Szupravezetőbeli spin- és töltéskorrelációk elméleti vizsgálata

Hajdú Csanád
Témavezető: Dr. Zaránd Gergely Attila

2021. 05. 21.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés **2**

2. Fizikai modell **2**
2.1. BCS-elmélet . . . 2
2.2. Hamilton-operátor meghatározása . . . 2
2.3. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai . . . 4
2.4. $u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ kiszámolása . . . 5
2.5. BCS közelítés és a mi közelítésünk . . . 6

3. Korrelátorok számolása **6**
3.1. Töltéskorreláció . . . 7
3.2. Spinkorreláció . . . 9

4. $F(\mathbf{r})$ és $G(\mathbf{r})$ függvények meghatározása **10**
4.1. Normálállapot . . . 10
4.1.1. $F(\mathbf{r})$ normálállapotban . . . 10
4.1.2. $G(\mathbf{r})$ normálállapotban . . . 10
4.2. Szupravezető állapot járuléka . . . 10
4.2.1. $F(\mathbf{r})$ szupravezető járuléka . . . 10
4.2.2. $G(\mathbf{r})$ szupravezető járuléka . . . 10
4.3. Asszimptotikus viselkedés . . . 10

5. Spin- és töltéskorrelációs függvények **10**
5.1. Töltéskorreláció . . . 10
5.2. Spinkorreláció . . . 10

1. Bevezetés

A szupravezetés a 20. század elején lett felfedezve Heike Kamerlingh Onnes holland fizikus által. A jelenség leírására több fenomenológikus elmélet is született, az első kvantummechanikai elméletet 1957-ben publikálta Bardeen[1], Cooper[2] és Schrieffer[3], amiért 1972-ben megkapták a fizikai Nobel-díjat. Az elméletük a BCS-elmélet.

A szupravezetés jelensége a mai napig fontos, többek között használják az orvostudományban (MRI), kutatásban (részecskegyorsítók), méréstechnikában (volt definíciója) és az energiaiparban (fúziós erőművek, szélerőművek) is.

A dolgozat során a BCS-elméletben használt szupravezető alapállapot segítségével levezetjük az elektronok töltéskorrelációs, illetve spinkorrelációs függvényét. A kapott függvények asszimptotikus viselkedését összevetjük a normálállapotú korrelációs függvényekkel.

2. Fizikai modell

2.1. BCS-elmélet

A BCS-elméletben használt szupravezető alapállapot hullámfüggvénye

$$\tilde{\phi} = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \phi_0, \tag{1}$$

ahol ϕ_0 a vákuum állapot, $c^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}$ a $(\mathbf{k}\sigma)$ sajátállapotú elektron keltő operátora, $u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ pedig általános esetben komplex együtthatók. A hullámfüggvény normálásának feltétele, hogy

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \tag{2}$$

Ezzel a formalizmussal a normálállapot alapállapota is leírható, ahol minden elektronállapot be van töltve a Fermi-felületig,

$$\tilde{\phi}_{\mathrm{n}} = \prod_{|\mathbf{k}|<k_{\mathrm{F}}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \phi_0, \tag{3}$$

ez az

$$u_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 0, & \text{ha } |\mathbf{k}| < k_{\mathrm{F}} \\ 1, & \text{ha } |\mathbf{k}| > k_{\mathrm{F}} \end{cases} \quad \text{és} \quad v_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 1, & \text{ha } |\mathbf{k}| < k_{\mathrm{F}} \\ 0, & \text{ha } |\mathbf{k}| > k_{\mathrm{F}} \end{cases} \tag{4}$$

együtthatóknak felel meg.

2.2. Hamilton-operátor meghatározása

A szupravezető állapot Hamilton-operátora két részből áll, a H_0 kinetikus és a H_{int} kölcsönhatási tagból. A kinetikus tag egyszerűen az egyes részecskék kinetikus energiájának összege,

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} \left(c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow} \right), \tag{5}$$

[1] John Bardeen, kétszeres Nobel-díjas (1956 és 1972) amerikai mérnök és fizikus

[2] Leon N. Cooper, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

[3] John Robert Schrieffer, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

ahol

$$\xi_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_{\mathrm{F}}.$$

A kölcsönhatási tag

$$H_{\mathrm{int}} = \sum_{\mathbf{k},\boldsymbol{\ell}} V_{\mathbf{k}\boldsymbol{\ell}}\, c^{\dagger}_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^{\dagger}_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \tag{6}$$

lesz, ahol $V_{\mathbf{k}\boldsymbol{\ell}}$ azt jellemzi, hogy két elektron kölcsönhatásánál mekkora a valószínűsége, hogy a $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$ állapotból az $(\boldsymbol{\ell}\uparrow, -\boldsymbol{\ell}\downarrow)$ állapotba kerüljenek.

A kölcsönhatási tag meghatározásához vezessük be a $\phi_{\mathbf{k}0}$ és $\phi_{\mathbf{k}1}$ állapotokat, amikben rendre a $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$ állapot nincs, illetve be van betöltve. Ennek segítségével $\tilde{\phi}$ felírható,

$$\tilde{\phi} = (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow})\phi_{\mathbf{k}0} = u_{\mathbf{k}}\phi_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}}\phi_{\mathbf{k}1} \tag{7}$$

alakban. Hasonló módon bevezethető a $\phi_{\mathbf{k}i\boldsymbol{\ell}j}$ állapot is, amiben i és j rendre a $(\mathbf{k}\uparrow, -\mathbf{k}\downarrow)$ és $(\boldsymbol{\ell}\uparrow, -\boldsymbol{\ell}\downarrow)$ állapotok betöltöttségét jelöli. Ezek segítségével is felírhatjuk $\tilde{\phi}$-t,

$$\begin{aligned}\tilde{\phi} &= \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\right)\left(u_{\boldsymbol{\ell}} + v_{\boldsymbol{\ell}}\, c^{\dagger}_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^{\dagger}_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right)\phi_{\mathbf{k}0\boldsymbol{\ell}0} = \\ &= u_{\mathbf{k}}u_{\boldsymbol{\ell}}\phi_{\mathbf{k}0\boldsymbol{\ell}0} + u_{\mathbf{k}}v_{\boldsymbol{\ell}}\phi_{\mathbf{k}0\boldsymbol{\ell}1} + v_{\mathbf{k}}u_{\boldsymbol{\ell}}\phi_{\mathbf{k}1\boldsymbol{\ell}0} + v_{\mathbf{k}}v_{\boldsymbol{\ell}}\phi_{\mathbf{k}1\boldsymbol{\ell}1}.\end{aligned} \tag{8}$$

A (6) definícióból ezután következik, hogy

$$\left\langle\tilde{\phi}\middle|H_{\mathrm{int}}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle = \sum_{\mathbf{k},\boldsymbol{\ell}} \left(V_{\mathbf{k}\boldsymbol{\ell}} v^*_{\mathbf{k}} u^*_{\boldsymbol{\ell}} u_{\mathbf{k}} v_{\boldsymbol{\ell}} + V_{\boldsymbol{\ell}\mathbf{k}} u^*_{\mathbf{k}} v^*_{\boldsymbol{\ell}} v_{\mathbf{k}} u_{\boldsymbol{\ell}}\right). \tag{9}$$

Továbbá definiáljuk a $\Delta_{\mathbf{k}}$ mennyiséget is,

$$\Delta_{\mathbf{k}} \coloneqq -\sum_{\boldsymbol{\ell}} V_{\mathbf{k}\boldsymbol{\ell}} u^*_{\boldsymbol{\ell}} v_{\boldsymbol{\ell}}, \tag{10}$$

aminek segítségével

$$\left\langle\tilde{\phi}\middle|H_{\mathrm{int}}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle = -\sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v^*_{\mathbf{k}} + \Delta^*_{\mathbf{k}} u^*_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}\right) \tag{11}$$

felírható.

H_{int} alakjának meghatározásához vizsgáljuk meg a $c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}$ operátor várhatóértékét,

$$\begin{aligned}\left\langle\tilde{\phi}\middle|c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle &= v^*_{\mathbf{k}} \left\langle\phi_{\mathbf{k}1}\middle|c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\middle|\phi_{\mathbf{k}0}\right\rangle u_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} v^*_{\mathbf{k}}, \\ \left\langle\tilde{\phi}\middle|c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle &= \left\langle\tilde{\phi}\middle|c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle^* = u^*_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}.\end{aligned} \tag{12}$$

Ez alapján (11) átalakítható,

$$\begin{aligned}\left\langle\tilde{\phi}\middle|H_{\mathrm{int}}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle &= -\sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} \left\langle\tilde{\phi}\middle|c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle + \Delta^*_{\mathbf{k}} \left\langle\tilde{\phi}\middle|c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\middle|\tilde{\phi}\right\rangle\right) \\ &= \left\langle\tilde{\phi}\middle|-\sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} + \Delta^*_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\right)\middle|\tilde{\phi}\right\rangle,\end{aligned} \tag{13}$$

így H_{int} teljes alakja

$$H_{\mathrm{int}} = -\sum_{\mathbf{k}} \left(\Delta_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} + \Delta^*_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\right). \tag{14}$$

A teljes Hamilton-operátor így felírható,

$$H_{\mathrm{BCS}} = H_0 + H_{\mathrm{int}} = \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi_{\mathbf{k}} \left(c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}\right) - \Delta_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta^*_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\right]. \tag{15}$$

2.3. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai

Feltételezzük, hogy H_{BCS} felírható léptetőoperátorok segítségével, vagyis

$$H_{\mathrm{BCS}} = \sum_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}} \left(\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow}\gamma_{\mathbf{k}\uparrow} + \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow}\gamma_{\mathbf{k}\downarrow} \right) + E_0, \tag{16}$$

ahol a $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$ operátorok a szupravezető-állapot léptetőoperátorai. Továbbá feltételezzük, hogy ezek az operátorok felírhatók a $c_{\mathbf{k}\sigma}$ operátorok lineáris kombinációjaként,

$$\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} = A\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} + B\, c_{-\mathbf{k}\downarrow}, \qquad A, B \in \mathbb{C}, \tag{17}$$

$$\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow} = C\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\downarrow} + D\, c_{-\mathbf{k}\uparrow}, \qquad C, D \in \mathbb{C}. \tag{18}$$

A $\gamma_{\mathbf{k}\sigma}$ operátorokra továbbá igaz, hogy

$$\left\{\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}\right\} = \left\{\gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma'}\right\} = 0, \tag{19}$$

$$\left\{\gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma^{\dagger}_{\mathbf{k}'\sigma'}\right\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}, \tag{20}$$

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma}\tilde{\phi} = 0, \tag{21}$$

ahol $\{A, B\} = AB + BA$ az antikommutátor.

Számoljuk ki $\gamma_{\ell\uparrow}$-t (17) és (21) összefüggések felhasználásával. Ehhez nézzük meg $c_{\ell\uparrow}$ és $c^{\dagger}_{-\ell\downarrow}$ hatását a $\tilde{\phi}$ alapállapotra.

$$\begin{aligned} c_{\ell\uparrow}\tilde{\phi} &= c_{\ell\uparrow} \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) c_{\ell\uparrow} \left(u_{\ell} + v_{\ell}\, c^{\dagger}_{\ell\uparrow} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \left(u_{\ell} c_{\ell\uparrow} + v_{\ell} \left(1 - c^{\dagger}_{\ell\uparrow} c_{\ell\uparrow} \right) c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \left(u_{\ell} c_{\ell\uparrow} + v_{\ell} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} - v_{\ell} c^{\dagger}_{\ell\uparrow} c_{\ell\uparrow} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) v_{\ell} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \phi_0 \end{aligned} \tag{22}$$

és

$$\begin{aligned} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow}\tilde{\phi} &= c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \left(u_{\ell} + v_{\ell}\, c^{\dagger}_{\ell\uparrow} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) \left(u_{\ell} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} - v_{\ell} c^{\dagger}_{\ell\uparrow} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \right) \phi_0 = \\ &= \prod_{\mathbf{k}\neq\ell} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}\, c^{\dagger}_{\mathbf{k}\uparrow} c^{\dagger}_{-\mathbf{k}\downarrow} \right) u_{\ell} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \phi_0. \end{aligned} \tag{23}$$

Így $\gamma_{\ell\uparrow}$ kifejezhető a (20) feltétel szerint,

$$\gamma_{\ell\uparrow}\tilde{\phi} = \left(u_{\ell} c_{\ell\uparrow} - v_{\ell} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow} \right) \tilde{\phi} = 0 \quad \Rightarrow \quad \gamma_{\ell\uparrow} = u_{\ell} c_{\ell\uparrow} - v_{\ell} c^{\dagger}_{-\ell\downarrow}. \tag{24}$$

Megjegyezzük, hogy az együtthatókban van egy komplex fázisnyi szabadsági fok, ezt konvenció szerint úgy választjuk meg, hogy $u_{\boldsymbol{\ell}}$ együtthatója egység legyen.

$\gamma_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}$-t hasonlóan kiszámolva végeredményül a különböző $\gamma_{\boldsymbol{\ell}\sigma}$ operátorokra

$$\begin{aligned}\gamma_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} &= u_{\boldsymbol{\ell}} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - v_{\boldsymbol{\ell}} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow},\\ \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} &= u^*_{\boldsymbol{\ell}} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - v^*_{\boldsymbol{\ell}} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow},\\ \gamma_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} &= u_{\boldsymbol{\ell}} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} + v_{\boldsymbol{\ell}} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow},\\ \gamma^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} &= u^*_{\boldsymbol{\ell}} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} + v^*_{\boldsymbol{\ell}} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\end{aligned} \tag{25}$$

adódnak. Az összefüggéseket invertálva megkaphatjuk a $c_{\mathbf{k}\sigma}$ operátorokat is,

$$\begin{aligned}c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} &= u^*_{\boldsymbol{\ell}} \gamma_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} + v_{\boldsymbol{\ell}} \gamma^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow},\\ c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} &= u_{\boldsymbol{\ell}} \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} + v^*_{\boldsymbol{\ell}} \gamma_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow},\\ c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} &= -v_{\boldsymbol{\ell}} \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} + u^*_{\boldsymbol{\ell}} \gamma_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow},\\ c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} &= -v^*_{\boldsymbol{\ell}} \gamma_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} + u_{\boldsymbol{\ell}} \gamma^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}.\end{aligned} \tag{26}$$

2.4. $u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ kiszámolása

$u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ kiszámolásához a (16) Hamilton-operátort és a léptetőoperátorok tulajdonságait használjuk fel. Felírható, hogy

$$H_{\mathrm{BCS}} \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} \tilde{\phi} = \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} \left(H_{\mathrm{BCS}} + E_{\boldsymbol{\ell}}\right) \tilde{\phi}, \tag{27}$$

amit tovább írva,

$$\left[H_{\mathrm{BCS}}, \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right] = E_{\boldsymbol{\ell}} \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}. \tag{28}$$

$\left[H_{\mathrm{BCS}}, \gamma^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right]$ kiszámolásához számoljuk ki egyenként $\left[H_{\mathrm{BCS}}, c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right]$ és $[H_{\mathrm{BCS}}, c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}]$ értékét,

$$\begin{aligned}\left[H_{\mathrm{BCS}}, c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right] &= \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} \left(c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c^\dagger_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}\right) - \Delta_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta^*_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\right), c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right] =\\ &= \xi_{\boldsymbol{\ell}} \left[c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}, c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right] - \Delta^*_{\boldsymbol{\ell}} \left[c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}, c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right] =\\ &= \xi_{\boldsymbol{\ell}} \left(c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right) - \Delta^*_{\boldsymbol{\ell}} \left(c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right) =\\ &= \xi_{\boldsymbol{\ell}} \left(c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right) - \Delta^*_{\boldsymbol{\ell}} \left(c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} - c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} + c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}\right) =\\ &= \xi_{\boldsymbol{\ell}} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - \Delta^*_{\boldsymbol{\ell}} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow},\end{aligned} \tag{29}$$

illetve

$$\begin{aligned}\left[H_{\mathrm{BCS}}, c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right] &= \left[\sum_{\mathbf{k}} \left(\xi_{\mathbf{k}} \left(c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} + c^\dagger_{\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\downarrow}\right) - \Delta_{\mathbf{k}} c^\dagger_{\mathbf{k}\uparrow} c^\dagger_{-\mathbf{k}\downarrow} - \Delta^*_{\mathbf{k}} c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}\right), c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right] =\\ &= \xi_{\boldsymbol{\ell}} \left[c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}, c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right] - \Delta_{\boldsymbol{\ell}} \left[c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}, c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right] =\\ &= \xi_{\boldsymbol{\ell}} \left(c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} - c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right) - \Delta_{\boldsymbol{\ell}} \left(c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} - c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right) =\\ &= -\xi_{\boldsymbol{\ell}} \left(c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} - c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right) - \Delta_{\boldsymbol{\ell}} \left(c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} - c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} + c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} c^\dagger_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow}\right) =\\ &= -\xi_{\boldsymbol{\ell}} c_{-\boldsymbol{\ell}\downarrow} - \Delta_{\boldsymbol{\ell}} c^\dagger_{\boldsymbol{\ell}\uparrow}.\end{aligned} \tag{30}$$

A (25) összefüggést felhasználva felírható, hogy

$$u_{\ell}^{*}\left(\xi_{\ell}c_{\ell\uparrow}^{\dagger}-\Delta_{\ell}^{*}c_{-\ell\downarrow}\right)-v_{\ell}^{*}\left(-\xi_{\ell}c_{-\ell\downarrow}-\Delta_{\ell}c_{\ell\uparrow}^{\dagger}\right)=E_{\ell}\left(u_{\ell}^{*}c_{\ell\uparrow}^{\dagger}-v_{\ell}^{*}c_{-\ell\downarrow}\right), \tag{31}$$

amit egy lineáris egyenletrendszerre hozhatunk,

$$\begin{pmatrix}\xi_{\ell} & \Delta_{\ell}\\ \Delta_{\ell}^{*} & -\xi_{\ell}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_{\ell}^{*}\\ v_{\ell}^{*}\end{pmatrix}=E_{\ell}\begin{pmatrix}u_{\ell}^{*}\\ v_{\ell}^{*}\end{pmatrix}. \tag{32}$$

A sajátértékekre $E_{\ell}=\pm\sqrt{\xi_{\ell}^{2}+|\Delta_{\ell}|^{2}}$ adódik, amiből a pozitív előjelűnek van fizikai értelme. Az egyenletrendszert megoldva úgy, hogy az eredmény kielégítse a (2) feltételt,

$$u_{\ell}^{*}=\frac{\Delta_{\ell}}{\sqrt{2E_{\ell}\left(E_{\ell}-\xi_{\ell}\right)}} \quad \text{és} \quad v_{\ell}^{*}=\frac{E_{\ell}-\xi_{\ell}}{\sqrt{2E_{\ell}\left(E_{\ell}-\xi_{\ell}\right)}} \tag{33}$$

adódik.

2.5. BCS közelítés és a mi közelítésünk

A BCS-elméletben Δ_{ℓ} definíciója

$$\Delta_{\ell}=\begin{cases}\Delta, & \text{ha } |\xi_{\ell}|<\hbar\omega_{\mathrm{D}}\\ 0, & \text{ha } |\xi_{\ell}|>\hbar\omega_{\mathrm{D}}\end{cases}, \tag{34}$$

ahol ω_{D} a Debeye-frekvencia. Ez azt jelenti, hogy csak a Fermi-felület közelében lévő elektronok vesznek részt a szupravezetésben.

A BCS-elméletben használt éles levágás helyett mi egy analitikus függvényt használunk, hogy a számolás során kapott integrálokat egyszerűbben tudjuk analitikusan kezelni. A használt levágás

$$\frac{1}{\left(\frac{\xi_{\ell}}{\hbar\omega_{\mathrm{D}}}\right)^{4}+1}$$

alakú, ami az éles levágáshoz hasonlóan nagyjából a $[-\hbar\omega_{\mathrm{D}},\hbar\omega_{\mathrm{D}}]$ tartományon nem zérus, Δ_{ℓ} értékét mi is konstansnak vesszük a vizsgált tartományon, $\Delta_{\ell}\equiv\Delta$.

A legtöbb szupravezetőben $|\Delta|\ll\hbar\omega_{\mathrm{D}}\ll E_{\mathrm{F}}$, amit a számolásaink során ki is fogunk használni.

3. Korrelátorok számolása

Vezessük be a $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ operátorokat, amik a $c_{\mathbf{k}\sigma}$ operátorokhoz hasonlóan keltő operátorok, viszont egy $(\mathbf{k}\sigma)$ sajátállapotú részecske helyett egy $(\mathbf{r}\sigma)$ sajátállapotút rak be az állapotfüggvénybe. A keltő operátorok transzformációja szerint kifejezhetjük őket egymással,

$$\begin{aligned}
\psi_{\uparrow}(\mathbf{r})&=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}c_{\mathbf{k}\uparrow}=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}\left(u_{\mathbf{k}}^{*}\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}+v_{\mathbf{k}}\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}\right),\\
\psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r})&=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{kr}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{kr}}\left(u_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}+v_{\mathbf{k}}^{*}\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}\right),\\
\psi_{\downarrow}(\mathbf{r})&=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{kr}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{-i\mathbf{kr}}\left(-v_{\mathbf{k}}\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}+u_{\mathbf{k}}^{*}\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}\right),\\
\psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r})&=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}}e^{i\mathbf{kr}}\left(-v_{\mathbf{k}}^{*}\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}+u_{\mathbf{k}}\gamma_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}\right).
\end{aligned} \tag{35}$$

3.1. Töltéskorreláció

A (35) keltő operátorokkal felírhatjuk a szupravezető állapotban a töltéskorrelációt,

$$e^2 \langle \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')\rangle = e^2 \sum_{\sigma,\sigma'} \left\langle \psi^\dagger_\sigma(\mathbf{r})\psi_\sigma(\mathbf{r})\psi^\dagger_{\sigma'}(\mathbf{r}')\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\right\rangle, \tag{36}$$

ahol a várhatóértékhez az $\langle A\rangle = \left\langle \tilde{\phi}\middle|A\middle|\tilde{\phi}\right\rangle$ jelölést használtuk. Az összeg egyes tagjait kiszámolhatjuk (35) segítségével.

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

$$\begin{aligned}\left\langle \psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\\ \mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4}} e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{r}}e^{-i\mathbf{k}_3\mathbf{r}'}e^{i\mathbf{k}_4\mathbf{r}'}\cdot \\ \cdot\left\langle \left(u_{\mathbf{k}_1}\gamma^\dagger_{\mathbf{k}_1\uparrow} + v^*_{\mathbf{k}_1}\gamma_{-\mathbf{k}_1\downarrow}\right)\left(u^*_{\mathbf{k}_2}\gamma_{\mathbf{k}_2\uparrow} + v_{\mathbf{k}_2}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}_2\downarrow}\right)\right. \\ \left.\left(u_{\mathbf{k}_3}\gamma^\dagger_{\mathbf{k}_3\uparrow} + v^*_{\mathbf{k}_3}\gamma_{-\mathbf{k}_3\downarrow}\right)\left(u^*_{\mathbf{k}_4}\gamma_{\mathbf{k}_4\uparrow} + v_{\mathbf{k}_4}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}_4\downarrow}\right)\right\rangle.\end{aligned} \tag{37}$$

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

$$\begin{aligned}\left\langle \psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \frac{1}{V^2}\sum_{\substack{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\\ \mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4}} e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{r}}e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{r}}e^{-i\mathbf{k}_3\mathbf{r}'}e^{i\mathbf{k}_4\mathbf{r}'}\cdot \\ \cdot\left(\left\langle v^*_{\mathbf{k}_1}u^*_{\mathbf{k}_2}u_{\mathbf{k}_3}v_{\mathbf{k}_4}\cdot\gamma_{-\mathbf{k}_1\downarrow}\gamma_{\mathbf{k}_2\uparrow}\gamma^\dagger_{\mathbf{k}_3\uparrow}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}_4\downarrow}\right\rangle + \left\langle v^*_{\mathbf{k}_1}v_{\mathbf{k}_2}v^*_{\mathbf{k}_3}v_{\mathbf{k}_4}\cdot\gamma_{-\mathbf{k}_1\downarrow}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}_4\downarrow}\gamma_{-\mathbf{k}_3\downarrow}\gamma^\dagger_{-\mathbf{k}_4\downarrow}\right\rangle\right)\end{aligned} \tag{38}$$

adódik. Ezután felhasználhatjuk a (19) és (20) összefüggéseket, illetve azt, hogy

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma}\gamma^\dagger_{\mathbf{k}'\sigma'}\left|\tilde{\phi}\right\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}\left|\tilde{\phi}\right\rangle.$$

Ezekkel a végső alak

$$\begin{aligned}&\left\langle \psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \\ &= \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\left|v_{\mathbf{k}}\right|^2\right)\left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\left|u_{\mathbf{k}}\right|^2\right) + \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\left|v_{\mathbf{k}}\right|^2\right)^2.\end{aligned} \tag{39}$$

A többi korrelátort is hasonlóan kiszámíthatjuk, azokra

$$\begin{aligned}&\left\langle \psi^\dagger_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \\ &= \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\left|v_{\mathbf{k}}\right|^2\right)\left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\left|u_{\mathbf{k}}\right|^2\right) + \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\left|v_{\mathbf{k}}\right|^2\right)^2,\end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}&\left\langle \psi^\dagger_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \\ &= \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}u_{\mathbf{k}}v^*_{\mathbf{k}}\right)\left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}u^*_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}\right) + \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}}\left|v_{\mathbf{k}}\right|^2\right)^2,\end{aligned} \tag{41}$$

$$\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \\ = \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*\right)\left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}u_{\mathbf{k}}^*v_{\mathbf{k}}\right) + \left(\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2\right)^2 \tag{42}$$

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

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &\coloneqq \left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\left|v_{\mathbf{k}}\right|^2, \\
&\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle = G(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \\
&\left\langle\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - G(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \\
&\left\langle\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - G(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \\
F(\mathbf{r}-\mathbf{r}') &\coloneqq \left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}u_{\mathbf{k}}v_{\mathbf{k}}^*, \\
&\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle = -F(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \\
&\left\langle\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle = -F^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \\
&\left\langle\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle = F^*(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),
\end{aligned} \tag{43}$$

adódnak, ahol bevezettük az $F(\mathbf{r})$ és $G(\mathbf{r})$ függvényeket. A nem felírt korrelátorok mind nullák. Ezekkel kifejezve a korábbi eredményeket,

$$\begin{aligned}
\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= \left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle\left\langle\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle + \left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\right\rangle\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle, \\
\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= \left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle\left\langle\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle + \left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\right\rangle\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle, \\
\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= -\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle\left\langle\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle + \left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\right\rangle\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle, \\
\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= -\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\right\rangle\left\langle\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle + \left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\right\rangle\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle,
\end{aligned} \tag{44}$$

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

$$\begin{aligned}
\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot(\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')) + G^2(0), \\
\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot(\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')) + G^2(0), \\
\left\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= \left|F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|^2 + G^2(0), \\
\left\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\right\rangle &= \left|F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|^2 + G^2(0).
\end{aligned} \tag{45}$$

A (44) összefüggésben felismerhetjük a Wick-tételt, ami szerint ki lehet bontani a várhatóértéket több egyszerűbb tag összegére.

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

$$e^2\left\langle\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')\right\rangle = e^2\left(4\,G^2(0) + 2\left|F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|^2 - 2\,G^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + 2\,G(0)\cdot\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right). \tag{46}$$

3.2. Spinkorreláció

A spinsűrűség operátorok felírhatók a (35) keltő operátorok segítségével,

$$s_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) & \psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\end{pmatrix}\sigma_\alpha\begin{pmatrix}\psi_\uparrow(\mathbf{r})\\ \psi_\downarrow(\mathbf{r})\end{pmatrix}, \tag{47}$$

ahol $\alpha = x, y, z$ és σ_α a Pauli-mátrixok. A teljes spinkorrelációs függvény

$$\langle s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}')\rangle = \sum_\alpha \langle s_\alpha(\mathbf{r})s_\alpha(\mathbf{r}')\rangle\,. \tag{48}$$

A függvény kiszámolása hasonlóan tehető meg, mint a töltéskorrelációs függvénynél, először számoljuk ki $\langle s_z(\mathbf{r})s_z(\mathbf{r}')\rangle$ értékét.

$$\begin{aligned}\langle s_z(\mathbf{r})s_z(\mathbf{r}')\rangle = \frac{\hbar^2}{4}\Big(&\Big\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\Big\rangle - \Big\langle\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\uparrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\Big\rangle - \\ &- \Big\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\uparrow(\mathbf{r}')\Big\rangle + \Big\langle\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r})\psi_\downarrow(\mathbf{r})\psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\downarrow(\mathbf{r}')\Big\rangle\Big)\,,\end{aligned} \tag{49}$$

a (45) összefüggéseket felhasználva

$$\langle s_z(\mathbf{r})s_z(\mathbf{r}')\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\Big(-\left|F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|^2 - G^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + G(0)\cdot\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Big)\,. \tag{50}$$

$\langle s_x(\mathbf{r})s_x(\mathbf{r}')\rangle$ és $\langle s_y(\mathbf{r})s_y(\mathbf{r}')\rangle$-t kiszámolva azt látjuk, hogy a három korrelátor értéke megegyezik, így a teljes spinkorrelációs függvény

$$\begin{aligned}\langle s(\mathbf{r})s(\mathbf{r}')\rangle &= \frac{3\hbar^2}{2}\Big(-\left|F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|^2 - G^2(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + G(0)\cdot\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\Big)\\ &= \frac{3\hbar^2}{4}\Big(\langle\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')\rangle - 4\left|F(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right|^2 - 4\,G^2(0)\Big)\,.\end{aligned} \tag{51}$$

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

4.1. Normálállapot

4.1.1. $F(\mathbf{r})$ normálállapotban

4.1.2. $G(\mathbf{r})$ normálállapotban

4.2. Szupravezető állapot járuléka

4.2.1. $F(\mathbf{r})$ szupravezető járuléka

4.2.2. $G(\mathbf{r})$ szupravezető járuléka

4.3. Asszimptotikus viselkedés

5. Spin- és töltéskorrelációs függvények

5.1. Töltéskorreláció

5.2. Spinkorreláció

Hivatkozások