального падения



Лекции 3-4

Эффект Мейсснера

Поверхностная и прикраевая сверхпроводимость

Мезоскопическая сверхпроводимость

Доменная сверхпроводимость

Сверхпроводимость на плоскостях двойникования

Ключевые открытия в области сверхпроводимости и сверхтекучести

- 1908: получение жидкого гелия (Камерлинг-Оннес)
- 1911: открытие сверхпроводимости (Камерлинг-Оннес) •
- 1933: открытие диамагнетизма сверхпроводников (Мейсснер, Оксенфельд)
- 1935: двухжидкостная электродинамика (бр. Лондоны)
- 1938: открытие сверхтекучести (Капица) •
- 1941: теория фазовых переходов и сверхтекучести жидкого гелия (Ландау) •
- 1946: феноменологическая теория сверхпроводимости (Гинзбург, Ландау) •
- 1950: вихри в сверхтекучем гелии (Фейнман)
- 1957: вихри в сверхпроводниках второго рода (Абрикосов) •
- 1957: микроскопическая теория сверхпроводимости (Бардин, Купер, Шриффер) •
- 1959: сверхтекучесть нейтронных звезд (Мигдал)
- 1962: туннелирование в сверхпроводниках (Гиазвер, Джозефсон) •
- 1987: открытие высокотемпературной сверхпроводимости (Беднорц, Мюллер) •
- 1995: бозе-эйнштейновская конденсация (Корнелл, Виман, Кеттерле) •

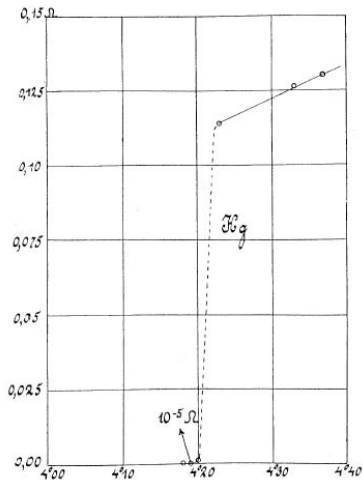
- Нобелевская премия

Экспериментальное открытие сверхпроводимости: Камерлинг-Оннес, 1911

Лейденская лаборатория, Нидерланды

эксперименты с дистиллированной ртутью (Hg)

manometer connected to S_3 . These measurements showed that from the melting point of hydrogen to the neighbourhood of the boiling point of helium the curve exhibited the ordinary gradual lessening of the rate of diminution of resistance, practically the same as given by the formula of Comm. N^o. 119. A little above and a little below the boiling point, from $4^{\circ}.29$ K. to $4^{\circ}.21$ K. the same gradual change was clearly evident (cf. the fig.), but between $4^{\circ}.21$ K. and $4^{\circ}.19$ K. the resistance diminished very rapidly and disappeared at $4^{\circ}.19$ K. (Temperature measurements are here given with $4^{\circ}.25$ K. as the boiling point of helium).



H. Kamerlingh Onnes, Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden. Suppl. 29 (Nov. 1911).

D. van Delft, P. Kes, *The discovery of superconductivity*. Physics Today, v. 63, 38-43 (2010).

Двухжидкостная электродинамика: теория Лондонов

Плотности «нормальной» и «сверхтекучей» электронной жидкостей

$$n_n \simeq n_0 \left(\frac{T}{T_{c0}} \right)^m \quad \text{и} \quad n_s \simeq n_0 \left\{ 1 - \left(\frac{T}{T_{c0}} \right)^m \right\},$$

где T_{c0} – критическая температура сверхпроводящего перехода в нулевом магнитном поле.

Уравнения механического движения «нормальных» электронов и «сверхтекучих» пар в электрическом поле \mathbf{E} с учётом рассеяния на дефектах (эффективной вязкости)

$$m^* \frac{d\mathbf{v}_n}{dt} = e\mathbf{E} - \frac{m^* \mathbf{v}_n}{\tau_n} \quad \text{и} \quad 2m^* \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = 2e\mathbf{E},$$

где τ_n – время свободного пробега «нормальных» электронов, $\nu = 1/\tau_n$ – средняя частота соударений, $2m^*$ и $2e$ – эффективная масса и заряд электронных пар.

Будем предполагать, что все поля и токи изменяются по гармоническому закону $\sim e^{i\omega t}$.

Введем плотности тока, соответствующие потоку заряда для «нормальной» и «сверхпроводящей» компонент

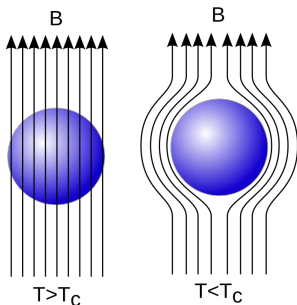
$$\mathbf{j}_n = en_n \mathbf{v}_n = \frac{n_n e^2 \tau_n}{m^*} \frac{1}{(1 + i\omega \tau_n)} \mathbf{E} \quad \text{и} \quad \mathbf{j}_s = en_s \mathbf{v}_s = \frac{n_s e^2}{m^*} \frac{1}{i\omega} \mathbf{E}.$$

Связь полной плотности тока $\mathbf{j} = \mathbf{j}_s + \mathbf{j}_n$ и амплитуды электрического поля можно записать в виде закона Ома $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$, где

$$\sigma = \frac{n_n e^2 \tau_n}{m^*} \frac{1}{(1 + i\omega \tau_n)} + \frac{n_s e^2}{m^*} \frac{1}{i\omega} \quad \leftarrow \quad \text{сингулярность при } \omega = 0.$$

Эффект Мейсснера-Оксенфельда (1)

W. Meissner, R.Ochsenfeld, *Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit*. Naturwissenschaften, v. 21, 787-788 (1933).



Анализ на основе двухжидкостной модели

Запишем локальный закон Ома для проводимости на переменном токе в следующем виде

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, \omega) = \sigma(\omega) \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \quad \text{где} \quad \sigma(\omega) = \frac{n_n e^2 \tau_n}{m^*} \frac{1}{(1 + i\omega\tau_n)} + \frac{n_s e^2}{m^*} \frac{1}{i\omega}.$$

Подставим это соотношение в первое уравнение Максвелла

$$\text{rot } \mathbf{B} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = \frac{4\pi}{c} \left(\frac{n_n e^2 \tau_n}{m^*} \frac{1}{(1 + i\omega\tau_n)} + \frac{n_s e^2}{m^*} \frac{1}{i\omega} \right) \mathbf{E}.$$

Запишем второе уравнение Максвелла в следующей форме

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{i\omega}{c} \mathbf{B}.$$

Комбинируя эти соотношения, получаем

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{4\pi}{c} \left(\frac{n_n e^2 \tau_n}{m^*} \frac{1}{(1 + i\omega\tau_n)} + \frac{n_s e^2}{m^*} \frac{1}{i\omega} \right) \left(-\frac{i\omega}{c} \right) \mathbf{B} \simeq \\ &\simeq \left(-\frac{4\pi}{c^2} \frac{n_n e^2}{m^*} \frac{i\omega\tau_n}{(1 + i\omega\tau_n)} - \frac{4\pi n_s e^2}{m^* c^2} \right) \mathbf{B} \quad (*). \end{aligned}$$

Введём два параметра: глубину проникновения магнитного поля в нормальные металлы в пределе низких частот (см. лекцию 1) и лондоновскую глубину проникновения магнитного поля в сверхпроводящие металлы

$$\delta = \frac{c}{\sqrt{2\pi\omega\sigma_0}} \quad \text{и} \quad \lambda = \sqrt{\frac{m^* c^2}{4\pi n_s e^2}}.$$

В нормальном состоянии плотность сверхпроводящих электронов равна нулю, поэтому $\lambda = \infty$ при $T > T_{c0}$.

Введённые нами параметры δ и λ позволяют записать уравнение (*) в пределе низких частот в следующем виде

$$\Delta \mathbf{B} - \left(\frac{2i}{\delta^2} + \frac{1}{\lambda^2} \right) \mathbf{B} = 0 \quad \text{при} \quad \omega\tau \ll 1.$$

При упрощении мы использовали соотношения $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ и $\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{B} = \nabla \operatorname{div} \mathbf{B} - \Delta \mathbf{B} = -\Delta \mathbf{B}$.

При условии $4\pi\omega\sigma_0/c^2 \ll \lambda^{-2}$ (или $\delta \gg \lambda$), которое выполняется для низких частот и для температур, не слишком близких к критической температуре, можно пренебречь вкладом нормальных электронов в полную проводимость и экранировку и получить второе уравнение Лондонов

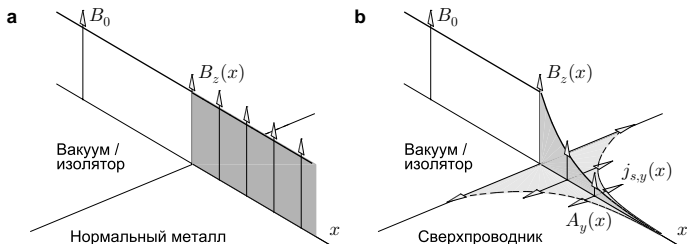
$$\Delta \mathbf{B} - \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B} = 0.$$

Рассмотрим сверхпроводящее полупространство с плоской поверхностью в параллельном магнитном поле: $\mathbf{B} = B_z(x)\mathbf{e}_z$. Решение уравнения

$$B_z''(x) - \frac{1}{\lambda^2} B_z(x) = 0,$$

локализованное вблизи поверхности, имеет вид

$$B_z(x) = B_0 \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right).$$



Идеальный диамагнетизм сверхпроводников: Мейсснер и Оксенфельд, 1933

Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit

Translated by Allister M Forrest from Meissner W and Ochsenfeld R 1933 *Die Naturwissenschaften* 21 787.

A new effect concerning the onset of superconductivity

If one places a cylindrical superconductor, e.g. lead or tin, above its transition temperature in a uniform magnetic field perpendicular to the cylinder axis the field lines pass virtually unhindered through it because of the very weak susceptibility of the superconductor (tin is slightly paramagnetic, lead, diamagnetic). According to previous views the field-line pattern would be expected to remain unchanged if, without altering the external magnetic field, the temperature was lowered below the transition temperature. Our investigations on tin and lead which contradict this view produced the following:

(i) On cooling below the transition temperature the field-line pattern in the region outside the superconductor changes almost to that which would be expected if the permeability of the superconductor was zero, or the diamagnetic susceptibility was $-1/(4\pi)$.

Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit

Bringt man einen zylindrischen Supraleiter, z. B. Blei oder Zinn, oberhalb seines Sprungpunktes in ein senkrecht zu seiner Achse gerichtetes homogenes Magnetfeld, so gehen die Kraftlinien wegen der sehr geringen Suszeptibilität der Supraleiter (Zinn ist schwach paramagnetisch, Blei diamagnetisch) fast ungehindert durch sie hindurch. Nach den bisherigen Anschauungen war zu erwarten, daß die Kraftlinienverteilung unverändert bleibt, wenn man die Temperatur, ohne an dem äußeren Magnetfeld etwas zu ändern, bis unter den Sprungpunkt erniedrigt. Unsere Versuche an Zinn und Blei haben im Gegensatz hierzu folgendes ergeben:

1. Beim Unterschreiten des Sprungpunktes ändert sich die Kraftlinienverteilung in der äußeren Umgebung der Supraleiter und wird nahezu so, wie es bei der Permeabilität 0, also der diamagnetischen Suszeptibilität $-1/(4\pi)$, des Supraleiters zu erwarten wäre.

A. M. Forrest, *Meissner and Ochsenfeld revisited*. Eur. J. Phys., v. 4, 117 (1983)

Функционал свободной энергии Гинзбурга-Ландау

Для описания электронных свойств сверхпроводника введем комплекснозначную функцию – параметр порядка $\Psi(\mathbf{r})$ (order parameter), квадрат модуля которого характеризует локальную плотность сверхпроводящего конденсата

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 \equiv \frac{n_s(\mathbf{r})}{2},$$

где $n_s(\mathbf{r})/2$ – плотность куперовских пар.

Согласно феноменологической теории сверхпроводимости Гинзбурга-Ландау (ГЛ) плотность свободной энергии для сверхпроводника и нормального металла при заданной температуре и при наличии магнитной индукции внутри образца можно записать в виде разложения по чётным степеням $|\Psi|$ и $|\nabla\Psi|$

$$f_s = f_{n,0} + \alpha |\Psi(\mathbf{r})|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi(\mathbf{r})|^4 + \frac{1}{4m^*} \left| \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) \right|^2 + \frac{\mathbf{B}^2(\mathbf{r})}{8\pi}$$

и

$$f_n = f_{n,0} + \frac{\mathbf{B}^2(\mathbf{r})}{8\pi} \quad \text{@ } \Psi(\mathbf{r}) = 0,$$

где f_{n0} – плотность свободной энергии в нормальном состоянии в нулевом магнитном поле, $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ – векторный потенциал, $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \text{rot } \mathbf{A}(\mathbf{r})$ – магнитная индукция, $2e = -2|e|$ и $2m^*$ – заряд и масса куперовской пары.

Как правило, свободная энергия есть $F = U - TS$. Где энтропийный вклад ($-TS$) в функционале ГЛ?

Разумно считать, что зависимость параметра разложения α вблизи критической температуры сверхпроводящего перехода T_{c0} имеет линейный характер:

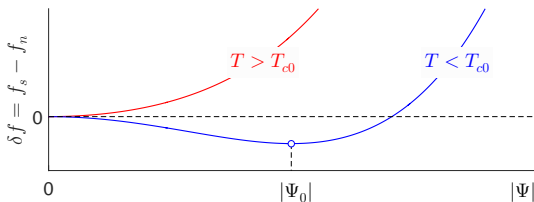
$$\alpha = \text{const} \cdot (T - T_{c0}),$$

параметр разложения β вблизи T_{c0} можно считать независящим от температуры.

Разность плотностей свободной энергии в однородном сверхпроводящем состоянии ($\Psi = \Psi_0$) и в нормальном состоянии ($\Psi = 0$) в отсутствие внешних полей и токов равна

$$\delta f \equiv f_s - f_n = \alpha |\Psi_0|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi_0|^4.$$

Если $T > T_{c0}$, то $\alpha > 0$ и минимуму δf соответствует состояние с $\Psi_0 = 0$; следовательно, появление сверхпроводимости при $T > T_{c0}$ является энергетически невыгодным. Если $T < T_{c0}$, то $\alpha < 0$ и минимум δf соответствует ненулевому значению параметра порядка: $|\Psi_0| = \sqrt{-\alpha/\beta} \propto \sqrt{1 - T/T_{c0}}$.



Далее будем использовать параметр порядка $\psi(\mathbf{r}) \equiv \Psi(\mathbf{r})/|\Psi_0|$, нормированный на равновесное значение параметра порядка $|\Psi_0|$ при данной температуре в нулевом магнитном поле:

$|\psi| = 1$ для сверхпроводящего состояния и $|\psi| = 0$ для нормального состояния.

Запишем функционал свободной энергии ГЛ, используя нормированный параметр порядка

$$\begin{aligned}
 f_s &= f_{n,0} + \alpha |\Psi_0|^2 |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi_0|^4 |\psi|^4 + \frac{|\Psi_0|^2}{4m^*} \left| \left(-i\hbar\nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{(\text{rot } \mathbf{A})^2}{8\pi} = \\
 &= \frac{\Phi_0^2}{32\pi^3 \lambda^2 \xi^2} \left(-|\psi|^2 + \frac{1}{2} |\psi|^4 + \xi^2 \left| \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 \right) + \frac{(\text{rot } \mathbf{A})^2}{8\pi},
 \end{aligned}$$

где мы ввели следующие вспомогательные размерные параметры:

$$\Phi_0 = \frac{\pi \hbar c}{|e|} = 2 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2 - \text{квант магнитного потока,}$$

$$\lambda = \sqrt{\frac{m^* c^2 \beta}{8\pi e^2 |\alpha|}} - \text{лондоновскую глубину проникновения магнитного поля,}$$

$$\xi = \sqrt{\frac{\hbar^2}{4m^* |\alpha|}} - \text{длину когерентности.}$$

Принимая во внимание температурную зависимость коэффициента $\alpha = \text{const} \cdot (T - T_{c0})$, можно заключить, что вблизи критической температуры T_{c0} для параметров λ и ξ справедливы универсальные зависимости

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{\sqrt{1 - T/T_{c0}}} \quad \text{и} \quad \xi = \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - T/T_{c0}}},$$

где λ_0 и ξ_0 — глубина проникновения магнитного поля и длина когерентности при $T = 0$.

При наличии внешнего магнитного поля $\mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r})$ удобно ввести плотность термодинамического потенциала (плотность свободной энергии Гиббса), используя преобразование Лежандра

$$g_s = f_s - \frac{\mathbf{B} \cdot \mathbf{H}_{ext}}{4\pi} =$$

$$= \frac{\Phi_0^2}{32\pi^3 \lambda^2 \xi^2} \left(-|\psi|^2 + \frac{|\psi|^4}{2} + \xi^2 \left| \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 \right) + \frac{(\text{rot } \mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\text{rot } \mathbf{A} \cdot \mathbf{H}_{ext}}{4\pi}$$

и полный термодинамический потенциал (т. н. свободная энергия Гиббса)

$$G \equiv \iiint g_s dV = \iiint \left\{ f_{n,0} + \frac{\Phi_0^2}{32\pi^3 \lambda^2 \xi^2} \left(-|\psi|^2 + \frac{|\psi|^4}{2} + \xi^2 \left| \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 \right) \right\} dV +$$

$$+ \iiint \left\{ \frac{(\text{rot } \mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\text{rot } \mathbf{A} \cdot \mathbf{H}_{ext}(\mathbf{r})}{4\pi} \right\} dV.$$

Уравнения Эйлера-Лагранжа для экстремальных решений функционала свободной энергии

$$\frac{\delta G}{\delta \psi^*} = 0 \quad \text{и} \quad \frac{\delta G}{\delta \mathbf{A}} = 0,$$

где $\delta/\delta\psi^*$ и $\delta/\delta\mathbf{A}$ – вариационные производные.

Такая процедура позволяет получить так называемые уравнения Гинзбурга-Ландау.

В. В. Шмидт, Введение в физику сверхпроводников. М.: МЦМНО. – 2000.

А. А. Абрикосов, Основы теории металлов. М.: Наука. – 1987; М.: Физматлит. – 2009.

Уравнения Гинзбурга-Ландау

Минимизируя G по ψ^* и \mathbf{A} , можно получить систему дифференциальных уравнений второго порядка с переменными коэффициентами для модуля и фазы параметра порядка

$$\xi^2 \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \psi - \psi + |\psi|^2 \psi = 0,$$
$$\text{rot rot } \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_s + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_{\text{ext}}$$

где

$$\mathbf{j}_s = \frac{c}{4\pi} \frac{|\psi|^2}{\lambda^2} \left(-\frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \theta - \mathbf{A} \right) \quad \text{и} \quad \mathbf{j}_{\text{ext}} = \frac{4\pi}{c} \text{rot } \mathbf{H}_{\text{ext}},$$

есть плотности сверхпроводящего тока и тока внешних источников; $\theta(\mathbf{r}) = \arg \psi(\mathbf{r})$ – фаза параметра порядка.

При минимизации функционала свободной энергии естественным образом возникают граничные условия. Если сверхпроводник граничит с вакуумом или диэлектриком, то граничным условием будет

$$\left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)_n \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{или} \quad i \frac{\partial}{\partial n} |\psi(\mathbf{r})| + \left(-\frac{\partial}{\partial n} \theta(\mathbf{r}) - \frac{2\pi}{\Phi_0} A_n(\mathbf{r}) \right) |\psi(\mathbf{r})| = 0,$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности сверхпроводника.

Параметр порядка Ψ – есть плавная огибающая волновых функций микроскопической теории.

Эффект Мейсснера-Оксенфельда (2)

Анализ на основе стационарных уравнений ГЛ:

Рассмотрим сверхпроводящее полупространство с плоской поверхностью в параллельном магнитном поле. Выберем параметр порядка чисто вещественным: $\arg \psi = 0$.

Если $B_0 \rightarrow 0$, то первое уравнение ГЛ

$$\xi^2 \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \psi - \psi + |\psi|^2 \psi = 0$$

допускает однородное решение $\psi = 1$.

Второе уравнение ГЛ внутри сверхпроводника

$$\text{rot rot } \mathbf{A} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_s, \quad \text{где } \mathbf{j}_s = -\frac{c}{4\pi} \frac{\mathbf{A}}{\lambda^2}$$

для лондоновской калибровки векторного потенциала ($\text{div } \mathbf{A} = 0$) принимает следующий вид

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{A} = 0 \quad \implies \quad \Delta \mathbf{B} - \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B} = 0.$$

Решение, локализованное вблизи поверхности, имеет вид

$$A_y = -A_0 \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right) \quad \text{и} \quad B_z = B_0 \exp\left(-\frac{x}{\lambda}\right).$$

Зарождение сверхпроводимости: линеаризованное уравнение Гинзбурга-Ландау

Очевидно, что на начальной стадии формирования сверхпроводимости нормированную плотность сверхпроводящего конденсата можно считать малой величиной: $|\psi|^2 \ll 1$. Это позволяет пренебречь нелинейным слагаемым $|\psi|^2\psi$ и поправками к векторному потенциалу, обусловленными сверхпроводящими токами, и перейти к так называемому линеаризованному уравнению Гинзбурга-Ландау

$$\left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\right)^2 \psi = \frac{1}{\xi^2} \psi$$

в заданном магнитном поле \mathbf{H}_{ext} , описываемом векторным потенциалом

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \iiint \frac{\mathbf{j}_{\text{ext}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'.$$

Линеаризованное уравнение Гинзбурга-Ландау для нормированного параметра порядка формально совпадает со стационарным уравнением Шрёдингера

$$\frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2 \psi = E \psi,$$

для волновой функции свободной бесспиновой частицы с энергией E , массой m^* и зарядом e при наличии магнитного поля, описываемого векторным потенциалом $\mathbf{A}(\mathbf{r})$.

Такая аналогия позволяет установить соответствие между свойствами локализованных решений задач квантовой механики и локализованных сверхпроводящих состояний.

Линеаризованное уравнение Гинзбурга-Ландау

$$\left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\right)^2 \psi = \frac{1}{\xi^2} \psi$$

представляет собой задачу Штурма-Лиувилля для определения собственных функций $\psi_n(\mathbf{r})$ и собственных значений $E_n = (1/\xi^2)_n$ дифференциального оператора

$$\hat{L} = \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\right)^2,$$

который является аналогом оператора Гамильтона для уравнения Гинзбурга-Ландау.

Тот факт, что длина когерентности зависит от температуры, означает, что каждому собственному решению $\psi_n(\mathbf{r})$ соответствует некоторая критическая температура

$$\left(\frac{1}{\xi^2}\right)_n = \frac{1}{\xi_0^2} \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) \implies T_{c,n} \equiv T_{c0} \cdot \left\{1 - \xi_0^2 \cdot (1/\xi^2)_n\right\},$$

где T_{c0} – критическая температура сверхпроводящей плёнки в нулевом поле ($B = 0$).

Разумно определить критическую температуру сверхпроводящего перехода как максимальное значение среди всех возможных $T_{c,n}$

$$T_c \equiv \max T_{c,n} = T_{c0} \cdot \left\{1 - \xi_0^2 \cdot \min (1/\xi^2)_n\right\}.$$

Подчеркнём, что критическая температура сверхпроводящего перехода определяется минимальным собственным значением уравнения типа Шрёдингера.

Макроскопический квантово-размерный эффект для сверхпроводящего конденсата

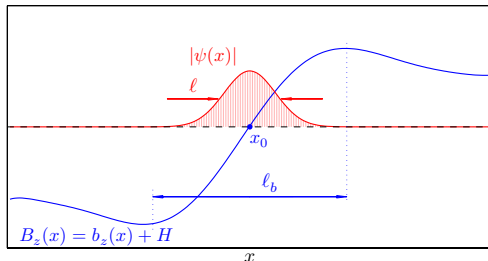
Квантовая механика:

$$E_n \sim \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{n^2}{\ell^2} \implies \min \left(\frac{2mE_n}{\hbar^2} \right) \sim \frac{1}{\ell^2},$$

где ℓ – длина локализации волновой функции.

Сопоставление квантовой механики и теории локализованной сверхпроводимости:

$$\min \left(\frac{2mE_n}{\hbar^2} \right) \equiv \frac{1}{\xi^2} \implies 1 - \frac{T}{T_{c0}} \simeq \frac{\xi_0^2}{\ell^2}.$$



Вывод: чем меньше радиус локализации параметра порядка, тем ниже критическая температура появления такого решения.

Зарождение сверхпроводимости внутри массивных сверхпроводников

Выберем ось z параллельно внешнему магнитному полю ($\mathbf{H}_{ext} = H\mathbf{e}_z$), тогда векторный потенциал можно записать в виде $\mathbf{A} = Hx\mathbf{e}_y$. Поскольку для данного выбора системы координат оператор Гамильтона

$$\hat{L} = \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 = \left(-i\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{e}_x - i\frac{\partial}{\partial y} \mathbf{e}_y - i\frac{\partial}{\partial z} \mathbf{e}_z + \frac{2\pi}{\Phi_0} Hx\mathbf{e}_y \right)^2$$

будет инвариантен относительно параллельных переносов вдоль осей y и z , соответствующие компоненты импульса являются хорошими квантовыми числами.

Следовательно, без ограничения общности решение уравнения линеаризованного уравнения Гинзбурга-Ландау можно искать в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = f(x) \cdot e^{-iky} \cdot e^{-iqz},$$

где k и q – импульсы кондендата вдоль осей y и z , соответственно.

Начнем с исследования условий появления решений, локализованных во внутренней области сверхпроводника и исчезающих при $x \rightarrow \pm\infty$, что соответствуют объёмной сверхпроводимости (bulk superconductivity). Краевая задача для функции $f(x)$ может быть записана в виде

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k \right)^2 f(x) + q^2 f(x) = \frac{1}{\xi^2} f(x) \quad \text{при условии} \quad f(x) \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0.$$

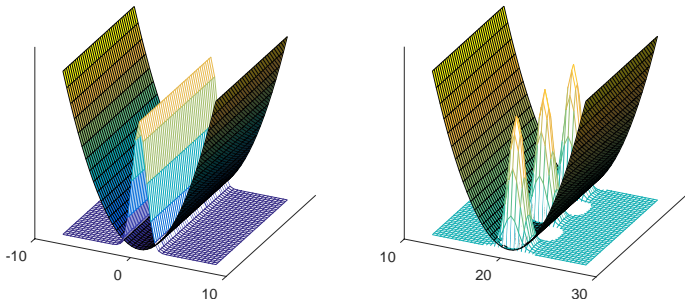
Краевая задача

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k \right)^2 f(x) = \left(\frac{1}{\xi^2} - q^2 \right) f(x) \quad \text{при условии} \quad f(x) \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0$$

есть уравнение для определения волновых функций гармонического осциллятора в эффективной параболической потенциальной яме

$$U(x) = \left(\frac{2\pi Hx}{\Phi_0} - k \right)^2 = \left(\frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^2 (x - x_0)^2,$$

центр которой сдвинут из начала координат на величину $x_0 = \Phi_0 k / (2\pi H)$.



Схематическое представление эффективного потенциала $U(x, y)$ и предполагаемого вида решения $\text{Re} \left(f(x) \cdot e^{-iky} \cdot e^{-iqz} \right)$ для $k = 0$ (слева) и $k \neq 0$ (справа) при $q = 0$

Воспользуемся известным решением задачи о линейном осцилляторе для определения критических параметров формирования сверхпроводимости в массивном сверхпроводнике. Уравнение Шрёдингера для линейного осциллятора имеет вид

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi_n(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi_n(x) = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \psi_n(x), \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Для того, чтобы второе слагаемое в левой части уравнения Шрёдингера приняло вид второго слагаемого в уравнении ГЛ

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k \right)^2 f(x) = \left(\frac{1}{\xi^2} - q^2 \right) f(x),$$

необходимо совершить сдвиг $x \rightarrow x - x_0$ и положить $\omega = (\hbar/m)(2\pi|H|/\Phi_0)$.

В этом случае собственные значения уравнения ГЛ

$$\frac{1}{\xi_0^2} \cdot \left(1 - \frac{T_{c,n}}{T_{c0}} \right) - q^2$$

будут определяться значениями нормированной энергии частицы в параболической яме

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{2m\hbar(\hbar/m)(2\pi|H|/\Phi_0)}{\hbar^2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow \frac{2\pi|H|}{\Phi_0} (2n + 1).$$

Приравнявая полученные выражения, находим связь между температурой появления состояния, соответствующего n -ому энергетическому уровню частицы в эффективной потенциальной яме, и амплитудой внешнего магнитного поля

$$1 - \frac{T_{c,n,q}}{T_{c0}} = \frac{2\pi\xi_0^2}{\Phi_0} |H| (2n + 1) + \xi_0^2 q^2.$$

Полученное соотношение

$$1 - \frac{T_{c,n,q}}{T_{c0}} = \frac{2\pi\xi_0^2}{\Phi_0} |H| (2n+1) + \xi_0^2 q^2.$$

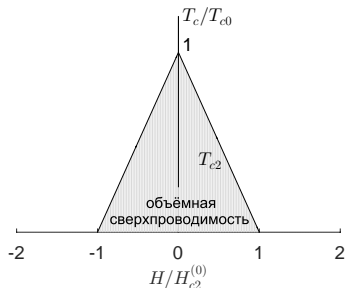
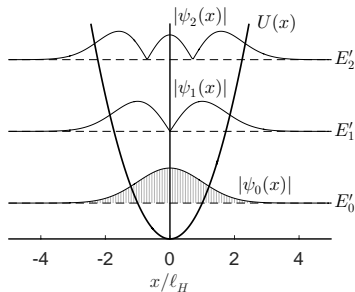
можно использовать для определения критических параметров формирования объёмной сверхпроводимости (bulk superconductivity), подставляя $n=0$ и $q=0$

$$H_{c2} = H_{c2}^{(0)} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) \quad \text{или} \quad 1 - \frac{T_{c2}}{T_{c0}} = \frac{|H|}{H_{c2}^{(0)}}.$$

где

$$H_{c2}^{(0)} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi_0^2}$$

есть так называемое второе критическое поле при нулевой температуре.



Зарождение поверхностной сверхпроводимости

Рассмотрим вопрос об определении критической температуры и критического магнитного поля, соответствующих зарождению сверхпроводимости в виде локализованного зародыша бесконечно малой амплитуды в сверхпроводнике с плоской поверхностью при $x = 0$.

Выберем ось z параллельно внешнему магнитному полю ($\mathbf{H}_{ext} = H\mathbf{e}_z$) и запишем векторный потенциал в виде $\mathbf{A} = Hxe_y$. Симметрия задачи по-прежнему позволяет искать решение линеаризованного уравнения Гинзбурга-Ландау в виде $\psi(\mathbf{r}) = f(x) \cdot e^{-iky} \cdot e^{-iqz}$. Поставленная нами задача сводится к поиску наименьшей собственной энергии краевой задачи

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k\right)^2 f(x) + q^2 f(x) = \frac{1}{\xi^2} f(x)$$

$$\text{при условии } \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=0} = 0 \quad \text{и} \quad f(x) \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0.$$

К сожалению, аналитически задача не решается, поэтому можно применять либо численные алгоритмы, либо приближённые методы решения дифференциальных уравнений.

Для решения задачи и для оценки минимальной собственной энергии уравнения Шрёдингера используем метод пробных функций

$$E_{app} = \frac{\int \psi_{app}^* \hat{L} \psi_{app} dV}{\int \psi_{app}^* \psi_{app} dV} \rightarrow \min.$$

Будем искать решение одномерной краевой задачи в виде гауссова колокола с максимумом на поверхности сверхпроводника

$$\psi(x, y, z) = e^{-x^2/2a^2} \cdot e^{-iky} \cdot e^{-iqz},$$

где a – характерная размер зародыша сверхпроводящей фазы. Таким образом, мы получили задачу поиска минимума собственной энергии на классе функций с тремя свободными параметрами k , q и a .

Несложно получить соотношения для интегралов на единицу площади поверхности

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_1 &\equiv \int_0^\infty \psi^*(x) \hat{L} \psi(x) dx = \int_0^\infty e^{-x^2/2a^2} \left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k \right)^2 + q^2 \right\} e^{-x^2/2a^2} dx = \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{4a} + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} H \right)^2 \frac{\sqrt{\pi}a^3}{4} - 2k \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} H \right) \frac{a^2}{2} + k^2 \frac{\sqrt{\pi}a}{2} + q^2 \frac{\sqrt{\pi}a}{2} \end{aligned}$$

и

$$\mathcal{I}_2 \equiv \int_0^\infty \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_0^\infty e^{-x^2/a^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}a}{2}.$$

Мы используем следующие табличные интегралы

$$\int_0^\infty e^{-x^2/a^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}a}{2}, \quad \int_0^\infty x e^{-x^2/a^2} dx = \frac{a^2}{2} \quad \text{и} \quad \int_0^\infty x^2 e^{-x^2/a^2} dx = \frac{\sqrt{\pi}a^3}{4}.$$

Оценка собственной энергии на рассматриваемом классе функций

$$E(k, q, a) = \frac{\mathcal{I}_1}{\mathcal{I}_2} = \frac{\sqrt{\pi}/(4a) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} H\right)^2 \sqrt{\pi} a^3/4 - 2k \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} H\right) a^2/2 + k^2 \sqrt{\pi} a/2 + q^2 \sqrt{\pi} a/2}{\sqrt{\pi} a/2}.$$

Для удобства введем так называемую магнитную длину

$$\ell_H \equiv \sqrt{\frac{\Phi_0}{2\pi|H|}}$$

и перепишем выражение для оценки собственной энергии в компактном виде

$$E(k, q, a) = \frac{1}{2a^2} + \frac{1}{\ell_H^4} \frac{a^2}{2} - \frac{ka}{\ell_H^2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} + k^2 + q^2.$$

Минимум функции соответствует параметрам

$$k_{min} = \frac{1}{\ell_H} \sqrt[4]{\frac{1}{\pi(\pi-2)}}, \quad q_{min} = 0 \quad \text{и} \quad a_{min} = \ell_H \sqrt[4]{\frac{\pi}{(\pi-2)}},$$

при этом минимальное значение функции равно

$$E_{min} \equiv E(k_{min}, q_{min}, a_{min}) = \frac{\sqrt{(\pi-2)/\pi}}{\ell_H^2} \simeq \frac{0.603}{\ell_H^2}.$$

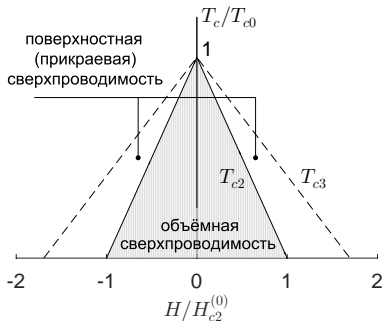
Точное численное решение задачи даёт коэффициент 0.590, который менее, чем на 2.5%, отличается от полученного нами приближённого решения.

Возвращаясь к связи минимальной собственной энергией $E_{min} \simeq 0.590/\ell_H^2$ и минимальным собственным значением $\xi^{-2} = \xi_0^{-2} (1 - T/T_{c0})$, получаем соотношение между температурой и внешним магнитным полем на линии фазового перехода

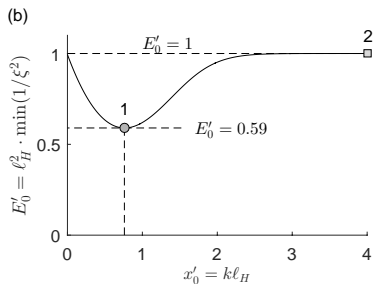
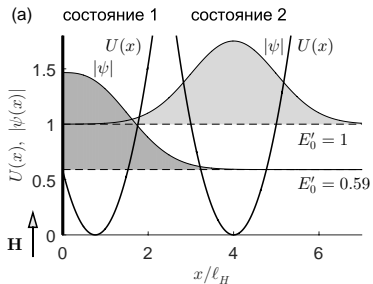
$$1 - \frac{T}{T_{c0}} \simeq 0.590 \frac{2\pi\xi_0^2}{\Phi_0} |H|.$$

Критические параметры формирования поверхностной сверхпроводимости (surface superconductivity)

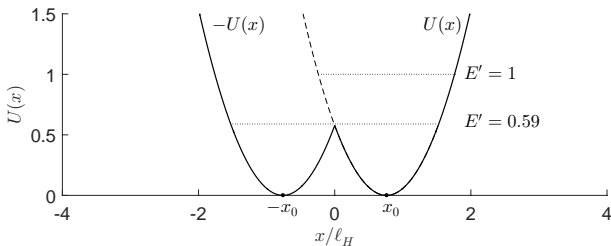
$$H_{c3} = 1.695 \cdot H_{c2}^{(0)} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) \quad \text{или} \quad 1 - \frac{T_{c3}}{T_{c0}} = 0.590 \cdot \frac{|H|}{H_{c2}^{(0)}}.$$



Результаты численного моделирования



Эффективный двухъямный потенциал



Зарождение прикраевой сверхпроводимости

Перейдем к обсуждению вопроса о зарождении локализованной сверхпроводимости в микро- и наноструктурах в *перпендикулярном* магнитном поле. Предположим, что плоскость тонкопленочной сверхпроводящей структуры совпадает с плоскостью (x, y) и её край располагается при $x = 0$. Запишем внешнее магнитное поле и векторный потенциал в виде $\mathbf{H}_{ext} = H\mathbf{e}_z$ и $\mathbf{A} = Hx\mathbf{e}_y$. Легко убедиться в том, что симметрия задачи позволяет искать решение уравнения ГЛ в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = f(x) \cdot e^{-iky} \cdot (Ae^{-iqz} + Be^{iqz}) \quad \text{или} \quad \psi(\mathbf{r}) = f(x) \cdot e^{-iky} \cdot (A' \cos qz + B' \sin qz).$$

Следовательно, формирование локализованной сверхпроводимости вблизи края тонкой плёнки толщины D в перпендикулярном магнитном поле будет описываться краевой задачей

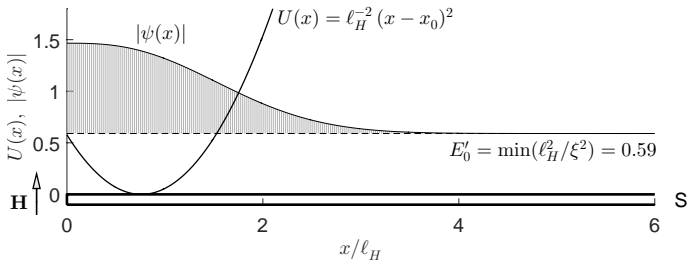
$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} Hx - k\right)^2 f(x) + q^2 f(x) = \frac{1}{\xi^2} f(x),$$

$$\text{при условии} \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad \psi(x, y, z) \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0 \quad \text{и} \quad \left. \frac{\partial \psi}{\partial z} \right|_{z=\pm D/2} = 0.$$

Очевидно, что однородное по толщине плёнки сверхпроводящее состояние ($q = 0$) удовлетворяет как дополнительным граничным условиями $\partial\psi/\partial z = 0$ на верхней и нижней поверхностях плёнки ($z = \pm D/2$), так и минимуму собственной энергии $1/\xi^2$. При условии $q = 0$ задача о прикраевой сверхпроводимости (edge superconductivity) в тонкой плёнке в перпендикулярном магнитном поле, совпадает с задачей о поверхностной сверхпроводимости в параллельном магнитном поле.

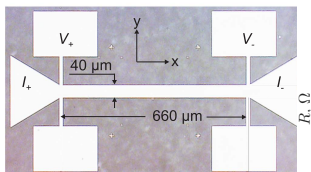
Формальное сходство задач о поверхностной и прикраевой сверхпроводимости означает, что критическое поле и критическая температура зарождения прикраевой сверхпроводимости будет описываться одними и теми же соотношениями

$$H_{c3} = 1.695 \cdot H_{c2}^{(0)} \cdot \left(1 - \frac{T}{T_{c0}}\right) \quad \text{или} \quad 1 - \frac{T_{c3}}{T_{c0}} = 0.590 \cdot \frac{|H|}{H_{c2}^{(0)}}.$$

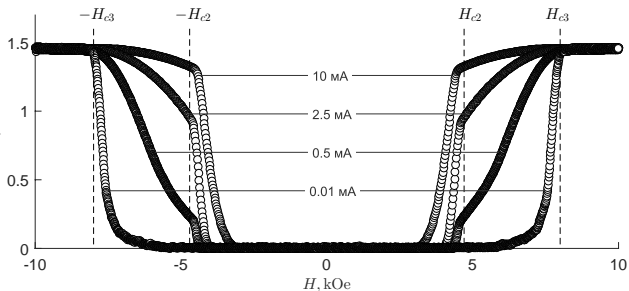


Прикраевая сверхпроводимость: полевые зависимости электрического сопротивления

Фотография Nb микроустройства



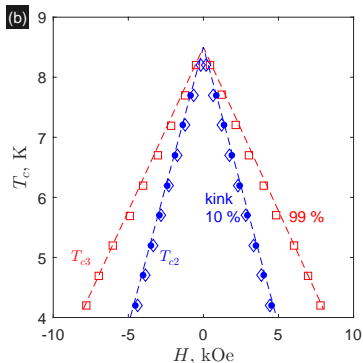
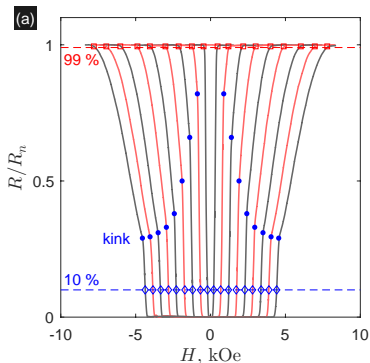
Транспортные измерения при 4.2 К



Наблюдается смещение резистивного перехода в область больших полей по мере уменьшения измерительного тока – свидетельство перехода сверхтока сверхпроводящими прикраевыми каналами.

Werner, Aladyshkin, Nefedov, Putilov *et al.* *Edge superconductivity in Nb thin film microbridges revealed by electric transport measurements and visualized by scanning laser microscopy // Superconductor Science and Technology*, vol. 26, 095011 (2013).

Восстановленная структура фазового пространства $H - T$



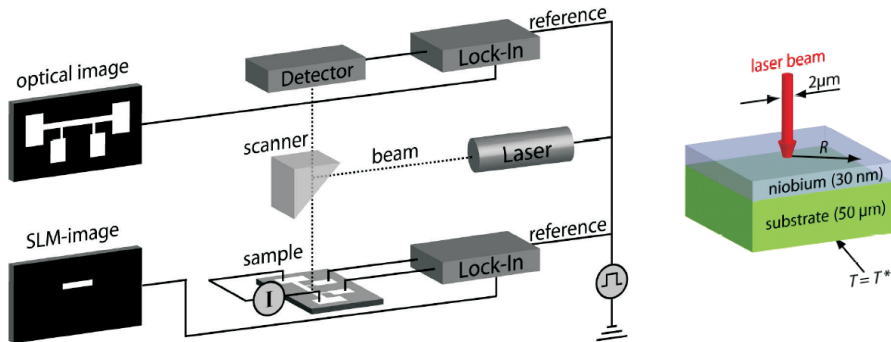
Наклоны линий фазового перехода отличаются в 1.7 раза – свидетельство формирования объёмной и прикраевой сверхпроводимости.

Werner, Aladyshkin, Nefedov, Putilov *et al.* *Edge superconductivity in Nb thin film microbridges revealed by electric transport measurements and visualized by scanning laser microscopy* // *Supercond. Sci. Technol.*, vol. 26, 095011 (2013).

Низкотемпературная сканирующая лазерная микроскопия

англ. low-temperature scanning laser microscopy (LT-SLM)

Фактически метод представляет собой пример сканирующей тепловой микроскопии:

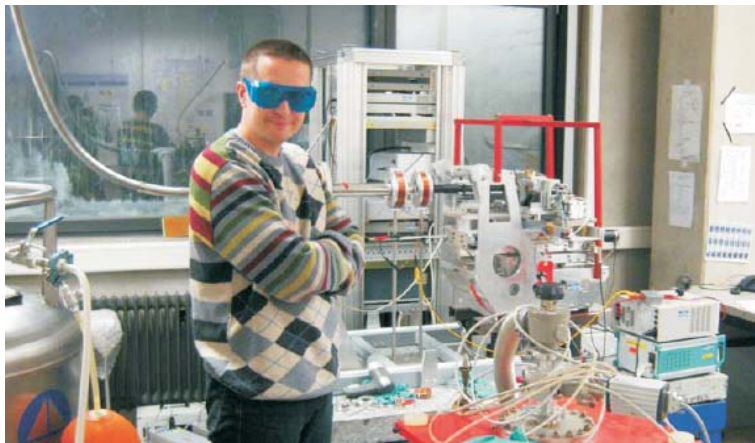


This figure was taken from J. Fritzsche, *Superconductivity controlled by inhomogeneous fields generated by magnetic domains* // PhD thesis, Katholieke Universiteit Leuven (2008).

Аналогичным образом можно проводить исследования локальных сверхпроводящих свойств методом низкотемпературной сканирующей электронной микроскопии с локальным нагревом образца от электронного луча

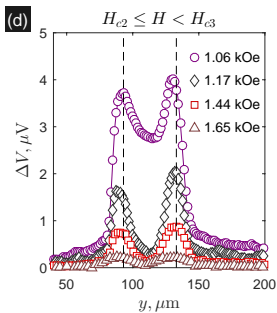
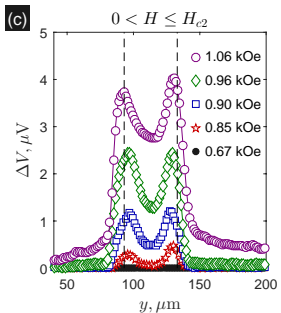
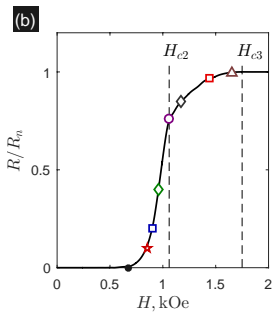
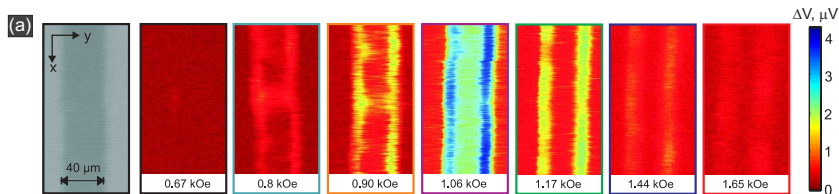
Идея: измерение индуцированного лазерным лучом падения напряжения на мостике ΔV в зависимости от координат центра пучка x, y

Условия измерений: температура – 3.5 до 9 К, магнитное поле – до 2 кЭ



LT-SLM установка в группе проф. Д. Кёлле и проф. Р. Кляйнера (University of Tuebingen)

Визуализация прикраевой сверхпроводимости методом сканирующей лазерной микроскопии

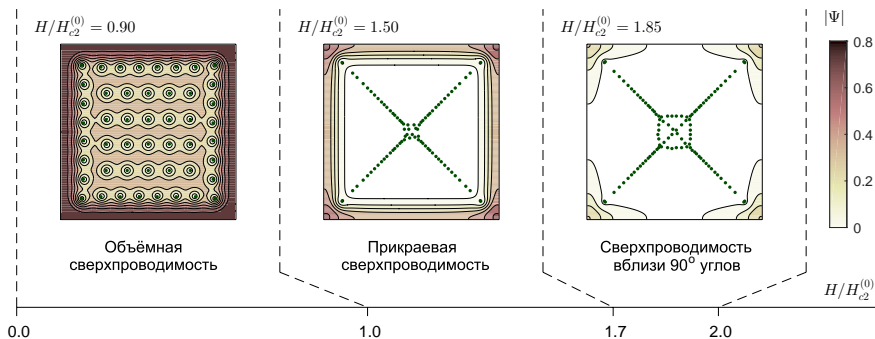


Werner, Aladyskhin et al., *Edge superconductivity in Nb thin film microbridges revealed by electric transport measurements and visualized by scanning laser microscopy* // Supercond. Sci. Technol., vol. 26, 095011 (2013).

Мезоскопическая сверхпроводимость

Мезоскопические сверхпроводники – это сверхпроводящие образцы малых размеров (порядка нескольких длин когерентности). В этом случае краевые эффекты будут особенно сильны.

1. В мезоскопических сверхпроводниках расширяется область существования сверхпроводимости на плоскости $H - T$ по сравнению с массивными сверхпроводниками:

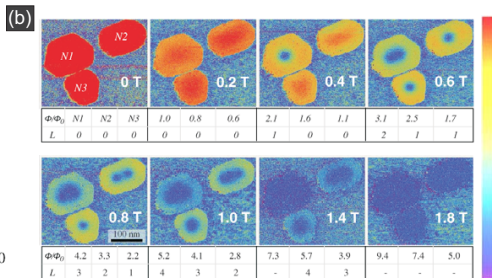
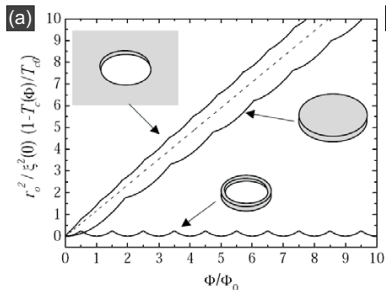


Равновесные распределения $|\psi(x, y)|$ в сверхпроводящем образце квадратной формы ($20\xi_0 \times 20\xi_0$) во внешнем магнитном поле при $T = 0$

А. Ю. Аладышкин, *Эффекты размерного квантования и локализованной сверхпроводимости в гибридных металлических наноструктурах*. Дисс. соиск. ... д-ра физ.-мат. наук (2020).

Мезоскопическая сверхпроводимость

- В мезоскопических сверхпроводниках зависимость $T_c(H)$ может быть осцилляторной (так называемые осцилляции Литтла-Паркса) и быть связанной с переходами между квантованными вихревыми состояниями.
- В мезоскопических сверхпроводниках могут существовать многоквантовые сверхпроводящие вихри и вихревые решётки негексагональной симметрии.



J. Berger, J. Rubinstein (Eds). *Connectivity and superconductivity*. Springer. Lecture notes in physics. – 2000.

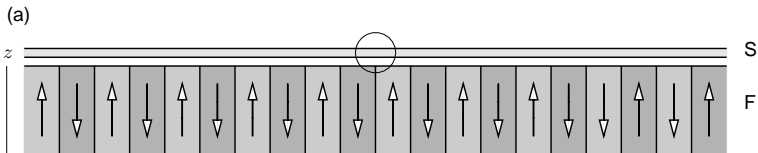
T. Cren, L. Serrier-Garcia, F. Debontridder, D. Roditchev. *Vortex fusion and giant vortex states in confined superconducting condensates*. Phys. Rev. Lett., vol. 107, 097202 (2011).

Доменная сверхпроводимость

Обсудим вопрос о зарождении локализованной сверхпроводимости в тонкой сверхпроводящей плёнке, неограниченной в латеральном направлении, в неоднородном магнитном поле, создаваемом доменной структурой в ферромагнитной плёнке или кристалле.

Для простоты предположим, что, по-первых, толщина ферромагнетика D_f существенно превышает ширину магнитных доменов L и, во-вторых, намагниченность ферромагнетика $\mathbf{M} = M_0 f(x) \mathbf{e}_z$ ориентирована перпендикулярно поверхности, где M_0 – величина остаточной намагниченности. В этом случае z -компонента магнитного поля вблизи поверхности ферромагнетика и внутри сверхпроводящей плёнки будет иметь вид меандра с амплитудой $B_0 = 2\pi M_0$. Если ширина доменов намного больше характерной длины локализации параметра порядка в однородном магнитном поле $\ell_B = \sqrt{\Phi_0/(2\pi B_0)}$, то зарождение сверхпроводимости в областях скачкообразного изменения магнитного поля (т. е. вблизи доменных стенок) будет происходить практически независимо. Это позволяет перейти к рассмотрению процесса зарождения локализованной сверхпроводимости вблизи уединённой доменной стенки (domain-wall superconductivity) в неоднородном магнитном поле в виде ступеньки:

$$B_z(x) = B_0 \operatorname{sgn} x \quad \text{и} \quad A_y(x) = B_0 |x|$$



Запишем векторный потенциал в виде $\mathbf{A} = B_0|x| \mathbf{e}_y$ и будем искать решение линеаризованного уравнения ГЛ в виде $\psi(\mathbf{r}) = f(x) e^{-iky}$, при этом функция $f(x)$ должна быть решением уравнения

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} B_0|x| - k \right)^2 f(x) = \frac{1}{\xi^2} f(x) \quad \text{при условии} \quad f(x) \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0.$$

Мы уже учли, что наибольшей критической температуре соответствует однородное по толщине распределение параметра порядка ($q = 0$).

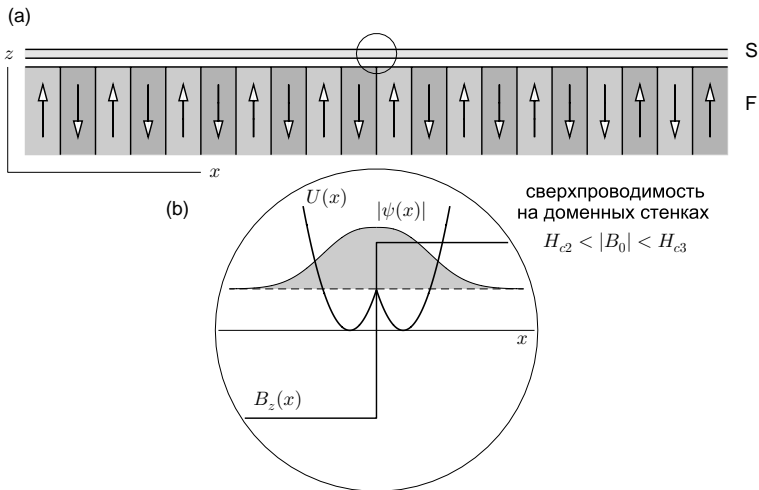
Легко видеть, что краевая задача не изменяет вида при инверсии ($x \rightarrow -x$), следовательно, функция $f(x)$ должна быть чётной функцией x . Поскольку собственная функция основного состояния для одномерных задач квантовой механики не может иметь нулей, производная параметра порядка при $x = 0$ должна обращаться в нуль. Эти соображения позволяют перейти к задаче, определённой для $x \geq 0$

$$-f''(x) + \left(\frac{2\pi}{\Phi_0} B_0 x - k \right)^2 f(x) = \frac{1}{\xi^2} f(x)$$

при условии $\frac{df}{dx} \Big|_{x=0} = 0$ и $f(x) \Big|_{x \rightarrow \infty} = 0$.

Очевидно, что эта задача совпадает с формулировкой задачи о зарождении прикраевой сверхпроводимости в тонких сверхпроводящих плёнках, если вместо внешнего поля H подставить амплитуду z -компоненты «встроенного» магнитного поля B_0 и положить $q = 0$.

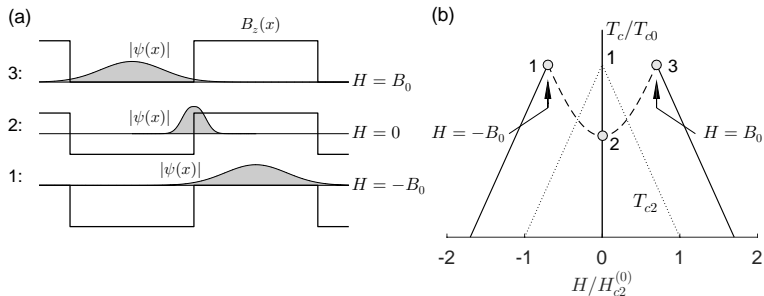
domain-wall superconductivity (DWS)



A. I. Buzdin, A. S. Mel'nikov, *Domain wall superconductivity in ferromagnetic superconductors*. Phys. Rev. B., v. 67, 020503 (2003).

A. Yu. Aladyshkin, A. I. Buzdin, A. A. Fraerman, A. S. Mel'nikov et al., *Domain-wall superconductivity in hybrid superconductor-ferromagnet structures*. Phys. Rev. B., v. 68, 184508 (2003).

Локализованная и делокализованная сверхпроводимость в тонких плёнках в поле магнитных доменов



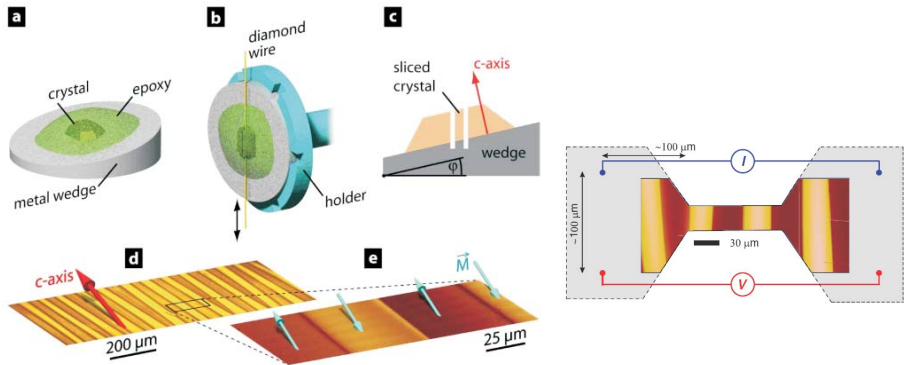
При наличии магнитного внешнего поля эквивалентность задач о доменной и прикраевой сверхпроводимости нарушается. Можно показать, что при условии $|H| \leq B_0$ энергетически выгодным является решение с максимумом параметра порядка вблизи доменной стенки.

Приближенное выражение для зависимости $T_c^{DWS}(H)$ для тонкой сверхпроводящей плёнки в знакопеременном поле вида $B_z(x) = B_0 \operatorname{sgn} x + H$ при $|H| < B_0$

$$1 - \frac{T_c^{DWS}}{T_{c0}} \simeq \frac{B_0}{H_{c2}^{(0)}} \cdot \left\{ 0.59 - 0.70 \left(\frac{H}{B_0} \right)^2 + 0.09 \left(\frac{H}{B_0} \right)^4 \right\}.$$

Магнитные текстуры для визуализации доменной и компенсированной сверхпроводимости

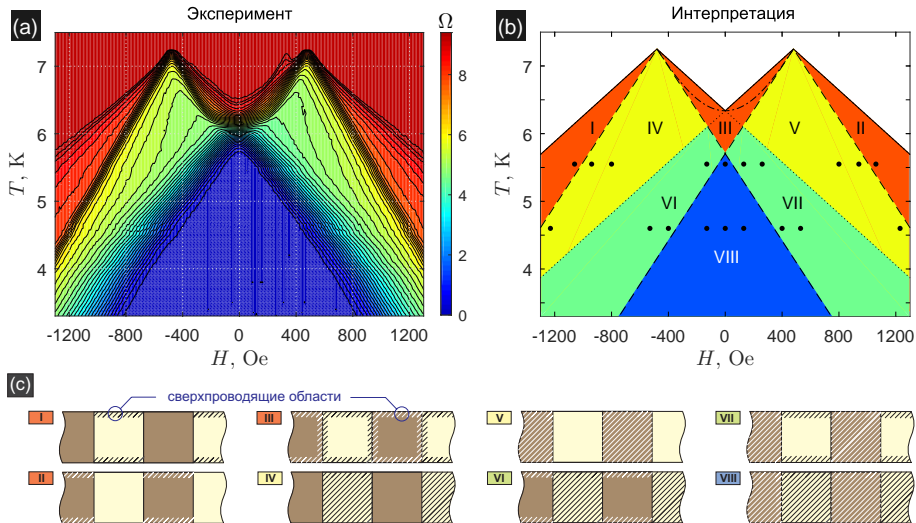
тонкие сверхпроводящие пленки Pb на ферромагнитном кристалле $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$



Карты распределения намагниченности получены методом магнитно-силовой микроскопии

This figure was taken from J. Fritzsche, Superconductivity controlled by inhomogeneous fields generated by magnetic domains // PhD thesis, Katholieke Universiteit Leuven (2008).

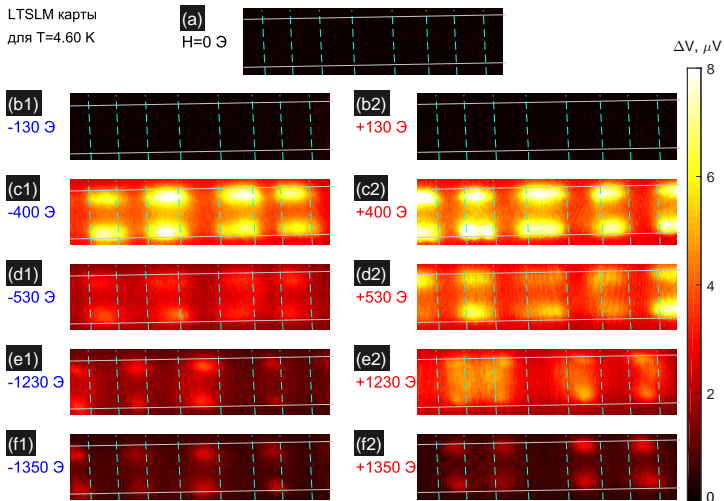
Транспортные измерения: \perp – ориентация



Aladyshkin, Fritzsche *et al.*, *Crossover between different regimes of inhomogeneous superconductivity in planar superconductor-ferromagnet hybrids* // *Physical Review B*, vol. 84, 094523 (2011).

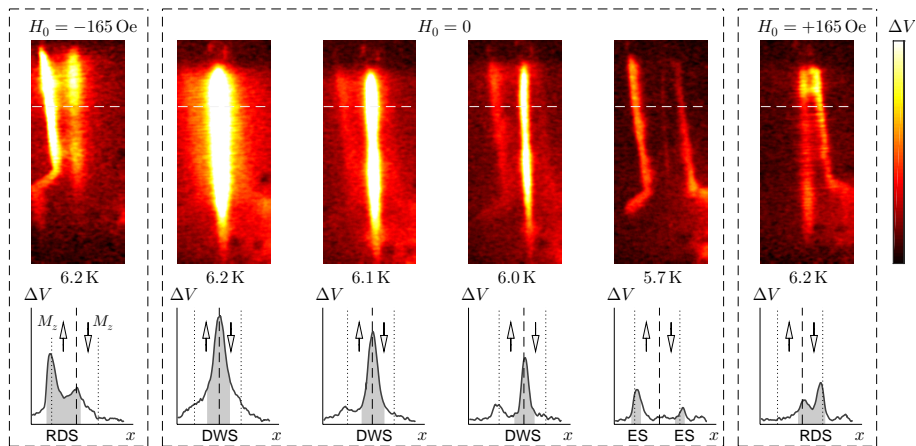
Визуализация компенсированной сверхпроводимости методом сканирующей лазерной микроскопии

LTSLM карты
для $T=4.60$ К



Aladyshkin, Fritzsche *et al.*, *Crossover between different regimes of inhomogeneous superconductivity in planar superconductor-ferromagnet hybrids* // *Physical Review B*, vol. 84, 094523 (2011).

Визуализация доменной и компенсированной сверхпроводимости методом сканирующей лазерной микроскопии

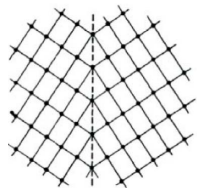


Werner, Aladyshkin et al., *Domain-wall and reverse-domain superconducting states of a Pb thin-film bridge on a ferromagnetic BaFe₁₂O₁₉ single crystal* // Physical Review B, vol. 84, 020505 (2011).

Сверхпроводимость на плоскостях двойникования

Наличие в монокристаллических сверхпроводниках протяжённых дефектов типа плоскостей двойникования (twin boundaries), нарушающих периодичность решётки на микроскопических масштабах, можно описать добавлением в функционал ГЛ поверхностного потенциала

$$U(x) = -\gamma |\Psi(x)|^2 \delta(x)$$



Подставим это выражение в плотность свободной энергии

$$\mathcal{G}_s^* = \frac{\Phi_0^2}{32\pi^3 \lambda^2 \xi^2} \left(-|\psi|^2 + \frac{|\psi|^4}{2} + \xi^2 \left| \left(-i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right) \psi \right|^2 - \gamma \frac{4m^* \xi^2}{\hbar^2} |\psi|^2 \delta(x) \right) + \frac{(\text{rot } \mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\text{rot } \mathbf{A} \cdot \mathbf{H}_{\text{ext}}}{4\pi}.$$

Здесь параметр $\gamma > 0$ учитывает локальное изменение свободной энергии вблизи плоскости двойникования ($x = 0$) и, тем самым, позволяет описать стимуляцию локализованной сверхпроводимости.

Далее для простоты рассмотрим появление локализованной сверхпроводимости в отсутствие магнитного поля ($\mathbf{A} = 0$), тогда полная свободная энергия будет равна

$$G^* = \iiint \frac{\Phi_0^2}{32\pi^3 \lambda^2 \xi^2} \left(-|\psi|^2 + \frac{|\psi|^4}{2} + \xi^2 \left| -i\nabla \psi \right|^2 - \gamma \frac{4m^* \xi^2}{\hbar^2} |\psi|^2 \delta(x) \right).$$

Минимизация модифицированного функционала свободной энергии по $\psi^*(\mathbf{r})$ приводит к краевой задаче для определения критической температуры

$$-f''(x) + k^2 f(x) - \frac{4m^*\gamma}{\hbar^2} \delta(x) f(x) = \frac{1}{\xi^2} f(x) \quad \text{при условии} \quad f(x) \Big|_{x \rightarrow \pm\infty} = 0.$$

Очевидно, что решением уравнения

$$f''(x) - k^2 f(x) + \frac{1}{\xi^2} f(x) = -\frac{4m^*\gamma}{\hbar^2} \delta(x) f(x).$$

является функция $f(x) = A e^{-\varkappa|x|}$, где A – неизвестная постоянная, $\varkappa \equiv \sqrt{k^2 - 1/\xi^2}$. Поскольку скачок производной $f'(x)$ при $x = 0$ с одной стороны определяется декрементом затухания волновой функции, с другой стороны – правой частью уравнения, получаем

$$f' \Big|_{x \rightarrow 0^+} - f' \Big|_{x \rightarrow 0^-} = -2A\varkappa = -\frac{4m^*\gamma}{\hbar^2},$$

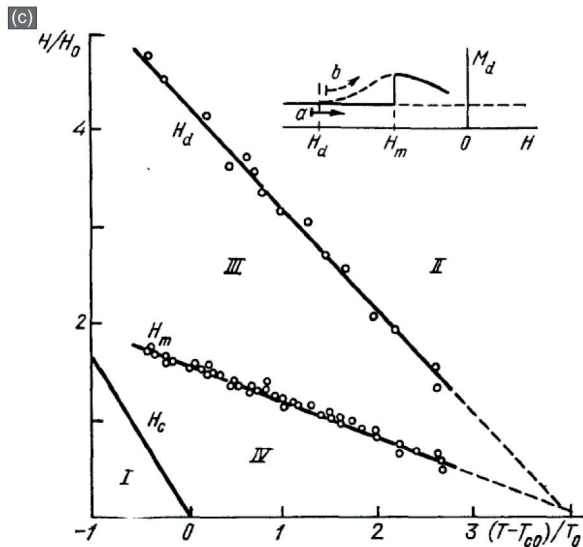
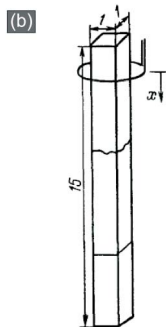
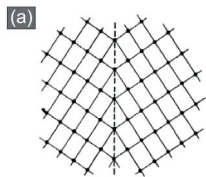
откуда следует $\varkappa = 2m^*\gamma/\hbar^2$.

Таким образом, с одной стороны $\varkappa^2 = k^2 - 1/\xi^2$, с другой стороны – $\varkappa^2 = (2m^*\gamma/\hbar^2)^2$. Отсюда следует, что

$$\frac{1}{\xi_0^2} \left(1 - \frac{T_c}{T_{c0}} \right) = k^2 - \left(\frac{2m^*\gamma}{\hbar^2} \right)^2.$$

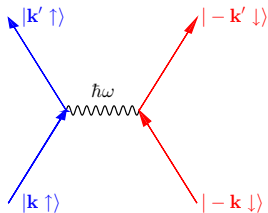
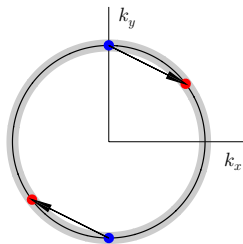
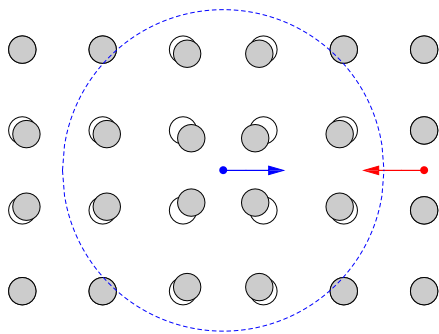
Поскольку наибольшей критической температуре соответствует состояние с $k = 0$, получаем, что критическая температура локализованного решения в нулевом магнитном поле может превышать критическую температуру объёмной сверхпроводимости

$$\frac{T_c}{T_{c0}} = 1 + \xi_0^2 \left(\frac{2m^*\gamma}{\hbar^2} \right)^2 > 1.$$



Хлюстиков, Буздин *Локализованная сверхпроводимость в двойниковых металлических кристаллах* // *Успехи физических наук*, т. 155, с. 47-88 (1988).

Поляризация решётки и притяжение электронов



$$\delta \hat{W}_{\text{пот}} = V_{k,k'} \hat{a}_{k\uparrow}^+ \hat{a}_{-k\downarrow}^+ \hat{a}_{-k'\downarrow} \hat{a}_{k'\uparrow}$$

Куперовские пары: метафорическое представление

Omnis comparatio claudicat (лат.) – всякое сравнение хромает



Волновая функция сверхпроводника в модели Бардина-Купера-Шриффера (БКШ)

Запишем пробную волновую функцию системы попарно-коррелированных электронов в виде произведения парных состояний $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ с противоположными импульсами и спинами

$$|BCS\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \right) |0\rangle.$$

где $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}^+$ и $\hat{a}_{\mathbf{k},\sigma}$ – стандартные операторы рождения и уничтожения электрона.

Волновая функция $|BCS\rangle$ описывает состояние системы с попарно-коррелированными электронными состояниями с неопределённым числом частиц.

Факторы когерентности $u_{\mathbf{k}}$ и $v_{\mathbf{k}}$ характеризуют вероятность того, что парное состояние двух электронов с противоположными импульсами \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ и противоположными спинами свободно или заполнено. Очевидно, что

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad \text{для произвольного } \mathbf{k}.$$

Введём фазы факторов когерентности $\arg u_{\mathbf{k}} = 0$ и $\arg v_{\mathbf{k}} = \theta$, при этом θ не зависит от \mathbf{k}

$$|BCS_{\theta}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(|u_{\mathbf{k}}| + |v_{\mathbf{k}}| e^{i\theta} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \right) |0\rangle.$$

Bardeen, Cooper and Schrieffer, *Phys. Rev.*, vol. 108, 1175 (1957)

де Жен, *Сверхпроводимость металлов и сплавов*. Москва: Мир (1968)

Энергия основного состояния при $T = 0$

Рассмотрим гамильтониан системы с переменным числом пар и фиксированным химическим потенциалом μ

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{кин}} + \hat{W}_{\text{пот}} - \mu \hat{N} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \left\{ \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \right) - \mu \right\} \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}, \sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \hat{a}_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \hat{a}_{-\mathbf{k}'\downarrow} \hat{a}_{\mathbf{k}'\uparrow},$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* - \mu$ — это энергия электрона, отсчитываемая от уровня Ферми.

Вычислим среднюю энергию системы в состоянии с волновой функцией $|BCS\rangle$ или $|BCS_{\theta}\rangle$

$$\begin{aligned} \bar{E} &= \langle BCS^* | \hat{H} | BCS \rangle = \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} = \\ &= \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 - \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \cdot \left(- \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \right) = \sum_{\mathbf{k}} 2\varepsilon_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 - \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*, \end{aligned}$$

Параметр

$$\Delta_{\mathbf{k}} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |u_{\mathbf{k}'}| |v_{\mathbf{k}'}| e^{i\theta}$$

часто называют потенциалом спаривания. Этот параметр характеризует величину энергетической щели в спектре квазичастичных возбуждений, а также является параметром порядка феноменологической теории Гинзбурга-Ландау

$$\Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = |\Delta_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})| e^{i\theta(\mathbf{r})} \iff \psi(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})| e^{i\theta(\mathbf{r})}.$$

Равновесные факторы когерентности

Запишем среднюю энергию сверхпроводника в виде комбинации попарно-коррелированных состояний в виде

$$\bar{E} = \sum_k 2\varepsilon_k |v_k|^2 + \sum_{k,k'} V_{k,k'} |u_k| |v_k| |u_{k'}| |v_{k'}|.$$

Принимая во внимание условие нормировки $|u_k| = \sqrt{1 - |v_k|^2}$ выразим среднюю энергию через $|v_k|$

$$\bar{E} = \sum_k 2\varepsilon_k |v_k|^2 + \sum_k \sum_{k'} V_{k,k'} \sqrt{1 - |v_k|^2} |v_k| \sqrt{1 - |v_{k'}|^2} |v_{k'}|.$$

Условие $\partial \bar{E} / \partial |v_q| = 0$ позволяет получить уравнение для определения оптимального распределения v_q^2 , соответствующего минимуму средней полной энергии, где \mathbf{q} – произвольный импульс. При дифференцировании двойной суммы следует учесть, что выбранное нами значение может входить как в сумму по \mathbf{k} , так и в сумму по \mathbf{k}' , поэтому

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{E}}{\partial |v_q|} = & 4\varepsilon_q |v_q| + \sum_{k'} V_{q,k'} \left(\frac{1}{2} \frac{(-2|v_q|)}{\sqrt{1 - |v_q|^2}} |v_q| + \sqrt{1 - |v_q|^2} \right) \sqrt{1 - |v_{k'}|^2} |v_{k'}| + \\ & + \sum_k V_{k,q} \sqrt{1 - |v_k|^2} |v_k| \left(\frac{1}{2} \frac{(-2|v_q|)}{\sqrt{1 - |v_q|^2}} |v_q| + \sqrt{1 - |v_q|^2} \right) = 0. \end{aligned}$$

После преобразований получаем уравнение для определения равновесного фактора когерентности v_q

$$4\varepsilon_q |v_q| + 2 \left(\frac{1 - 2|v_q|^2}{\sqrt{1 - |v_q|^2}} \right) \sum_{k'} v_{q,k'} |u_{k'}| |v_{k'}| = 4\varepsilon_q |v_q| - 2 \left(\frac{1 - 2|v_q|^2}{\sqrt{1 - |v_q|^2}} \right) |\Delta_q| = 0,$$

которое приводится к виду биквадратного уравнения (замена обозначений $q \rightarrow k$ для удобства)

$$|v_k|^4 - |v_k|^2 + \frac{|\Delta_k|^2}{(\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2)} = 0.$$

Общее решение имеет вид

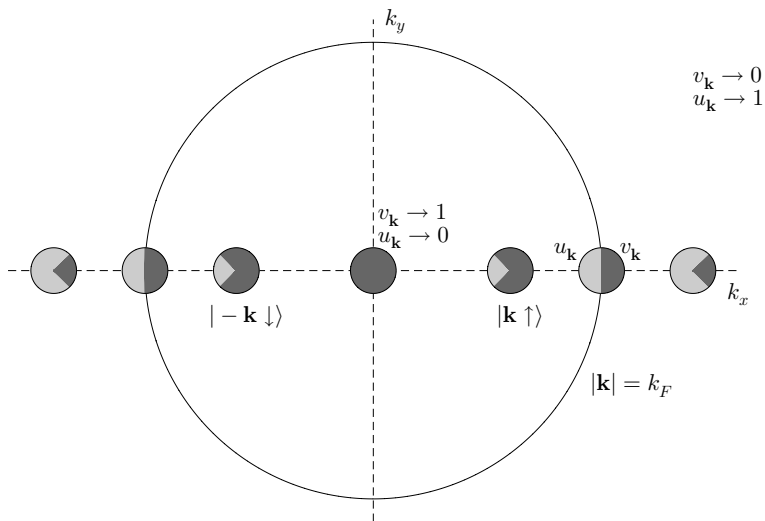
$$|v_k|^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{|\Delta_k|^2}{(\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2)}} \right) = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\varepsilon_k}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}} \right).$$

Учитывая, что $|v_k|^2 \rightarrow 0$ при $\varepsilon_k \rightarrow \infty$, находим равновесные факторы когерентности

$$\begin{pmatrix} |v_k|^2 \\ |u_k|^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{\varepsilon_k}{E_k} \right) = \frac{1}{2} \left(1 \mp \frac{(\hbar^2 k^2 / 2m^* - \mu)}{\sqrt{(\hbar^2 k^2 / 2m^* - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}} \right),$$

где $E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}$ – энергия квазичастичных возбуждений. **Как это понимать?**

Схематическое представление частично-заполненных и частично-свободных электронных состояний в однородном сверхпроводнике в состоянии термодинамического равновесия:



Энергия квазичастичных возбуждений

Рассмотрим произвольную пару состояний $(\mathbf{q} \uparrow, -\mathbf{q} \downarrow)$ в импульсном пространстве, находящегося в основном состоянии при $T = 0$. Пользуясь линейностью операции суммирования, выделим вклад этого состояния в средней энергии сверхпроводника

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \sum_k 2\varepsilon_k |v_k|^2 + \sum_k \sum_{k'} V_{k,k'} u_k v_k^* u_{k'}^* v_{k'} = \sum_{k \neq q} 2\varepsilon_k |v_k|^2 + 2\varepsilon_q |v_q|^2 + \\ &+ \sum_{k \neq q} \sum_{k' \neq q} V_{k,k'} u_k v_k^* u_{k'}^* v_{k'} + \sum_{k' \neq q} V_{q,k'} u_q v_q^* u_{k'}^* v_{k'} + \sum_{k \neq q} V_{k,q} u_k v_k^* u_q^* v_q + V_{q,q} u_q v_q^* u_q^* v_q \simeq \\ &\simeq \text{фон} + 2\varepsilon_q |v_q|^2 - 2\Delta_q u_q v_q^*.\end{aligned}$$

1. Если парное состояние $(\mathbf{q} \uparrow, -\mathbf{q} \downarrow)$ частично заполнено и частично свободно равновесным образом, то полная средняя энергия равна

$$\bar{E}_0 \simeq \text{фон} + 2\varepsilon_q |v_q|^2 - 2\Delta_q u_q v_q^* \simeq \text{фон} + \varepsilon_q - E_q, \quad \text{при этом} \quad \varepsilon_q - E_q < 0.$$

2. Если состояние $|\mathbf{q} \uparrow\rangle$ заполнено, а состояние $|\mathbf{q} \downarrow\rangle$ – свободно (или наоборот), то полная средняя энергия равна

$$\bar{E}_1 \simeq \text{фон} + \varepsilon_q (1 + 0) - 0 \simeq \text{фон} + \varepsilon_q.$$

3. Изменение средней энергии системы попарно-коррелированных электронов из-за неравного заполнения одного из парных состояний равно $\bar{E}_1 - \bar{E}_0 = E_q$.

Энергия квазичастичных возбуждений и плотность состояний

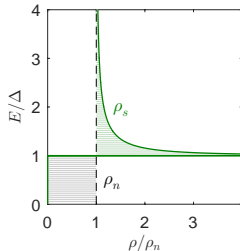
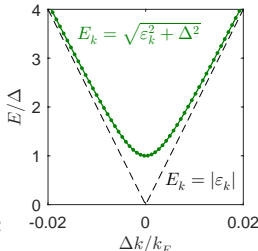
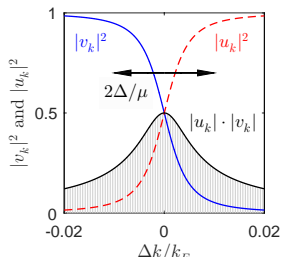
Равновесные факторы когерентности

$$\begin{pmatrix} |v_k|^2 \\ |u_k|^2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \mp \frac{(\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* - \mu)}{\sqrt{(\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* - \mu)^2 + |\Delta_k|^2}} \\ 1 \mp \frac{\sqrt{E_k^2 - |\Delta_k|^2}}{E_k} \end{pmatrix},$$

где $E_k = \sqrt{\varepsilon_k^2 + |\Delta_k|^2}$ – энергия квазичастичных возбуждений.

Плотность состояний квазичастичных возбуждений (density of states, DOS)

$$\rho_s(E) = \rho_n \cdot \begin{cases} 0 & E \leq |\Delta| \\ |E| / \sqrt{E^2 - |\Delta|^2} & E > |\Delta| \end{cases} = \rho_n \cdot \text{Re} \left(\frac{|E|}{\sqrt{E^2 - |\Delta|^2}} \right)$$



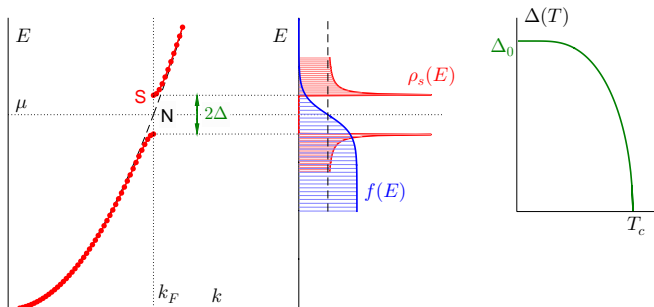
«Полупроводниковая» модель сверхпроводника

Для многих задач туннелирования сверхпроводник можно рассматривать как полупроводник с шириной запрещённой зоны 2Δ и модифицированной плотностью состояний

$$\rho_s = \rho_n \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{|E'|}{\sqrt{E'^2 - |\Delta|^2}} \right), \quad \text{где } E' = E - \mu$$

и считать, что все квазичастичные состояния заполнены равновесным образом в соответствии с распределением Ферми-Дирака

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/k_B\Theta}}.$$



Лекции 5-6

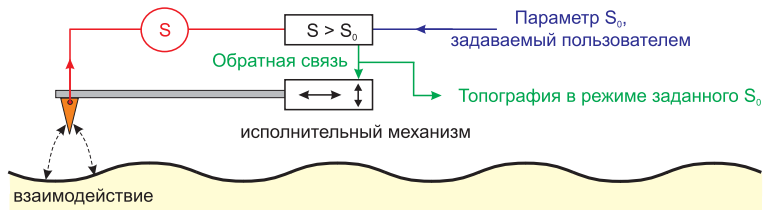
Сканирующая зондовая микроскопия: общие принципы

Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия

Атомно-силовая микроскопия: контактный
и бесконтактный режимы

Общий принцип сканирующей зондовой микроскопии

англ. scanning probe microscopy (SPM)



Сканирующая туннельная микроскопия: STM, STS, spin-polarized STM

Сканирующая силовая микроскопия: AFM, MFM, Kelvin probe microscopy, ...

Сканирующая ближнепольная оптическая микроскопия: NSOM

Сканирующая ближнепольная СВЧ микроскопия

Сканирующая полевая микроскопия: scanning Hall probe microscopy, SQUID microscopy

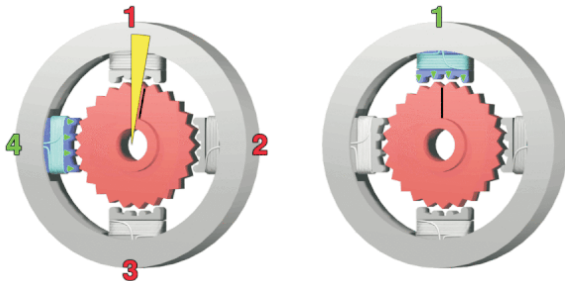
Сканирующая лазерная микроскопия

Сканирующая электронная микроскопия

Литература по методам сканирующей зондовой микроскопии

- * Chen, *Introduction to scanning tunneling microscopy*. Oxford University Press (1993)
- * *Scanning tunneling microscopy* (Eds. Stroscio and Kaiser), in series *Methods of Experimental Physics*, vol. 27, Academic Press (1993)
- * *Noncontact atomic force microscopy* (Eds. Morita, Wiesendanger and Meyer), in series *Nanoscience and Technology*, Springer (2002)
- * Wiesendanger, *Introduction to scanning probe microscopy and spectroscopy: Methods and Application*. Cambridge University Press (1994)
- * Миронов, *Основы сканирующей зондовой микроскопии*. Нижний Новгород (2004)
- * Оура, Лифшиц, Саранин, Зотов, Катаяма, *Введение в физику поверхности*. Москва: Наука (2006)
- * *Springer Handbook of Nanotechnology* (Ed. B. Bhushan), part C. Springer, 3rd edition (2010)
- * Voigtländer, *Scanning probe microscopy*. Springer (2015)
- * Voigtländer, *Atomic force microscopy*. Springer (2019)

Системы грубого позиционирования: шаговый электродвигатель



Пример шагового электродвигателя с 3.6° -поворотом за один шаг (100 шагов/оборот)

Существуют шаговые электродвигатели с 1.8° или 0.9° -поворотом за один шаг (200 или 400 шагов/оборот)

Если соединить шаговый электродвигатель с линейным манипулятором (пусть шаг резьбы 0.1-0.2 мм), то можно получить контролируемое перемещение зонда на 0.2-2 мкм за один шаг даже без понижающего редуктора.

https://ru.wikipedia.org/wiki/Шаговый_электродвигатель

Пьезоэффект

Прямой пьезоэффект – появление электрического поля из-за деформации

Обратный пьезоэффект – возникновение деформации из-за приложенного электрического поля

Необходимым условием наблюдения пьезоэффекта в монокристаллических образцах является отсутствие центра симметрии в элементарной ячейке. Тем не менее, пьезоэффект может наблюдаться и в поликристаллических диэлектриках при условии, что переход точки фазового перехода (так называемой температуры Кюри) при охлаждении происходит в достаточно сильном поляризующем электрическом поле. Одним из наиболее распространенных керамических пьезоэлектрических материалов, применяющихся в сканирующей зондовой микроскопии, является цирконат–титанат свинца (lead zirconate titanate, PZT), который имеет химическую формулу вида $Pb [Zr_x Ti_{1-x}] O_3$, где $0 \leq x \leq 1$ есть удельная концентрация циркония в данном интерметаллическом соединении (обычно $x \simeq 0.52$).

Очень часто в теории пьезоэффекта используют индексы 1, 2 и 3 вместо стандартного обозначения осей x , y и z декартовой системы координат для того, чтобы не смешивать кристаллографические оси пьезоэлектрического материала с осями, характеризующими общую геометрию пьезоэлектрического элемента. Поскольку тензор деформаций (англ. strain) должен быть симметричным тензором второго ранга, то этот тензор в общем случае характеризуется шестью независимыми коэффициентами, которые иногда переобозначаются следующим образом: $S_{11} \rightarrow S_1$, $S_{22} \rightarrow S_2$, $S_{33} \rightarrow S_3$, $S_{23} \rightarrow S_4$, $S_{13} \rightarrow S_5$ и $S_{12} \rightarrow S_6$.

Связь между компонентами тензора деформации (англ. strain) кристалла S_{ij} и компонентами напряженности электрического поля E_i для материалов кристаллографического класса 4mm таких, как поляризованная PZT–керамика в тетрагональной фазе или BaTiO₃, для случая нулевых механических напряжений (англ. stress)

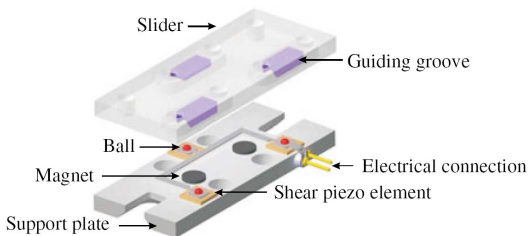
$$\begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ S_4 \\ S_5 \\ S_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d_{31} \\ 0 & 0 & d_{32} \\ 0 & 0 & d_{33} \\ 0 & d_{24} & 0 \\ d_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix},$$

где ось 3 является осью поляризации пьезоэлектрика, d_{ij} – матрица пьезоэлектрических коэффициентов, имеющий размерность нм/В. Например, если к пьезоэлектрическому элементу, имеющему форму параллелепипеда объемом $L_x \times L_y \times L_z$, приложено внешнее напряжение таким образом, что внутри пьезоэлектрика возникает однородное электрическое поле $E_3 = V/L_z$ параллельное оси z поляризации пьезоэлектрика, то

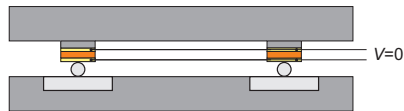
$$\frac{\delta L_x}{L_x} \equiv S_1 = d_{31} E_3, \quad \frac{\delta L_y}{L_y} \equiv S_2 = d_{32} E_3, \quad \frac{\delta L_z}{L_z} \equiv S_3 = d_{33} E_3.$$

Типичные значения пьезоэлектрических коэффициентов чрезвычайно малы, например, для PZT–керамики $d_{31} \simeq -0.2$ нм/В при комнатной температуре и $d_{31} \simeq -0.02$ нм/В при температуре жидкого гелия (4.2 К).

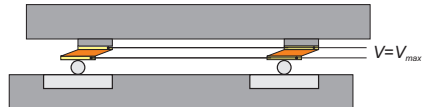
Пьезосистемы грубого позиционирования: линейный шаговый пьезодвигатель



Шаг 1: начальное положение



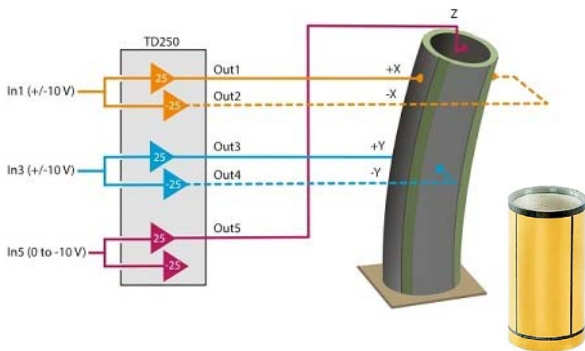
Шаг 2: медленное удлинение пьезоэлементов и максимальное смещение верхней платформы



Шаг 3: быстрое сокращение пьезоэлементов и проскальзывание сапфировых шариков



Пьезосистема точного позиционирования



Изменение размеров 4-х сегментной трубки при подаче напряжения на противоположные электроды

$$\delta L_x \simeq V_x \frac{2\sqrt{2} d_{31} L_z^2}{\pi D h} \quad \text{и} \quad \delta L_y \simeq V_y \frac{2\sqrt{2} d_{31} L_z^2}{\pi D h},$$

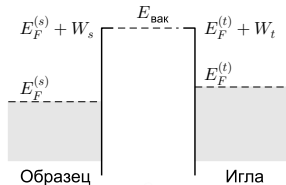
где D есть наружный диаметр трубки, h есть толщина стенок. Если подать одинаковое напряжение V на все четыре электрода относительно центрального электрода, то пьезотрубка удлинится (или укорачивается) на величину

$$\delta L_z \simeq V \frac{d_{31} L_z}{h}$$

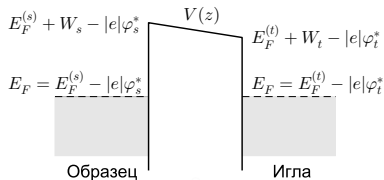
Туннельный эффект в физике твёрдого тела

Зонная структура двух металлов и контактная разность потенциалов

(a)

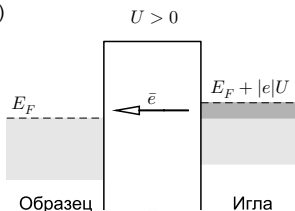


(b)

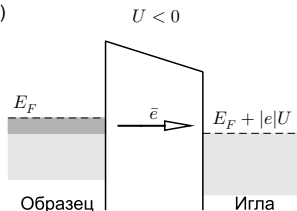


Возникновение туннельного тока: $I = \text{const} \cdot U \cdot \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p(z)| dz\right) \sim e^{-2\kappa \cdot w}$

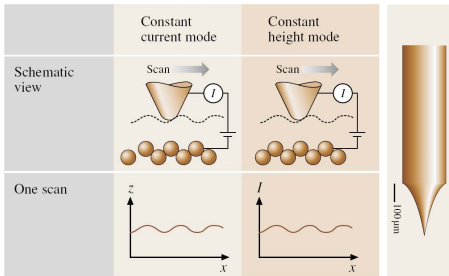
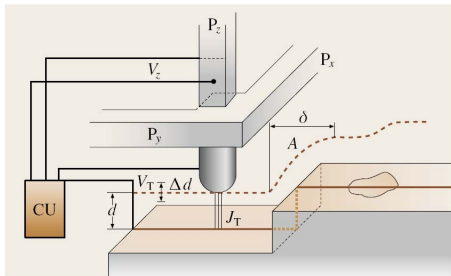
(a)



(b)



Сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия



Сканирующая туннельная микроскопия в режиме заданной высоты

Сканирующая туннельная микроскопия в режиме заданного тока

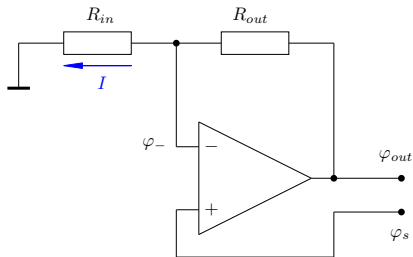
Туннельная спектроскопия в заданной точке

Сканирующая туннельная спектроскопия

$I - V$ конвертер на основе операционного усилителя*

Идеальный операционный усилитель (ОУ):

- входное сопротивление ОУ чрезвычайно велико;
- электрический потенциал выхода ОУ определяется только разностью потенциалов между неинвертирующим (+) и инвертирующим (-) входами: $\varphi_{out} = K(\varphi_+ - \varphi_-)$, где K - коэффициент усиления (обычно $10^4 \dots 10^6$).



Уравнения Кирхгофа:

$$\varphi_+ = \varphi_s$$

$$\varphi_{out} = K(\varphi_s - \varphi_-)$$

$$\varphi_- = I \cdot R_{in},$$

$$\varphi_{out} = I(R_{in} + R_{out}) = \varphi_- + I R_{out}.$$

Решение в пределе $K \gg 1$:

$$\varphi_- \simeq \varphi_s \left\{ 1 - \frac{1}{K} \left(1 + \frac{R_{out}}{R_{in}} \right) \right\} \rightarrow \varphi_s,$$

$$V_{out} = \varphi_{out} - \varphi_s = (I \cdot R_{out} + \varphi_-) - \varphi_s \simeq I \cdot R_{out}.$$

Первый успех: расшифровка реконструкции Si(111)7×7

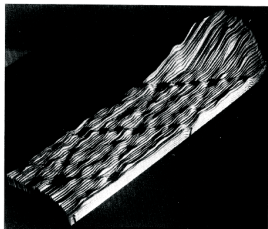
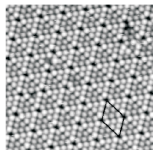
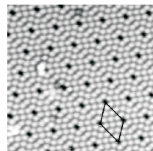
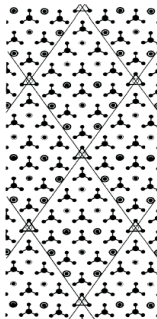
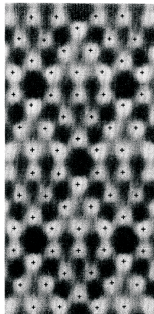
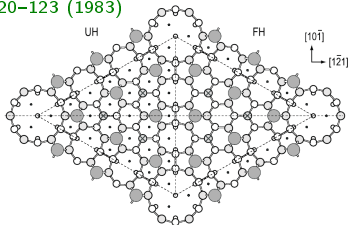


FIG. 1. Relief of two complete 7×7 unit cells, with nine minima and twelve maxima each, taken at 300°C . Heights are enhanced by 55%; the hill at the right grows to a maximal height of 15 \AA . The $[\bar{2}11]$ direction points from right to left, along the long diagonal.

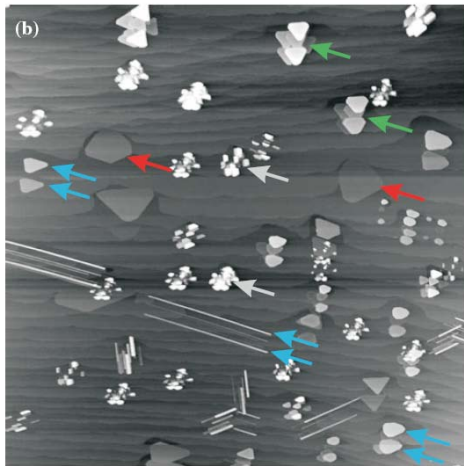
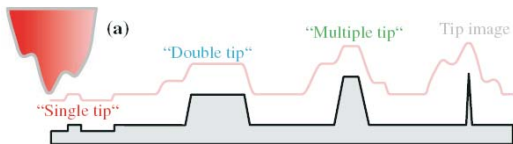


Binnig, Rohrer, Gerber, Weibel, Phys. Rev. Lett., vol. 50, 120–123 (1983)

Оура, Лифшиц, Саранин, Зотов, Катаяма,
Введение в физику поверхности. Москва: Наука (2005)



Артефакты СТМ изображений



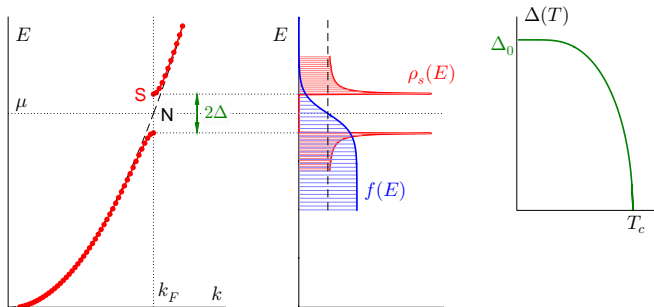
«Полупроводниковая» модель сверхпроводника

Описания транспортных свойств туннельно-связанных сверхпроводящих систем при заданном напряжении сверхпроводник можно рассматривать как полупроводник с шириной запрещённой зоны 2Δ и модифицированной плотностью состояний

$$\rho_s = \rho_n \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{|E'|}{\sqrt{E'^2 - |\Delta|^2}} \right), \quad \text{где } E' = E - \mu$$

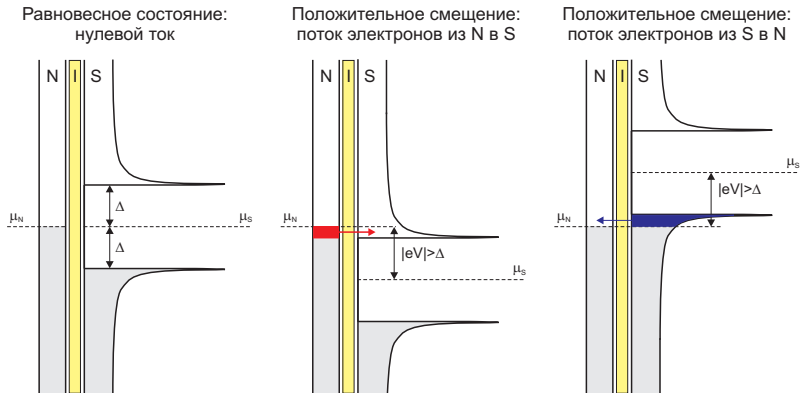
и считать, что все квазичастичные состояния заполнены равновесным образом в соответствие с распределением Ферми-Дирака

$$f = \frac{1}{1 + e^{E'/k_B\Theta}}.$$



Туннельный контакт N–I–S: проводимость в режиме заданного напряжения

Качественный анализ на основе зонных диаграмм:



При низких температурах квазичастичный (quasiparticle) ток должен возникать только при конечном напряжении

$$|eV| > \Delta.$$

Квазичастичный ток в модели туннельного матричного перехода

$$I_{qp} = 2e \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \sum_k \sum_q |M_{k,q}|^2 \cdot \{f(E) - f(E - eV)\} dE =$$

$$= 2e \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |M|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_1(E) \cdot \rho_2(E - eV) \cdot \{f(E) - f(E - eV)\} dE,$$

где $\rho_1(E)$ и $\rho_2(E)$ – плотность состояний левого и правого электродов. Подставим плотность состояний сверхпроводящего электрода согласно полупроводниковой модели

$$I_{qp} = 2e \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |M|^2 \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{n1} \cdot \rho_{n2} \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{|E - eV|}{\sqrt{(E - eV)^2 - \Delta^2}} \right) \cdot \{f(E) - f(E - eV)\} dE.$$

Рассмотрим частный случай $T_c = 0$ и $\Delta = 0$, тогда

$$I_{qp} = 2e \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |M|^2 \cdot \rho_{n1} \cdot \rho_{n2} \int_{-\infty}^{\infty} \{f(E) - f(E - eV)\} dE = 2e \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \cdot |M|^2 \cdot \rho_{n1} \cdot \rho_{n2} \cdot eV = \frac{V}{R_n},$$

где $R_n = \hbar(4\pi e^2 |M|^2 \rho_{n1} \rho_{n2})^{-1}$ – сопротивление контакта в нормальном состоянии (измеряемый параметр).

Теперь мы можем записать вольт-амперную характеристику туннельного контакта N-I-S, используя нормированные плотности состояний и нормальное сопротивление

$$I_{qp} = \frac{1}{|e|R_n} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{Re} \left(\frac{|E - eV|}{\sqrt{(E - eV)^2 - \Delta^2}} \right) \cdot \{f(E) - f(E - eV)\} dE.$$

Учтём, что $e = -|e|$ и $k_B T \rightarrow 0$, тогда

$$\begin{aligned}
 I_{qp} &= \frac{1}{|e|R_n} \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot \operatorname{Re} \left(\frac{|E + |e|V|}{\sqrt{(E + |e|V)^2 - \Delta^2}} \right) \cdot \{f(E) - f(E + |e|V)\} dE = \\
 &= \frac{1}{|e|R_n} \int_{-|e|V}^0 \operatorname{Re} \frac{(E + |e|V)}{\sqrt{(E + |e|V)^2 - \Delta^2}} dE = \frac{1}{|e|R_n} \int_{\Delta}^{|e|V} \frac{E'}{\sqrt{E'^2 - \Delta^2}} dE' = \frac{\sqrt{(eV)^2 - \Delta^2}}{|e|R_n}.
 \end{aligned}$$

Предельные случаи малых и больших напряжений

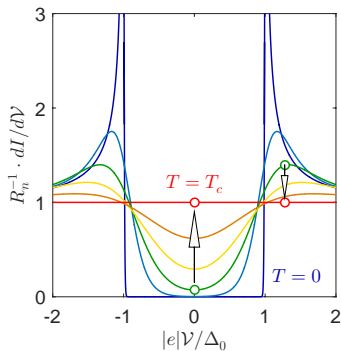
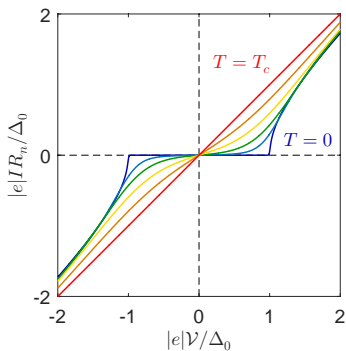
$$I_{qp} \simeq \begin{cases} 0 & \text{при } |eV| < \Delta \text{ и } T \ll T_c \\ V/R_n & \text{при } |eV| \gg \Delta \text{ и/или } T > T_c \end{cases}$$

Вид зависимости дифференциальной проводимости dI/dV от напряжения V при низких температурах

$$R_n \frac{dI}{dV} = \begin{cases} 0 & \text{при } |eV| < \Delta \\ |eV|/\sqrt{(eV)^2 - \Delta^2} & \text{при } |eV| \geq \Delta \end{cases}$$

совпадает с функциональной зависимостью плотности состояний сверхпроводника от энергии $\rho_s(E) = \rho_n \cdot \operatorname{Re} |E|/\sqrt{E^2 - |\Delta|^2}$, если заменить $eV \rightarrow E$.

Вольт-амперные характеристики контакта N-I-S в режиме заданного напряжения



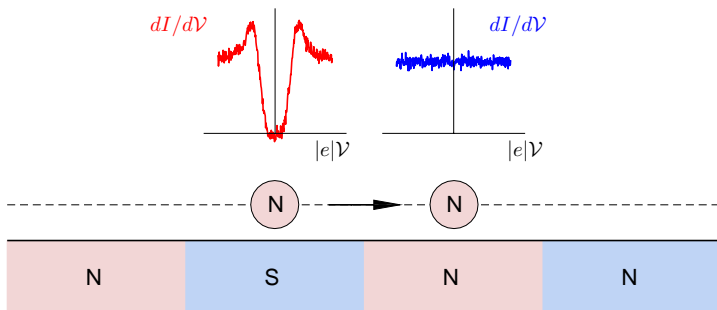
Вид зависимости дифференциальной проводимости dI/dV от напряжения V при низких температурах совпадает с функциональной зависимостью нормированной плотности состояний сверхпроводника от энергии

$$R_n \frac{dI}{dV} = \begin{cases} 0 & |eV| < \Delta \\ |eV|/\sqrt{(eV)^2 - \Delta^2} & |eV| \geq \Delta \end{cases} \Rightarrow \rho_s(E) = \begin{cases} 0 & |E| < \Delta \\ |E|/\sqrt{E^2 - |\Delta|^2} & |E| \geq \Delta \end{cases}$$

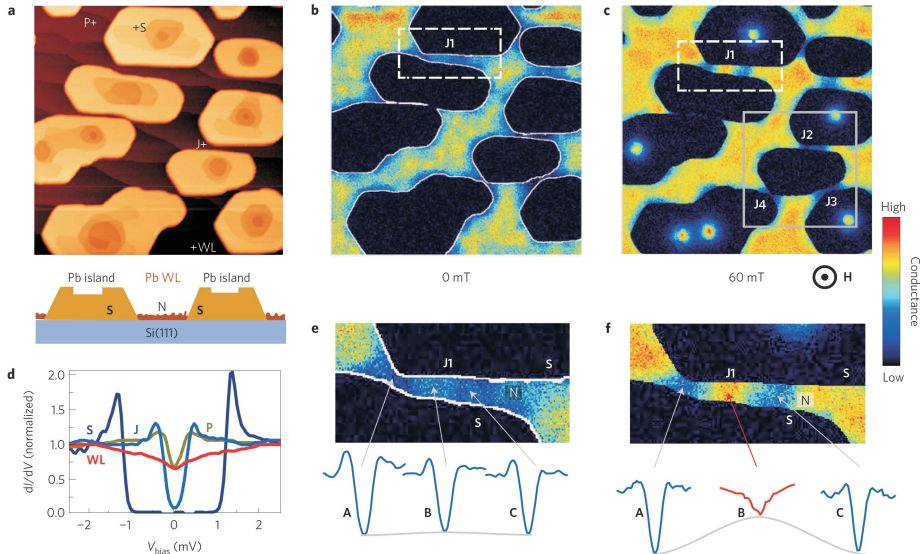
если заменить $eV \rightarrow E$.

Сканирующая туннельная спектроскопия сверхпроводников в режиме заданного напряжения

Сканирующая туннельная спектроскопия позволяет детектировать несверхпроводящие включения внутри сверхпроводника



Туннельная спектроскопия: вихри в Pb островках



Roditchev, Brun, Serrier-Garcia, Cuevas, ... Nature Physics, vol. 11, 322-337 (2015)

Атомно-силовая микроскопия: основные режимы

Атомно-силовая микроскопия (АСМ), atomic-force microscopy (AFM)

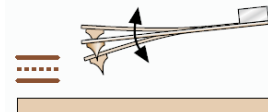
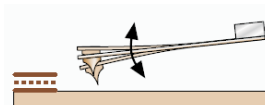
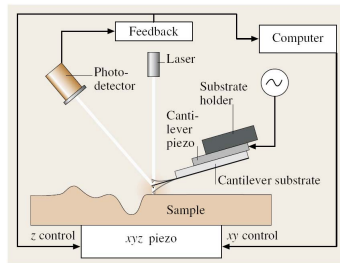
* Статический режим

Контактная методика (contact mode)

* Динамические режимы

Полуконтактная методика (intermittent/tapping mode)

Бесконтактная методика (non-contact mode)



Статическая методика: регистрация z-отклонения зонда

+ : простота реализации исполнительного механизма и обратной связи

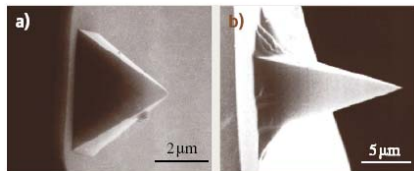
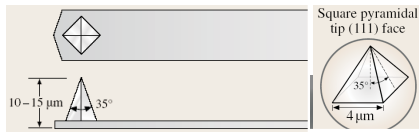
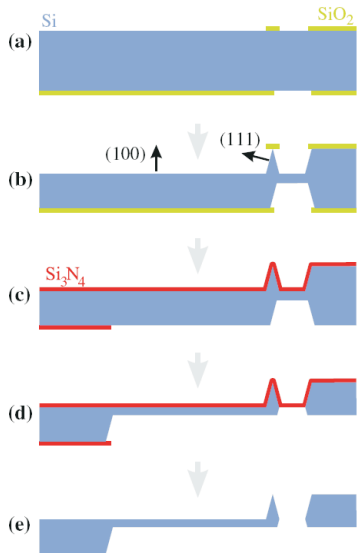
- : заметное механическое воздействие на образец

Динамическая методика: регистрация изменений амплитуды/частоты/фазы колебаний

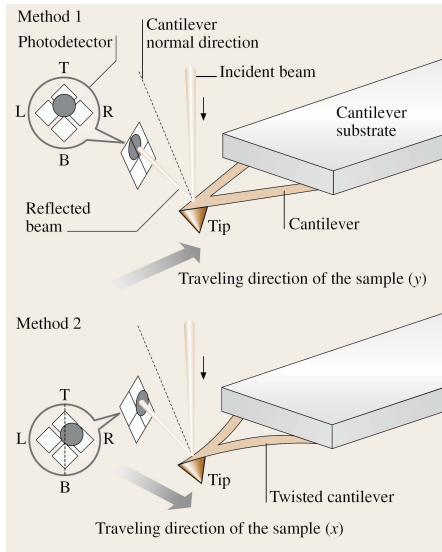
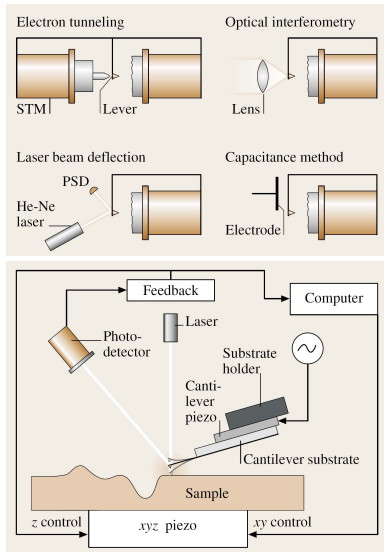
+ : уменьшение механического воздействия, повышение чувствительности

- : усложнение технической реализации, низкая скорость сканирования

Стандартные Si зонды для атомно-силовой микроскопии



Основные методы регистрации отклонения зонда



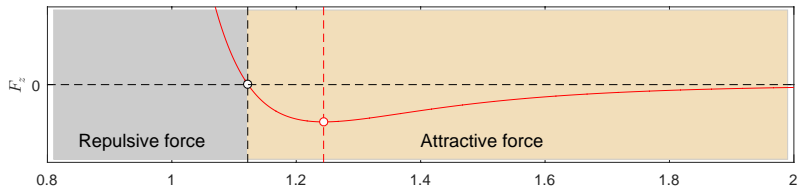
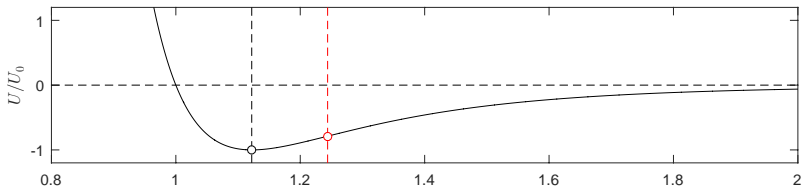
Модельный потенциал Леннарда–Джонса

Потенциал Леннарда-Джонса (Lennard-Jones) описывает притяжение нейтрального зонда (tip) к поверхности (surface) на больших расстояниях и отталкивание на малых расстояниях

$$U_{ts}(z) = U_0 \cdot \left\{ \left(\frac{z^*}{z} \right)^{12} - \left(\frac{z^*}{z} \right)^6 \right\},$$

где z – условное расстояние от поверхности, U_0 и z^* – параметры модели.

Нормальная z -компонента силы $F_{ts} = -dU_{ts}/dz$, действующей на зонд, меняет знак.



Прилипание к поверхности в контактном режиме

jump-to-contact, snap-to-contact

Результирующий потенциал

$$U_{tot}(z) = U_{ts} + U_{ynp} = U_0 \cdot \left\{ \left(\frac{z^*}{z} \right)^{12} - \left(\frac{z^*}{z} \right)^6 \right\} + \frac{k}{2} (z - z_0)^2,$$

где z_0 – равновесное положение зонда, $\Delta z = z - z_0$ – изгиб консоли из-за взаимодействия с поверхностью. В зависимости от жесткости пружины k и равновесной высоты z_0 могут быть разные профили результирующего потенциала $U_{tot}(z)$.

Положение равновесия соответствует балансу сил $|F_{ts}| = |F_{ynp}|$, где $F_{ynp} = -k \cdot (z - z_0)$ есть сила упругости по закону Гука

$$\frac{d}{dz} U_{tot}(z) = \frac{d}{dz} U_{ts}(z) + k(z - z_0) = 0$$

Устойчивость положения равновесия определяется второй производной результирующего

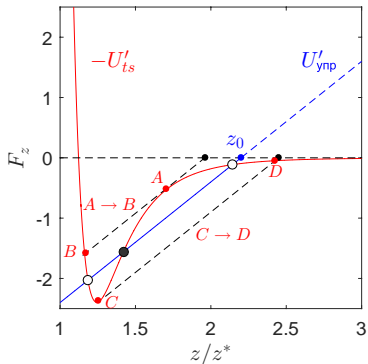
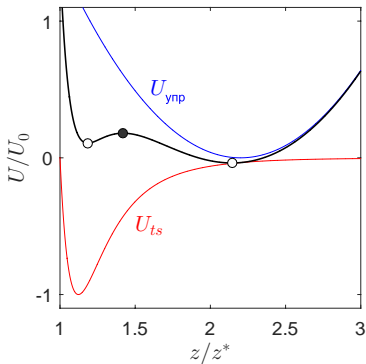
$$\frac{d^2}{dz^2} U_{ts}(z) + k > 0 \quad \text{или} \quad k > \frac{d}{dz} F_{ts}.$$

Для механической стабильности системы нужна большая жесткость подвеса, однако это уменьшает чувствительность!

Результирующий потенциал

$$U_{\text{tot}}(z) = U_0 \cdot \left\{ \left(\frac{z^*}{z} \right)^{12} - \left(\frac{z^*}{z} \right)^6 + \frac{1}{2} \frac{k z^{*2}}{U_0} \left(\frac{z}{z^*} - \frac{z_0}{z^*} \right)^2 \right\}$$

Моделирование выполнено для параметра $k z^{*2}/U_0 = 2$ и $z_0/z^* = 2.2$



Прилипание зонда к поверхности приводит к гистерезису зависимости z от z_0 !

Исследование адгезии и микрожесткости

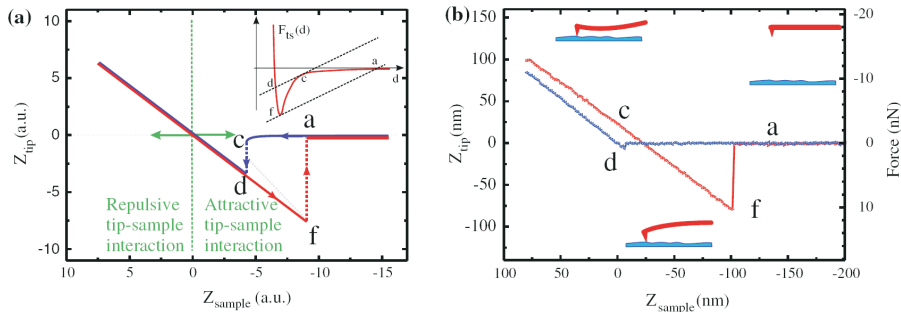


Fig. 13.6 **a** Schematic of a $z_{tip}(z_{sample})$ plot with the *blue curves* corresponding to an approach of the sample toward the tip, while the *red curves* correspond to a retraction of the sample. The nomenclature for the variables is the same as in Fig.13.5. At points *c* and *f*, the tip-sample force gradient becomes equal to the spring constant of the cantilever and leads to an instability associated with snap-to-contact or snap-out-of-contact, respectively. **b** Experimentally measured force-distance curve obtained on a silicon wafer in a lab course at RWTH Aachen University. The cantilever spring constant was 0.13 N/m (The unusual coordinate system has negative z_{sample} values going to the right. This is, however, the way it is normally plotted)

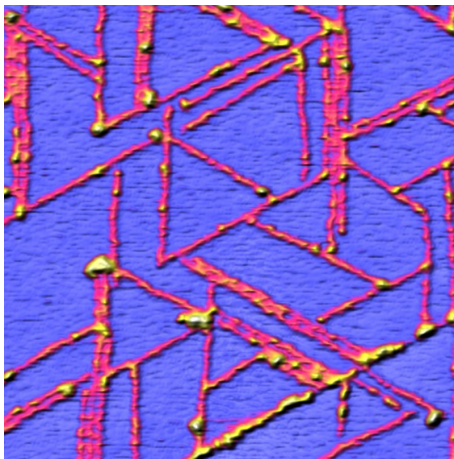
По наклону линейной части можно определить фактическую микрожесткость образца

По ширине гистерезиса можно определить параметры адгезии

Промежуточные выводы: контактный режим измерений

- * Самая простая техническая реализация: статическое отклонение консоли $\Delta z = z - z_0$ дает информацию о силе взаимодействия зонда с поверхностью
- * Как правило имеет место механическая неустойчивость, связанная с прилипанием зонда к поверхности
- * Заметное влияние на поверхность образца, поэтому метод *как правило* не применим для исследования органических и биологических объектов
- * Метод не пригоден для получения информации с атомарным разрешением
- * Возможны измерения в режиме заданной силы с активной обратной связью
- * Возможны измерения в режиме заданной высоты
- * Позволяет получать информацию о рельефе, микрожесткости, коэффициентах адгезии и трения
- * Для повышения чувствительности и стабильности необходим переход к динамическому режиму измерений, при этом можно следить за изменением амплитуды, частоты и фазы колебаний зонда на консоли

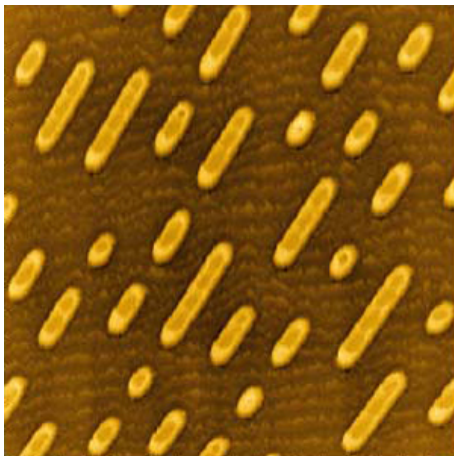
Типичные результаты: контактный режим AFM



Одномерные цепочки (ламеллы) гексаглицина на поверхности пиролитического графита (размер кадра $400 \times 400 \text{ nm}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

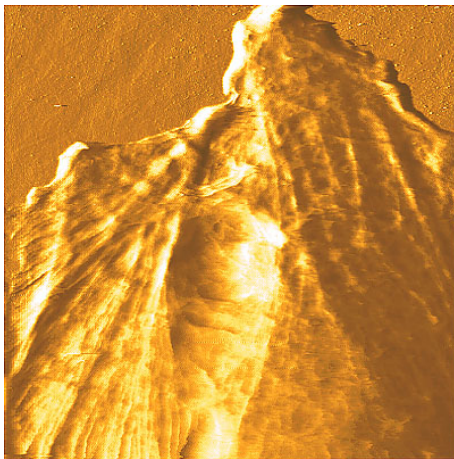
Типичные результаты: контактный режим AFM



Изображение Al реплики CD диска (размер кадра $15 \times 15 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Типичные результаты: контактный режим AFM



Изображение части живой клетки эпителия почки свиньи в буферном растворе при температуре 37°C (размер кадра 27 × 27 мкм²).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Колебания груза на упругом подвесе

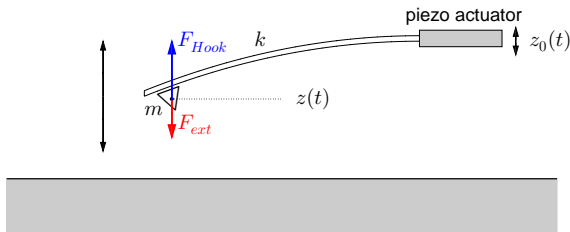
Рассмотрим сосредоточенную массу m на упругом подвесе (кантилевере) с жесткостью k . Запишем закон Ньютона для динамики системы в присутствии постоянной силы трения и внешней силы $F_{\text{вн}}$ (например, силы тяжести и прочих), направленной по оси z

$$m\ddot{z} = F_{\text{упр}} - \gamma\dot{z} + F_{\text{вн}},$$

где $F_{\text{упр}} = -k \cdot (z(t) - z_0(t))$ – сила упругости, пропорциональная удлинению, γ – коэффициент затухания и $-\gamma\dot{z}$ – сила трения.

После переупорядочения слагаемых и подстановки $F_{\text{вн}} = F_0 + F'_z \cdot z$ получаем уравнение

$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + (k - F'_z)z(t) = k z_0(t) + F_0$, где $k_{\text{эфф}} = k - F'_z$ есть эффективная жёсткость.



Будем считать, что исполнительный механизм (actuator, dizzer) возбуждает гармонические колебания подвеса

$$z_0(t) = A_0 \cos \omega t = A_0 \operatorname{Re} \left(e^{i\omega t} \right),$$

где A_0 и ω есть амплитуда и частота вынужденных колебаний.

Будем считать, что зависимость z -координаты зонда от времени имеет вид

$$z(t) = z^* + \operatorname{Re} \left(a(\omega) e^{i\omega t} \right),$$

где z^* есть средняя координата деформированного кантилевера, $a(\omega) = A(\omega)e^{i\varphi(\omega)}$ есть комплексная амплитуда вынужденных колебаний.

После подстановки зависимостей $z_0(t)$ и $z(t)$ в уравнение

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + (k - F'_z)z(t) = k z_0(t) + F_0$$

получаем

$$-m\omega^2 a(\omega)e^{i\omega t} + i\omega\gamma a(\omega)e^{i\omega t} + (k - F'_z) \cdot \left(z^* + a(\omega)e^{i\omega t} \right) = kA_0e^{i\omega t} + F_0.$$

Отсюда следует

$$z^* = \frac{F_0}{k - F'_z} \quad \text{и} \quad a(\omega) = \frac{\omega_0^2 A_0}{(\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m) + i\omega\omega_0/Q},$$

где $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ есть резонансная частота ненагруженного осциллятора, $Q = \omega_0 m/\gamma$ есть добротность системы.

Для удобства выделим в выражении для комплексной амплитуды

$$a(\omega) = \frac{\omega_0^2 A_0}{(\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m) + i\omega\omega_0/Q}$$

модуль $A(\omega)$ и фазу $\varphi(\omega)$. После умножения числителя и знаменателя дроби на комплексно-сопряженное выражение получаем

$$a(\omega) = \frac{\omega_0^2 A_0}{(\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m)^2 + (\omega\omega_0/Q)^2} ((\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m) - i\omega\omega_0/Q) \quad (*)$$

Таким образом,

$$A(\omega) = |a(\omega)| = \frac{\omega_0^2 A_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m)^2 + (\omega\omega_0/Q)^2}},$$

$$\varphi(\omega) = \arg a(\omega) = \begin{cases} -\arctg(\omega\omega_0 Q^{-1}/(\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m)), & \omega < \sqrt{\omega_0^2 - F'_z/m}; \\ -\pi/2, & \omega = \sqrt{\omega_0^2 - F'_z/m}; \\ -\pi + \arctg(\omega\omega_0 Q^{-1}/(\omega^2 - \omega_0^2 + F'_z/m)), & \omega > \sqrt{\omega_0^2 - F'_z/m}. \end{cases}$$

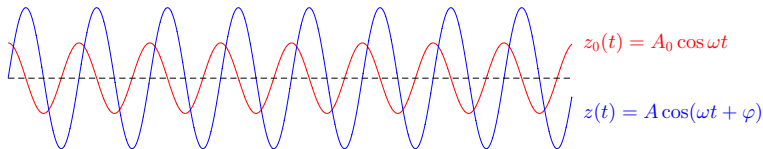
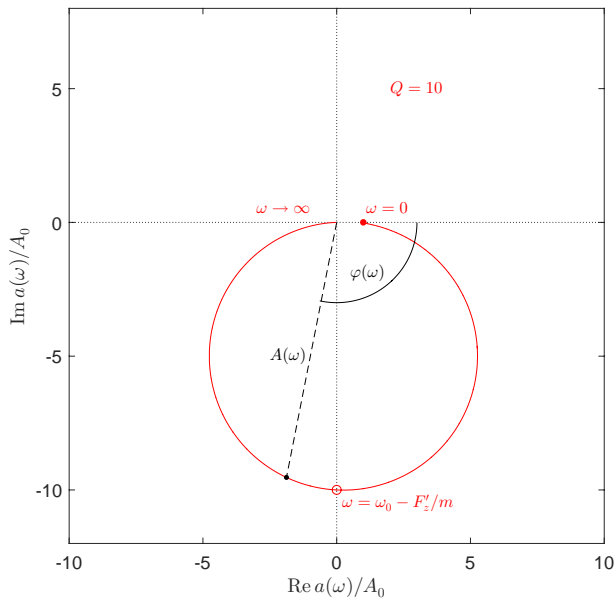


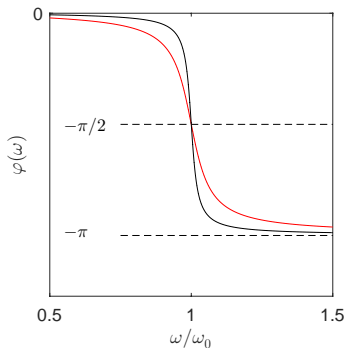
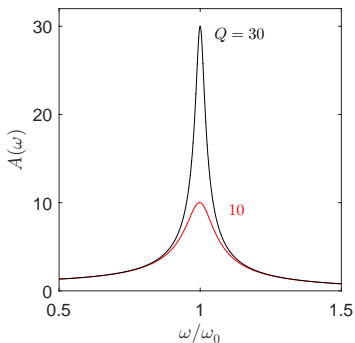
Иллюстрация правила определения фазы вынужденных колебаний



Колебания груза с постоянной внешней силой

Амплитудно- и фазо-частотные характеристики маятника с постоянной силой ($F'_z = 0$)

$$A(\omega) = \frac{\omega_0^2 A_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + (\omega \omega_0 / Q)^2}} \quad \text{и} \quad \varphi(\omega) = -\pi + \operatorname{arctg} \left(\frac{\omega \omega_0 / Q}{\omega^2 - \omega_0^2} \right) \quad (\text{при } \omega > \omega_0)$$



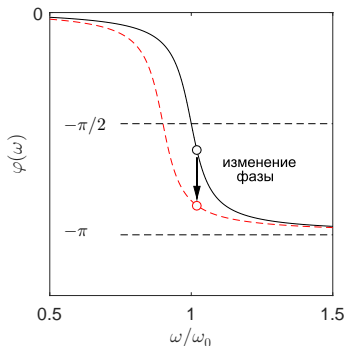
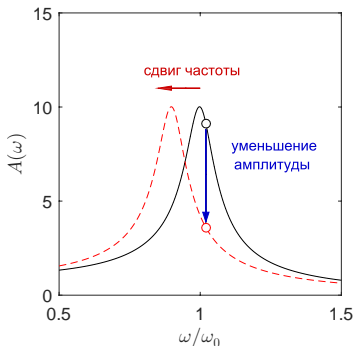
Резонансная частота ненагруженного маятника и нагруженного маятника с трением:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad \text{и} \quad \omega_{res} = \sqrt{\omega_0^2 \cdot \left(1 - \frac{1}{2Q^2}\right)} \simeq \omega_0 \cdot \left(1 - \frac{1}{4Q^2}\right).$$

Колебания груза с координатно-зависящей силой

Амплитудно- и фазочастотная характеристики маятника с переменной силой ($F'_z \neq 0$)

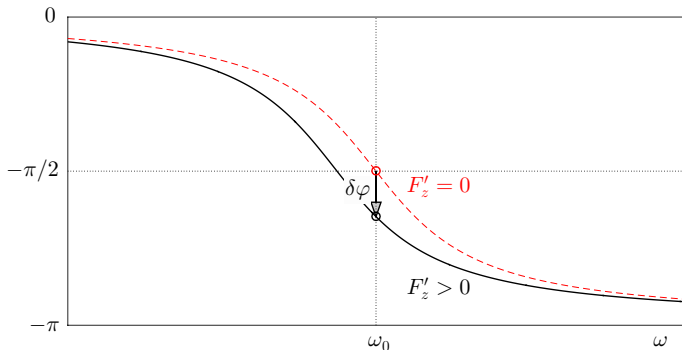
$$A(\omega) = \frac{\omega_0^2 A_0}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m)^2 + (\omega \omega_0/Q)^2}} \quad \text{и} \quad \varphi(\omega) = -\pi + \arctg\left(\frac{\omega \omega_0/Q}{\omega_0^2 - \omega^2 - F'_z/m}\right) \quad (\omega > \omega_0)$$



Резонансная частота нагруженного кантилевера в присутствии координатно-зависящей силы

$$\Omega_{res} = \sqrt{\omega_0^2 \cdot \left(1 - \frac{1}{2Q^2}\right) - \frac{F'_z}{m}} = \omega_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{1}{2Q^2} - \frac{F'_z}{m} \cdot \frac{m}{k}} \simeq \omega_{res} - \omega_0 \frac{F'_z}{2k}$$

Типичная фазо-частотная зависимость



После разложения зависимости $\varphi(\omega)$ в ряд Тейлора вблизи резонанса ($\omega \simeq \omega_0$) получаем

$$\varphi(\omega)\Big|_{\omega=\omega_0} = -\pi + \operatorname{arctg}\left(\frac{\omega_0^2/Q}{-F'_z/m}\right) \simeq -\pi - \operatorname{arctg}\left(\frac{k}{QF'_z}\right) \simeq -\frac{\pi}{2} - \frac{QF'_z}{k} \quad \text{при} \quad \frac{Q|F'_z|}{k} \ll 1.$$

Таким образом, сдвиг фазы зависит от градиента силы взаимодействия с поверхностью

$$\delta\varphi \equiv \varphi(\omega)\Big|_{\omega=\omega_0} - \left(-\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{QF'_z}{k}.$$

Колебания груза с координатно-зависящей силой: альтернативное рассмотрение

Получим соотношение для сдвига частоты более компактным образом. Предположим, что добротность механического осциллятора велика ($Q \gg 1$) и сдвигом резонансной частоты нагруженного можно пренебречь ($\omega_{res} \simeq \omega_0$).

Запишем уравнение Ньютона в следующем виде

$$m\ddot{z} + \gamma\dot{z} + (k - F'_z)z(t) = kz_0(t) + F_0.$$

Заменяя k на $k_{эфф} = k - F'_z$, оценим резонансную частоту кантилевера в присутствии силы, зависящей от координаты

$$\Omega_{res}^2 \simeq \frac{k_{эфф}}{m} \simeq \frac{k}{m} - \frac{F'_z}{m}.$$

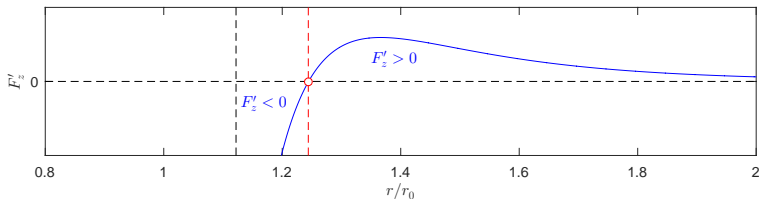
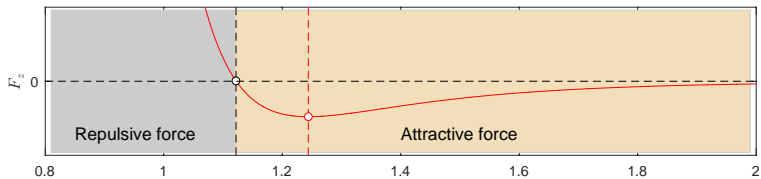
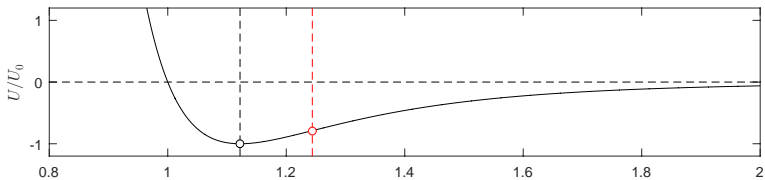
Подставим $\Omega_{res} = \omega_0 + \Delta\omega$ и считая $\Delta\omega \ll \omega_0$, получим

$$(\omega_0 + \Delta\omega)^2 \simeq \frac{k}{m} - \frac{F'_z}{m} \quad \text{или} \quad \omega_0^2 + 2\omega_0\Delta\omega \simeq \frac{k}{m} - \frac{F'_z}{k} \frac{k}{m},$$

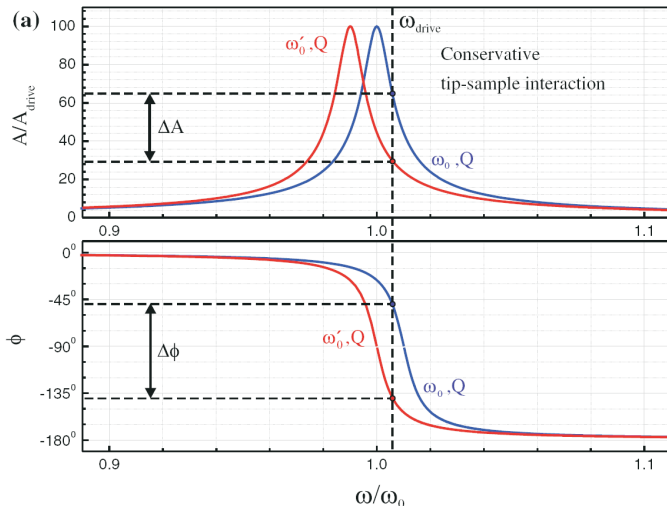
откуда следует

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_0} \simeq -\frac{F'_z}{2k}.$$

Потенциал Ленарда–Джонса $U(z) = \alpha \cdot \left\{ (z_0/z)^{12} - (z_0/z)^6 \right\}$

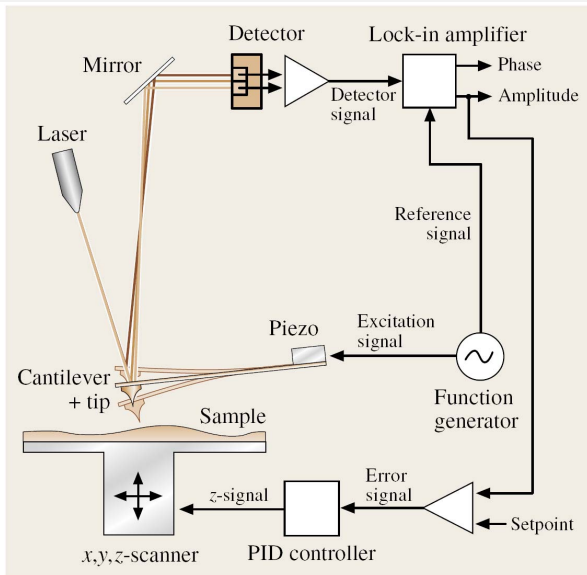


Изменение параметров вынужденных колебаний

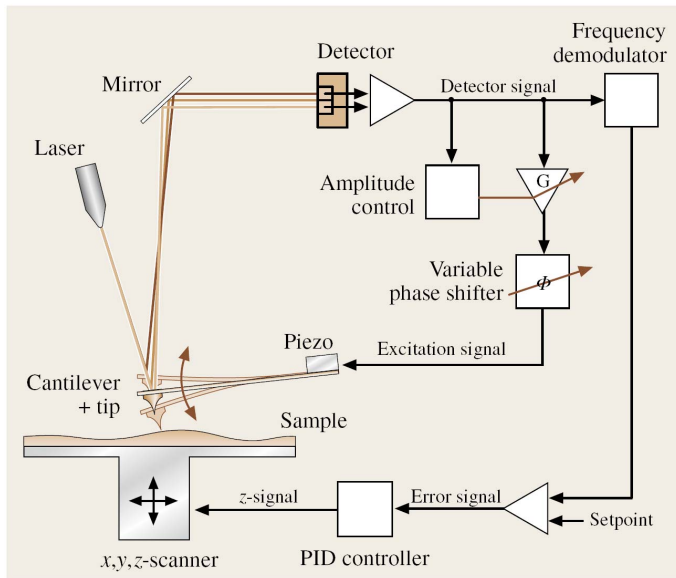


По изменению амплитуды на заданной частоте можно судить о сдвиге резонансной частоты нагруженного резонатора $\Delta\omega/\omega_0 = -F'_z/2k$. Изменение фазы колебаний $\Delta\phi = -Q F'_z/k$ пропорционально градиенту силы взаимодействия зонда с поверхностью.

Принципиальная схема: измерения в режиме амплитудной модуляции (AM)



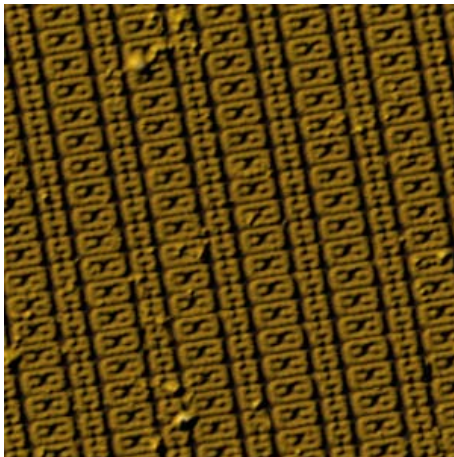
Принципиальная схема: измерения в режиме частотной модуляции (FM)



Промежуточные выводы: бесконтактный режим измерений

- * Более сложная техническая реализация, включающая как минимум две системы обратной связи, что уменьшает скорость измерений
- * Метод позволяет получать информации о структуре поверхности с атомарным разрешением
- * Сдвиг частоты и фазы колебаний пропорционален градиенту силы взаимодействия зонда с поверхностью
- * Метод применим для исследования непроводящих и проводящих образцов, включая органические и биологические объекты
- * В AM-режиме измерения проводятся на фиксированной частоте, а контролируется амплитуда и/или фаза колебаний
- * Немонотонная зависимость сдвига частоты от высоты может приводить к неустойчивости
- * В FM-режиме измерения проводятся на изменяющейся частоте в условиях механического резонанса, измеряется контролируется сдвиг частоты, или фазы, или амплитуды.

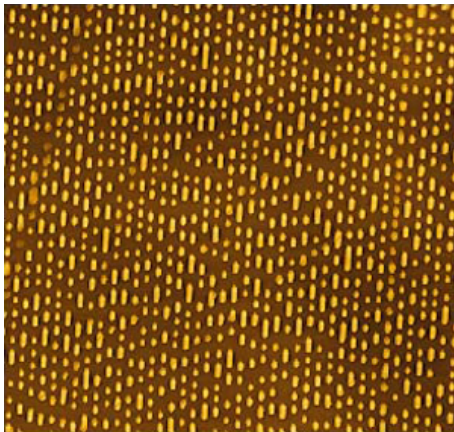
Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Изображение микроструктуры (размер кадра $30 \times 30 \text{ nm}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

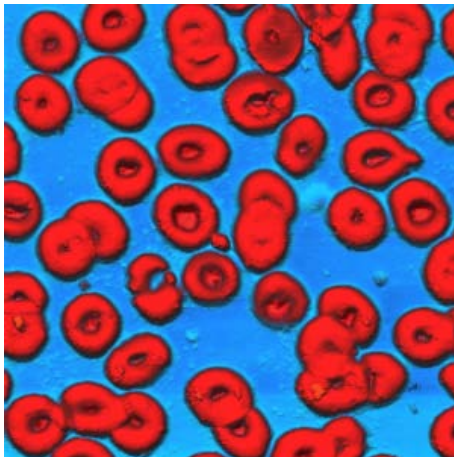
Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Изображение поверхности DVD диска (размер кадра $30 \times 30 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

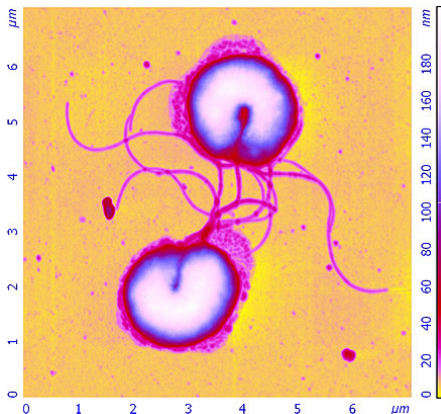
Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Изображение эритроцитов – красных кровяных телец (размер кадра $50 \times 50 \mu\text{m}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

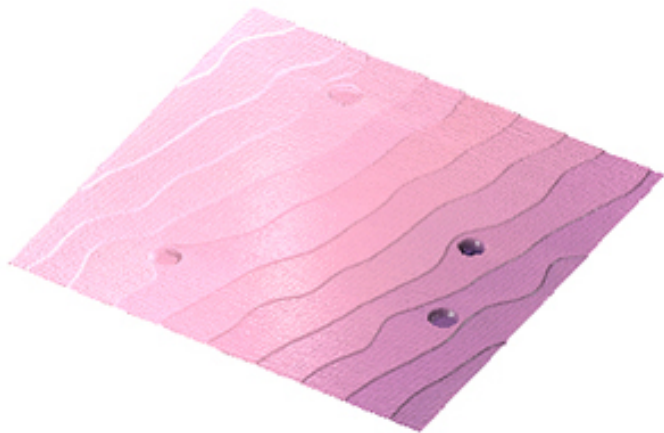
Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Изображение двух бактерий *Helicobacter pylori* в процессе образования кокковидной формы (размер кадра 7.2×7.2 мкм²).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

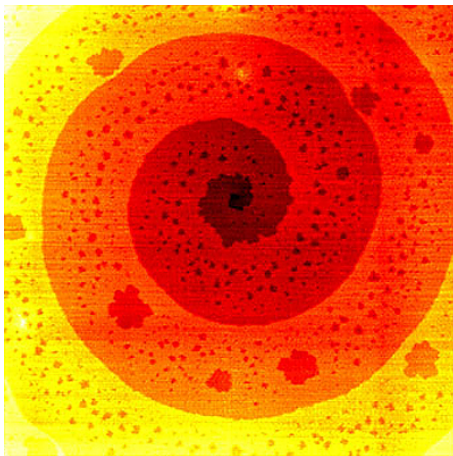
Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Двухслойные ступени на поверхности $\text{SrTiO}_3(001)$, высота ступени 0.39 нм (размер кадра $8 \times 8 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

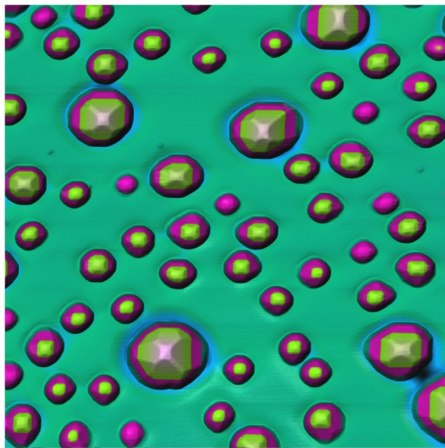
Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Спиральная ступень на поверхности Si(111), образовавшаяся вследствие выхода винтовой дислокации на поверхность, и двумерные (глубиной 0.31 нм) вакансионные островки (размер кадра $8 \times 8 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Типичные результаты: полуконтактный режим AFM



Куполообразные и пирамидальные Ge-Si островки (размер кадра $3 \times 3 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Типичные результаты: бесконтактный режим AFM

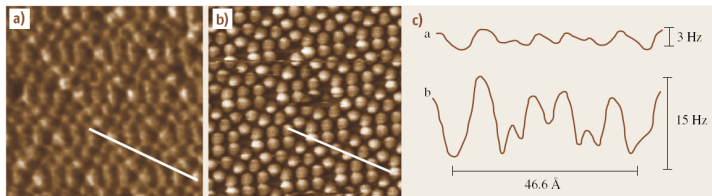


Fig. 23.10a–c Noncontact-mode AFM images of a Si(111)-(7×7) reconstructed surface obtained using the Si tips (a) without and (b) with a dangling bond. The scan area is 99 Å×99 Å. (c) The cross-sectional profiles along the long diagonal of the 7×7 unit cell indicated by the white lines in (a) and (b)

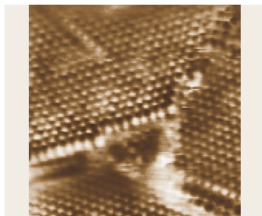


Fig. 23.22 The constant frequency-shift topography of domain boundaries on a C₆₀ multilayered film deposited on a Si(111) surface based on [23.105]. Image size: 35×35 nm²

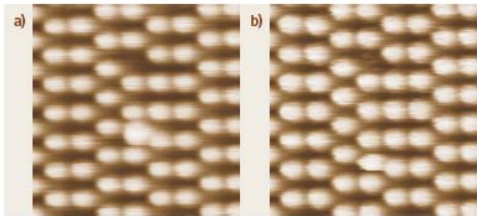
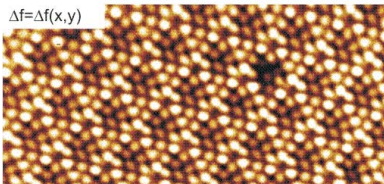
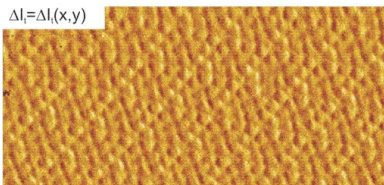
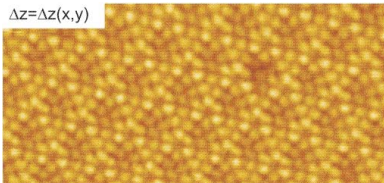


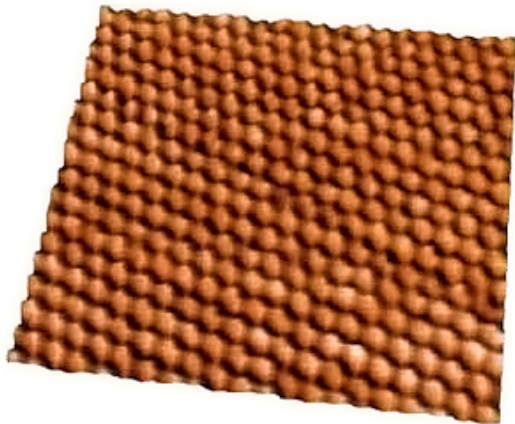
Fig. 23.26a–c Consecutively recorded FM-AFM images showing the tip-induced manipulation of a Ge adatom on Ge(111)-(c2×8) at 80 K. Scanning was performed from bottom to top (© N. Oyabu [24.235])

Типичные результаты: бесконтактный режим AFM

Топографическое изображение участка реконструированной поверхности Si(111)7x7, полученное комбинированным методом 50% NC-AFM – 50% STM; базовая частота сенсора $f_0=24.8 \times 10^3$ Гц, сдвиг резонансной частоты $df=-30$ Гц, туннельный ток $I=300$ пА, напряжение на игле $V_0=-700$ мВ, $T=77$ К, область сканирования 20×10 нм².



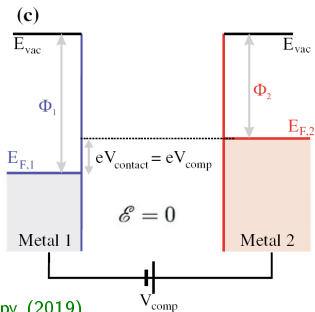
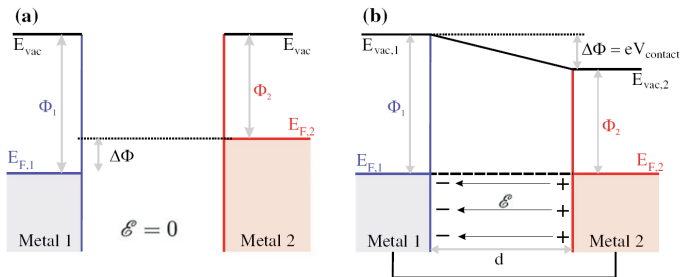
Типичные результаты: бесконтактный режим AFM



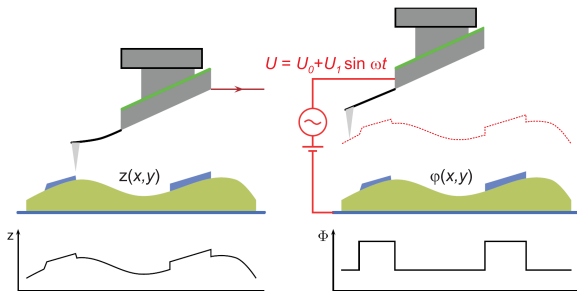
Изображение атомной решетки MoTe_2 (размер кадра $9 \times 9 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Работа выхода и контактная разность потенциалов



Сканирующая емкостная и кельвиновская микроскопия с проводящим зондом



Machleidt, Sparrer, Kapusi, Franke, Meas. Sci. Technol. vol. 20, 084017 (2009)

Первый проход: стандартное измерение рельефа в полуконтактной или бесконтактной моде

Второй проход: электрические измерения без механических возбуждений проводящего зонда в режиме постоянной высоты зонда на большой высоте ($>10-20$ нм) для исключения всех сил, кроме электростатической силы

Пусть $\varphi_t(t) = U_0 + U_1 \sin \omega t$ – электрический потенциал зонда, $\varphi_s(x, y)$ – локальная контактная разность потенциалов между зондом и поверхностью.

Пусть $U = \varphi_t - \varphi_s(x, y) = U_0 + U_1 \sin \omega t - \varphi_s(x, y)$ – разность потенциалов между зондом и поверхностью, которая зависит от времени и положения зонда.

Энергия заряженной системы «зонд-поверхность» (для заданной разности потенциалов)

$$W = -\frac{CU^2}{2}$$

Электрическая сила, действующая на зонд

$$F_z = -\frac{\partial W}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{CU^2}{2} \right) = \frac{U^2}{2} \cdot \frac{\partial C}{\partial z}, \quad \text{при этом } F_z < 0, \quad \text{поскольку } \frac{\partial C}{\partial z} < 0.$$

Поскольку

$$U^2 = (U_0 - \varphi_s(x, y))^2 + 2(U_0 - \varphi_s(x, y)) \cdot U_1 \sin \omega t + U_1^2 \sin^2 \omega t,$$

получаем

$$F_z = \frac{\partial C}{\partial z} \cdot \left\{ \frac{1}{2} (U_0 - \varphi_s(x, y))^2 + \frac{U_1^2}{2} \right\} + \frac{\partial C}{\partial z} \cdot (U_0 - \varphi_s(x, y)) \cdot U_1 \sin \omega t + \frac{\partial C}{\partial z} \cdot \frac{U_1^2}{4} \cos 2\omega t.$$

Переменный потенциал зонда приводит к появлению первой и второй гармоник для силы, действующей на зонд.

1. Первая фурье-гармоника силы

$$\frac{\partial C}{\partial z} \cdot (U_0 - \varphi_s(x, y)) \cdot U_1 \sin \omega t$$

приводит к колебаниям зонда на основной частоте. Однако при сканировании можно подстраивать постоянную составляющую потенциала U_0 так, чтобы амплитуда колебаний зонда на основной частоте была равна нулю. Это позволяет определить распределение электрического потенциала $\varphi_s(x, y)$ вдоль поверхности.

Такая техника бесконтактных измерений называется сканирующая кельвиновская микроскопия (Kelvin probe scanning force microscopy, KPFM).

2. Вторая фурье-гармоника силы

$$\frac{\partial C}{\partial z} \cdot \frac{U_1^2}{4} \cos 2\omega t$$

приводит к колебаниям зонда на удвоенной частоте с амплитудой, пропорциональной $\partial C / \partial z$. Фиксируя амплитуду колебаний зонда при сканировании, можно получить информацию о распределении ёмкости в плоскости образца.

Такая техника бесконтактных измерений называется сканирующая ёмкостная микроскопия (scanning capacitance microscopy, SCM).

Типичные результаты: измерения в кельвиновской моде

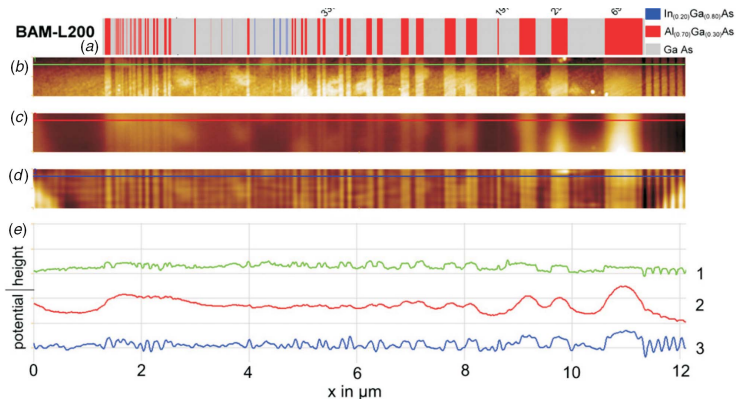
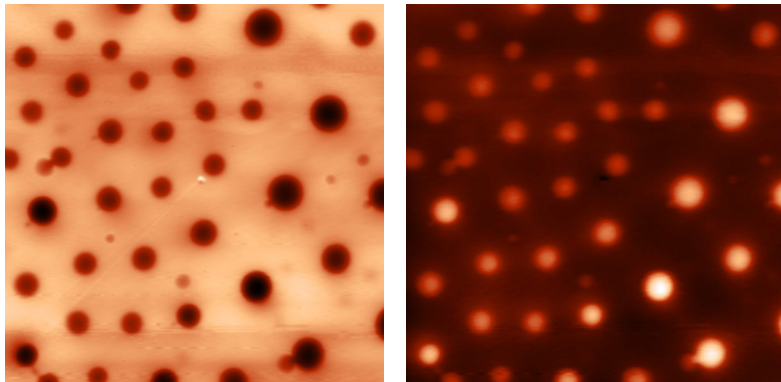


Figure 7. Practical results. (a) Illustration of the BAM-L200 standard, (b) topography measurement, (c) KPFM measurement, (d) deconvolution of the KPFM data, (e) profile of the results ((1) topography, (2) KPFM data, (3) deconvolved KPFM data).

Machleidt, Sparrer, Kapusi, Franke, Meas. Sci. Technol. vol. 20, 084017 (2009)

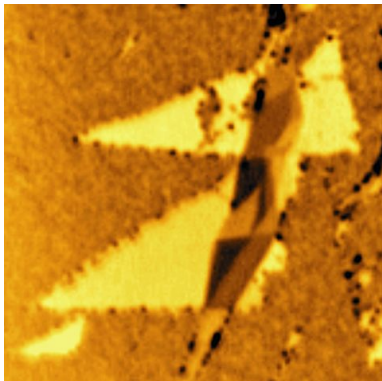
Типичные результаты: измерения в кельвиновской моде



Топография и поверхностный потенциал пленки PS-PVAC (размер кадра $30 \times 30 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

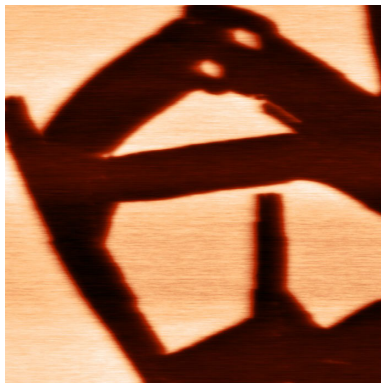
Типичные результаты: измерения в кельвиновской моде



Топография и поверхностный потенциал для чешуек графена на подложке из золота (размер кадра 30×30 мкм²).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Типичные результаты: измерения в кельвиновской моде



Топография и поверхностный потенциал пленки флуороалкана $F_{12}H_{20}$ на слюде (размер кадра $30 \times 30 \text{ мкм}^2$).

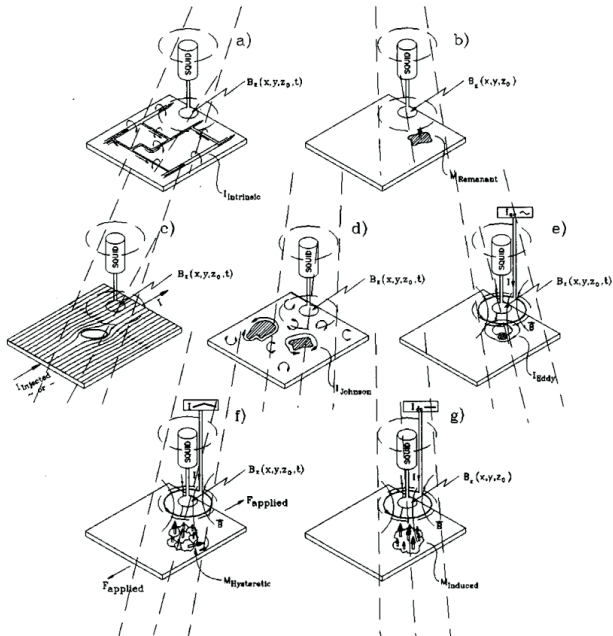
Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Лекция 7

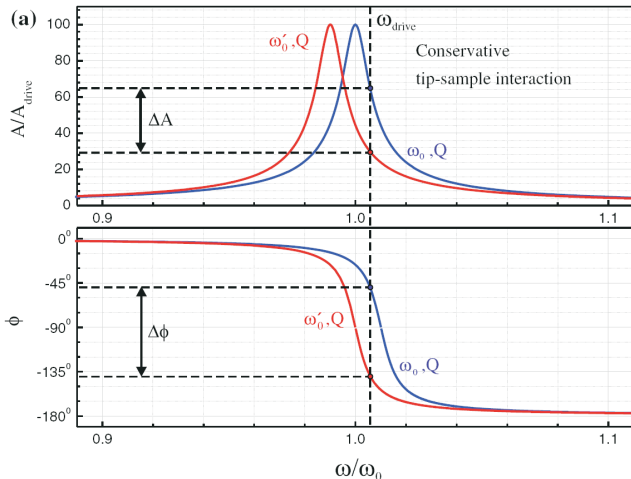
Магнитно-силовая микроскопия

Сканирующая холловская и СКВИД-микроскопия

Возможности сканирующей магнитометрии



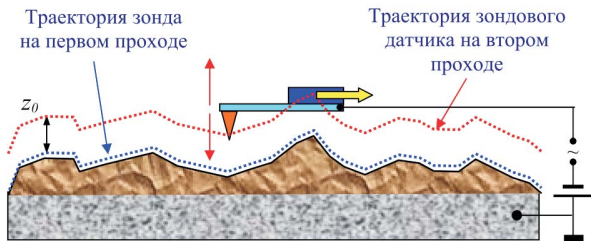
AFM-микроскопия: измерение параметров вынужденных колебаний зонда с координатно-зависящей силой



По изменению амплитуды на заданной частоте можно судить о сдвиге резонансной частоты нагруженного резонатора $\Delta\omega/\omega_0 = -F'_z/2k$. Изменение фазы колебаний $\Delta\phi = -Q F'_z/k$ пропорционально градиенту силы взаимодействия зонда с поверхностью.

Сканирующая магнитно-силовая микроскопия

англ. magnetic-force microscopy (MFM)



Первый проход: стандартное измерение рельефа в полуконтактной или бесконтактной моде

Второй проход: бесконтактные AFM измерения с механическим возбуждением намагниченного зонда в режиме постоянной высоты зонда над поверхностью образца вне области действия поверхностных сил

На больших высотах взаимодействие зонда с образцом будет полностью магнитостатическим

Введение: уравнения Максвелла

лекция 1

Макроскопические уравнения Максвелла для описания электромагнитного поля в веществе

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = 4\pi \rho_0(\mathbf{r}, t),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где $\mathbf{j}_0(\mathbf{r}, t)$ – плотность внешних токов, $\rho_0(\mathbf{r}, t)$ – плотность внешних зарядов.

В статическом случае ($\partial/\partial t = 0$) система четырех уравнений распадается на две независимых системы уравнений, описывающих электро- и магнитостатику

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{и} \quad \operatorname{div} \mathbf{D}(\mathbf{r}) = 4\pi \rho_0(\mathbf{r}),$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0.$$

Используем соотношение $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}(\mathbf{r}) + 4\pi\mathbf{M}(\mathbf{r})$ и запишем уравнения магнитостатики либо в виде задачи для поля $\mathbf{B}(\mathbf{r})$

$$\operatorname{rot} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) + c \operatorname{rot} \mathbf{M}(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \operatorname{div} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0,$$

либо в виде задачи для поля $\mathbf{H}(\mathbf{r})$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_0(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \operatorname{div} \mathbf{H}(\mathbf{r}) = -4\pi \operatorname{div} \mathbf{M}(\mathbf{r}).$$

Представим результирующую напряженность магнитного поля (максвелловское поле) в виде суммы

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{H}_M(\mathbf{r}),$$

где $\mathbf{H}_0(\mathbf{r})$ – внешнее магнитное поле, создаваемое заданными токами, и $\mathbf{H}_M(\mathbf{r})$ – поле, создаваемое неоднородным распределением намагниченности:

Поле внешних токов

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}_0(\mathbf{r}),$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) = 0.$$

Размагничивающее поле

$$\operatorname{rot} \mathbf{H}_M(\mathbf{r}) = 0,$$

$$\operatorname{div} \mathbf{H}_M(\mathbf{r}) = -4\pi \operatorname{div} \mathbf{M}(\mathbf{r}).$$

По аналогии с электростатикой можно ввести плотность «магнитного заряда»

$$\rho_M(\mathbf{r}) = -\operatorname{div} \mathbf{M}(\mathbf{r}).$$

Безвихревой характер поля $\mathbf{H}_M(\mathbf{r})$ позволяет ввести скалярный потенциал $\phi(\mathbf{r})$ и записать

$$\mathbf{H}_M(\mathbf{r}) = -\nabla\phi.$$

Энергия магнитостатического взаимодействия

Если ферромагнетик с неоднородным распределением намагниченности $\mathbf{M}(\mathbf{r})$ находится во внешнем магнитном поле с напряженностью $\mathbf{H}_0(\mathbf{r})$, то энергия взаимодействия описывается выражением зеемановского типа

$$W = - \iiint \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) dV.$$

Это выражение описывает тенденцию к выстраиванию локальных магнитных моментов ферромагнетика по внешнему магнитному полю.

Не путать с энергией магнитостатического взаимодействия с собственным полем

$$W = -\frac{1}{2} \iiint \mathbf{H}_M(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) dV.$$

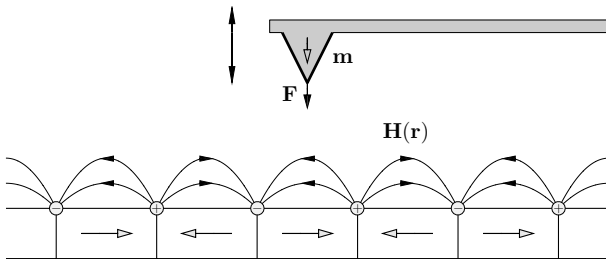
Рассмотрим энергию взаимодействия внешнего магнитного поля с малой ферромагнитной частицей, считая

$$\mathbf{M}(\mathbf{r}) = \mathbf{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0),$$

где \mathbf{r}_0 – радиус-вектор, соответствующий центру малой магнитной частицы. В этом случае

$$W = - \iiint \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{M}(\mathbf{r}) dV = - \iiint \mathbf{H}_0(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) dV = -\mathbf{H}_0(\mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{m}.$$

Сила, действующая на намагниченный зонд



Энергия магнитостатического взаимодействия равна

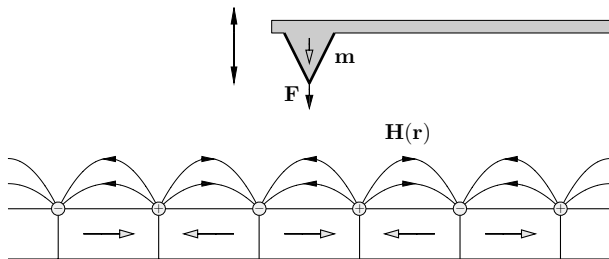
$$W(\mathbf{r}_0) = -\mathbf{H}_M(\mathbf{r}_0) \cdot \mathbf{m}.$$

Мы учли, что размагничивающее поле $\mathbf{H}_M(\mathbf{r})$, создаваемое магнитными текстурами в образце, по отношению к магнитному зонду является внешним полем.

Поскольку магнитостатическая энергия взаимодействия зависит от относительного положения магнитного зонда по отношению к поверхности исследуемого образца, на зонд со стороны образца будет действовать сила

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}_0) = -\nabla W(\mathbf{r}_0) = \left\{ m_x \left(\frac{\partial H_{M,x}}{\partial x_0} \right) \mathbf{e}_x + m_y \left(\frac{\partial H_{M,y}}{\partial y_0} \right) \mathbf{e}_y + m_z \left(\frac{\partial H_{M,z}}{\partial z_0} \right) \mathbf{e}_z \right\}_{x_0, y_0, z_0}.$$

Сдвиг частоты и фазы вынужденных колебаний



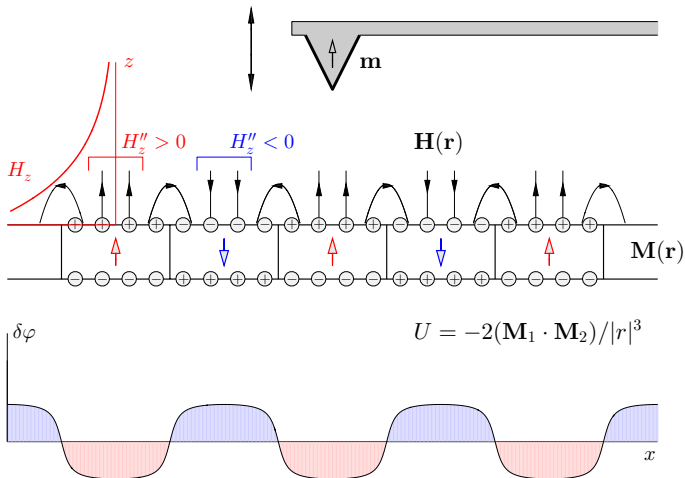
Для зонда, намагниченного по оси z , есть только нормальная компонента силы

$$F_z = m_z \left(\frac{\partial H_{M,z}}{\partial z_0} \right)_{x_0, y_0, z_0} .$$

Наличие координатно-зависящей силы ожидаемо приводит к сдвигу частоты и фазы колеблющегося зонда:

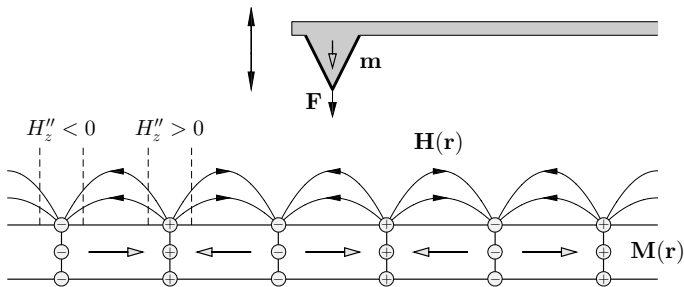
$$\frac{\delta\omega}{\omega_0} = -\frac{F'_z}{2k} = -\frac{m_z}{2k} \left(\frac{\partial^2 H_{M,z}}{\partial z_0^2} \right)_{x_0, y_0, z_0} \quad \text{и} \quad \delta\varphi = -Q \frac{F'_z}{2k} = -Q \frac{m_z}{2k} \left(\frac{\partial^2 H_{M,z}}{\partial z_0^2} \right)_{x_0, y_0, z_0} .$$

Ферромагнетик с анизотропией типа «лёгкая ось»



Абсолютное значение второй производной $\partial^2 H_{M,z} / \partial z^2$ будет максимально над центрами магнитных доменов и минимально над доменными стенками, при этом знак $\partial^2 H_{M,z} / \partial z^2$ противоположен знаку ближайшего к зонду локального «магнитного» заряда. MFM-сигнал будет иметь два уровня интенсивности и соответствовать магнитным доменам с положительной и отрицательной проекцией z -компонент намагниченности.

Ферромагнетик с анизотропией типа «лёгкая плоскость»

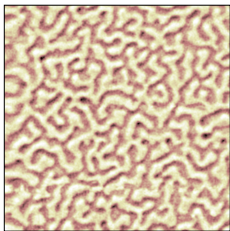


Абсолютное значение второй производной $\partial^2 H_{M,z} / \partial^2 z$ будет максимально над доменными стенками и близко к нулю над центрами магнитных доменов.

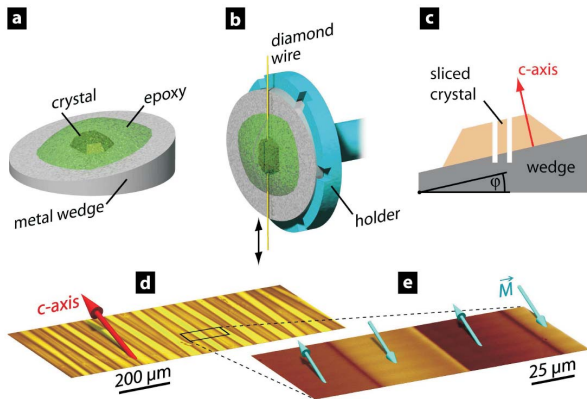
Следовательно, MFM-сигнал будет иметь три уровня интенсивности, при этом пространственное расположение областей с максимальным и минимальным сигналом будет соответствовать «магнитным» полюсам, которые локализованы вблизи доменных стенок.

Типичные результаты: магнитные домены

Лабиринтная структура
в плёнках CoPt

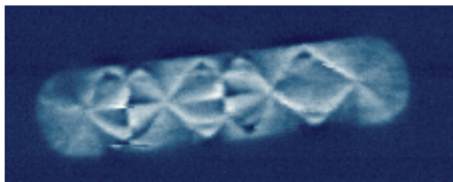
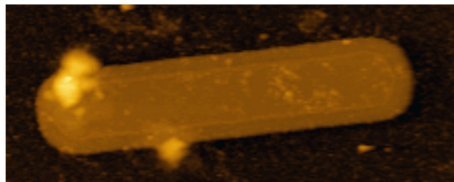


Полосатая доменная структура в монокристаллах BaFeO



Right panel is taken from J. Fritzsche, PhD thesis (K. U. Leuven, 2006)

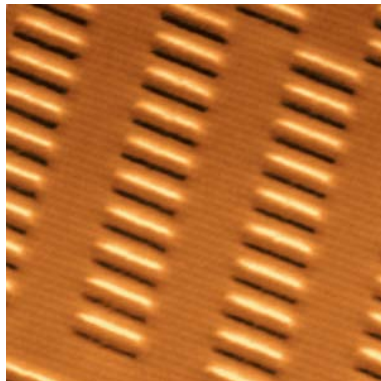
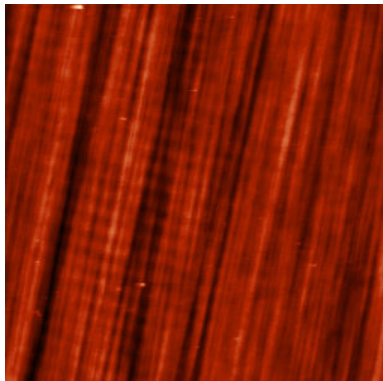
Типичные результаты: магнитные домены



Топография и магнитно-силовое изображение ферромагнитных кобальтовых полосок с доменной структурой (размер кадра $13 \times 5 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

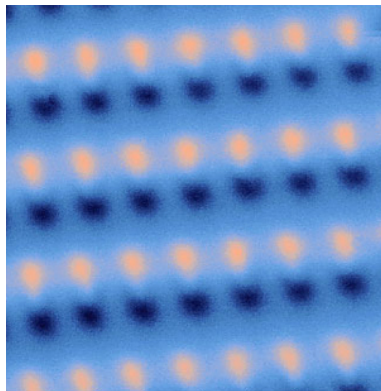
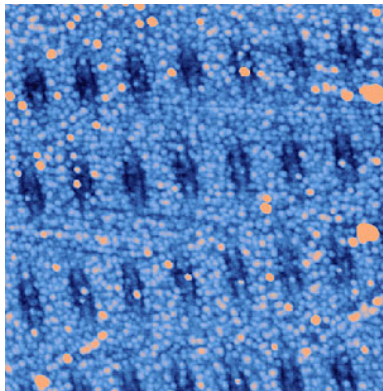
Типичные результаты: магнитные частицы



Топография и магнитные домены жёсткого HDD диска

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

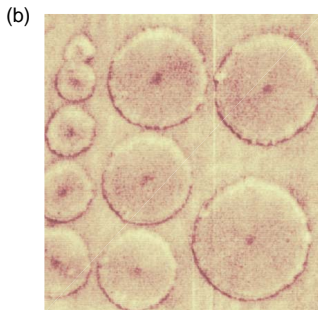
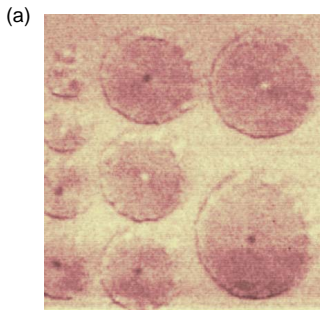
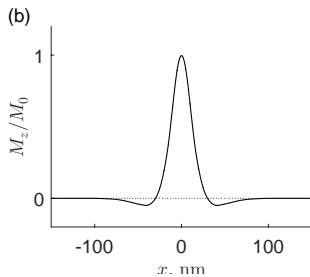
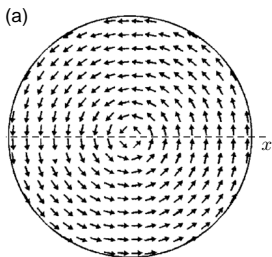
Типичные результаты: магнитные частицы



Топография и магнитно-силовое изображение ферромагнитных частиц в парамагнитной пленке. Магнитное изображение выглядит как массив субмикронных магнитных диполей (размер кадра 4×4 мкм²).

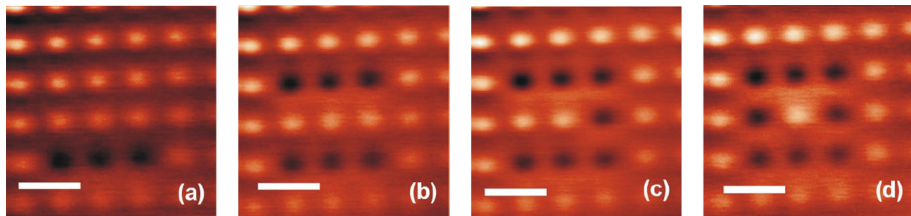
Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Типичные результаты: магнитные частицы



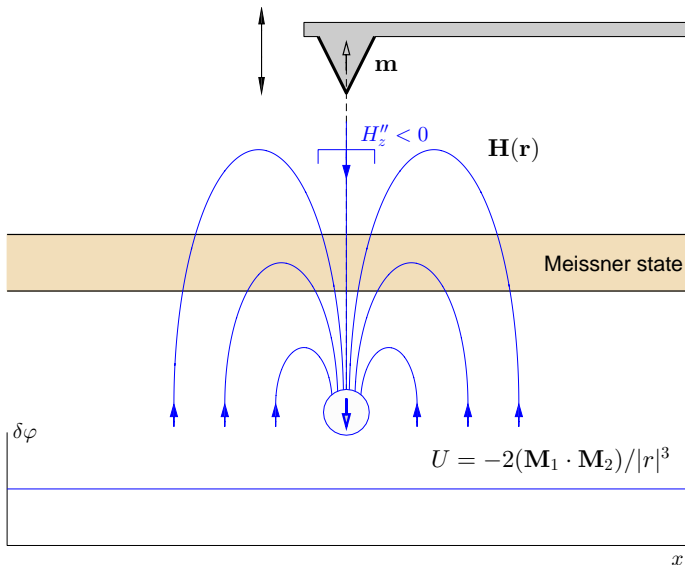
Типичные результаты: магнитные частицы

На малых высотах собственное поле зонда может влиять на магнитную структуру образца!

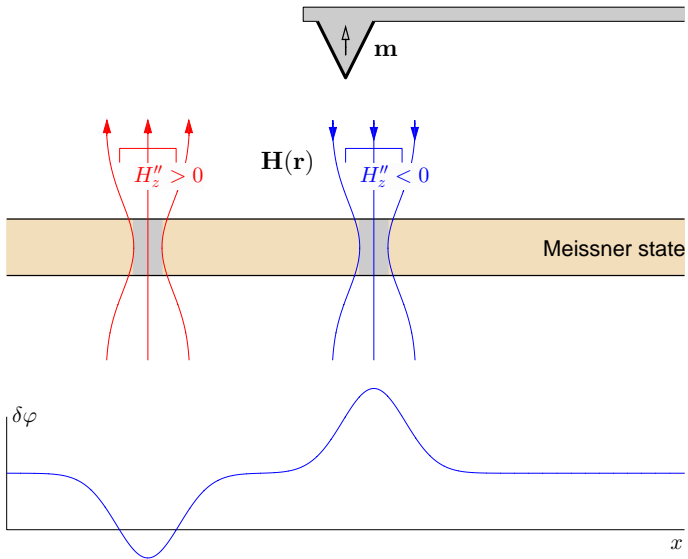


Карты MFM-сигнала, иллюстрирующие результат последовательного перемагничивания отдельных ферромагнитных Co/Pt дисков диаметром 200 нм собственным магнитным полем зонда. Белая полоса соответствует 1 мкм.

Магнитно-силовая микроскопия: сверхпроводящие плёнки

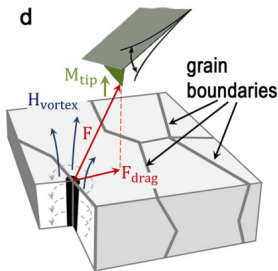
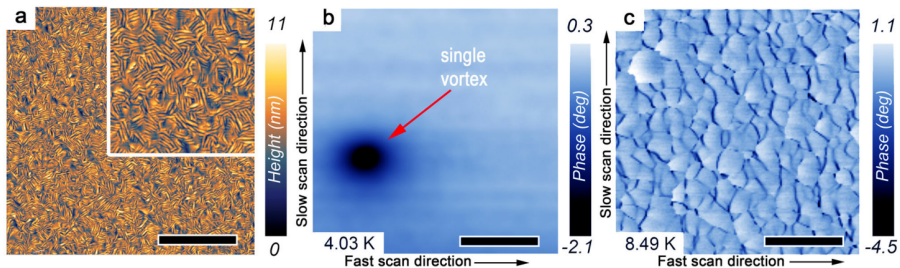


Магнитно-силовая микроскопия: вихри и антивихри



Типичные результаты: вихри в Nb плёнках

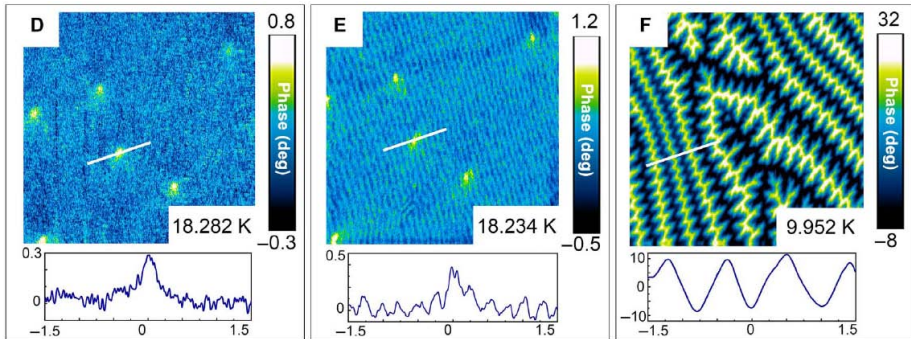
magnetic-force microscopy @ $T \ll T_c$ vs. scanning vortex microscopy @ $T \rightarrow T_c$



Hovhannisyanyan, Grebenchuk, Larionov, Shishkin, Grebenko, Kupchinskaya, Dobrovolskaya, Skryabina, Aladyshkin, Dremov, Golovchanskiy, Samokhvalov, Melnikov, Roditchev and Stolyarov, *Scanning vortex microscopy reveals thickness-dependent pinning nano-network in superconducting niobium films*. Commun. Mater. (2025); doi: 10.1038/s43246-025-00759-6

Типичные результаты: ферромагнитные сверхпроводники

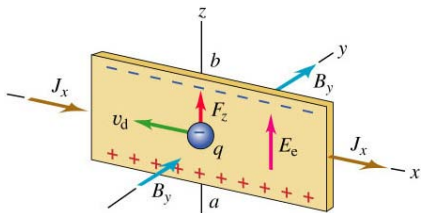
доменные структуры и (анти)вихри в монокристаллах $\text{EuFe}_2(\text{As}_{0.79}\text{P}_{0.21})_2$



Stolyarov *et al.*, Domain Meissner state and spontaneous vortex-antivortex generation in the ferromagnetic superconductor $\text{EuFe}_2(\text{As}_{0.79}\text{P}_{0.21})_2$ // *Science Advances*, v. 4, eaat1061 (2018).

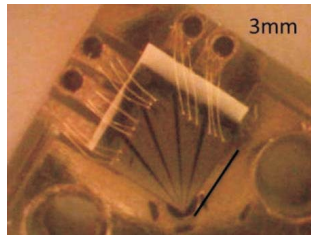
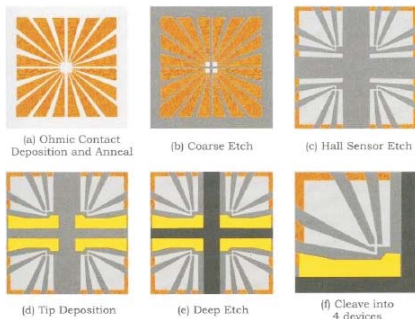
Сканирующая холловская микроскопия

scanning Hall probe microscopy (SHPM)



Эффект Холла (1879) – появление поперечного электрического поля при наличии транспортного тока и поперечного магнитного поля.

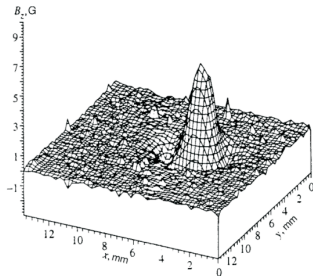
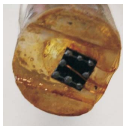
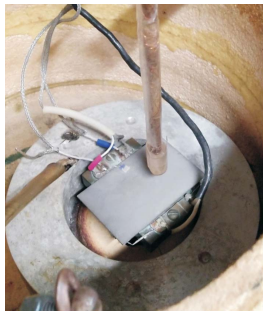
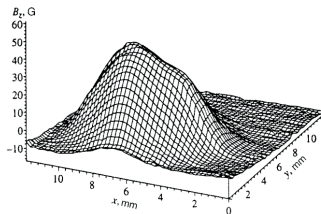
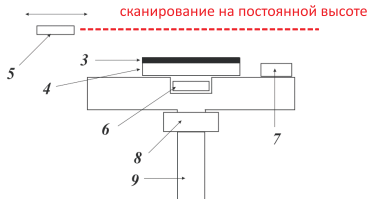
Датчик Холла с дополнительным электродом для контроля высоты



Сканирующая холловская микроскопия в ИФМ РАН

Образец: пленка YBaCuO , $T_c = 91 \text{ K}$

Датчик Холла: материал – InSb , размер – $50 \times 100 \text{ мкм}^2$, высота сканирования – $100 - 500 \text{ мкм}$



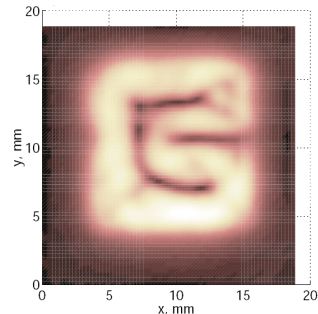
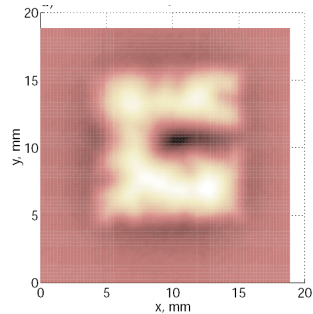
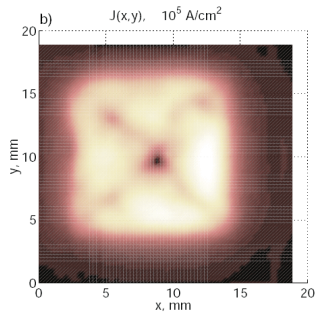
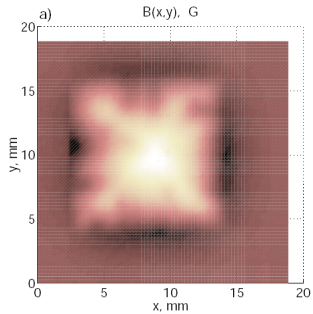
Вопрос: как восстановить распределение токов внутри образца по результатам измерений полей рассеяния над образцом?

Прямая задача: уравнение Максвелла и закон Био-Савара-Лапласа

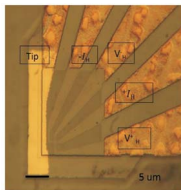
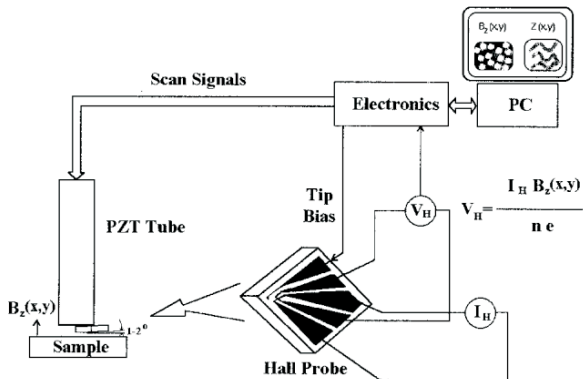
$$\operatorname{rot} \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}(\mathbf{r}) \quad \text{и} \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{1}{c} \iiint \frac{[\mathbf{j}(\mathbf{r}') \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} d^3 \mathbf{r}'$$

Обратная задача: в общем виде решения не имеет. Приближенное аналитическое решение для двумерного распределения токов

$$\mathbf{J}(x, y) = \frac{c}{4\pi d_s} \iint B_z(x', y', z = h) \frac{[\mathbf{e}_z \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} dx' dy'$$



Сканирующая холловская микроскопия с контролем высоты



Сенсор имеет пять контактов: два – для инъекции транспортного тока, два – для измерения холловского напряжения и один – для измерения туннельного тока.

Обратная связь удерживает неизменным туннельный ток и, соответственно, фактическую высоту датчика над поверхностью.

Типичные результаты: холловская микроскопия

Scanning Hall probe microscopy of superconductors and magnetic materials

A. Oral and S. J. Bending

School of Physics, University of Bath, Bath BA2 7AY, England

M. Henini

Department of Physics, University of Nottingham, Nottingham NG7 2RD, England

(Received 25 July 1995; accepted 29 November 1995)

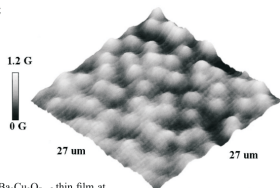


FIG. 4. SHPM image of individual vortices in a $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ thin film at 77.6 K. The sample was field cooled at +2 G.

PHYSICAL REVIEW B **84**, 104507 (2011)

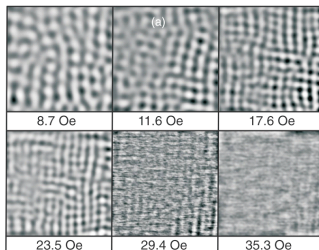
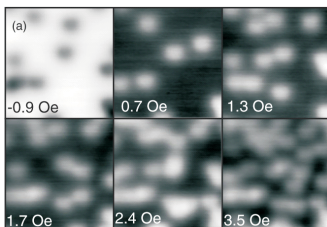


Vortex imaging and vortex lattice transitions in superconducting Sr_2RuO_4 single crystals

P. J. Curran, V. V. Khotkevych, and S. J. Bending

Department of Physics, University of Bath, Claverton Down, Bath BA2 7AY, United Kingdom

A. S. Gibbs, S. L. Lee, and A. P. Mackenzie



Типичные результаты: холловская микроскопия

По профилю зависимости $B_z(x, y)$ для одиночного вихря можно экспериментально определить глубину проникновения магнитного поля

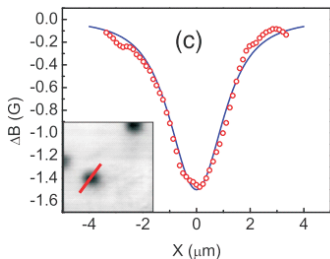


Figure 2(c) shows a fit to the profile across a well-isolated vortex measured at $H = -0.2$ Oe (see inset) based on the Clem variational model (Ref. 27) modified to account for surface screening effects using an approach due to Kirtley *et al.* (Ref. 14) and assuming a variational coherence length $\xi_v = 66$ nm, $\lambda = 165$ nm, and an active Hall probe width, w , of 600 nm:

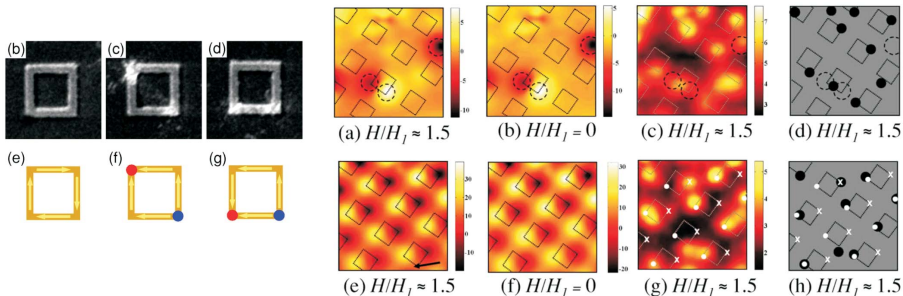
$$B(x, y, z) = \frac{\phi_0}{w^2} \int_{y-\frac{w}{2}}^{y+\frac{w}{2}} \int_{x-\frac{w}{2}}^{x+\frac{w}{2}} \int_0^\infty \frac{K_1(\sqrt{k^2 + \lambda^{-2}}\xi_v)}{2\pi\lambda(\sqrt{k^2 + \lambda^{-2}} + k)K_1(\xi_v/\lambda)} \times J_0(k\sqrt{x'^2 + y'^2})\exp(-kz)kdkdx'dy',$$

Типичные результаты: холловская микроскопия

Магнитные кольца в зависимости от подмагничивающего поля могут находиться в разных магнитных состояниях и, соответственно, по-разному взаимодействовать с сверхпроводящими вихрями и антивихрями:

Direct visualization of magnetic vortex pinning in superconductors

Mariela Menghini,¹ R. B. G. Kramer,¹ A. V. Silhanek,¹ J. Sautner,² V. Metlushko,² K. De Keyser,¹ J. Fritzsche,¹
N. Verellen,¹ and V. V. Moshchalkov¹



Типичные результаты: холловская микроскопия

Received 12 Sep 2016 | Accepted 8 Nov 2016 | Published 9 Dec 2016

DOI: 10.1038/ncomms13880

OPEN

Nanoscale assembly of superconducting vortices with scanning tunnelling microscope tip

Jun-Yi Ge¹, Vladimir N. Gladilin^{1,2}, Jacques Tempere², Cun Xue^{1,3}, Jozef T. Devreese², Joris Van de Vondel¹, Youhe Zhou⁴ & Victor V. Moshchalkov¹

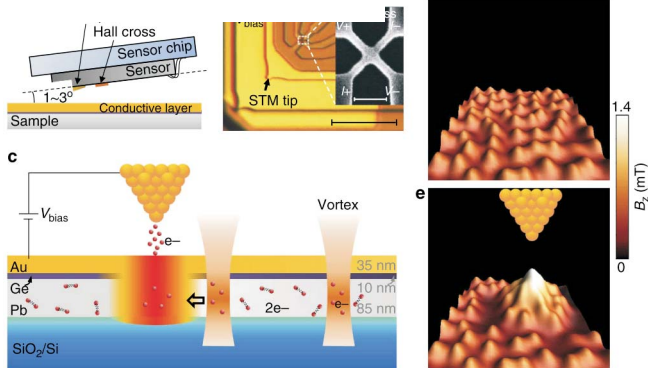


Figure 1 | Introduction to the operation of the heating effect generated with a scanning tunnelling microscope tip. (a) Schematic view of the scanning Hall probe microscopy (SHPM). A scanning tunnelling microscope (STM) tip is assembled together with a Hall cross to make a sensor, which is aligned at a small angle ($1-3^\circ$) to the sample surface. (b) An optical image of the Hall sensor. A scanning electron microscope (SEM) image of the Hall cross is shown in the inset. The longer (shorter) scale bar corresponds to 20 ($1\ \mu\text{m}$). (c) Schematic representation of the local heating effect by using the STM tip. The area close to the tip is heated up by the tunnelling current while the insulating Ge layer and the superconducting Pb layer are also warmed up due to thermal transfer. Superconductivity is suppressed in a localized region where it is energetically favourable to place vortices. (d) SHPM image of a vortex lattice observed after FC at $H = 3.74 \times 10^2\ \text{A m}^{-1}$ from above T_c down to $T = 4.2\ \text{K}$. (e) SHPM image after 5 s of tunnelling at bias voltage of 0.5 V and tunnelling current of 0.5 nA, and then lifting up the tip for Hall probe imaging. A vortex cluster forms at the tip position due to the local quench of the hot spot.

Типичные результаты: холловская микроскопия

Room temperature magnetic imaging of magnetic storage media and garnet epilayers in the presence of external magnetic fields using a sub-micron GaAs SHPM

Adarsh Sandhu^{a,*}, Hiroshi Masuda^b, Ahmet Oral^c, Simon.J. Bending^d

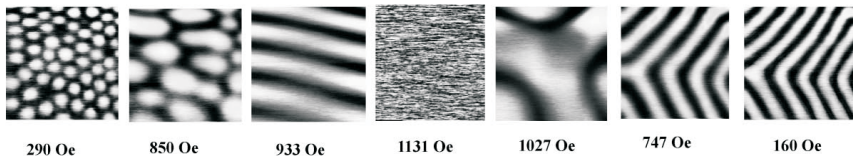


Fig. 6. $25\ \mu\text{m} \times 25\ \mu\text{m}$ images of a $5.5\ \mu\text{m}$ thick single crystal bismuth substituted iron garnet epilayer placed in a cyclic external perpendicular field.

Сканирующая СКВИД-микроскопия

SQUID = Superconducting Quantum Interference Device

Annu. Rev. Mater. Sci. 1999, 29:117–48

SCANNING SQUID MICROSCOPY

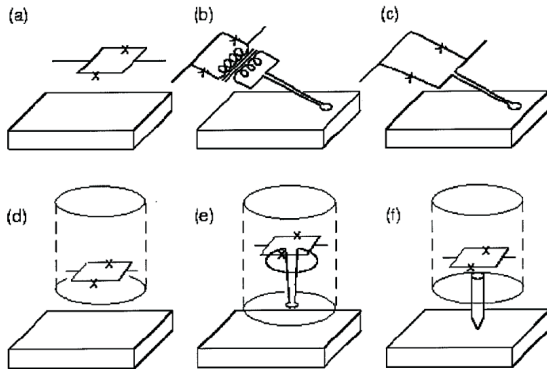
John R. Kirtley

IBM T. J. Watson Research Center, Yorktown Heights, New York 10598;
e-mail: kirtley@watson.ibm.com

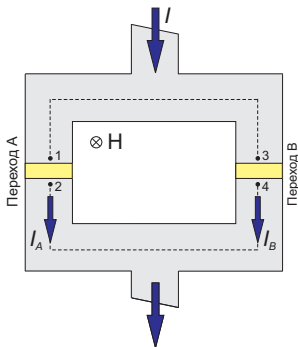
John P. Wikswo, Jr.

Department of Physics and Astronomy, Vanderbilt University, Nashville,
Tennessee 37235; e-mail: wikswojp@ctrvax.vanderbilt.edu

Figure 2 Various strategies have been used for scanning the sample relative to the SQUID. Both sample and SQUID sensor can be cooled (*a-c*) or only the SQUID (*d-f*). The field at the SQUID can be detected (*a,d*), or a superconducting pickup loop can be inductively coupled to the SQUID (*b,e*), or the pickup loop can be integrated into the SQUID design (*c*). In (*f*), a ferromagnetic tip is used to couple flux from a room temperature sample to a cooled SQUID.



Сверхпроводящий квантовый интерферометр (dc-SQUID)



Используем первое соотношение Джозефсона: $I = I_c \sin \chi$

Полный сверхток через два параллельно подключенных одинаковых точечных джозефсоновских перехода

$$I = I_c \sin \chi_A + I_c \sin \chi_B = 2I_c \sin \left(\frac{\chi_A + \chi_B}{2} \right) \cos \left(\frac{\chi_A - \chi_B}{2} \right),$$

$$\chi_A = \theta_1 - \theta_2 - \frac{2|e|\hbar}{c} \int_1^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}, \quad \chi_B = \theta_3 - \theta_4 - \frac{2|e|\hbar}{c} \int_3^4 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}.$$

Запишем обобщенный импульс куперовской пары

$$2m\mathbf{v}_s = \hbar\nabla\theta + \frac{2|e|\hbar}{c} \mathbf{A}.$$

и проинтегрируем по контурам 1-3 и 2-4, которые целиком лежат внутри сверхпроводящей области в области нулевого магнитного поля и поэтому $\mathbf{v}_s = 0$:

$$\int_1^3 \nabla\theta \cdot d\mathbf{l} = \theta_3 - \theta_1 = -\frac{2|e|\hbar}{c} \int_1^3 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad \text{и} \quad \int_4^2 \nabla\theta \cdot d\mathbf{l} = \theta_2 - \theta_4 = -\frac{2|e|\hbar}{c} \int_4^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}.$$

Преобразуем выражение для полуразности фаз

$$\begin{aligned}\frac{\chi_A - \chi_B}{2} &= \frac{(\theta_1 - \theta_2) - (\theta_3 - \theta_4)}{2} - \frac{|e|}{\hbar c} \int_1^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} + \frac{|e|}{\hbar c} \int_3^4 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \\ &= \frac{|e|}{\hbar c} \int_1^3 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} + \frac{|e|}{\hbar c} \int_3^4 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} + \frac{|e|}{\hbar c} \int_4^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} + \frac{|e|}{\hbar c} \int_2^1 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} = \\ &= \frac{|e|}{\hbar c} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \simeq \frac{|e|}{\hbar c} \iint H \cdot dS = \frac{\pi\Phi}{\Phi_0},\end{aligned}$$

где $\Phi = H \cdot S$ – поток внешнего поля через контур, $\Phi_0 = \pi\hbar c/|e|$ – квант магнитного потока.

Таким образом, сверхпроводящий ток, протекающий через два параллельных перехода, равен

$$I = 2I_c \sin\left(\frac{\chi_A + \chi_B}{2}\right) \cos\left(\frac{\chi_A - \chi_B}{2}\right) = 2I_c \sin\left(\frac{\chi_A + \chi_B}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right).$$

Поскольку максимальное (по модулю) значение $\sin(\chi_A + \chi_B)/2$ равно единице, то получаем величину максимального тока, который может пропускать двухконтактный элемент без диссипации

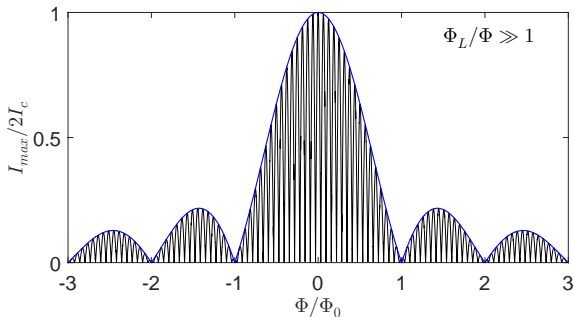
$$\max I_c^* = 2I_c \left| \cos\left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0}\right) \right|.$$

Максимальный диссипативный ток зависит от магнитного потока через контур

$$I_c^* \equiv \max I = 2I_c \left| \cos \left(\frac{\pi\Phi}{\Phi_0} \right) \right|.$$

Анализируя осцилляторную зависимость $I_c(\Phi)$, можно получить величину внешнего поля – это основной принцип джозефсоновской магнитометрии.

Сверхпроводящий двухконтактный квантовый интерферометр постоянного тока



Если учесть неоднородное распределение фазы поперек джозефсоновских переходов, то можно получить медленную огибающую, описывающую появление джозефсоновских вихрей внутри переходов при увеличении внешнего магнитного поля.

Self-Aligned Nanoscale SQUID on a Tip

Amit Finkler,^{*,†} Yehonathan Segev,[†] Yuri Myasoedov,[†] Michael L. Rappaport,[†] Lior Ne'eman,[†] Denis Vasyukov,[†] Eli Zeldov,[†] Martin E. Huber,[†] Jens Martin,[§] and Amir Yacoby[§]

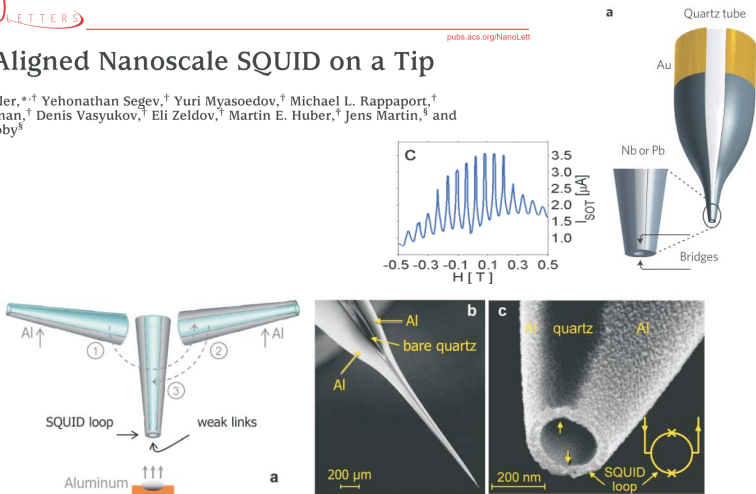
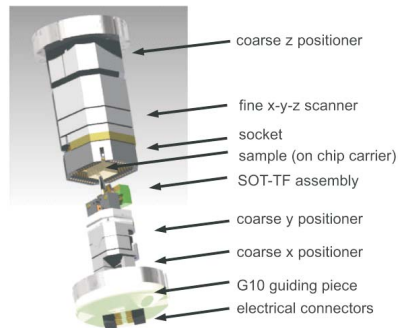
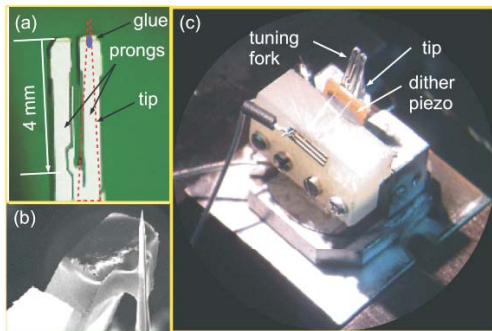


FIGURE 1. (a) Schematic description of three self-aligned deposition steps for fabrication of SOT on a hollow quartz tube pulled to a sharp tip (not to scale). In the first two steps, aluminum is evaporated onto opposite sides of the tube forming two superconducting leads that are visible as bright regions separated by a bare quartz gap of darker color in the SEM image (b). In a third evaporation step, Al is evaporated onto the apex ring that forms the nanoSQUID loop shown in the SEM image (c). The two regions of the ring between the leads, marked by the arrows in (c), form weak links acting as two Josephson junctions in the SQUID loop. The schematic electrical circuit of the SQUID is shown in the inset of (c).

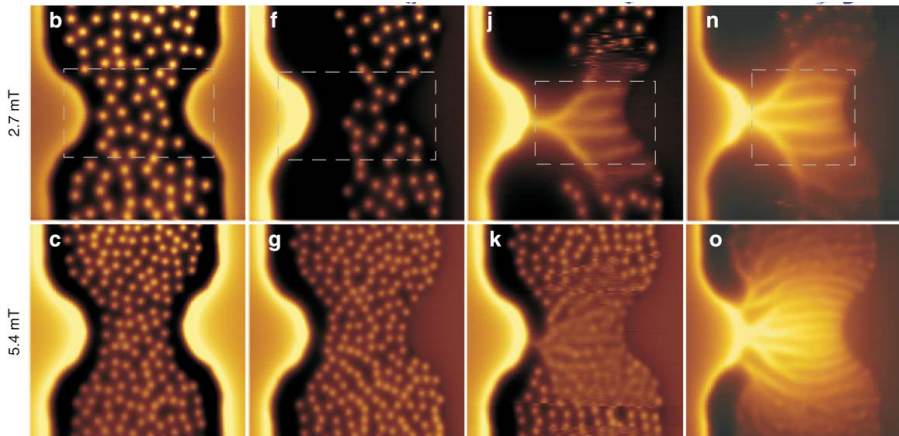
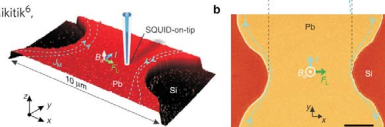
Scanning superconducting quantum interference device on a tip for magnetic imaging of nanoscale phenomena

A. Finkler,^{1,a)} D. Vasyukov,¹ Y. Segev,¹ L. Ne'eman,¹ E. O. Lachman,¹ M. L. Rappaport,¹
Y. Myasoedov,¹ E. Zeldov,¹ and M. E. Huber²



Imaging of super-fast dynamics and flow instabilities of superconducting vortices

L. Embon¹, Y. Anahory^{1,2}, Ž.L. Jelić^{3,4}, E.O. Lachman¹, Y. Myasoedov¹, M.E. Huber⁵, G.P. Mikitik⁶,
A.V. Silhanek⁴, M.V. Milošević³, A. Gurevich⁷ & E. Zeldov¹

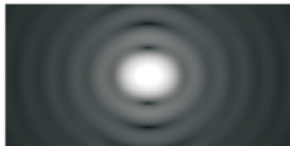


Лекция 8

Сканирующая ближнепольная микроскопия

Дифракционный предел и оценка разрешающей способности

Согласно классической теории дифракции, луч света от удаленного источника, попадая в круглый окуляр, формирует изображение, состоящее из ряда светлых и темных concentрических полос вокруг яркой центральной точки – так называемую дифракционную картину.



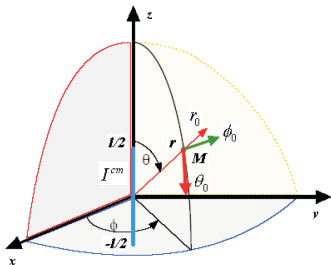
Критерий Релея (Rayleigh):

Если центральное световое пятно дифракционной картины одного источника света удалено от центрального светового пятна другого источника света на расстояние не менее радиуса первой темной дифракционной полосы, то мы начинаем воспринимать два источника света отдельно: это расстояние называется линейным разрешением прибора.

Если два источника света удалены друг от друга на расстояние d , расстояние от них до нас равно D , длина световой волны равна λ , а диаметр окуляра равен A , то условием оптического разрешения двух источников в окуляре будет:

$$\frac{d}{D} > 1.22 \frac{\lambda}{A}.$$

Задача об излучении электрического диполя



$$E_r = \frac{k l I^{cm}}{2 \pi \omega \epsilon \epsilon_0} \cdot \frac{\cos \theta}{r^2} \cdot \left(\frac{1}{kr} \sin(\omega t - kr) + \cos(\omega t - kr) \right)$$

$$E_\theta = \frac{k^2 l I^{cm}}{4 \pi \omega \epsilon \epsilon_0} \cdot \frac{\sin \theta}{r} \cdot \left(\frac{1}{kr} \cos(\omega t - kr) + \left(\frac{1}{k^2 r^2} - 1 \right) \sin(\omega t - kr) \right)$$

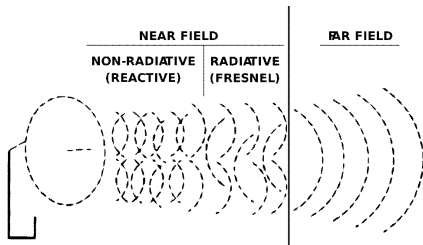
$$H_\phi = \frac{k l I^{cm}}{4 \pi} \cdot \frac{\sin \theta}{r} \cdot \left(\frac{1}{kr} \cos(\omega t - kr) - \sin(\omega t - kr) \right)$$

Терминология:

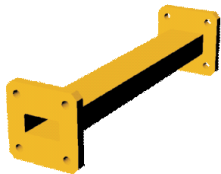
Дальняя зона или зона Фраунгофера ($\sim 1/r$)

Промежуточная зона

Ближняя зона ($\sim 1/r^3$)



Моды в прямоугольных волноводах



Поперечная структура E-волны

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) E_z + \kappa^2 E_z = 0$$

Поперечная структура H-волны

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) H_z + \kappa^2 H_z = 0$$

Для металлического волновода прямоугольного сечения

$$\kappa_{n,m} = \sqrt{\frac{\pi^2 n^2}{a^2} + \frac{\pi^2 m^2}{b^2}} \implies \kappa_{min} = \frac{\pi}{a}$$

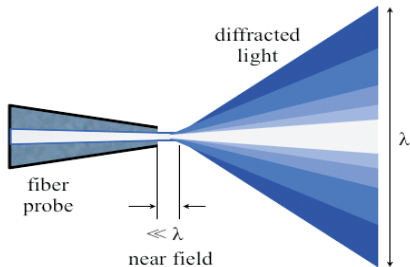
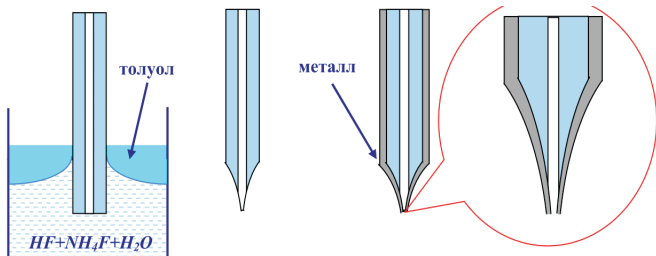
Дисперсионная характеристика электромагнитных волн в волноводе $\omega^2 = c^2 (k_z^2 + \kappa^2)$

Групповая скорость $v_{гр} = d\omega/dk_z = ck_z/\sqrt{k_z^2 + \kappa^2}$

Предельные значения для односвязных волноводов: $k_z = 0$ и $\omega_{min} = c \cdot \pi/a$ (для волны H_{10})

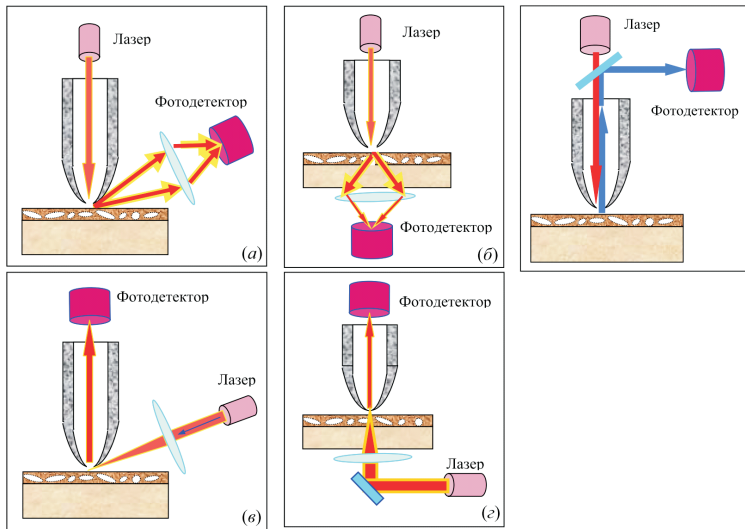
Для $\omega < \omega_{min}$ и $a < \lambda/2$ в системе невозможны распространяющиеся моды постоянной амплитуды, поэтому в запредельных волноводах существуют только нераспространяющиеся (эванесцентные) моды с мнимым волновым вектором – аналог туннельного эффекта!

Преодоление дифракционного предела в ближней зоне запердельных волноводов



Ближнепольная сканирующая оптическая микроскопия

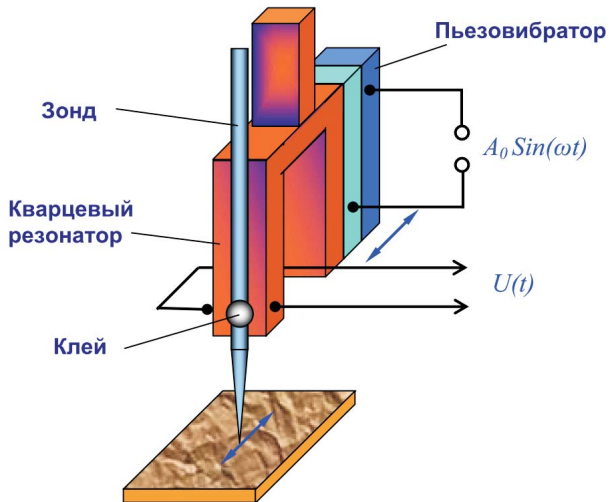
англ. near-field scanning optical microscopy (NSOM), scanning near-field optical microscopy (SNOM)



Transmission mode / Reflection mode / Collection mode / Illumination+collection mode

Возможная реализация просвечивающего ближнепольного сканирующего микроскопа

англ. shear-force microscopy



Типичные результаты: NSOM

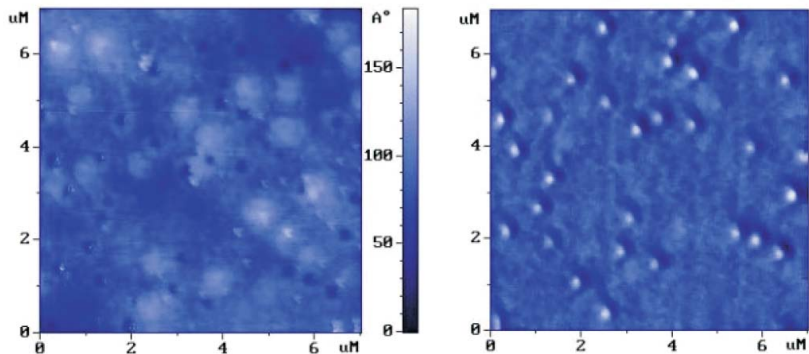
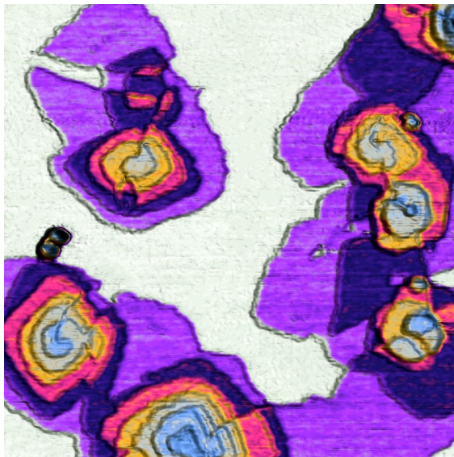


Рис. 102. “Shear force” АСМ изображение рельефа поверхности (слева) и ближнепольное оптическое изображение (справа) образца с квантовыми точками InAs [12]

Изображение взято из монографии Миронова

Типичные результаты: NSOM

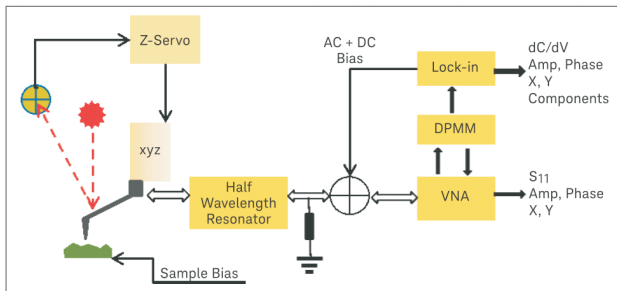


Отражение ИК излучения от ультратонкой пленки олиготиофена (размер кадра $3 \times 3 \text{ мкм}^2$).

Изображение взято с сайта <https://www.ntmdt-si.ru/resources/scan-gallery/>

Принципиальная схема сканирующего СВЧ микроскопа

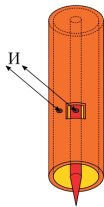
англ. scanning microwave microscopy, scanning impedance microscopy



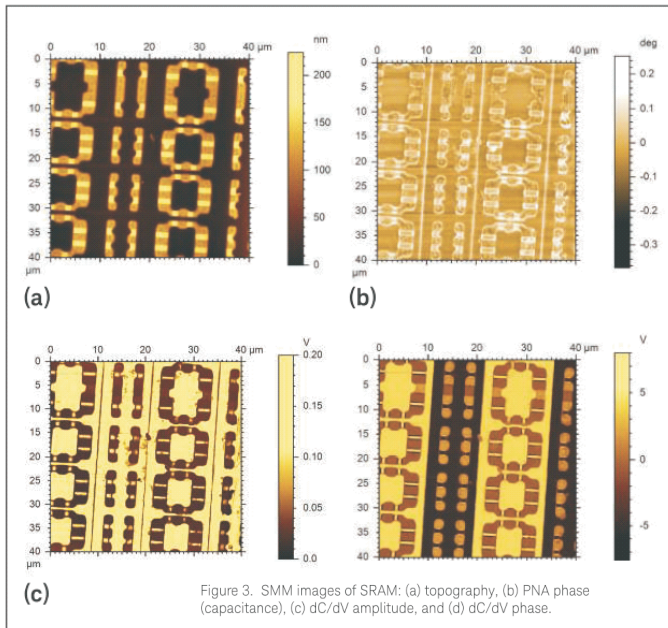
Омическая связь

Ёмкостная связь

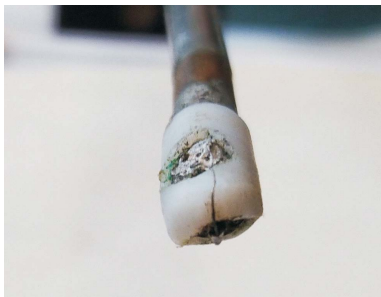
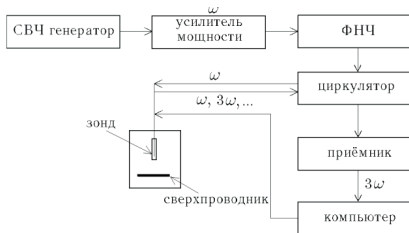
Индуктивная связь



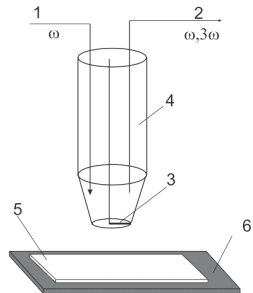
Типичные результаты: сканирующая СВЧ микрокопия

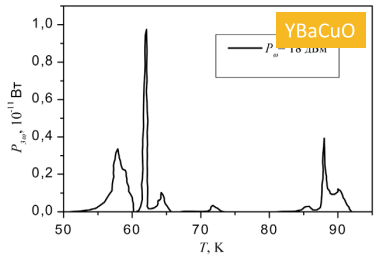
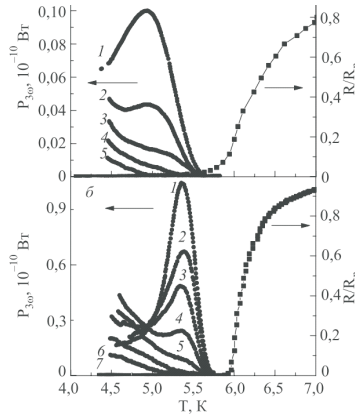
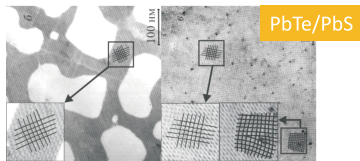
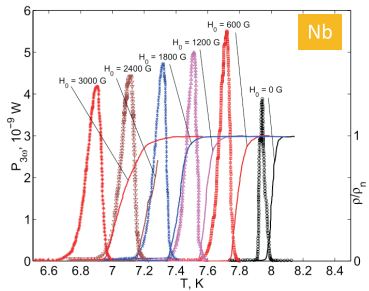


Ближнепольная нелинейная сканирующая СВЧ микроскопия



ИФМ РАН:
Ю. Н. Ноздрин, Е. Е. Пестов





Аладышкин, Андронов, Пестов, Ноздрин и др., Экспериментальное исследование нелинейного СВЧ отклика сверхпроводников // Известия ВУЗов. Радиофизика, том. XLVI, стр. 123-143 (2003)
 Юзефович и др., Сверхпроводимость границ раздела полупроводниковых слоев в двухслойных и многослойных гетероструктурах типа $A^IV B^VI$ // Физика низких температур, т. 34, 1249-1258 (2008)

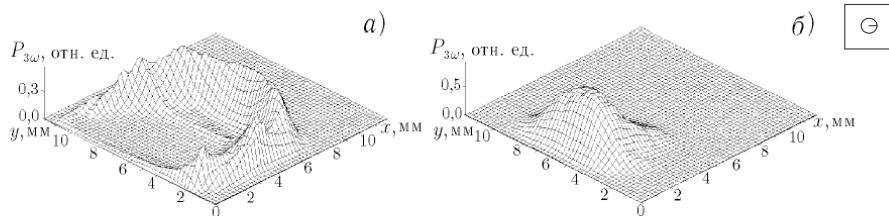


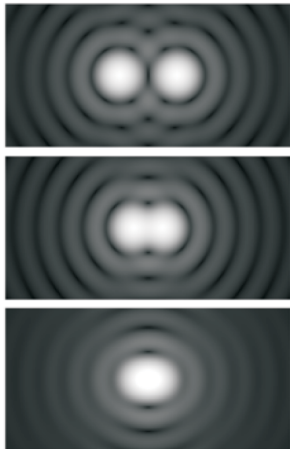
Рис. 14. Пространственное распределение нелинейного СВЧ отклика плёнки YBCO при $T = 88$ К (а) и $T = 90$ К (б). Проволочка зонда расположена параллельно оси x

Эволюция карт нелинейного отклика аналогична эволюции карт, полученных сканирующей лазерной микроскопии

Метод позволяет регистрировать пространственное распределение критической температуры в сверхпроводящих плёнках с разрешением порядка 100 мкм ($\ll \lambda$)

Аладышкин, Андронов, Пестов, Ноздрин и др., *Экспериментальное исследование нелинейного СВЧ отклика сверхпроводников* // Известия ВУЗов. Радиофизика, том. XLVI, стр. 123-143 (2003).

Дифракционный предел и оценка разрешающей способности



Критерий Релея:

$$\frac{d}{D} > 1.22 \frac{\lambda}{A}.$$

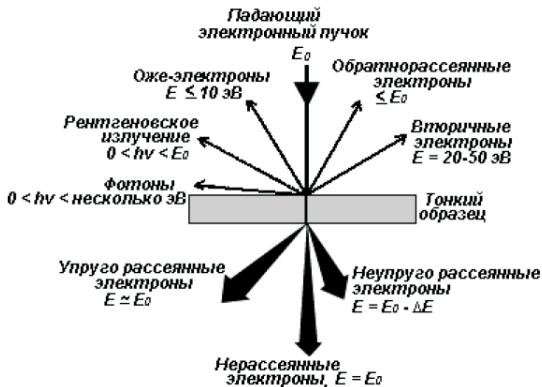
Для повышения разрешающей способности нужно уменьшать длину волны λ зондирующего излучения!

Длина электронной волны в нерелятивистском приближении

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}} \quad \Rightarrow \quad \lambda[\text{нм}] = \sqrt{\frac{1.5}{E[\text{эВ}]}}$$

Например, для $E = 150$ эВ длина волны равна 0.1 нм, для $E = 15$ кэВ длина волны равна 0.01 нм!

Взаимодействие электронов с твёрдым телом



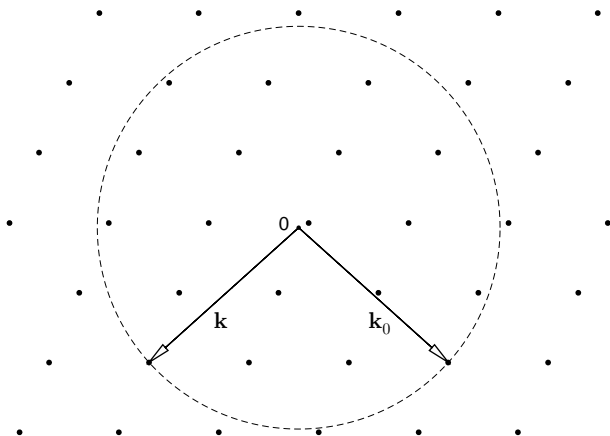
Типичные энергии: от 1 до 50 кэВ

Типы взаимодействий: упругое (с сохранением энергии) и неупругое (без сохранения энергии)

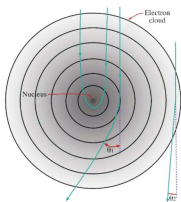
Получаемое SEM-изображение характеризуется яркостью и контрастностью, которые зависят от «формы» пучка электронов, падающих на образец; характера взаимодействия электронов с образцом; типа используемого детектора и физических процессов, происходящих в нем; локального состава в области сканирования; топографии поверхности образца.

Почти упругое рассеяние электронов на кристаллической структуре

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \mathbf{K} \quad \text{при условии} \quad |\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$



Почти упругое рассеяние электронов на ядрах и тормозное излучение



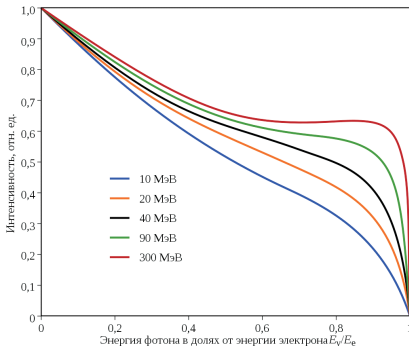
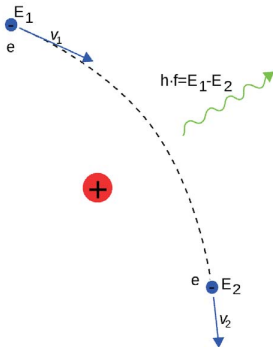
Рассеяние на изолированном атоме

При рассеянии на атомах электрон теряет малую часть энергии

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{E} \right)^2 \frac{1}{4\sin^4(\theta/2)}$$

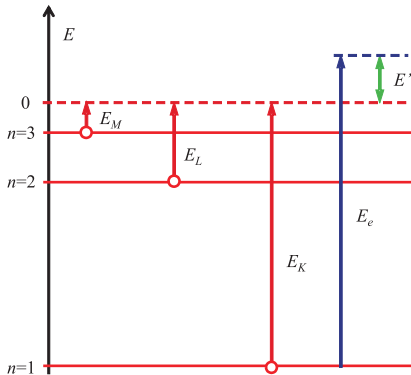
$$E_N = \frac{2Mm_e}{(M + m_e)^2} E$$

Зависимость интенсивности тормозного излучения от нормированной энергии фотона для налетающих электронов



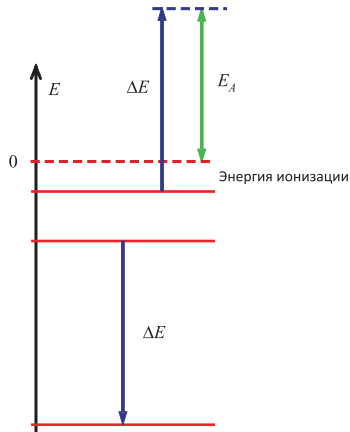
Неупругое рассеяние и характеристическое излучение

Этап 1: Ионизация внутренних оболочек атома



При достаточной энергии E_e наибольшую вероятность имеет ионизация оболочки с минимальным значением главного квантового числа n

Этап 2: Оже-рекомбинация (для малых Z)



или испускание фотона (для больших Z)
(характеристическое рентгеновское излучение)

$$\Delta E = E_m - E_n$$

Прочие неупругие процессы

Возбуждение фононов

Кинетическая энергия первичного электрона передаётся колебаниям атомов. Увеличение амплитуды колебаний атомов относительно положений их равновесия выражается в росте температуры облучаемого образца.

Эмиссия электронов проводимости

Первичные электроны могут передавать энергию электронами проводимости, в результате чего электроны проводимости могут выйти из поверхности металла и стать свободными. Несмотря на относительно большую кинетическую энергию первичных электронов (порядка десятка кэВ), большинство вторичных электронов имеют энергии в диапазоне от нуля до десятков электрон-вольт. Такие частицы в электронной микроскопии называются вторичными электронами. Спектр вторичных электронов – непрерывный.

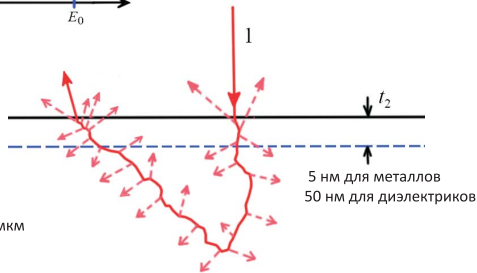
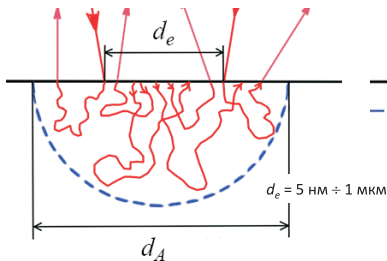
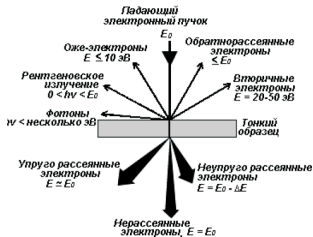
Возбуждение плазмонов

При попадании в металл первичные электроны возбуждают в ансамбле электронов проводимости коллективные колебания (плазмоны). Генерирование плазмонов в металле составляет существенную долю неупругих потерь энергии первичных электронов

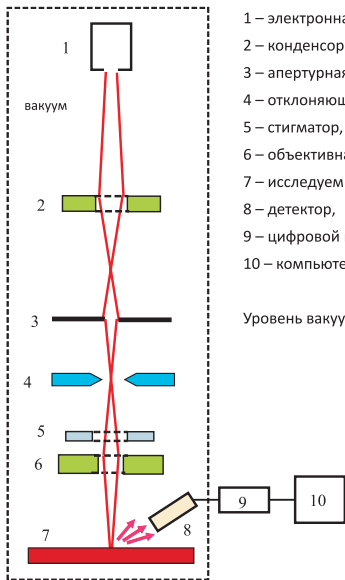
Возбуждение электрон-дырочных пар и катодолюминисценция

Первичный электрон, попав в вещество, может передать валентному электрону энергию, превышающую ширину запрещенной зоны. Валентный электрон переходит в зону проводимости, а в валентной зоне освобождается одноэлектронное состояние, т.е. образуется «дырка». Через некоторое время происходит рекомбинация: электрон из зоны проводимости заполняет «дырку», а потеря энергии может компенсироваться разными способами, в том числе образованием фотона.

Отраженные и вторичные электроны

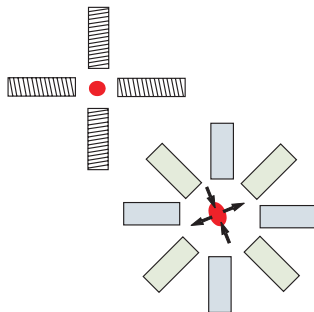
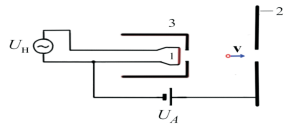


Сканирующая электронная микроскопия



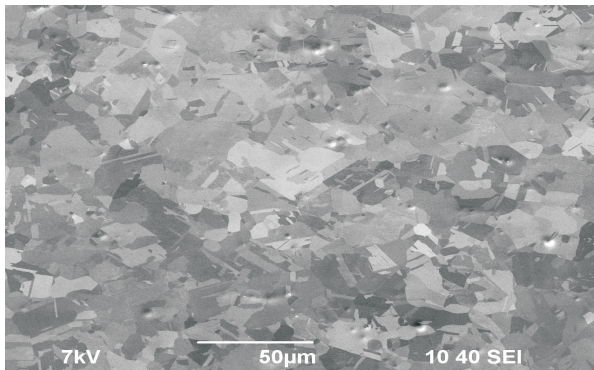
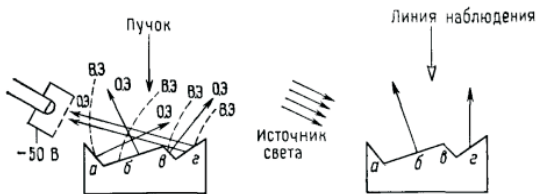
- 1 – электронная пушка,
- 2 – конденсорная магнитная линза,
- 3 – апертурная диафрагма,
- 4 – отклоняющие (сканирующие) катушки
- 5 – стигматор,
- 6 – объективная магнитная линза,
- 7 – исследуемый образец,
- 8 – детектор,
- 9 – цифровой преобразователь,
- 10 – компьютер с дисплеем

Уровень вакуума: $10^{-6} \dots 10^{-11}$ мбар



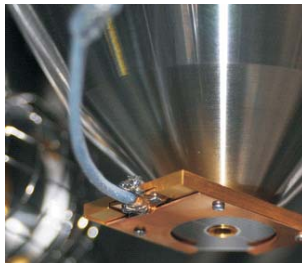
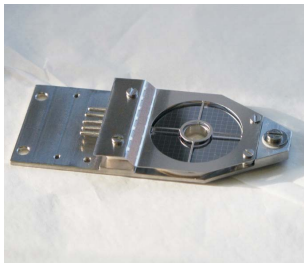
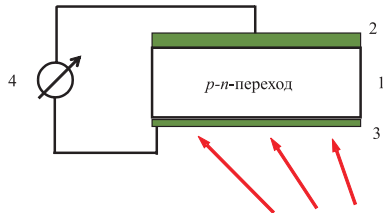
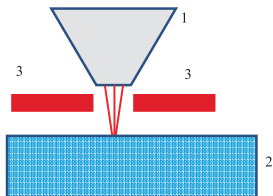
Идея: регистрация интенсивности потока вторичных или отраженных электронов в зависимости от местоположения первичного пучка

Идея: регистрация интенсивности потока вторичных электронов в зависимости от местоположения пучка



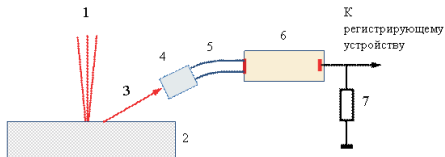
Методы регистрации вторичных и отраженных электронов

С помощью р-п перехода



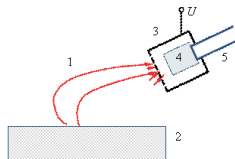
Методы регистрации вторичных и отраженных электронов

С помощью фотоэлектронного умножителя и сцинтилляционного счетчика

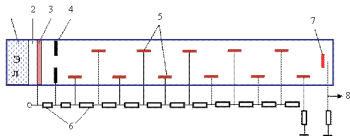


1 – пучок первичных электронов, 2 – исследуемый образец, 3 – поток вторичных электронов, попадающих в детектор, 4 – сцинтиллятор, 5 – световод, 6 – фотоэлектрический умножитель (ФЭУ), 7 – нагрузочное сопротивление.

С помощью цилиндра Фарадея



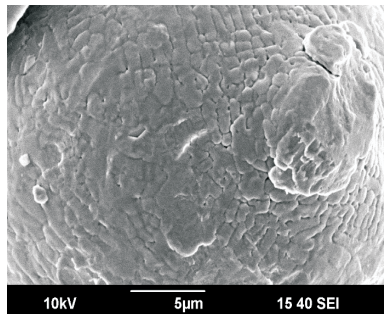
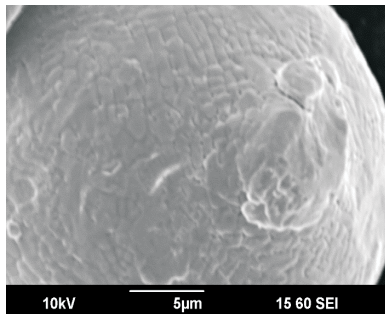
1 – пучок первичных электронов, 2 – исследуемый образец, 3 – цилиндр Фарадея, 4 – сцинтиллятор, 5 – световод, U – положительный потенциал, поданный на цилиндр Фарадея.



1 – сцинтиллятор, 2 – световод, 3 – фотокатод, 4 – фокусирующий электрод, 5 – диноды, 6 – делители напряжения, 7 – анод, 8 – выходной сигнал. Элементы 3 – 7 составляют ФЭУ



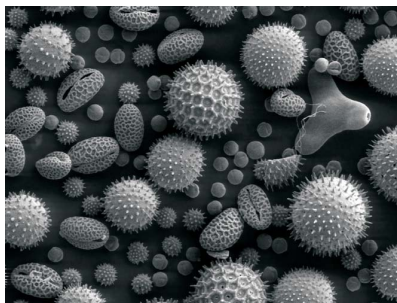
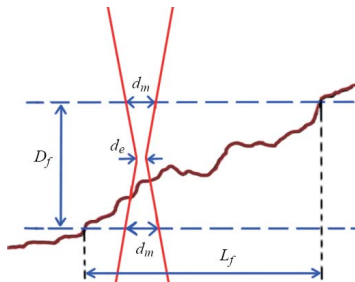
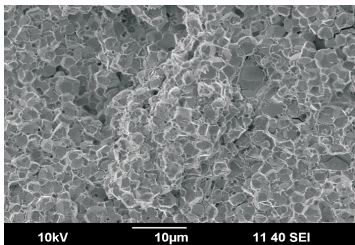
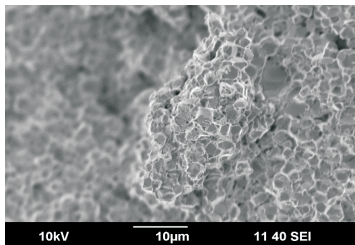
Типичные результаты



Поверхность частиц порошка никелевого сплава. Слишком большой диаметр пучка на рисунке (а) приводит к потере информации о рельефе поверхности. При уменьшении диаметра пучка (б) детали рельефа становятся различимыми

Типичные результаты

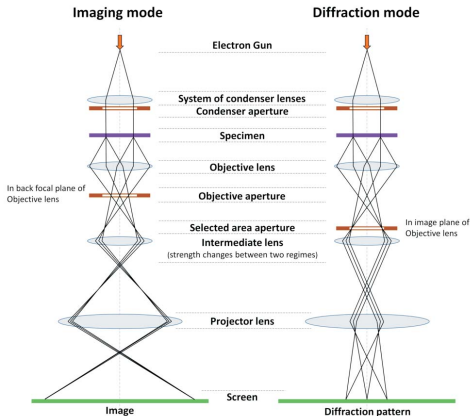
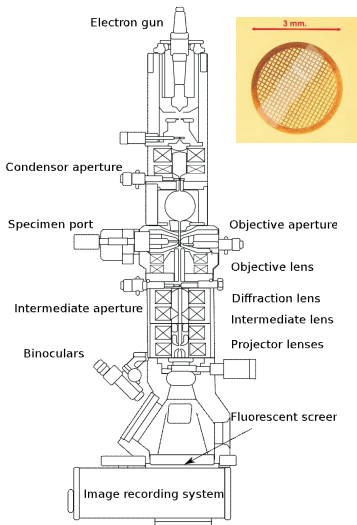
Влияние глубины резкости

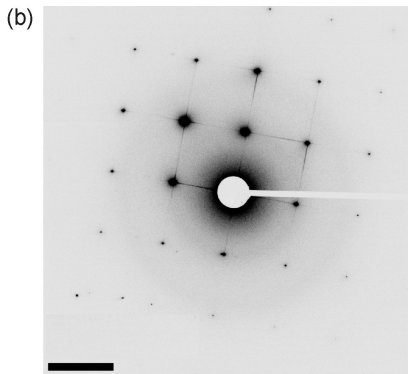
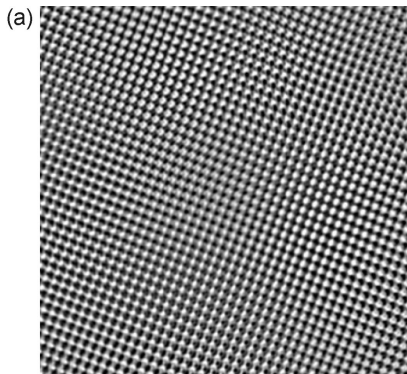


Просвечивающая электронная микроскопия

англ. transmission electron microscopy (TEM)

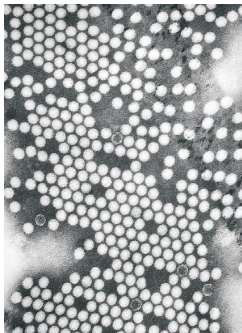
Типичные энергии:
до 200 кВ (нерелятивистское приближение)
от 300 до 1000 кВ (релятивистское приближение)



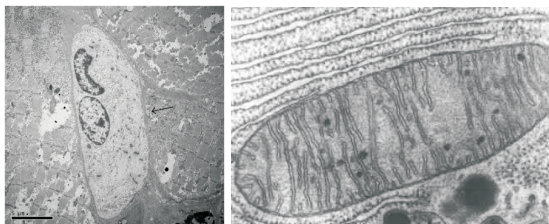


Микрофотография кристаллической гцк-решётки кристалла MgO , полученная методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения, постоянная решётки $a = 0.421$ нм, межплоскостное расстояние 0.211 нм). (b) – инвертированная картина электронной дифракции, самые интенсивные пики соответствуют плоскостям (200) и (020). Рисунки любезно предоставлены Д. А. Татарским (ИФМ РАН, Нижний Новгород).

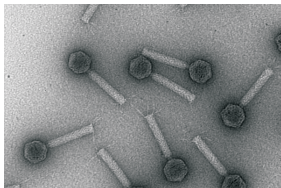
Вирусы полиомиелита (диаметр 30 нм)



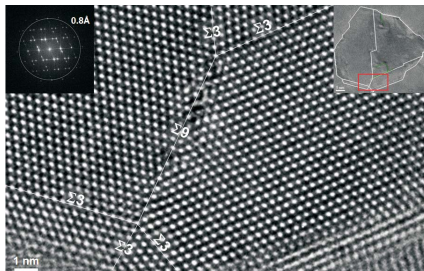
Изображение клеток



Кишечная палочка

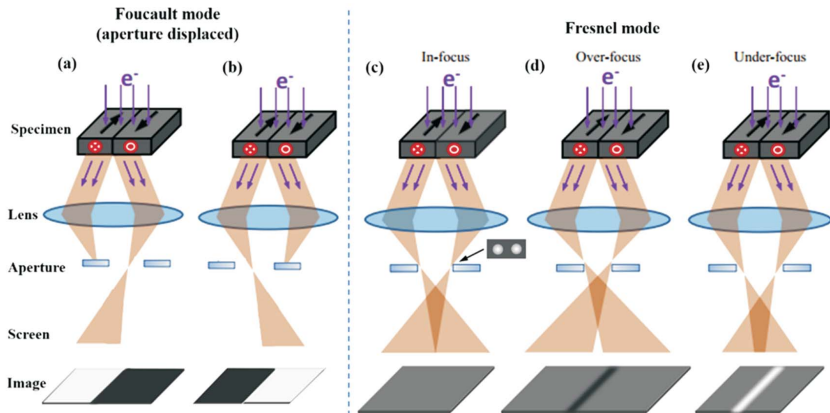


Домены в монокристаллическом палладию

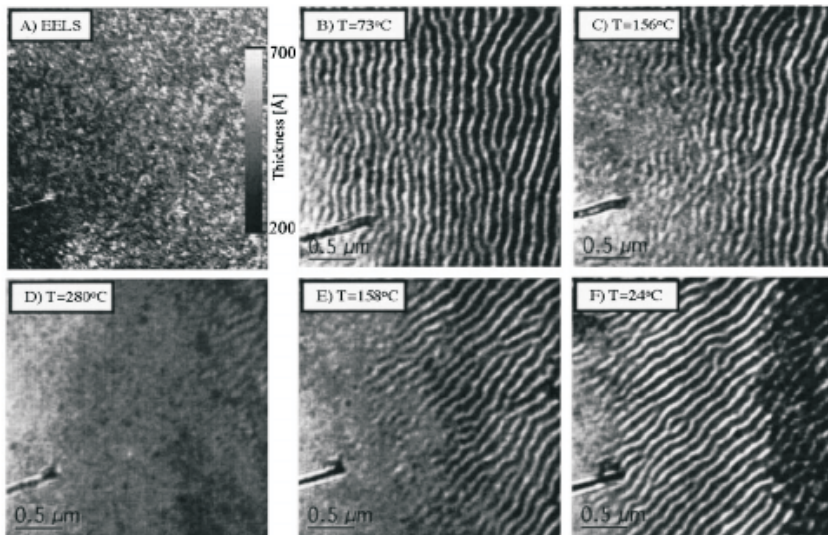


Лоренцевская микроскопия

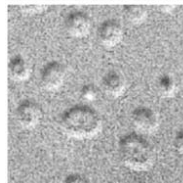
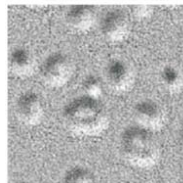
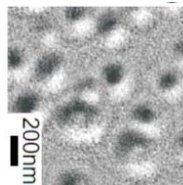
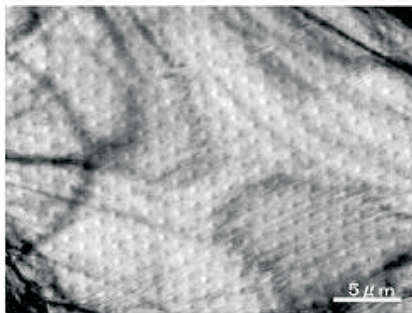
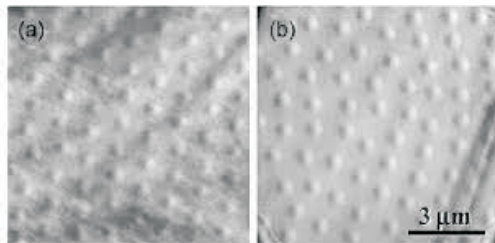
Метод просвечивающей электронной микроскопии позволяет визуализировать неоднородное распределение магнитного поля внутри образца по неоднородному распределению электронной плотности



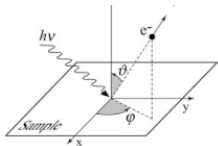
Визуализация доменной структуры в тонких ферромагнитных плёнках



Визуализация решетки вихрей и скирмионов в тонких сверхпроводящих и ферромагнитных плёнках



Фотоэлектронная спектроскопия



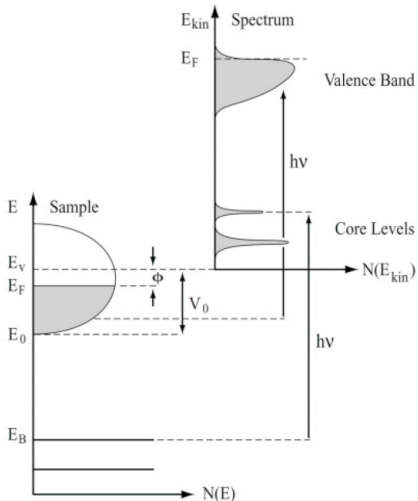
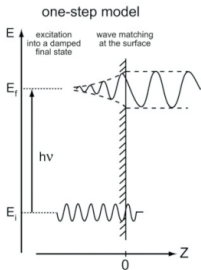
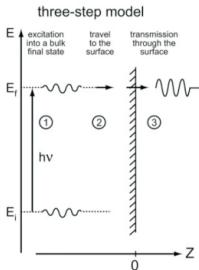
Законы сохранения энергии и импульса для всей системы

$$E_f^{(N)} - E_i^{(N)} = \hbar\omega$$

$$\mathbf{k}_f^{(N)} - \mathbf{k}_i^{(N)} = \mathbf{k}_{\hbar\omega}$$

Уравнение фотоэффекта

$$E_{\text{kin}} = \hbar\omega - E_B - \phi$$



Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением

Импульс фотоэлектрона в вакууме $|\mathbf{k}^{\text{vac}}| = \sqrt{2mE_{\text{kin}}}/\hbar$

$$k_x^{\text{vac}} = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \sin\theta \cos\varphi, \quad k_y^{\text{vac}} = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \sin\theta \sin\varphi \quad \text{и} \quad k_z^{\text{vac}} = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \cos\theta$$

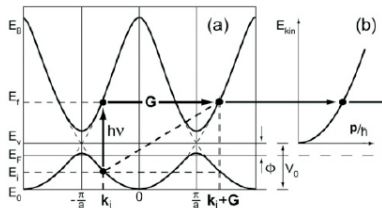
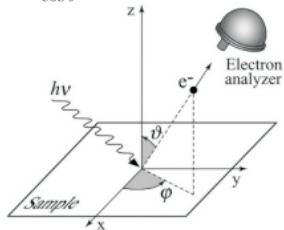
Основная задача: связать параметры импульса фотоэлектрона в вакууме с энергией связи электрона в кристалле

Оценка энергии связанного состояния $|E_B| = \hbar\omega - E_{\text{kin}} - \phi$

Оценка импульса электрона для связанного состояния

$$k_{\parallel} = k_{\parallel}^{\text{vac}} = \frac{\sqrt{2mE_{\text{kin}}}}{\hbar} \sin\theta \quad k_{\perp} = \frac{\sqrt{2m^*(E_{\text{kin}} \sin^2\theta + V_0)}}{\hbar}$$

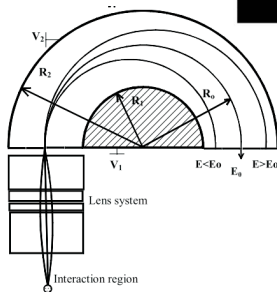
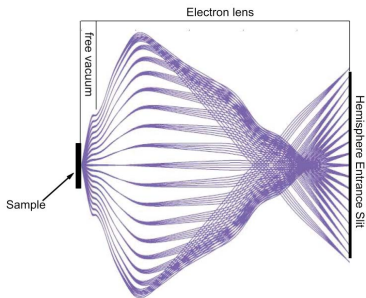
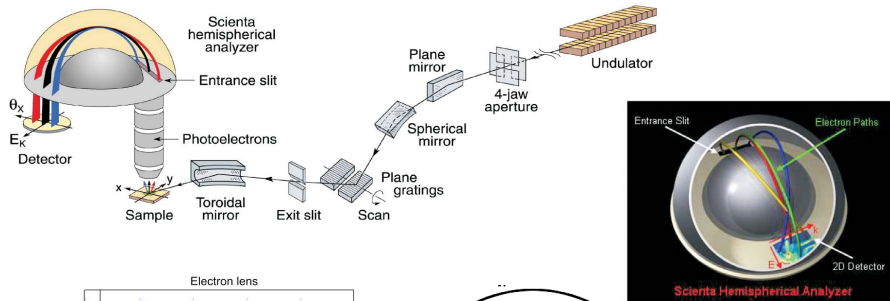
$$E_f(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} - |E_0| = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2) - |E_0| = E_{\text{kin}} + \phi$$



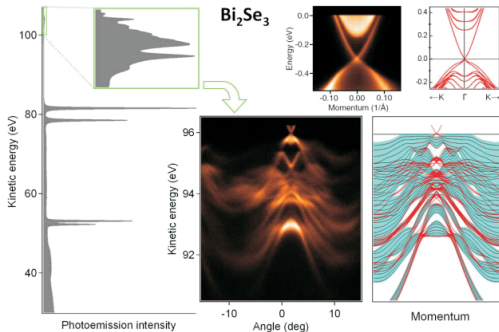
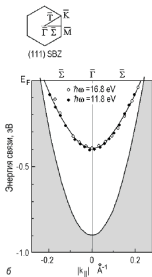
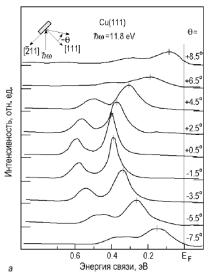
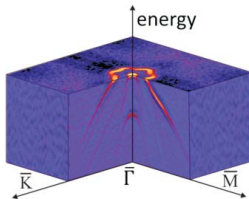
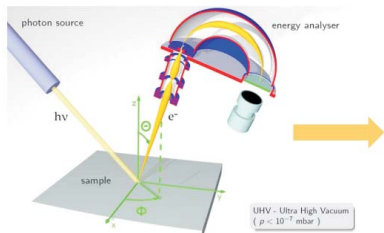
Метод исследования зонной структуры образцов, включая поверхностные электронные состояния

Фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением

Принцип работы полусферического анализатора энергий



Типичные результаты



Типичные результаты

A. Y. Tupchaya, L. V. Bondarenko, A. A. Yakovlev, A. N. Mihalyuk, D. V. Gruznev, N. S. Denisov, A. V. Matetsky, A. Yu. Aladyshkin, A. V. Zotov, A. A. Saranin, *2D system incorporating perforated Mg sheet sandwiched between Pb layer and Si(111)* // Applied Surface Science, vol. 589, 152951 (2022).

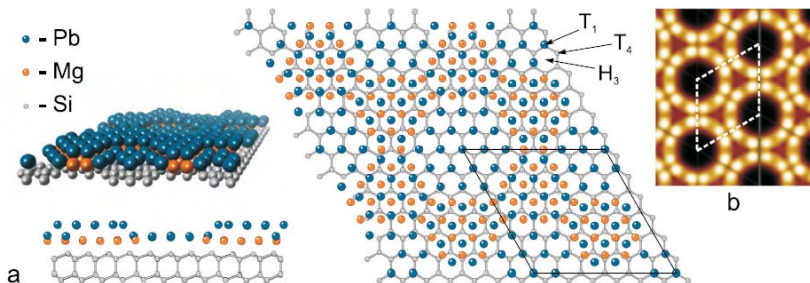


Fig. 4. (a) Ball-and-stick (top and side views) and isometric view of the structural model for the 6×6 -(Mg, Pb) surface. (b) Simulated empty state STM image (+0.5 V).

Типичные результаты

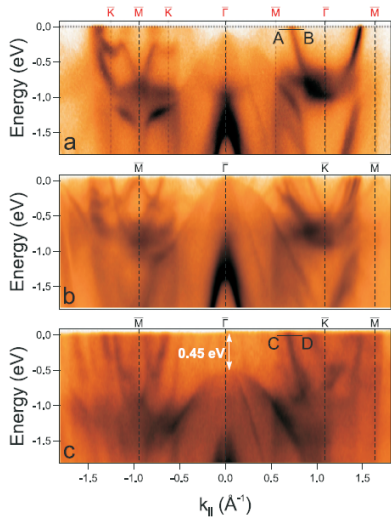


Fig. 5. Experimental ARPES spectra (darker color corresponds to higher photoelectron intensity) of (a) initial 4/3-ML Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Pb, (b) 6/5-ML Si(111) $\sqrt{7}\times\sqrt{3}$ -Pb and (c) Si(111) 6×6 -(Mg, Pb) surface reconstructions recorded at 78 K. High-symmetry points printed in black and red colors correspond to 1×1 and $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ SBZs, respectively. The white double-headed arrow represents the Fermi level shift after the Mg intercalation.

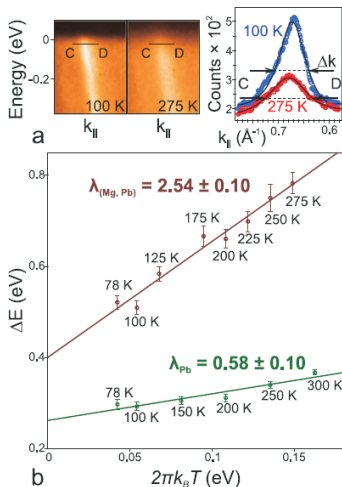


Fig. 6. (a) The surface-state band of the 6×6 -(Mg, Pb) reconstruction marked in Fig. 5(c) by the C-D line at two selected temperatures with corresponding MDCs. (b) Temperature dependencies of the linewidth ΔE of these bands for the initial Pb/Si(111) (green) and the final (Mg, Pb)/Si(111) (brown) surfaces.

composed of small commensurate $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ domains but with different

Лекция 9

Наноструктуры и размерность пространства

Локализация частицы в «мелкой» яме

Фазовые переходы в магнитных системах

Спонтанная димеризация и переход Пайерлса

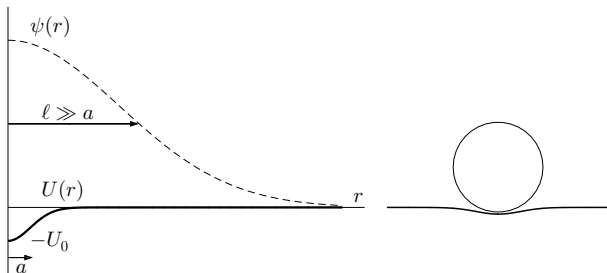
Теорема Поля о случайных блужданиях

Локализация частицы в «мелкой» потенциальной яме

Рассмотрим частицу в изотропной потенциальной яме

$$U(r) = \begin{cases} -U_0 & \text{при } |r| \leq a; \\ 0 & \text{при } |r| \gg a, \end{cases}$$

причем выход потенциальной энергии на асимптотическое значение происходит на масштабе, равном a .



В классической механике сколь угодно «мелкая» потенциальная яма способна захватить частицу, поскольку минимуму полной энергии соответствует положение частицы внутри ямы.

В квантовой механике ответ на вопрос о локализации частицы в потенциальной яме существенно зависит от размерности доступного пространства.

Связь между энергией и импульсом в квантовой механике:

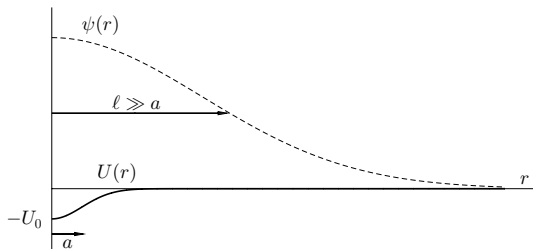
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Используем величину $-U_0$ в качестве грубой оценки собственной энергии локализованного состояния. Учитывая, что в барьере волновой вектор является мнимым ($k = i\kappa$), получаем декремент затухания волновой функции по порядку величины

$$-U_0 \simeq -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \implies \kappa \simeq \frac{\sqrt{2mU_0}}{\hbar}.$$

Оценим радиус локализации волновой функции частицы:

$$\ell \equiv \frac{1}{\kappa} \simeq \frac{\hbar}{\sqrt{2mU_0}} \implies \ell \gg a \text{ при } U_0 \rightarrow 0.$$



Таким образом, для мелкой потенциальной ямы, удовлетворяющей условию

$$U_0 \ll \frac{\hbar^2}{2ma^2},$$

получаем, что масштаб локализации волновой функции должен быть существенно больше характерных размеров ямы

$$\ell \gg a.$$

Используем это условие для оценки средней потенциальной и кинетической энергии частицы в основном состоянии.

Оценим амплитуду волновой функции, считая, что частица локализована в ограниченной области пространства с центром в точке $\mathbf{r} = 0$ и радиусом локализации $\ell \gg a$. Условие нормировки вероятности

$$\int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} = 1$$

даёт оценку амплитуды волновой функции в центре ямы

$$|\psi_0| \sim \frac{1}{\ell^{N/2}}.$$

Запишем стационарное уравнение Шрёдингера для частицы в потенциале $U(\mathbf{r})$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}),$$

где E – полная энергия. Умножим каждое слагаемое на $\psi^*(\mathbf{r})$ и проинтегрируем по доступному пространству размерности N

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r})\Delta\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} + \int U(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} = E \int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r}$$

или

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r})\Delta\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} + \int U(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r}.$$

Средняя потенциальная энергия по порядку величины равна

$$\langle E_{\text{пот}} \rangle \equiv \int U(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} \simeq -U_0 \int_{|\mathbf{r}| \lesssim a} |\psi_0|^2 d^N\mathbf{r} \simeq -U_0 \left(\frac{a}{\ell}\right)^N.$$

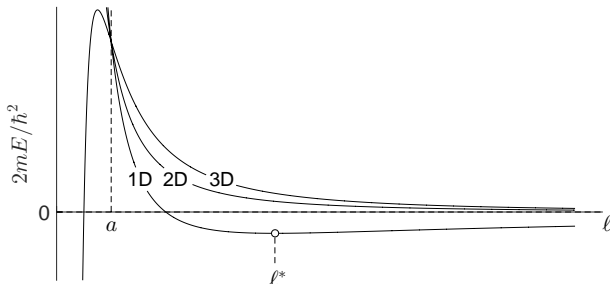
Принимая во внимание, что характерные изменения волновой функции происходят на масштабах порядка ℓ , получаем оценку средней кинетической энергии

$$\langle E_{\text{кин}} \rangle \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^*(\mathbf{r})\Delta\psi(\mathbf{r}) d^N\mathbf{r} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{|\mathbf{r}| \lesssim \ell} \frac{|\psi_0|^2}{\ell^2} d^N\mathbf{r} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\ell^2}.$$

Зависимость полной энергии $E = \langle E_{\text{кин}} \rangle + \langle E_{\text{пот}} \rangle$ от радиуса локализации ℓ пробной функции

$$E \simeq \frac{\hbar^2}{2m\ell^2} - U_0 \frac{a^N}{\ell^N} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{1}{\ell^2} - \frac{2ma^N U_0}{\hbar^2} \frac{1}{\ell^N} \right)$$

определяется размерностью задачи.



Для одномерной потенциальной ямы ($N = 1$) зависимость полной энергии E от радиуса локализации ℓ всегда имеет минимум при $\ell^* = \hbar^2/(maU_0)$ для любого U_0 , при этом $\ell^* \gg a$ при выполнении условия $U_0 \ll \hbar^2/(2ma^2)$.

Легко убедиться в том, что в рассматриваемой модели зависимость E от ℓ для двумерной и трёхмерной ям ($N = 2$ и 3) не имеет минимума в предельном случае $\ell \gg a$ и $U_0 \rightarrow 0$. Размерный анализ указывает на невозможность локализации квантовомеханических частиц в мелких двумерных и трёхмерных потенциальных ямах.

Энергия локализованных состояний в модели ВКБ

1. Энергия локализованного состояния в одномерной яме для $\ell = \ell^*$ равна

$$E^* \simeq \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{1}{\ell^{*2}} - \frac{2maU_0}{\hbar^2} \frac{1}{\ell^*} \right) \simeq -\frac{ma^2U_0^2}{2\hbar^2}.$$

Это выражение совпадает

– со спектром квантовомеханической частицы в яме вида $D\delta(x)$, где $D = aU_0$ – амплитуда дельта-функции;

– с квазиклассическим выражением для одномерной ямы произвольной формы (Ландау и Лифшиц, т. III, §45)

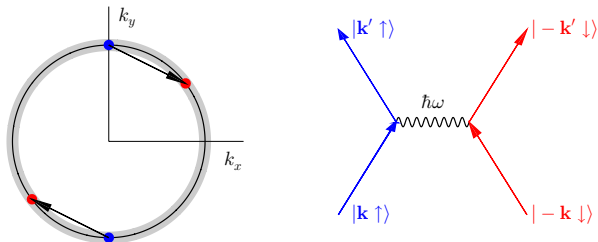
$$E^{(1D)} \simeq -\frac{m}{2\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^{+\infty} U(x) dx \right)^2.$$

2. Энергия локализованного состояния в двумерной квазиклассической потенциальной яме определяется **неаналитическим по U_0** выражением (Ландау и Лифшиц, т. III, §45)

$$E^{(2D)} \simeq -\frac{\hbar^2}{ma^2} \exp \left\{ -\frac{\hbar^2}{m} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} U(r) r dr \right|^{-1} \right\}.$$

Задача Фрëлиха-Купера и сверхпроводимость

Образование парных состояний с противоположными импульсами и спинами вблизи поверхности Ферми



Оценка энергетической щели и критической температуры в модели БКШ

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{1}{\rho(E_F)V}\right) \quad \text{и} \quad T_c = 1.14 \frac{\hbar\omega_D}{k_B} \exp\left(-\frac{1}{\rho(E_F)V}\right)$$

Если $\hbar\omega_D \sim 100$ К и безразмерный параметр $\rho(E_F)V \sim 0.2$, то $T_c \sim 0.8$ К.

Сравните с энергией локализованного состояния в двумерной яме

$$E^{(2D)} \simeq -\frac{\hbar^2}{ma^2} \exp\left\{-\frac{\hbar^2}{m} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} U(r) r dr \right|^{-1}\right\}.$$

Фазовые переходы в магнитных системах

Пусть классические магнитные моменты, имеющие лишь одну отличную от нуля компоненту, располагаются в узлах одномерной или двумерной квадратной решётки (модель Изинга). Энергия такой системы в нулевом внешнем поле может быть вычислена по формуле

$$U = - \sum_{i,j} J \sigma_i \sigma_j,$$

где i и j – индексы соседних узлов, J – константа обменного или магнитостатического взаимодействия, $\sigma_i = \pm 1$ – величина среднего значения магнитного момента на i -ом узле. Иными словами, энергия взаимодействия ближайших магнитных моментов равна $-J$, если моменты параллельны, и $+J$, если они антипараллельны.

Очевидно, что при условии $J > 0$ основное состояние такой системы соответствует ферромагнитному упорядочению магнитных моментов и в нулевом внешнем магнитном поле может быть реализовано двумя способами



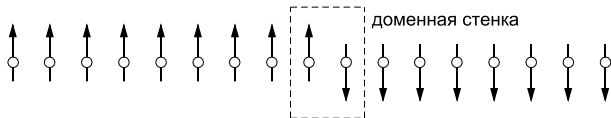
Какую структуру и энергию имеет низшее возбуждённое состояние такой системы?

Условие термодинамического равновесия системы при конечной температуре

$$F = U - T \cdot S \rightarrow \min,$$

Одномерный случай:

Для цепочки магнитных атомов возбуждённое состояние с наименьшей энергией соответствует такой конфигурации, когда магнитные моменты в части цепочки перевернуты:



Формирование уединённой «доменной стенки» сопровождается увеличением внутренней энергии системы на величину

$$\Delta U = 2J.$$

Поскольку «доменная стенка» может располагаться в любом из N узлов цепочки, изменение энтропии, связанное с появлением одиночной доменной стенки, можно рассчитать по формуле Больцмана

$$\Delta S = k_B \ln w,$$

где k_B – постоянная Больцмана и $w = N$ – число возможных микросостояний для заданного макросостояния.

Изменение свободной энергии магнитной системы при образовании одиночной доменной стенки в одном из узлов решётки равно

$$\Delta F = \Delta U - T \cdot \Delta S = 2J - k_B T \ln N.$$

Изменение свободной энергии равно

$$\Delta F = 2J - k_B T \ln N.$$

Легко видеть, что для достаточно больших $N > N^*$, где

$$N^* = \exp\left(\frac{2J}{k_B T}\right),$$

изменение свободной энергии ΔF будет отрицательным для любых T и J . Следовательно, для достаточно длинных цепочек при конечных температурах разупорядоченное магнитное состояние с одной или несколькими доменными стенками и нулевым средним магнитным моментом является более энергетически выгодным, чем однородное ферромагнитное состояние.

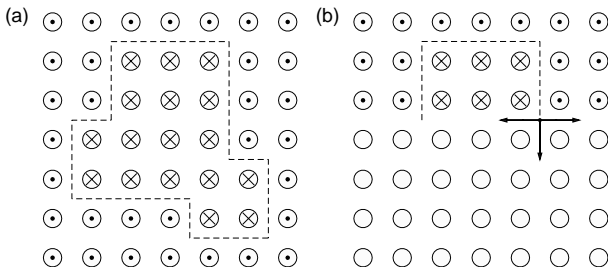
Определим критическую температуру фазового перехода из условия $\Delta F = 0$

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln N} \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad N \rightarrow \infty.$$

Вывод: фазовый переход в упорядоченное магнитное состояние в одномерной модели Изинга невозможен!

Двумерный случай:

Возбуждённое состояние с наименьшей энергией для двумерной решетки представляет собой домен, периметр которого равен Na , где N – число узлов на границе домена и a – постоянная решётки:



Изменение внутренней энергии, связанное с формированием одного домена, равно

$$\Delta U = 2JN.$$

Для оценки энтропии необходимо оценить число способов, которым может быть образована такая граница. Если доменная стенка дошла до какого-то узла, то существует три способа продолжить эту границу. Число способов образования домена с периметром N по порядку величины равно 3^N (без учёта самопересечений), тогда

$$\Delta S = k_B \ln w \simeq k_B N \ln 3.$$

Изменение свободной энергии при образовании такого домена длиной Na равно

$$\Delta F = \Delta U - T \cdot \Delta S \simeq 2JN - k_B T N \ln 3 \simeq N \left(2J - k_B T \ln 3 \right).$$

Эта формула позволяет оценить критическую температуру Кюри магнитного фазового перехода для двумерной модели Изинга

$$k_B T_c = \frac{2J}{\ln 3} \simeq 1.82 J \quad \implies \quad \Delta F = \frac{Nk_B}{\ln 3} \left(T_c - T \right)$$

Таким образом, при $T < T_c$ изменение свободной энергии является положительным, следовательно, формирование магнитных доменов и разрушение упорядоченного ферромагнитного состояния является энергетически невыгодным. При $T > T_c$ изменение свободной энергии является отрицательным, следовательно, система будет переходить в размагниченное состояние с хаотично распределенными доменами с положительной и отрицательной намагниченностью.

Точное решение задачи (Онсагер, 1944) для двумерного случая:

$$k_B T_c = 2.26 J$$

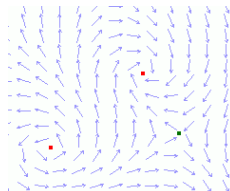
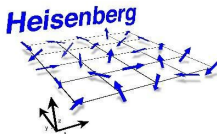
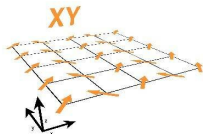
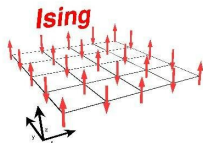
Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика, ч. 1.* – М.: Физматлит. – 2001. – §151.

Дж. Займан, *Принципы теории твёрдого тела.* – Пер. с англ. – М.: Мир. – 1974.

Для трехмерных решёток точных решений задачи Изинга пока не найдено.

Переход Березинского-Костерлица-Таулеса (БКТ)

Переход Березинского-Костерлица-Таулеса – это фазовый переход в двумерной XU -модели (закрепленных ротаторов). Это переход из состояния связанных пар вихрь-антивихрь при низких температурах в состояние с неспаренными вихрями и антивихрями при некоторой критической температуре. Аналогичные переходы наблюдаются в тонких сверхпроводящих плёнках.



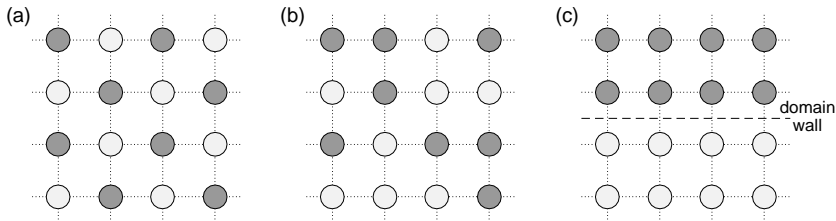
Джон Костерлиц и Дэвид Таулес – лауреаты Нобелевской премии по физике 2016 года (совместно с Холдейном). Вадим Березинский скончался в 1980 году в возрасте 44 лет.

Вывод 1: фазовый переход в упорядоченное магнитное состояние в одномерной $X-U$ модели невозможен!

Вывод 2: сверхпроводимость в одномерных системах невозможна, в чисто двумерных системах подавлена из-за флуктуационного формирования свободных пар вихрь-антивихрь!

Спинодальный распад твердых растворов

Рассмотрим двухкомпонентный твёрдый раствор, в котором концентрация компонент A и B неоднородна. Будет ли процесс релаксации к состоянию равновесия за счёт диффузии приводить к нарастанию или уменьшению этой неоднородности концентрации компонент?



Эта модель аналогична двумерной модели Изинга, в которой атомы сортов A и B можно ассоциировать с узлами решетки со спинами вверх и вниз.

Будем учитывать взаимодействие ближайших соседей, для чего введём энергии взаимодействия однотипных ($-E_{AA}$ и $-E_{BB}$) и разнотипных ($-E_{AB}$) атомов, явно указывая, что энергия межатомного взаимодействия является отрицательной величиной, а введённые нами величины E_{AA} , E_{BB} и E_{AB} , являются положительными. Разность между энергией взаимодействия разнотипных атомов и средней энергией взаимодействия однотипных атомов будем называть энергией смешения (mixing)

$$E_{mix} \equiv E_{AB} - \frac{(E_{AA} + E_{BB})}{2}.$$

Пусть C и $1 - C$ есть локальные объёмные атомов сортов A и B , соответственно. Запишем внутреннюю энергию твёрдого раствора в приближении среднего поля в виде

$$U = -\frac{N}{2} \left\{ E_{AA} \cdot p_{AA} + E_{BB} \cdot p_{BB} + 2E_{AB} \cdot p_{AB} \right\}.$$

Здесь N – полное число атомов, множитель $1/2$ явно учитывает то обстоятельство, что энергия взаимодействия определяется для пары атомов. Формула связывает внутреннюю энергию системы с вероятностями обнаружения пары одинаковых или различных атомов на соседних узлах решетки: $p_{AA} = C^2$, $p_{BB} = (1 - C)^2$ и $p_{AB} = C(1 - C)$.

Введем параметр

$$\eta \equiv C - \frac{1}{2},$$

который описывает отличие локальной концентрации атомов сорта A (или узлов со спином вверх в магнитной задаче) от равновесной концентрации для полностью перемешанного (или немагнитного) расплава. Перепишем выражение для внутренней энергии, используя η

$$U = -\frac{N}{2} \left\{ E_{AA} \left(\frac{1}{4} + \eta + \eta^2 \right) + E_{BB} \left(\frac{1}{4} - \eta + \eta^2 \right) + 2E_{AB} \left(\frac{1}{4} - \eta^2 \right) \right\}.$$

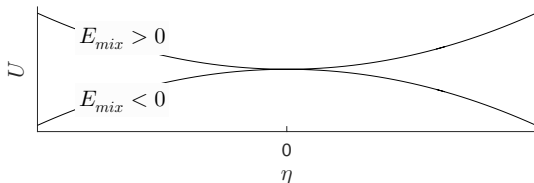
Используя определение E_{mix} , перепишем внутреннюю энергию в виде

$$U \simeq U_0 + N \frac{(E_{BB} - E_{AA})}{2} \eta + N E_{mix} \eta^2, \quad \text{где} \quad U_0 = -N \frac{(E_{AA} + E_{BB} + 2E_{AB})}{8}.$$

Очевидно, что если $E_{mix} > 0$, минимуму внутренней энергии

$$U \simeq U_0 + N \frac{(E_{BB} - E_{AA})}{2} \eta + N E_{mix} \eta^2$$

соответствует полностью перемешанное состояние ($\eta = 0$ или $C = 1/2$). Иными словами, имеется тенденция к образованию сверхструктуры из чередующихся атомов. Такие твёрдые растворы называются упорядочивающимися (Ga-As, Co-Pt и др.) – аналог антиферромагнитного состояния.



Для твёрдых растворов с $E_{mix} < 0$ перемешанное состояние ($\eta = 0$) соответствует максимуму внутренней энергии, следовательно, система имеет тенденцию к распаду и пространственному разделению компонент (Fe-Cr, Co-Cu, Au-Ni и др.). Экспериментально было установлено, что для каждой пары веществ существует критическая температура T_c , выше которой вещества смешиваются, а при $T < T_c$ раствор распадается на две фазы, одна из которых обогащена компонентом A , а другая содержит, в основном, атомы сорта B – аналог ферромагнитного состояния.

Рассмотрим более подробно этот случай и для далее для простоты будем считать $E_{AA} = E_{BB}$.

Равновесное состояние системы при фиксированной температуре T соответствует минимуму свободной энергии $F = U - T \cdot S$, для чего необходимо вычислить энтропию S .

Для оценки энтропии применим формулу Больцмана $S = k_B \ln w$, которая связывает энтропию и число микросостояний w , а также формулу Стирлинга $\ln N! \simeq N \ln N$

$$S = k_B \ln \frac{N!}{N_A! N_B!} \simeq k_B \left\{ N \ln N - N_A \ln N_A - N_B \ln N_B \right\} \simeq -k_B N \left\{ C \ln C + (1 - C) \ln (1 - C) \right\},$$

где N_A – число атомов сорта A , N_B – число атомов сорта B и $N = N_A + N_B$ есть полное число атомов твёрдого раствора. Энтропия максимальна $S_{max} = k_B N \ln 2$ для полностью перемешанного состояния ($C = 1/2$) и приближается к нулю при $C = 0$ или $C = 1$.

Выразим энтропию через η и разложим зависимость энтропии от параметра η с точностью до слагаемых четвертого порядка

$$S \simeq k_B N \left(\ln 2 - 2\eta^2 - \frac{4}{3} \eta^4 \right).$$

Запишем свободную энергию в следующем виде

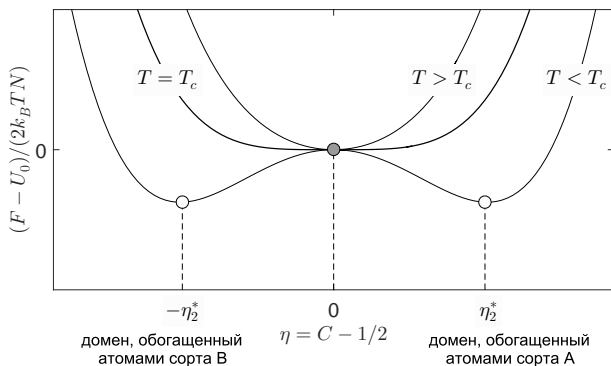
$$F = U - T S = U_0 + N(E_{mix} + 2k_B T) \eta^2 + \frac{4}{3} N k_B T \eta^4.$$

Сравните с функционалом свободной энергии Гинзбурга-Ландау для сверхпроводника

$$f_s = f_{n,0} + \tilde{\alpha} (-T_c + T) |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{4m^*} \left| \left(-i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} A \right) \Psi \right|^2 + \frac{B^2}{8\pi}.$$

Свободная энергия распадающегося твердого раствора

$$F = U - TS = U_0 + N(E_{mix} + 2k_B T)\eta^2 + \frac{4}{3} N k_B T \eta^4.$$



Критическая температура фазового перехода соответствует смене знака у квадратичного слагаемого, поэтому $E_{mix} + 2k_B T_c = 0$ или

$$T_c = -\frac{E_{mix}}{2k_B}.$$

Критическая температура фазового перехода

$$T_c = -\frac{E_{mix}}{2k_B}$$

Следовательно, при $T \lesssim T_c$ нормированную свободную энергию можно записать в виде

$$F' \equiv \frac{F}{2k_B T_c N} \simeq U'_0 + \left(\frac{T}{T_c} - 1\right) \eta^2 + \frac{2}{3} \eta^4,$$

где $U'_0 = U_0/(2k_B T_c N)$.

Используя условие экстремальности свободной энергии ($dF/d\eta = 0$), получим уравнение для определения равновесных концентраций

$$\left(\frac{T}{T_c} - 1\right) \eta + \frac{4}{3} \eta^3 = 0,$$

откуда следует

$$\eta_1^* = 0 \quad \text{и} \quad \eta_2^* = \sqrt{\frac{3}{4} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)}.$$

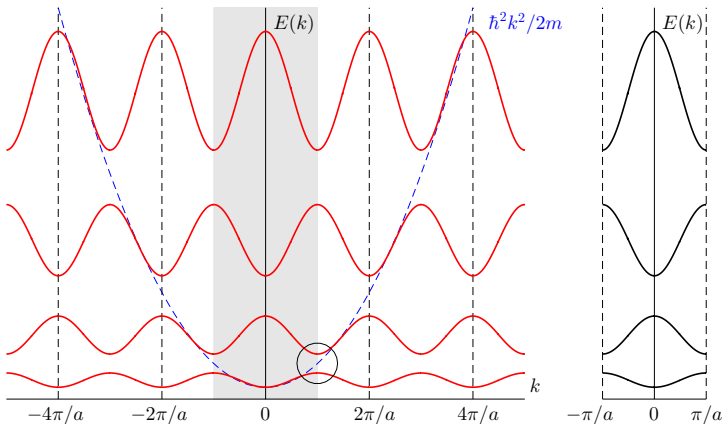
Легко показать, что при $T > T_c$ минимум свободной энергии соответствует перемешанному состоянию ($\eta = 0$); при $T < T_c$ минимум свободной энергии соответствует пространственно-разделённым компонентам ($\eta = \pm \eta_2^*$), разделённым интерфейсом – доменной стенкой.

Фазовый переход Пайерлса

Ранее мы получили зонный спектр в одномерном кристалле в приближении слабой связи

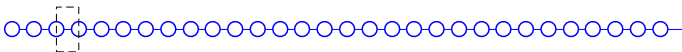
$$E(k) = V_0 + \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ k^2 + \left(k - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left\{ k^2 - \left(k - \frac{2\pi n}{a} \right)^2 \right\}^2 + 4|V_n|^2},$$

где k – квазиимпульс, n – номер зоны Бриллюэна, a – постоянная решётки, V_0 и V_n – нулевая и n -ая фурье-компоненты потенциальной энергии.



Цепочка атомов с периодом a

Рассмотрим одномерную периодическую структуру – цепочку N атомов с периодом a и полной длиной $L = Na$.



Для простоты предположим, что цепочка свернута в кольцо. Это допускает существование бегущих плоских волн вида $e^{\pm ikx}$, где x – координата вдоль цепочки атомов. Применим периодические граничные условия Борна-Кармана

$$\psi(x) = \psi(x + L).$$

В этом случае спектр разрешённых значений волнового вектора k_n находится из уравнения

$$k_n L = 2\pi n,$$

где n – целочисленный индекс. Отметим, что спектр разрешённых значений является эквидистантным. Отметим, что на длине цепочки L укладывается целое число длин волн ($\lambda = 2\pi/k$ и поэтому $L/\lambda = n$).

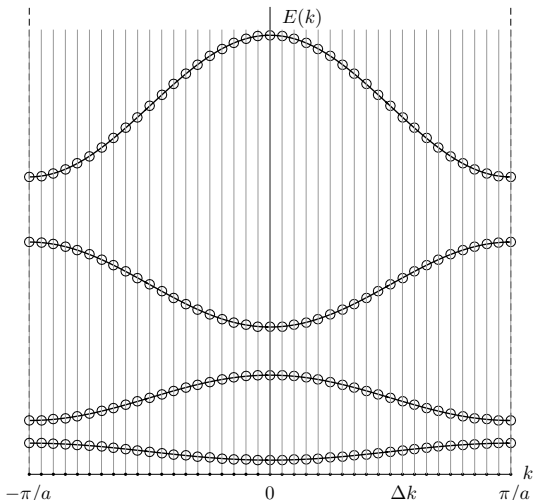
Интервал Δk между соседними разрешёнными значениями волнового вектора равен

$$\Delta k \equiv k_n - k_{n-1} = \frac{2\pi}{L}.$$

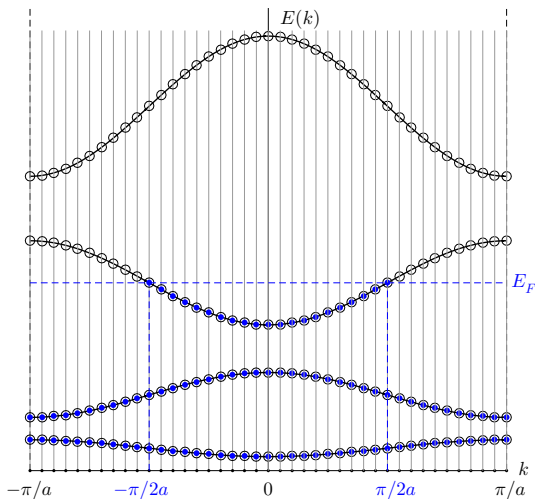
Пусть N_{states} есть полное число доступных состояний в рассматриваемой разрешённой зоне. Поскольку ширина первой зоны Бриллюэна равна $\pi/a - (-\pi/a) = 2\pi/a$, то число состояний с учётом спинового вырождения равно

$$N_{states} = 2 \cdot \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{1}{\Delta k} = 2 \cdot \frac{2\pi}{a} \cdot \frac{L}{2\pi} = 2N.$$

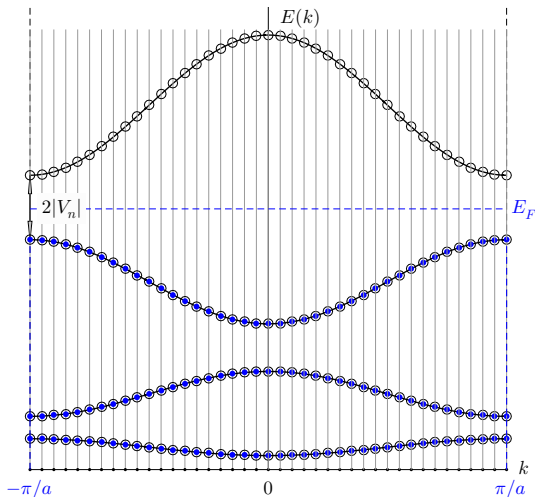
Число доступных состояний в каждой зоне равно удвоенному числу атомов в цепочке.



Если каждый атом способен отдать *один* валентный электрон, то полное число электронов равно N , Следовательно, в зоне проводимости будет заполнена *половина* доступных состояний. При наличии малой разности потенциалов ($|eU| \rightarrow 0$) электронная система будет вести себя как система с металлической проводимостью.

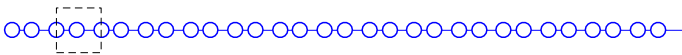


Если каждый атом способен отдать *два* валентных электрона, то в зоне проводимости будут заполнены *все* доступные состояния. Заполненные состояния отделены от незаполненной зоны щелью конечной ширины. При малых напряжениях и низких температурах ($|eU| < 2|V_n|$ и $k_B T \ll 2|V_n|$) система неспособна к переносу тока (состояние изолятора).



Цепочка атомов с периодом $2a$

Рассмотрим одномерную цепочку одновалентных атомов. Предположим, что четные и нечетные атомы в силу некоторых обстоятельств в цепочке сдвинулись друг относительно друга, так что период структуры удвоился.



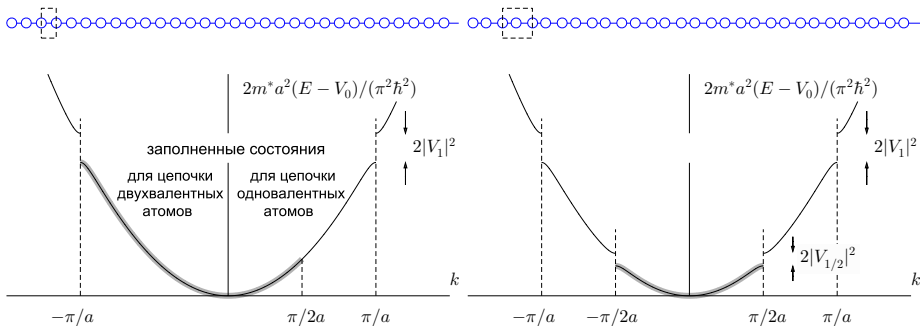
Естественным следствием такой димеризации структуры является увеличение периода структуры ($a \rightarrow 2a$) и уменьшения размера зоны Бриллюэна ($\pi/a \rightarrow \pi/2a$). Отметим, что положение границы зоны Бриллюэна димеризованной цепочки в точности совпадает с фермиевским волновым вектором недимеризованной цепочки

$$k_{Br}^* = \frac{\pi}{2a} \quad \text{и} \quad k_{Br}^* = k_F.$$

Очевидно, что в фурье-спектре потенциала появляется компонента V^* , соответствующая волновому вектору $\pi/(2a)$. Очевидно, что амплитуда V^* тем больше, чем сильнее смещение атомов из положений равновесия «жесткой» цепочки. Безусловно, такое изменение кристаллической структуры повышает упругую энергию ионного остова, однако при крайне малом смещении «четных» атомов изменение упругой энергии может быть незначительным. В то же время удвоение периода потенциала сопровождается кардинальной перестройкой электронной структуры.

Переход Пайерлса (Peierls transition) – перестройка электронной структуры одномерного проводника из-за спонтанного удвоения периода (1930-е гг.).

В результате такого перехода энергия половины электронных состояний с волновыми векторами $|k| < \pi/2a$ уменьшается, энергия оставшейся половины состояний с $\pi/2a < |k| < \pi/a$ – увеличивается, однако полная энергия всех состояний не изменится.



Если изначально была заполнена половина состояний (как для цепочки моновалентных атомов), то полная энергия электронной системы понизится!

Метафорическое представление:



+ 100

- 100

Оценка выигрыша энергии электронной подсистемы

Используем модельное выражение для электронного спектра

$$E(k) = \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{2m^*} \left\{ k^2 + \left(k - \frac{2\pi}{a} \right)^2 \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^2 \left\{ k^2 - \left(k - \frac{2\pi}{a} \right)^2 \right\}^2 + 4|V|^2}.$$

Для удобства перейдем к безразмерному виду, нормируя энергию на $E_0 = \hbar^2/(2m^*a^2)$ и волновой вектор – на a^{-1}

$$E(k) = \frac{1}{2} \left\{ (ka)^2 + (ka - 2\pi)^2 \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left\{ (ka)^2 - (ka - 2\pi)^2 \right\}^2 + 4|V|^2}.$$

Для оценки спектра исходной цепочки вдали от границы зоны Бриллюэна можно пренебречь наличием щели при $k = \pm\pi/a$ и формально положить $V = 0$

$$E_1(k) \simeq \frac{1}{2} \left\{ (ka)^2 + (ka - 2\pi)^2 \right\} + \frac{1}{2} \left\{ (ka)^2 - (ka - 2\pi)^2 \right\}^2 \simeq (ka)^2.$$

Для оценки спектра димеризованной цепочки следует заменить $a \rightarrow 2a$ и положить $V_{1/2} \neq 0$

$$E_2(k) = \frac{1}{2} \left\{ (ka)^2 + (ka - \pi)^2 \right\} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left((ka)^2 - (ka - \pi)^2 \right)^2 + 4|V_{1/2}|^2} \simeq$$
$$(ka)^2 - \pi ka + \frac{\pi^2}{2} - \sqrt{\left(\pi ka - \frac{\pi^2}{2} \right)^2 + |V_{1/2}|^2}.$$

Выигрыш энергии

$$\delta E(k) = E_1(k) - E_2(k) = -\left(\frac{\pi^2}{2} - \pi ka\right) + \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{2} - \pi ka\right)^2 + |V_{1/2}|^2} > 0 \quad \text{для } |ka| < \frac{\pi}{2}.$$

Вычислим полный выигрыш энергии электронной подсистемы в размерном виде

$$\begin{aligned} \Delta E_{total} &= 2 \cdot E_0 \cdot \left(\sum_{|k| \leq \pi/(2a)} E_1(k) - \sum_{|k| \leq \pi/(2a)} E_2(k) \right) = 2E_0 \cdot \sum_{|k| \leq \pi/2a} \delta E(k) = \\ &= \frac{4E_0}{\Delta k} \cdot \int_0^{\pi/2a} \left(-\left(\frac{\pi^2}{2} - \pi ka\right) + \sqrt{\left(\frac{\pi^2}{2} - \pi ka\right)^2 + \frac{|V_{1/2}|^2}{E_0^2}} \right) dk. \end{aligned}$$

Можно сделать замену переменных $q = \pi^2/2 - \pi ka$ и $dq = -\pi a dk$, тогда

$$\begin{aligned} \Delta E_{total} &= \frac{4E_0 L}{2\pi} \int_{-\pi^2/2}^0 \left(-q + \sqrt{q^2 + \frac{|V_{1/2}|^2}{E_0^2}} \right) \frac{dq}{(-\pi a)} = \\ &= \frac{2E_0 L}{\pi^2 a} \int_0^{\pi^2/2} \left(-q + \sqrt{q^2 + \frac{|V_{1/2}|^2}{E_0^2}} \right) dq > 0. \end{aligned}$$

Вспомогательный интеграл

$$\int \left(-x + \sqrt{x^2 + a^2} \right) dx = \frac{x}{2} \sqrt{x^2 + a^2} + \frac{a^2}{2} \ln \left(x + \sqrt{x^2 + a^2} \right) - \frac{x^2}{2}.$$

Разность энергий электронов для исходной и димеризованной цепочек

$$\Delta E_{total} \simeq \frac{L}{\pi} \frac{|V_{1/2}|^2}{\hbar v_F} \ln \left(2 \frac{\hbar v_F q^*}{|V_{1/2}|} \right) > 0.$$

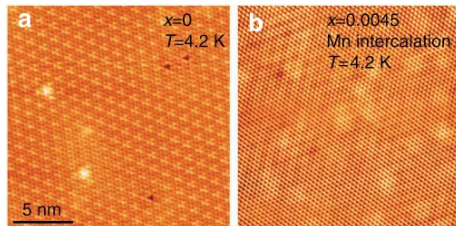
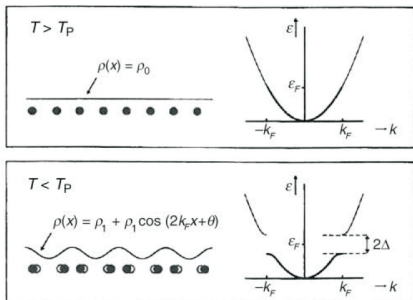
Мы получили важный результат: энергия электронной системы с периодическим расположением атомов превышает энергию электронной системы с димеризованным потенциалом системы и разница энергий ΔE пропорциональна искажению решётки посредством квадрата фурье-компоненты искаженного потенциала $V_{1/2}^2$. Мы не учитывали увеличение упругой энергии системы из-за искажения решётки, которая также должна быть пропорциональна $V_{1/2}^2$.

Таким образом, при определённых условиях при понижении температуры выигрыш энергии электронной системы может превысить потери упругой энергии и тогда система спонтанно перейдет в состояние с удвоенным периодом. Описанный процесс известен как переход Пайерлса. Как следствие перестройки электронного спектра и открытия пайерлсовской щели, система перейдет в изолирующее состояние.

Вывод: металлическая проводимость в одномерных системах при низких температурах невозможна!

Волны зарядовой плотности

англ. charge density waves (CDW)



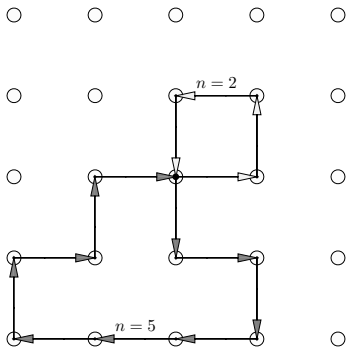
Chatterjee, Zhao, Iavarone et al. *Emergence of coherence in the charge-density wave state of 2H-NbSe₂* // Nature Commun. vol. 6, 6313 (2015).

Вывод: кратное изменение периода (удвоение, утроение и т.п.) структуры для одномерных и двумерных реконструкцию может существенно изменить электронные свойства реконструированных систем.

Теорема Поля о случайных блужданиях

Пусть электрон совершает случайные блуждания по узлам N -мерной квадратной решётки, перескакивая с одного узла на ближайшие соседние узлы с вероятностью w . Оценим вероятность того, что частица вернется на узел, из которого началось блуждание, через время t , совершив $n = t/\tau$ прыжков, где $\tau = 1/w$ – время жизни частицы на узле.

Введём параметр $p_n(\ell)$, который характеризует вероятность достигнуть узла ℓ из начального узла ровно за n пар перескоков, включая многократные возвращения в конечное состояние. Поскольку в момент начала отсчёта времени частица находилась в начальном положении, то $p_0(0) = 1$ по определению. Также введём параметр f_n – вероятность *однократного* возвращения в начальный узел *ровно* за n пар шагов.



Можно записать цепочку соотношений

$$p_1(0) = f_1 \cdot 1, \quad p_2(0) = f_1 \cdot p_1(0) + f_2 \cdot 1 \quad \text{и т. д.},$$

которые объединим в одно рекуррентное соотношение

$$p_n(0) = f_1 p_{n-1}(0) + \dots + f_m p_{n-m}(0) + \dots + f_n p_0(0) = \sum_{m=1}^n f_m p_{n-m}(0).$$

Введём два параметра

$$F = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \quad \text{и} \quad P = \sum_{n=1}^{\infty} p_n, \quad (*)$$

которые характеризуют полную вероятность возвращения частицы в начальный узел в ходе блужданий с однократными и многократными возвращениями, соответственно.

Выполним суммирование по индексу n и приведем соотношение (*) к виду

$$\begin{aligned} P &= \sum_{n=1}^{\infty} p_n = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^n f_m p_{n-m} = \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} f_m \cdot \sum_{k=0}^{\infty} p_k = \sum_{m=1}^{\infty} f_m \cdot \left(1 + \sum_{k=1}^{\infty} p_k \right) = F(1 + P) \quad \Rightarrow \quad F = 1 - \frac{1}{P}. \end{aligned}$$

Для оценки F и P для решёточных моделей разной размерности получим вспомогательное соотношение, рассматривая классическую задачу диффузии в приближении сплошной и однородной среды размерности N .

Пусть $p(\mathbf{r}, t)$ есть вероятность обнаружения частицы в точке с координатой \mathbf{r} в момент времени t . Очевидно, что функция $p(\mathbf{r}, t)$ является решением диффузионного уравнения

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}, t) = D \Delta p(\mathbf{r}, t),$$

с начальным условием

$$p(\mathbf{r}, t) \Big|_{\mathbf{r}=0, t=0} = \delta(\mathbf{r}).$$

Здесь Δ – оператор Лапласа размерности N , $D \simeq a^2/\tau$ – коэффициент диффузии, a – постоянная решётки.

Будем искать решение задачи диффузии методом Фурье, для чего представим искомую функцию в виде разложения по плоским волнам

$$p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int p_{\mathbf{k}}(t) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^N \mathbf{k}.$$

Очевидно, что фурье-компоненты $p_{\mathbf{k}}(t)$ удовлетворяют дифференциальному уравнению первого порядка

$$\dot{p}_{\mathbf{k}} = -D k^2 p_{\mathbf{k}}(t) \implies p_{\mathbf{k}}(t) = C e^{-Dt k^2},$$

где постоянная $C = (2\pi)^{-N/2}$ может быть определена из начального условия.

Следовательно, решение N -мерного уравнения диффузии в приближении сплошной среды имеет вид

$$p(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int e^{-Dt \cdot \mathbf{k}^2} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d^N \mathbf{k}.$$

Оценим вероятность обнаружения частицы в начальной точке $\mathbf{r} = 0$ через время t

$$p(0, t) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int e^{-Dt \cdot \mathbf{k}^2} d^N \mathbf{k} \sim \frac{1}{(Dt)^{N/2}}.$$

Это и есть вероятность обнаружения частицы в начальном положении с учётом многократных возвращений.

Подставим $t = 2\tau n$ (время, необходимое на n пар перескоков, в дискретной модели) и получим оценку вероятности как функции числа перескоков n

$$p_n(0) = p(0, t) \Big|_{t=2\tau n} \sim \frac{1}{(2D\tau n)^{N/2}} \quad \text{и} \quad P \sim \sum_n p_n(0) \sim \frac{1}{(2D\tau)^{N/2}} \sum_n \frac{1}{n^{N/2}}$$

Очевидно, что ряд в полученном соотношении для $N = 3$ сходится, что соответствует конечной вероятности для частицы хотя бы один раз вернуться в начальную точку и конечной же вероятности покинуть начальную точку навсегда.

В системах пониженной размерности ($N = 1$ и 2) ряд расходится ($P \rightarrow \infty$) и поэтому

$$F = 1 - \frac{1}{P} \rightarrow 1.$$

Таким образом мы приходим к теореме Поля: вероятность возвращения частицы в начальную точку хотя бы один раз в процессе случайных блужданий по узлам одно- и двумерных решёток равна единице!