

Szupravezetőbeli spin- és töltéskorrelációk elméleti vizsgálata

BSc szakdolgozat

Hajdú Csanád

Témavezető:

Dr. Zaránd Gergely

BME Természettudományi Kar
Elméleti Fizika Tanszék

2021. 05. 21.

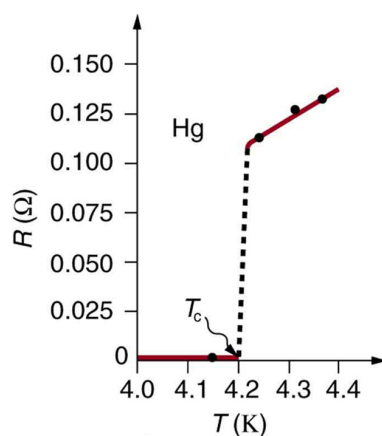


Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	2
2. Fizikai modell	4
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
3. Korrelátorok számítása	7
3.1. Töltéskorreláció	7
3.2. Spinkorreláció	10
4. Az $F(\mathbf{r})$ és $G(\mathbf{r})$ függvények meghatározása	10
4.1. Normál állapot	10
4.2. A szupravezető állapotbeli korrelációk	11
4.2.1. Az $F(\mathbf{r})$ függvény szupravezető bel alakja	11
4.2.2. A $G(\mathbf{r})$ függvény szupravezető bel alakja	14
5. Spin- és töltéskorrelációs függvények	18
5.1. Korrelációs függvények normál állapotban	18
5.2. Töltéskorrelációs függvény	20
5.3. Spinkorrelációs függvény	21
6. Konklúzió	22
7. Hivatkozások	23

1. Bevezetés

A szupravezetést a 20. század elején fedezte 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.

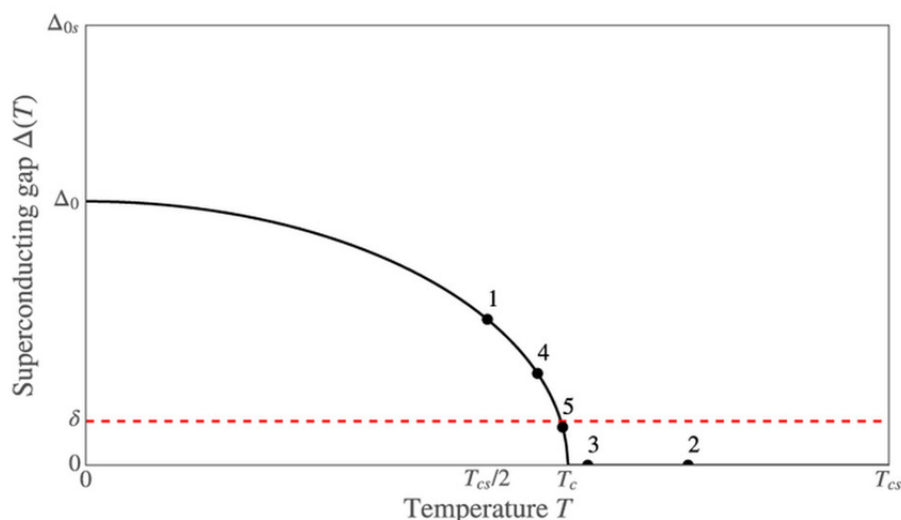
A szupravezetőket széles körben használják. Az egyik alapvető jelenség, amit felhasználnak a Josephson-effektus, ahol két szupravezető rész közé egy vékony szigetelőt illesztnek és a két vezetőre egy egyenfeszültséget kapcsolnak. Ekkor a mintán váltóáram mérhető, aminek a frekvenciája $\omega_J = \frac{2eV}{\hbar}$. 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 fenomenologikus elmélet, illetve a BCS-elmélet, ami egy mikroszkopikus leírást ad. A Ginzburg–Landau-elméletet

1950-ben dolgozták ki Vitaly Ginzburg¹ és Lev Landau² orosz fizikusok. Az elmélet jó leírást ad a szupravezetők makroszkopikus 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 Bardeen³, Leon N. Cooper⁴ és John Robert Schrieffer⁵ amerikai fizikusok dolgozták ki, és publikálták 1957-ben. A BCS-elmélet egy mikroszkopikus 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]

¹Vitaly Lazarevich Ginzburg, Nobel-díjas (2003) orosz fizikus

²Lev Davidovich Landau, Nobel-díjas (1962) orosz fizikus

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

⁴Leon N. Cooper, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

⁵John 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 aszimptotikus 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_{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_{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 ω_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,

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

ahol a $|0\rangle$ vákuum állapotba helyezünk 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_{ℓ}' azt jelöli, hogy az összegzés csak a $|\xi_{\ell}| < \hbar\omega_D$ állapotokra történik. Ezután a fenti átlagtér közelítést alkalmazva (2) a következőképp közelíthető,

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

Ezzel felírhatjuk a teljes BCS Hamilton-operátort,

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

2.2. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai

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

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

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, figyelembe véve 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 ω_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 Δ -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 σ^{α} 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

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

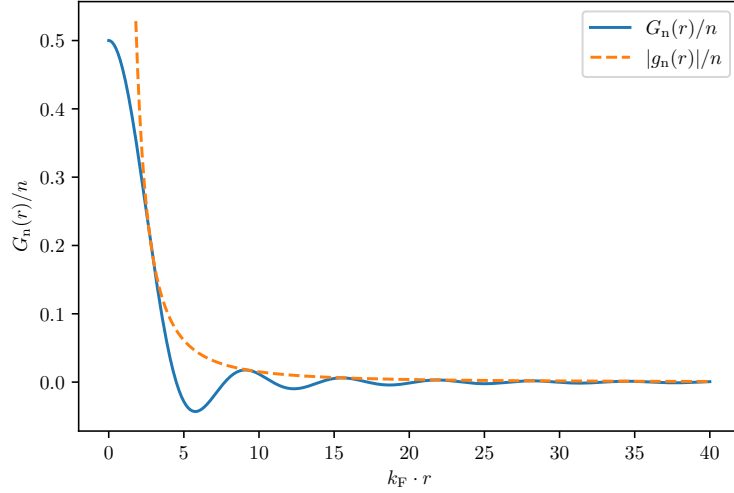
adódik, ide a (6) értékeket behelyettesítve

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

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 állapotbeli korrelációk

4.2.1. Az $F(\mathbf{r})$ függvény szupravezető beli 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.

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

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 Δ és ω_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 λ_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 reziduumok 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

$$F(\mathbf{r} \gg \lambda_D) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \cdot K_0(\tilde{r}) \cdot \sin(k_F r). \quad (59)$$

A függvény aszimptotikus viselkedését is meghatározhatjuk ebből,

$$F(\mathbf{r} \gg \xi_c) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \sqrt{\frac{\pi}{2\tilde{r}}} \cdot e^{-\tilde{r}} \cdot \sin(k_F r). \quad (60)$$

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

$$\begin{aligned} \int_1^\infty dy \frac{1}{\sqrt{y^2 - 1}} (1 - \tilde{r}y) \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} &= \\ &= \int_1^\infty dy \frac{1}{\sqrt{y^2 - 1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} - \tilde{r} \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2 - 1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1}, \end{aligned} \quad (61)$$

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

$$f(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \cdot I \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \frac{\Delta^*}{|\Delta|} \cdot \begin{cases} K_0(r/\xi_c), & \text{ha } r \gg \lambda_D \\ A - B \cdot r/\xi_c + R_1 + R_2, & \text{ha } r \ll \lambda_D \end{cases}, \quad (62)$$

ahol A és B az (61) összefüggésben szereplő integrálok értékei. Ezzel az $F(\mathbf{r})$ függvény

$$\begin{aligned} F(\mathbf{r}) &= \text{Im}\{e^{ik_F r} \cdot f(r)\} \approx \\ &\approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \text{Im}\left\{\frac{\Delta^*}{|\Delta|} \cdot e^{ik_F r}\right\} \cdot \begin{cases} K_0(r/\xi_c), & \text{ha } r \gg \lambda_D \\ A - B \cdot r/\xi_c + R_1 + R_2, & \text{ha } r \ll \lambda_D \end{cases}. \end{aligned} \quad (63)$$

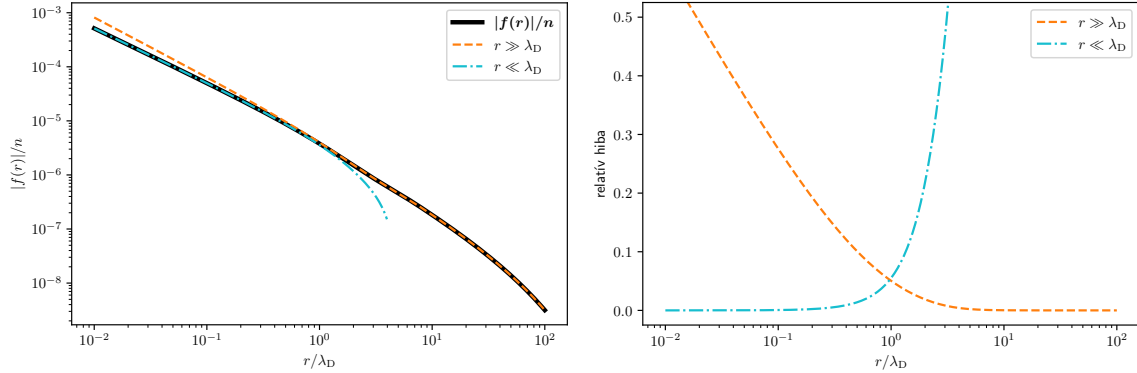
Az analitikus eredmények ellenőrzésére a (53) összefüggés alapján numerikusan is kiszámoltuk $f(r)$ értékét, és összehasonlítottuk a kapott közelítések értékével. A számolás során a $|\Delta| : \omega_D : E_F = 1 : 100 : 10000$ energia arányokat használtuk. A kapott függvényeket a 4a. ábrán láthatjuk.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

$$\delta f_{r \gg \lambda_D}(r) = \left| \frac{f(r) - f_{r \gg \lambda_D}(r)}{f(r)} \right|,$$

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 távoltéri közelítő függvények. (b) Az $f(r)$ -t közelítő függvények relatív hibája r függvényében.

4. ábra

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

A $G(\mathbf{r})$ függvény szupravezető belső alakjának kiszámolásához két mennyiséget kell meghatározni. 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,

$$G(\mathbf{r}) = G_n(\mathbf{r}) - \tilde{G}_n(\mathbf{r}) + \tilde{G}_{SC}(\mathbf{r}). \quad (64)$$

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

$$\tilde{G}_n(\mathbf{r}) = \int_{|\mathbf{k}| < k_F} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi_{\mathbf{k}}}{\omega_D}\right)^4 + 1} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{r} \text{Im} \left\{ \int_0^{k_F} dk \, k e^{ikr} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} \right\}. \quad (65)$$

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 közelítő mennyiségeket behelyettesítve

$$\tilde{G}_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{v_F r} \text{Im} \left\{ \int_{-\infty}^0 d\xi \left(k_F + \frac{\xi}{v_F} \right) e^{ik_F r} e^{i\xi \frac{r}{v_F}} \cdot \frac{1}{\left(\frac{\xi}{\omega_D}\right)^4 + 1} \right\}. \quad (66)$$

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

$$\tilde{G}_n(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \operatorname{Im} \left\{ e^{ik_F r} \int_{-\infty}^0 dx \left(1 + \frac{x}{k_F \xi_c} \right) e^{i\tilde{r}x} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D x)^4 + 1} \right\}. \quad (67)$$

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 megjelenik egy reziduum az $x_2 = \frac{i-1}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}$ pontban, így I_n értéke

$$I_n = \int_0^\infty dy \left(-i + \frac{y}{k_F \xi_c} \right) e^{-\tilde{r}y} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} + R_{2n}, \quad (68)$$

ahol

$$R_{2n} = 2\pi i \left(1 + \frac{x_2}{k_F \xi_c} \right) e^{i\tilde{r}x_2} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_2^3} = \left(-\frac{i\pi}{2} - \frac{\pi}{2k_F \xi_c \tilde{\lambda}_D^2} \right) \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (69)$$

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

$$\int_0^\infty dy \left(-i + \frac{y}{k_F \xi_c} \right) e^{-\tilde{r}y} = -\frac{i}{\tilde{r}} + \frac{1}{k_F \xi_c \tilde{r}^2}, \quad (70)$$

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

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dy \left(-i + \frac{y}{k_F \xi_c} \right) (1 - \tilde{r}y) \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} &= \\ &= \frac{-i\pi}{2\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D} + \frac{\pi}{4k_F \xi_c \tilde{\lambda}_D^2} - \tilde{r} \cdot \left(\frac{-i\pi}{4\tilde{\lambda}_D^2} + \frac{\pi}{2\sqrt{2}k_F \xi_c \tilde{\lambda}_D^3} \right) \end{aligned} \quad (71)$$

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

$$\tilde{G}_{SC}(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \operatorname{Im} \left\{ e^{ik_F r} \int_{-\infty}^0 dx \frac{\sqrt{1+x^2} - x}{2\sqrt{1+x^2}} e^{i\tilde{r}x} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D x)^4 + 1} \right\}. \quad (72)$$

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

$$I_{SC} = \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2 - 1}} e^{-\tilde{r}y} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} + R_{1SC} + R_{2SC} \quad (73)$$

lesz, ahol $R_{1\text{SC}}$ és $R_{2\text{SC}}$ 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,

$$R_{1\text{SC}} = 2\pi i \left(\frac{1}{2} - \frac{x_1}{2\sqrt{1+x_1^2}} \right) e^{i\tilde{r}x_1} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_1^3} \approx \frac{i\pi}{4x_1} \exp\left(i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right), \quad (74)$$

és

$$R_{2\text{SC}} = 2\pi i \left(\frac{1}{2} - \frac{x_2}{2\sqrt{1+x_2^2}} \right) e^{i\tilde{r}x_2} \cdot \frac{1}{4\tilde{\lambda}_D^4 x_2^3} \approx -\frac{i\pi x_2}{2} \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (75)$$

A kettő összege

$$R_{1\text{SC}} + R_{2\text{SC}} \approx R_{2\text{SC}} = \frac{\pi(1+i)}{2\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D} \exp\left(-i\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right) \exp\left(-\frac{\tilde{r}}{\sqrt{2}\tilde{\lambda}_D}\right). \quad (76)$$

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

$$\int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2-1}} e^{-\tilde{r}y} = K_1(\tilde{r}). \quad (77)$$

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

$$\begin{aligned} \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2-1}} (1 - \tilde{r}y) \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} &= \\ &= \int_1^\infty dy \frac{y}{\sqrt{y^2-1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1} - \tilde{r} \int_1^\infty dy \frac{y^2}{\sqrt{y^2-1}} \cdot \frac{1}{(\tilde{\lambda}_D y)^4 + 1}, \end{aligned} \quad (78)$$

és a kapott integrálokat numerikusan kiértékelhetjük.

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

$$\tilde{g}_n(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot I_n, \quad \tilde{g}_{\text{SC}}(r) = \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot I_{\text{SC}}, \quad (79)$$

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

$$g(r) = g_n(r) - \tilde{g}_n(r) + \tilde{g}_{\text{SC}}(r). \quad (80)$$

Vizsgáljuk meg ennek a függvénynek a távol- és közeltéri értékeit. Távoltérben a (70) és (77) összefüggéseket használhatjuk,

$$\begin{aligned} g(r \gg \lambda_D) &\approx \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{1 - ik_F r}{r^3} - \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot \left(-\frac{i}{\tilde{r}} + \frac{1}{k_F \xi_c \tilde{r}^2} \right) + \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}) \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(r/\xi_c). \end{aligned} \quad (81)$$

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

$$g(r \gg \lambda_D) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(r/\xi_c), \quad (82)$$

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

$$G(\mathbf{r} \gg \lambda_D) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(\tilde{r}) \cdot \sin(k_F r). \quad (83)$$

A függvény aszimptotikus viselkedését is meghatározhatjuk ebből,

$$G(\mathbf{r} \gg \xi_c) \approx \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \sqrt{\frac{\pi}{2\tilde{r}}} \cdot e^{-\tilde{r}} \cdot \sin(k_F r) \quad (84)$$

Közeltérben a (71) és (78) összefüggéseket használhatjuk,

$$g(r \ll \lambda_D) \approx \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{1 - ik_F r}{r^3} + \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot (A - B \cdot r/\xi_c - R_{2n} + R_{1SC} + R_{2SC}) \right), \quad (85)$$

ahol A és B az egyes eseteknél számolt együtthatók különbsége.

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

$$G(\mathbf{r} \gg \lambda_D) \approx \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot K_1(r/\xi_c) \cdot \sin(k_F r), \quad (86)$$

és

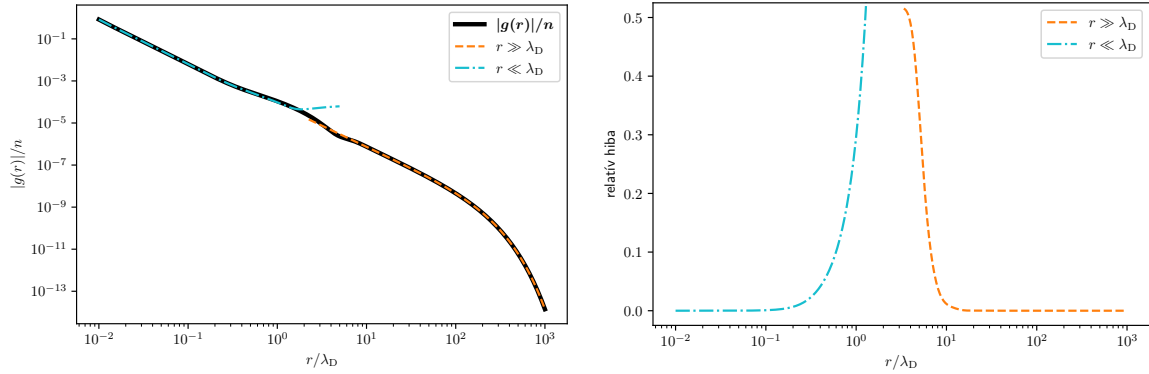
$$G(\mathbf{r} \ll \lambda_D) \approx \frac{1}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{\sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r)}{r^3} + \frac{k_F}{\xi_c r} \cdot \sin(k_F r) \cdot (A - B \cdot r/\xi_c - R_{2n} + R_{1SC} + R_{2SC}) \right) \quad (87)$$

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 ábrához log-log skálát használtunk.

Az ábrázolt görbéken azt látjuk, hogy a közel- és távolytéri 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 távolytéri esetben

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

és közeltéri 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 görbékét számolni. A $G^2(\mathbf{r})$ és $F^2(\mathbf{r})$ függvényeket fejezzük ki,

$$\begin{aligned} G^2(\mathbf{r}) &= \left(\text{Im} \left\{ e^{ik_F r} \cdot g(r) \right\} \right)^2 = \frac{|g(r)|^2 - \text{Re} \left\{ e^{2ik_F r} \cdot g^2(r) \right\}}{2}, \\ F^2(\mathbf{r}) &= \left(\text{Im} \left\{ e^{ik_F r} \cdot f(r) \right\} \right)^2 = \frac{|f(r)|^2 - \text{Re} \left\{ e^{2ik_F r} \cdot f^2(r) \right\}}{2}. \end{aligned} \quad (88)$$

Ezeknek a függvényeknek az értékei rendre a $[0, |g(r)|^2]$ és $[0, |f(r)|^2]$ tartományokban vannak. A továbbiakban használjuk az alábbi jelölést,

$$\begin{aligned} \langle \delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(0) \rangle &= \text{Re} \left\{ g_{\rho 0}(r) - e^{2ik_F r} \cdot g_{\rho}(r) \right\}, \\ \langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle &= \text{Re} \left\{ g_{s 0}(r) - e^{2ik_F r} \cdot g_{\vec{s}}(r) \right\}. \end{aligned} \quad (89)$$

Az itt megjelenő burkolókat így könnyen felírhatjuk a (39), (43) és (88) összefüggések segítségével,

$$\begin{aligned} g_{\rho 0}(r) &= |f(r)|^2 - |g(r)|^2, \quad g_{s 0}(r) = \frac{3}{4} \left(-|f(r)|^2 - |g(r)|^2 \right), \\ g_{\rho}(r) &= f^2(r) - g^2(r), \quad g_{\vec{s}}(r) = \frac{3}{4} \left(-f^2(r) - g^2(r) \right). \end{aligned} \quad (90)$$

5.1. Korrelációs függvények normál állapotban

Normál állapotban a $g(r)$ és $f(r)$ függvények pontos alakja ismert,

$$g_n(r) = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \frac{1 - ik_F r}{r^3} \quad \text{és} \quad f_n(r) = 0. \quad (91)$$

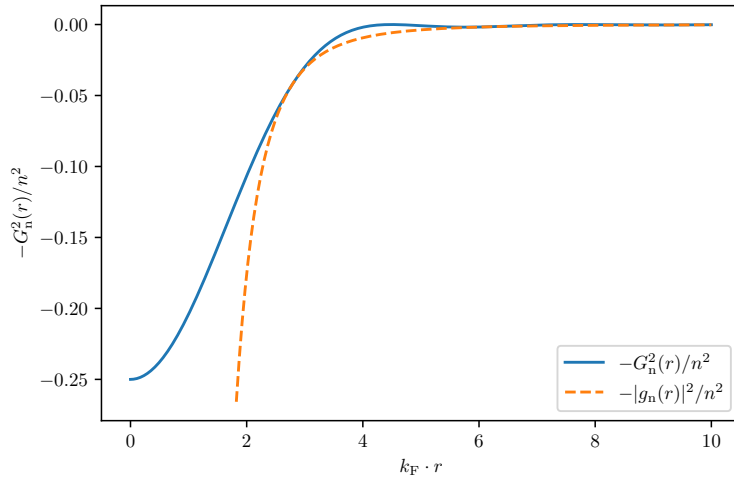
Ezekkel kifejezve a korrelációs függvényeket,

$$\begin{aligned}\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle &= -2 G_n^2(\mathbf{r}), \\ \langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle &= -\frac{3}{2} G_n^2(\mathbf{r}),\end{aligned}\tag{92}$$

és behelyettesítve $G_n(\mathbf{r})$ értékét,

$$\begin{aligned}\langle \delta\rho(\mathbf{r})\delta\rho(0) \rangle &= \frac{1}{2\pi^4} \left(-\frac{1 + (k_F r)^2}{r^6} + \frac{(1 - (k_F r)^2) \cdot \cos(2 k_F r) + 2 k_F r \cdot \sin(2 k_F r)}{r^6} \right), \\ \langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle &= \frac{3}{8\pi^4} \left(-\frac{1 + (k_F r)^2}{r^6} + \frac{(1 - (k_F r)^2) \cdot \cos(2 k_F r) + 2 k_F r \cdot \sin(2 k_F r)}{r^6} \right).\end{aligned}\tag{93}$$

Mindkét korrelátor függvény a $-G_n^2(\mathbf{r})$ függvénnyel arányos. Ezt a függvényt a 6. ábrán láthatjuk.



6. ábra. A $G_n^2(\mathbf{r})$ függvény értéke \mathbf{r} függvényében.

Az ábrán azt látjuk, hogy a függvény $r = 0$ esetén egy negatív véges értéket vesz föl, egyébként pedig gyorsan lecseng. Az $r = 0$ helyen lévő lyuk az úgynevezett Pauli-lyuk. Ez a Pauli-elv következménye, ami szerint nem lehet két elektron egyszerre ugyanabban az állapotban. Töltéskorreláció esetén ez azt eredményezi, hogy a nagy távolságoknál várt átlagos részecskeszám négyzetéhez képest ennek a fele fog megjelenni, mert az origóban lévő elektron kiszorítja a többit arról a helyről. Spinkorreláció esetén is hasonló történik. Mivel az origóban lévő elektron az azonos spinű elektronokat szorítja ki, ezért egy negatív korrelációt kapunk.

5.2. Töltéskorrelációs függvény

A töltéskorrelációs függvény burkolóját a (90) összefüggés szerint számolhatjuk ki. Itt is vizsgáljuk az $r \gg \lambda_D$ és $r \ll \lambda_D$ tartományokat. Az $r \gg \lambda_D$ távolféti közelítésben

$$\begin{aligned} f^2(r) &\approx |f(r)|^2 \approx \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot K_0^2(r/\xi_c), \\ g^2(r) &\approx |g(r)|^2 \approx \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot K_1^2(r/\xi_c), \end{aligned} \quad (94)$$

így a töltéskorrelációs függvény burkolói

$$g_{\rho 0}(r \gg \lambda_D) \approx g_{\rho}(r \gg \lambda_D) \approx \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \left(K_0^2(r/\xi_c) - K_1^2(r/\xi_c) \right), \quad (95)$$

amik $r \gg \xi_c$ esetén tovább egyszerűsödnek,

$$g_{\rho 0}(r \gg \xi_c) \approx g_{\rho}(r \gg \xi_c) \approx - \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{r} \right)^2 \cdot \frac{\pi}{2r^2} \exp(-2r/\xi_c) \sim - \frac{\exp(-2r/\xi_c)}{r^4}. \quad (96)$$

Ezekkel felírhatjuk a töltéskorrelációs függvény teljes közelítő alakját $r \gg \lambda_D$ és $r \gg \xi_c$ esetén,

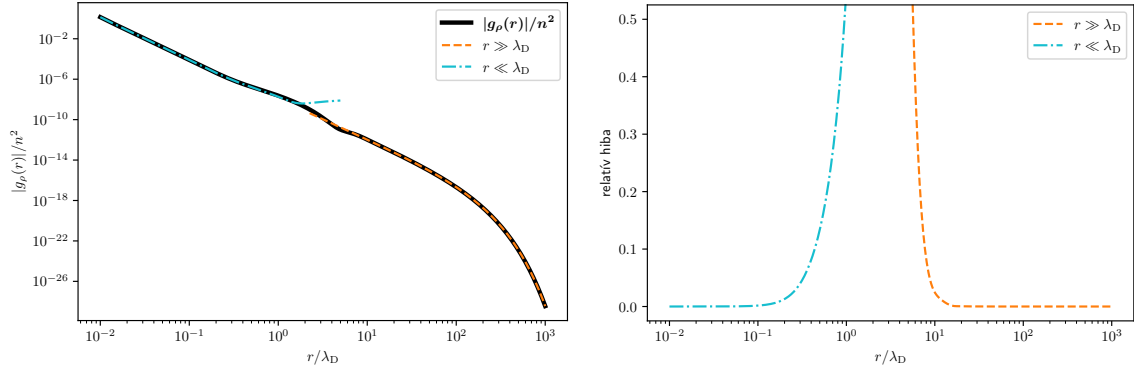
$$\begin{aligned} \langle \delta\rho(\mathbf{r} \gg \lambda_D) \delta\rho(0) \rangle &\approx \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \left(K_0^2(r/\xi_c) - K_1^2(r/\xi_c) \right) \cdot (1 - \cos(2k_F r)), \\ \langle \delta\rho(\mathbf{r} \gg \xi_c) \delta\rho(0) \rangle &\approx \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{r} \right)^2 \cdot \frac{\pi}{2r^2} \exp(-2r/\xi_c) \cdot (1 - \cos(2k_F r)), \end{aligned} \quad (97)$$

Az $r \ll \lambda_D$ közeletéri közelítésben belátható, hogy $|f(r)|^2 \ll |g(r)|^2$, így a burkoló függvények

$$g_{\rho 0}(r \ll \lambda_D) \approx -|g(r)|^2 \quad \text{és} \quad g_{\rho}(r \ll \lambda_D) \approx -g^2(r) \quad (98)$$

lesznek, ahol $g(r)$ a (85) összefüggés alapján írható fel. Fontos, hogy $g(r)$ szupravezető járulékatól nem tekinthetünk el, ellenkező esetben a közelítés rossz lesz $r \gtrsim k_F^{-1}$ esetén.

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. Az ábrázolásnál a $\langle \delta\rho(\mathbf{r}) \delta\rho(0) \rangle$ korrelációs függvény harmonikus függésének amplitúdóját ábrázoltuk, vagyis $|g_{\rho}(r)|$ -t, illetve ezek közelítő függvényeit. Ezen kívül a közelítések relatív hibáit is ábrázoltuk. Mindezt a 7. ábrán láthatjuk. A használt 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 távolféri közelítő függvények.

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

7. ábra

5.3. Spinkorrelációs függvény

A spinkorrelációs függvényt és annak burkolóját a (90) összefüggés alapján számolhatjuk ki. Az $r \gg \lambda_D$ távolféri közelítésben (94) összefüggés teljesül, így a spinkorrelációs függvény burkolói

$$g_{\vec{s}0}(r \gg \lambda_D) \approx g_{\vec{s}}(r \gg \lambda_D) \approx -\frac{3}{4} \cdot \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \left(K_0^2(r/\xi_c) + K_1^2(r/\xi_c) \right), \quad (99)$$

amik $r \gg \xi_c$ esetén tovább egyszerűsödnek,

$$g_{\vec{s}0}(r \gg \xi_c) \approx g_{\vec{s}}(r \gg \xi_c) \approx -\frac{3}{4} \cdot \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{r} \right)^2 \cdot \frac{\pi}{\xi_c r} \exp(-2r/\xi_c) \sim -\frac{\exp(-2r/\xi_c)}{r^3}. \quad (100)$$

Ezekkel felírhatjuk a spinkorrelációs függvény teljes közelítő alakját $r \gg \lambda_D$ és $r \gg \xi_c$ esetén,

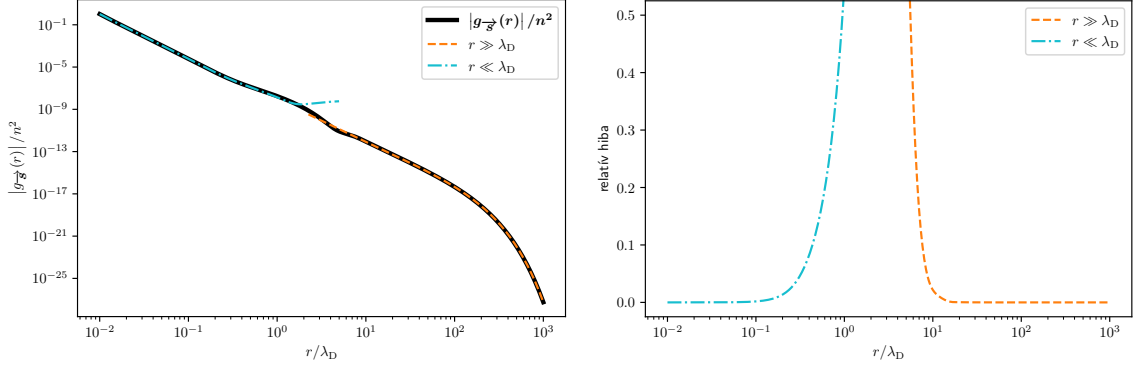
$$\begin{aligned} \langle \vec{s}(\mathbf{r} \gg \lambda_D) \cdot \vec{s}(0) \rangle &\approx -\frac{3}{4} \cdot \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \left(K_0^2(r/\xi_c) + K_1^2(r/\xi_c) \right) \cdot (1 - \cos(2k_F r)), \\ \langle \vec{s}(\mathbf{r} \gg \xi_c) \cdot \vec{s}(0) \rangle &\approx -\frac{3}{4} \cdot \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{r} \right)^2 \cdot \frac{\pi}{\xi_c r} \exp(-2r/\xi_c) \cdot (1 - \cos(2k_F r)). \end{aligned} \quad (101)$$

Az $r \ll \lambda_D$ közeleltéri közelítésben itt is felhasználhatjuk, hogy $|f(r)|^2 \ll |g(r)|^2$, így a burkoló függvények

$$g_{\vec{s}0}(r \ll \lambda_D) \approx -\frac{3}{4} \cdot |g(r)|^2 \quad \text{és} \quad g_{\vec{s}}(r \ll \lambda_D) \approx -\frac{3}{4} \cdot g^2(r) \quad (102)$$

lesznek, ahol $g(r)$ a (85) összefüggés alapján írható fel.

Itt is csináltunk egy numerikus ellenőrzést ugyanolyan paraméterekkel, mint a töltéskorrelációs függvény esetén. A $|g_{\vec{s}}(r)|$ burkoló függvényt a közelítő függvényekkel együtt, illetve a közelítések relatív hibáit a 8. ábrán láthatjuk. A használt közelítő függvények itt is jól illeszkednek a megfelelő tartományokban.



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

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

8. ábra

6. Konklúzió

A dolgozatban megvizsgáltuk, hogy egy szupravezetőben hogyan változnak a spin- és töltéskorrelációs függvények a normál állapothoz képest. Háromféle hosszskála jelent meg az eredményeinkben, ezek a k_F Fermi-hullámszám, a $\lambda_D = \frac{v_F}{\omega_D}$ Debeye-hossz és a $\xi_c = \frac{\hbar v_F}{|\Delta|}$ szupravezető korrelációs hossz, ahol v_F a Fermi-sebesség, ω_D a Debeye-frekvencia és Δ a szupravezető gap nagysága.

Azt tapasztaltuk, hogy a korrelációk lokalizáltabbak a szupravezető állapotban. A szupravezető állapotban lévő spin- és töltéskorrelációs függvények lecsengése vezető rendben aszimptotikusan, az $r \gg \xi_c$ tartományban rendre $\sim \frac{\exp(-2r/\xi_c)}{r^3}$ és $\sim \frac{\exp(-2r/\xi_c)}{r^4}$. Ezzel szemben a normál állapotban mindkét esetben $\sim r^{-4}$ lecsengést kapunk. Az exponenciális lecsengés karakterisztikus hossza ξ_c a szupravezető korrelációs hossz. Az $r \ll \lambda_D$ tartományban a szupravezető állapotbeli korrelációs függvények egy $\mathcal{O}(r^{-2})$ kis korrekción kívül megegyeznek a normál állapotbeli függvényekkel.

A korrelációs függvényekhez analitikus közelítő függvényeket is meghatároztunk $r \ll \lambda_D$ és $r \gg \lambda_D$ tartományokban. Ezek érvényességi tartományát a λ_D Debeye-hossz határozza meg. Az ehhez tartozó ω_D Debeye-frekvenciának az a szerepe a szupravezetésben, hogy a Fermi-felület körül csak a $\pm \hbar \omega_D$ energiatartományban hatnak kölcsön az elektronok, és rendeződnek Cooper-párokba. Ennek megfelelően $r \ll \lambda_D$ esetén lényegében a normál állapotbeli függvényeket kapjuk vissza. Ezek a vizsgált 3 dimenziós esetben

$$\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle, \langle \delta \rho(\mathbf{r}) \delta \rho(0) \rangle \sim \frac{(\sin(k_F r) - k_F r \cos(k_F r))^2}{r^6}$$

lecsengést mutatnak.

Az $r \approx \lambda_D$ tartományban nem tudtunk analitikus megoldást adni a korrelációs függvények alakjára. Itt a szupravezető járuléka és a normál állapotbeli korrelációk keverednek, ahogy r nő, a szupravezető járuléka egyre dominánsabbá válik. Habár analitikus megoldás nincs ebben a tartományban, numerikusan jól lehet számolni a két állapot járulékát.

Az $r \gg \lambda_D$ tartományban az $F(\mathbf{r})$ párkorrelációs függvény és a $G(\mathbf{r})$ normál korrelációs függvény másodfajú módosított Bessel-függvényeket követnek. Spinkorrelációs

függvényénél a két járulék erősíti egymást,

$$\langle \vec{s}(\mathbf{r}) \cdot \vec{s}(0) \rangle \approx -\frac{3}{4} \cdot \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \left(K_0^2(r/\xi_c) + K_1^2(r/\xi_c) \right) \cdot (1 - \cos(2 k_F r)), \quad (103)$$

míg töltéskorrelációs függvényénél gyengítik egymást,

$$e^2 \langle \delta\rho(\mathbf{r}) \delta\rho(0) \rangle \approx e^2 \left(\frac{1}{2\pi^2} \frac{k_F}{\xi_c r} \right)^2 \cdot \left(K_0^2(r/\xi_c) - K_1^2(r/\xi_c) \right) \cdot (1 - \cos(2 k_F r)). \quad (104)$$

A korrelációs függvények aszimptotikus viselkedése $r \gg \xi_c$ esetén pedig

$$\begin{aligned} \langle \vec{s}(\mathbf{r} \gg \xi_c) \cdot \vec{s}(0) \rangle &\sim \frac{\exp(-2r/\xi_c)}{r^3} \cdot (1 - \cos(2 k_F r)), \\ \langle \delta\rho(\mathbf{r} \gg \xi_c) \delta\rho(0) \rangle &\sim \frac{\exp(-2r/\xi_c)}{r^4} \cdot (1 - \cos(2 k_F r)). \end{aligned} \quad (105)$$

Az eredményeink akkor érvényesek, ha teljesül a $k_F^{-1} \ll \lambda_D \ll \xi_c$ reláció. Ez a legtöbb közönséges szupravezetőben így van. Léteznek azonban olyan szupravezetők, amikben a $\Delta_{\mathbf{k}}$ gap függvénynek nódusai vannak (pl. magas hőmérsékletű szupravezetők). Ezeknél a számításainkból arra következtethetünk, hogy a korrelációs függvények aszimptotikus viselkedése nem egy exponenciális, hanem valamilyen hatványfüggvényt követ. Az eredményeink továbbá nem érvényesek olyan szupravezetőkre, amikre nem ismert a BCS-elmélet (pl. UBe_{13}).

7. Hivatkozások

- [1] OpenStax College: *College Physics* (OpenStax College, 2017)
<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
- [3] Neil W. Ashcroft, N. David Mermin: *Solid State Physics* (Saunders College, 1976)
- [4] P. G. de Gennes: *Superconductivity of Metals and Alloys*, Advanced Book Classics (Westview Press, 1966)