

# Szupravezetőbeli spin- és töltéskorrelációk elméleti vizsgálata

Hajdú Csanád

Témavezető:  
Dr. Zaránd Gergely

BME Természettudományi Kar  
Elméleti Fizika Tanszék

2021. 05. 21.



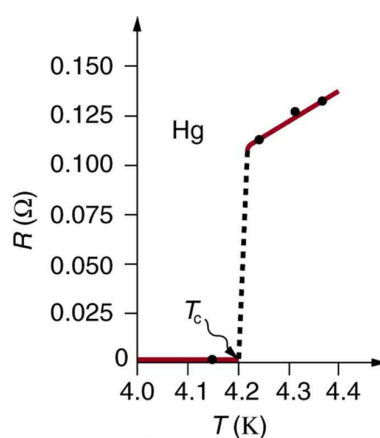


# Tartalomjegyzék

<b>1. Bevezetés</b>	<b>2</b>
<b>2. Fizikai modell</b>	<b>4</b>
2.1. A BCS Hamilton-operátor . . . . .	4
2.2. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai . . . . .	5
2.3. Az $u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ együtthatók meghatározása . . . . .	6
2.4. Levágási séma . . . . .	7
<b>3. Korrelátorok számítása</b>	<b>7</b>
3.1. Töltéskorreláció . . . . .	7
3.2. Spinkorreláció . . . . .	10
<b>4. Az <math>F(\mathbf{r})</math> és <math>G(\mathbf{r})</math> függvények meghatározása</b>	<b>10</b>
4.1. Normál állapot . . . . .	10
4.2. A szupravezető állapot beli korrelációk . . . . .	11
4.2.1. Az $F(\mathbf{r})$ függvény szupravezető beli alakja . . . . .	11
4.2.2. A $G(\mathbf{r})$ függvény szupravezető beli alakja . . . . .	14
<b>5. Spin- és töltéskorrelációs függvények</b>	<b>18</b>
5.1. Töltéskorrelációs függvény . . . . .	18
5.2. Spinkorrelációs függvény . . . . .	19
<b>6. Konklúzió</b>	<b>19</b>

# 1. Bevezetés

A szupravezetést a 20. század elején fedezve fel Heike Kamerlingh Onnes holland fizikus, amikor a higany ellenállását vizsgálta alacsony hőmérsékleten. Azt tapasztalta, hogy 4,2 K alatt az ellenállás ugrásszerűen nullára csökkent. Azóta sok más elemi fémnél és ötvözetnél is tapasztaltak szupravezetést. Mindegyiknél létezik egy  $T_c$  kritikus hőmérséklet, ami alatt a vezető disszipáció nélkül képes áramot vezetni. A kritikus hőmérséklet értéke jellemzően 10 K alatt van, viszont léteznek olyan anyagok is, amik már 100 K körül is szupravezetnek. Az ilyen anyagokat magas hőmérsékletű szupravezetőknek nevezzük. Utóbbiak nagy előnye, hogy folyékony hélium helyett folyékony nitrogénnel is lehűthetők annyira, hogy szupravezessenek.



1. ábra. Egy higany minta ellenállása  $T_c$  körül. [1]

A szupravezetés jelenségének fontos tulajdonsága a Meissner-effektus, ami egy minta belsejében a mágneses tér teljes kiszorítását jelenti. Könnyen belátható, hogy egy ideális vezető belsejében a mágneses tér erőssége állandó, a Meissner-effektus viszont ennél nagyobb megszorítást jelent: a minta belsejében a mágneses tér állandó és zérus, még akkor is, ha a szupravezető állapotra egy külső mágneses tér mellett hűtjük le a mintát.

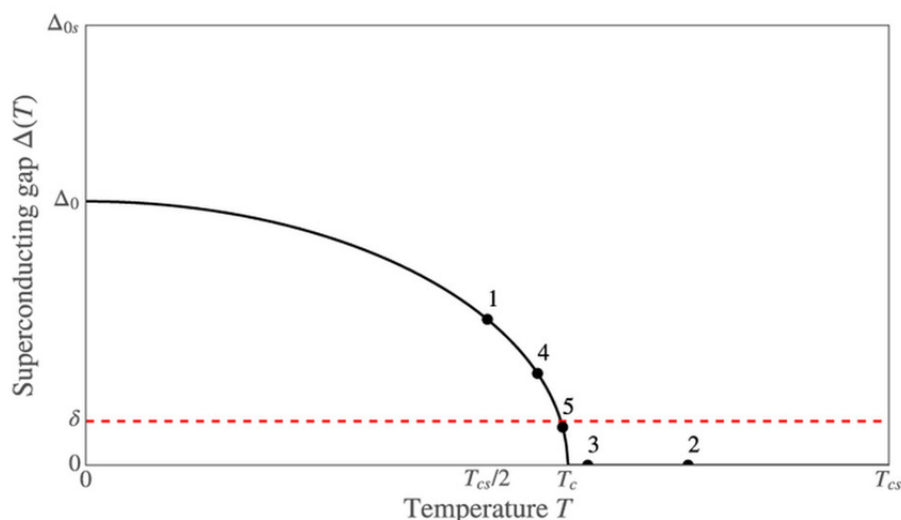
A szupravezetőket széles körben használják. Az egyik alapvető jelenség, amit felhasználnak a Josephson-effektus, ahol két szupravezető rész közé egy vékony szigetelőt illesztnek és a két vezetőre egy egyenfeszültséget kapcsolnak. Ekkor a mintán váltóáram mérhető, aminek a frekvenciája  $\omega_J = \frac{2eV}{\hbar}$ . Egy ilyen Josephson-átmenetet használ az úgynevezett SQUID is (superconducting quantum interference device), amivel mágneses tereket lehet nagy pontossággal mérni. Ezen kívül a Josephson-effektus alapján definiálják az SI rendszerben a volt egységét. A szupravezetésnek fontos felhasználási területe a nagyterű szupravezető mágnesek, amiket többek között az orvostudományban is használnak MRI készülékekben. Kvantumszámítógépekben is előnyös szupravezetőket használni a kvantumbitekhez, mivel az energiaspektrumukban lévő gap védelmet biztosít az alacsonyfrekvenciás zaj ellen.

A felfedezése óta számos elmélet született a szupravezetés jelenségének leírására. A két meghatározó elmélet a Ginzburg–Landau-elmélet, ami egy fenomenológikus elmélet, illetve a BCS-elmélet, ami egy mikroszkópikus leírást ad. A Ginzburg–Landau-elméletet

1950-ben dolgozták ki Vitaly Ginzburg<sup>1</sup> és Lev Landau<sup>2</sup> orosz fizikusok. Az elmélet jó leírást ad a szupravezetők makroszkópikus tulajdonságaira még olyan anyagoknál is, amikre a BCS-elmélet nem használható. Ilyenek például a magas hőmérsékletű szupravezetők és a nehéz fermion rendszerek. Az elméletből ezen kívül levezethető még az első- és másodfajú szupravezetők megkülönböztetése.

A BCS-elméletet John Bardeen<sup>3</sup>, Leon N. Cooper<sup>4</sup> és John Robert Schrieffer<sup>5</sup> amerikai fizikusok dolgozták ki, és publikálták 1957-ben. A BCS-elmélet egy mikroszkópikus leírásmódot ad a szupravezetés jelenségére. Az elmélet szerint a vezetési elektronok úgynevezett Cooper-párokat alkotnak a köztük lévő, rácsrezgések által közvetített, vonzó kölcsönhatás miatt. Először Cooper mutatta meg, hogy akármilyen gyenge vonzó kölcsönhatás mellett is a normál állapot instabil lesz, és az elektronok párokba rendeződnek. Az elektronok párokba rendeződését mérésekkel is igazolni lehet. A vezető részecskék töltése, így például a Josephson-frekvenciában szereplő töltés is kétszerese az elektron töltésének.

Szupravezetésnél a minta energiaspektrumában megjelenik egy „rés”, ez az úgynevezett *szupravezető gap*. Ez a gap a hőmérséklet csökkenésével nő, és 0 K-nél éri el a maximumát. Kialakulása fontos szerepet játszik a szupravezetésben. Azt tapasztaljuk, hogy ha a gap-et eltüntetjük például egy erős mágneses térrel, akkor a minta már nem szupravezet. A szupravezető gap értékének hőmérsékletfüggését a 2. ábrán láthatjuk. A gap jelenléte azt is jelenti, hogy kevés termikus gerjesztés van a szupravezető állapotban.



2. ábra. Szupravezető gap a hőmérséklet függvényében. [2]

<sup>1</sup>Vitaly Lazarevich Ginzburg, Nobel-díjas (2003) orosz fizikus

<sup>2</sup>Lev Davidovich Landau, Nobel-díjas (1962) orosz fizikus

<sup>3</sup>John Bardeen, kétszeres Nobel-díjas (1956 és 1972) amerikai mérnök és fizikus

<sup>4</sup>Leon N. Cooper, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

<sup>5</sup>John Robert Schrieffer, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

A dolgozat célja az, hogy a szupravezető gap jelenléte mellett vizsgáljuk a spin- és töltéskorrelációs függvényeket, és összehasonlítsuk őket a normál állapotban lévő függvényekkel. Hosszabb távon cél, hogy megértsük egy szupravezetőbe helyezett mágneses szennyezés körül kialakult úgynevezett Kondo-felhőben a spin-korrelációkat.

A dolgozatban először megnézzük a BCS Hamilton-operátor alakját, majd megmutatjuk, hogy ez transzformálható egy olyan alakra, ahol léptetőoperátorok jelennek meg, majd ezekkel a léptetőoperátorokkal felírjuk a korrelációs függvényeket. Azt fogjuk látni, hogy ezekben két független függvény jelenik meg, amiket kiszámolunk mind normál állapotban, mind szupravezető állapotban. Ezen függvények asszimptotikus viselkedését is megvizsgáljuk és analitikus közelítő függvényeket adunk meg közel- és távotérben. Végül ezek segítségével megkapjuk a spin- és töltéskorrelációs függvényeket normál- és szupravezető állapotban.

A számolásokhoz alapvető kvantumtérelméleti eszközöket használunk, részecske keltő és eltüntető operátorokat, illetve átlagtér közelítést. Ezen kívül a BCS-elmélet közelítéseivel is élünk.

## 2. Fizikai modell

### 2.1. A BCS Hamilton-operátor

A BCS-elmélet egy egyszerű átlagtér modellt alkalmaz a szupravezetők leírására. A Hamilton-operátort két részből építi fel, a  $H_0$  kinetikus és a  $H_{\text{int}}$  kölcsönhatási tagokból. A kinetikus tag

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow} \right), \quad (1)$$

ahol  $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  a  $(\mathbf{k}\sigma)$  sajátállapotú elektron keltő operátora és

$$\xi_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F$$

az elektron kinetikus energiája a Fermi-energiához viszonyítva.

A kölcsönhatási tagnál azt a közelítést vesszük, hogy az elektronok csak a Cooper-párokon belül hatnak kölcsön. Így  $H_{\text{int}}$  felírható úgy, mint a Cooper-párok  $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$  állapotból  $(\ell\uparrow, -\ell\downarrow)$  állapotba való átmenete,

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}, \ell} V_{\mathbf{k}\ell} c_{\ell\uparrow}^\dagger c_{-\ell\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}, \quad (2)$$

ahol  $V_{\mathbf{k}\ell}$  az átmenet valószínűségi amplitúdója. A BCS-elméletben ezt a valószínűséget úgy választjuk meg, hogy

$$V_{\mathbf{k}\ell} = \begin{cases} -V, & \text{ha } |\xi_{\ell}| < \hbar\omega_D \text{ és } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases},$$

ahol  $\omega_D$  a Debeye-frekvencia. Ez azt jelenti, hogy csak a Fermi-felület közelében lévő elektronok hatnak kölcsön.

Bardeen, Cooper és Schrieffer a Hamilton-operátor alapállapotát a következő variációs hullámfüggvénnyel közelítette,

$$|\tilde{\phi}\rangle \equiv \prod_{\mathbf{k}} \left( u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \right) |0\rangle, \quad (3)$$

ahol a  $|0\rangle$  vákuum állapotba helyezzünk be Cooper-párokat valamilyen amplitúdóval. Az  $u_{\mathbf{k}}$  és  $v_{\mathbf{k}}$  együtthatók általános esetben komplexek és ahhoz, hogy  $|\tilde{\phi}\rangle$  normálva legyen teljesülnie kell az

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1 \quad (4)$$

relációnak. Ezzel a formalizmussal a normál állapot hullámfüggvényét is felírhatjuk, ahol minden elektronállapot be van töltve a Fermi-felületig,

$$|\tilde{\phi}_n\rangle = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} |0\rangle, \quad (5)$$

ez az

$$u_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 0, & \text{ha } |\mathbf{k}| < k_F \\ 1, & \text{ha } |\mathbf{k}| > k_F \end{cases} \quad \text{és} \quad v_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 1, & \text{ha } |\mathbf{k}| < k_F \\ 0, & \text{ha } |\mathbf{k}| > k_F \end{cases} \quad (6)$$

együtthatóknak felel meg.

A (2)-ben lévő kölcsönhatást átlagtér közelítéssel átírhatjuk,

$$c_{\ell\uparrow}^{\dagger} c_{-\ell\downarrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \approx \langle c_{\ell\uparrow}^{\dagger} c_{-\ell\downarrow}^{\dagger} \rangle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\ell\uparrow}^{\dagger} c_{-\ell\downarrow}^{\dagger} \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle c_{\ell\uparrow}^{\dagger} c_{-\ell\downarrow}^{\dagger} \rangle \langle c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle. \quad (7)$$

Ezen kívül vezessük be a  $\Delta_{\mathbf{k}}$  mennyiséget,

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* \equiv \begin{cases} V \sum_{\ell}' \langle c_{\ell\uparrow}^{\dagger} c_{-\ell\downarrow}^{\dagger} \rangle, & \text{ha } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{egyébként} \end{cases}, \quad (8)$$

ahol  $\sum_{\ell}'$  azt jelöli, hogy az összegzés csak a  $|\xi_{\ell}| < \hbar\omega_D$  állapotokra történik. Ezután a fenti átlagtér közelítést alkalmazva (2) a következőképp közelíthető,

$$H_{\text{int}} \approx - \sum_{\mathbf{k}} \left( \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right) + \text{cst.} \quad (9)$$

Ezzel felírhatjuk a teljes BCS Hamilton-operátort,

$$H_{\text{BCS}} = H_0 + H_{\text{int}} \approx \sum_{\mathbf{k}} \left[ \xi_{\mathbf{k}} \left( c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\downarrow} \right) - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \right] + \text{cst.} \quad (10)$$

## 2.2. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai

A BCS Hamilton-operátor spektrumának meghatározásához azt léptetőoperátorok segítségével fejezzük ki,

$$H_{\text{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left( \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \gamma_{\mathbf{k}\downarrow} \right) + \text{cst}, \quad (11)$$

ahol a  $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$  operátorok a szupravezető-állapot kvázirészecskéinek léptetőoperátorai. Ezek kielégítik a következő relációkat,

$$\begin{aligned} \{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger} \} &= \{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'} \} = 0, \\ \{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger} \} &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \end{aligned} \quad (12)$$

ahol  $\{A, B\} = AB + BA$  az antikommutátor. Az alapállapotot az eltüntető operátoroknak a nullelembe kell vinniük, vagyis

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma} |\tilde{\phi}\rangle = 0. \quad (13)$$

Megmutatható, hogy a

$$\begin{aligned} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow} - v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \\ \gamma_{\mathbf{k}\downarrow} &= u_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\downarrow} + v_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger \end{aligned} \quad (14)$$

választással teljesülnek a (12) és (13) összefüggések.

A  $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$  operátorokra kapott (14) kifejezést invertálva megkaphatjuk a  $c_{\mathbf{k}\sigma}$  operátorokat is,

$$\begin{aligned} c_{\mathbf{k}\uparrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger, \\ c_{\mathbf{k}\downarrow} &= u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\uparrow}^\dagger. \end{aligned} \quad (15)$$

### 2.3. Az $u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ együtthatók meghatározása

Az  $u_{\mathbf{k}}$  és  $v_{\mathbf{k}}$  együtthatók meghatározásához a léptetőoperátorok tulajdonságait használjuk fel. A (11) egyenletből következik, hogy

$$[H_{\text{BCS}}, \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger] = E_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger. \quad (16)$$

A  $[H_{\text{BCS}}, \gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger]$  kommutátor kiszámolásához használjuk fel a (14) összefüggést, tehát számoljuk ki egyenként  $[H_{\text{BCS}}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger]$  és  $[H_{\text{BCS}}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}]$  értékét. A  $c_{\mathbf{k}\sigma}$  operátorok felcserélési relációjából könnyen belátható, hogy

$$[H_{\text{BCS}}, c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger] = \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} \quad (17)$$

és

$$[H_{\text{BCS}}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}] = -\xi_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger. \quad (18)$$

Így a (16) összefüggés tovább írható,

$$u_{\mathbf{k}}^* (\xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}) - v_{\mathbf{k}}^* (-\xi_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger) = E_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger - v_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow}), \quad (19)$$

amit egy lineáris egyenletrendszerként is felírhatunk,

$$\begin{pmatrix} \xi_{\mathbf{k}} & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & -\xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix} = E_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}}^* \\ v_{\mathbf{k}}^* \end{pmatrix}. \quad (20)$$

A sajátértékekre  $E_{\mathbf{k}} = \pm \sqrt{\xi_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2}$  adódik, amiből a pozitív előjelű feleltethető meg a felfelé léptető operátornak. Végül az  $u_{\mathbf{k}}$  és  $v_{\mathbf{k}}$  együtthatókra, figyelembevéve a (4) normálási feltételt,

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}^*}{\sqrt{2E_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})}} \quad \text{és} \quad v_{\mathbf{k}} = \frac{E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}}}{\sqrt{2E_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})}} \quad (21)$$

adódik.



## 2.4. Levágási séma

A BCS-elméletben  $\Delta_{\mathbf{k}}$  definíciója

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \Delta(\xi_{\mathbf{k}}) = \begin{cases} \Delta, & \text{ha } |\xi_{\mathbf{k}}| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{ha } |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_D \end{cases}, \quad (22)$$

ahol  $\omega_D$  a Debeye-frekvencia. Ez azt jelenti, hogy csak a Fermi-felület közelében lévő elektronok vesznek részt a szupravezetésben.

E helyett az éles levágás helyett mi egy sima függvényt használunk, így a számolás során kapott integrálokat egyszerűbben tudjuk kezelni. A használt levágás

$$w(\xi) = \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\hbar\omega_D}\right)^4 + 1} \quad (23)$$

alakú, ami az éles levágáshoz hasonlóan nagyjából a  $[-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D]$  tartományon nem zérus. A szupravezető gap impulzus- és energiafüggését mi is elhanyagoljuk, értékét konstans  $\Delta$ -nak választjuk. A legtöbb szupravezetőben  $|\Delta| \ll \hbar\omega_D \ll E_F$ , amit a számolásaink során ki is fogunk használni.

## 3. Korrelátorok számítása

A korrelátorok kiszámításához a  $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$  téroperátorokat használjuk. Ezek a  $c_{\mathbf{k}\sigma}$  operátorokhoz hasonlóan eltüntető operátorok, viszont  $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$  egy  $(\mathbf{k}\sigma)$  sajátállapotú részecske helyett egy  $(\mathbf{r}\sigma)$  sajátállapotút tüntet el az állapotfüggvényből. A téroperátorokat kifejezhetjük a korábban meghatározott kvázirészecske operátorokkal,

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\uparrow} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}), \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\downarrow} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} (u_{\mathbf{k}}^* \gamma_{\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}} \gamma_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}). \end{aligned} \quad (24)$$

A téroperátorok segítségével kifejezhetjük a töltés- és spinsűrűség operátorokat,

$$e \rho(\mathbf{r}) = e (\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) + \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r})) \quad (25)$$

és

$$s^{\alpha}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} (\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \quad \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r})) \sigma^{\alpha} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \\ \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (26)$$

ahol  $\alpha = x, y, z$ , és  $\sigma^{\alpha}$  a Pauli-mátrixokat jelöli, illetve  $\hbar = 1$  egységeket használunk.

### 3.1. Töltéskorreláció

Először a töltéssűrűség korrelációs függvényt vizsgáljuk. A (25) összefüggés alapján felírhatjuk a korrelációs függvényt,

$$e^2 \langle \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \rangle = e^2 \sum_{\sigma, \sigma'} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (27)$$

ahol a várható értékhez az  $\langle A \rangle = \langle \tilde{\phi} | A | \tilde{\phi} \rangle$  jelölést használtuk. Az összeg egyes tagjait kiszámolhatjuk (24) segítségével.

Először írjuk fel  $\langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle$ -t,

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \\ \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_3 \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_4 \mathbf{r}'} \cdot \\ &\quad \cdot \left\langle \left( u_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}_1}^* \gamma_{-\mathbf{k}_1 \downarrow} \right) \left( u_{\mathbf{k}_2}^* \gamma_{\mathbf{k}_2 \uparrow} + v_{\mathbf{k}_2} \gamma_{-\mathbf{k}_2 \downarrow}^{\dagger} \right) \right. \\ &\quad \left. \left( u_{\mathbf{k}_3} \gamma_{\mathbf{k}_3 \uparrow}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}_3}^* \gamma_{-\mathbf{k}_3 \downarrow} \right) \left( u_{\mathbf{k}_4}^* \gamma_{\mathbf{k}_4 \uparrow} + v_{\mathbf{k}_4} \gamma_{-\mathbf{k}_4 \downarrow}^{\dagger} \right) \right\rangle. \end{aligned} \quad (28)$$

Kihasználhatjuk, hogy  $\gamma_{\mathbf{k}\sigma} | \tilde{\phi} \rangle = 0$  és  $\langle \tilde{\phi} | \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} = 0$ , amivel

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \\ \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_3 \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_4 \mathbf{r}'} \cdot \\ &\quad \cdot \left( \langle v_{\mathbf{k}_1}^* u_{\mathbf{k}_2}^* u_{\mathbf{k}_3} v_{\mathbf{k}_4} \cdot \gamma_{-\mathbf{k}_1 \downarrow} \gamma_{\mathbf{k}_2 \uparrow} \gamma_{\mathbf{k}_3 \uparrow}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k}_4 \downarrow}^{\dagger} \rangle + \langle v_{\mathbf{k}_1}^* v_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_3}^* v_{\mathbf{k}_4} \cdot \gamma_{-\mathbf{k}_1 \downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}_4 \downarrow}^{\dagger} \gamma_{-\mathbf{k}_3 \downarrow} \gamma_{-\mathbf{k}_4 \downarrow}^{\dagger} \rangle \right) \end{aligned} \quad (29)$$

adódik. Ezután felhasználhatjuk a (12) összefüggést, illetve azt, hogy

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma} \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^{\dagger} | \tilde{\phi} \rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} | \tilde{\phi} \rangle.$$

Ezekkel a végső alak

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \\ &= \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} |u_{\mathbf{k}}|^2 \right) + \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \right)^2. \end{aligned} \quad (30)$$

A többi korrelátort is hasonlóan kiszámíthatjuk, azokra

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \\ &= \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} |v_{\mathbf{k}}|^2 \right) \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} |u_{\mathbf{k}}|^2 \right) + \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \right)^2, \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \\ &= \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \right) \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right) + \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \right)^2, \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \\ &= \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \right) \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \right) + \left( \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \right)^2 \end{aligned} \quad (33)$$

adódnak.

Az eredmények megértéséhez számoljuk ki a  $\langle \psi_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle$  alakú különféle korrelátorokat is. Ezeket az előzőekhez hasonlóan tehetjük meg, végeredményül

$$\begin{aligned}
 G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &\equiv \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle = \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} |v_{\mathbf{k}}|^2, \\
 \langle \psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle &= \langle \psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\
 F(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &\equiv \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle = -\langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*, \\
 \langle \psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle &= -\langle \psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle = F^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),
 \end{aligned} \tag{34}$$

adódnak, ahol bevezettük az  $F(\mathbf{r})$  és  $G(\mathbf{r})$  függvényeket,

$$F(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \quad \text{és} \quad G(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} |v_{\mathbf{k}}|^2. \tag{35}$$

A nem felírt korrelátorok mind eltűnnek. Ezekkel kifejezve a korábbi eredményeket,

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle &= \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle \langle \psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle + \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle, \\
 \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle &= \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle \langle \psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle + \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle, \\
 \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle &= -\langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle \langle \psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle + \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle, \\
 \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle &= -\langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}') \rangle \langle \psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle + \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}) \rangle \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle,
 \end{aligned} \tag{36}$$

az  $F(\mathbf{r})$  és  $G(\mathbf{r})$  függvényekkel kifejezve

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle &= G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot (\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) + G^2(0), \\
 \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle &= G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot (\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')) + G^2(0), \\
 \langle \psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}') \rangle &= |F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 + G^2(0), \\
 \langle \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}') \rangle &= |F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 + G^2(0).
 \end{aligned} \tag{37}$$

A (36) összefüggésben felismerhetjük a Wick-tételt, ami szerint a téroperátorok szorzatának várható értékét föl lehet írni úgy, mint az összes lehetséges párosítás összegét.

A töltéskorrelációs függvényt így felírhatjuk az  $F(\mathbf{r})$  és  $G(\mathbf{r})$  függvények segítségével,

$$e^2 \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}') \rangle = e^2 \left( 4 G^2(0) + 2 |F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 - 2 G^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + 2 G(0) \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right). \tag{38}$$

A konstans tagok számunkra nem érdekesek, ezért használjuk a  $\delta\rho(\mathbf{r})$  sűrűség operátorokat a korrelációs függvényhez. Felhasználva, hogy  $\langle \rho(\mathbf{r}) \rangle = 2 G(0) \equiv \langle \rho \rangle$  a töltéskorrelációs függvény

$$e^2 \langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(\mathbf{r}') \rangle = e^2 \left( 2 |F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 - 2 G^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + \langle \rho \rangle \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right). \tag{39}$$

### 3.2. Spinkorreláció

A teljes spinkorrelációs függvény egyszerűen az egyes irányok spinkorrelációs függvényeinek összege. A (26) operátorokat felhasználva

$$\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(\mathbf{r}') \rangle = \sum_{\alpha} \langle s^{\alpha}(\mathbf{r}) s^{\alpha}(\mathbf{r}') \rangle. \quad (40)$$

Az egyes tagokat hasonlóan számíthatjuk ki, mint a töltéskorrelációs függvényénél. Először számoljuk ki  $\langle s^z(\mathbf{r}) s^z(\mathbf{r}') \rangle$  értékét,

$$\begin{aligned} \langle s^z(\mathbf{r}) s^z(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{4} & \left( \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle - \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \rangle - \right. \\ & \left. - \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle + \langle \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\downarrow}(\mathbf{r}') \rangle \right), \end{aligned} \quad (41)$$

ami a (37) összefüggéseket felhasználva

$$\langle s^z(\mathbf{r}) s^z(\mathbf{r}') \rangle = \frac{1}{2} \left( -|F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 - G^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + G(0) \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right). \quad (42)$$

Az  $\langle s^x(\mathbf{r}) s^x(\mathbf{r}') \rangle$  és  $\langle s^y(\mathbf{r}) s^y(\mathbf{r}') \rangle$  korrelátorokat kiszámolva azt látjuk, hogy azok értéke megegyezik  $\langle s^z(\mathbf{r}) s^z(\mathbf{r}') \rangle$  értékével, így a teljes spinkorrelációs függvény

$$\begin{aligned} \langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(\mathbf{r}') \rangle &= \frac{3}{2} \left( -|F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 - G^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + G(0) \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right) \\ &= \frac{3}{4} \left( \langle \delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(\mathbf{r}') \rangle - 4|F(\mathbf{r} - \mathbf{r}')|^2 \right). \end{aligned} \quad (43)$$

## 4. Az $F(\mathbf{r})$ és $G(\mathbf{r})$ függvények meghatározása

### 4.1. Normál állapot

Először a normál állapotban vizsgáljuk az  $F(\mathbf{r})$  és  $G(\mathbf{r})$  függvények alakját. Ehhez  $u_{\mathbf{k}}$  és  $v_{\mathbf{k}}$  értékre a már korábban felírt (6) értékeket használjuk.

A (34) összefüggés értelmében  $F(\mathbf{r})$  értéke

$$F_{\text{n}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*. \quad (44)$$

A (6) értékeket behelyettesítve azt látjuk, hogy normál állapotban a függvény értéke  $F_{\text{n}}(\mathbf{r}) \equiv 0$ , tehát nincs szupravezető párkorreláció.

A  $G(\mathbf{r})$  függvény meghatározásához a (34) összefüggést felhasználva

$$G_{\text{n}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} |v_{\mathbf{k}}|^2 \quad (45)$$

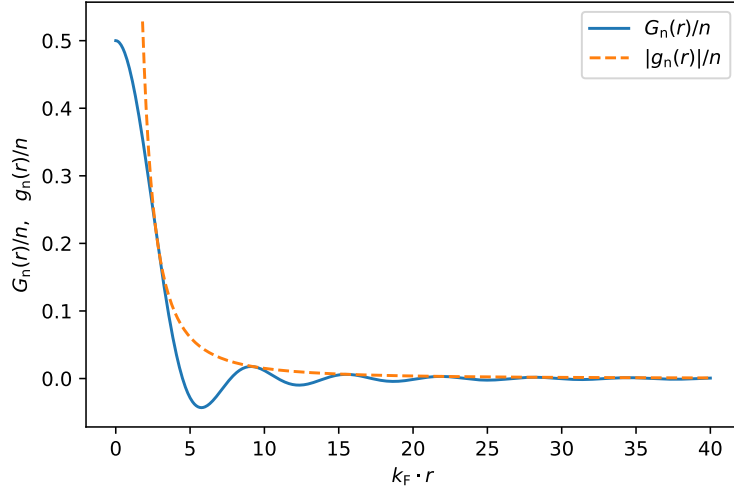
adódik, ide a (6) értékeket behelyettesítve

$$\begin{aligned} G_{\text{n}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{k}| < k_{\text{F}}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{r} \int_0^{k_{\text{F}}} dk \, k \sin(kr) = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{\sin(k_{\text{F}}r) - k_{\text{F}}r \cos(k_{\text{F}}r)}{r^3}. \end{aligned} \quad (46)$$

A továbbiakban hasznos lesz, ha a  $k_F r$  szerinti oszcillációt figyelmen kívül hagyjuk és a függvény burkolóját vizsgáljuk. Ehhez vezessük be a  $g_n(r)$  komplex függvényt, amivel  $G_n(\mathbf{r})$  a következő alakban írható,

$$G_n(\mathbf{r}) = \text{Im}\{g_n(r) \cdot e^{ik_F r}\}, \quad g_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{1 - ik_F r}{r^3}. \quad (47)$$

Így  $|g_n(\mathbf{r})|$  nem más, mint  $G_n(\mathbf{r})$  burkológörbéje. A  $G_n(\mathbf{r})$  és  $g_n(r)$  függvényeket a 3. ábrán láthatjuk. A függvényeket az  $n$  részecskesűrűséggel normáltuk.



3. ábra. A  $G_n(\mathbf{r})$  és  $|g_n(\mathbf{r})|$  függvények normált értéke  $k_F r$  függvényében.

## 4.2. A szupravezető állapot belüli korrelációk

### 4.2.1. Az $F(\mathbf{r})$ függvény szupravezető belüli alakja

Ugyanúgy, mint korábban, itt is írjuk fel a (34) összefüggés alapján a szupravezető állapotban  $F(\mathbf{r})$  értékét. A számolás során felhasználjuk a (21) értékeket, illetve a (23) levágást.

$$\begin{aligned} F(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}}' e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\omega_D}\right)^4 + 1} = \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \int_0^\infty \frac{dk}{(2\pi)^3} k^2 \sin \vartheta e^{-ikr \cos \vartheta} \frac{\Delta^*}{2\sqrt{|\Delta|^2 + \xi^2}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} = \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{r} \text{Im} \left\{ \int_0^\infty dk k e^{ikr} \frac{\Delta^*}{2\sqrt{|\Delta|^2 + \xi^2}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} \right\} \end{aligned} \quad (48)$$

Mivel a Fermi-felülethez közeli tartományon integrálunk, közelíthetjük a kitevőben lévő  $k$  értékét az alábbi módon,

$$k = \sqrt{2m(E_F + \xi)} \approx k_F + \frac{\xi}{v_F}, \quad (49)$$

ahol  $v_F = \frac{k_F}{m}$  a Fermi-sebesség.

A integrálban tényezőként lévő  $k$  értékét egyszerűen  $k_F$ -el közelítjük, mert a pontosabb közelítésből csak egy elhanyagolható nagyságú korrekció származna.

Még érdemes bevezetni a  $\Delta$  és  $\omega_D$  energiákhoz tartozó hosszskalákat, a szupravezető korrelációs hosszát és a Debeye hullámhosszat,

$$\xi_c \equiv \frac{v_F}{|\Delta|} \quad \text{és} \quad \lambda_D \equiv \frac{v_F}{\omega_D}, \quad (50)$$

illetve az  $r$  és  $\lambda_D$  szupravezető korrelációs hosszhoz viszonyított értékét,

$$\tilde{r} \equiv \frac{r}{\xi_c} \quad \text{és} \quad \tilde{\lambda}_D \equiv \frac{\lambda_D}{\xi_c}. \quad (51)$$

Mindezeket felhasználva

$$F(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \operatorname{Im} \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \quad k_F e^{ik_F r} e^{i\xi \frac{r}{v_F}} \frac{\Delta^*}{2\sqrt{|\Delta|^2 + \xi^2}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} \right\}. \quad (52)$$

Az integrált az  $x = \frac{\xi}{|\Delta|}$  változó szerint átírva a következő kifejezést kapjuk,

$$F(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \operatorname{Im} \left\{ e^{ik_F r} \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad e^{i\tilde{r}x} \frac{1}{2\sqrt{1+x^2}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D x)^4 + 1} \right\}. \quad (53)$$

A továbbiakban jelöljük az itt megjelenő integrált  $I$ -vel. Ha az integrált kiterjesztjük a komplex síkra azt látjuk, hogy a  $\sqrt{1+x^2}$  miatt a képzetes tengely mentén az integrandusnak szakadása van, illetve a  $\frac{1}{(\tilde{\lambda}_D x)^4 + 1}$  tényező miatt négy pontban pólusok jelennek meg.

Az integrálási görbét transzformáljuk úgy, hogy az a képzetes tengely menti szakadást kerülvegye. Az integrálási változót  $x = iy$  szerint transzformálva az integrál

$$I = \int_1^{\infty} dy \quad \frac{1}{\sqrt{y^2 - 1}} e^{-\tilde{r}y} \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} + R_1 + R_2, \quad (54)$$

ahol  $R_1$  és  $R_2$  az  $x_1 = \frac{i+1}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}$  és  $x_2 = \frac{i-1}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}$  pont beli reziduumok járulékát jelöli.

A reziduumok járulékát könnyen felírhatjuk,

$$R_1 = 2\pi i e^{i\tilde{r}x_1} \frac{1}{2\sqrt{1+x_1^2}} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_1^3} \approx -\frac{i\pi}{4} \exp\left(i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \quad (55)$$

és

$$R_2 = 2\pi i e^{i\tilde{r}x_2} \frac{1}{2\sqrt{1+x_2^2}} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_2^3} \approx \frac{i\pi}{4} \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (56)$$

A kettő összege

$$R_1 + R_2 \approx \frac{\pi}{2} \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \cos\left(\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (57)$$

A képzetes tengely menti integrál értékét vizsgáljuk meg  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  és  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  esetekben. Az  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  távolféteri közelítésben az integrálból kihagyhatjuk a levágást, mivel az exponenciális rész sokkal gyorsabban vág le. Ezzel az integrált meghatározhatjuk,

$$I \approx \int_1^\infty dy \frac{1}{\sqrt{y^2 - 1}} e^{-\tilde{r}y} = K_0(\tilde{r}), \quad (58)$$

ahol  $K_n(x)$  a másodfajú módosított Bessel-függvényeket jelöli. A reziduuumok járuléka  $\exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right)$  szerint cseng le távolféterben, ami sokkal gyorsabb, mint  $K_0(\tilde{r} \gg 1) \sim \frac{\exp(-\tilde{r})}{\sqrt{\tilde{r}}}$  lecsengése, tehát itt azoktól is eltekinthetünk. Így végül távolféterben az  $F(\mathbf{r})$  függvény alakja

$$F(\mathbf{r}) \stackrel{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \cdot K_0(\tilde{r}) \cdot \sin(k_F r) \stackrel{\tilde{r} \gg 1}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \sqrt{\frac{\pi}{2\tilde{r}}} \cdot e^{-\tilde{r}} \cdot \sin(k_F r). \quad (59)$$

Az  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  közeltéri közelítésben az integrálban lévő exponenciális függvényt sorba fejthetjük  $\tilde{r}$  szerint,

$$\begin{aligned} \int_1^\infty dy \frac{1}{\sqrt{y^2 - 1}} (1 - \tilde{r}y) \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} = \\ = \int_1^\infty dy \frac{1}{\sqrt{y^2 - 1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} - \tilde{r} \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2 - 1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1}, \end{aligned} \quad (60)$$

és kapott integrálokat numerikusan könnyen kiértékelhetjük.

A  $G_n(\mathbf{r})$  számolásához hasonlóan itt is bevezethetünk egy  $f(r)$  komplex mennyiséget, ami az  $F(\mathbf{r})$  függvény burkolóját jellemzi. A (53) összefüggés alapján felírhatjuk, hogy

$$f(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \cdot I \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \cdot \begin{cases} K_0(\tilde{r}), & \text{ha } \tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D \\ A - B \cdot \tilde{r} + R_1 + R_2, & \text{ha } \tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D \end{cases}, \quad (61)$$

ahol  $A$  és  $B$  az (60) összefüggésben szereplő integrálok értékei. Ezzel az  $F(\mathbf{r})$  függvény

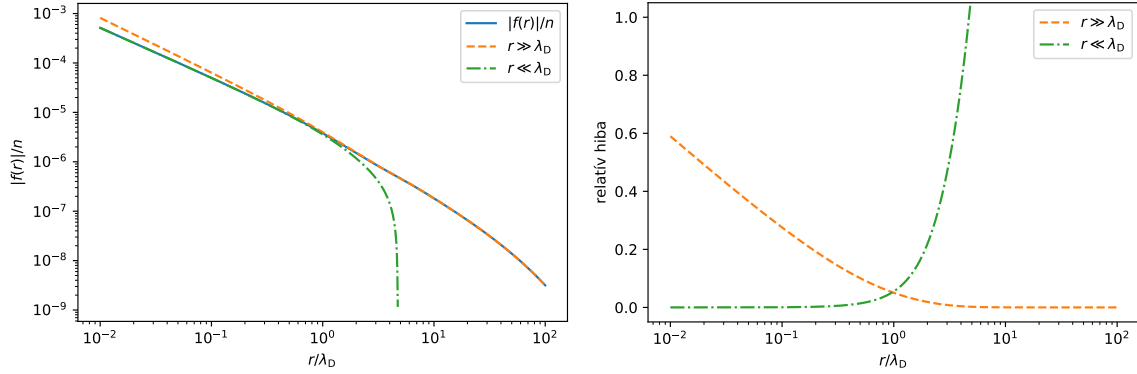
$$F(\mathbf{r}) = \text{Im}\{e^{ik_F r} \cdot f(r)\} \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \text{Im}\left\{\frac{\Delta^*}{|\Delta|} \cdot e^{ik_F r}\right\} \cdot \begin{cases} K_0(\tilde{r}), & \text{ha } \tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D \\ A - B \cdot \tilde{r} + R_1 + R_2, & \text{ha } \tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D \end{cases}, \quad (62)$$

Az analitikus eredmények ellenőrzésére a (53) összefüggés alapján numerikusan is kiszámoltuk  $f(r)$  értékét, és összehasonlítottuk a kapott közelítések értékével. A számolás során a  $|\Delta| : \omega_D : E_F = 1 : 100 : 10000$  energia arányokat használtuk. A kapott függvényeket a 4a. ábrán láthatjuk. Az ábrázoláshoz log-log skálát használtunk, hogy jobban elkülönüljenek a görbék.

Az ábrázolt görbéken azt látjuk, hogy a közel- és távolféteri közelítések jól illeszkednek a numerikus eredményhez a megfelelő tartományokban. Ezt úgy is ellenőrizhetjük, hogy a közelítő függvények relatív eltérését ábrázoljuk  $r$  függvényében. Az eltérés meghatározásához használt képlet távolféteri esetben

$$\delta f_{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}(r) = \left| \frac{f(r) - \tilde{f}_{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}(r)}{f(r)} \right|,$$

és közeltéri esetben is egy ugyanilyen képletet használtunk. A relatív eltéréseket a 4b. ábrán láthatjuk.



(a) Az  $|f(r)|$  értéke  $r$  függvényében, illetve a közel- és távolférfi közelíté függvények. (b) Az  $f(r)$ -t közelíté függvények relatív hibája  $r$  függvényében.

4. ábra

#### 4.2.2. A $G(\mathbf{r})$ függvény szupravezető beli alakja

A  $G(\mathbf{r})$  függvény szupravezető beli alakjának kiszámolásához két mennyiséget kell meghatározunk. Először a  $\tilde{G}_n(\mathbf{r})$  függvényt, ami a normál állapotban lévő  $G_n(\mathbf{r})$  függvénynek a levágással vett járuléka, a  $\tilde{G}_{SC}(\mathbf{r})$  függvényt, ami a szupravezető állapotban a levágással számolt járuléka. Ezekkel a függvényekkel ezután kifejezhetjük a szupravezető állapotban a teljes  $G(\mathbf{r})$  függvényt,

$$G(\mathbf{r}) = G_n(\mathbf{r}) - \tilde{G}_n(\mathbf{r}) + \tilde{G}_{SC}(\mathbf{r}). \quad (63)$$

A  $\tilde{G}_n(\mathbf{r})$  járuléka kiszámolásánál hasonlóan járunk el, mint korábban,

$$\tilde{G}_n(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\omega_D}\right)^4 + 1} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{r} \text{Im} \left\{ \int_0^{k_F} dk \, k e^{ikr} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} \right\}. \quad (64)$$

Itt is elvégezhetjük a (49) közelítést azzal a különbséggel, hogy a szorzó tényezőként megjelenő  $k$  értéket is pontosabban közelítjük. Erre azért van szükség, mert az integrál vezető rendet követő tagjait is pontosan kell közelítenünk. A közelíté mennyiségeket behelyettesítve

$$\tilde{G}_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^0 d\xi \left( k_F + \frac{\xi}{v_F} \right) e^{ik_F r} e^{i\xi \frac{r}{v_F}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} \right\}. \quad (65)$$

Az integrált  $x = \frac{\xi}{|\Delta|}$  változó szerint átírva így

$$\tilde{G}_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \text{Im} \left\{ e^{ik_F r} \int_{-\infty}^0 dx \left( 1 + \frac{x}{k_F \xi_c} \right) e^{i\tilde{r}x} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\tilde{\lambda}_D x}{\tilde{\lambda}_D}\right)^4 + 1} \right\}. \quad (66)$$

A továbbiakban jelöljük az itt megjelenő integrált  $I_n$ -el. Hasonlóan az  $F(\mathbf{r})$  számolásához itt is transzformáljuk az integrálási görbét a komplex síkon úgy, hogy a képzetes tengely



mentén integráljunk. Most is megjelennik egy reziduum az  $x_2 = \frac{i-1}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}$  pontban, így  $I_n$  értéke

$$I_n = \int_0^\infty dy \left( -i + \frac{y}{k_F \xi_c} \right) e^{-\tilde{r}y} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} + R_{2n}, \quad (67)$$

ahol

$$R_{2n} = 2\pi i \left( 1 + \frac{x_2}{k_F \xi_c} \right) e^{i\tilde{r}x_2} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_2^3} = \left( -\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{2k_F \xi_c \tilde{\lambda}_D^2} \right) \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (68)$$

Vizsgáljuk meg az integrál értékét  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  és  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  közelítések mellett is. Az  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  távolféltéri közelítésben a levágást elhanyagolhatjuk, tehát az integrál értéke

$$\int_0^\infty dy \left( -i + \frac{y}{k_F \xi_c} \right) e^{-\tilde{r}y} = -\frac{i}{\tilde{r}} + \frac{1}{k_F \xi_c \tilde{r}^2}, \quad (69)$$

míg az  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  közeltéri közelítésben az exponenciális tagot sorba fejthetjük, tehát az integrál értéke

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy \left( -i + \frac{y}{k_F \xi_c} \right) (1 - \tilde{r}y) \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} = \\ = \frac{-i\pi}{2\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D} + \frac{\pi}{4k_F \xi_c \tilde{\lambda}_D^2} - \tilde{r} \cdot \left( \frac{-i\pi}{4\tilde{\lambda}_D^2} + \frac{\pi}{2\sqrt{2}k_F \xi_c \tilde{\lambda}_D^3} \right) \end{aligned} \quad (70)$$

A szupravezető állapot  $\tilde{G}_{SC}(\mathbf{r})$  járuléka is hasonlóan számítható, a levezetésben annyi különbség van, hogy a (49) közelítést nem alkalmazzuk az integrálban tényezőként megjelenő  $k$ -ra. Az  $x = \frac{\xi}{|\Delta|}$  változó szerint felírt integrállal a  $G_{SC}(\mathbf{r})$  függvény értéke

$$\tilde{G}_{SC}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \text{Im} \left\{ e^{ik_F r} \int_{-\infty}^\infty dx \frac{\sqrt{1+x^2} - x}{2\sqrt{1+x^2}} e^{i\tilde{r}x} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D x)^4 + 1} \right\}. \quad (71)$$

A továbbiakban jelöljük a zárójel belüli integrált  $I_{SC}$ -vel. Hasonlóan a korábbi számításokhoz, itt is transzformáljuk az integrálási görbét úgy, hogy a képzetes tengely mentén integráljunk. Az integrál értéke

$$I_{SC} = \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2 - 1}} e^{-\tilde{r}y} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} + R_{1SC} + R_{2SC} \quad (72)$$

lesz, ahol  $R_{1SC}$  és  $R_{2SC}$  az  $x_1 = \frac{i+1}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}$  és  $x_2 = \frac{i-1}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}$  pontokban lévő reziduumok járuléka,

$$R_{1SC} = 2\pi i \left( \frac{1}{2} - \frac{x_1}{2\sqrt{1+x_1^2}} \right) e^{i\tilde{r}x_1} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_1^3} \approx \frac{i\pi}{4x_1} \exp\left(i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right), \quad (73)$$

és

$$R_{2SC} = 2\pi i \left( \frac{1}{2} - \frac{x_2}{2\sqrt{1+x_2^2}} \right) e^{i\tilde{r}x_2} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_2^3} \approx -\frac{i\pi x_2}{2} \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (74)$$

A kettő összege

$$R_{1\text{SC}} + R_{2\text{SC}} \approx R_{2\text{SC}} = \frac{\pi(1+i)}{2\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D} \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (75)$$

A képzetes tengely menti integrál értékét itt is vizsgáljuk meg  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  és  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  tartományokban. Távoltéri közelítésben az integrálból kihagyhatjuk a levágást, mivel az exponenciális rész sokkal gyorsabban vág le. Ezzel az integrál értéke

$$\int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2-1}} e^{-\tilde{r}y} = K_1(\tilde{r}). \quad (76)$$

Közelítéri közelítésben az integrálban lévő exponenciális függvényt sorba fejthetjük  $\tilde{r}$  szerint,

$$\begin{aligned} \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2-1}} (1-\tilde{r}y) \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} = \\ = \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2-1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} - \tilde{r} \int_1^\infty dy \frac{y^2}{\sqrt{y^2-1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1}, \end{aligned} \quad (77)$$

és a kapott integrálokat numerikusan kiértékelhetjük.

A már korábban bevezetett  $g_n(r)$ -hez hasonlóan itt is definiálhatunk burkoló mennyiségeket,

$$\tilde{g}_n(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot I_n, \quad \tilde{g}_{\text{SC}}(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot I_{\text{SC}}, \quad (78)$$

és a teljes  $G(\mathbf{r})$  függvény  $g(r)$  burkolóját kifejezhetjük ezekkel,

$$g(r) = g_n(r) - \tilde{g}_n(r) + \tilde{g}_{\text{SC}}(r). \quad (79)$$

Vizsgáljuk meg ennek a függvénynek a távol- és közelítéri értékeit. Távolterben a (69) és (76) összefüggéseket használhatjuk,

$$\begin{aligned} g(r) \stackrel{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left( \frac{1-ik_F r}{r^3} - \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot \left( -\frac{i}{\tilde{r}} + \frac{1}{k_F \xi_c \tilde{r}^2} \right) + \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}) \right) = \\ = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}). \end{aligned} \quad (80)$$

Azt látjuk, hogy távolterben a  $g_n(r)$  teljesen kiesik, és csak a szupravezető járulék marad meg,

$$g(r) \stackrel{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}), \quad (81)$$

ezzel a  $G(\mathbf{r})$  függvényt felírva

$$G(\mathbf{r}) \stackrel{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}) \cdot \sin(k_F r) \stackrel{\tilde{r} \gg 1}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \sqrt{\frac{\pi}{2\tilde{r}}} \cdot e^{-\tilde{r}} \cdot \sin(k_F r). \quad (82)$$

Közel térben a (70) és (77) összefüggéseket használhatjuk,

$$g(r) \stackrel{\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left( \frac{1 - ik_F r}{r^3} + \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot (A - B \cdot \tilde{r} - R_{2n} + R_{1SC} + R_{2SC}) \right), \quad (83)$$

ahol  $A$  és  $B$  az egyes eseteknél számolt együtthatók különbsége. Mivel  $r \ll \lambda_D \ll \xi_c$ , itt a második tag csak kis korrekciót ad,

$$g(r) \stackrel{\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D}{\approx} \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{1 - ik_F r}{r^3}. \quad (84)$$

Végül  $g(r)$  segítségével felírhatjuk a  $G(\mathbf{r})$  függvény alakját,

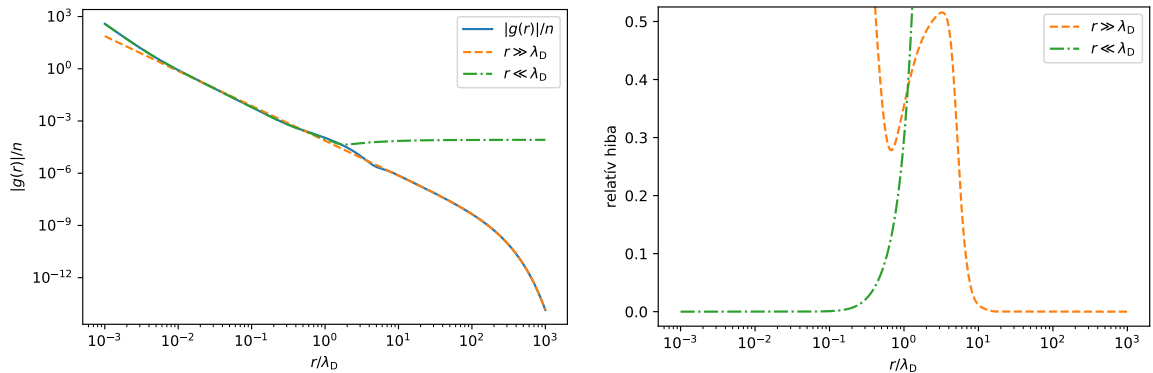
$$G(\mathbf{r}) = \text{Im}\{e^{ik_F r} \cdot g(r)\} \approx \frac{1}{2\pi^2} \cdot \begin{cases} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}) \cdot \sin(k_F r), & \text{ha } \tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D \\ \frac{\sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r)}{r^3}, & \text{ha } \tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D \end{cases} \quad (85)$$

Az eredmények ellenőrzésére  $g(r)$  értékét numerikusan is kiszámoltuk, és összehasonlítottuk a kapott közelítések értékével. A számolás során a  $|\Delta| : \omega_D : E_F = 1 : 100 : 10000$  energia arányokat használtuk. A kapott függvényeket az 5a. ábrán láthatjuk. Az ábrázoláshoz log-log skálát használtunk.

Az ábrázolt görbéken azt látjuk, hogy a közel- és távolféri közelítések jól illeszkednek a numerikus eredményhez a megfelelő tartományokban. Ezt úgy is ellenőrizhetjük, hogy a közelítő függvények  $g(r)$ -től való relatív eltérését kiszámoljuk. Az eltérés meghatározásához használt képlet távolféri esetben

$$\delta g_{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}(r) = \left| \frac{g(r) - g_{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}(r)}{g(r)} \right|,$$

és közelféri esetben is egy ugyanilyen képletet használtunk. A relatív eltéréseket az 5b. ábrán láthatjuk.



(a) A  $|g(r)|$  értéke  $r$  függvényében, illetve a közel- és távolféri közelítő függvények.

(b) A  $g(r)$ -t közelítő függvények relatív hibája  $r$  függvényében.

5. ábra

## 5. Spin- és töltéskorrelációs függvények

A spin- és töltéskorrelációs függvényeket már korábban kifejeztük az  $F(\mathbf{r})$  és  $G(\mathbf{r})$  függvények segítségével, így azokat egyszerűen ki tudjuk számolni ezek segítségével. Itt is érdemes burkoló görbéket számolni, amik egyszerűen  $|f(r)|^2$  és  $|g(r)|^2$  lesznek. A korrelációs függvények burkolójára használjuk az alábbi jelölést,

$$e^2 \overline{\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle} \quad \text{és} \quad \overline{\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle}. \quad (86)$$

A burkolókat így könnyen felírhatjuk a (39) és (43) összefüggések segítségével,

$$\begin{aligned} e^2 \overline{\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle} &= 2e^2 \left( |f(r)|^2 - |g(r)|^2 \right), \\ \overline{\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle} &= \frac{3}{2} \left( -|f(r)|^2 - |g(r)|^2 \right). \end{aligned} \quad (87)$$

### 5.1. Töltéskorrelációs függvény

A töltéskorrelációs függvény burkolóját a (87) összefüggés szerint számolhatjuk ki. Itt is vizsgáljuk az  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  és  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  tartományokat. Az  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  távolféri közelítésben

$$\begin{aligned} |f(r)|^2 &\approx \left( \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot K_0^2(\tilde{r}), \\ |g(r)|^2 &\approx \left( \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot K_1^2(\tilde{r}), \end{aligned} \quad (88)$$

tehát a töltéskorrelációs függvény burkolója

$$\begin{aligned} e^2 \overline{\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle} &\stackrel{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}{\approx} 2e^2 \left( \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot (K_0^2(\tilde{r}) - K_1^2(\tilde{r})) \\ &\stackrel{\tilde{r} \gg 1}{\approx} -2e^2 \left( \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \frac{\pi}{2\tilde{r}^2} \exp(-2\tilde{r}). \end{aligned} \quad (89)$$

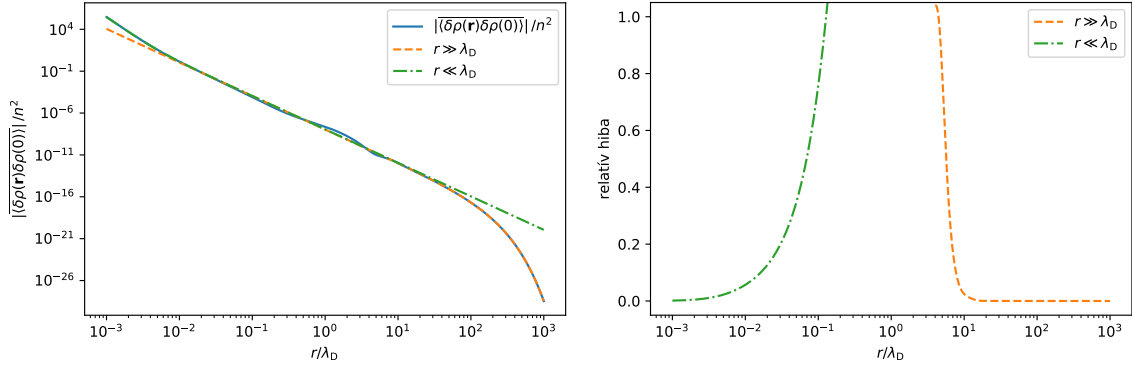
Az  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  közeltéri közelítésben

$$\begin{aligned} |g(r)|^2 &\approx \left( \frac{1}{2\pi^2} \right)^2 \cdot \frac{1 + (k_F r)^2}{r^6}, \\ |f(r)|^2 &\ll |g(r)|^2, \end{aligned} \quad (90)$$

amivel a töltéskorrelációs függvény burkolója

$$e^2 \overline{\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle} \stackrel{\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D}{\approx} -2e^2 \left( \frac{1}{2\pi^2} \right)^2 \cdot \frac{1 + (k_F r)^2}{r^6}. \quad (91)$$

A korábbiakhoz hasonlóan a korrelációs függvényt numerikusan is ellenőriztük. A számolás során itt is a  $|\Delta| : \omega_D : E_F = 1 : 100 : 10000$  energia arányokat használtuk. A  $\overline{\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle}$  burkoló függvényt a közelítő függvényekkel együtt, illetve a közelítések relatív hibáit a 6. ábrán láthatjuk. A haszált közelítő függvények itt is jól illeszkednek a megfelelő tartományokban a numerikusan számolt görbéhez.



(a) A töltéskorrelációs függvény burkoló görbéje az  $r$  függvényében, illetve a közel- és távolférfi közelítő függvények.

(b) A töltéskorrelációs függvény burkoló görbéjét közelítő függvények relatív hibája  $r$  függvényében.

6. ábra

## 5.2. Spinkorrelációs függvény

A spinkorrelációs függvény burkolóját a (87) összefüggés alapján számolhatjuk ki. Az  $\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D$  távolférfi közelítésben a (88) összefüggést használjuk fel, amivel a spinkorrelációs függvény

$$\begin{aligned} \overline{\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle} &\stackrel{\tilde{r} \gg \tilde{\lambda}_D}{\approx} -\frac{3}{2} \left( \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot (K_0^2(\tilde{r}) + K_1^2(\tilde{r})) \\ &\stackrel{\tilde{r} \gg 1}{\approx} -\frac{3}{2} \left( \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \frac{\pi}{\tilde{r}} \exp(-2\tilde{r}). \end{aligned} \quad (92)$$

Az  $\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D$  közelférfi közelítésben a (90) összefüggés alapján a spinkorrelációs függvény

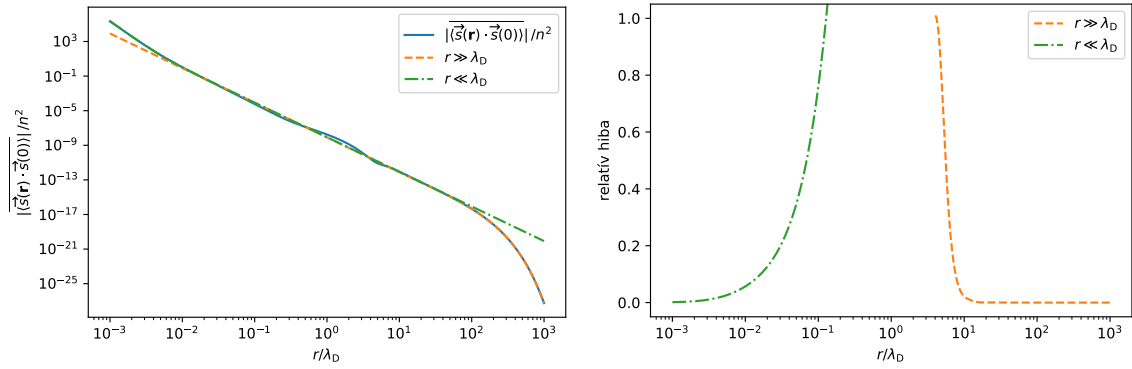
$$\overline{\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle} \stackrel{\tilde{r} \ll \tilde{\lambda}_D}{\approx} -\frac{3}{2} \left( \frac{1}{2\pi^2} \right)^2 \cdot \frac{1 + (k_F r)^2}{r^6}. \quad (93)$$

Itt is csináltunk egy numerikus ellenőrzést ugyanolyan paraméterekkel, mint a töltéskorrelációs függvény esetén. Az  $\overline{\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle}$  burkoló függvényt a közelítő függvényekkel együtt, illetve a közelítések relatív hibáit a 7. ábrán láthatjuk. A használt közelítő függvények itt is jól illeszkednek a megfelelő tartományokban.

## 6. Konklúzió

## Hivatkozások

- [1] OpenStax College. (2017). *College Physics*. OpenStax College.  
<https://openstax.org/details/books/college-physics-ap-courses>
- [2] Electric control of superconducting transition through a spin-orbit coupled interface - Scientific Figure on ResearchGate.  
[https://www.researchgate.net/figure/Sketch-of-the-superconducting-gap-D-as-a-function-of-temperature-T-for-a-superconducting\\_fig3\\_305412985](https://www.researchgate.net/figure/Sketch-of-the-superconducting-gap-D-as-a-function-of-temperature-T-for-a-superconducting_fig3_305412985)



(a) A spinkorrelációs függvény burkoló görbéje az  $r$  függvényében, illetve a közel- és távoltéri közelítő függvények.

(b) A spinkorrelációs függvény burkoló görbáját közelítő függvények relatív hibája  $r$  függvényében.

7. ábra