



รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ : สมบัติบางประการของตัวนำยวดยิ่ง MgB_2

โดย นายพงษ์แก้ว อุดมสมุทรศิริบุญและคณะ

30 มิถุนายน 2547

รายงานวิจัยฉบับสมบูรณ์

โครงการ : สมบัติบางประการของตัวนำยวดยิ่ง MgB_2

คณะผู้วิจัย

สังกัด

1.ศ.ดร.สุทัศน์ ยกส้าน

มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
(นักวิจัยที่ปรึกษา)

2.นายพงษ์แก้ว อุดมสมุทรหิรัญ

มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ
(หัวหน้าโครงการวิจัย)

สนับสนุนโดยสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย

(ความเห็นในรายงานนี้เป็นของผู้วิจัย สกว.ไม่จำเป็นต้องเห็นด้วยเสมอไป)

คำนำ

เนื่องจากตัวนำยวดยิ่งแมกนีเซียมไดโบไรด์ เพิ่งจะมีการค้นพบในปี 2001 และผมได้รับทุนวิจัยในปี 2002 ซึ่งเป็นช่วงต้นของการศึกษาสมบัติต่างๆก็ยังไม่ชัดเจนซึ่งจนจบโครงการแล้วในปี 2004 การศึกษาด้านนี้ก็ยังไม่มีย่อสรุปที่ชัดเจน การนำเสนอทฤษฎีทำกันในลักษณะ " ตาบอดคำข้าง " การอธิบายสมบัติต่างๆใช้ทฤษฎีในแง่รายละเอียดที่ไม่เหมือนกัน ซึ่งผมก็ทำเช่นนั้น จึงทำให้การนำเสนอทำในลักษณะที่ไม่ต่อเนื่องที่ละแบบจำลองซึ่งแยกกันอย่างชัดเจนเป็นบทๆไป

การวิจัยครั้งนี้ได้รับเงินความสนับสนุนการวิจัยจากสำนักงานกองทุนสนับสนุนการวิจัย และได้รับความกรุณาจากท่าน ศ.ดร.สุทัศน์ ยุกส์าน มาเป็นนักวิจัยที่ปรึกษาให้ จึงขอขอบคุณมาในครั้งนี้ด้วย

นายพงษ์แก้ว อุดมสมุทรศิริณ

หัวหน้าโครงการวิจัย

Executive Summary

จากการค้นพบตัวนำยวดยิ่งตัวใหม่ในแมกนีเซียมไดโบไรด์เมื่อต้นปี 2001 ได้กระตุ้นวงการวิจัยด้านตัวนำยวดยิ่งเป็นอันมาก มีการทำวิจัยในเรื่องนี้อย่างมากมายทั่วโลก แต่อย่างไรจนถึงปัจจุบันปี 2004 กลไกการเกิดสภาพนำยวดยิ่งและสมบัติต่างยังไม่มีทฤษฎีใดที่สามารถอธิบายได้ชัดเจนและครอบคลุม งานวิจัยนี้ได้เริ่มทำเมื่อกลางปี 2002 ซึ่งยังไม่มีอะไรที่ชัดเจนมากนักโดยจะทำการศึกษาสมบัติของตัวนำยวดยิ่งแมกนีเซียมไดโบไรด์ในเรื่อง ปรากฏการณ์ไอโซโทป ความจุความร้อน ช่องว่างพลังงานและความไม่สมมาตร โดยใช้แบบจำลองที่มีความเป็นไปได้ที่จะสามารถอธิบายสมบัติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้จำนวน 3 แบบจำลอง คือ แบบจำลองแบบหลุมศักย์ 2 หลุม แบบจำลองแบบไม่สมมาตร และแบบจำลองแบบสองแถบ ดังนี้

1. แบบจำลองแบบหลุมศักย์ 2 หลุม ศึกษาอัตราส่วนของช่องว่างพลังงาน ต่ออุณหภูมิวิกฤติของ แมกนีเซียมไดโบไรด์ สำหรับตัวนำยวดยิ่งที่มีค่าคู่ควบแบบอ่อน และเป็น s-wave โดยกำหนดให้มีศักย์ของการจับคู่ของคูเปอร์เป็นอันตรกิริยาแบบ electron-phonon และ non-electron-phonon พบว่าสามารถอธิบายค่าอัตราส่วนของช่องว่างพลังงาน ต่ออุณหภูมิวิกฤติที่มี 2 ค่าโดยมีค่ามาก และค่าน้อย กว่าทฤษฎี BCS ได้

2.แบบจำลองแบบไม่สมมาตร ศึกษาความจุความร้อนของแมกนีเซียมไดโบไรด์ โดยคำนวณหาสัดส่วนของความจุความร้อน $\frac{\Delta C}{C_N}$ ของแมกนีเซียมไดโบไรด์ ซึ่งพบว่าผลของความไม่สมมาตรแบบ แบบคลื่น S ที่มีความไม่สมมาตรในทุกแกนให้ค่า $\frac{\Delta C}{C_N}$ ที่สอดคล้องกับผลการทดลอง

3.แบบจำลองแบบสองแถบ ศึกษาอุณหภูมิวิกฤติและสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของตัวนำยวดยิ่งแบบ two-band และ s-wave โดยกำหนดให้ในแต่ละ band มีศักย์ของการจับคู่ของคูเปอร์เป็นอันตรกิริยาแบบ electron-phonon และ non-electron-phonon รวมทั้งมีการจับคู่ของอิเล็กตรอนระหว่าง band ด้วยพบว่าสามารถหาค่าอุณหภูมิวิกฤติ 40 K และสัมประสิทธิ์ของไอโซโทป 0.26 ของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้

จากผลการทดลองและคำนวณเชิงตัวเลขล่าสุดซึ่งเป็นที่ยอมรับอย่างกว้างขวางพบว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์มีสมบัติของตัวนำยวดยิ่งแบบสองแถบพลังงานที่มีความไม่สมมาตร และในการวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยใช้แบบจำลองแบบสองแถบพลังงานซึ่งก็ให้ผลการคำนวณที่สอดคล้องกับการทดลองได้เป็นอย่างดี แต่ผู้วิจัยไม่ได้คำนึงถึงผลของความไม่สมมาตรเข้าไปด้วยจึงไม่สามารถอธิบายสมบัติอื่นได้ครบถ้วน ซึ่งจะต้องทำการวิจัยต่อไป

บทคัดย่อ

งานวิจัยนี้มีจุดประสงค์เพื่อการศึกษาสมบัติบางประการของตัวนำยวดยิ่งแมกนีเซียมไดโบไรด์ในเรื่อง ปรากฏการณ์ไอโซโทป ความจุความร้อน ช่องว่างพลังงานและความไม่สมมาตร โดยใช้แบบจำลอง 3 แบบ คือ แบบจำลองแบบหลุมศักย์ 2 หลุม ศึกษาอัตราส่วนของช่องว่างพลังงาน ต่ออุณหภูมิวิกฤติ แบบจำลองแบบไม่สมมาตรศึกษาความจุความร้อน และใช้แบบจำลองแบบสองแถบพลังงานศึกษาสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของ แมกนีเซียมไดโบไรด์ พบว่าทุกแบบจำลองสามารถอธิบายสมบัติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้ดีทั้งนี้ขึ้นกับขนาดของตัวแปรที่ใช้ จากผลการทดลองและคำนวณเชิงตัวเลขล่าสุดพบว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์มีสมบัติของตัวนำยวดยิ่งแบบสองแถบพลังงานที่มีความไม่สมมาตร และในการวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยใช้แบบจำลองแบบสองแถบพลังงาน โดยไม่ได้คำนึงถึงผลของความไม่สมมาตรเข้าไปซึ่งก็ให้ผลการคำนวณที่สอดคล้องกับการทดลองได้เป็นอย่างดี อย่างไรก็ตามเพื่อจะอธิบายสมบัติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้ครบถ้วน จะต้องมีการศึกษาตัวนำยวดยิ่งแบบสองแถบพลังงานที่มีความไม่สมมาตร ซึ่งจะทำให้ในการวิจัยครั้งต่อไป

Abstract

The purpose of our research is to study some properties of MgB_2 superconductors as the isotope effect, specific heat, energy gap and anisotropy property. There are 3 models used for calculating these properties. The two-square-well model, the anisotropy model, and two-band model are used to study the Gap-to- T_c ratio, specific heat, and the isotope effect of MgB_2 , respectively. We find that all of our models can describe properties of MgB_2 well depending on the value of their parameters. From the recent experiments and numerical calculations of MgB_2 , they show that MgB_2 is the anisotropy two-band superconductors. In our work, we have already done the two-band model without anisotropy term that its result agrees with experimental data. However to cover all of properties of MgB_2 , the anisotropy two-band superconductors will be done that may be in the next project.

สารบัญ

เนื้อหา	หน้า
บทคัดย่อไทย	
บทคัดย่ออังกฤษ	
Executive Summary	
บทที่ 1 บทนำ	1
1.1 วัตถุประสงค์ของโครงการ	1
1.2 ระเบียบการวิจัย	1
1.3 แผนการดำเนินงานตลอดโครงการ	1
1.4 ประวัติการค้นพบตัวนำยวดยิ่ง	2
บทที่ 2 เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	4
2.1 ทฤษฎีของตัวนำยวดยิ่ง	4
2.2 ปฏิกิริยาของไอโซโทป	4
2.3 ความจุความร้อน	5
2.4 ช่องว่างพลังงาน	6
2.5 ความไม่สมมาตร	7
บทที่ 3 แบบจำลองแบบหลุมศักย์ 2 หลุม	9
3.1 การคำนวณ	9
3.2 ผลการคำนวณและสรุป	11
บทที่ 4 แบบจำลองแบบไม่สมมาตร	13
4.1 การคำนวณ	13
4.2 ผลการคำนวณและสรุป	15
บทที่ 5 แบบจำลองแบบสองแถบพลังงาน	18
5.1 แบบจำลองของฮามิลโทเนียน	18
5.2 สมการของอนุกรมวิวกฤติ	19
5.3 สัมประสิทธิ์ของไอโซโทป	20
5.4 ผลการคำนวณ	21
5.5 สรุปและวิจารณ์ผล	22
บทที่ 6 สรุปผลการวิจัย	24
เอกสารอ้างอิง	25
Output ของโครงการ	
ภาคผนวก	

บทที่ 1

บทนำ

1.1 วัตถุประสงค์ของโครงการ

เพื่อพัฒนาความรู้ ความเข้าใจในสมบัติและกลไกของตัวนำยิ่งยวดใน MgB_2 โดยจะศึกษาสมบัติของ MgB_2 ในเรื่อง อัตราส่วนของช่องว่างพลังงาน (Δ_0) กับอุณหภูมิวิกฤติ (T_c) และสัดส่วนของความจุความร้อน

1.2 ระเบียบการวิจัย

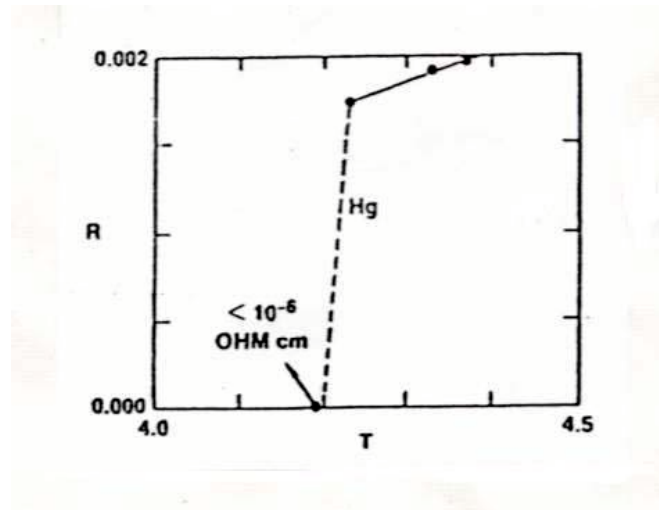
ในการวิจัยนี้ มีเป้าหมายที่จะอธิบายสมบัติของ MgB_2 ให้ได้สอดคล้องกับผลการทดลองมากยิ่งขึ้น โดยใช้ทฤษฎี BCS มาปรับปรุง จะใช้การคำนวณภายใต้ two-band model และความหนาแน่นสถานะที่ขึ้นกับพลังงานแบบต่างๆ เพื่อให้ได้คำตอบ ของอัตราส่วนช่องว่างพลังงานกับอุณหภูมิวิกฤติ ความจุความร้อนและดัชนีของ ปรากฏการณ์ ไอโซโทป แล้วเปรียบเทียบคำตอบที่ได้กับผลการคำนวณเชิงตัวเลขเพื่อนำมาเปรียบเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง

1.3 แผนการดำเนินงานตลอดโครงการ

กิจกรรม	0-6 ค.	6 ค.-1 ปี	1 ปี-1.5 ปี	1.5ปี-2ปี
ศึกษาผลงานที่เกี่ยวข้อง เช่น สมบัติต่างๆ ของ MgB_2 และ ทฤษฎีใหม่ที่มีการนำเสนอ และเทคนิคในการแก้ปัญหา	<<=====	=====	=====	=====>>
สร้างแบบจำลอง MgB_2 ภายใต้ขอบเขตของ ทฤษฎีการควบคู่แบบอ่อนและแข็ง	<<=====	=====	=====>>	
คำนวณสมบัติของ MgB_2 เชิงคณิตศาสตร์ เพื่อให้ได้คำตอบของอัตราส่วนของช่องว่าง พลังงาน (Δ_0) กับอุณหภูมิวิกฤติ (T_c) ความจุ ความร้อนและดัชนีของปราคฏการณ์ ไอโซโทป	<<=====	=====	=====	=====>>
คำนวณเชิงตัวเลข ด้วยโปรแกรม mathematica และ เทคนิคการทำซ้ำแบบ Newton	<<=====	=====	=====	===== >>
นำเสนอผลงานในวารสาร		<<=====>>		<<=====>>
สรุปโครงการ				<<=====>>

1.4 ประวัติการค้นพบตัวนำยวดยิ่ง

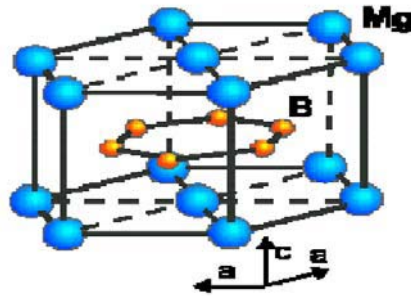
สภาพนำยวดยิ่งถูกพบครั้งแรกในปรอท โดย Kamerlingh Onnes(Kamerlingh Onnes: 1911) ในปี 1911 เมื่อลดอุณหภูมิจนต่ำกว่าอุณหภูมิวิกฤติ(T_c) ตัวนำยวดยิ่งจะเปลี่ยนสถานะจากสถานะปกติ เป็นสถานะนำยวดยิ่ง มีสมบัติที่แตกต่างจากสถานะปกติอย่างชัดเจนคือ มีความต้านทานเป็นศูนย์ ปรากฏการณ์ไมส์เนอร์ (Meissner Effect) ปรากฏการณ์ไอโซโทป(Isotope Effect) และปรากฏการณ์โจเซฟสัน (Josephson Effect)



รูปที่ 1.1 แสดงอุณหภูมิวิกฤติของสภาพนำยวดยิ่งในปรอท(Kittel :1991)

ในปี 1988 Bednorz และ Muller(Bednorz and Muller :1986) พบสภาพนำยวดยิ่งในสารประกอบของธาตุทรานสิชันและออกไซด์ ซึ่งเป็นตัวนำยวดยิ่งตระกูลใหม่ที่เรียกว่า ตัวยวดยิ่งอุณหภูมิสูง มีสมบัติที่แตกต่างกับตัวนำยวดยิ่งแบบเดิมหลายประการ แต่ที่สำคัญคือมีอุณหภูมิวิกฤติสูงกว่าตัวนำยวดยิ่งแบบเดิมมาก เช่น พบว่า ในตระกูล Bi-Sr-Ca-Cu-O สามารถให้ T_c ได้สูงถึง 110 K สูงกว่าจุดเดือดของไนโตรเจนเหลว(77K) ก่อนข้างมาก ดังนั้นจึงสามารถนำมาใช้ประโยชน์ได้กว้างขวางกว่าตัวนำยวดยิ่งแบบเดิม ที่ใช้ฮีเลียมเหลว(4 K)เป็นสารหล่อเย็น และยังเป็นที่ยกย่องกันว่า ถ้าสามารถสร้างตัวนำยวดยิ่งที่มี T_c สูงถึงอุณหภูมิห้องก็สามารถนำมาใช้แทนทองแดงในสายไฟฟ้าต่างๆ ในอุปกรณ์ทางไฟฟ้า เนื่องจากตัวนำยวดยิ่งไม่มีความต้านทานจะสามารถลดการสูญเสียพลังงานและเพิ่มประสิทธิภาพของอุปกรณ์นั้นได้เป็นอย่างมาก

เมื่อเดือนมกราคมปี 2001 มีการค้นพบตัวนำยวดยิ่งตัวใหม่ คือ MgB_2 โดย Nagamatsu และ Akimitsu (Nagamatsu and Akimitsu: 2001) ที่มีโครงสร้างและองค์ประกอบที่แตกต่างจากตัวนำยวดยิ่งกลุ่มเดิมที่พบในสารประกอบของธาตุทรานสิชันและคอปเปอร์ออกไซด์เท่านั้น ทั้งนี้ยังมี T_c ที่สูงถึง 39 K สูงกว่าขอบเขตที่อธิบายได้ดีด้วยทฤษฎี BCS และยังไม่มียทฤษฎีหรือคำอธิบายใดที่ได้รับการยอมรับอย่างกว้างขวาง



รูปที่ 1.2 แสดงโครงสร้างของแมกนีเซียมไดโบไรด์ (Buzea and Yamashita :2001)

แมกนีเซียมไดโบไรด์มีโครงสร้างง่าย ๆ ที่ประกอบด้วยธาตุโลหะ 2 ชนิด (Binary Compound) คือ ธาตุแมกนีเซียม 1 อะตอม และธาตุโบรอน 2 อะตอม โดยอะตอมของโบรอนแต่ละตัวจะจับกับอะตอมของโบรอนข้างเคียงอีก 3 ตัว เรียงตัวกันลักษณะเดียวกับแกรไฟต์ คือ โบรอน 6 ตัวจะจับพันธะกันเป็นรูป 6 เหลี่ยมเป็นระนาบ ระหว่างระนาบของโบรอนจะมีอะตอมของแมกนีเซียมอยู่ตรงกลาง วางตัวแบบ Hexagonal close-packed เรียงตัวซ้อนกันตามแกน c ระยะห่างระหว่างระนาบของโบรอนกับระนาบของโบรอนที่ติดกันจะมากกว่าระยะห่างระหว่างระนาบโบรอนกับระนาบของแมกนีเซียม พลังงานระหว่างพันธะของแมกนีเซียมกับโบรอน จะอ่อนกว่าพลังงานพันธะของแมกนีเซียมกับแมกนีเซียม และพลังงานพันธะของโบรอนกับโบรอนจะแข็งแรงมากที่สุด แสดงว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์ มีโครงสร้างแบบ anisotropy เชื่อว่าการมีโครงสร้างแบบชั้น ๆ ของสารประกอบชนิดนี้อาจมีผลกระทบที่สำคัญต่อสมบัติต่างๆ ในสภาพนำยวดยิ่งเช่นเดียวกับตัวนำยวดยิ่งอุณหภูมิสูง นอกจากแมกนีเซียมไดโบไรด์แล้วยังมีการค้นพบตัวนำยวดยิ่งในกลุ่มนี้อีกหลายชนิด เช่น TaB_2 มี $T_c = 9.5 \text{ K}$ (Kaczorowski et al.: 2001) , $\text{BeB}_{2.75}$ มี $T_c = 0.7 \text{ K}$ (Young et al.:2001), สารประกอบ graphite-sulphur มี $T_c = 35 \text{ K}$ (Silva, Torres, and Kopelevich :2001)

ในแง่ของการนำมาประยุกต์ใช้งาน เนื่องจากเป็นโลหะผสมที่มีโครงสร้างที่ไม่ซับซ้อน จึงสามารถเตรียมได้ง่าย รวมทั้งยังสามารถนำไปขึ้นรูปทำตัวนำได้ง่ายและสะดวกกว่าตัวนำยวดยิ่งกลุ่มคอปเปอร์ออกไซด์ และยังสามารถเตรียมได้ในหลายลักษณะ เช่น เป็นก้อน (Bulk) ฟิล์มบาง (Thin film) ผง (Powder) เส้นลวด (Wire) ผลึกเชิงเดี่ยว (Single crystal) และเทป (Tape) การดึงเป็นเส้นหรือขึ้นรูปในลักษณะต่างๆ ไม่เกิดการเปราะหรือแตกหักง่ายเหมือนในตัวนำยวดยิ่งแบบเซรามิกซ์ และแมกนีเซียมไดโบไรด์ยังมีความหวังของนักวิทยาศาสตร์ ในการนำตัวนำยวดยิ่งมาประดิษฐ์เป็นอุปกรณ์ทางอิเล็กทรอนิกส์ต่างๆ ที่ใช้งานได้จริงในชีวิตประจำวัน

บทที่ 2

เอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

ในบทนี้จะกล่าวถึงเอกสารงานวิจัยที่เกี่ยวข้องกับแมกนีเซียมไดโบไรด์ในประเด็นกว้างๆ และที่สำคัญ ในเรื่อง ปฏิกิริยาไอโซโทป ความจุความร้อน ช่องว่างพลังงานและความไม่สมมาตร รวมไปถึงทฤษฎี BCS ซึ่งเป็นทฤษฎีหลักของตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมและยังสามารถนำมาปรับปรุงให้สามารถใช้อธิบายสมบัติบางประการของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้

2.1 ทฤษฎีของตัวนำยวดยิ่ง

ในปัจจุบันมีทฤษฎีของตัวนำยวดยิ่งที่ได้รับการยอมรับอย่างกว้างคือ ทฤษฎี BCS (Bardeen, Cooper, and Schrieffer :1957) ที่ถูกเสนอโดย Bardeen, Cooper และ Schrieffer ในปี 1957 โดยมีหลักการที่ว่า ตัวนำในสถานะนำยวดยิ่งคือ คู่ของอิเล็กตรอนที่ดึงดูดกันด้วยปฏิกิริยาที่มีโฟนอนเป็นตัวช่วย (electron-phonon interaction) และ คู่ของอิเล็กตรอนนี้ถูกเรียกว่า คู่ของคูเปอร์ (Cooper pair)(Cooper:1956)

BCS ได้เสนอแบบจำลองของฮามิลโทเนียน(Hamiltonian) ที่มีคู่ของคูเปอร์เป็นตัวนำดังนี้

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} - \sum_{kk'} V_{kk'} C_{k\uparrow}^+ C_{-k\downarrow}^+ C_{-k'\downarrow} C_{k'\uparrow} \quad (2.1)$$

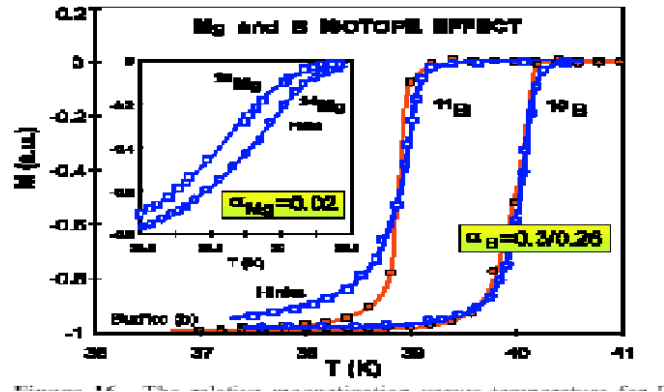
โดย ε_k เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนวัดจากระดับพลังงานเฟอร์มี $V_{kk'}$ เป็นพลังงานศักย์ของการดึงดูดกันของอิเล็กตรอนในคู่อิเล็กตรอน

เมื่อนำฮามิลโทเนียนมาคำนวณด้วยวิธีทางคณิตศาสตร์จะพบว่าทฤษฎี BCS สามารถอธิบายสมบัติต่างๆของตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมได้ดี แต่สำหรับตัวนำยวดยิ่งอุณหภูมิสูงและแมกนีเซียมไดโบไรด์ยังมีสมบัติหลายประการที่ไม่สามารถอธิบายได้

2.2 ปฏิกิริยาไอโซโทป

จากการทดลองเรื่องปฏิกิริยาไอโซโทปในตัวนำยวดยิ่งพบว่า $T_c \propto M^{-\alpha}$ โดย M คือมวลของไอโซโทป และ α เป็นสัมประสิทธิ์ของปฏิกิริยาไอโซโทป ตามทฤษฎี BCS พบว่า $\alpha = 1/2$ เสมอซึ่งแสดงว่ากลไกของสภาพนำยวดยิ่งเกิดจากปฏิกิริยาของอิเล็กตรอนกับโฟนอนภายใต้การประมาณแบบฮามิลโทเนียนอย่างง่าย

ในปี 2001 Bud'ko และคณะ(Bud'ko et al.:2001) ทำการทดลองวัดสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้ประมาณ 0.26 ซึ่งสอดคล้องกับผลการทดลองของ Hink

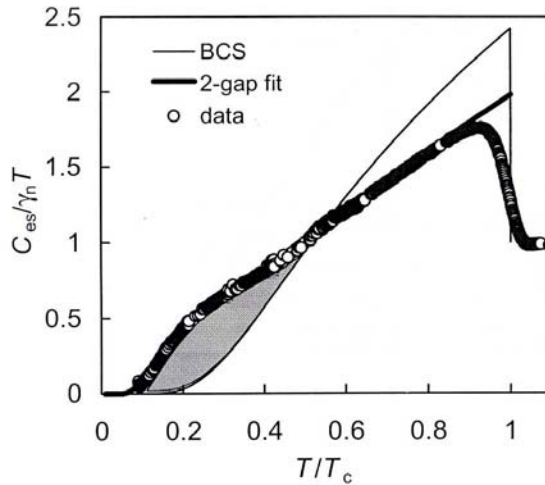


รูปที่ 2.1 แสดงกราฟของสัมประสิทธิ์ของไอโซโทป(Hink; et al.:2001)

และ คณะ(Hink et al. :2001) ที่สามารถวัดสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของแมกนีเซียม(α_{Mg}) ได้ $\alpha_{Mg} = 0.02$ และวัดสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของโบรอน(α_B) ได้ $\alpha_B = 0.26$ รวมสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปทั้งหมด เป็น $\alpha_B + \alpha_{Mg} = 0.28$ ซึ่งเป็นหลักฐานยืนยันที่ชัดเจนว่ากลไกการเกิดสภาพนำยวดยิ่งในแมกนีเซียมไดโบไรด์เกิดจากการจับคู่ของอิเล็กตรอน(electron-phonon-electron interaction)ตามแบบทฤษฎี BCS และพบว่าการจับคู่ของอิเล็กตรอนเกิดในระนาบของโบรอนเป็นส่วนใหญ่

2.3 ความจุความร้อน

Walti และ คณะ (Walti et al.:2001) ทำการทดลองวัดค่าความจุความร้อนจำเพาะ $C_p(T)$ ของ MgB_2 ในช่วงอุณหภูมิระหว่าง 3 K ถึง 220 K พบว่ากราฟที่ได้ไม่เป็นไปตามความสัมพันธ์ $C_p(T) = \gamma T + \beta T^3$ เช่นในตัวนำยิ่งยวดแบบดั้งเดิม และได้เสนอคำอธิบายค่าของความจุความร้อนจำเพาะของ MgB_2 โดยแยกการคำนวณเป็นสองส่วนคือ ส่วนของประจุและ lattice คำนวณความจุความร้อนจำเพาะของประจุโดยใช้ทฤษฎี BCS ที่มีการควบคู่แบบแรง($\lambda \approx 2$) และ คำนวณความจุความร้อนจำเพาะของ lattice โดยใช้แบบจำลองของ Debye-Einstein พบว่าสอดคล้องกับการทดลองได้ดี แต่มีข้อโต้แย้งว่าทฤษฎี BCS เป็นทฤษฎีที่ใช้ได้ดีในช่วงการควบคู่แบบอ่อน($\lambda < 1$) เท่านั้น



รูปที่ 2.2 แสดงค่าการกระโดดของความจุความร้อนของแมกนีเซียมไดโบไรด์ (Buzza and Yamashita :2001) โดยเปรียบเทียบผลการทดลองกับทฤษฎีต่างๆ

Wang, Plackowski และ Junod (Wang,Plackowski,and Junod:2001) หาค่าการกระโดดของความจุความร้อนได้ $\frac{\Delta C(T_C)}{\gamma T_C} = 0.8$ ซึ่งต่ำกว่าค่าที่ทำนายไว้ตามทฤษฎี BCS คือควรมีค่า $\frac{\Delta C(T_C)}{\gamma T_C} = 1.14$

2.4 ช่องว่างพลังงาน

Rubio-Bollinger, Suderow และ Vieira (Rubio-Bollinger,Suderow and Vieira:2001) ใช้เทคนิค STM(Scanning tunneling microscope) ทำการทดลองวัดค่าช่องว่างพลังงานของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้สัดส่วนของช่องว่างพลังงานต่ออุณหภูมิวิกฤตเป็น $\frac{2\Delta(0)}{k_B T_C} \approx 1.2 - 4.0$

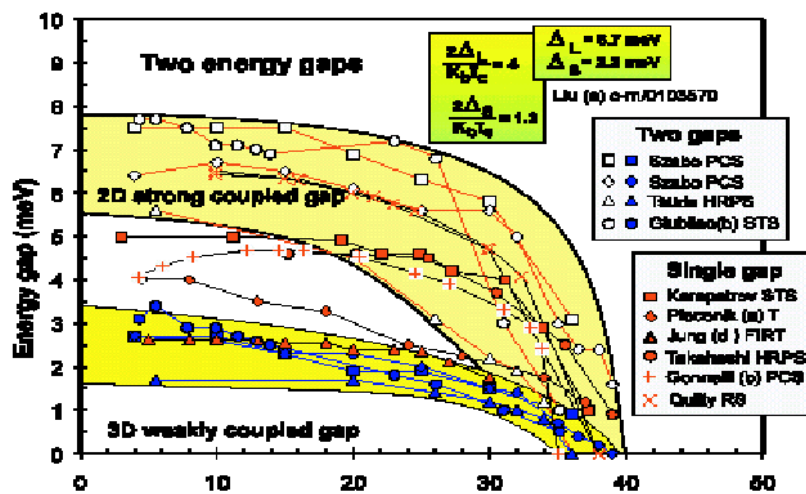
Schmidt และ คณะ (Schmidt et al.:2001) ใช้เทคนิค PCS(Point contact spectroscopy) วัดช่องว่างพลังงานได้ประมาณ 4.3 meV ซึ่งน้อยกว่าทฤษฎี BCS (5.9 meV) สามารถคำนวณสัดส่วนของช่องว่างพลังงานต่ออุณหภูมิวิกฤตเป็น $\frac{2\Delta(0)}{k_B T_C} \approx 1.25$ และในบางโครงสร้างได้เท่ากับ 1.5 และ

3 Ivarone และ คณะ(Ivarone et al.:2001) ใช้เทคนิค STM ทำการวัดช่องว่างพลังงานพบว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์ มีช่องว่างพลังงาน 2 ค่า คือ $\Delta_1 = 2.3 \text{ meV}$ และ $\Delta_2 = 7.1 \text{ meV}$ ซึ่งแสดงว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์เป็นตัวนำยิ่งยวดแบบช่องว่างพลังงานหลายช่อง

Sharoni, Felner และ Millo (Sharoni,Felner, and Millo:2001) ใช้เทคนิค STM วัดช่องว่างพลังงานของแมกนีเซียมไดโบไรด์ พบว่ามีค่าอยู่ระหว่าง 5 ถึง 7 meV .ให้ค่า $\frac{2\Delta(0)}{k_B T_C} \approx 3 - 4$ ยืนยันว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์เป็นตัวนำยิ่งยวดชนิดคลื่นเอสที่มีอันตรกิริยาแบบอ่อน

Szabo และ คณะ (Szabo et al.:2001) ใช้เทคนิคการวัดแบบการสะท้อนของแอนดรีฟ (Andreev Reflection) พบว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์มีช่องว่างพลังงาน 2 แถบ ช่องว่างพลังงานแถบเล็ก $\Delta_s = 2.8 \text{ meV}$ และช่องว่างพลังงานแถบกว้าง $\Delta_L = 7 \text{ meV}$ ซึ่งแถบกว้างมีขนาดใกล้เคียงกับทฤษฎี BCS

Lie และคณะ(Liu et al.:2001) เสนอว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์มีลักษณะของแถบพลังงานแบบเฉพาะตัวที่มีทั้งแถบพลังงานในแบบสองมิติและสามมิติ หรืออาจกล่าวได้ว่าเป็นตัวนำยวดยิ่งแบบ Mutiband

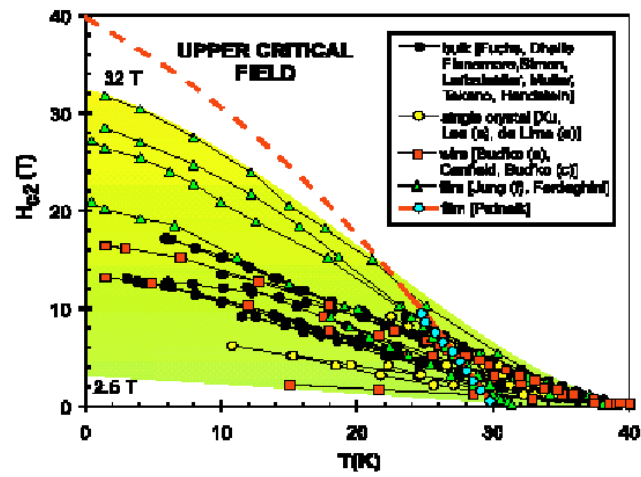


รูปที่ 2.3 กราฟแสดงผลการทดลองวัดช่องว่างพลังงานของแมกนีเซียมไดโบไรด์ (Buzea and Yamashita :2001)

2.5 ความไม่สมมาตร

Buzea และ Yamashita (Buzea and Yamashita : 2001) ทำการทดลองวัดค่าสนามแม่เหล็กวิกฤติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ พบว่าเป็นตัวนำยวดยิ่งแบบที่ 2 (Type II superconductors) และแสดงการขึ้นกับทิศทาง(Anisotropy)ของสนามแม่เหล็กอย่างชัดเจน โดยพบว่าสัดส่วนของสนามแม่เหล็กวิกฤติในระนาบ ab (H_{C2}^{ab}) และในแกน c (H_{C2}^c) มีค่าเป็น $\frac{H_{C2}^{ab}}{H_{C2}^c} \approx 0.2$ ค่าความยาว

อาพันธ์ $\xi_{ab} = 65$ อังสตรอม และ $\xi_c = 25$ อังสตรอม



รูปที่ 2.4 กราฟของสนามแม่เหล็กวิกฤตที่แสดงถึงความไม่สมมาตรในตัวนำยิ่งยวดเชิงแมกนีเซียมไดโบไรด์ (Buzza and Yamashita :2001)

บทที่ 3

แบบจำลองแบบหลุมศักย์ 2 หลุม

ผู้วิจัยมีความเชื่อว่าตัวนำในสารประกอบแมกนีเซียมไดโบไรด์ยังคงเป็นคู่ของคูเปอร์ตามทฤษฎี BCS เนื่องจากสัมประสิทธิ์ของปรากฏการณ์ไอโซโทปมีค่าน้อยกว่าการคำนวณตาม BCS ไม่มาก จากการทดลองวัดช่องว่างพลังงานสามารถชี้ได้ชัดว่าช่องว่างพลังงานของแมกนีเซียมไดโบไรด์เป็นแบบคู่หรือมากกว่าซึ่งไม่สามารถใช้ทฤษฎี BCS คำนวณโดยตรงได้จะต้องมีการปรับปรุงบางอย่าง

จากการทดลองวัดปรากฏการณ์ของไอโซโทปของแมกนีเซียมไดโบไรด์โดย Bud'ko และคณะ (Bud'ko et al.:2001) และ Hink และ คณะ (Hink et al.:2001) พบว่าสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปมีค่าประมาณ 0.28 ซึ่งเพียงพอที่จะระบุได้ว่ากลไกของการเกิดสถานะนำยวดยิ่งมีอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน เป็นกลไกสำคัญและแมกนีเซียมไดโบไรด์เป็นตัวนำยวดยิ่งแบบ s - wave

ตามทฤษฎี BCS อัตราส่วนของช่องว่างพลังงานต่ออุณหภูมิวิกฤติของตัวนำยวดยิ่งแบบ s - wave ทุกชนิด จะมีค่า $\frac{2\Delta(0)}{T_C} = 3.53$ ซึ่งเป็นค่าคงตัว แต่จากผลการทดลองของแมกนีเซียมไดโบไรด์ของ Rubio-Bollinger, Suderow และ Vieira (Rubio-Bollinger, Suderow and Vieira:2001) พบว่า $\frac{2\Delta(0)}{k_B T_C} \approx 1.2 - 4.0$ และ Schmidt และ คณะ (Schmidt et al.:2001) พบว่า $\frac{2\Delta(0)}{k_B T_C} \approx 1.25$ และในบางโครงสร้างได้เท่ากับ 1.5 และ 3 ก็มี Sharoni, Felner และ Millo (Sharoni, Felner and Millo:2001) ให้ค่า $\frac{2\Delta(0)}{k_B T_C} \approx 3 - 4$ ซึ่งพอสรุปได้ว่าค่าของ $\frac{2\Delta(0)}{T_C}$ ในแมกนีเซียมไดโบไรด์ มีค่าอยู่ในช่วงระหว่าง 1.2 ถึง 4.2 และ แมกนีเซียมไดโบไรด์มีช่องว่างพลังงานอย่างน้อย 2 ค่า

ในส่วนนี้ผู้วิจัยสนใจศึกษาอัตราส่วนของช่องว่างพลังงาน ต่ออุณหภูมิวิกฤติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ ในขอบเขตแรงควบคู่อย่างอ่อนตามทฤษฎี BCS โดยจะทำการคำนวณเพื่ออธิบายอัตราส่วนของช่องว่างพลังงานกับอุณหภูมิวิกฤติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ โดยใช้แบบจำลองแบบหลุมศักย์สองหลุม สำหรับตัวนำยวดยิ่งที่มีค่าคู่ควบแบบอ่อน และเป็น s - wave

3.1 การคำนวณ

จากสมการช่องว่างพลังงานของ BCS

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} \frac{V_{kk'}}{\sqrt{\varepsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}} \frac{\Delta_{k'}}{2T} \tanh \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}}{2T} \right) \quad (3.1)$$

กำหนดให้กลไกของการเกิดสภาพนำยวดยิ่งมีศักย์เป็น

$$\begin{aligned} V_{kk'} &= -V_1 - V_2 & \text{สำหรับ } |\varepsilon_k| \text{ และ } |\varepsilon_{k'}| < \omega_D \\ &= -V_2 & \text{สำหรับ } \omega_D < |\varepsilon_k| \text{ และ } |\varepsilon_{k'}| < \omega_C \\ &= 0 & \text{อื่น ๆ} \end{aligned} \quad (3.2)$$

ในที่นี้ให้ V_1 เป็นศักย์ที่เกิดจาก electron – phonon intereaction และ V_2 เป็นศักย์ใด ๆ ที่เพิ่มเข้ามาซึ่งไม่ได้เกิดจาก electron – phonon intereaction และ ω_D และ ω_c เป็นพลังงาน cut-off ของ Debye และ V_2 ตามลำดับ และจากศักย์ข้างบน จะกำหนดให้มีช่องว่างพลังงานเป็น

$$\begin{aligned} \Delta_k &= \Delta_1 & \text{สำหรับ } |\varepsilon_k| < \omega_D \\ &= \Delta_2 & \text{สำหรับ } \omega_D < |\varepsilon_k| < \omega_C \\ &= 0 & \text{อื่น ๆ} \end{aligned} \quad (3.3)$$

โดย Δ_1 และ Δ_2 เป็นค่าคงตัวที่ขึ้นกับอุณหภูมิ

แทนค่าสมการ(3.2)และ(3.3) ลงในสมการช่องว่างพลังงานของ BCS จะได้สมการของอุณหภูมิวิกฤติที่ไม่มีการประมาณเป็น

$$I_1 = \frac{1}{\lambda_1 + \mu^*} \quad (3.4)$$

โดย

$$\mu^* = \frac{\lambda_2}{1 - \lambda_2 I_2} \quad (3.5)$$

ซึ่ง I_1 และ I_2 มีค่าเป็น

$$I_1(T_c) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)} \tan^{-1} \left(\frac{\omega_D}{2\pi T_c \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right) \quad (3.6)$$

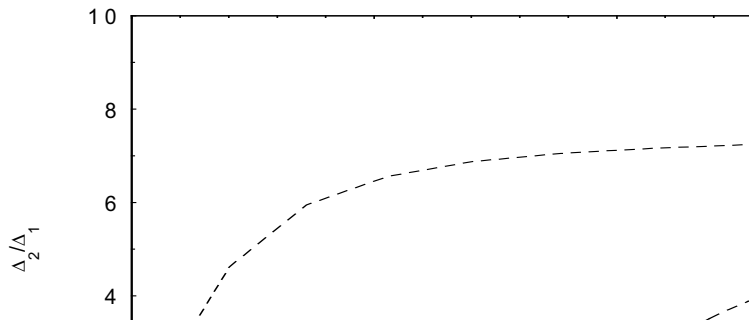
$$I_2(T_c) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{\pi \left(n + \frac{1}{2} \right)} \tan^{-1} \left(\left(\frac{\omega_c}{2\pi T_c \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{\omega_D}{2\pi T_c \left(n + \frac{1}{2} \right)} \right) \right) \quad (3.7)$$

และได้สมการของช่องว่างพลังงาน(order parameter) โดยกำหนดให้ $\Delta_1 = \Delta_1(0)$ และ $\Delta_2 = \Delta_2(0)$ จะได้

$$I_1(0) = \sinh^{-1} \left(\frac{\omega_D}{\Delta_1(0)} \right) \text{ และ } I_2(0) = \sinh^{-1} \left(\frac{\omega_c}{\Delta_2(0)} \right) - \sinh^{-1} \left(\frac{\omega_D}{\Delta_2(0)} \right) \quad (3.8)$$

3.2 ผลการคำนวณและสรุป

ผู้วิจัย ใช้วิธีการคำนวณเชิงตัวเลขโดยใช้โปรแกรม Mathematica และ เทคนิคการทำซ้ำแบบ Newton ในการคำนวณหาค่า $\frac{2\Delta_2(0)}{T_c}$ และอาศัยการประมาณว่าค่า $\frac{2\Delta_1(0)}{T_c}$ มีค่าตามทฤษฎี BCS คือเท่ากับ 3.53



รูปที่ 3.1 แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\frac{\Delta_2(0)}{\Delta_1(0)}$ กับอุณหภูมิวิกฤติ โดย $\Delta_1(0) = \frac{3.53T_c}{2}$ (----) และ $\Delta_1(0) = \frac{3.535T_c}{2}$ (---)

ได้ผลการคำนวณตามรูปที่ 3.1 ซึ่งแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\frac{\Delta_2(0)}{\Delta_1(0)}$ กับอุณหภูมิวิกฤติ โดยใช้ $\Delta_1(0)$ ตามสมการ(3.8) พบว่า $\Delta_2(0)$ มีค่าได้ทั้งที่มากกว่า $\Delta_1(0)$ และน้อยกว่า $\Delta_1(0)$ ทั้งนี้ขึ้นอยู่กับขนาดตัวแปร และเมื่อนำมาเปรียบเทียบกับผลการทดลอง ซึ่งได้ $\frac{\Delta_2(0)}{\Delta_1(0)}$ มีค่าอยู่ระหว่าง 0.24 ถึง 0.41 ที่ $T_c \cong 40K$ โดยสามารถแบ่งช่องว่างพลังงานออกเป็น 2 ค่าคือ $\frac{2\Delta_1}{T_c} \sim 4.0$ และ $\frac{2\Delta_2}{T_c} \sim 1.2$ หรือ $\Delta_2(0)$ มีค่าน้อยกว่า $\Delta_1(0)$ ดังนั้นสามารถประมาณได้ว่า $\Delta_1(0)$ มีค่าประมาณตามทฤษฎี BCS

จากรูปที่ 3.1 เมื่อเปลี่ยนจาก $\Delta_1 = \frac{3.53T_c}{2}$ เป็น $\Delta_1 = \frac{3.535T_c}{2}$ บริเวณที่มี $\Delta_2(0)$ น้อยกว่า $\Delta_1(0)$ จะเปลี่ยนจาก $T_c \approx 20 K$ เป็น $T_c \approx 38 K$ ผลที่ได้ใกล้เคียงกับการผลการทดลอง

สรุปว่า จากการใช้แบบจำลองแบบหลุมศักย์ 2 หลุม คำนวณอัตราส่วนของช่องว่างพลังงานกับอุณหภูมิวิกฤติของตัวนำยวดยิ่งแมกนีเซียมไดโบไรด์ พบว่าเมื่อ $\frac{2\Delta_1(0)}{T_C}$ มีค่าประมาณ 3.53 จะได้ $\frac{2\Delta_2(0)}{T_C}$ มีค่าได้ทั้งมากกว่าและน้อยกว่า 3.53 และสามารถหาค่าของ $\frac{2\Delta_2(0)}{T_C}$ ที่น้อยกว่า 3.53 ได้เมื่อใช้ $T_C \approx 38$ K และ $\frac{2\Delta_1(0)}{T_C} = 3.535$ ซึ่งใกล้เคียงกับผลการทดลอง

บทที่ 4

แบบจำลองแบบไม่สมมาตร

ในส่วนนี้ผู้วิจัยจะใช้แบบจำลองแบบไม่สมมาตรในการศึกษาสมบัติของความจุความร้อนของแมกนีเซียมไดโบไรด์ โดยจากการศึกษาของ Seneor และคณะ (Seneor et al:2002) พบว่าค่าของช่องว่างพลังงานของแมกนีเซียมไดโบไรด์ มีลักษณะเป็นแบบไม่สมมาตร แบบคลื่น S โดยมีสองลักษณะที่เป็นไปได้คือเป็นแบบ ที่มี uniaxial symmetry และ แบบที่มีความไม่สมมาตรในระนาบ จากงานวิจัยเมื่อเร็ว ๆ นี้ของ Haas และ Maki (Haas and Maki :2001) และ งานของ Posazhennikova , Dahm และ Maki (Posazhennikova,Dahm ,and Maki:2002) ซึ่งได้เสนอการคำนวณสมบัติทางเทอร์โมไดนามิกของ MgB_2 โดยใช้แบบจำลองของช่องว่างพลังงานแบบไม่สมมาตร แบบคลื่น S ที่มี uniaxial symmetry ต่อมา Mishonov, Penev และ Indeken (Mishonov ,Penev ,and Indekeu :cond-mat/0205104v3) ได้อาศัยแบบจำลองทั้งสองคำนวณหาสัดส่วนของความจุความร้อน $\frac{\Delta C}{C_N}$ ของแมกนีเซียมไดโบไรด์ ซึ่งพบว่าผลของความไม่สมมาตรแบบ แบบคลื่น S ที่มี uniaxial symmetry ทำให้ $\frac{\Delta C}{C_N}$ มีค่าลดลงจากค่าของ BCS

4.1 การคำนวณ

ผู้วิจัยทำการคำนวณทางทฤษฎีเพื่ออธิบายความจุความร้อนของ แมกนีเซียมไดโบไรด์ โดยใช้แบบจำลองแบบ ที่มีการไม่สมมาตรในระนาบ สำหรับ ตัวนำยวดยิ่งที่มีค่าคู่ควบแบบอ่อน และเป็น s – wave พบว่าในตัวนำยวดยิ่งจะมีสมการสัดส่วนของความจุความร้อนอยู่ในรูปสมการ

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 1.43 \frac{\langle f^2(\theta, \phi) \rangle^2}{\langle f^4(\theta, \phi) \rangle} \quad (4.1)$$

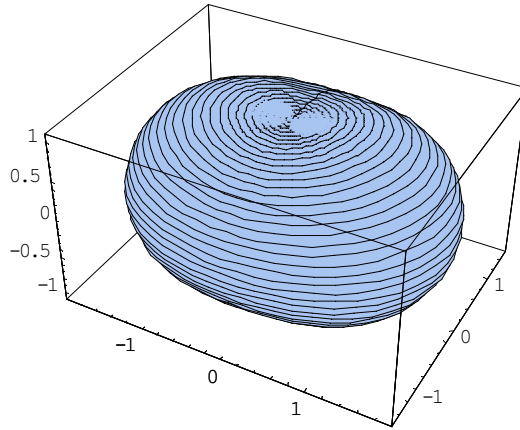
$$\text{โดย } \langle f^2(\theta, \phi) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\theta d\phi \sin \theta f^2(\theta, \phi) \quad (4.2)$$

จากการปรับรูปแบบของแบบจำลองของ Haas และ Maki (Haas and Maki :2001) และ งานของ Posazhennikova , Dahm และ Maki (Posazhennikova,Dahm ,and Maki:2002) เพื่อให้สามารถคำนวณผลของความไม่สมมาตรแบบในระนาบ ab และ แกน c ที่มีต่อสัดส่วนของความจุความร้อนได้ ได้กำหนดฟังก์ชัน $f(\theta, \phi)$ ใหม่ในสองลักษณะ

ตามแบบจำลองของ Haas และ Maki เมื่อนำมาปรับรูปแบบจะได้

$$f(\theta, \phi) = 1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2 \quad (4.3)$$

โดย a และ b เป็นค่าคงตัวตามแกน a และ b ตามลำดับ



รูปที่ 4.1 แสดงรูปของช่องว่างพลังงานตามแบบจำลองของ Haas และ Maki ที่ปรับรูปแบบแล้วเพื่อให้สามารถศึกษาผลของความไม่สมมาตรในระนาบ ได้ โดยใช้ตัวแปร $a = 0.5$ และ $b = 0.9$

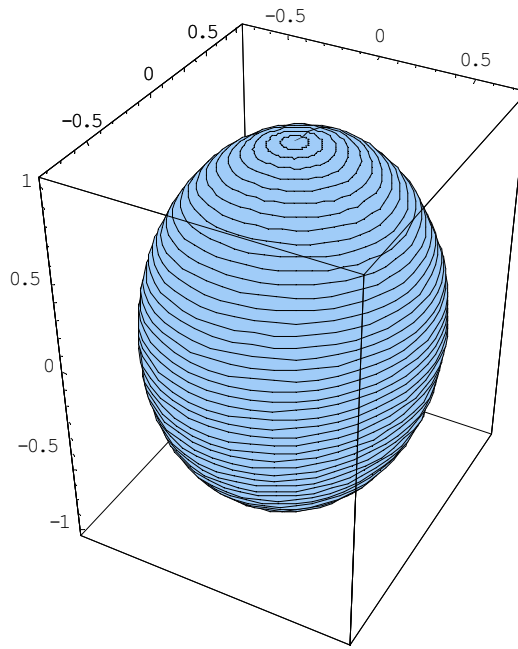
แทนค่าสมการ(4.3)ในสมการ(4.1)และสมการ(4.2) จะได้

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 1.43 \frac{(1 + \frac{4}{3}a + \frac{8}{15}a^2 + \frac{2}{3}\delta + \frac{8}{15}a\delta + \frac{1}{5}\delta^2)^2}{[1 + \frac{8}{3}a + \frac{16}{5}a^2 + \frac{64}{35}a^3 + \frac{128}{315}a^4 + \frac{4}{3}\delta + \frac{16}{5}a\delta + \frac{96}{35}a^2\delta + \frac{256}{315}a^3\delta + \frac{6}{5}\delta^2 + \frac{72}{35}a\delta^2 + \frac{32}{35}a^2\delta^2 + \frac{4}{7}\delta^3 + \frac{32}{63}a\delta^3 + \frac{1}{9}\delta^4]}$$

(44)

ตามแบบจำลองของ Posazhennikova , Dahm และ Maki เมื่อนำมาปรับรูปแบบจะได้

$$f(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2}} \quad (4.5)$$



รูปที่ 3.2 แสดงรูปของช่องว่างพลังงานตามแบบจำลองของ Posazhennikova , Dahm และ Maki ที่ปรับรูปแบบแล้วเพื่อให้สามารถคิดผลของความไม่สมมาตรในระนาบ ได้ โดยใช้ตัวแปร $a = 0.5$ และ $b = 0.9$

แทนค่าสมการ(4.5)ในสมการ(4.1)และสมการ(4.2) จะได้

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 1.43x 2 \frac{\left[\frac{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)}} + \frac{\delta}{2} \left(-\frac{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)^{3/2}}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{ka^{k-1}}{(2k+1)(1+a)^{k+2}} \right) \right]^2}{\left[\frac{1}{\sqrt{(1+a)(1+a+\delta)}} + \frac{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)^{3/2}}} + \frac{\delta}{2} \left(-\frac{2 \tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)^{5/2}}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{ka^{k-1}}{(2k+1)(1+a)^{k+3}} \right) \right]}$$

(4.6)

4.2 ผลการคำนวณและสรุป

ตามแบบจำลองที่ปรับปรุงแล้วของ Haas และ Maki และของ Posazhennikova , Dahm และ Maki เมื่อนำมาคำนวณหาสัดส่วนของความจุความร้อนเพื่อศึกษาผลของความไม่สมมาตรในระนาบแสดงได้ดังรูปที่ 3.3 และ 3.4

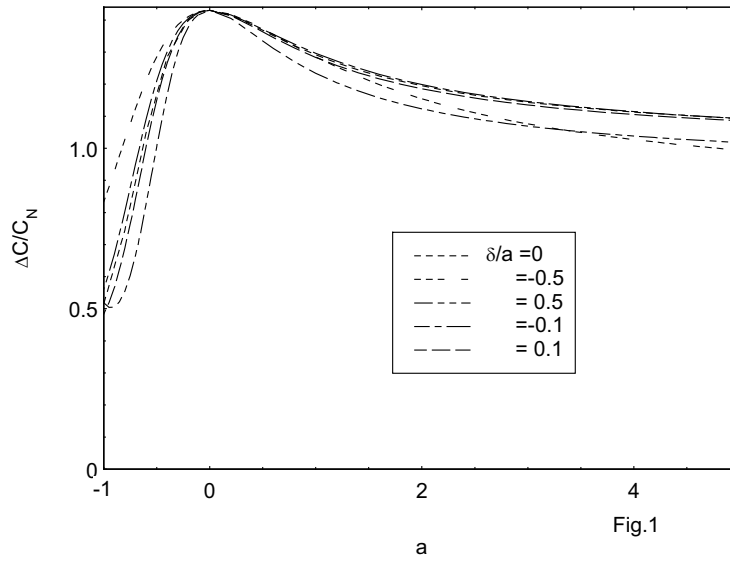


Fig.1

รูปที่ 3.3 กราฟระหว่าง $\frac{\Delta C}{C_N}$ กับตัวแปรของช่องว่างพลังงานตามแกน x ที่ $\frac{\delta}{a}$ ค่าต่างๆของสมการ

$$\Delta(\theta, \phi) = \Delta_0(1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2) \text{ โดย } b = a + \delta \text{ ซึ่งเมื่อ } \frac{\delta}{a} = 0$$

เส้นกราฟที่ได้จะตรงกับของ Mishonov และคณะ(Mishonov ,Penev ,and Indekeu :cond-mat/0205104v3)

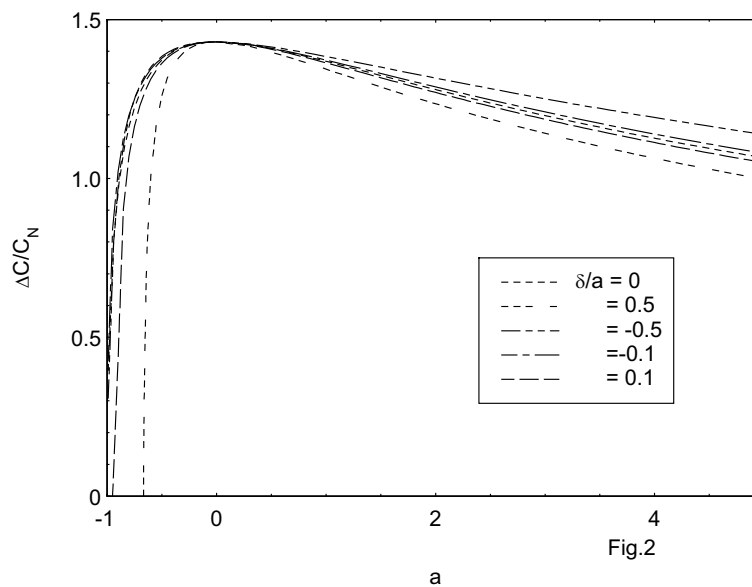


Fig.2

รูปที่ 3.4 กราฟระหว่าง $\frac{\Delta C}{C_N}$ กับตัวแปรของช่องว่างพลังงานตามแกน x ที่ $\frac{\delta}{a}$ ค่าต่างๆ ของสมการ

$$\Delta(\theta, \phi) = \frac{\Delta_0}{\sqrt{1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2}} \text{ โดย } b = a + \delta \text{ ซึ่งเมื่อ } \frac{\delta}{a} = 0 \text{ เส้น}$$

กราฟที่ได้จะตรงกับของ Mishonov และคณะ (Mishonov ,Penev ,and Indekeu :cond-mat/0204545v1)

จากรูปที่ 3.3 และ 3.4 พบว่าทั้งสองกรณีจะให้ผลที่ตรงกันคือค่าของ $\frac{\Delta C}{C_N}$ จะ มี

มากที่สุด เมื่อ $a=0$ และเมื่อ $\frac{\delta}{a} > 0$ จะได้ค่าของ $\frac{\Delta C}{C_N}$ ลดลงเมื่อ $\frac{\delta}{a}$

เพิ่มขึ้น โดย $b = a + \delta$ ซึ่งแสดงว่าความไม่สมมาตรแบบในระนาบมีผลทำให้ค่าของ $\frac{\Delta C}{C_N}$ ลดลง จากผลการทดลองของ Seneor และคณะ พบว่าค่าของช่องว่างพลังงานตาม

แกน z เป็น $\Delta_c = 8$ meV และ ในระนาบเป็น $\Delta_{ab} = 5$ meV จะได้ $\frac{\Delta_{ab}}{\Delta_c} = 0.625$ จาก

การคำนวณตามแบบจำลองทั้งสองจะพบว่าค่า $\frac{\Delta C}{C_N}$ ควรจะเป็น 1.28 แต่ถ้า MgB_2 มีความไม่

สมมาตรแบบในระนาบเกิดขึ้นค่า $\frac{\Delta C}{C_N}$ ที่ได้จากการทดลองจะมีโอกาสมากหรือน้อยกว่านี้ก็ได้ ทั้ง

นี้ขึ้นกับขนาดของตัวแปรของความไม่สมมาตร

บทที่ 5

แบบจำลองแบบสองแถบพลังงาน

นักวิจัยด้านตัวนำยวดยิ่งจะให้ความสำคัญกับสัมประสิทธิ์ของไอโซโทป α ก่อนข้างมาก เนื่องจากเป็นปริมาณสำคัญที่เป็นตัวบ่งชี้ถึงกลไกการเกิดสภาพนำยวดยิ่ง ตามทฤษฎี BCS ที่กลไกการเกิดสภาพนำยวดยิ่งเกิดจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน จะให้ $\alpha = 0.5$ สำหรับตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิม แต่ในตัวนำยวดยิ่งอุณหภูมิสูง การทดลองพบว่าจะได้ α น้อยกว่า 0.5 (Batlogg et al.:1987; Moris et al.:1988; Hoen et al.:1989) ด้วยปริมาณขนาดนี้จึงเป็นตัวชี้ว่ากลไกการเกิดสภาพนำยวดยิ่งในตัวนำยวดยิ่งอุณหภูมิสูงน่าจะมีกลไกชนิดอื่นที่นอกเหนือจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนเข้ามาเกี่ยวข้อง และได้มีความพยายามที่จะอธิบายการมีสัมประสิทธิ์ที่น้อยกว่าปกตินี้อย่างกว้างขวาง เช่น มีการใช้ความหนาแน่นสถานะแบบ van Hove singularity (Labbe and Bok:1987; Tsuei et al.: 1990; Radtke and Norman :1994) ใช้การพิจารณาการสั่นของโฟนอนแบบ anharmonic (Schuttler and Pao:1995), pairing-breaking effect (Carbotte, Gresson, and Perez-gonzalez:1991) ผลของช่องว่างพลังงานเทียม(pseudogap) (Dahm:2000; Udomsamuthirun:2001)

สำหรับตัวนำยวดยิ่งแมกนีเซียมไดโบไรด์ ซึ่งมีอุณหภูมิวิกฤติ 40 K สัมประสิทธิ์ของไอโซโทปเท่ากับ 0.26 (Hink, Claus, and Jorgensen :2001) ที่มีสมบัติเป็นตัวนำยวดยิ่งแบบ two-band และ s-wave ผู้วิจัยได้ใช้แบบจำลอง two-band และ s-wave ในการอธิบายสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของ MgB_2

5.1 แบบจำลองของฮามิลโทเนียน

สำหรับตัวนำยวดยิ่งแบบ two-band และ s-wave จะใช้แบบจำลองของฮามิลโทเนียนดังนี้

$$H = H_{\pi} + H_p + H_{p\pi} \quad (5.1)$$

โดย H_{π} , H_p และ $H_{p\pi}$ เป็นฮามิลโทเนียนของ π band, σ band และ interband ตามลำดับ ซึ่งในแต่ละ band จะเขียนฮามิลโทเนียนได้ตามทฤษฎี BCS ดังนี้

$$H_{\pi} = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} \pi_{k\sigma}^+ \pi_{k\sigma} - \sum_{kk'} V_{\pi\pi kk'} \pi_{k\uparrow}^+ \pi_{-k\downarrow}^+ \pi_{-k'\downarrow} \pi_{k'\uparrow} \quad (5.2.1)$$

$$H_p = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} p_{k\sigma}^+ p_{k\sigma} - \sum_{kk'} V_{pp kk'} p_{k\uparrow}^+ p_{-k\downarrow}^+ p_{-k'\downarrow} p_{k'\uparrow} \quad (5.2.2)$$

$$H_{p\pi} = - \sum_{kk'} V_{p\pi kk'} (p_{k\uparrow}^+ p_{-k\downarrow}^+ \pi_{-k'\downarrow} \pi_{k'\uparrow} + \pi_{k\uparrow}^+ \pi_{-k\downarrow}^+ p_{-k'\downarrow} p_{k'\uparrow}) \quad (5.2.3)$$

สมการข้างบนใช้ตัวแปรที่มีความหมายตามมาตรฐานทั่วไป และ $V_{\pi\pi k k'}$, $V_{pp k k'}$, $V_{p\pi k k'}$ เป็นศักย์ดึงดูดของคู่อิเล็กตรอนใน π band, σ band และ interband ตามลำดับ

คำนวณสมการ(5.1)และ(5.2) ตามทฤษฎีBCS จะได้สมการของช่องว่างพลังงานเป็น

$$\Delta_{pk} = -\sum_{k'} V_{ppkk'} \frac{\Delta_{pk'}}{2\sqrt{\varepsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}}{2T}\right) - \sum_{k'} V_{p\pi kk'} \frac{\Delta_{\pi k'}}{2\sqrt{\varepsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}}{2T}\right) \quad (5.3.1)$$

$$\Delta_{\pi k} = -\sum_{k'} V_{\pi\pi kk'} \frac{\Delta_{\pi k'}}{2\sqrt{\varepsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}}{2T}\right) - \sum_{k'} V_{p\pi kk'} \frac{\Delta_{pk'}}{2\sqrt{\varepsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}}{2T}\right) \quad (5.3.2)$$

ในแต่ละ band จะกำหนดให้อันตรกิริยาการดึงดูดกันของอิเล็กตรอนของคู่อิเล็กตรอนประกอบไปด้วย 2 ส่วนคือ อันตรกิริยาการดึงดูดที่เกิดจากโฟนอน V_{ph} และอันตรกิริยาการดึงดูดที่ไม่ได้เกิดจากโฟนอน U_c (Yoksan:1991;Daemen and Overhauser1990) โดยมี ω_D และ ω_c เป็นขอบเขตพลังงานของอันตรกิริยาทั้งสองตามลำดับ ดังนั้นพลังงานศักย์ของอันตรกิริยา $V_{kk'}$ สามารถเขียนได้เป็น

$$\begin{aligned} V_{ikk'} &= -V_{ph}^i - U_c^i & \text{สำหรับ } 0 < |\varepsilon| < \omega_D \\ &= -U_c^i & \text{สำหรับ } \omega_D < |\varepsilon| < \omega_c \text{ และ } i = p, \pi, p\pi \end{aligned} \quad (5.4)$$

ดังนั้นช่องว่างพลังงานจะเป็น

$$\begin{aligned} \Delta_{jk} &= \Delta_{j1} & \text{สำหรับ } 0 < |\varepsilon| < \omega_D \\ &= \Delta_{j2} & \text{สำหรับ } \omega_D < |\varepsilon| < \omega_c \text{ และ } j = p, \pi \end{aligned} \quad (5.5)$$

5.2 สมการของอุณหภูมิวิกฤติ

ก่อนที่จะคำนวณหาสมการของสมบัติของไอโซโทปจะต้องมีการคำนวณหาสมการของอุณหภูมิวิกฤติเสียก่อน โดยพิจารณาที่ $T = T_c$ และที่ความหนาแน่นสถานะแบบคงตัว $N(\varepsilon_k) = N(0)$, สมการ(5.3)และสมการ(5.4) และ(5.5) จะเป็น

$$\begin{pmatrix} \Delta_{\pi 1} \\ \Delta_{p 1} \\ \Delta_{\pi 2} \\ \Delta_{p 2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\lambda_{\pi} + \mu_{\pi})I_1 & (\lambda_{\pi p} + \mu_{\pi p})I_1 & \mu_{\pi}I_2 & \mu_{\pi p}I_2 \\ (\lambda_{\pi p} + \mu_{\pi p})I_1 & (\lambda_p + \mu_p)I_1 & \mu_{\pi p}I_2 & \mu_p I_2 \\ \mu_{\pi}I_1 & \mu_{\pi p}I_1 & \mu_{\pi}I_2 & \mu_{\pi p}I_2 \\ \mu_{\pi p}I_1 & \mu_p I_1 & \mu_{\pi p}I_2 & \mu_p I_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_{\pi 1} \\ \Delta_{p 1} \\ \Delta_{\pi 2} \\ \Delta_{p 2} \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

$$\text{โดย} \quad I_1 = \int_0^{\omega_D} d\varepsilon \frac{\tanh(\varepsilon / 2T_c)}{\varepsilon} \quad (5.7.1)$$

$$I_2 = \int_{\omega_D}^{\omega_C} d\varepsilon \frac{\tanh(\varepsilon / 2 T_C)}{\varepsilon} \quad (5.7.2)$$

แ ล ะ ค่าคงตัวของการควบคู่(Coupling constant)ด้ ง นี

$$\lambda_\pi = N_\pi(0) V_{ph}^\pi, \lambda_p = N_p(0) V_{ph}^p, \lambda_{\pi p} = N_\pi(0) V_{ph}^{\pi p} = N_p(0) V_{ph}^{p\pi}$$

แ ล ะ

$$\mu_\pi = N_\pi(0) U_C^\pi, \mu_p = N_p(0) U_C^p, \mu_{\pi p} = N_\pi(0) U_C^{\pi p} = N_p(0) U_C^{p\pi}$$

แก้สมการ secular ของสมการ(5.6) จะได้คำตอบที่เหมาะสมเป็น

$$I_1 = \frac{A}{B + \sqrt{C^2 - D}} \quad (5.8)$$

โดย

$$\begin{aligned} A &= 2(-1 + I_2 \mu_p)(-1 + I_2 \mu_\pi) - 2I_2^2 \mu_{\pi p}^2 \\ B &= \mu_p + \mu_\pi + 2I_2(-\mu_p \mu_\pi + \mu_{\pi p}^2) + (\lambda_p + \lambda_\pi)((-1 + I_2 \mu_p)(-1 + I_2 \mu_\pi) - I_2^2 \mu_{\pi p}^2) \\ C &= \lambda_p + \lambda_\pi + \mu_p - I_2 \mu_p(\lambda_p + \lambda_\pi) + \mu_\pi(1 + I_2^2 \mu_p(\lambda_p + \lambda_\pi) - I_2(\lambda_p + \lambda_\pi + 2\mu_p)) \\ &\quad - I_2 \mu_{\pi p}^2(-2 + I_2(\lambda_p + \lambda_\pi)) \\ D &= 4((-1 + I_2 \mu_p)(-1 + I_2 \mu_\pi) - I_2^2 \mu_{\pi p}^2)[\lambda_\pi \mu_p - 2\lambda_{\pi p} \mu_{\pi p} - (-1 + I_2 \lambda_\pi)(\mu_p \mu_\pi - \mu_{\pi p}^2) \\ &\quad + \lambda_p[(-1 + I_2 \mu_p)(-\mu_\pi + \lambda_\pi(-1 + I_2 \mu_\pi)) - I_2 \mu_{\pi p}^2(-1 + I_2 \lambda_\pi)] \\ &\quad + \lambda_{\pi p}^2(-1 + I_2(\mu_p + \mu_\pi) + I_2^2(-\mu_p \mu_\pi + \mu_{\pi p}^2))] \end{aligned}$$

สมการ(5.8) เป็นสมการของอุณหภูมิวิกฤติของตัวนำยวดยิ่งแบบ two-band และ s-wave ซึ่งในที่นี้ก็คือตัวนำยวดยิ่งแมกนีเซียมไดโบไรด์

5.3 สัมประสิทธิ์ของไอโซโทป

ใช้การคำนวณภายใต้การประมาณแบบฮาโมนิกอย่างง่ายคือ $\omega_D \propto M^{-1/2}$ และให้ ω_c ไม่ขึ้นกับมวล สมการของสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปจะเป็น

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{d \ln T_c}{d \ln M} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\omega_D}{T_c} \frac{dT_c}{d\omega_D} \end{aligned} \quad (5.9)$$

โดย M เป็นมวลของไอโซโทปของธาตุที่พิจารณาซึ่งสำหรับแมกนีเซียมไดโบไรด์ก็คือธาตุโบรอน

แก้สมการ(5.8) และสมการ(5.9) จะได้

$$\alpha = \frac{(1/2)}{\frac{\tanh(\omega_c / 2 T_c)}{\tanh(\omega_D / 2 T_c)} \frac{(\mu_\pi D' + \mu_p E' + \mu_{\pi p}^2 F')}{(\lambda_\pi A' + I_1 \lambda_{\pi p} B' + \lambda_p C')} - 1} \quad (5.10)$$

โดย

$$A' = -[-1 + \mu_p(I_1 + I_2)][-1 + \mu_\pi(I_1 - I_2)] + (I_1^2 - I_2^2)\mu_{\pi p}^2$$

$$B' = \lambda_{\pi p}[2(-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_\pi) + I_1(\mu_p + \mu_\pi - 2I_2\mu_p\mu_\pi)] + 4\mu_{\pi p} + 2(I_1 - I_2)I_2\lambda_{\pi p}\mu_{\pi p}^2$$

$$C' = (-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_\pi) + I_2^2\mu_{\pi p}^2 + I_1^2[-\mu_\pi + \mu_p(-1 + 2I_2\mu_\pi) - 2I_2\mu_{\pi p}^2] \\ + I_1[\mu_p - \mu_\pi + 2\lambda_\pi(-(-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_\pi) + I_2^2\mu_{\pi p}^2)]$$

$$D' = I_1^2\lambda_{\pi p}^2 - (-1 + I_1\lambda_p)(-1 + I_1\lambda_\pi)$$

$$E' = -1 + I_1(\lambda_\pi + \lambda_p(1 - I_1\lambda_\pi) + I_1\lambda_{\pi p}^2) + \mu_\pi F$$

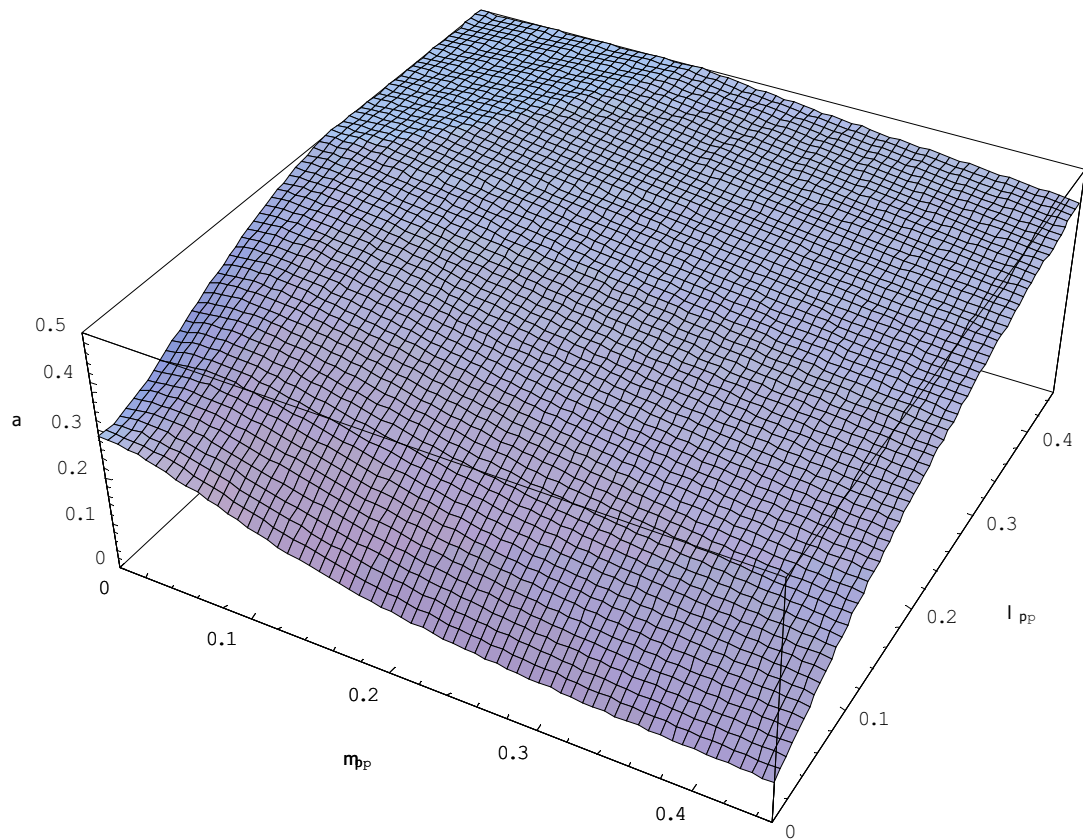
$$F' = 2I_2 + I_1(2 - 2I_2(\lambda_p + \lambda_\pi) + I_1(-\lambda_\pi + \lambda_p(-1 + 2I_2\lambda_\pi) - 2I_2\lambda_{\pi p}^2))$$

ถ้าพิจารณาสมการ (5.8) และสมการ (5.10) จะพบว่าสามารถลดรูปเป็นสมการของ BCS ได้

5.4 ผลการคำนวณ

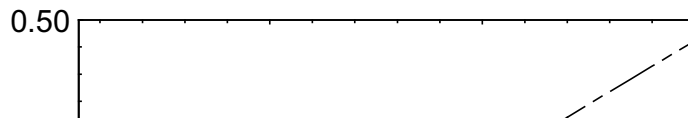
นำสมการที่ (5.10) มาคำนวณเชิงตัวเลขจะได้ความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์ของ ไอโซโทปกับค่าคงตัวของการควบคู่ในระหว่าง band $\lambda_{\pi p}$ และ $\mu_{\pi p}$ โดยมีตัวแปรเป็น

$T_c = 40$ K, $\omega_D = 745$ K, $\omega_c = 1.5\omega_D$, $\lambda_\pi = \lambda_p = 0.05$, $\mu_\pi = \mu_p = 0.05$ ได้ดังรูป



รูปที่ 5.1 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปกับค่าคงตัวของการควบคู่ในระหว่าง band λ_{π} และ $\mu_{\pi p}$

ถ้าพิจารณาความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปกับค่าคงตัวกับค่าคงตัวของการควบคู่ λ_{π} โดยมีตัวแปรเป็น $T_c = 40$ K, $\omega_D = 745$ K, $\omega_c = 1.5\omega_D$, $\lambda_p = 0.1$, $\mu_{\pi} = \mu_p = 0.05$ จะได้



รูปที่ 5.2 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปกับค่าคงตัวกับค่าคงตัวของการควบคู่ λ_{π}

5.5 สรุปและวิจารณ์ผล

จากรูปที่ 5.1 จะพบว่าสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปมีค่าเข้าหา 0.5 เมื่อมีผลของอันตรกิริยาระหว่างเบนของโฟนอนมากขึ้นและของ non-phonon น้อยลง และสามารถพบ $\alpha = 0.3$ ที่มี $T_c \approx 40$ K ได้โดยใช้แบบจำลองนี้ซึ่งจากการคำนวณสามารถพบได้ในหลายบริเวณ เช่น

$\mu_{\pi} = \mu_p = 0.05$, $\lambda_{\pi p} = 0.05$, $\mu_{\pi p} = 0.142$, $0.034 < \lambda_p < 0.114$, และ $0.01 < \lambda_{\pi} < 0.1$.

จากรูปที่ 5.2 จะเห็นว่าอันตรกิริยาระหว่างโฟนอนกับอิเล็กตรอนมีผลต่อสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปมากกว่า non-phonon และอันตรกิริยาทั้งสองมีผลทำให้สัมประสิทธิ์ของไอโซโทปเพิ่มเหมือนกัน

ดังนั้นสามารถสรุปได้ว่าสัมประสิทธิ์ของไอโซโทปของแมกนีเซียมไดโบไรด์สามารถคำนวณได้โดยใช้แบบจำลองtwo-band และs-wave ที่มีการนำผลของโฟนอนและnon-phonon รวมทั้งอันตรกิริยาระหว่างแบบ เข้ามาพิจารณาด้วย

บทที่ 6

สรุปผลการวิจัย

จากการใช้แบบจำลองต่างๆ 3 แบบคือ แบบจำลองแบบหุลัมศักดิ์ 2 หุลัม แบบจำลองแบบไม่สมมาตร และแบบจำลองแบบสองแถบ ศึกษาสมบัติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ โดยใช้แบบจำลองแบบหุลัมศักดิ์ 2 หุลัม ศึกษาอัตราส่วนของช่องว่างพลังงาน ต่ออุณหภูมิวิกฤติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ ใช้แบบจำลองแบบไม่สมมาตรศึกษาความจุความร้อน และใช้แบบจำลองแบบสองแถบพลังงานศึกษาอุณหภูมิวิกฤติและสัมประสิทธิ์ของไอโซโทป พบว่าสามารถอธิบายสมบัติของแมกนีเซียมไดโบไรด์ได้ดี

แต่จากผลการทดลองและคำนวณเชิงตัวเลขและทางทฤษฎีล่าสุดพบว่าแมกนีเซียมไดโบไรด์มีสมบัติของตัวนำยิ่งยวดแบบสองแถบพลังงานที่มีความไม่สมมาตร และในการวิจัยครั้งนี้ผู้วิจัยใช้แบบจำลองแบบสองแถบพลังงานที่คำนึงผลของอันตรกิริยาทั้งแบบ phonon และ non-phonon interaction รวมทั้งผลของ interband interaction เข้าไปด้วย ซึ่งให้ผลการคำนวณที่ดี โดยมีค่าตัวแปรต่างๆ คือ ค่าคงตัวของการคู่ควบ อุณหภูมิวิกฤติ สัมประสิทธิ์ของไอโซโทป สอดคล้องกับผลการทดลอง อย่างไรก็ตามผู้วิจัยไม่ได้คำนึงถึงผลของความไม่สมมาตรเข้าไปด้วย จึงไม่ทราบว่าความไม่สมมาตรมีผลต่อสมบัติของแมกนีเซียมไดโบไรด์มากหรือน้อยอย่างไร จึงไม่สามารถอธิบายสมบัติอื่นได้ครบถ้วน ซึ่งจะต้องทำการวิจัยต่อไป

เอกสารอ้างอิง

Effect of in-plane anisotropy on specific heat jump of MgB_2

P. Udomsamuthirun*, S. Rakpanich, and S. Yoksan

Department of Physics, Faculty of Science, Srinakhariwirot University,
Sukumvit 23 Road, Bangkok 10110, Thailand

Received by P. Deák 17 March 2003, revised 23 July 2003, accepted 5 August 2003
Published online 10 October 2003

PACS 65.40.Ba, 74.20.Fg, 74.70.Ad

An analytical result for the normalized jump of the heat capacity $\Delta C/C_N$ is derived for in-plane anisotropic s-wave superconductors within the framework of the weak-coupling BCS approach. Our results show that within the anisotropy gap model the value of $\Delta C/C_N$ must be less than the BCS value and the effect of in-plane asymmetry will reduce or increase the value of $\Delta C/C_N$ of in-plane symmetry depending on its parameters.

© 2003 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim

1 Introduction

The specific heat of MgB_2 [1] has shown the difference of amplitude and sharpness between the BCS curve and the data and has been interpreted that MgB_2 is a two-gap superconductor. One gap is found to be larger (Δ_o) and the other smaller (Δ_π) than $1.76 k_B T_c$ [2]. Δ_o approximately follows the BCS-like curve with non-standard gap ratio $2\Delta_o/k_B T_c \approx 4.18$ but Δ_π shows a marked reduction with respect to BCS-like behavior with $2\Delta_\pi/k_B T_c \approx 1.59$ [3]. A larger gap Δ_o is associated with a two-dimensional σ band due to p_x and p_y electrons of B atoms and the smaller Δ_π is associated with a three-dimensional π band due to p_z electrons of B atoms. These are weakly hybridized with electron orbitals of Mg atoms. The σ band is strongly coupled to in-plane B-atom vibration and the inter-band impurity scattering is strongly reduced due to the different symmetry of σ and π bands [4]; therefore the diffusion from one band to the other is inhibited. This preserves the T_c suppression and the large anisotropy of the energy gaps. Within these observations, MgB_2 has shown the influence of both two bands and gap anisotropy. The concept of multiband superconductivity was first introduced by Suhl et al. [5] and Moskalenko [6] in the case of large disparity of the electron–phonon interaction for the different Fermi-surface sheets. The isotope effect of MgB_2 established that the interaction responsible for the formation of pairing is mediated by phonons [7, 8] and nuclear magnetic resonance showed that the symmetry of Cooper pairs is s-wave [9].

In Seneor et al.'s paper [10], they found that the order parameter of MgB_2 must be of the anisotropic s-wave with uniaxial symmetry or of the anisotropic s-wave with in-plane anisotropy. Mishonov et al. [11, 12] considered the temperature dependence of the specific heat of a clean anisotropic gap superconductor, which is applicable to MgB_2 . In Hass and Maki [13] and Posazhennikova et al. [14], models for the anisotropy gap with uniaxial symmetry in MgB_2 were proposed. The central issue in their research is to propose an analytical model for analyzing the thermodynamic behavior by assuming a spherical Fermi surface; the anisotropy gap functions are introduced as $\Delta(k) = \Delta(1 + az^2)/(1 + a)$ in [13] and $\Delta(k) = \Delta/\sqrt{1 + az^2}$ in [14], where $z = \cos \theta$, θ is the polar angle, and a is an anisotropy parameter that

* Corresponding author: e-mail: udomsamut55@yahoo.com

can be determined experimentally from the ratio of the gap in the z -axis and the gap in the ab -plane. Using these two models, Mishonov et al. [15, 16] derived analytical results for the normalized jump of the heat capacity $\Delta C/C_N$. They find that the anisotropy parameter a decreases the BCS $\Delta C/C_N$ result.

In order to describe the three-dimensional superconducting nature in MgB₂, we consider the gap function of MgB₂ depending on its axis parameters in three dimensions and follow the weak-coupling BCS approach to derive an analytical expression for $\Delta C/C_N$ for an anisotropic s-wave with in-plane anisotropy.

2 Anisotropy gap model

Because MgB₂ is an anisotropic s-wave superconductor, we can use the BCS gap equation as

$$\Delta_k = \frac{1}{2} \sum_{k'} \frac{V_{kk'}}{\sqrt{\varepsilon_k^2 + \Delta_k^2}} \tanh \left(\frac{\sqrt{\varepsilon_{k'}^2 + \Delta_{k'}^2}}{2T} \right), \quad (1)$$

where every symbol has its usual meaning.

We assume the pairing interaction as

$$V_{kk'} = V_0 f(k) f(k'). \quad (2)$$

Here $f(k)$ is the anisotropy function and V_0 is the coupling constant.

Based on the pairing interaction, an anisotropy gap is given by

$$\Delta_k = \Delta(T) f(k), \quad (3)$$

where $\Delta(T)$ is temperature dependent and $f(z) = (1 + az^2)/(1 + a)$ as in [13] or $f(z) = 1/\sqrt{1 + az^2}$ as in [14]. These two models consider only the effect of anisotropy in the c -axis.

Inserting Eqs. (2) and (3) into Eq. (1), we get the gap equation averaged over all directions of Δ_k as

$$\frac{1}{N_0 V_0} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \, d\phi \int_0^{\omega_D} d\varepsilon \frac{f^2(\theta, \phi)}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T) f^2(\theta, \phi)}} \tanh \left(\frac{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2(T) f^2(\theta, \phi)}}{2T} \right). \quad (4)$$

Here we use a constant density of states N_0 , θ is the polar angle, ϕ is the azimuthal angle, and the factor $1/4\pi$ is the normalization factor.

In the vicinity of T_c where $(T_c - T)/T_c \ll 1$ the gap is small compared with temperature. Let $\ln(T/T_c) \approx (T - T_c)/T_c$; we find that

$$\Delta^2(T) = \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \frac{8\pi^2 T_c^2 \langle f^2(\theta, \phi) \rangle}{7\zeta(3) \langle f^4(\theta, \phi) \rangle}, \quad (5)$$

where $\langle f^2(\theta, \phi) \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\theta \, d\phi \sin \theta f^2(\theta, \phi)$ and $\zeta(x)$ is the Riemann zeta function.

The thermodynamic potential density in the normal state and the superconducting state are Ω_n and Ω_s respectively. Their relation can be written as [17]

$$\Omega_s - \Omega_n = -\frac{7}{16} \frac{\zeta(3) N_0}{\pi^2 T_c^2} \langle f^4(\theta, \phi) \rangle \Delta^4(T). \quad (6)$$

Inserting Eq. (5) into Eq. (6), we get

$$\Omega_s - \Omega_n = -\frac{8N_0\pi^2T_c^2}{14\zeta(3)} \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)^2 \frac{\langle f^2(\theta, \phi) \rangle^2}{\langle f^4(\theta, \phi) \rangle}. \quad (7)$$

By the relation $\Omega_s - \Omega_n = -(1/8\pi) H_c^2$ with H_c the critical magnetic field, we get

$$H_c(T) = \sqrt{\frac{32\pi N_0}{7\zeta(3)}} \pi T_c \left(1 - \frac{T}{T_c}\right) \frac{\langle f^2(\theta, \phi) \rangle}{\sqrt{\langle f^4(\theta, \phi) \rangle}}. \quad (8)$$

And, by the relation $\Delta C = \frac{T_c}{4\pi} \left(\frac{dH_c}{dT} \right)^2 \bigg|_{T=T_c}$, the normalized jump of the heat capacity at $T = T_c$ is

found to be

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 1.43 \frac{\langle f^2(\theta, \phi) \rangle^2}{\langle f^4(\theta, \phi) \rangle}. \quad (9)$$

Equation (9) is Pokrovskii's result for the reduced heat-capacity jump [12, 16, 18].

3 The specific heat jump of MgB₂

To show the effect of the type of in-plane anisotropy on $\Delta C/C_N$, we make some comparisons between different models applied to MgB₂. We first consider the case of the symmetry gap $f(\theta, \phi) = 1$. Equation (9) then gives $\Delta C/C_N = 1.43$, which is the BCS result.

In the case of

$$\Delta(\theta, \phi) = \Delta_0(1 + a(\sin\theta \cos\theta)^2 + b(\sin\theta \sin\theta)^2), \quad (10)$$

this gives

$$f(\theta, \phi) = 1 + a(\sin\theta \cos\theta)^2 + b(\sin\theta \sin\theta)^2. \quad (11)$$

Here Δ_0 , a , and b are the gap parameters in the c -axis, a -axis, and b -axis, respectively. Within this model, we get $\Delta_z = \Delta_0$, $\Delta_x = \Delta_0(1 + a)$, and $\Delta_y = \Delta_0(1 + b)$. For $a = b$, we get $f(\theta) = 1 + a \sin^2\theta$, which agrees with Hass and Maki's model [13] in the case of an anisotropic s-wave with uniaxial symmetry.

Next we let $b = a + \delta$ and insert Eq. (11) into Eq. (9); the normalized jump of the heat capacity is

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 1.43 \frac{\left(1 + \frac{4}{3}a + \frac{8}{15}a^2 + \frac{2}{3}\delta + \frac{8}{15}a\delta + \frac{1}{5}\delta^2\right)^2}{\left[1 + \frac{8}{3}a + \frac{16}{5}a^2 + \frac{64}{35}a^3 + \frac{128}{315}a^4 + \frac{4}{3}\delta + \frac{16}{5}a\delta + \frac{96}{35}a^2\delta + \frac{256}{315}a^3\delta + \frac{6}{5}\delta^2 + \frac{72}{35}a\delta^2 + \frac{32}{35}a^2\delta^2 + \frac{4}{7}\delta^3 + \frac{32}{63}a\delta^3 + \frac{1}{9}\delta^4\right]}. \quad (12)$$

Our Eq. (12) can be reduced to Eq. (1) of [14] by putting $\delta = 0$ and $a = -a'/(1 + a)$; a' is the gap parameter of [15]. The numerical calculation of Eq. (12) is shown in Fig. 1, where $\Delta C/C_N$ shows the maximum value when $a = 0$ for all δ . When $-1 < a < 0$, $\Delta C/C_N$ decreases with increasing δ/a and, as $a > 0$, $\Delta C/C_N$ also decreases with increasing $|\delta/a|$.

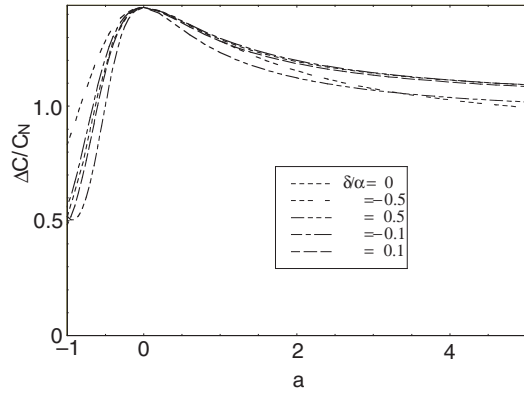


Fig. 1 Plot of $\Delta C/C_N$ versus gap parameter a in the a -axis at various values of δ/a in the case $\Delta(\theta, \phi) = \Delta_0(1 + a(\sin \theta \cos \theta)^2 + b(\sin \theta \sin \theta)^2)$, where $b = a + \delta$. At $\delta/a = 0$, we get Mishonov et al. [15] result.

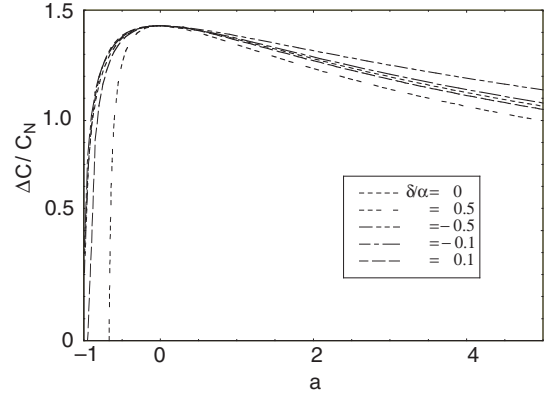


Fig. 2 Plot of $\Delta C/C_N$ versus gap parameter a in the a -axis at various values of δ/a in the case $\Delta(\theta, \phi) = \Delta_0/\sqrt{1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2}$, where $b = a + \delta$. At $\delta/a = 0$, we get Mishonov et al. [16] result.

For another case of interest, we consider the anisotropy gap in the form

$$\Delta(\theta, \phi) = \frac{\Delta_0}{\sqrt{1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2}}, \quad (13)$$

which gives

$$f(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{1 + a(\sin \theta \cos \phi)^2 + b(\sin \theta \sin \phi)^2}}. \quad (14)$$

Here Δ_0 , a , and b are the gap parameters along the c -axis, a -axis, and b -axis, respectively. Within this model, we get $\Delta_z = \Delta_0$, $\Delta_x = \Delta_0/(1+a)$, and $\Delta_y = \Delta_0/(1+b)$. For $a = b$, we get $f(\theta) = 1/\sqrt{1 + a \sin^2 \theta}$, which agrees with Posazhennikova et al.'s model [14] in the case of an anisotropic s-wave with uniaxial symmetry.

As before, we let $b = a + \delta$ and insert Eq. (14) into Eq. (9); the normalized jump of the heat capacity is

$$\frac{\Delta C}{C_N} = 1.43 \times 2 \frac{\left[\frac{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)}} + \frac{\delta}{2} \left(-\frac{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)^{3/2}}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{ka^{k-1}}{(2k+1)(1+a)^{k+2}} \right) \right]^2}{\left[\frac{1}{\sqrt{(1+a)(1+a+\delta)}} + \frac{\tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)^{3/2}}} + \frac{\delta}{2} \left(-\frac{2 \tanh^{-1} \sqrt{\frac{a}{1+a}}}{\sqrt{a(1+a)^{5/2}}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{ka^{k-1}}{(2k+1)(1+a)^{k+3}} \right) \right]}. \quad (15)$$

Equation (15) can be reduced to Eq. (1) of [16] by putting $\delta = 0$ and $a = -a'/(1+a')$; a' is the gap parameter of [16]. Numerical calculations of Eq. (15) are shown in Fig. 2. The maximum value of $\Delta C/C_N$ occurs at $a = 0$. When $-1 < a < 0$ and $\delta/a > 0$, $\Delta C/C_N$ decreases while δ/a increases but there is no change in $\Delta C/C_N$ in the case $\delta/a < 0$ and $a = 0$. Figure 2 shows that $\Delta C/C_N$ decreases as δ/a increases.

4 Discussion and conclusions

In both cases under consideration, we find an anisotropy effect on $\Delta C/C_N$, which shows a maximum value at $a = 0$ and, when $\delta/a > 0$, $\Delta C/C_N$ will decrease as δ/a increases. This result indicates that the effect of anisotropy in the ab -plane decreases $\Delta C/C_N$.

Based on the experimental data on MgB_2 of Seneor et al. [10], they found a maximum gap $\Delta_z = 8$ meV for the c -axis film and a minimum gap $\Delta_{xy} = 5$ meV; this gives $\Delta_{xy}/\Delta_z = 0.625$. Our model predicts that if there is a gap symmetry in the ab -plane, i.e. $a = b$, the value of $\Delta C/C_N$ should be 1.28 and, if there is an asymmetry of the gap in the ab -plane, $a \neq b$, the value of $\Delta C/C_N$ should be slightly more or less than this depending on its a and b parameters. Because of $\Delta C/C_N$ depending on the parameter, we think that the effect of in-plane asymmetry may be the cause of non-sharpness in the specific heat curve at T_c .

In conclusion, we have derived analytical results for the normalized jump of the heat capacity of $\Delta C/C_N$ of MgB_2 with an anisotropy gap by including the effect of in-plane gap anisotropy within the framework of the weak-coupling BCS approach. We find that, within the three-dimensional anisotropy, the value of $\Delta C/C_N$ is less than the BCS value, and the effect of the in-plane asymmetry will reduce or increase the value of $\Delta C/C_N$ of the in-plane symmetry depending on its parameters.

Acknowledgement We acknowledge financial support by the Thai Research Fund.

References

- [1] F. Bouquet, Y. Wang, R. A. Fisher, et al., Europhys. Lett. **56**, 856 (2001).
F. Bouquet, R. A. Fisher, N. E. Phillips, et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 047001 (2001).
Y. Wang, T. Plackowski, and A. Junod, Physica C **355**, 179 (2001).
F. Bouquet, Y. Wang, I. Sheikin, et al., Physica C **385**, 192 (2003).
- [2] R. Combescot, Europhys. Lett. **43**, 701 (1998).
- [3] R. S. Gonnelli, et al., cond-mat/0209472v2.
- [4] I. I. Mazin, et al., Phys. Rev. Lett. **89**, 107002 (2002).
- [5] H. Suhl, B. T. Matthias, and L. R. Walker, Phys. Rev. Lett. **3**, 552 (1959).
- [6] V. A. Moskalenko, M. E. Palistrant, and V. M. Vakalyuk, Sov. Phys. Usp. **34**, 717 (1991).
- [7] S. L. Budko, G. Lapertot, C. Petrovic, et al., Phys. Rev. Lett. **86**, 1877 (2001).
- [8] D. H. Hinks, H. Claus, and J. D. Jorgensen, Nature **411**, 457 (2001).
- [9] H. Kotegawa, K. Ishida, Y. Kitaoka, et al., Phys. Rev. Lett. **87**, 127001 (2001).
- [10] P. Seneor, et al., Phys. Rev. B **65**, 012505 (2002).
- [11] T. M. Mishonov, et al., cond-mat/0212491v3.
- [12] T. M. Mishonov and E. Penev, Int. J. Mod. Phys. B **16**, 3573 (2002).
- [13] S. Hass and K. Maki, Phys. Rev. B **65**, 020502(R) (2001).
- [14] A. I. Posazhennikova, T. Dahm, and K. Maki, cond-mat/0204272.
- [15] T. M. Mishonov, E. S. Penev, and J. O. Indekeu, cond-mat/0204545v1.
- [16] T. M. Mishonov, E. S. Penev, and J. O. Indekeu, cond-mat/0205104v3.
- [17] A. L. Fetter and J. D. Walecka, Quantum Theory of Many-particle Systems (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [18] V. L. Pokrovskii and M. S. Ryvkin, Zh. Exp. Teor. Fiz. **43**, 92 (1962).
V. L. Pokrovskii, Zh. Exp. Teor. Fiz. **40**, 641 (1961).

Influence of Interband Interaction on Isotope Effect Exponent of MgB_2 Superconductors

P.Udomsamuthirun⁽¹⁾, C.Kumvongsa⁽²⁾, A.Burakorn⁽¹⁾, P.Changkanarth⁽¹⁾

⁽¹⁾ Department of Physics, Faculty of Science, Srinakharinwirot University, Bangkok 10110, Thailand. E-mail: udomsamut55@yahoo.com

⁽²⁾ Department of Basic Science, School of Science, The University of the Thai Chamber of Commerce, Dindaeng, Bangkok 10400, Thailand.

Keywords: isotope effect exponent, superconductors, interband interaction

PACS : 74.20.Fg, 74.70.Ad.

Abstract

The exact formula of T_c 's equation and the isotope effect exponent of two-band s-wave superconductors in weak-coupling limit are derived by considering the influence of interband interaction. The pairing interaction in each band consisted of 2 parts: the electron-phonon interaction and non-electron-phonon interaction are included in our model. The isotope effect exponent of MgB_2 , $\alpha = 0.3$ with $T_c \approx 40$ K, can be found in the weak coupling regime and interband interaction of electron-phonon interaction show more effect on isotope effect exponent than of non-phonon interaction.

1. Introduction

The isotope effect exponent, α , is one of the most interesting properties of superconductors. In the conventional BCS theory $\alpha = 0.5$ for all element.

In high- T_c superconductors, experimenter found that α is smaller than 0.5[1-3]. This unusual small value leads to suggestion that the pairing interaction might be predominantly of electronic origin with a possible small phononic contribution[4]. To explain the unusual isotope effect in high- T_c superconductors, many models have been proposed such as the van Hove singularity[5-7], anharmonic phonon[8,9], pairing-breaking effect[10], and pseudogap[11,12].

The discovery of [13] of superconductivity in MgB_2 with a high critical temperature, $T_c \approx 39$ K, has attracted a lot of considerable attention. Various experiments [14-21] suggest the existence of multiband in MgB_2 superconductors. The gap values $\Delta(k)$ cluster into two groups at low temperature, a small value of ≈ 2.5 meV and a large value of ≈ 7 meV. The calculation of the electron structure [22-26] support this conclusion. The Fermi surface consists of four sheets: two three-dimensional sheets from the π bonding and antibonding bands ($2p_z$), and two nearly cylindrical sheets from the two-dimensional σ band ($2p_{x,y}$) [24,27]. There is a large difference in the electron-phonon coupling on different Fermi surface sheet and this fact leads to multiband description of superconductivity. The average electron-phonon coupling strength is found to be small values[14-16]. Ummarino et al.[28] proposed that MgB_2 is the weak coupling two band phononic system where the Coulomb pseudopotential and the interchannel pairing mechanism are key terms to interpret the superconductivity state. Garland[29] has shown that Coulomb potential in the d-orbitals of transition metal reduce the isotope exponent whereas sp-metals generally shown a nearly full isotope effect. So for sp-metal as MgB_2 , the Coulomb effect could not be account to explain the reduced of isotope exponent.

Budko et al.[30] and Hinks et al.[31] measured the boron isotope exponent and estimated as $\alpha_B = 0.26 \pm 0.03$ and nearly zero magnesium isotope effect. The boron isotope exponent is closed to that obtained for the YNi_2B_2C and $LuNi_2B_2C$ borocarbides [32,33] where theoretical work[34] suggested that the phonons responsible for the superconductivity are high-frequency boron optical modes. This observation is consistent with a phonon-mediated BCS superconducting mechanism that boron phonon modes are playing an important role.

The theory of thermodynamic and transport properties of MgB_2 was made in the framework of the two band BCS model [35-43]. Zhitomirsky and Dao[44] derive the Ginzburg-Landau functional for two gap superconductors from the microscopic BCS model and then investigate the magnetic properties. The concept of multiband superconductors was first introduced by Suhl[45] and Moskalenko[46] in case of large disparity of the electron-phonon interaction for different Fermi-surface sheets.

The purpose of this paper is to derive the exact formula of T_c 's equation and the isotope effect exponent of two-band superconductors in weak-coupling limit by considering the influence of interband interaction. The pairing interaction in each band consisted of 2 parts: a attractive electron-phonon interaction and a attractive non-electron-phonon interaction are included in our model.

2. Model and calculation

The properties of MgB_2 suggest the two-band s-wave superconductors(σ -band and π -band). And in each band, it may have two energy

gaps . To recover this fact, we make the assumption that the paring interaction consists of 2 parts : a attractive electron-phonon interaction and a attractive non-electron-phonon interaction in σ -band and π -band , and the σ - π scattering of interband pairs. The Hamiltonian of the corresponding system is taken in the form

$$H = H_{\pi} + H_p + H_{p\pi} \quad (1)$$

where H_{π} , H_p and $H_{p\pi}$ are the Hamiltonian of π band , σ band and interband respectively that

$$H_{\pi} = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} \pi_{k\sigma}^{\dagger} \pi_{k\sigma} - \sum_{kk'} V_{\pi\pi kk'} \pi_{k\uparrow}^{\dagger} \pi_{-k\downarrow}^{\dagger} \pi_{-k'\downarrow} \pi_{k'\uparrow} \quad (2.1)$$

$$H_p = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} p_{k\sigma}^{\dagger} p_{k\sigma} - \sum_{kk'} V_{ppkk'} p_{k\uparrow}^{\dagger} p_{-k\downarrow}^{\dagger} p_{-k'\downarrow} p_{k'\uparrow} \quad (2.2)$$

$$H_{p\pi} = - \sum_{kk'} V_{p\pi kk'} (p_{k\uparrow}^{\dagger} p_{-k\downarrow}^{\dagger} \pi_{-k'\downarrow} \pi_{k'\uparrow} + \pi_{k\uparrow}^{\dagger} \pi_{-k\downarrow}^{\dagger} p_{-k'\downarrow} p_{k'\uparrow}) \quad (2.3)$$

Here we use the standard meaning of parameters and $V_{\pi\pi kk'}$, $V_{ppkk'}$, $V_{p\pi kk'}$ are the attractive interaction potential in σ band and π band ,and interband respectively .

By performing a BCS mean field analysis of Eq.(1) and applying standard techniques, we obtain the gap equation as

$$\Delta_{pk} = - \sum_{k'} V_{ppkk'} \frac{\Delta_{pk'}}{2\sqrt{\epsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}}{2T}\right) - \sum_{k'} V_{p\pi kk'} \frac{\Delta_{\pi k'}}{2\sqrt{\epsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}}{2T}\right) \quad (3.1)$$

$$\Delta_{\pi k} = - \sum_{k'} V_{\pi\pi kk'} \frac{\Delta_{\pi k'}}{2\sqrt{\epsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon_{\pi k'}^2 + \Delta_{\pi k'}^2}}{2T}\right) - \sum_{k'} V_{p\pi kk'} \frac{\Delta_{pk'}}{2\sqrt{\epsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}} \tanh\left(\frac{\sqrt{\epsilon_{pk'}^2 + \Delta_{pk'}^2}}{2T}\right) \quad (3.2)$$

In each band, the paring interaction consists of 2 parts[47,48] : an attractive electron-phonon interaction V_{ph} and an attraction non-electron-phonon interaction $U_c \cdot \omega_D$ and ω_c is the characteristic energy cutoff of the Debye phonon and non-phonon respectively. The interaction potential $V_{kk'}$ may be written as

$$\begin{aligned} V_{ikk'} &= -V_{ph}^i - U_c^i & \text{for } 0 < |\epsilon| < \omega_D \\ &= -U_c^i & \text{for } \omega_D < |\epsilon| < \omega_c \text{ and } i = p, \pi, p\pi \end{aligned}$$

For such as the interaction the superconducting order parameter can be written as

$$\begin{aligned} \Delta_{jk} &= \Delta_{j1} & \text{for } 0 < |\epsilon| < \omega_D \\ &= \Delta_{j2} & \text{for } \omega_D < |\epsilon| < \omega_c \text{ and } j = p, \pi \end{aligned}$$

3. T_c 's Equation

In this section, the exact formula of T_c 's equation of two- band s-wave superconductors is derived . At $T = T_c$ and constant density of state $N(\epsilon_k) = N(0)$, Eq.(3) become

$$\begin{pmatrix} \Delta_{\pi 1} \\ \Delta_{p 1} \\ \Delta_{\pi 2} \\ \Delta_{p 2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (\lambda_{\pi} + \mu_{\pi})I_1 & (\lambda_{\pi p} + \mu_{\pi p})I_1 & \mu_{\pi}I_2 & \mu_{\pi p}I_2 \\ (\lambda_{\pi p} + \mu_{\pi p})I_1 & (\lambda_p + \mu_p)I_1 & \mu_{\pi p}I_2 & \mu_pI_2 \\ \mu_{\pi}I_1 & \mu_{\pi p}I_1 & \mu_{\pi}I_2 & \mu_{\pi p}I_2 \\ \mu_{\pi p}I_1 & \mu_pI_1 & \mu_{\pi p}I_2 & \mu_pI_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta_{\pi 1} \\ \Delta_{p 1} \\ \Delta_{\pi 2} \\ \Delta_{p 2} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Here
$$I_1 = \int_0^{\omega_D} d\varepsilon \frac{\tanh(\varepsilon / 2T_c)}{\varepsilon} \quad (7.1)$$

$$I_2 = \int_{\omega_D}^{\omega_C} d\varepsilon \frac{\tanh(\varepsilon / 2T_c)}{\varepsilon} \quad (7.2)$$

and

$$\lambda_{\pi} = N_{\pi}(0)V_{ph}^{\pi}, \lambda_p = N_p(0)V_{ph}^p, \lambda_{\pi p} = N_{\pi}(0)V_{ph}^{\pi p} = N_p(0)V_{ph}^{p\pi}$$

and

$$\mu_{\pi} = N_{\pi}(0)U_C^{\pi}, \mu_p = N_p(0)U_C^p, \mu_{\pi p} = N_{\pi}(0)U_C^{\pi p} = N_p(0)U_C^{p\pi}$$

are the coupling constants.

Solving the secular equation, the appropriate solution is,

$$I_1 = \frac{A}{B + \sqrt{C^2 - D}} \quad (8)$$

that

$$\begin{aligned} A &= 2(-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_{\pi}) - 2I_2^2\mu_{\pi p}^2 \\ B &= \mu_p + \mu_{\pi} + 2I_2(-\mu_p\mu_{\pi} + \mu_{\pi p}^2) + (\lambda_p + \lambda_{\pi})((-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_{\pi}) - I_2^2\mu_{\pi p}^2) \\ C &= \lambda_p + \lambda_{\pi} + \mu_p - I_2\mu_p(\lambda_p + \lambda_{\pi}) + \mu_{\pi}(1 + I_2^2\mu_p(\lambda_p + \lambda_{\pi}) - I_2(\lambda_p + \lambda_{\pi} + 2\mu_p)) \\ &\quad - I_2\mu_{\pi p}^2(-2 + I_2(\lambda_p + \lambda_{\pi})) \\ D &= 4((-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_{\pi}) - I_2^2\mu_{\pi p}^2)[\lambda_{\pi}\mu_p - 2\lambda_{\pi p}\mu_{\pi p} - (-1 + I_2\lambda_{\pi})(\mu_p\mu_{\pi} - \mu_{\pi p}^2) \\ &\quad + \lambda_p[(-1 + I_2\mu_p)(-\mu_{\pi} + \lambda_{\pi}(-1 + I_2\mu_{\pi})) - I_2\mu_{\pi p}^2(-1 + I_2\lambda_{\pi})] \\ &\quad + \lambda_{\pi p}^2(-1 + I_2(\mu_p + \mu_{\pi}) + I_2^2(-\mu_p\mu_{\pi} + \mu_{\pi p}^2))] \end{aligned}$$

Eq.(8) is the T_c 's equation of two-band s-wave superconductors.

4. The isotope effect exponent

In harmonic approximation, $\omega_D \propto M^{-1/2}$, and ω_c does not depend on mass.

The isotope effect exponent can be derived from the equation

$$\begin{aligned} \alpha &= -\frac{d \ln T_c}{d \ln M} \\ &= \frac{1}{2} \frac{\omega_D}{T_c} \frac{dT_c}{d\omega_D} \end{aligned} \quad (9)$$

where M is the mass of the atom constituting the specimen under consideration.

Using Eq.(6) and Eq.(9), we can the isotope effect exponent as below

$$\alpha = \frac{(1/2)}{\frac{\tanh(\omega_c / 2T_c)}{\tanh(\omega_D / 2T_c)} \frac{(\mu_{\pi}D' + \mu_pE' + \mu_{\pi p}^2F')}{(\lambda_{\pi}A' + I_1\lambda_{\pi p}B' + \lambda_pC')} - 1} \quad (10)$$

Here

$$\begin{aligned}
A' &= -[-1 + \mu_p(I_1 + I_2)][-1 + \mu_\pi(I_1 - I_2)] + (I_1^2 - I_2^2)\mu_{\pi p}^2 \\
B' &= \lambda_{\pi p}[2(-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_\pi) + I_1(\mu_p + \mu_\pi - 2I_2\mu_p\mu_\pi)] + 4\mu_{\pi p} + 2(I_1 - I_2)I_2\lambda_{\pi p}\mu_{\pi p}^2 \\
C' &= (-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_\pi) + I_2^2\mu_{\pi p}^2 + I_1^2[-\mu_\pi + \mu_p(-1 + 2I_2\mu_\pi) - 2I_2\mu_{\pi p}^2] \\
&\quad + I_1[\mu_p - \mu_\pi + 2\lambda_\pi(-(-1 + I_2\mu_p)(-1 + I_2\mu_\pi) + I_2^2\mu_{\pi p}^2)] \\
D' &= I_1^2\lambda_{\pi p}^2 - (-1 + I_1\lambda_p)(-1 + I_1\lambda_\pi) \\
E' &= -1 + I_1(\lambda_\pi + \lambda_p(1 - I_1\lambda_\pi) + I_1\lambda_{\pi p}^2) + \mu_\pi F \\
F' &= 2I_2 + I_1(2 - 2I_2(\lambda_p + \lambda_\pi) + I_1(-\lambda_\pi + \lambda_p(-1 + 2I_2\lambda_\pi) - 2I_2\lambda_{\pi p}^2))
\end{aligned}$$

Eq.(8) and Eq.(10) can be easily reduced to the T_c 's equation and isotope exponent of BCS theory .

In Figure.(1), we plot a three dimensional graph of the isotope exponent Eq.(10) versus the interband coupling constant $\lambda_{\pi p}$ and $\mu_{\pi p}$. Depending on the measured Debye frequency $\omega_D = 64.3$ meV [30,49] and $T_c \approx 40$ K, the parameters are $T_c = 40$ K, $\omega_D = 745$ K, $\omega_c = 1.5\omega_D$, $\lambda_\pi = \lambda_p = 0.05$, $\mu_\pi = \mu_p = 0.05$. The isotope effect exponent is tend to 0.5 at large values of phonon and low value of non-phonon interband coupling constant. We calculate Eq.(8) and Eq.(10) numerically to find isotope effect exponent of MgB_2 , $\alpha = 0.3$ with $T_c \approx 40$ K that many ranges of coupling constant agree with these conditions, example as $\mu_\pi = \mu_p = 0.05$, $\lambda_{\pi p} = 0.05$, $\mu_{\pi p} = 0.142$, $0.034 < \lambda_p < 0.114$, and $0.01 < \lambda_\pi < 0.1$. In Figure.(2), we show the effect of interband coupling constant on isotope effect exponent. The interband interaction of electron-phonon interaction show more effect on isotope exponent than of non-phonon interaction and both of them increase the isotope effect exponent in the same way.

5.Conclusions

The exact formula of T_c 's equation and the isotope effect exponent of two-band s-wave superconductors in weak-coupling limit are derived by considering the influence of interband interaction. The pairing interaction in each band consisted of 2 parts: a attractive electron-phonon interaction and a attractive non-electron-phonon interaction are included. We find isotope effect exponent of MgB_2 , $\alpha = 0.3$ with $T_c \approx 40$ K in many ranges of coupling constant. These strength values of the coupling parameters indicate that the MgB_2 superconductor is in the weak coupling regime. The interband interaction of electron-phonon interaction show more effect on isotope exponent than of non-phonon interaction.

Acknowledgement The author would like to thank Thailand Research Fund for financial support and the university of the Thai Chamber of Commerce for partial financial support and the useful discussions from Prof.Dr.Suthat Yoksan.

6.Refference

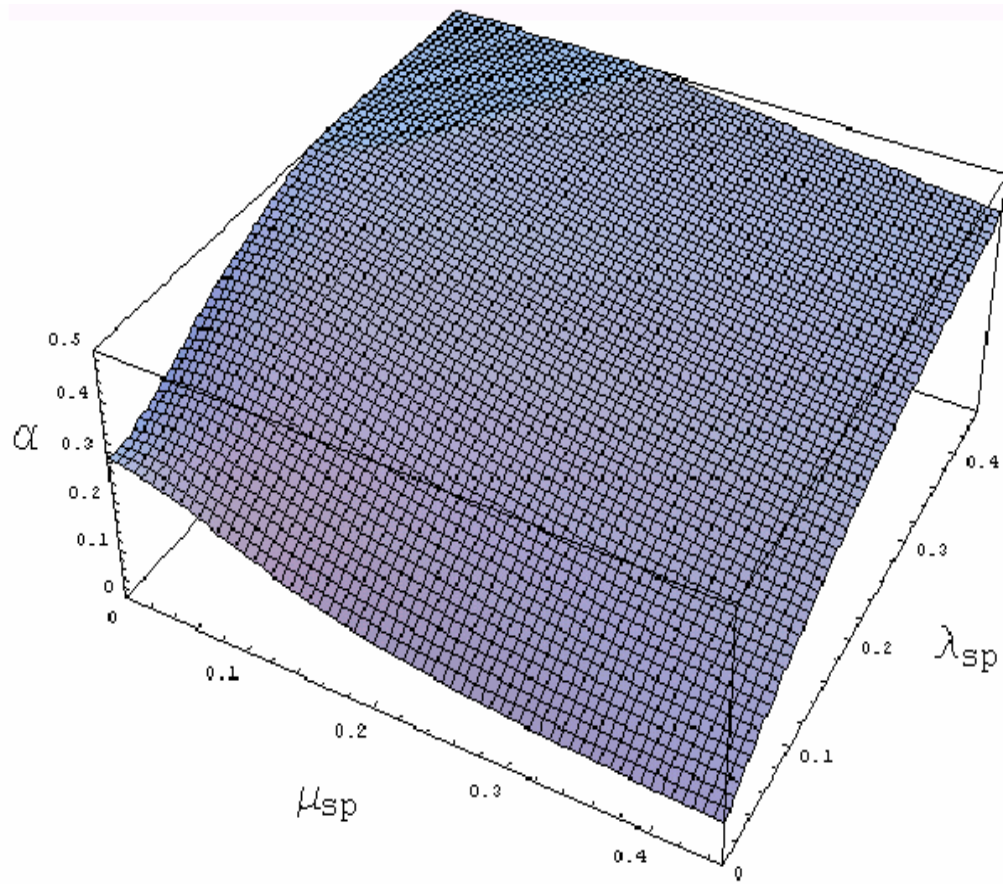
1. B.Batlogg et al., Phys.Rev.Lett. **58**, 2333(1987).
2. D.E.Moris et al., Phys.Rev. B **37**, 5936(1988).
3. S.Hoen et al., Phys.Rev.B **39**,2269(1989).
4. F.Marsiglio, R.Akis, and J.P.Carbotte, Solid State Commun. **64**,905(1987).
5. J.Labbe and J.Bok, Europhys.Lett. **3**,1225(1987)
6. C.C.Tsuei,D.M.Newns,C.C.Chi, and P.C.Pattnaik, Phys.Rev.Lett. **65**,2724(1990).
7. R.J.Radtke and M.R.Norman, Phys.Rev. B **50**,9554(1994).
8. H.B.Schuttler and C.H.Pao, Phys.Rev.Lett. **75**,4504(1995).
9. L.Pietronero and S.Strassler, Europhys.Lett. **18**, 627(1992).
10. J.P.Carbotte, M.Greenson, and A.Perez-gonzalez, Phys.Rev.Lett. **66**,1789(1991).
11. T.Dahm, Phys.Rev.B **61**, 6381(2000).
12. P.Udomsamuthirun, Phys.Stat.Sol.(b) **226**,315(2001).
- 13 J.Nagamatsu,N.Nakagawa,T.Muranaka,Y.Zenitani and J.Akimutsu, Nature(London) **410**,63(2001).
- 14 F.Bouquet, Y.Wang,R.A.Fisher et al., Europhys,Lett. **56**,856(2001).
- 15.F.Bouquet,R.A.Fisher,N.E.Phillips et al., Phys.Rev.Lett. **87**,047001(2001).
- 16.Y.Wang,T.Plackowski, and A.Junod, Physica C **355**,179(2001).
- 17.F.Bouquet,Y.Wang,I.Sheikin et al., Physica C **385**,192(2003).
- 18.P.Szabo et al.,Phys.Rev.Lett. **87**,137005(2001).
- 19.X.K.Chen et al.,Phys.Rev.Lett. **87**,157002(2001).
- 20.S.Tsuda et al., Phys.Rev.Lett. **87**,177006(2001).
- 21.F.Giubileo et al.,Phys.Rev.Lett. **87**,177008(2001).
- 22.J.M.An and W.E.Pickett,Phys.Rev.Lett. **86**,4366(2001).
- 23.J.Kortus et al.,Phys.Rev.Lett. **86**,4656(2001).
- 24.A.Y.Liu,I.I.Mazin, and J.Kortus, Phys.Rev.Lett. **87**,087005(2001).
- 25.N.I.Medvedeva et al. Phys.Rev. B **64**,020502(2001).
- 26 I.I.Mazin and V.P.Antropo, Physica C **385**,49(2003).
- 27.Y.Kong et al.,Phys.Rev. B **64**, 020501(2001).
- 28 .G.A.Ummario,R.S.Gonnelli,S.Massidda, and A.Bianconi,cond-mat/0310284v1
- 29 J.W.Garland,Phys.Rev.Lett. **11**,114(1963).
- 30S.L.Budko,G.Lapertot,C.Petrovic et al., Phys.Rev.Lett. **86**,1877(2001).
- 31 D.G.Hinks,H.Claus and J.D.Jorgensen, Nature **411**,457(2001).
- 32 D.D.Lawrie and J.P.Franck, Physica(Amsterdam) **245C**, 159(1995).
- 33 K.O.Cheon,I.R.Fisher, and P.C.Canfield, Physica(Amsterdam) **312C**, 35(1999).
- 34 L.F.Mattheiss,T.Siegrist, and R.J.Cava, Solid State Commun. **91**, 587(1994).
- 35 A.A.Golubov et al.,J.Phys.:Condens.Matter **14**,1353(2002).
- 36 A.Brinkman et al.,Phys.Rev.B **65**,180517(2002).
- 37 I.I.Mazin et al.,Phys.Rev.Lett. **89**,1072002(2002).
- 38 A.Nakai, M.Ichioka, and K.Machida, J.Phys.Soc.Jpn. **71**,23(2002).
- 39 P.Miranovic, K.Machida, and V.G.Kogan, J.Phys.Soc.Jpn. **72**,221(2003).
- 40 T.Dahm and N.Scopohl, Phys.Rev.Lett. **91**,017001(2003).
- 41 A.Gurevich, Phys.Rev. B **67**,184515(2003).
- 42 A.A.Golubov and A.E.Koshelev, cond-mat/0303237
- 43 A.E.Koshelev and A.A.Golubov, Phys.Rev.Lett. **90**,177002(2003).

- 44 M.E. Zhitomirsky and V.H.Dao, Phys.Rev.B **69**,054508(2004).
- 45 H.Suhl,B.T.Matthias, and L.R.Walker, Phys.Rev.Lett. **3**,552(1959).
- 46 V.A.Moskalenko, M.E.Palistrant, and V.M.Vakalyuk, Sov.Phys.Usp. **34**,717(1991).
- 47 S.Yoksan Solid State Commun. **78**, 233(1991).
- 48 L.L.Daemen and A.W.Overhauser, Phys.Rev. B**41**, 7182(1990)
- 49 Ch.Walti et al.,Phys.Rev. B **65**,172515(2001).

Figure Caption

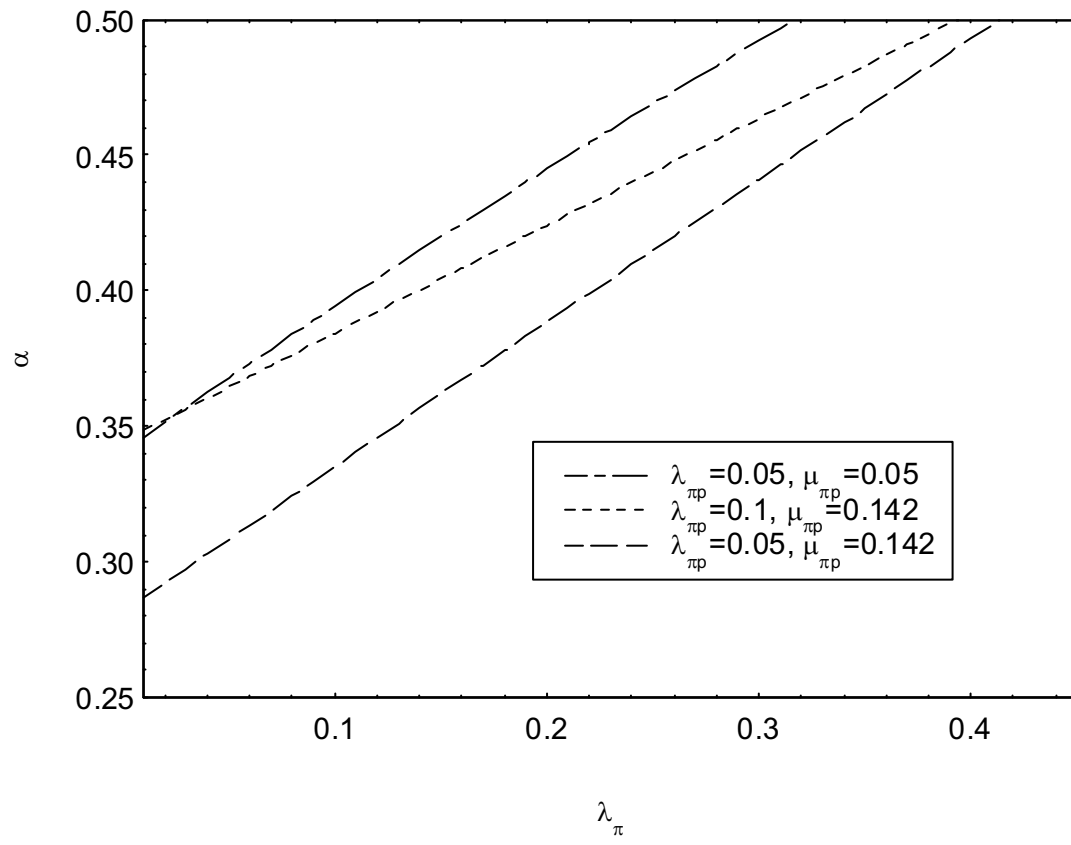
Figure(1). Plot graph of the isotope exponent Eq.(10) versus the interband coupling constant $\lambda_{\pi p}$ and $\mu_{\pi p}$, the parameters are $T_c = 40$ K, $\omega_D = 745$ K, $\omega_c = 1.5\omega_D$, $\lambda_\pi = \lambda_p = 0.05$, $\mu_\pi = \mu_p = 0.05$.

Figure.(2). We show the effect of interband coupling constant on isotope effect exponent. The parameters are $T_c = 40$ K, $\omega_D = 745$ K, $\omega_c = 1.5\omega_D$, $\lambda_p = 0.1$, $\mu_\pi = \mu_p = 0.05$.



Figure(1).

Udomsamuthirun et al.



Figure(2).

Udomsamuthirun et al.

Output ของโครงการ

1. ผลงานตีพิมพ์ในระดับต่างประเทศ 2 เรื่อง ดังนี้

- Udomsamuthirun P., Rakpanich S., and Yoksan S., (2003), "Effect of in-plane anisotropy on specific heat of MgB_2 ", Phys. Stat. Sol. (b) **240**:591-595.
- เรื่อง "Influence of Interband Interaction on Isotope Effect Exponent of MgB_2 Superconductors" submit to Physica Status Solidi (b) และนำเสนอทาง web-site ใน <http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0406496>.

2. ผลงานตีพิมพ์ในระดับในประเทศ 2 เรื่อง

- พงษ์แก้ว อุดมสมุทรหิรัญ และ อุดลย์ บุรากรม, "อัตราส่วนของช่องว่างพลังงานกับอุณหภูมิวิกฤติของตัวนำยวดยิ่ง MgB_2 ", การประชุมทางวิชาการของมหาวิทยาลัยเกษตรศาสตร์ ครั้งที่ 41 (2545) 261-267 (ตามเอกสารแนบหมายเลข)
- สมบัติบางประการของ MgB_2 จะนำเสนอ วทท. (กำลังจัดเตรียม)

3. มีนักศึกษาระดับปริญญาโทของภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์

มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ ที่ทำงานวิจัยในด้านนี้สำเร็จการศึกษา 3 คน