

Szupravezetőbeli spin- és töltéskorrelációk elméleti vizsgálata

Hajdú Csanád

Témavezető: Dr. Zaránd Gergely Attila

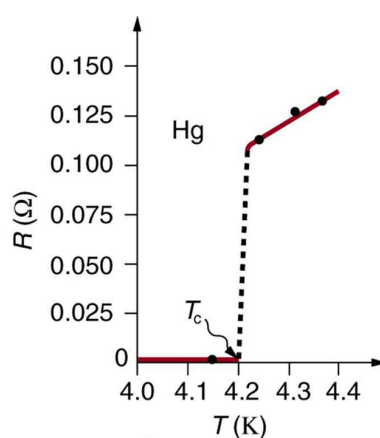
2021. 05. 21.

Tartalomjegyzék

| | |
|---|-----------|
| 1. Bevezetés | 2 |
| 2. Fizikai modell | 4 |
| 2.1. BCS-elmélet | 4 |
| 2.2. Hamilton-operátor meghatározása | 4 |
| 2.3. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai | 6 |
| 2.4. $u_{\mathbf{k}}$ és $v_{\mathbf{k}}$ kiszámolása | 7 |
| 2.5. BCS közelítés és a mi közelítésünk | 8 |
| 3. Korrelátorok számolása | 8 |
| 3.1. Töltéskorreláció | 9 |
| 3.2. Spinkorreláció | 11 |
| 4. $F(\mathbf{r})$ és $G(\mathbf{r})$ függvények meghatározása | 12 |
| 4.1. Normálállapot | 12 |
| 4.1.1. $F(\mathbf{r})$ normálállapotban | 12 |
| 4.1.2. $G(\mathbf{r})$ normálállapotban | 12 |
| 4.2. Szupravezető állapot járuléka | 12 |
| 4.2.1. $F(\mathbf{r})$ szupravezető járuléka | 12 |
| 4.2.2. $G(\mathbf{r})$ szupravezető járuléka | 12 |
| 4.3. Asszimptotikus viselkedés | 12 |
| 5. Spin- és töltéskorrelációs függvények | 12 |
| 5.1. Töltéskorreláció | 12 |
| 5.2. Spinkorreláció | 12 |

1. Bevezetés

A szupravezetés a 20. század elején lett felfedezve Heike Kamerlingh Onnes holland fizikus által, 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 van egy T_c kritikus hőmérséklet, ami alatt a vezető disszipáció nélkül képes áramot vezetni. A kritikus hőmérséklet értéke jellemzően 10 K alatt van, viszont vannak olyan anyagok is, amik már 100 K körül is szupravezetnek, az ilyen anyagokat magas hőmérsékletű szupravezetőknek nevezzük. Az ilyen anyagok 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. Az ideális vezetésből következik, hogy a szupravezető minta belsejében a mágneses tér erőssége állandó, a Meissner-effektus viszont ennél nagyobb megszorítást tesz, azt hogy a minta belsejében a mágneses tér állandó és zérus.

A szupravezetőket széles körben használják fel, az egyik alapvető jelenség, amit kihasználnak a Josephson-effektus, ahol két szupravezető rész közé egy vékony szigetelőt tesznek be és a két vezetőre egy egyenfeszültséget kötnek. Ezután azt tapasztaljuk, hogy a mintán egy váltóáram mérhető, aminek a frekvenciája arányos a vezetőkre kapcsolt feszültséggel. A Josephson-effektust használja ki például az úgynevezett SQUID (superconducting quantum interference device), amivel mágneses tereket lehet nagy pontossággal mérni. Ezen kívül még a Josephson-effektus alapján van definiálva az SI rendszerben a volt egysége. Még fontos felhasználási terület a nagyterű szupravezető mágnesek, amiket többek között az orvostudományban is használnak MRI-kben. Kvantumszámítógépekben is előnyös szupravezetőket használni a kvantumbitekhez, mivel az energiaspektrumukban van egy rés, így viszonylag magas hőmérsékleten is kicsi a zajuk.

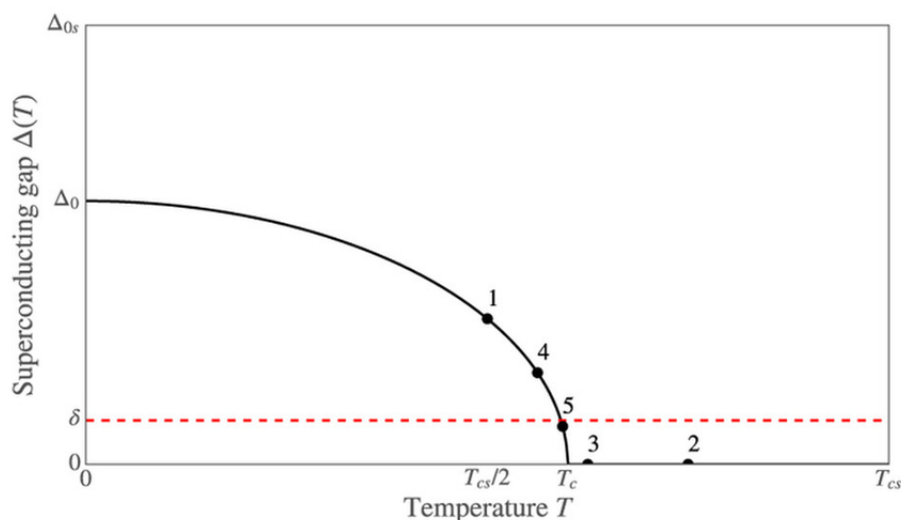
A felfedezése óta számos elmélet született a szupravezetés jelenségének leírására, a két meghatározó elmélet a Ginzburg–Landau-elmélet, ami egy fenomenológikus elmélet, illetve a BCS-elmélet, ami egy mikroszkópikus leírást ad. A Ginzburg–Landau-elméletet

¹<https://pressbooks.bccampus.ca/collegephysics/chapter/resistance-and-resistivity/>

1950-ben dolgozták ki Vitaly Ginzburg² és Lev Landau³ orosz fizikusok, az elmélet jó leírást ad a szupravezetők makroszkópikus tulajdonságaira, még az olyan anyagoknál is, amikre a BCS-elmélet nem érvényes. Ilyenek például a magas hőmérsékletű szupravezetők és nehéz fermion rendszerek. Az elméletből ezen kívül következik még az első- és másodfajú szupravezetők megkülönböztetése.

A BCS-elméletet John Bardeen⁴, Leon N. Cooper⁵ és John Robert Schrieffer⁶ amerikai fizikusok dolgozták ki, és publikálták 1957-ben, az elmélet egy mikroszkópikus leírásmodot ad a szupravezetés jelenségére. Az elmélet szerint a vezetési elektronok úgynevezett Cooper-párokat alkotnak egy köztük lévő vonzó kölcsönhatás miatt. Ezt először Cooper mutatta meg, hogy akármilyen gyenge vonzó kölcsönhatás mellett is a normálállapot instabil lesz és az elektronok párokba rendeződnek. A vonzó kölcsönhatás elektron-fonon kölcsönhatásokból származik és alacsony hőmérsékleten jön elő. Az elektronok párokba rendeződését mérésekkel is igazolni lehet, azt tapasztaljuk, hogy a vezető részecskék töltése 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 fog szupravezetni. A szupravezető gap értékének hőmérsékletfüggését a 2. ábrán láthatjuk.



2. ábra. Szupravezető gap a hőmérséklet függvényében.⁷

A gap jelenléte azt is jelenti, hogy kevés gerjesztés van a szupravezető állapotban, tehát az elektronok többsége alapállapotban van. Ez az állapot nagyon hasonlít a Bose–Einstein-kondenzációhoz, de a kialakulása másképp történik.

²Vitaly Lazarevich Ginzburg, Nobel-díjas (2003) orosz fizikus

³Lev Davidovich Landau, Nobel-díjas (1962) orosz fizikus

⁴John Bardeen, kétszeres Nobel-díjas (1956 és 1972) amerikai mérnök és fizikus

⁵Leon N. Cooper, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

⁶John Robert Schrieffer, Nobel-díjas (1972) amerikai fizikus

⁷<https://www.researchgate.net/figure/Sketch-of-the-superconducting-gap-D-...>

A dolgozat célja az, hogy a szupravezető gap jelenléte mellett vizsgáljuk a spin- és töltéskorrelációs függvényeket, és összehasonlítsuk őket a normálállapotban 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 normálállapotban, mind szupravezető állapotban. Ezen függvények asszimptotikus viselkedését is megvizsgáljuk és analitikus közelítőfüggvényeket 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. BCS-elmélet

A BCS-elméletben használt szupravezető alapállapot hullámfüggvénye

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

ahol ϕ_0 a vákuum állapot, $c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$ 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

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

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

$$\tilde{\phi}_n = \prod_{|\mathbf{k}| < k_F} c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \phi_0, \quad (3)$$

ez az

$$u_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 0, & \text{ha } |\mathbf{k}| < k_F \\ 1, & \text{ha } |\mathbf{k}| > k_F \end{cases} \quad \text{és} \quad v_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 1, & \text{ha } |\mathbf{k}| < k_F \\ 0, & \text{ha } |\mathbf{k}| > k_F \end{cases} \quad (4)$$

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,

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

ahol

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

A kölcsönhatási tag

$$H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}, \ell} V_{\mathbf{k}\ell} c_{\ell\uparrow}^\dagger c_{-\ell\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (6)$$

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

$$\tilde{\phi} = (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \phi_{\mathbf{k}0} = u_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}0} + v_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}1} \quad (7)$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{\phi} &= (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) (u_{\ell} + v_{\ell} c_{\ell\uparrow}^\dagger c_{-\ell\downarrow}^\dagger) \phi_{\mathbf{k}0\ell 0} = \\ &= u_{\mathbf{k}} u_{\ell} \phi_{\mathbf{k}0\ell 0} + u_{\mathbf{k}} v_{\ell} \phi_{\mathbf{k}0\ell 1} + v_{\mathbf{k}} u_{\ell} \phi_{\mathbf{k}1\ell 0} + v_{\mathbf{k}} v_{\ell} \phi_{\mathbf{k}1\ell 1}. \end{aligned} \quad (8)$$

A (6) definícióból ezután következik, hogy

$$\langle \tilde{\phi} | H_{\text{int}} | \tilde{\phi} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \ell} (V_{\mathbf{k}\ell} v_{\mathbf{k}}^* u_{\ell}^* u_{\mathbf{k}} v_{\ell} + V_{\ell\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^* v_{\ell}^* v_{\mathbf{k}} u_{\ell}). \quad (9)$$

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

$$\Delta_{\mathbf{k}} := - \sum_{\ell} V_{\mathbf{k}\ell} u_{\ell}^* v_{\ell}, \quad (10)$$

aminek segítségével

$$\langle \tilde{\phi} | H_{\text{int}} | \tilde{\phi} \rangle = - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* + \Delta_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}) \quad (11)$$

felírható.

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

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi} | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | \tilde{\phi} \rangle &= v_{\mathbf{k}}^* \langle \phi_{\mathbf{k}1} | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | \phi_{\mathbf{k}0} \rangle u_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^*, \\ \langle \tilde{\phi} | c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} | \tilde{\phi} \rangle &= \langle \tilde{\phi} | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | \tilde{\phi} \rangle^* = u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Ez alapján (11) átalakítható,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\phi} | H_{\text{int}} | \tilde{\phi} \rangle &= - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} \langle \tilde{\phi} | c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger | \tilde{\phi} \rangle + \Delta_{\mathbf{k}}^* \langle \tilde{\phi} | c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} | \tilde{\phi} \rangle) \\ &= \langle \tilde{\phi} | - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) | \tilde{\phi} \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

így H_{int} teljes alakja

$$H_{\text{int}} = - \sum_{\mathbf{k}} (\Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}). \quad (14)$$

A teljes Hamilton-operátor így felírható,

$$H_{\text{BCS}} = H_0 + H_{\text{int}} = \sum_{\mathbf{k}} [\xi_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow} + c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}) - \Delta_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger - \Delta_{\mathbf{k}}^* c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}]. \quad (15)$$

2.3. Az szupravezető-állapot léptetőoperátorai

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

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

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,

$$\gamma_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger = A c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger + B c_{-\mathbf{k}\downarrow}, \quad A, B \in \mathbb{C}, \quad (17)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger = C c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + D c_{-\mathbf{k}\uparrow}, \quad C, D \in \mathbb{C}. \quad (18)$$

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

$$\left\{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right\} = \left\{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'} \right\} = 0, \quad (19)$$

$$\left\{ \gamma_{\mathbf{k}\sigma}, \gamma_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \right\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (20)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}\sigma} \tilde{\phi} = 0, \quad (21)$$

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 $c_{-\ell\downarrow}^\dagger$ hatását a $\tilde{\phi}$ alapállapotra.

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

és

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

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

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

Megjegyezzük, hogy az együtthatókban van egy komplex fázisnyi szabadsági fok, ezt konvenció szerint úgy választjuk meg, hogy u_ℓ együtthatója egység legyen.

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

$$\begin{aligned}\gamma_{\ell\uparrow} &= u_\ell c_{\ell\uparrow} - v_\ell c_{-\ell\downarrow}^\dagger, \\ \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger &= u_\ell^* c_{\ell\uparrow}^\dagger - v_\ell^* c_{-\ell\downarrow}, \\ \gamma_{-\ell\downarrow} &= u_\ell c_{-\ell\downarrow} + v_\ell c_{\ell\uparrow}^\dagger, \\ \gamma_{-\ell\downarrow}^\dagger &= u_\ell^* c_{-\ell\downarrow}^\dagger + v_\ell^* c_{\ell\uparrow}\end{aligned}\tag{25}$$

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

$$\begin{aligned}c_{\ell\uparrow} &= u_\ell^* \gamma_{\ell\uparrow} + v_\ell \gamma_{-\ell\downarrow}^\dagger, \\ c_{\ell\uparrow}^\dagger &= u_\ell \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger + v_\ell^* \gamma_{-\ell\downarrow}, \\ c_{-\ell\downarrow} &= -v_\ell \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger + u_\ell^* \gamma_{-\ell\downarrow}, \\ c_{-\ell\downarrow}^\dagger &= -v_\ell^* \gamma_{\ell\uparrow} + u_\ell \gamma_{-\ell\downarrow}^\dagger.\end{aligned}\tag{26}$$

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

$$H_{\text{BCS}} \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger \tilde{\phi} = \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger (H_{\text{BCS}} + E_\ell) \tilde{\phi},\tag{27}$$

amit tovább írva,

$$[H_{\text{BCS}}, \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger] = E_\ell \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger.\tag{28}$$

$[H_{\text{BCS}}, \gamma_{\ell\uparrow}^\dagger]$ kiszámolásához számoljuk ki egyenként $[H_{\text{BCS}}, c_{\ell\uparrow}^\dagger]$ és $[H_{\text{BCS}}, c_{-\ell\downarrow}]$ értékét,

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

illetve

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

A (25) összefüggést felhasználva felírható, hogy

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

amit egy lineáris egyenletrendszerre hozhatunk,

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

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,

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

adódik.

2.5. BCS közelítés és a mi közelítésünk

A BCS-elméletben Δ_ℓ definíciója

$$\Delta_\ell = \begin{cases} \Delta, & \text{ha } |\xi_\ell| < \hbar\omega_D \\ 0, & \text{ha } |\xi_\ell| > \hbar\omega_D \end{cases}, \quad (34)$$

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

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

alakú, ami az éles levágáshoz hasonlóan nagyjából a $[-\hbar\omega_D, \hbar\omega_D]$ tartományon nem zérus, Δ_ℓ értékét mi is konstansnak vesszük a vizsgált tartományon, $\Delta_\ell \equiv \Delta$.

A legtöbb szupravezetőben $|\Delta| \ll \hbar\omega_D \ll E_F$, 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,

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

3.1. Töltéskorreláció

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

$$e^2 \langle \rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}') \rangle = e^2 \sum_{\sigma, \sigma'} \langle \psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\sigma'}(\mathbf{r}') \rangle, \quad (36)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}') \psi_{\uparrow}(\mathbf{r}') \rangle &= \frac{1}{V^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \\ \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4}} e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}_3 \mathbf{r}'} e^{i\mathbf{k}_4 \mathbf{r}'} \cdot \\ &\quad \cdot \langle (u_{\mathbf{k}_1} \gamma_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}_1}^* \gamma_{-\mathbf{k}_1 \downarrow}) (u_{\mathbf{k}_2}^* \gamma_{\mathbf{k}_2 \uparrow} + v_{\mathbf{k}_2} \gamma_{-\mathbf{k}_2 \downarrow}^{\dagger}) \\ &\quad (u_{\mathbf{k}_3} \gamma_{\mathbf{k}_3 \uparrow}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}_3}^* \gamma_{-\mathbf{k}_3 \downarrow}) (u_{\mathbf{k}_4}^* \gamma_{\mathbf{k}_4 \uparrow} + v_{\mathbf{k}_4} \gamma_{-\mathbf{k}_4 \downarrow}^{\dagger}) \rangle. \end{aligned} \quad (37)$$

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

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

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

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

A többi korrelátort is hasonlóan kiszámíthatjuk, azokra

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

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

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

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

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

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}
 \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, \quad (44)
 \end{aligned}$$

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

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

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,

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

3.2. Spinkorreláció

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

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

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

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

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

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

a (45) összefüggéseket felhasználva

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

$\langle s_x(\mathbf{r})s_x(\mathbf{r}') \rangle$ 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

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

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