Supraconductibilitatea în Modelul Shiba-Rusinov. Examinarea Gapului Energetic.

Vladimir M.
Catedra ”Fizica”
Universitatea Tehnică a Moldovei Chişinău ,
Republica Moldova
mihai.vladimir@mail.ru

***Abstract* – Shiba – Rusinov model is examined for systems with magnetic impurities inside energy gap. The magnetic impurity is described by energy level and in case of strong scattering of electrons on an impurity it transforms into an energy band. Energy gap is described by U_g^2 function responsible for superconducting state for which we obtained an equation of the fifth degree. Finally, the magnetic impurities superconductivity is described by a parameter of destruction of Cooper pairs.**

***Cuvinte cheie* – supraconductibilitate, gap energetic, ecuaţii.**

I. INTRODUCERE

Teoria microscopică a supraconductibilității a fost elaborată în lucrările clasice ale lui Bardeen, Cooper și Schrieffer [1, 2], Bogoliubov [3]. Această teorie rezultă din instabilitatea sferei Fermi a metalului obişnuit în raport cu atracția oricât de mică a electronilor, în rezultatul căreia ia naştere o distribuție esențială a electronilor în metal. Această interacțiune de atracție generează perechi din electroni cu impulsuri și spini antiparaleli. Interacțiunea de atracție dintre electroni e de natură electron – fononică. Distanța efectivă dintre acești electroni, numită lungime de coerență e de ordinul 10^{-4} cm. Atunci când atracția dintre electroni o depăşeşte pe cea coulombiană restructurarea sferei Fermi devine favorabilă din punct de vedere energetic stării de supraconductibilitate. Apariția în metal a stărilor electronice legate cu impulsul şi spinul nul conduce spre condensarea Bose – Einstein a cuplurilor electronice la temperaturi mai mici decât temperatura critică T_c. Deasupra stării fundamentale a supraconductorului la temperaturi nenule există excitații elementare Fermi.

Deosebirea esențială a acestor excitații de metalul normal constă în existența gapului energetic $\Delta(T)$.

Mărimea $\Delta(T)$ este mult mai mică decât energia Fermi E_F , de aceea mărimea $\xi_0 \approx \frac{V_F}{\Delta}$ este mult mai mare decât distanța a între atomi, fiind de ordinul $\frac{V_F}{\Delta}$. În teoria supraconductibilității mai există încă o mărime energetică valoarea căreia este de ordinul energiei Debye $\hbar\,\omega_D$, $\hbar -$ constanta Planck, $\omega_D -$ frecvența Debye. Mărimea $\hbar\omega_D$ defineşte intervalul energetic din vecinătatea nivelului Fermi în limitele căruia atracția fononică dintre electroni este esențială. Frecvența Debye are un rol important în definirea gapului energetic și a temperaturii critice a supraconductorului. Supraconductorii reali se deosebesc esențial de acest model simplu din punct de vedere al purității metalului, existența impurităților, caracterul zonal al spectrului energetic și intensității interacțiunii dintre electroni. În lucrările lui Abrikosov și Gorkov [4] a fost dezvoltată teoria supraconductorilor izotropi de o singură bandă cu impurități. Această teorie a aliajelor supraconductibile presupune că concentrația impurităților este relativ mică, în sensul că parcursul liber dintre impurități ℓ este mult mai mare decît distanța dintre atomii de bază a metalului. Prezența impurităților schimbă esențial proprietățile supraconductorilor. Există două tipuri de impurități: magnetice și nemagnetice. Impuritățile nemagnetice practic nu influențează proprietățile termodinamice ale supraconductorilor cu o singură bandă energetică, în schimb influențează asupra proprietăților electromagnetice. Impuritățile paramagnetice influențează puternic atât proprietățile termodinamice cât și cele electromagnetice. Abrikosov și Gorkov au arătat că o cantitate mică de impurități paramagnetice micșorează esențial temperatura critică a supraconductorului și schimbă proprietățile lui termice. Împrăștierea de schimb a electronilor metalului pe impuritate conduce spre distrugerea cuplurilor electronice în supraconductor. La o anumită concentrație critică a impurităților paramagnetice are loc distrugerea totală a stării de supraconductibilitate și metalul trece în stare normală. La o concentrație a impurităților paramagnetice mai mică decât cea critică dispare gapul energetic în spectrul excitațiilor Fermi. În intervalul dintre aceste două concentrații de impuritate se realizează starea de supraconductibilitate fără gap energetic. Starea de supraconductibilitate se descrie cu ajutorul funcției densității stărilor electronice $n(\omega) = \frac{N(\omega)}{N_F}$,

$$N_F = \frac{mK_F}{2\pi^2\hbar^3} = \mathrm{N}(0),$$

unde $\mathrm{N}(\omega)$ – densitatea stărilor electronice a supraconductorului, $\mathrm{N_F}$ - densitatea stărilor electronice a metalului în stare normală la suprafața Fermi, $\mathrm{K_F}$ – impulsul Fermi, m - masa electronului, ω - frecvența. Funcția

$$n(\omega) = Im\frac{U(\omega)}{\sqrt{1-U^2(\omega)}}, \tag{1}$$

unde $\mathrm{U}(\omega) = \frac{\tilde{\omega}}{\tilde{\Delta}}, \tilde{\Delta}, \tilde{\omega} -$parametrul de ordine și frecvența renromate și definite la suprafața Fermi. Mărimea U(ω) în teoria Abrikosov – Gorkov satisface ecuația

$$\frac{\omega}{\Delta} = U(\omega)\left(1 - \frac{\sigma}{\sqrt{1-U^2(\omega)}}\right), \tag{2}$$

unde $\sigma = \frac{\hbar}{\tau_S \Delta}, \tau_S -$ timpul de schimb la împrăștierea electronilor pe impuritate, Δ - parametrul de ordine al supraconductorului. Parametrul de distrugere a cuplurilor electronice σ este direct proporțional cu concentrația impurităților paramagnetice. În [4] s–a arătat că influența impurităților paramagnetice e destul de puternică. Shiba [5] și Rusinov [6] au generalizat teoria impurităților magnetice elaborată de Abrikosov și Gorkov pentru cazul cînd interacțiunea electronilor de conducție cu impuritatea magnetică este atît de puternică încât iau naștere stări excitate localizate în interiorul gapului energetic, energiile cărora sunt mai mici decît Δ . În cazul cînd există o singură impuritate, această interacțiune dă naștere unui nivel energetic total. Cînd există mai multe impurități, împrăștierea de schimb a electronilor pe potențialul impurității conduce spre lărgirea acestui nivel și la apariția în interiorul gapului a benzii energetice a impurităților. Shiba a arătat că stările locale din interiorul gapului pot fi obținute în cazul impurităților magnetice. În acest caz se respectă inegalitatea Γ<<U, unde Γ –lățimea nivelului d al electronilor iar U – energia de repulsie coulombiană a electronilor. Teoria Shiba descrie două cazuri particulare: cazul impurităților nemagnetice a metalelor de tranziție și cazul impurităților magnetice. Aceste două cazuri se observă experimental – conform abaterii de la teoria Abrikosov – Gorkov a dependenței temperaturii critice T_c de concentrația impurităților magnetice. În lucrarea [4] se observă micșorarea rapidă a T_c la introducerea impurităților paramagnetice M_n și C_r în Z_n , și micșorarea moderată a T_c la introducerea în Z_n a impurităților feromagnetice de F_e Co și Ni. În lucrarea dată se examinează starea de supraconductibilitate gapului energetic și se stabilesc criteriile pentru care se realizează acest lucru. Ecuația care generalizează rezultatul obținut de Abrikosov – Gorkov în [2] a fost obținută de către Shiba în [5] și, în cazul impurităților magnetice are forma:

$$\frac{\omega}{\Delta} = U\left(1 - \frac{\sigma\sqrt{1-U^2}}{\gamma^2 - U^2}\right), \tag{3}$$

unde γ - nivelul energetic local al unei impurități în unități, Δ iar $1/\tau_s\Delta$ este parametrul de distrugere a perechilor de electroni, direct proporțional concentrației impurităților magnetice *c*. Parametrul γ descrie abaterea de la teoria Abrikosov – Gorkov. În cazul limită a împrăștierii slabe, menținînd $\frac{1}{\tau_S}$ const, mărimea γ^2 tinde către unitate și teoria Shiba coincide cu rezultatele teoriei Abrikosov– Gorkov. Atragem atenția că în cazul unei singure impurități, starea locală excitată reprezintă un nivel dublu, degenerat față de direcția spinului. În cazul impurității magnetice acest nivel dublu se despică în două nivele distincte. Unul din ele e paralel cu spinul momentului local și se contopește cu spectrul continuu, pe când celălalt cu spinul antiparalel rămâne în interiorul gapului energetic. În cazul concentrației finite a impurităților distribuite aleatoriu în spațiu și în lipsa ordinii magnetice a momentelor locale ia naștere lărgirea densității de stare a supraconductorului pur (așa numitul efect de lărgire datorită ciocnirilor). Descrierea stării de supraconductibilitate, atât cu gap cât și fără gap energetic, se reduce la calculul densității electronice de stare n(ω) și a frecvenței ω_g care reprezintă lățimea gapului energetic. Obiectul prezentei lucrări este examinarea detaliată a supraconductibilității în cazul prezentei gapului energetic. Mărimea ω_g se găsește din ecuația (3) impunând condiția suplimentară $d\omega/du$=0. Această condiție este echivalentă cu ecuația

$$1=\frac{\sigma(\gamma^2-2\gamma^2U_g^2+U_g^2)}{(\gamma^2-U_g^2)^2\sqrt{1-U_g^2}}\ ; U_g^2 = x, \tag{4}$$

unde U_g - funcția ce descrie starea de supraconductibilitate a gapului energetic. Spre deosebire de teoria Abrikosov – Gorkov, ecuația (3) poate avea mai multe soluții [7, 8]. Aceste soluții corespund frontierelor benzii impurităților și spectrului continuu. Este cunoscut faptul că în teoria Abrikosov –Gorkov condiția σ =1 corespunde dispariției gapului energetic.

II. Rezultate si discuții

Ecuația (4) este de gradul cinci în raport cu x şi are forma:

$$f(x)=x^5+ a_1x^4+ a_2x^3+ a_3x^2+ a_4x^1+ a_5=0, \tag{5}$$

unde a_1=-$(4\gamma^2+1)$; a_2=$2\gamma^2(3\gamma^2+2)$;a_3= $(2\gamma^2-1)^2\sigma^2 - 2\gamma^4(3+2\gamma^2)$; a_4=$\gamma^2[\gamma^4(\gamma^2+4)-2(2\gamma^2-1)\sigma^2]$; a_5=$\gamma^4(\sigma^2-\gamma^4)$. (6)

Ecuația (1) descrie stările supraconductibilă şi normală din interiorul gapului energetic

$$f'(x)=5(x^4+0.8\,a_1x^3+0.6\,a_2x^2+0.4\,a_3x+0.2\,a_4)=0. \tag{7}$$

Ecuația (7) permite să aflăm punctele maxime şi minime a funcției f(x) în interiorul gapului energetic.

$$f''(x)=20(x^3+0.6\,a_1x^2+0.3\,a_2x+0.1a_3)=0. \tag{8}$$

Ecuația (8) permite să aflăm punctele de inflexiune a funcției f(x) din interiorul gapului energetic. Ecuația (5) poate avea:

1) o soluție reală şi patru soluții complexe două câte două conjugate;
2) trei soluții reale şi două complexe conjugate între ele;
3) cinci soluții reale.

Ecuația (7) pentru maxime şi minime este de gradul patru şi se rezolvă exact. Ecuația (8) este de gradul trei şi de asemenea se rezolvă exact.

Ecuația (5) fiind de gradul cinci nu se rezolvă exact, dar poate fi rezolvată cu o exactitate de oricare ordin dorim, de exemplu cu exactitatea de 10^{-8}. Observăm că punctele de inflexiune sunt cele mai apropiate de zerourile ecuației de gradul cinci. Astfel punctele de inflexiune pot servi drept soluții inițiale pentru ecuația de gradul cinci.

Pentru a obține soluții exacte pentru ecuația de gradul cinci, utilizăm metoda aproximațiilor consecutive a lui Newton, şi corectăm soluțiile inițiale obținute din ecuația (8) cu exactitatea necesară. Obținând soluțiile exacte corectate prin metoda aproximațiilor consecutive reducem gradul ecuației de la cinci la patru prin împărţirea la $(x-x_{ex})$. Ecuația de gradul patru obținuta se rezolva exact prin metodele standard. Mai întâi rezolvăm ecuația (8) pentru punctele de inflexiune, soluțiile cărora vor servi drept soluții inițiale pentru ecuația (5). Aducem ecuația (8) la forma necompleta. Pentru asta alegem

$$x = y + 0.2(1+4\gamma^2). \tag{9}$$

Introducem (9) în ecuația (8) şi obținem:

$$y^3+py+q=0. \tag{10}$$

unde $\frac{p}{3}=-0.04(1-\gamma^2)^2<0$,

$\frac{q}{2}=0.05[(1-2\gamma^2)^2\sigma^2-0.16(1-\gamma^2)^3]$.

Discriminantul

$$Q=(\frac{p}{3})^3+(\frac{q}{2})^2=0.0025(1-2\gamma^2)^2\sigma^2*[(1-2\gamma^2)^2\sigma^2-0.32(1-\gamma^2)^3]. \quad (11)$$

Introducem substituția:

$$[(1-2\gamma^2)^2\sigma^2=0.16(1-\gamma^2)^3c. \quad (12)$$

În relația (12) parametrul de anihilare a cuplărilor electronice σ l-am înlocuit cu un alt parametru tot de anihilare a cuplurilor Cooper c din comoditate.

Parametrii σ ori c sunt proporționale cu concentrația impurităților magnetice existente în starea supraconductibilă. Parametrul c variază în intervalul $0\le c\le\infty$ $(0\le\sigma\le\infty)$.

Înlocuind (12) în (11) obținem:

$$\frac{q}{2}=(0.2)^3(1-\gamma^2)^3(c-1);\ \frac{p}{3}=-(0.2)^2(1-\gamma^2)^2<0$$

$$Q=(0.2)^6(1-\gamma^2)^6[(c-1)^2-1]. \quad (13)$$

Ecuația (10) poate fi modificată prin următoarea substituție:

$$y=0.2(1-\gamma^2)z. \quad (14)$$

Înlocuind (13) si (14) in (10) obținem:

$$z^3-3z+2(c-1)=0. \quad (15)$$

Ecuația (15) are soluții reale în dependenţă de discriminantul Q.

1) Q = 0, daca c = 0 ori c = 2;
2) Q>0, daca c > 2;
3) Q<0, daca c < 2.

Examinam cazul 1) când c = 0 ori c = 2.
Pentru c = 0 soluția z = 2; Pentru c = 2 soluția z = -2.
În acest caz $y_1=0.4(1-\gamma^2)$; $y_{2,3}=-0.4(1-\gamma^2)$
Astfel, pentru Q = 0 ecuația (15) are trei soluții reale, dintre care doua coincid.

Conform formulei (9) punctele de inflexiune sunt:

$$(x_{inf})_1=0.2(3+2\gamma^2)>0;\ x_{2,3}^{inf}=0,2(-1+6\gamma^2). \quad (16)$$

Soluțiile trebuie să fie pozitive, deoarece $x_{inf}=U_g^2$. Pentru $(x_{inf})_{2,3}$ intervalul de variație a parametrului γ^2 este $\frac{1}{6}<\gamma^2<1$. Pentru $(x_{inf})_1$ intervalul de variație a lui γ^2 este $0\le\gamma^2<1$.

Examinăm cazul 2) Q>0 pentru c>2. În acest caz ecuația (15) are o soluție reală:

$$Z_1=U_1+V_1;$$

unde

$$(U_1,V_1)=[-(c-1)\pm\sqrt{(c-1)^2-1}]^{1/3}, \quad (17)$$

şi două soluții complexe conjugate între ele:

$$Z_{2,3}=-\frac{U_1+V_1}{2}\pm\frac{i\sqrt{3}}{2}(U_1-V_1).$$

Produsul $U_1V_1=1$;
Conform (14) si (9) pentru punctele de inflexiune:

$$(x_{inf})_1=0.2(1+4\gamma^2)+0,2(1-\gamma^2)Z_1. \quad (18)$$

$$(x_{inf})_{2,3}=0.2(1+4\gamma^2)+0,2(1-\gamma^2)Z_{2,3}.$$

Examinăm cazul 3) în care Q<0 pentru c < 2.
În acest caz soluțiile ecuației (15) sunt reale şi se exprimă prin funcțiile trigonometrice. Scriem aceste soluții

$$z_1=2\cos(\frac{\varphi}{3});\ z_{2,3}=2\cos\left(\frac{\varphi}{3}\pm\frac{2\pi}{3}\right), \quad (19)$$

$\cos\varphi=\frac{q/2}{(-p/3)^{3/2}}$; semnele $\frac{q}{2}$ si $(-\frac{p}{3})^{3/2}$ coincid.

Înlocuind (13) în (19) obținem

$$\cos\varphi=c-1;\ \varphi=\arccos(c-1). \quad (20)$$

Din condițiile $\cos\varphi=c-1\le1$ şi $\cos\varphi=c-1\ge-1$ rezultă intervalul de variație a marimilor c.
Aşa dar, $0\le c\le2$.

Conform formulelor (9), (14), (19) şi (20) pentru punctele de inflexiune avem:

$$(X_{inf})_1=0,2(1+4\gamma^2)+0,4(1-\gamma^2)\cos(\frac{1}{3}arccos(c-1)).$$

$$(X_{inf})_2=0,2(1+4\gamma^2)-0,2(1-\gamma^2)[\cos(\frac{1}{3}arccos(c-1))+\sqrt{3}sin(\frac{1}{3}arccos(c-1))].$$

$$(X_{inf})_3=0,2(1+4\gamma^2)-0,2(1-\gamma^2)[\cos(\frac{1}{3}arccos(c-1))-\sqrt{3}sin(\frac{1}{3}arccos(c-1))]. \quad (21)$$

Soluțiile obținute pentru punctele de inflexiune la rezolvarea ecuațiilor de gradul trei (7) în toate cazurile examinate, joaca rol de soluții inițiale pentru ecuația de gradul cinci.

Soluțiile inițiale, se caracterizează utilizând metoda aproximațiilor consecutive propusa de Newton. Astfel pentru următoarea aproximație avem

$$(x_{inf})=x_0;\ x_1=x_0-\frac{f(x_0)}{f'(x_0)};$$

$$x_2=x_1-\frac{f(x_1)}{f'(x_1)};\ x_3=x_2-\frac{f(x_2)}{f'(x_2)};\ldots;$$

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)};\ldots n=0,1,2,3,\ldots \quad (23)$$

Soluția exactă x_{n+1} a ecuației de gradul cinci permite să micşorăm gradul ecuației de la cinci la patru.

$$x^5+a_1x^4+a_2x^3+a_3x^2+a_4^x+a_5=(x-x_{n+1})(A_1x^4+A_2x^3+A_3x^2+A_4^x+A)=0, \quad (24)$$

unde $A_1=x_{n+1}+a$; $A_2=x_{n+1}^2+a_1x_{n+1}+a_2$;

$A_3=x_{n+1}^3+a_1x_{n+1}^2+a_2x_{n+1}+a_3$;

$A_4=x_{n+1}^4+a_1x_{n+1}^3+a_2x_{n+1}^2+a_3x_{n+1}+a_4$;

Restul

$$f(x_{n+1})=x_{n+1}^5+a_1x_{n+1}^4+a_2x_{n+1}^3+a_3x_{n+1}^2+a_4x_{n+1}+a_5=0;$$

Astfel am redus gradul ecuației de la cinci la patru prin împărțire.

Ecuația

$$x^4+A_1x^3+A_2x^2+A_3x+A_4=0, \quad (25)$$

este de gradul patru si se rezolva exact.

Energia gapului se află din formula (2), înlocuind în ea $U_g=\sqrt{x_{n+1}}$ şi are forma

$$\frac{\omega_g}{\Delta}=\sqrt{x_{n+1}}\left(1-\frac{\sigma\sqrt{1-x_{n+1}}}{\gamma^2-x_{n+1}}\right). \quad (26)$$

Pentru a obține celelalte energii din interiorul gapului, este necesar de rezolvat ecuația (25).

Pentru examinarea densității de stare din interiorul gapului energetic trebuie de rezolvat şi ecuația (7) pentru punctele de maxime şi minime. Rezolvam ecuația (25) prezentând-o în formă necomplectă. Pentru asta folosim substituția

$$x=\xi-\frac{A_1}{4}. \quad (27)$$

Introducând (27) în (25) obținem:

$$\xi^4+b_1\xi^2+b_2\xi+b_3=0, \quad (28)$$

unde $b_1=A_2-6(\frac{A_1}{4})^2$; $b_2=A_3-\frac{A_2A_2}{2}+8(\frac{A_1}{4})^3$;

$b_3=A_4-A_3\frac{A_1}{4}+A_2(\frac{A_1}{4})^2-3(\frac{A_1}{4})^4$;

Descompunem (28) în factori

$$\xi^4 + b_1\xi^2 + b_2\xi + b_3 = (\xi^2 + p_1\xi + q_1)\left(\xi^2 - p_1 + \frac{b_3}{q_1}\right) = \left(\xi^4 + (q_1 + \frac{b_3}{q_1} - p_1^2\right)\xi^2 + p_1\left(\frac{b_3}{q_1} - q_1\right)\xi + b_3 = 0. \quad (29)$$

Comparând (28) şi (29) obţinem un sistem de ecuaţii pentru coeficienţii p_1 $și$ q_1 .

$$\frac{b_3}{q_1} + q_1 = p_1^2 + b_1;\ \frac{b_3}{q_1} - q_1 = \frac{b_2}{p_1};$$

Adunând şi scăzând ecuaţiile din sistem obţinem:

$$\frac{2b_3}{q_1} = p_1^2 + b_1 + \frac{b_2}{p_1};\ 2q_1 = p_1^2 + b_1 - \frac{b_2}{p_1};$$

Înmulţind aceste ecuaţii primim o ecuaţie de gradul trei în raport cu $p_1^2 = t$.

$$t^3 + 2b_1t^2 + (b_1^2 - 4b_3)t - b_2^2 = 0 \quad (30)$$

Cu ajutorul substituției t=$\tau - \frac{2b_1}{3}$ aducem ecuația (30) la forma ei necompletă

$$\tau^3 + p_2\tau + q_2 = 0 \quad (32)$$

unde coeficienții p_2 si q_2 sunt

$$\frac{p_2}{3} = -(\frac{4b_3}{3} + \frac{b_1^2}{9});\ \frac{q_2}{2} = -(\frac{b_1^3}{27} - \frac{4b_3b_3}{3} + \frac{b_2^2}{2}). \quad (32)$$

Discriminantul Q$_1$ =$(\frac{p_2}{3})^3 + (\frac{q_2}{2})^2$.

Soluționarea ecuației (32) este posibilă în cazurile

1) $\frac{p_2}{3} < 0$; Q$_1$>0; 2) $\frac{p_2}{3} < 0$; Q$_1$≤0; 3) $\frac{p_2}{3} > 0$; Q$_1$>0;

În cazul 1) Q$_1$>0 soluția reala se scrie

$$\tau_1 = U_3 + V_3;\ (U_3, V_3) = (-\frac{q_2}{2} \pm \sqrt{Q_1})^{1/3}; \quad (34)$$

ori putem scrie soluția și prin funcțiile hiperbolice

$$\frac{p_2}{3} < 0.\ \tau_1 = -2a\,\mathrm{ch}\frac{\alpha}{3};\ \mathrm{ch}\alpha = \frac{q_2/2}{a^3};\ a = \pm(-\frac{p_2}{3})^{1/2}. \quad (35)$$

Semnele mărimilor $\frac{q_2}{2}$ şi a coincid.

În cazul 3) $\frac{p_2}{2}$>0,Q$_1$>0 soluția reala se scrie:

$$\tau_1 = -2a\,\mathrm{ch}\frac{\alpha}{3};\ \mathrm{ch}\alpha = \frac{q_2/2}{a^3};\ a = \pm(\frac{p_2}{3})^{1/2}. \quad (36)$$

Semnele mărimilor $\frac{q_2}{2}$ si a coincid.

În cazul 2) $\frac{q_2}{2}$<0 si Q$_1$≤0, soluţiile reale se scriu

$$\tau_1 = 2(-\frac{p_2}{3})^{1/2}cos\frac{\alpha}{3};\tau_{1,2} = 2(-\frac{p_2}{3})^{1/2}\cos\left(\frac{\alpha}{3} + \frac{2\pi}{3}\right)$$

$$\cos\alpha = -\frac{q_2/2}{(-\frac{p_2}{3})^{1/2}}. \quad (37)$$

Sa examinăm ecuația (29) de gradul patru reprezentata ca produsul a doua ecuații pătrate

$$\xi^2 + p_1\xi + q_1 = 0;\ \text{si}\ \xi^2 - p_1\xi + \frac{b_3}{q_1} = 0 \quad (38)$$

Soluțiile acestor ecuații sunt:

$$\xi_{1.2} = -\frac{1}{2}\sqrt{\tau - \frac{2b_1}{3}} \pm [-\frac{1}{4}\left(\tau - \frac{2b_1}{3}\right) - \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{2\sqrt{\tau - \frac{2b_1}{3}}}]^{1/2},$$

$$\xi_{3,4} = \frac{1}{2}\sqrt{\tau - \frac{2b_1}{3}} \pm [-\frac{1}{4}\left(\tau - \frac{2b_1}{3}\right) - \frac{b_1}{2} - \frac{b_2}{2\sqrt{\tau - \frac{2b_1}{3}}}]^{1/2}. \quad (39)$$

Mărimea τ se afla din ecuatia $\tau^2 + p_2\tau + q_2 = 0$ examinata mai sus.

Trebuie de urmărit după expresiile de sub radical, de exemplu $\tau - \frac{2b_1}{3}$>0. La fel soluțiile x=$U_g^2 = \xi - \frac{a_1}{4}$>0, trebuie sa fie pozitive. Analog ecuației (25) examinam ecuația (7) pentru maxime și minime.

$$x^4 + 0.8a_1x^3 + 0.6a_2x^2 + 0.4a_3x + 0.2a_4 = 0.$$

Trecem la forma necompleta a ecuației (7) prin substituția x=$\eta - 0.2a_1$; obținem:

$$\eta^4 + B_1\eta^3 + B_2\eta + B_3 = 0, \quad (40)$$

unde

$$B_1 = 0.6(a_2 - 0.4a_1);\ B_2 = 0.4(a_3 - 0.6a_2a_1 + 0.16a_1^3);$$
$$B_3 = 0.2(a_4 - 0.4a_3 - a_1 + 0.12a_2a_1^2 - 0.024a_1^4);$$

Descompunem (40) în factori

$$\eta^4 + B_1\eta^3 + B_2\eta + B_3 = (\eta^2 + p_3\eta + q_3)(\eta^2 - p_3\eta + \frac{B_3}{q_3}) = \eta^4 + (q_3 + \frac{B_3}{q_3} - p_3^2)\eta^2 + p_3\left(\frac{B_3}{q_3} - q_3\right)\eta + B_3 = 0. \quad (41)$$

Comparând (40) și (41) obținem sistemul de ecuații pentru coeficienții p_3 si q_3.

$$\frac{B_3}{q_3} + q_3 = p_3^2 + B_1;\ \frac{B_3}{q_3} - q_3 = \frac{B_2}{p_3}.$$

Adunând şi scăzând ecuaţiile din sistem avem:

$$\frac{2B_3}{q_3} = p_3^2 + B_1 + \frac{B_2}{p_3};\ 2q_3 = p_3^2 + B_1 - \frac{B_2}{p_3};$$

Înmulțind aceste ecuații, primim o ecuație de gradul trei in raport cu $p_3^2 = \lambda$.

$$\lambda^3 + B_1\lambda^2 + (B_1^2\eta - 4B_3)\lambda - B_2^2 = 0. \quad (42)$$

Cu ajutorul substituției

$$\lambda = \nu - \frac{2b_1}{3}, \quad (43)$$

aducem ecuația (42) la forma necompletă.

$$\nu^3 + p_3\nu + q_3 = 0, \quad (44)$$

unde coeficienții p_3 $și$ q_3 sunt

$$\frac{p_3}{3} = -(\frac{4B_1}{3} + \frac{B_1^2}{9});\ \frac{q_3}{2} = -(\frac{B_1^3}{27} - \frac{4B_1B_3}{3} + \frac{B_2^2}{2});$$

Discriminantul

$$Q_2 = (\frac{p_3}{3})^3 + (\frac{q_3}{2})^2.$$

Soluționarea ecuației (44) este posibilă în cazurile:

1) $\frac{p_3}{3} < 0$; Q$_2$>0; 2) $\frac{p_3}{3} < 0$; Q$_2$≤0; 3) $\frac{p_3}{3} > 0$; Q$_2$>0;

Scriem soluțiile în fiecare caz aparte.

În primul caz 1) $\frac{p_3}{3} < 0$; Q$_2$>0; Soluția reala se scrie

$$\nu_1 = U_4 + V_4;\ (U_4, V_4) = (-\frac{q_3}{2} \pm \sqrt{Q_2})^{1/3}. \quad (45)$$

Soluția poate fi scrisă și prin funcții hiperbolice.

$$\nu_1 = -2a_1\mathrm{ch}\frac{\alpha_1}{3};\ \mathrm{ch}\alpha_1 = \frac{q_3/2}{a_1};\ a_1 = \pm(-\frac{p_3}{3})^{1/2}. \quad (46)$$

Semnele mărimilor $\frac{q_3}{2}$ $și$ a_1 coincid.

În cazul 3) $\frac{p_3}{3} > 0$; Q$_2$>0; avem

$$\nu_1 = -2a_1\mathrm{sh}\frac{\alpha_1}{3};\ \mathrm{sh}\alpha_1 = \frac{q_3/2}{a_1};\ a_1 = \pm(\frac{p_3}{3})^{1/2}. \quad (47)$$

Semnele $\frac{q_3}{2}$ si a_1 coincid.

În cazul 2) $\frac{p_3}{3} < 0$; Q$_2$≤0; soluţiile reale se scriu

$$\nu_1 = 2(-\frac{p_3}{3})^{1/2}cos\frac{\alpha_1}{3};\nu_{2.3} = 2(-\frac{p_3}{3})^{1/2}\cos\left(\frac{\alpha_1}{3} \pm \frac{2\pi}{3}\right)$$

$$\cos\alpha_1 = -\frac{q_3/2}{\left(-\frac{p_3}{3}\right)^{3/2}}. \quad (48)$$

Examinăm acum ecuația (41) scrisă prin produsul a două ecuații de gradul doi.

$$\eta^2 + p_3\eta + q_3 = 0\ \text{si}\ \eta^2 - p_3\eta + \frac{B_3}{q_3} = 0. \quad (49)$$

Soluțiile acestor ecuații sunt:

$$\eta_{1.2} = -\frac{1}{2}\sqrt{\nu - \frac{2b_1}{3}} \pm [-\frac{1}{4}\left(\nu - \frac{2b_1}{3}\right) - \frac{b_1}{2} + \frac{b_2}{2\sqrt{\nu - \frac{2b_1}{3}}}]^{1/2}$$

$$\eta_{3,4} = \frac{1}{2}\sqrt{\nu - \frac{2b_1}{3}} \pm [-\frac{1}{4}\left(\nu - \frac{2b_1}{3}\right) - \frac{b_1}{2} - \frac{b_2}{2\sqrt{\nu - \frac{2b_1}{3}}}]^{1/2}, \quad (50)$$

Mărimea ν se află din ecuaţia $\nu^2 + p_3\nu + q_3 = 0$ examinată mai sus. Trebuie de urmărit expresiile de sub semnul radicalului $\nu - \frac{2b_1}{3} > 0$. Trecerea catre variabila x se efectuează cu ajutorul formulei:

$$x = U_g^2 = \eta - 0.2a_1 > 0,$$

adică trebuie de urmărit ca soluţiile U_g^2 sa fie positive.

CONCLUZII

În lucrarea prezentată am examinat supraconductibilitatea în modelul Shiba−Rusinov. Am studiat detaliat gapul energetic, care conţine banda energetică generată de interacţiunea electronilor şi impurităţilor. Având informaţia despre zerourile ecuaţiei (5), puncte de maximum şi minimum, punctele de inflexiune, putem construi graficul polinomului f(x) în interiorul gapului energetic şi examina banda energetica. Modelul matematic este prezentat de ecuaţia de gradul cinci în raport cu U_g^2, unde functia U_g este responsabila de supraconductibilitatea din interiorul gapului energetic. Ecuaţia de gradul cinci pentru U_g^2 a fost rezolvată prin metode analitice. Am observat ca punctele de inflexiune sunt cele mai apropiate de zerourile ecuaţiei de gradul cinci. Astfel punctele de inflexiune au fost luate drept soluţii iniţiale pentru ecuaţia de gradul cinci. Aceste soluţii iniţiale au fost corectate prin metoda aproximaţiilor consecutive propusa de Newton. Corecţia soluţiilor poate fi efectuata cu exactitate necesara, de exemplu de ordinul 10^{-8}. Aceste soluţii corectate joaca rol de soluţii exacte pentru ecuaţia de gradul cinci. Împărţind polinomul de gradul cinci la $x - x_{corectate}$ micşoram gradul ecuaţiei de la cinci la patru. Ecuaţia de gradul patru se rezolva exact prin metode standard. Metoda propusa de rezolvare analitica a ecuaţiei de gradul cinci este o prima încercare în acest domeniu. Analog putem proceda şi cu ecuaţiile de gradul şase. Punctele de inflexiune în ecuaţia de gradul şase sunt reprezentate de derivata a doua de la polinomul de gradul şase, care este o ecuaţie de gradul patru şi soluţiile acestei ecuaţii joaca rol de soluţii iniţiale pentru ecuaţia de gradul şase. Fiind corectate aceste soluţii iniţiale cu exactitatea necesara prin metoda aproximaţiilor consecutive obţinem soluţii exacte pentru ecuaţia de gradul şase. Apoi prin împărţire la soluţiile exacte micşoram gradul ecuaţiei de la şase la cinci, şi de la cinci la patru.

Metoda propusa de rezolvare analitica a ecuaţiei de gradul cinci este destul de simpla pentru ecuaţii cu coeficienţi numerici. Noi în schimb am examinat ecuaţia de gradul cinci cu coeficient variabili, care este mai dificilă analitic. În multe domenii din fizică teoretică se întâlnesc ecuaţii de gradul cinci şi şase care întâlnesc obstacole din lipsa de metode de rezolvare a astfel de ecuaţii. Metoda propusă de noi înlătura aceste dificultăţi matematice.

BIBLIOGRAFIE

[1] L.Cooper,Phys.Rev.,104,1183(1956).
[2] T.Bardeen,L.Cooper,T.Schrieffer, Phys.Rev.108, 1175, (1957).
[3] N.N. Bogoliubov,JETP,34,58,(1958).
[4] A.A.Abrikosov, L.P.Gorkov, JETP, 39, 1781, (1960).
[5] H.Shiba, Prog.Theor.Phys.40, 435, (1968); 50, 50 (1973).
[6] A.J. Rusinov,JETP,56,6,(1969).
[7] M.I.Vladimir, Teza de doctor in stinte fizico- matematice, Chisinau, (1975).
[8] M.I.Vladimir,Teza de doctor habilitat in stiinte fizico-matematice, Chisinau, (1991).