

Article

สมการทศจรรย: แบบจำลองฟังก์ชันสเปกตรัมของตัวนำยวดยิ่ง

Model of Superconducting Spectral Function

แพทย พรายพรรณ, อรรณวัฒน์ ดวงนิล, วิชชุตม์ อิมจิตร์, จักรภัทร สียางนอก และ อุดมสิลป์ ปีนสุช*

Pataiy Praiypan, Attawat Duangnil, Vichayuth Imchitr, Jakkapat Seeyangnok and

Udomsilp Pinsook*

ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย กรุงเทพมหานคร 10330

Department of Physics, Faculty of Science, Chulalongkorn University, Bangkok 10330,

Thailand

*Corresponding author E-mail: udomsilp.p@chula.ac.th

วันที่รับบทความ: 8 มีนาคม 2565, วันแก้ไขบทความ: 26 เมษายน 2565, วันตอบรับบทความ: 27 เมษายน 2565

Received: 8th March 2022, Revised: 26th April 2022, Accepted: 27th April 2022

บทคัดย่อ

บทความนี้กล่าวถึงฟังก์ชันสเปกตรัมของตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมซึ่งมีที่มาจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน ฟังก์ชันสเปกตรัมมีความสำคัญมากในการทำนายสมบัติตัวนำยวดยิ่ง เหตุผลหนึ่งคือการคำนวณอุณหภูมิวิกฤติ T_c นั้นต้องคำนวณจากพารามิเตอร์ค่าความแข็งแรงของการคู่ควบเฉลี่ย (Average coupling strength, λ) และค่าความถี่ลอการิทึมเฉลี่ย (Average logarithm frequency, ω_{ln}) ซึ่งต้องหาจากฟังก์ชันสเปกตรัมโดยตรง ในบทความนี้ผู้เขียนจะบรรยายที่มาของฟังก์ชันสเปกตรัมจากทฤษฎีควอนตัมหลายวัตถุอย่างกระชับ และผู้เขียนจะยกตัวอย่างฟังก์ชันสเปกตรัมที่วัดจากการทดลองเพื่อสังเกตสมบัติพื้นฐานบางอย่าง จากนั้นผู้เขียนจะกล่าวถึงแบบจำลองอย่างง่ายของฟังก์ชันสเปกตรัมที่สามารถถอดแบบค่า λ และ ω_{ln} ได้ การมีแบบจำลองอย่างง่ายจะช่วยให้ผู้อ่านได้เห็นความเชื่อมโยงระหว่างรูปแบบทางเรขาคณิตของฟังก์ชันสเปกตรัมกับสมบัติทางฟิสิกส์ที่เกี่ยวข้อง นอกจากนี้ยังอาจนำไปสู่การทำนายแนวโน้มของค่า T_c จากการพิจารณาพารามิเตอร์ของแบบจำลองอีกด้วย

คำสำคัญ: ตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิม, แบบจำลองฟังก์ชันสเปกตรัม, อุณหภูมิวิกฤติ

Abstract

This article discussed the spectral function of conventional superconductors, which comes from the electron-phonon interaction. The spectral function is essential to the prediction of superconducting properties. This is because the calculation of the critical temperature T_c can be derived from two important parameters, which are the average coupling strength λ and the average logarithm frequency ω_{ln} . These parameters can be evaluated directly from the spectral function. In this article, the authors described briefly the origin of the spectral function from the quantum field theory. A typical spectral function from an experimental measurement was examined in order to find some essential features. Then, a simple model of the spectral function was introduced. This simple spectral function can correctly reproduced

λ and ω_{ln} . This simple model will help visualize the relation between the geometry of the spectral function and its related physical properties. By considering the model parameters, it would lead to a reasonable prediction of T_c .

Keywords: Conventional superconductors, Spectral function model, Critical temperature

บทนำ

ตัวนำยวดยิ่ง (Superconductors) คือสถานะของธาตุหรือสารประกอบที่มีสภาพต้านทานเข้าใกล้ศูนย์และเป็นไดอะแมกเนติกที่สมบูรณ์ (Perfect diamagnetism) ค้นพบเป็นครั้งแรกในปรอท โดยออนเนส (Onnes) เมื่อปี พ.ศ. 2454 [1] หลังจากนั้นก็มีการค้นพบตัวนำยวดยิ่งอีกเป็นจำนวนมาก แต่ธาตุหรือสารประกอบเหล่านั้นมีค่าอุณหภูมิการเปลี่ยนสถานะจากสถานะปกติเป็นตัวนำยวดยิ่ง หรือที่เรียกว่า อุณหภูมิวิกฤติ (Critical temperature, T_c) ต่ำมาก อย่างเช่น ปรอท มีค่า $T_c = 4.16$ K กลไกการเกิดตัวนำยวดยิ่งอธิบายได้ด้วยการจับคู่ของอิเล็กตรอนเรียกว่า คูคูเปอร์ (Cooper pairing) โดยมีโฟนอน (Phonons) เป็นตัวเชื่อม การจับคู่นี้เสนอไว้ในทฤษฎีของบาร์ดีน คูคูเปอร์ และ ชริฟเฟอร์ (Bardeen-Cooper-Schrieffer) เรียกว่า ทฤษฎี BCS [2] ตัวนำยวดยิ่งที่มีสมบัติต่าง ๆ ที่สามารถอธิบายได้ด้วยทฤษฎี BCS จะได้รับการเรียกรวม ๆ กันว่าเป็นตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิม (Conventional superconductors) ส่วนตัวนำยวดยิ่งชนิดอื่น ๆ จะไม่มีกล่าวถึงในบทความนี้

ในปี พ.ศ. 2544 ได้มีการสังเคราะห์สารประกอบ MgB_2 ซึ่งเป็นตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิม มีค่า $T_c = 39$ K [3] ซึ่งถือว่ามีค่าสูงมากในสมัยนั้น และเนื่องจาก MgB_2 นั้นสังเคราะห์ง่ายและมีราคาถูก จึงทำให้เกิดงานวิจัยขึ้นมากมาย รวมทั้งแนวคิดที่จะนำตัวนำยวดยิ่งไปใช้ประโยชน์ในเชิงเทคโนโลยีและเชิงพาณิชย์ เช่น การสร้างรถไฟความเร็วสูง [4] นอกจากนี้ ยังมีการศึกษาวิจัยเพื่อหาวิธีเพิ่มค่า T_c ให้สูงขึ้นด้วยวิธีต่าง ๆ เช่น การเจือสารอื่น [5] อย่างไรก็ตาม วิธีเหล่านี้ไม่สามารถเพิ่มค่า T_c ได้มากอย่างมีนัยยะสำคัญ งานวิจัยตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมจึงมีความคึกคักอยู่ในช่วงระยะเวลาหนึ่งก่อนที่จะซบเซาไป

จากการพัฒนาเครื่องมือสร้างความดันสูงในห้องปฏิบัติการ [6] ทำให้นักฟิสิกส์สามารถสังเคราะห์วัสดุชนิดใหม่ ๆ ซึ่งอาจจะมีสมบัติพิเศษกว่าวัสดุภายใต้สภาวะปกติได้ ในปี พ.ศ. 2558 กลุ่มของเอริเมทส์ [7] ได้ประกาศการค้นพบสมบัติตัวนำยวดยิ่งในสารประกอบที่คล้าย ๆ กับก๊าซไฮโดรเจน แต่มีสูตรเคมีเป็น H_3S โดยสารประกอบนี้เป็นของแข็งและแสดงสมบัติตัวนำยวดยิ่งที่ $T_c = 203$ K สังเคราะห์ได้ที่ความดัน 155 GPa หลังจากนั้น มีการยืนยันผลการทดลองจากกลุ่มวิจัยอื่นที่เป็นอิสระต่อกันและมีการวัดสมบัติทางแม่เหล็กภายใต้ความดันด้วย [8] การค้นพบนี้ทำให้นักวิจัยทางด้านตัวนำยวดยิ่งก็กลับมามีชีวิตชีวาอีกครั้ง โดยมีการประกาศการค้นพบตัวนำยวดยิ่งที่มีค่า T_c สูง ๆ ภายใต้ความดันสูงเพิ่มขึ้นจำนวนหนึ่ง ตัวอย่างที่สำคัญ ได้แก่ LaH_{10} มีค่า $T_c = 260-280$ K ที่ความดัน 180-200 GPa [9,10] การค้นพบที่มีชื่อเสียงที่สุดเกิดขึ้นในปี พ.ศ. 2563 เมื่อกลุ่มของ ดิเอส [11] ได้ประกาศการค้นพบตัวนำยวดยิ่งจากสารประกอบของ คาร์บอน กำมะถัน และไฮโดรเจน (CSH compounds) ที่ $T_c = 287.7$ K (ประมาณ 15 องศาเซลเซียส) ที่ความดัน 267 GPa ซึ่งถือว่าใกล้เคียงกับค่าอุณหภูมิห้อง การค้นพบนี้สร้างความตื่นเต้นให้กับวงการวิจัยตัวนำยวดยิ่งเป็นอย่างมาก อย่างไรก็ตาม จนถึงปัจจุบันก็ยังไม่มียานวิจัยจากกลุ่มอื่นมายืนยันความสำเร็จนี้ ตารางที่ 1 ได้สรุปการค้นพบสำคัญของตัวนำยวดยิ่งในยุคร่วมสมัยเหล่านี้

นอกจากนี้ การค้นพบตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมภายใต้ความดันสูงยังเป็นชัยชนะที่สำคัญของฝั่งทฤษฎีอีกด้วย จากการคำนวณสมบัติของระบบหลายวัตถุ (Many-body system) นำไปสู่ทฤษฎี BCS [2] และทฤษฎีที่ละเอียดมากขึ้น [13,14] ทำให้การคำนวณค่าอุณหภูมิวิกฤติของตัวนำยวดยิ่งในสารต่าง ๆ มีความน่าเชื่อถือและสอดคล้องกับผลการทดลอง หรือแม้แต่ชี้้นำการทดลองได้ ตัวอย่างที่สำคัญคือ การใช้ทฤษฎีฟังก์ชันนัลความหนาแน่น (Density functional theory, DFT) [15,16] ประกอบกับการค้นหาโครงสร้างผลึก [17,18] เพื่อคำนวณฟังก์ชันสเปกตรัม (Spectral function, $\alpha^2F(\omega)$) ของสารประกอบ H_xS และทำนายว่าสารประกอบนี้จะ

เปลี่ยนสถานะเป็นตัวนำวดยิ่งภายใต้ความดันสูง [19] โดยมีการตีพิมพ์ผลการคำนวณก่อนการค้นพบทางการทดลอง [7] เป็นเวลา 1 ปี

ตารางที่ 1 ตัวอย่างตัวนำวดยิ่งแบบดั้งเดิมที่มีการค้นพบจากการทดลองภายใต้สภาวะปกติและที่ความดันสูง

ตัวนำวดยิ่ง	ความดัน (GPa)	อุณหภูมิวิกฤต (K)	เอกสารอ้างอิง
Hg	0	4.16	[1]
β -Ga	0	6.5	[12]
Ga amorphous	0	8.56	[12]
MgB ₂	0	39	[3]
H ₃ S	155	203	[7]
LaH ₁₀	180-200	260, 280	[9,10]
CSH	267	287.7	[11]

ในชุดบทความสมการมหัศจรรย์นี้ ผู้เขียนมีความตั้งใจจะบรรยายถึงแบบจำลองอย่างง่าย คำนวณได้ง่าย โดยใช้เครื่องมือคำนวณพื้นฐาน แต่เป็นแบบจำลองที่มีความสวยงามและทรงพลัง และยังคงไว้ซึ่งอำนาจในการทำนายผล (Predictive power) เพื่อให้ผู้อ่านได้ใช้ในการศึกษา ติดตามผลงานวิจัยชั้นนำร่วมสมัย และผู้อ่านอาจนำแนวคิดเหล่านี้ไปสร้างแบบจำลองที่ซับซ้อนและมีความละเอียดแม่นยำมากขึ้นได้ โดยในบทความนี้จะกล่าวถึงแบบจำลองฟังก์ชันสเปกตรัมของตัวนำวดยิ่งซึ่งมาจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน (Electron-phonon interaction) ตามที่ปรากฏในสมการที่ (6) และ (12) และสามารถนำไปสร้างฟังก์ชันการกระจาย $\rho(\omega) = 2 \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$ เพื่อใช้หาค่าเฉลี่ยต่าง ๆ ได้ตามสมการที่ (10) ค่าเฉลี่ยที่สำคัญ ได้แก่ ค่าความแข็งแรงของการคู่ควบเฉลี่ย (Average coupling strength, λ) ตามสมการที่ (8) และ ค่าความถี่ลอการิทึมเฉลี่ย (Average logarithm frequency, ω_{ln}) ตามสมการที่ (9) เมื่อทราบค่าพารามิเตอร์ทั้งสองแล้วสามารถคำนวณค่าอุณหภูมิวิกฤตได้จากสมการของอัลเลน-ไดนส์ (Allen-Dynes equation) [20] ดังนี้

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1.20} \exp\left(-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)}\right) \quad (1)$$

ค่า μ^* เป็นพารามิเตอร์ที่บ่งบอกอันตรกิริยายังผลของคูลอมบ์ (Effective Coulomb parameter) มีค่าระหว่าง 0.1 และ 0.2 ซึ่งผู้เขียนขอไม่กล่าวถึงในรายละเอียดของพารามิเตอร์ตัวนี้ในบทความนี้เนื่องจากไม่เกี่ยวกับฟังก์ชันสเปกตรัมโดยตรง

ในบทความนี้ผู้เขียนจะบรรยายที่มาของฟังก์ชันสเปกตรัมจากทฤษฎีควอนตัมหลายวัตถุอย่างกระชับ อันดับถัดมา ผู้เขียนจะยกตัวอย่างฟังก์ชันสเปกตรัมที่วัดได้จากการทดลองเพื่อสังเกตสมบัติพื้นฐานบางอย่าง จากนั้น ผู้เขียนจะกล่าวถึงแบบจำลองอย่างง่ายของฟังก์ชันสเปกตรัมที่สามารถถอดแบบ (Reproduce) ค่า λ และ ω_{ln} ได้ การมีแบบจำลองอย่างง่ายจะช่วยให้ผู้อ่านมีมุมมองเชื่อมโยงระหว่างรูปแบบทางเรขาคณิตของฟังก์ชันสเปกตรัมกับสมบัติทางฟิสิกส์ที่เกี่ยวข้อง เมื่อพบกับฟังก์ชันสเปกตรัมที่มีความซับซ้อน ผู้อ่านสามารถคะเนระดับขนาดของค่า λ และ ω_{ln} ได้ก่อนที่จะลงมือคำนวณอย่างละเอียด นอกจากนี้ ยังอาจนำไปสู่การทำนาย T_c จากการพิจารณาพารามิเตอร์ของแบบจำลองอีกด้วย

ทฤษฎีของตัวนำวดยิ่งแบบดั้งเดิมและฟังก์ชันสเปกตรัม

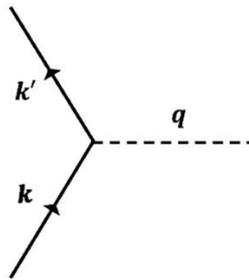
ทฤษฎีของตัวนำวดยิ่งแบบดั้งเดิมมีพื้นฐานอยู่บนแฮมิลโทเนียนที่อธิบายอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน H_{e-ph} [2,13,14] ซึ่งเขียนได้ดังนี้

$$H_{e-ph} = \sum_{i,I} \mathbf{u}_I \cdot \nabla V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I^0) \quad (2)$$

โดยพจน์ $V(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_I^0)$ อธิบายอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนที่ตำแหน่ง \mathbf{r}_i กับอะตอมตัวที่ I อยู่ที่ตำแหน่งสมดุค \mathbf{R}_I^0 และกำลังสี่นด้วยการกระจัด \mathbf{u}_I ซึ่งการกระจัดนี้รวมผลของโฟนอนทั้งหมดในโครงผลึกเอาไว้ จากอันตรกิริยานี้ องค์ประกอบเมทริกซ์ของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน (Matrix elements of electron-phonon interaction) เขียนได้ดังนี้

$$g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}} = \langle \mathbf{k}' | H_{e-ph} | \mathbf{k}, \mathbf{q} \rangle \quad (3)$$

โดย \mathbf{k}', \mathbf{k} เป็นสถานะต่าง ๆ ของอิเล็กตรอน และ \mathbf{q} คือโหมดต่าง ๆ ของโฟนอน โดยเมทริกซ์นี้อธิบายการเปลี่ยนสถานะของอิเล็กตรอน ที่อุณหภูมิไม่สูงมากนักการเปลี่ยนสถานะนี้เกิดขึ้นได้รอบ ๆ พื้นผิวเฟอร์มี (Fermi surface) เท่านั้น สมการที่ (3) เขียนเป็นจุดร่วม (Vertex) ในแผนภาพไฟน์แมนได้ตามรูปที่ 1

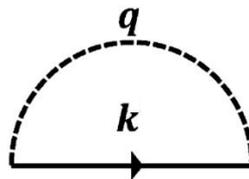


รูปที่ 1 แผนภาพแสดงจุดร่วม (Vertex) ในแผนภาพไฟน์แมนของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอน \mathbf{k}', \mathbf{k} และโฟนอน \mathbf{q}

ผลของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนทำให้เกิดพจน์ที่เรียกว่า พจน์อัตรพลังงาน (Self-energy terms, $\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon)$) ในฟังก์ชันกรีนซึ่งอธิบายการแพร่กระจายของอิเล็กตรอนที่มีอันตรกิริยา ซึ่งเขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$G(\mathbf{k}, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) + i\eta} \quad (4)$$

โดยพจน์อัตรพลังงานคำนวณได้จากแผนภาพไฟน์แมนตามรูปที่ 2



รูปที่ 2 แผนภาพของ $\Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon)$ ของอิเล็กตรอนที่มาจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอน

η เป็นค่าบวกที่เล็กมาก ๆ (Infinitesimal value) ใส่เข้ามาเพื่อให้ฟังก์ชันกรีนเป็นแบบหน่วง (Retarded Green's function) และขั้ว (Poles) ของฟังก์ชันกรีนจะอยู่เหนือแกนค่าจริงในระนาบพิกัดเชิงซ้อน (Complex plane) ตำแหน่งของขั้วคือผลเฉลยพลังงานของอิเล็กตรอน นอกจากนี้ พจน์อัตราพลังงานจะมีความสัมพันธ์กับฟังก์ชันสเปกตรัม $\alpha^2 F(\omega)$ ดังนี้

$$\text{Im } \Sigma(\mathbf{k}, \varepsilon) = -\pi \int_0^\infty d\omega (\alpha^2 F_{\mathbf{k}}^+(\omega)[b(\omega) + f(\omega + \varepsilon)] + \alpha^2 F_{\mathbf{k}}^-(\omega)[b(\omega) + f(\omega - \varepsilon)]) \quad (5)$$

โดย $b(\omega)$ และ $f(\omega)$ เป็นฟังก์ชันการกระจายจำนวนอนุภาคโบซอนและเฟอร์มิออนตามลำดับ และฟังก์ชันสเปกตรัมสัมพันธ์กับ $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2$ ดังนี้

$$\alpha^2 F_{\mathbf{k}}^\pm(\omega) \propto \sum_{\mathbf{q}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}}) \sum_{\mathbf{k}'} |g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}' \pm \omega}) \quad (6)$$

หากแยกผลบวก $\sum_{\mathbf{q}} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}})$ ออกจากสมการที่ (6) ผลลัพธ์ของผลบวกคือความหนาแน่นสถานะของโฟนอนในทำนองเดียวกัน หากแยกผลบวก $\sum_{\mathbf{k}'} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}'})$ ออกจากสมการที่ (6) ผลลัพธ์ของผลบวกนี้คือความหนาแน่นสถานะของอิเล็กตรอน แต่เมื่อมารวมตัวกันอยู่ในสมการที่ (6) นี้ สามารถตีความได้ว่าเป็นกฎการคัดเลือก (Selection rules) สำหรับการเปลี่ยนสถานะ โดยมีค่า $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2$ และ $\delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}' \pm \omega})$ เป็นตัวควบคุม ถ้าหาก $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 = 0$ ทุก ๆ ค่าของ \mathbf{k}', \mathbf{k} และ \mathbf{q} ฟังก์ชันสเปกตรัมก็จะมีค่าเป็นศูนย์ และถ้าหาก $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2$ มีค่าสูง และความหนาแน่นสถานะของทั้งโฟนอนและอิเล็กตรอนมีค่าสูง ฟังก์ชันสเปกตรัมจะมีค่าสูง นอกจากนี้ในธาตุหรือสารประกอบบางชนิดมีสถานะทางอิเล็กตรอนิกส์ที่มีภาวะเอกฐานแบบแวนโฮฟ (van Hove singularity) [21] ซึ่งอาจทำให้ความหนาแน่นสถานะของอิเล็กตรอนมีค่าสูงได้อีกทางหนึ่งด้วย

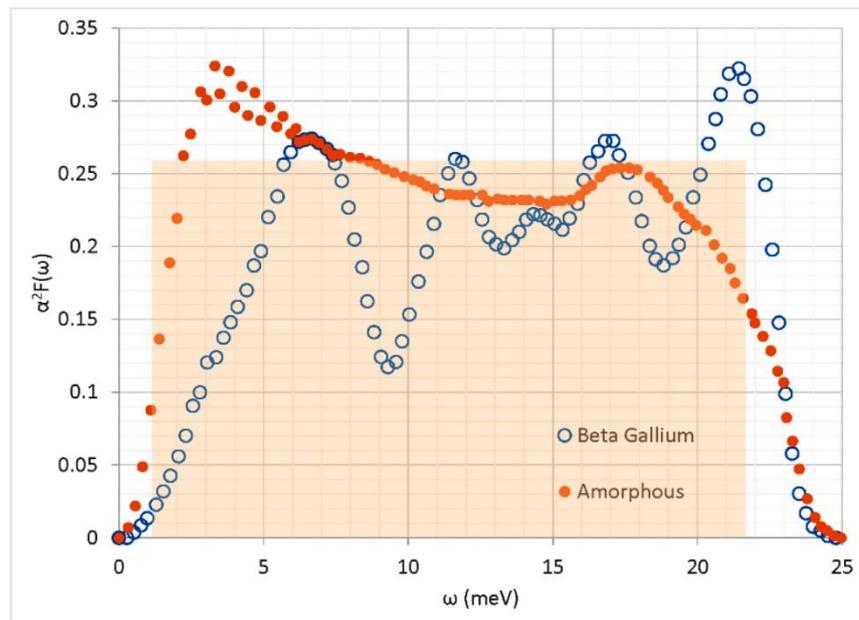
ปกติแล้ว อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนด้วยกันเองเป็นอันตรกิริยาคุลอมบ์ (Coulomb interaction) ซึ่งเป็นอันตรกิริยาแบบคู่ (Pair interaction) และส่งผลให้เกิดแรงผลักระหว่างคู่อิเล็กตรอนทุก ๆ คู่ในระบบ ดังนั้นหากไม่มีตัวช่วยอื่นใดในระบบ อิเล็กตรอนจะพยายามอยู่ห่าง ๆ กัน นอกจากอันตรกิริยาแบบคุลอมบ์แล้ว การที่อิเล็กตรอนเป็นเฟอร์มิออนเมื่ออยู่กันจำนวนมาก จะมีสหสัมพันธ์ระหว่างกัน (ผู้อ่านลองพิจารณาจากบทความเรื่องสมการมหัศจรรย์: สมการชาซิโย [22]) ทำให้อิเล็กตรอนยิ่งอยู่ห่างกันมากกว่าอนุภาคที่ไม่ใช่เฟอร์มิออน แต่เมื่อในระบบมีโฟนอนเข้ามาเกี่ยวข้อง อย่างเช่น ในสถานะของแข็งหรือของเหลวของธาตุและสารประกอบต่าง ๆ จะทำให้เกิดอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนเหล่านี้ตามสมการที่ (2) ผลของอันตรกิริยานี้จะทำให้อันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับอิเล็กตรอนด้วยกันเองเปลี่ยนไปด้วย สามารถเขียนเป็นศักย์ยังผล (Effective potential) [23,24] ได้ดังนี้

$$V_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}(\mathbf{q}) = |g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 \frac{\hbar\omega_{\mathbf{q}}}{(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 - (\hbar\omega_{\mathbf{q}})^2} \quad (7)$$

โดย $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ เป็นพลังงานของอิเล็กตรอนที่สถานะ \mathbf{k} และ $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ เป็นพลังงานของโฟนอนที่มีความถี่ $\omega_{\mathbf{q}}$ ความสวยงามของสมการนี้คือ ถ้า $\varepsilon_{\mathbf{k}'} \approx \varepsilon_{\mathbf{k}}$ แล้ว ศักย์ยังผลมีโอกาสที่จะมีค่าติดลบ โดยมีเงื่อนไขว่า $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 > 0$ และ $\hbar\omega_{\mathbf{q}} > 0$ ด้วย การที่ศักย์ยังผลมีค่าติดลบนำไปสู่การจับคู่กันของอิเล็กตรอน (Electron pairing) ถ้าหาก $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2 = 0$ อาจตีความได้ว่าไม่มีการจับคู่อิเล็กตรอนในระบบ การคำนวณค่าของ $|g_{\mathbf{k}',\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2$ ออกมาอย่างชัดเจนนั้นสามารถทำได้ แต่มีความซับซ้อนค่อนข้างมาก เพราะต้องทราบรายละเอียดอันตรกิริยาระหว่างอะตอมกับอิเล็กตรอนและสถานะของอิเล็กตรอนและโฟนอนในโครงสร้างผลึกของธาตุหรือสารประกอบแต่ละชนิด ผู้เขียนจึงขอละ

ไว้เพราะจะทำให้บทความยาวเกินไป ผู้อ่านที่สนใจการคำนวณ $|g_{k',k,q}|^2$ สามารถศึกษาได้จากเอกสารอ้างอิงเหล่านี้ [23,24]

ในมุมมองของการทดลองนั้น ปรากฏว่าฟังก์ชันสเปกตรัมสามารถวัดได้จากการทดลองปรากฏการณ์ทะลุอุโมงค์ (Tunnelling experiment) มีการตีพิมพ์ผลการทดลองที่สภาวะปกติ (ความดันบรรยากาศ) จำนวนมาก ยกตัวอย่างเช่น Hg [25], ธาตุโลหะอื่น ๆ [26] หรือ กราฟีน [27] แต่ผู้เขียนขอนำผลการทดลองของธาตุแกเลียม (Gallium, Ga) [12] มาเป็นตัวอย่าง โดย $\alpha^2F(\omega)$ ที่วัดจากแกเลียมที่มีสถานะเป็นตัวนำยวดยิ่งนั้น แสดงตามรูปที่ 3 การวัดทำในสถานะที่เป็นของแข็งที่มีโครงผลึก (วงกลมสีฟ้า) และสถานะที่เป็นอสัณฐาน (Amorphous) (จุดสีส้ม) ลักษณะทั่วไปของ $\alpha^2F(\omega)$ คือฟังก์ชันที่เริ่มจากความถี่ $\omega = 0$ ไปจบที่ค่าความถี่สูงสุดค่าหนึ่ง $\omega = \omega_{max}$ และฟังก์ชันมียอดสูง ๆ (Peaks) จำนวนหนึ่ง ซึ่งส่วนหนึ่งน่าจะสะท้อนความแข็งแรงของ $|g_{k',k,q}|^2$ และอีกส่วนหนึ่งน่าจะสะท้อนความหนาแน่นสูงของสถานะของอิเล็กตรอนและโฟนอน เช่น ในบริเวณที่มีสมมาตรสูง สิ่งที่น่าสนใจเป็นพิเศษในสถานะที่เป็นอสัณฐานของแกเลียมนี้เมื่อเทียบกับสถานะที่เป็นโครงผลึกคือ ขนาดของ $\alpha^2F(\omega)$ นั้นไม่ได้ลดลงมากนักยกเว้นที่ความถี่สูง ๆ แต่ลักษณะความเป็นยอดสูง ๆ นั้นเลือนรางไป และทำให้ลักษณะของฟังก์ชันสเปกตรัมปรากฏเป็นผืนกว้างคล้ายคลึงกับรูปสี่เหลี่ยมผืนผ้า (ดูพื้นที่ระบายสีส้มเทียบกับจุดข้อมูลสีส้ม) ซึ่งเรานำลักษณะทางเรขาคณิตนี้ไปใช้สร้างแบบจำลองต่อไป



รูปที่ 3 $\alpha^2F(\omega)$ ซึ่งวัดได้จากการทดลองปรากฏการณ์ทะลุอุโมงค์ของแกเลียมที่มีโครงผลึกแบบบีตา (β -Ga) (วงกลมสีฟ้า) และเป็นอสัณฐาน (Amorphous) (วงกลมสีส้ม) (สกัดข้อมูลจากเอกสารอ้างอิง [12])

เมื่อทราบ $\alpha^2F(\omega)$ แล้ว เราสามารถคำนวณพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้องกับค่าอุณหภูมิวิกฤติตามสมการที่ (1) ได้แก่ ค่าความแข็งแรงของการคู่ควบเฉลี่ย λ [20] ซึ่งเป็นเสมือนค่าตัวแทนความแข็งแรงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนทั้งหมดในระบบ เขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$\lambda = 2 \int_0^\infty d\omega \frac{\alpha^2F(\omega)}{\omega} \quad (8)$$

ในความเป็นจริง ค่าของ λ สามารถหาได้จากการทดลองวัดสภาพต้านทานของธาตุหรือสารประกอบในสถานะปกติที่มีอุณหภูมิเข้าใกล้ T_c และวัดได้จากการทดลองปรากฏการณ์ทะลุช่องโมเมนต์และการทดลองความจุความร้อน [28] ค่าจากสมการที่ (8) จึงเป็นค่าที่สามารถเปรียบเทียบกับค่าจากการทดลองได้โดยตรง [28]

ค่าความถี่ลอการิทึมเฉลี่ย ω_{ln} [20] เป็นเสมือนค่าตัวแทนของความถี่โฟนอนทั้งหมดในระบบ เขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$\omega_{ln} = \exp\left(\frac{2}{\lambda} \int_0^\infty d\omega \ln(\omega) \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}\right) \quad (9)$$

ผู้อ่านจะสังเกตเห็นว่า ถ้าหากมองว่าปริมาณ $\rho(\omega) = 2 \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$ เป็นเหมือนกับฟังก์ชันการกระจาย (Distribution function) ชนิดหนึ่ง การคำนวณค่าเฉลี่ย $\langle f \rangle$ ของฟังก์ชัน $f(\omega)$ ใด ๆ ภายใต้ฟังก์ชันการกระจายนี้จะอยู่ในรูปทั่วไปคือ

$$\langle f \rangle = \frac{\int_0^\infty d\omega f(\omega) \rho(\omega)}{\int_0^\infty d\omega \rho(\omega)} = \frac{1}{\lambda} \int_0^\infty d\omega f(\omega) \rho(\omega) \quad (10)$$

โดยค่า $\frac{1}{\lambda}$ ประพจน์ตัวเหมือนเป็นตัวประกอบที่ทำให้เป็นปกติ (Normalization factor) อัลเลน-ไดนส์ [20] ได้ลองใช้วิธีเฉลี่ยความถี่หลาย ๆ แบบ ได้แก่ ความถี่เฉลี่ย (Average frequency, $\langle \omega \rangle$) รากของความถี่กำลังสองเฉลี่ย (Root mean square, $\sqrt{\langle \omega^2 \rangle}$) พวกเขาพบว่าทางเลือกใช้ ω_{ln} ในการหาค่า T_c ตามสมการที่ (1) จะให้ผลการคำนวณที่สอดคล้องกับผลการทดลองที่สุด [20]

ในตอนนี้ ผู้อ่านได้เห็นที่มาของฟังก์ชันสเปกตรัมจากทฤษฎีควอนตัมหลายวัตถุและได้เห็นค่าที่แท้จริงที่วัดได้จากการทดลอง นอกจากนี้ เรายังได้ศึกษาสมบัติบางประการของฟังก์ชันสเปกตรัมด้วย เมื่อเราได้ค่าของฟังก์ชันสเปกตรัมแล้ว เราสามารถนำไปคำนวณพารามิเตอร์ต่าง ๆ เพื่อใช้ในการหาค่าอุณหภูมิวิกฤตได้ ในตอนต่อไป เราจะได้บรรยายแบบจำลองฟังก์ชันสเปกตรัม และวิเคราะห์สมบัติบางประการที่อาจนำไปสู่การวิเคราะห์อุณหภูมิวิกฤตของตัวนำยิ่งยวดแบบดั้งเดิมต่อไป

แบบจำลองฟังก์ชันสเปกตรัม

ในงานวิจัยของ อัลเลน-ไดนส์ [20] พวกเขาได้เสนอแบบจำลองของ $\alpha^2 F(\omega)$ เป็นฟังก์ชันเดลต้า (Delta function) ที่มีความสูงเท่ากับ $\frac{\lambda \omega_E}{2}$ และตำแหน่งของฟังก์ชันอยู่ตรงความถี่ไอน์สไตน์ (Einstein frequency, ω_E) ดังนี้

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega_E}{2} \delta(\omega - \omega_E) \quad (11)$$

ในความเป็นจริง แบบจำลองนี้อาจจะเหมาะกับระบบที่มีโฟนอนเชิงแสง (Optical phonons) ที่มีความถี่เพียงค่าเดียวคือ ω_E แบบจำลองนี้ทำให้เรามองเห็นความสัมพันธ์ระหว่าง $\alpha^2 F(\omega)$ กับค่า λ และ ω_E นอกจากนี้ยังสามารถแสดงได้ว่า $\omega_{ln} = \omega_E$ จากแบบจำลองนี้เราคำนวณพื้นที่ใต้กราฟ $A = \int_0^\infty d\omega \alpha^2 F(\omega) = \frac{\lambda \omega_E}{2}$ ได้ และจะพบว่าอัตราส่วน $\frac{2A}{\lambda \omega_{ln}} = 1$ เสมอ ซึ่งหมายความว่า เมื่อเราทราบค่าของพารามิเตอร์สองตัวใด ๆ จากสามตัว (A , λ และ ω_{ln}) เราสามารถหาค่าของพารามิเตอร์ตัวที่เหลือได้จากอัตราส่วนนี้ อย่างไรก็ตาม เมื่อเราพิจารณาผลจากการทดลองหรือผลจากการคำนวณทางทฤษฎีตามตัวอย่างที่แสดงในตารางที่ 2 จะพบว่า $\frac{2A}{\lambda \omega_{ln}} \neq 1$ ยิ่งไปกว่านั้น ถ้าอัตราส่วนนี้ไม่ใช่ค่าคงตัว นั่นแสดงว่าพารามิเตอร์สามตัวนี้เป็นอิสระต่อกัน การที่อัตราส่วนนี้มีสมบัติแตกต่างจากการทดลองและการคำนวณทางทฤษฎีเป็นหลักฐานหนึ่งที่แสดงข้อจำกัดของแบบจำลองฟังก์ชันเดลต้า

จากการสังเกต $\alpha^2 F(\omega)$ ที่มาจากการทดลองและการคำนวณในหลาย ๆ ตัวอย่าง พบว่ารูปแบบทางเรขาคณิตของ $\alpha^2 F(\omega)$ มีความคล้ายคลึงกับรูปสี่เหลี่ยมผืนผ้าซ้อนทับด้วยการกระเพื่อมของยอดสูง (Peaks) หลาย ๆ ยอด หากเราตั้งสมมติฐานว่ากระเพื่อมเหล่านี้ไม่ได้ส่งผลมากนักกับค่าพารามิเตอร์ที่นำไปใช้คำนวณอุณหภูมิวิกฤตมากนัก เราอาจแทน $\alpha^2 F(\omega)$ ด้วยฟังก์ชันที่มีความราบเรียบ หรือมองอีกมุมหนึ่งก็คือแทนฟังก์ชันการกระจาย $\rho(\omega) = 2 \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$ ด้วยฟังก์ชันที่จัดการได้ง่ายกว่าแต่ให้ค่าเฉลี่ยตามสมการ (8)–(10) เหมือนกับฟังก์ชันจริง

ตารางที่ 2 ตัวอย่างตัวนำยวดยิ่งที่มีการรายงานค่า λ , ω_{ln} และ A จากการคำนวณด้วยวิธี DFT [29] พร้อมพารามิเตอร์ C , ω_a และ ω_b ที่คำนวณจากสมการที่ (16)–(18) และค่า T_c จากสมการที่ (1) โดยกำหนดให้ $\mu^* = 0.1$ ยกเว้นค่า λ , ω_{ln} และ T_c ของแกเลียมมาจากการทดลอง [12]

ตัวนำยวดยิ่ง	λ	ω_{ln} (K)	A (K)	$\frac{2A}{\lambda\omega_{ln}}$	C	ω_a (K)	ω_b (K)	T_c (K)
β -Ga (exp)	0.97	86.1	53.1	1.27	0.197	25.1	295	6.5
Ga (amorphous, exp)	1.55	56.6	61.9	1.41	0.261	12.8	250	8.56
CaH ₆ (DFT)	2.53	1044.4	1450.6	1.10	0.837	491	2224	173
LaH ₁₀ (DFT)	2.46	1067.6	1555.0	1.18	0.601	384	2970	174
H ₃ S (DFT)	2.08	1415.8	1624.6	1.10	0.670	652	3077	209
YH ₁₀ (DFT)	2.42	1311.3	1914.7	1.21	0.559	444	3870	212
MgH ₆ (DFT)	2.54	1439.0	2030.8	1.11	0.790	644	3215	239

ในบทความนี้ ผู้เขียนเลือกบรรยายถึงฟังก์ชันสี่เหลี่ยมผืนผ้าหรือฟังก์ชันความกว้างแถบความถี่ (Bandwidth function) ตามเอกสารอ้างอิง [30] ซึ่งเขียนเป็นสมการได้ดังนี้

$$\alpha^2 F(\omega) = C; \quad \omega_a < \omega < \omega_b \quad (12)$$

โดยอาจมองว่าฟังก์ชันนี้เป็นผลรวมของฟังก์ชันเดลต้าจำนวนมากมีความสูงคงตัว C เท่ากันหมด แต่มีตำแหน่งของฟังก์ชันอยู่ที่ความถี่หลาย ๆ ค่า และความถี่เหล่านี้มีขอบเขตอยู่ระหว่างค่าความถี่ต่ำสุด $\omega_a \neq 0$ และความถี่สูงสุด ω_b ความหมายทางฟิสิกส์คือระบบมีโฟนอนที่มีความถี่จำกัดภายในช่วง $\omega_a < \omega < \omega_b$ และอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟนอนเหล่านี้มีความแข็งแรงเท่ากันทั้งหมด แน่ใจว่าฟังก์ชันตามสมการที่ (12) นี้ใช้แทนฟังก์ชันจริงไม่ได้ในทุกกรณี โดยเฉพาะที่ลิมิต $\omega \rightarrow 0$ นักฟิสิกส์ทฤษฎีพบว่าฟังก์ชันเชิงวิเคราะห์ (Analytic function) จะลู่ออกเข้าหาเลขยกกำลังของความถี่หรือ $\alpha^2 F(\omega) \rightarrow \omega^n$ [31] หรือในกรณีที่ฟังก์ชันมีความเป็นยอดสูงชัดเจน (Sharp peaks) หรือฟังก์ชันมีลักษณะขาดออกจากกันสมการที่ (12) ก็จะเป็นตัวแทนที่ไม่ดีเช่นกัน ผู้อ่านอาจลองหาวิธีสร้างแบบจำลองที่ดีกว่าสมการที่ (12) แต่สำหรับวัตถุประสงค์ของบทความนี้ที่ต้องการรักษาความง่ายของสมการแล้วถือว่าฟังก์ชันนี้ใช้ได้ดีพอสมควร

เมื่อมีแบบจำลองของ $\alpha^2 F(\omega)$ แล้วเราสามารถหาพารามิเตอร์ต่าง ๆ ได้ทันที ได้แก่ พื้นที่ใต้กราฟ A ดังนี้

$$A = \int_{\omega_a}^{\omega_b} d\omega \alpha^2 F(\omega) = C(\omega_b - \omega_a) \quad (13)$$

ค่าความแข็งแรงของการคู่ควบเฉลี่ย

$$\lambda = 2 \int_{\omega_a}^{\omega_b} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} = 2C \ln\left(\frac{\omega_b}{\omega_a}\right) \quad (14)$$

ผู้อ่านจะสังเกตเห็นว่า λ ขึ้นกับอัตราส่วน $\frac{\omega_b}{\omega_a}$ หรืออีกนัยยะหนึ่งคือขึ้นกับความกว้างแถบความถี่ (Bandwidth) ของฟังก์ชันสเปกตรัม ยิ่งความกว้างแถบความถี่มีค่ามาก λ ก็ยิ่งมีค่าสูง นอกจากนี้ λ จะมีค่าสูงเมื่อ C ต้องมีค่าสูงด้วย [30]

อันดับถัดมา ค่าความถี่ลอการิทึมเฉลี่ย หาได้ดังนี้

$$\omega_{ln} = \exp\left(\frac{2}{\lambda} \int_{\omega_a}^{\omega_b} d\omega \ln(\omega) \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}\right) = \sqrt{\omega_a \omega_b} \quad (15)$$

ผู้อ่านจะสังเกตเห็นว่า ω_{ln} มีค่ามากที่สุดก็ต่อเมื่อ $\omega_a = \omega_b$ นั่นคือความกว้างแถบความถี่มีค่าเข้าใกล้ศูนย์ หรือ ω_{ln} จะมีค่าสูงเมื่อ ω_a และ ω_b มีค่าสูงทั้งคู่ และสำหรับแบบจำลองนี้ ω_{ln} ไม่ขึ้นกับค่า C เลย [30]

ในทางกลับกัน เมื่อทราบสมการที่ (13)–(15) แล้ว เราสามารถแก้สมการทั้งสามเพื่อหาค่าพารามิเตอร์ C , ω_a และ ω_b ที่เป็นฟังก์ชันของ A , λ และ ω_{ln} ได้โดยเริ่มต้นจากการหาค่า C จากสมการ

$$\frac{4C}{\lambda} \sinh \frac{\lambda}{4C} = \frac{2A}{\lambda \omega_{ln}} \quad (16)$$

ผู้อ่านอาจจะสังเกตว่า $\frac{\sinh x}{x} \geq 1$ เสมอ¹ ซึ่งหมายความว่าในแบบจำลองนี้ให้ค่า $\frac{2A}{\lambda \omega_{ln}} \geq 1$ เสมอ และเราสามารถปรับค่า C จนกระทั่งได้อัตราส่วน $\frac{2A}{\lambda \omega_{ln}}$ ที่ถูกต้องได้ตามที่แสดงในตารางที่ 2 และเราสามารถกล่าวได้ว่าแบบจำลองความกว้างแถบความถี่นี้ถอดแบบ (Reproduce) ค่า A , λ และ ω_{ln} ได้ถูกต้องพร้อม ๆ กันทั้งสามค่าเมื่อทราบค่า C แล้วก็สามารถหาค่าพารามิเตอร์ตัวที่เหลือได้ ดังนี้

$$\omega_a = \omega_{ln} e^{-\frac{\lambda}{4C}} \quad (17)$$

และ

$$\omega_b = \omega_{ln} e^{\frac{\lambda}{4C}} \quad (18)$$

ตัวอย่างค่าพารามิเตอร์ C , ω_a และ ω_b ที่คำนวณจากค่า A , λ และ ω_{ln} ในตัวนำยวดยิ่งชนิดต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตารางที่ 2

¹ เรารู้ว่า $\frac{\sinh x}{x} \approx 1 + \frac{x^2}{6} + \frac{x^4}{120} + \dots$ มีค่ามากกว่าหรือเท่ากับ 1 เสมอ ถ้าใช้สมการนี้หาค่า C จะได้ว่า

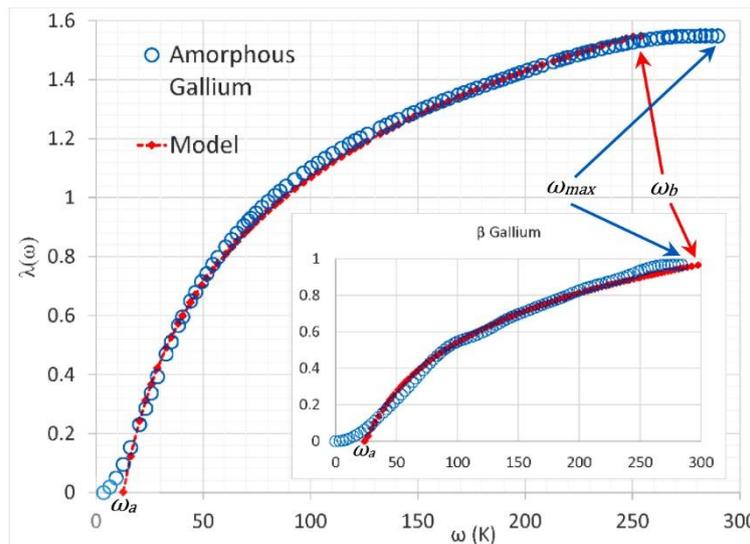
$$C \approx \frac{\lambda}{4} \left(\sqrt{120 \left(\frac{2A}{\lambda \omega_{ln}} - 1 \right) + 100} - 10 \right)^{-1/2}$$

ผู้อ่านลองเทียบกับค่า C ในตารางที่ 2 ซึ่งแก้สมการที่ (16) โดยตรง

ในขั้นตอนนี้ เรามาพิจารณาอำนาจการทำนายของแบบจำลอง โดยปริมาณแรกที่พิจารณาคือฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$ สมมติว่าเราทราบค่า $\alpha^2 F(\omega)$ ที่ความถี่ต่าง ๆ จากการทดลอง เราสามารถทำการอินทิเกรตเชิงตัวเลขเพื่อหาฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$ ได้ดังนี้

$$\lambda(\omega) = 2 \int_0^\omega d\omega' \frac{\alpha^2 F(\omega')}{\omega'} \quad (19)$$

ตัวอย่างของ $\lambda(\omega)$ ซึ่งอินทิเกรตจาก $\alpha^2 F(\omega)$ จากผลการทดลองของแกลเลียมในสถานะอัญฐานแสดงไว้ในรูปที่ 4 (วงกลมสีฟ้า) หากพิจารณาตามแบบจำลองและสมการที่ (14) แล้วเราสามารถทำนายได้ว่า $\lambda(\omega)$ เป็นฟังก์ชันลอการิทึมของความถี่ (จุดและเส้นประสีแดง) ซึ่งใช้พารามิเตอร์ C , ω_a และ ω_b ที่มาจากสมการ (16)–(18) และค่าตัวเลขแสดงไว้ในตารางที่ 2 เมื่อเปรียบเทียบระหว่างค่าฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$ ที่อินทิเกรตจากการทดลองและจากแบบจำลองแล้วจะเห็นว่ามีความสอดคล้องกันเป็นอย่างมาก ผู้เขียนได้แสดงฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$ ของแกลเลียมที่มีโครงสร้างผลึกแบบบีตา (β -Ga) ไว้ในภาพแทรกของรูปที่ (4) เพื่อการเปรียบเทียบด้วย อย่างไรก็ตาม จุดอ่อนของแบบจำลองนี้คือไม่สามารถอธิบายฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$ ที่ $\omega \rightarrow 0$ ได้ และไม่มีการรับประกันว่า $\omega_b \approx \omega_{max}$ (ดูลูกศรสีแดงและสีน้ำเงินในรูปที่ 4 ประกอบ)



รูปที่ 4 แสดงกราฟของ $\lambda(\omega)$ ที่เป็นฟังก์ชันของความถี่ ω โดยวงกลมสีฟ้าคือค่าที่อินทิเกรตจากฟังก์ชันสเปกตรัมที่มาจากการทดลองของแกลเลียมแบบอัญฐาน (วงกลมสีส้มในรูปที่ 3) ส่วนเส้นประสีแดงคือแบบจำลอง $\lambda(\omega) = 2C \ln\left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)$ ภาพแทรกเป็น $\lambda(\omega)$ ของแกลเลียมที่มีโครงสร้างผลึกแบบบีตา (β -Ga)

เมื่อเร็ว ๆ นี้มีการตีพิมพ์ผลงานจากสารประกอบไฮโดรด์ (ScYH_{12}) ที่ความดันสูงและมีค่า T_c สูงคำนวณด้วยวิธี DFT จากการวิเคราะห์ผลการคำนวณก็พบว่าฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$ ที่คำนวณได้มีความคล้ายคลึงกับฟังก์ชันลอการิทึมเป็นอย่างมาก [32] ทั้งนี้ อาจเป็นเพราะว่าในโครงสร้างผลึกของสารประกอบไฮโดรด์ที่มีสัดส่วนของไฮโดรเจนจำนวนมากและทำให้เกิดโฟนอนเชิงแสง (Optical phonons) ได้หลายความถี่ เราทราบว่าแบบจำลองโฟนอนที่มีความถี่เดียว ω_E ของไอส์ไตน์นั้นสามารถอธิบายโฟนอนเชิงแสงได้ดี สำหรับระบบที่มีโฟนอนเชิงแสงหลายความถี่เราก็เพียงดัดแปลงแบบจำลองด้วยการบวกเพิ่มความถี่เหล่านี้เข้าไป สำหรับแบบจำลองฟังก์ชันสเปกตรัมในสมการที่ (12) ก็อาจมองได้ว่าฟังก์ชันนี้เป็นผลรวมของฟังก์ชันเดลต้าจำนวนมากที่สัมพันธ์กับโฟนอนเชิงแสงหลาย ๆ ความถี่ในระบบนั่นเอง

อันดับสุดท้าย ผู้เขียนขอพิจารณาผลกระทบของพารามิเตอร์ C , ω_a และ ω_b ต่อค่าอุณหภูมิวิกฤติ เพื่อความง่าย เราลดรูปสมการที่ (1) เหลือเพียง

$$T_c \propto \omega_{ln} \exp\left(-\frac{1}{\lambda}\right) \quad (20)$$

สมการที่ (20) นี้ใช้เพื่อการอธิบายเท่านั้น ไม่สามารถทดแทนการคำนวณค่า T_c จากสมการที่ (1) ได้ อย่างไรก็ตาม ผู้อ่านจะเห็นว่าจากรูปสมการ T_c จะมีค่าสูงก็ต่อเมื่อ λ และ ω_{ln} ต้องมีค่าสูงทั้งสองตัว (ดูค่าพารามิเตอร์ของ MgH_6 ในตารางที่ 2 เทียบกับตัวนำยวดยิ่งตัวอื่น ๆ) แต่เราได้เรียนรู้จากสมการที่ (14) และ (15) แล้วว่า λ และ ω_{ln} มีความสัมพันธ์ผกผันระหว่างกัน ความพยายามที่จะเพิ่มค่า λ ด้วยการดัดแปลง ω_a และ ω_b ยกตัวอย่างเช่น พยายามเพิ่มความกว้างของแถบความถี่ ผลที่ตามมาคือ ω_{ln} กลับมีค่าลดลง และในทางกลับกัน ถ้าจะเพิ่มค่า ω_{ln} ด้วยการเพิ่ม ω_a ให้เท่ากับ ω_b ผลที่เกิดขึ้นตามมาคือจะทำให้ $\lambda = 0$ ฉะนั้น แบบจำลองอย่างง่ายนี้บอกเป็นนัยว่าการเปลี่ยนแปลงที่ส่งผลต่อการเปลี่ยนแปลงความถี่ของโฟนอนอย่างเดียวโดยไม่ได้เปลี่ยนความแข็งแรงของอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนกับโฟนอน อย่างเช่น การเพิ่มความดันหรือการเพิ่มความเค้นแล้วความถี่โฟนอนเพิ่มขึ้นหรือลดลงอาจจะส่งผลต่อค่า T_c บ้าง แต่ไม่สามารถทำให้ λ และ ω_{ln} มีค่าเพิ่มขึ้นพร้อมกันได้ ยกเว้นมีการเปลี่ยนแปลงอื่น ๆ ที่ทำให้ค่า C เปลี่ยนไปด้วย เช่น มีการเปลี่ยนสถานะทางโครงสร้างเกิดขึ้น ดังนั้น แนวโน้มงานวิจัยในปัจจุบันคือการค้นหาสารประกอบใหม่หรือสารประกอบเดิมแต่มีโครงสร้างใหม่ที่ให้ค่า λ และ ω_{ln} สูงได้พร้อมกัน [30] และท้ายที่สุดนี้ ผู้อ่านอาจจะสังเกตเห็นแนวโน้มจากตารางที่ 2 ว่า T_c มีแนวโน้มแปรผันกับพื้นที่ใต้กราฟ A ของ $\alpha^2F(\omega)$ ความสัมพันธ์นี้เสนอโดย ลีฟเวนส์และคาร์บอทท์ (Leavens-Carbotte relation) [33] หากจะมองหาค่า T_c สูง ๆ เราอาจเพียงมองหาฟังก์ชัน $\alpha^2F(\omega)$ ที่มีพื้นที่ใต้กราฟ $A = C(\omega_b - \omega_a)$ ที่มีค่ามาก ๆ อย่างไรก็ตาม จากตารางที่ 2 ส่วนใหญ่มาจากการคำนวณด้วยวิธี DFT [29] ถ้าเราต้องการยืนยันความสัมพันธ์ของ ลีฟเวนส์และคาร์บอทท์ เราต้องการข้อมูลจากการทดลองเพิ่มเติมอีกมากโดยเฉพาะ $\alpha^2F(\omega)$ ของตัวอย่างที่มีค่า T_c สูง ๆ แต่การวัด $\alpha^2F(\omega)$ ที่ความดันสูงยังไม่สามารถทำได้ด้วยเครื่องมือที่มีในปัจจุบัน

สรุป

ผู้เขียนได้กล่าวถึงฟังก์ชันสเปกตรัมของตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมซึ่งมีที่มาจากอันตรกิริยาระหว่างอิเล็กตรอนและโฟนอนตามสมการที่ (6) จากนั้นได้นำฟังก์ชันสเปกตรัมมาใช้คำนวณพารามิเตอร์ค่าความแข็งแรงของการคู่ควมเฉลี่ย (λ) ตามสมการที่ (8) และค่าความถี่ลอการิทึมเฉลี่ย (ω_{ln}) ตามสมการที่ (9) และคำนวณอุณหภูมิวิกฤติ T_c จากสมการของอัลเลน-ไดนส์ [20] ตามสมการที่ (1) อันดับถัดมา ผู้เขียนได้กล่าวถึงแบบจำลองความกว้างแถบสเปกตรัมของฟังก์ชันสเปกตรัม โดยแบบจำลองมีลักษณะเป็นสี่เหลี่ยมผืนผ้า ซึ่งบรรยายได้ด้วยพารามิเตอร์สามตัว ได้แก่ ความสูง C ความถี่ต่ำสุด ω_a และความถี่สูงสุด ω_b แบบจำลองนี้สามารถถอดแบบค่า ω_{ln} และ λ (รวมทั้งฟังก์ชัน $\lambda(\omega)$) ตามรูปที่ 4) และยังสามารถให้ค่าอัตราส่วน $\frac{2A}{\lambda\omega_{ln}}$ ที่ถูกต้องด้วย ในปัจจุบันนักฟิสิกส์มองหาตัวนำยวดยิ่งที่มีค่า T_c สูง ๆ และจากสมการที่ (1) และ (20) พบว่า T_c จะมีค่าสูงก็ต่อเมื่อทั้ง λ และ ω_{ln} มีค่าสูงพร้อม ๆ กัน การมีแบบจำลองอย่างง่ายช่วยให้เห็นความเชื่อมโยงระหว่างรูปแบบทางเรขาคณิตของฟังก์ชันสเปกตรัมกับค่า T_c ดังนี้ 1) หากแถบความถี่มีความกว้างมาก ($\omega_a \ll \omega_b$) λ จะมีค่าสูง ตามสมการที่ (14) 2) หากความสูง C มีค่ามาก λ ก็จะมีค่าสูงได้ตามสมการที่ (14) เช่นกัน 3) แต่ถ้าหากแถบความถี่แคบมาก ($\omega_a \approx \omega_b$) และ ω_a กับ ω_b มีค่ามาก ω_{ln} ก็จะมีค่ามาก ตามสมการที่ (15) โดยไม่ขึ้นกับค่าความสูง C ดังนั้น การเปลี่ยนแปลงค่า ω_a กับ ω_b จะมีผลกระทบต่อค่า ω_{ln} และ λ ในลักษณะที่เพิ่มหรือลดตรงข้ามกัน 4) จากตารางที่ 2 พบว่า T_c มีแนวโน้มแปรผันตรงกับค่าพื้นที่ใต้กราฟของฟังก์ชันสเปกตรัม $A = C(\omega_b - \omega_a)$ ตามที่ลีฟเวนส์และคาร์บอทท์ [33] ได้เคยเสนอไว้แล้ว ผลจากแบบจำลองน่าจะทำให้ผู้อ่านมองหาตัวนำยวดยิ่งที่มี T_c สูง ๆ จากการพิจารณาพารามิเตอร์ C , ω_a และ ω_b ได้ไม่ยาก ปัจจุบันพบว่ามีการพยากรณ์หลายชนิดที่สังเคราะห์ได้ภายใต้ความดันสูง มีการรายงานผลการวัดและ

การคำนวณค่า λ และ ω_{ln} ออกมาเป็นจำนวนมาก แนวโน้มงานวิจัยในปัจจุบันคือการค้นหาสารประกอบใหม่หรือสารประกอบเดิมแต่มีโครงสร้างใหม่ที่ให้ค่า λ และ ω_{ln} สูงได้พร้อมกัน [30] และมีการค้นพบวาทสารประกอบบางตัวแสดงสมบัติของตัวนำยวดยิ่งที่ T_c มีค่าเข้าใกล้อุณหภูมิห้องมากขึ้นเรื่อย ๆ ผู้เขียนหวังว่าบทความนี้จะช่วยให้ผู้อ่านได้ติดตามและวิเคราะห์ผลจากการค้นพบตัวนำยวดยิ่งแบบดั้งเดิมเหล่านี้ได้อย่างลึกซึ้งมากขึ้น และอาจนำไปสู่การค้นพบสารประกอบตัวนำยวดยิ่งชนิดใหม่ ๆ ที่มีค่า T_c สูง ๆ ต่อไปในอนาคต

กิตติกรรมประกาศ

จักรภัทร สีสายนอก ได้รับทุนอุดหนุนการวิจัยจากโครงการสร้างเสริมพลังจุฬาฯ ก้าวสู่ศตวรรษที่ 2 จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย และ อรรถวัต ดวงนิล ได้รับทุนโครงการพัฒนาและส่งเสริมผู้มีความสามารถพิเศษทางวิทยาศาสตร์และเทคโนโลยี (พสวท.)

เอกสารอ้างอิง

- [1] H. K. Onnes, "Further experiments with liquid helium. C. On the change of electric resistance of pure metals at very low temperatures etc. IV. The resistance of pure mercury at helium temperatures", Proceedings of the Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences (KNAW), 13, 1274-1276 (1911).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, "Theory of superconductivity", Physical Review, 108, 1175-1204 (1957).
- [3] J. Nagamatsu, N. Nakagawa, T. Muranaka, Y. Zenitani and J. Akimitsu, "Superconductivity at 39 K in magnesium diboride", Nature, 410, 63-64 (2001).
- [4] M. Zeisberger, W. Gawalek and G. Giunchi, "Magnetic levitation using magnesium diboride", Journal of Applied Physics, 98, 023905 (2005).
- [5] J. S. Ahn, Y.-J. Kim, M.-S. Kim, S.-I. Lee and E. J. Choi, "Structural and superconducting properties of $MgB_{2-x}Be_x$ ", Physical Review B, 65, 172503 (2002).
- [6] P. W. Bridgman, "General survey of certain results in the field of high-pressure physics", Nobel Lecture, December 11, 1946, from <https://www.nobelprize.org/prizes/physics/1946/bridgman/lecture/>.
- [7] A. P. Drozdov, M. I. Erements, I. A. Troyan, V. Ksenofontov and S. I. Shylin, "Conventional superconductivity at 203 kelvin at high pressures in the sulfur hydride system", Nature, 525, 73-76 (2015).
- [8] X. Huang, X. Wang, D. Duan, B. Sundqvist, X. Li, Y. Huang, H. Yu, F. Li, Q. Zhou, B. Liu and T. Cui, "High-temperature superconductivity in sulfur hydride evidenced by alternating-current magnetic susceptibility", National Science Review, 6, 713-718 (2019).
- [9] M. Somayazulu, M. Ahart, A. K. Mishra, Z. Geballe, M. Baldini, Y. Meng, V. V. Struzhkin and R. J. Hemley, "Evidence for superconductivity above 260 K in lanthanum superhydride at megabar pressures", Physical Review Letters, 122, 027001 (2019).
- [10] V. Struzhkin, B. Li, C. Ji, X. J. Chen, V. Prakapenka, E. Greenberg, I. Troyan, A. Gavriluk and H. K. Mao, "Superconductivity in La and Y hydrides: Remaining questions to experiment and theory", Matter and Radiation at Extremes, 5, 028201 (2020).
- [11] E. Snider, N. Dasenbrock-Gammon, R. McBride, M. Debessai, H. Vindana, K. Venkatasamy, K. V. Lawler, A. Salamat and R. P. Dias, "Room-temperature superconductivity in a carbonaceous sulfur hydride", Nature, 586, 373-377 (2020).
- [12] J. P. Garino, "Simple high vacuum evaporation system with low temperature substrate", Review of Scientific Instruments, 49, 1218-1220 (1978).
- [13] A. B. Migdal, "Interaction between electrons and lattice vibrations in a normal metal", Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics, 7, 996-1001 (1958).

- [14] G. M. Eliashberg, "Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor", Soviet Physics Journal of Experimental and Theoretical Physics, 11, 696-702 (1960).
- [15] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous electron gas", Physical Review, 136, B864-B871 (1964).
- [16] W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", Physical Review, 140, A1133-A1138 (1965).
- [17] A. R. Oganov and C. W. Glass, "Crystal structure prediction using *ab initio* evolutionary techniques: Principles and applications", The Journal of Chemical Physics, 124, 244704 (2006).
- [18] C. J. Pickard and R. J. Needs, "*Ab initio* random structure searching", Journal of Physics: Condensed Matter, 23, 053201 (2011).
- [19] D. Duan, Y. Liu, F. Tian, D. Li, X. Huang, Z. Zhao, H. Yu, B. Liu, W. Tian and T. Cui, "Pressure-induced metallization of dense (H₂S)₂H₂ with high-T_c superconductivity", Scientific Reports, 4, 6968 (2014).
- [20] P. B. Allen and R. Dynes, "Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed", Physical Review B, 12, 905-922 (1975).
- [21] L. van Hove, "The occurrence of singularities in the elastic frequency distribution of a crystal", Physical Review, 89, 1189-1193 (1953).
- [22] อุดมศิลป์ ปิ่นสุข, "สมการมัทซึบาราย: สมการชานชิโย", Thai Journal of Physics, 36, 100-106 (2019).
- [23] R. Heid, "Electron-phonon coupling", In E. Pavarini, E. Koch, R. Scalettar and R. Martin (Eds.), The Physics of Correlated Insulators, Metals, and Superconductors Modeling and Simulation, 7, 15.1-15.29 (2017).
- [24] J. A. Flores-Livas, L. Boeri, A. Sanna, G. Profeta, R. Arita and M. Eremets, "A perspective on conventional high-temperature superconductors at high pressure: Methods and materials", Physics Reports, 856, 1-78 (2020).
- [25] W. N. Hubin and D. M. Ginsberg, "Electron tunneling into superconducting mercury films at temperatures below 0.4°K", Physical Review, 188, 716-722 (1969).
- [26] S. Y. Savrasov and D. Y. Savrasov, "Electron-phonon interactions and related physical properties of metals from linear-response theory", Physical Review B, 54, 16487-16501 (1996).
- [27] B. M. Ludbrook, G. Levya, P. Nigge, M. Zonno, M. Schneider, D. J. Dvorak, C. N. Veenstra, S. Zhdanovich, D. Wong, P. Dosanjh, C. Straßer, A. Stöhr, S. Forti, C. R. Ast, U. Starke and A. Damascelli, "Evidence for superconductivity in Li-decorated monolayer graphene", The Proceedings of the National Academy of Sciences, 112, 11795-11799 (2015).
- [28] P. B. Allen, "The electron-phonon coupling constant λ ", In C. P. Poole, Jr. (Ed.), Handbook of superconductivity, 478-483 (1999), New York: Academic Press.
- [29] Y. Quan, S. S. Ghosh and W. E. Pickett, "Compressed hydrides as metallic hydrogen superconductors", Physical Review B, 100, 184505 (2019).
- [30] U. Pinsook, "In search for near-room-temperature superconducting critical temperature of metal superhydrides under high pressure: A review", Journal of Metals, Materials and Minerals, 30, 31-41 (2020).
- [31] M. Baggioli, C. Setty and A. Zaccone, "Effective theory of superconductivity in strongly coupled amorphous materials", Physical Review B, 101, 214502 (2020).
- [32] W. Sukmas, P. Tsuppayakorn-ae, U. Pinsook, R. Ahuja and T. Bovornratanaraks, "Roles of optical phonons and logarithmic profile of electron-phonon coupling integration in superconducting Sc_{0.5}Y_{0.5}H₆ superhydride under pressures", Journal of Alloys and Compounds, 901, 163524 (2022).
- [33] C. R. Leavens and J. P. Carbotte, "An important parameter in high-temperature superconductivity", Journal of Low Temperature Physics, 14, 195-211 (1974).