

Uniwersytet Jagielloński
Instytut Fizyki im. Mariana Smoluchowskiego
Zakład Teorii Materii Skondensowanej



Jan Kaczmarczyk

**Para Coopera i teoria
Bardeena-Coopera-Schrieffera
nadprzewodników ze spinowo-zależnymi
masami**

Praca magisterska

Opiekun naukowy: Prof. dr hab. Józef Spałek

Kraków, 2007

Spis treści

1	Wprowadzenie oraz sformułowanie problemu	2
1.1	Oryginalny problem Coopera (1956): para z pędem środka masy $\mathbf{Q} = 0$	2
1.2	Spinowo-zależne masy kwazicząstek $m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$	9
1.3	Stany elektronowe w gazie idealnym ze spinowo-zależnymi masami	11
1.3.1	Spontaniczne rozszczepienie spinowe mas ($\mathbf{B} = 0$)	11
1.3.2	Rozszczepienie mas wywołane polem ($\mathbf{B} \neq 0$)	13
1.4	Cel pracy	14
1.5	Układ dwuwymiarowy	16
2	Nieruchoma para Coopera ($\mathbf{Q} = 0$) dla spinowo-zależnych mas kwazicząstek	
	$(m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow})$	18
2.1	Model ze skalarną masą efektywną	19
2.2	Model z masą będącą operatorem	24
2.3	Podsumowanie	28
3	Poruszająca się para Coopera ($\mathbf{Q} \neq 0$) przy spinowo-zależnych masach ($m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$)	29
3.1	Stan $ 1 \uparrow\rangle 2 \downarrow\rangle$ łamiący zasadę nierozróżnialności cząstek	30
3.2	Energia wiązania pary - wyniki numeryczne	33
3.2.1	Morze Fermiego kwazicząstek ze spinowo-zależnymi masami	34
3.2.2	Stan związany pary	36
3.3	Dyskusja braku antysymetrii funkcji falowej	41
3.3.1	Rozważania ogólne	43
3.3.2	Funkcja falowa pary w spoczynku - kwazicząstki nierozróżnialne	44
3.3.3	Rozróżnialność kwazicząstek dla poruszającej się pary	46
3.3.4	Dlaczego brakuje symetrii?	46
3.3.5	Kwazicząstki rozróżnialne	48
3.4	Ogólna funkcja falowa spełniająca warunki symetrii i jej nieadekwatność	49

4	Opis w ramach teorii BCS, przy $m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$	54
4.1	Problem parowania	54
4.2	Diagonalizacja hamiltonianu	55
4.3	Równanie na przerwę	58
4.4	Obliczenie $\Delta_0 \equiv \Delta(T = 0)$	58
4.5	Wyniki numeryczne	60
5	Podsumowanie i konkluzje	65
5.1	Odniesienie do wyników eksperymentalnych dla CeCoIn_5	66
5.2	Co dalej?	68
5.3	Najważniejsze wyniki pracy	70

Podziękowania

Chciałbym gorąco podziękować kilku osobom, bez których napisanie tej pracy byłoby trudniejsze, bądź nawet niemożliwe. Przede wszystkim dziękuję profesorowi Józefowi Spałkowi za owocną dwuletnią współpracę, która do powstania tej pracy doprowadziła, a także za wybór tak interesującego tematu, wielokrotną korektę treści pracy, bezcenne dyskusje oraz bardzo dużą ilość czasu mi poświęconego. W drugiej kolejności dziękuję mgr. Kubie Jędrakowi oraz mgr. Michałowi Hellerowi za dyskusje na temat pracy oraz jej korektę.

Praca była współfinansowana z grantu 1P03P 001 29 przyznanego przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz subsydium profesorskiego prof. Józefa Spałka przyznanego przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej na lata 2003-2007.

Dziękuję także za stypendia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego oraz "Sapere Auso" Małopolskiej Fundacji Stypendialnej, które otrzymywałem w latach 2005-2007.

Abstract

The goal of this thesis is to formulate a theory of superconductivity of the BCS type in the case of spin-dependent masses of quasiparticles ($m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$). In chapter 1 we review the theoretical description of the superconducting state. We also summarize the theory of mass spin dependence and stress the modification of the Landau Fermi-liquid theory resulting from the mass splitting. In chapter 2 we consider a single Cooper pair of quasiparticles with the spin-dependent masses. We derive an analytic solution in the case of zero center-of-mass momentum, $\mathbf{Q} = 0$. In chapter 3 we provide the numerical solution which depends on the center-of-mass momentum. It turns out that a moving pair has a greater binding energy than the motionless one. We also discuss the reason behind the lack of proper symmetry of a moving pair, which constitutes the fundamental difference between standard Cooper pairs and those with spin-split masses. Chapter 4 contains the Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) theory for the case of motionless pairs. We derive an analytic formula for the binding energy in the case of zero temperature. Dependence of the binding energy on the magnetic field and the temperature has been examined numerically. In chapter 5 we provide a summary of the results. We also discuss a possible application of our theory to the CeCoIn₅ system, in which both the Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov state (FFLO - state with moving pairs), as well as the spin-dependent masses in the normal state, have been observed.

Streszczenie

Celem pracy jest sformułowanie teorii nadprzewodnictwa typu BCS przy spinowo-zależnych masach kwazicząstek ($m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$). W rozdziale 1 podajemy język opisu teoretycznego stanu nadprzewodzącego oraz przedstawiamy skrótowo teorię związaną z rozszczepieniem spinowym mas kwazicząstek, a także omawiamy modyfikację teorii Landaua cieczy Fermiego, którą takie rozszczepienie mas wprowadza. Koncepcje te są punktem wyjścia do sformułowania teorii nadprzewodnictwa przy spinowo-zależnych masach. W rozdziale 2 rozważono pojedynczą parę Coopera przy masie zależnej od kierunku spinu cząstki ($m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$). Przedyskutowano sposób wprowadzenia takich mas do hamiltonianu efektywnego oraz przedstawiono rozwiązanie analityczne przy zerowym pędzie środka masy pary $\mathbf{Q} = 0$. W rozdziale 3 zaprezentowano rozwiązanie numeryczne, przy pomocy którego szuka się stanu o najniższej energii minimalizując ją względem pędu \mathbf{Q} . Okazuje się, że rozwiązanie z niezerowym pędem \mathbf{Q} jest korzystniejsze energetycznie od rozwiązania z $\mathbf{Q} = 0$ realizującego się dla $m_{\uparrow} = m_{\downarrow} = m$. Omówiono także przyczynę braku odpowiedniej symetrii funkcji falowej takiej pary Coopera, co stanowi o fundamentalnej różnicy pomiędzy zwykłymi parami Coopera i tymi ze spinowo-zależnymi masami. Rozdział 4 dotyczy teorii Bardeena-Coopera-Schrieffera (BCS) z zerowym pędem par Coopera przy masach kwazicząstek zależnych od spinu. Wyprowadzono tu wyrażenie analityczne na energię wiązania w zerowej temperaturze. Obliczono numerycznie zależność energii wiązania od temperatury i pola magnetycznego. W rozdziale 5 podsumowano pracę oraz omówiono zastosowanie wprowadzonej teorii do opisu związku CeCoIn_5 , w którym zaobserwowano rozszczepione masy w stanie normalnym oraz przejście ze stanu BCS do stanu Fulde-Ferrella-Larkina-Owczynnikowa (FFLO) - stanu z niezerowym pędem par Coopera.

Motywacja

Teoria nadprzewodnictwa ze spinowo-zależnymi masami kwazicząstek jest potrzebna ze względu na odkrycie takich mas na podstawie pomiarów efektu de Haasa van Alphen w nadprzewodniku ciężkofermionowym CeCoIn_5 [1]. Przeprowadzone pomiary wykazały, że w stanie normalnym w polach powyżej H_{c2} masy kwazicząstek z poziomu $4f$ ulegają spinowemu rozszczepieniu. Dodatkowo zaobserwowano fazę Fulde-Ferrella-Larkina-Owczynnikowa (FFLO) [2, 3, 4] w tym samym związku w stanie nadprzewodzącym blisko H_{c2} [5, 6] (por. rys. 5.1). Przypuszczamy, że te dwa fakty są ze sobą powiązane i za pojawienie się dobrze określonej fazy FFLO może odpowiadać występowanie w układzie spinowo-zależnych mas. W opisie teoretycznym układu CeCoIn_5 teoria nadprzewodnictwa ze spinowo-zależnymi masami kwazicząstek może zatem odegrać znaczącą rolę. Celem pracy jest sformułowanie zarysów takiej właśnie teorii.

Słowo wstępne

Oznaczenia i konwencje

W pracy tej często pojawiają się określenia będące pewnego rodzaju żargonem w fizyce ciała stałego. I tak, wektor falowy \mathbf{k} jest zamiennie nazywany *pędem*, *kwazipędem* oraz *wektorem falowym*. W zasadzie określenie go *pędem* nie jest do końca poprawne, gdyż w stanie Blocha nie jest on wartością własną tylko wartością średnią operatora pędu, ale tak przyjęło się mówić. Następnie, zamiennie używamy określeń *cząstka* i *kwazicząstka* mimo, że mamy do czynienia tylko z kwazicząstkami. Kolejną konwencją wymagającą komentarza jest oznaczanie wektora przez pogrubiony znak $\vec{k} \equiv \mathbf{k}$, a wartości wektora przez znak niepogrubiony $|\mathbf{k}| \equiv |\vec{k}| \equiv k$. Przestrzeń wektorów falowych \mathbf{k} będziemy nazywali przestrzenią odwrotną. Przez σ oznaczamy rzut *spinowego momentu magnetycznego* (a nie spinu!) na kierunek pola magnetycznego \mathbf{B} ; zatem $\mu_s^z = g_s \frac{\hbar}{2} \mu_B \sigma$, gdzie $g_s = 2.0023$. Wartość $\sigma = \pm 1$ będziemy też symbolicznie oznaczać przy pomocy strzałek $\sigma = 1$ odpowiada $\sigma \equiv \uparrow$, natomiast $\sigma = -1$ jest ekwiwalentne z $\sigma \equiv \downarrow$. Przez σ_i^z , $i = 1, 2$ rozumiemy operator z -owej składowej (zgodnej z polem) spinowego momentu magnetycznego i -tego elektronu o wartościach własnych ± 1 . Stany spinowe oznaczamy przy pomocy strzałek. W stanie $|1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle$ pierwszy elektron ma spinowy moment magnetyczny skierowany zgodnie z polem, a drugi - przeciwnie do pola. Ponieważ określenie *rzut spinowego momentu magnetycznego* jest długie i często z niego korzystamy, to odąd zastąpimy je przez *rzut spinu*. Przez rzut spinu zawsze będziemy więc rozumieli rzut spinowego momentu magnetycznego. W całej pracy rozpatrujemy układy trójwymiarowe, chyba że zaznaczono inaczej.

Pole magnetyczne

Pole magnetyczne jest skierowane "w górę" osi z . W ramach tej pracy opisano oddziaływanie elektronów ze stałym polem magnetycznym tylko poprzez spinowy wyraz Zeemana. Magnetyzm orbitalny Landaua jest bardzo trudno uwzględnić w przedstawionych rachunkach. Ponadto, pokazano dla układu CeCoIn_5 , że paramagnetyzm Pauliego mocno przeważa nad efektami orbitalnymi [6, 7] co jest cechą ogólną wymaganą do obserwacji fazy FFLO [8]. Tak więc, wszędzie gdzie napisano, że uwzględniono pole magnetyczne chodzi tylko i wyłącznie o wyraz Zeemana. Oczywiście pole magnetyczne wnika w nadprzewodnik w postaci sieci wirów, czego również nie uwzględniamy. Możliwość współistnienia fazy FFLO i sieci wirów udowodniono w pracy [8].

Rozdział 1

Wprowadzenie oraz sformułowanie problemu

W rozdziale tym podsumujemy najpierw oryginalne podejście Coopera [9] do stanu związanego oddziałującej pary elektronów na powierzchni Fermiego, a następnie scharakteryzujemy specyfikę takiego samego problemu w sytuacji, gdy masy cząstek parujących się są różne. W tym celu omówimy skrótowo mechanizm rozszczepienia mas [10, 11, 12] oraz wynikającą z tego faktu modyfikację teorii Landaua cieczy Fermiego. Przedstawione koncepcje będą punktem wyjścia do sformułowania teorii nadprzewodnictwa przy spinowo-zależnych masach.

1.1 Oryginalny problem Coopera (1956): para z pędem środka masy $\mathbf{Q} = 0$

Omówimy tutaj oryginalne podejście Coopera z pewną modyfikacją (wprowadzenie obszarów W_i), która pozwoli nam w dalszej części pracy zająć się przypadkiem parowania kwazicząstek o rozszczepionych masach.

Rozważmy parę oddziałujących ze sobą dwóch elektronów w obecności morza Fermiego nieoddziałujących elektronów. Rozpatrywane elektrony oddziałują między sobą, ale nie z elektronami morza Fermiego. Jest to dość sztuczne założenie, ale bardzo pouczające. Będziemy chcieli obliczyć energię takiego układu dwóch elektronów w temperaturze 0 K w zależności od wielkości potencjału parującego oraz parametrów pasywnego morza Fermiego. W tym celu rozwiązujemy niezależne od czasu równanie Schrödingera

$$H\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2), \quad (1.1)$$

gdzie

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (1.2)$$

Jak widać, hamiltonian składa się tylko z części kinetycznych dla obu elektronów $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2$, $i = 1, 2$ oraz z efektywnego potencjału oddziaływania $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. O potencjale tym zakładamy, że zależy jedynie od odległości między elektronami $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V(r)$, gdzie $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. W szczególności potencjał ten nie zależy od spinu elektronów, dzięki czemu funkcja falowa separuje się na część przestrzenną i spinową, jako że hamiltonian (1.2) jest niezależny od spinu, tj.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2). \quad (1.3)$$

Na razie interesował nas będzie stan singletowy, w którym $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle - |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle)$.

Przestrzenną funkcję falową konstruujemy standardowo jako superpozycję stanów bazowych - funkcji falowych elektronów nieoddziałujących. Używamy tu najprostszych funkcji falowych, tzn. opisujących nieoddziałujące elektrony w pudle o objętości V przy periodycznych warunkach brzegowych. Funkcje te to fale płaskie¹

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1.4)$$

przy czym czynnik $\frac{1}{\sqrt{V}}$ wynika z normalizacji. Energia stanu o wektorze falowym \mathbf{k} wynosi $E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}$. Najwyższy obsadzony poziom nazywamy *poziomem Fermiego*. Poziom ten ma energię $\epsilon_F = \frac{\hbar^2\mathbf{k}_F^2}{2m}$, gdzie \mathbf{k}_F jest wektorem falowym Fermiego. Można policzyć, że dla N elektronów w układzie trójwymiarowym $k_F = (3\pi^2\frac{N}{V})^{1/3}$. Tak więc, przestrzenna funkcja falowa w naszym problemie dwóch elektronów będzie miała postać

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)\Psi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2}. \quad (1.5)$$

Wiadomo z twierdzenia spin-statystyka [13], że funkcja falowa elektronów, jako fermionów, musi być antysymetryczna ze względu na przestawienie cząstek², tzn. musi zmieniać znak przy transformacji $(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \leftrightarrow (\mathbf{r}_2, \sigma_2)$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \sigma_2, \sigma_1). \quad (1.6)$$

Z postaci (1.3) funkcji falowej wynika, że skoro część spinowa funkcji $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ dla założonego stanu singletowego jest antysymetryczna $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = -\chi(\sigma_2, \sigma_1)$, to część przestrzenna musi być symetryczna $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$. Zauważmy, że symetria $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ narzuca

¹Nie używamy funkcji falowych Blocha, gdyż dla zjawiska nadprzewodnictwa, które chcemy opisać, detale struktury elektronowej mają drugorzędne znaczenie.

²Traktujemy tutaj spin jako współrzedną dychotomiczną, nie jako liczbę kwantową.

symetrię współczynników $\alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \alpha_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1}$. Ten warunek sprawdzimy w rozdziale 3, w ogólniejszym przypadku. Jak się okaże, dla spinowo-zależnych mas, nie będzie on spełniony, co prowadzi do załamania warunku symetryczności przestrzennej funkcji falowej. *Ten fundamentalny fakt stanowi jeden z zasadniczych wyników tej pracy.*

Oddziaływanie $V(r)$ zachowuje pęd środka masy, więc możemy się spodziewać uproszczenia problemu przy przejściu do współrzędnych środka masy

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2}; \quad \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \quad (1.7)$$

oraz do współrzędnych względnych

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}{2}. \quad (1.8)$$

Funkcja falowa $\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ oraz hamiltonian w nowych zmiennych przedstawiają się następująco

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{V} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1.9)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(r). \quad (1.10)$$

W powyższym wyrażeniu μ oznacza masę efektywną układu cząstek oddziałujących (w tym przypadku $\mu = \frac{m}{2}$), M jest całkowitą masą układu ($M = 2m$), natomiast symbole $\nabla_{\mathbf{R}}$ oraz $\nabla_{\mathbf{r}}$ oznaczają operator gradientu we współrzędnych \mathbf{R} oraz \mathbf{r} odpowiednio. Sumowanie w wyrażeniu (1.9) odbywa się tylko po pędzie względnym \mathbf{k} , gdyż pęd środka masy \mathbf{Q} jest zachowany.

Po wstawieniu funkcji falowej (1.9) do równania Schrödingera z hamiltonianem (1.10) otrzymujemy

$$\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2M} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu} + V(r) - E \right] \frac{1}{V} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 0. \quad (1.11)$$

Mnożąc powyższe równanie przez $e^{-i\mathbf{Q}\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$, a następnie wykonując całkę w zmiennych \mathbf{r} po całej objętości V i korzystając ze związku $\frac{1}{V} \int_V e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} d^3r = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, dostajemy

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2M} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2\mu} - E \right) \alpha_{\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(r) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r = 0. \quad (1.12)$$

Oznaczając element macierzowy potencjału parującego $V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \equiv \frac{N}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(r) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r$, energię kinetyczną ruchu środka masy $\epsilon_{\mathbf{Q}} \equiv \frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2M}$ oraz energię kinetyczną ruchu względnego $\epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu}$, otrzymujemy z (1.12) po prostych przekształceniach równanie na współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}}$ w postaci (zmieniliśmy indeksy $\mathbf{k} \leftrightarrow \mathbf{k}'$)

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (1.13)$$

Dalsze postępowanie zależy od tego, jaką przyjmiemy postać potencjału parującego $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$. Potencjał ten może być opisywany skomplikowanymi wyrażeniami, jednak chodzi nam tutaj o uchwycenie najważniejszej fizyki problemu. Przyjmujemy więc, tak jak w oryginalnej pracy Coopera [9], że przyciągający potencjał jest stały w wąskiej warstwie powyżej poziomu Fermiego, tj.

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m}, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m}, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_1{}^2}{2m}, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_2{}^2}{2m} \in [\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D], \\ 0, & \text{w pozostałych przypadkach,} \end{cases} \quad (1.14)$$

gdzie ϵ_F jest energią Fermiego, natomiast $\hbar\omega_D$ to energia Debye'a wyznaczająca szerokość obszaru powyżej powierzchni Fermiego, w którym wartość potencjału parującego jest niezerowa. Energia Debye'a jest maksymalną energią fononów akustycznych w układzie. Postać powyższych warunków wynika z faktu, że oddziaływanie między elektronami, prowadzące do zjawiska nadprzewodnictwa, odbywa się za pośrednictwem fononów.

Potencjał $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ powinien być explicite funkcją \mathbf{k} oraz \mathbf{k}' , czyli pędów względnych otrzymanych z $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$ po przejściu do układu środka masy. Trzeba więc z warunków w przestrzeniach $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2$ przejść na warunki w przestrzeniach \mathbf{k} oraz \mathbf{k}' . W tym celu obszary w przestrzeni \mathbf{k}_1 i \mathbf{k}_2 (podobnie \mathbf{k}'_1 oraz \mathbf{k}'_2), dla których potencjał przyjmuje niezerową wartość oznaczymy odpowiednio W_1 i W_2

$$W_i = \{\mathbf{k} \mid \epsilon_F \leq \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_i} \leq \epsilon_F + \hbar\omega_D\}, \quad i = 1, 2. \quad (1.15)$$

W obecnym przypadku równych mas ($m_1 = m_2 = m$) obszary W_1 i W_2 są oczywiście ekwiwalentne. Na podstawie transformacji do układu środka masy (1.7, 1.8) warunki (1.15) przekładają się na warunki w przestrzeni \mathbf{k} oraz \mathbf{k}' . Oznaczmy więc

$$\overline{W}_{\mathbf{Q}} = \{\mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}{2} \mid \mathbf{k}_1 \in W_1 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_2 \wedge \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2\}. \quad (1.16)$$

Ostatecznie wyrażenie (1.14) na potencjał możemy zatem zapisać jako

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}} \vee \mathbf{k}' \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}. \end{cases} \quad (1.17)$$

Widać stąd, że oddziałuje tylko taka para elektronów, której pęd względny należy do $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$. Co więcej, oddziaływanie nie wyprowadza pędu względnego pary poza ten obszar. Oczywiście $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ zależy od pędu środka masy \mathbf{Q} , który jest stałym parametrem (całką ruchu). W dalszej części pracy scharakteryzujemy dokładniej obszar $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$.

Po wykorzystaniu otrzymanej postaci potencjału (1.17) równanie (1.13) przyjmuje prostszą postać

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \frac{V_0}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}, & \text{dla } \mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}. \end{cases} \quad (1.18)$$

Z równania tego wynika, że stany spod poziomu Fermiego nie występują w superpozycji (1.9), co jest zgodne z zakazem Pauliego - stany te są bowiem obsadzone. Sumując stronami po $\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}$ otrzymujemy

$$\sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \alpha_{\mathbf{k}} = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \alpha_{\mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (1.19)$$

Po podzieleniu stronami przez $\sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \alpha_{\mathbf{k}}$ dostajemy równanie całkowe na energię pary w postaci

$$1 = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (1.20)$$

Po chwili zastanowienia możemy oznaczyć energię układu - dwóch oddziaływujących elektronów - jako

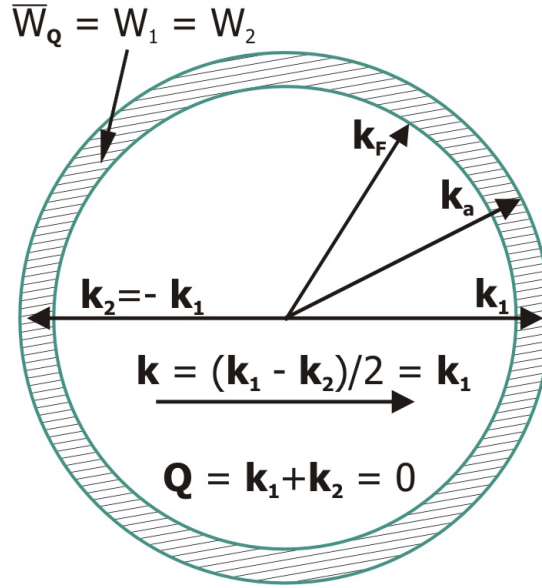
$$E = 2\epsilon_F - \Delta. \quad (1.21)$$

Interpretacja powyższego oznaczenia jest następująca: gdyby oddziaływania nie było, energia elektronów byłaby równa $2\epsilon_F$, czyli elektrony obsadziłyby stany o najniższej energii dostępnej przy uwzględnieniu zakazu Pauliego. Skoro jednak występuje oddziaływanie, to energia ulega zmniejszeniu o wielkość Δ zwaną energią wiązania. Dla nieoddziałującej pary elektronów mamy oczywiście $\Delta = 0$.

Wstawiając wyrażenie na energię pary do równania (1.20) dostajemy

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - 2\epsilon_F + \Delta}. \quad (1.22)$$

Zastanówmy się przez chwilę nad fizyką wynikającą z tego równania. Widać, że Δ jest monotoniczną funkcją potencjału parującego V_0 , co nie powinno dziwić (im mocniejszy potencjał parujący, tym większa energia wiązania). Możemy także wywnioskować, że największą energią wiązania przy ustalonym potencjale V_0 dostaniemy, gdy duży będzie zakres sumowania (obszar $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$) oraz dla znacznej części obszaru sumowania mały będzie mianownik $\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - 2\epsilon_F + \Delta$. Oba te warunki, w przypadku mas niezależnych od spinu, są najlepiej spełnione dla zerowego pędu środka masy pary \mathbf{Q} . Dla takiej, nieruchomej pary mamy $\epsilon_{\mathbf{Q}} = 0$ oraz zakres całkowania jest maksymalny z możliwych.



Rysunek 1.1: Konfiguracja pędowa elektronów tworzących parę Coopera. Wektor \mathbf{k}_a jest zdefiniowany przez $\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_a^2}{2m} = \epsilon_F + \hbar\omega_D$. Część zakreskowana definiuje obszar \overline{W}_Q , w którym potencjał parujący jest różny od zera. Pęd środka masy pary $\mathbf{Q} = 0$.

Dla standardowej pary Coopera mamy więc $\mathbf{Q} = 0$, co po skorzystaniu z praw transformacji daje $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = 0 \Rightarrow \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$, skąd wynika (patrz rys. 1.1)

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2}{2} = \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2, \quad (1.23)$$

$$W_1 = W_2 = \overline{W}_Q = \{\mathbf{k} | \epsilon_F \leq \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \leq \epsilon_F + \hbar\omega_D\}. \quad (1.24)$$

Równość obszarów W_1, W_2 oraz \overline{W}_Q jest powodem, dla którego przy omawianiu problemu Coopera nigdzie nie można natknąć się na taki sposób wprowadzenia potencjału, jak w tej pracy. Z reguły od razu wypisywana jest następująca postać potencjału równoważna (przy $\mathbf{Q} = 0$) z (1.17)

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m} \in [\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D], \\ 0, & \text{dla } \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \notin [\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D] \vee \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'^2}{2m} \notin [\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D]. \end{cases} \quad (1.25)$$

Zauważmy, że występująca tu wielkość $\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ jest równa połowie energii $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu}$, gdyż $\mu = \frac{m}{2}$

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = 2 \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (1.26)$$

Wracając do naszego problemu, równanie na przerwę (1.22) przy założeniu zerowego pędu środka masy pary $\mathbf{Q} = 0$ wygląda następująco

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\epsilon_F \leq \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \leq \epsilon_F + \hbar\omega_D} \frac{1}{2\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} - 2\epsilon_F + \Delta}. \quad (1.27)$$

Skorzystaliśmy tu z postaci obszaru $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ dla $\mathbf{Q} = 0$ oraz z faktu, że $\epsilon_{\mathbf{Q}} = 0$. Zamieniając sumę na całkę według znanej reguły

$$\sum_{\mathbf{k}}(\dots) = \int d\mathbf{k} \rho_{\sigma}(\mathbf{k})(\dots) = \int d\epsilon \rho(\epsilon)(\dots), \quad (1.28)$$

gdzie $\rho_{\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$ i $\rho(\epsilon)$ to gęstości stanów w odpowiednich przestrzeniach, natomiast $\epsilon = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ jest **jednocząstkową** energią kinetyczną elektronu, dostajemy

$$\frac{N}{V_0} = \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \hbar\omega_D} d\epsilon \rho(\epsilon) \frac{1}{2\epsilon - 2\epsilon_F + \Delta}. \quad (1.29)$$

Zakładając, że obszar całkowania jest wąski, tzn. $\hbar\omega_D \ll \epsilon_F$, co w istocie zachodzi, gdyż $\epsilon_F \approx 1 \text{ eV}$, $\hbar\omega_D \approx 0,01 \text{ eV}$, możemy przybliżyć wartość $\rho(\epsilon)$ przez $\rho(\epsilon_F)$. Pozwala nam to obliczyć całkę otrzymując

$$\Delta = \frac{2\hbar\omega_D}{e^{V_0 \bar{\rho}(\epsilon_F)} - 1}, \quad (1.30)$$

gdzie $\bar{\rho}(\epsilon)$ jest gęstością stanów na jedną cząstkę. Podsumowując, wyprowadziliśmy wzór na energię wiązania pary Coopera Δ w zależności od potencjału parującego V_0 , gęstości stanów na 1 cząstkę na poziomie Fermiego $\bar{\rho}(\epsilon_F) \equiv \rho(\epsilon_F)/N$ oraz maksymalnej energii fononów w układzie $\hbar\omega_D$. Dla konwencjonalnych nadprzewodników Δ jest rzędu 10 K . Spełnione są więc relacje

$$\epsilon_F \gg \hbar\omega_D \gg \Delta. \quad (1.31)$$

Z równania (1.18) możemy wyliczyć współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}}$

$$\alpha_{\mathbf{k}} \propto \begin{cases} \frac{V_0/N}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E}, & \text{dla } \mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \end{cases} \quad (1.32)$$

gdzie wykorzystaliśmy to, że $\sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \alpha_{\mathbf{k}'}$ nie zależy od \mathbf{k} oraz $\epsilon_{\mathbf{Q}} = 0$. Równanie na współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}}$ posłuży nam później (rozdział 3) do zbadania symetrii funkcji falowej pary Coopera. Tutaj zaznaczamy tylko, że w przypadku mas niezależnych od spinu funkcja pary Coopera posiada odpowiednią symetrię. Korzystając z równania na współczynniki możemy także skonstruować funkcję falową pary w przestrzeni rzeczywistej. Zgodnie z równaniem (1.9) część przestrzenna funkcji falowej wynosi

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{V} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = \psi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}), \quad (1.33)$$

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k} \in \bar{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{V_0/N}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}; \quad \psi(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}}. \quad (1.34)$$

Okazuje się, że rozmiar pojedynczej pary Coopera jest rzędu 1000 Å. W obszarze o takim promieniu mieściłoby się mniej więcej 10^6 środków ciężkości innych par Coopera, jeśli wszystkie elektrony typowego metalu byłyby sparowane. Zatem funkcje falowe poszczególnych par przekrywają się bardzo silnie. Oznacza to, że dwuciałowa teoria pary Coopera jest niedokładna, gdyż nie uwzględnia efektów wielociałowych - korelacji między parami. W ogólności, wyodrębnienie dwóch elektronów z morza Fermiego i zaniedbanie ich oddziaływania z resztą jest przybliżeniem nierealistycznym, a poza tym łamie ono zasadę nierozróżnialności cząstek. Podejście wielociałowe do problemu parowania się wszystkich elektronów dostarcza teoria Bardeena, Coopera i Schrieffera [14, 15] (w skrócie: teoria BCS), którą omówimy w rozdziale 4 w przypadku spinowo-zależnych mas.

1.2 Spinowo-zależne masy kwazicząstek $m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$

Omówimy tutaj skrótowo zjawisko rozszczepienia spinowego mas efektywnych kwazicząstek. Intuicyjnie, spinowe rozszczepienie mas można sobie wyobrazić dzięki następującemu rozumowaniu. Załóżmy, że mamy zdegenerowane spinowo pasmo elektronowe w pewnym materiale. Włączając pole magnetyczne \mathbf{B} powodujemy polaryzację pasma - więcej elektronów ma spin (przyp: przez spin rozumiemy tutaj spinowy moment magnetyczny) ustawiony zgodnie z kierunkiem pola.

Będzie nas teraz interesowało oddziaływanie między elektronami. Rozważmy więc dwa elektrony: elektron i oraz j . Zastanówmy się nad przypadkiem, kiedy spiny elektronów są ustawione równolegle, $\sigma_i = \sigma_j$. Wówczas N-cząstkowa funkcja falowa musi być antysymetryczna ze względu na przestawienie ($\mathbf{r}_i \leftrightarrow \mathbf{r}_j$), ponieważ elektrony charakteryzują się takim samym spinem. Wobec tego dla współrzędnych $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j$ wartość funkcji falowej musi wynosić 0, skąd wynika, że elektrony nie będą ze sobą silnie oddziaływać, bo nie będą blisko siebie przebywały. Te same restrykcje nie obowiązują, jeśli jeden z elektronów ma spin ustawiony zgodnie, a drugi przeciwnie do kierunku pola magnetycznego. W takim przypadku elektrony mogą znajdować się blisko siebie. Intuicyjnie, elektrony o spinach antyrównoległych będą więc mocniej oddziaływały niż, gdy ich spiny ustawią się równolegle.

Założmy, że w naszym spolaryzowanym paśmie mamy N_{\uparrow} elektronów o spinie w górę oraz N_{\downarrow} elektronów o spinie w dół, przy czym oczywiście $N_{\uparrow} > N_{\downarrow}$. Elektrony o spinie w górę widzą więc N_{\downarrow} elektronów, z którymi mogą mocno oddziaływać, natomiast elektrony o spinie w dół widzą takich elektronów więcej, bo $N_{\uparrow} > N_{\downarrow}$. Oddziaływanie między elektronami możemy skojarzyć z

rozpraszaniem i tym, jak ciężko elektronom poruszać się przez układ. Jeśli teraz z takim poruszaniem się zwiążemy masę elektronu (innymi słowy w masę włączymy oddziaływania z otoczeniem), to jest oczywistym, że elektrony o spinie w górę będą miały mniejszą masę efektywną (jako, że czują mniej elektronów, na których mogą się rozproszyć, N_{\downarrow}), niż elektrony o spinie w dół (które takich elektronów czują więcej, N_{\uparrow}).

Do wystąpienia spinowo-zależnych mas w układzie potrzebne są jeszcze dwa warunki, o których do tej pory nie wspominaliśmy. Po pierwsze, aby takie zjawisko było znaczące, energia Zeemana elektronów w polu magnetycznym nie może być kilka rzędów wielkości mniejsza od energii Fermiego. Jako że energia Zeemana elektronów w polu $B = 10 T$ wynosi około $\epsilon_B = 7 K$, to warunek ten jest spełniony, jeśli rozważane pasmo energetyczne ma szerokość rzędu $\epsilon_F \approx 100 K$ lub mniejszą. Wówczas masa efektywna elektronów jest rzędu $m^* \approx 100 m_0$. Związki o tak ciężkich (lub nawet dużo cięższych) masach kwazicząstek nazywamy **ciężkofermionowymi**. Przykładami takich układów są UPt_3 [16], $CeCoIn_5$ [5, 6]. Drugim warunkiem koniecznym do wystąpienia spinowo-zależnych mas jest wypełnienie pasma bliskie jedności $n \approx 0.95 - 0.99$. Wówczas występują w układzie silne korelacje i oddziaływania międzyelektronowe mają duży wpływ na wielkość i charakter masy efektywnej.

Powyższy opis jest bardzo skrótowy i obrazowy, ponieważ dokładne scharakteryzowanie zjawiska rozszczepienia mas kwazicząstek wychodzi poza ramy tej pracy. Przedstawione rozumowanie miało jedynie na celu zilustrowanie faktu, że takie zjawisko jak spinowo-zależne masy jest możliwe w układach ciężkofermionowych, o wypełnieniu pasma bliskiemu jedności.

Szczegółowy opis spinowego rozszczepienia mas został przedstawiony w pracach [10] oraz [11]. Zjawisko to jest tam analizowane w ramach modelu Hubbarda i podejścia Gutzwillera. Podstawowym wynikiem wspomnianych prac, który w dalszej części będziemy często wykorzystywać, jest następujące wyrażenie na masę efektywną kwazicząstki w granicy bardzo silnych korelacji (oddziaływanie Hubbarda $U \rightarrow \infty$)

$$\frac{m_{\sigma}}{m_B} = \frac{1 - n/2}{1 - n} - \sigma \frac{\bar{m}}{2(1 - n)}, \quad (1.35)$$

gdzie m_B oznacza masę efektywną pasmową, moment magnetyczny $\bar{m} = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$, $\sigma = \pm 1$ oznacza rzut spinu na kierunek pola magnetycznego \mathbf{B} , natomiast n_{σ} to wypełnienie podpasma o spinie σ , czyli średnia liczba elektronów ze spinem σ przypadająca na 1 komórkę elementarną. Oczywiście $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$.

Wyrażenie (1.35) możemy jeszcze przekształcić do postaci

$$\frac{m_{\sigma}}{m_B} = 1 + \frac{n_{\bar{\sigma}}}{1 - n}. \quad (1.36)$$

Dla typowej wartości $n \approx 0.95 - 0.99$ drugi wyraz jest o rząd - dwa rzędy wielkości większy od

jedności. Możemy więc w pierwszym przybliżeniu przyjąć, że

$$\frac{m_\sigma}{m_B} \simeq \frac{n_{\bar{\sigma}}}{1-n}, \quad (1.37)$$

czyli że masa kwazicząstki jest wprost proporcjonalna do ilości kwazicząstek o przeciwnym spinie.

Potrzebna jest jeszcze uwaga odnośnie parametru m_B . Jest to, tak jak już wspominaliśmy, masa efektywna w stanie Blocha, która w naszym modelu będzie wprowadzona albo jako niezależny parametr (równy typowo 5 - 20 masom swobodnych elektronów m_0 dla układów ciężkofermionowych), albo na zasadzie porównania z innym modelem nadprzewodnictwa przy spinowo-zależnych masach rozważanym w naszym zespole krakowsko-katowickim [M. Maśka, M. Mierzejewski, J. Spałek i inni].

1.3 Stany elektronowe w gazie idealnym ze spinowo-zależnymi masami

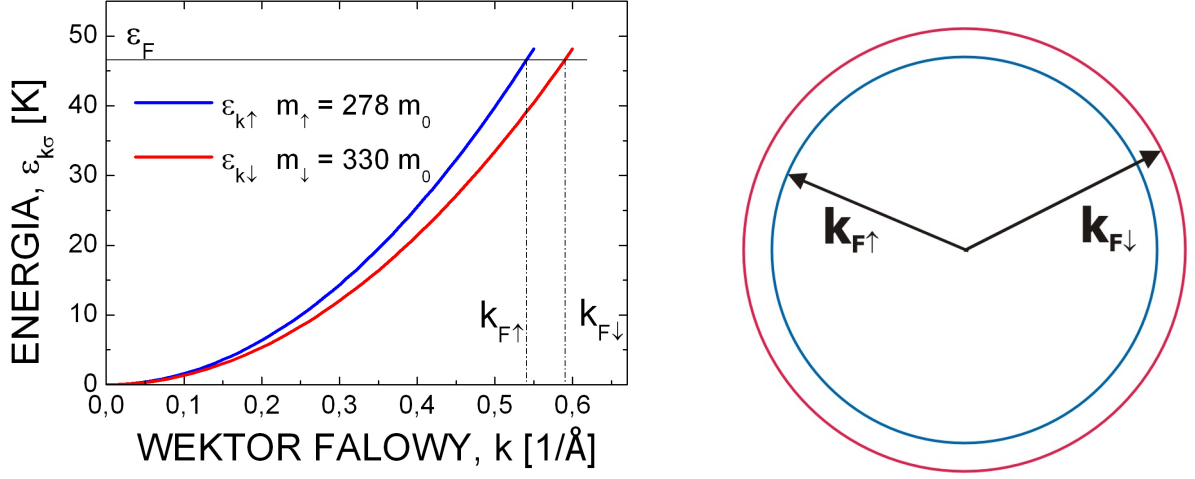
W tej części pracy omówimy modyfikację teorii Landaua cieczy Fermiego wynikającą z rozszczepienia mas efektywnych kwazicząstek. W szczególności powiemy o **rozszczeniu sfer Fermiego**, które będzie miało ważne konsekwencje dla opisu zjawiska nadprzewodnictwa. Najpierw omówimy, co zachodzi, jeżeli nie uwzględnimy pola magnetycznego, co może się wydawać nierealistyczne, gdyż spinowo-zależne masy obserwuje się w niezerowym polu, gdy układ jest paramagnetyczny. Niemniej jednak, istnieją układy (takie jak układy kwarków, czy ultrazimne gazy atomowe będące mieszaniną różnych pierwiastków), w których mamy do czynienia z dwiema populacjami cząstek o różnych masach, przy czym cząstki te mogą się parować [17]. Wówczas, nawet bez pola pojawiają się dwie różne masy w relacjach dyspersji. Następnie przedstawimy, co ulegnie zmianie, jeżeli do naszych rozważań włączymy pole magnetyczne \mathbf{B} poprzez wyraz Zeemana.

W tej pracy przedyskutujemy wyniki dotyczące parowania kwazicząstek tylko w przypadku rozszczepienia mas wywołanego polem, gdyż wydaje nam się on bliższy rzeczywistości. Wyniki przy spontanicznym rozszczepieniu mas przedstawiono wcześniej w pracy [18].

1.3.1 Spontaniczne rozszczepienie spinowe mas ($\mathbf{B} = 0$)

Jeśli masa kwazicząstki zależy od rzutu jej spinu na kierunek pola magnetycznego \mathbf{B} , to cząstki wykazują się dwiema relacjami dyspersji (przyjmujemy tutaj relacje dyspersji, jak dla gazu elektronów)

$$\epsilon_{\mathbf{k}\uparrow} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\uparrow}, \quad \epsilon_{\mathbf{k}\downarrow} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\downarrow}. \quad (1.38)$$



Rysunek 1.2: Przykładowa relacja dyspersji dla kwazicząstek o spinowo-zależnych masach oraz symboliczne przedstawienie dwóch powierzchni Fermiego. Nie uwzględniamy tu jeszcze pola magnetycznego. Uczynimy to w dalszej części pracy.

Oczywiście w układzie występuje jedna energia Fermiego, bo gdyby energie Fermiego dla obu cząstek były różne, to cząstki z wyższego poziomu Fermiego przepłynęłyby na niższy zmieniając spin. Tego samego nie możemy powiedzieć o wektorze falowym Fermiego. Mianowicie

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\uparrow}^2}{2m_\uparrow} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\downarrow}^2}{2m_\downarrow}, \quad (1.39)$$

skąd wynika

$$k_{F\uparrow} = k_{F\downarrow} \sqrt{\frac{m_\uparrow}{m_\downarrow}}, \quad (1.40)$$

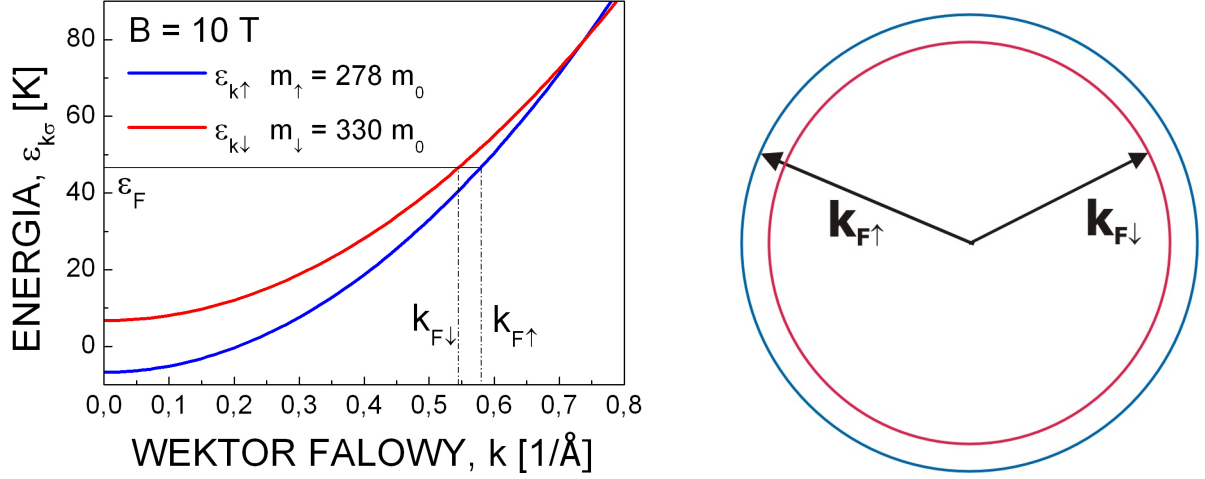
czyli że wektory falowe Fermiego przy spinowo zależnych masach zależą od kierunku spinu (patrz rys. 1.2). Rozszczepienie wektorów falowych Fermiego jest o tyle ważne dla zjawiska nadprzewodnictwa, że zmniejsza obszar oddziaływania kwazicząstek w przestrzeni odwrotnej, osłabiając parowanie.

Równania startowe, z których wyprowadzimy dalsze wzory, to wyrażenie na energię Fermiego (1.39) oraz dwie inne proste zależności

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\uparrow}^2}{2m_\uparrow} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\downarrow}^2}{2m_\downarrow}, \quad (1.41)$$

$$N = N_\uparrow + N_\downarrow, \quad (1.42)$$

$$N_\sigma = \frac{4}{3} \pi k_{F\sigma}^3 \rho_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{V}{6\pi^2} k_{F\sigma}^3, \quad (1.43)$$



Rysunek 1.3: Relacja dyspersji dla kwazicząstek o spinowo-zależnych masach oraz symboliczne przedstawienie rozszczepionych powierzchni Fermiego przy uwzględnieniu wyrazu Zeemana. Zwróćmy uwagę, że w tym przypadku $k_{F\uparrow} > k_{F\downarrow}$.

gdzie $\rho_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$ jest gęstością stanów w przestrzeni \mathbf{k} dla cząstek o jednym kierunku spinu. Z powyższych wzorów przy ustalonej liczbie cząstek N w układzie o objętości V i masach kwazicząstek m_\uparrow i m_\downarrow można wyprowadzić [19] następujące wyrażenia na pędy Fermiego $k_{F\sigma}$, energię Fermiego ϵ_F oraz gęstość stanów w układzie $\rho_\sigma(\epsilon)$, odpowiednio

$$k_{F\uparrow} = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \frac{m_\uparrow^{3/2}}{m_\uparrow^{3/2} + m_\downarrow^{3/2}} \right)^{\frac{1}{3}}; \quad k_{F\downarrow} = \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \frac{m_\downarrow^{3/2}}{m_\uparrow^{3/2} + m_\downarrow^{3/2}} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (1.44)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2} \left(6\pi^2 \frac{N}{V} \frac{1}{m_\uparrow^{3/2} + m_\downarrow^{3/2}} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (1.45)$$

$$\rho_\sigma(\epsilon) = \frac{V}{8\pi^2} \sqrt{\epsilon} \left(\frac{2m_\sigma}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}. \quad (1.46)$$

Przedstawione wzory redukują się przy $m_\uparrow = m_\downarrow$ do standardowych wyrażen dla gazu elektonowego z degeneracją spinową stanów 1-cząstkowych.

1.3.2 Rozszczepienie mas wywołane polem ($\mathbf{B} \neq 0$)

Przedstawiona powyżej teoria jest elegancka, bo daje proste wzory analityczne (1.44 - 1.46). Problem polega na tym, że za rozszczepienie mas odpowiada pole magnetyczne poprzez polaryzację spinową \bar{m} , której na razie nie uwzględniliśmy w rachunkach. Uczynimy to więc teraz.

Gdy do energii pasmowej dodamy wyraz Zeemana, to relacje dyspersji ulegają względnemu

przesunięciu (patrz rys. 1.3). Startowe wzory, z których można policzyć energię oraz pędy Fermiego, przedstawiają się wtedy następująco

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\uparrow}^2}{2m_\uparrow} - \epsilon_B = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\downarrow}^2}{2m_\downarrow} + \epsilon_B, \quad (1.47)$$

$$N = N_\uparrow + N_\downarrow, \quad (1.48)$$

$$N_\sigma = \frac{4}{3} \pi k_{F\sigma}^3 \rho_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{V}{6\pi^2} k_{F\sigma}^3, \quad (1.49)$$

gdzie ϵ_B oznacza energię spinowego momentu magnetycznego w polu \mathbf{B} , $\epsilon_B = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} B$. Wydawać by się mogło, że taka drobna zmiana, jak rozsuniecie relacji dyspersji o $2\epsilon_B$ nie może spowodować wielkich trudności rachunkowych. Niestety jednak powoduje i równania (1.47 - 1.49) nie dają się już tak łatwo rozwiązać. Prowadzą one mianowicie do następującego równania na energię Fermiego ϵ_F

$$6\pi \frac{N}{V} \left(\frac{\hbar^2}{2} \right)^{3/2} = m_\uparrow^{3/2} (\epsilon_F - \epsilon_B)^{3/2} + m_\downarrow^{3/2} (\epsilon_F + \epsilon_B)^{3/2}. \quad (1.50)$$

Równanie to ma rozwiązania w postaci pierwiastków wielomianu szóstego stopnia. W dwóch wymiarach sytuacja wygląda dużo prościej. W powyższym wzorze nie pojawiają się wówczas wykładniki $3/2$, tylko wszystkie wielkości występują w pierwszej potędze, dzięki czemu równanie daje się łatwo rozwiązać analitycznie dając wynik

$$\epsilon_F^{2D} = \frac{2\pi\hbar^2}{M} \frac{N}{S} + \epsilon_B \frac{\Delta m}{M}, \quad (1.51)$$

gdzie S jest powierzchnią układu, $M = m_1 + m_2$, $\mu = \frac{m_1 m_2}{M}$. Do przypadku dwuwymiarowego przy uwzględnieniu zależności mas od magnetyzacji wrócimy jeszcze pod koniec rozdziału.

1.4 Cel pracy

W pierwszym rozdziale pracy omówiliśmy już wszystkie koncepcje, które posłużą nam teraz do sformułowania teorii nadprzewodnictwa przy spinowo-zależnych masach.

W punkcie wyjścia mamy więc teorię spinowo-zależnych mas efektywnych, teorię stanów elektronowych w gazie ze spinowo-zależnymi masami oraz znamy rozwiązanie problemu Coopera dla $m_\uparrow = m_\downarrow$. Celem pracy jest podanie teorii nadprzewodnictwa przy spinowo-zależnych masach, która będzie uwzględniać wszystkie te koncepcje, więc wymagania jakie jej stawiamy to

1. Uwzględnienie zależności mas od pola magnetycznego \mathbf{B} i wypełnienia pasma n ,
2. Operowanie w ramach zmodyfikowanej przez rozszczepienie mas teorii Landaua cieczy Fermiego,

3. Redukowanie się do formalizmu podanego przez Coopera i do teorii BCS przy równych masach kwazicząstek ($B = 0$).

Powiemy tu jeszcze o punkcie startowym, czyli o tym, z których dokładnie równań będziemy korzystać. Aby rozwiązać problem Coopera dla układów ze spinowo-zależnymi masami potrzebujemy mieć dane masy kwazicząstek, wektory falowe Fermiego oraz energię Fermiego. Żeby te wielkości obliczyć wykorzystujemy wzór na masę efektywną (1.35) oraz związki (1.47 - 1.49), które tutaj powtórzymy

$$\frac{m_\sigma}{m_B} = \frac{1 - n/2}{1 - n} - \sigma \frac{\bar{m}}{2(1 - n)}, \quad (1.52)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\uparrow}^2}{2m_\uparrow} - \epsilon_B = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\downarrow}^2}{2m_\downarrow} + \epsilon_B, \quad (1.53)$$

$$N = N_\uparrow + N_\downarrow, \quad (1.54)$$

$$N_\sigma = \frac{4}{3} \pi k_{F\sigma}^3 \rho_\sigma(\mathbf{k}) = \frac{V}{6\pi^2} k_{F\sigma}^3. \quad (1.55)$$

Powyższy układ równań na ϵ_F , $k_{F\sigma}$, N_σ oraz m_σ rozwiązujemy przed przystąpieniem do analizy problemu Coopera. Równania te możemy jeszcze uprościć. Zauważmy mianowicie, że jeżeli za V podstawimy nie objętość układu, lecz objętość komórki elementarnej V_{elem} , to zamiast wielkości N_σ będziemy mogli wstawić wypełnienie podpasma spinowego n_σ . Podstawienie pod V objętości komórki elementarnej V_{elem} oraz pod liczbę cząstek N_σ wypełnienia podpasma n_σ jest przejściem od parametrów ekstensywnych do intensywnych, więc upraszcza analizę problemu. Korzystając też z wyrażenia na magnetyzację na 1 cząstkę $\bar{m} = n_\uparrow - n_\downarrow$, możemy zapisać

$$m_\sigma = m_B \frac{1 - n/2}{1 - n} - \sigma m_B \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{2(1 - n)}, \quad (1.56)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\uparrow}^2}{2m_\uparrow} - \epsilon_B, \quad (1.57)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\downarrow}^2}{2m_\downarrow} + \epsilon_B, \quad (1.58)$$

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow, \quad (1.59)$$

$$k_{F\sigma} = \left(6\pi^2 \frac{n_\sigma}{V_{elem}}\right)^{1/3}. \quad (1.60)$$

Mamy więc siedem równań (pierwsze i ostatnie liczymy podwójnie, bo zachodzą dla $\sigma = \pm 1$) i siedem niewiadomych (ϵ_F , $k_{F\sigma}$, N_σ oraz m_σ). Układ ten rozwiązujemy numerycznie sprowadzając go uprzednio do jednego równania na jedną zmienną (dzięki temu mamy większą kontrolę nad procesem

rozwiązywania). Można pokazać, że powyższy układ daje następujące równanie na $n_1 \equiv n_\uparrow$

$$\frac{n n_1^{2/3}}{(n - n_1)(2m_{av} - m_B) + m_B n_1} = \frac{n(n - n_1)^{2/3}}{n_1(2m_{av} - m_B) + m_B(n - n_1)} + \frac{4\epsilon_B}{\hbar^2} \left(\frac{V_{elem}}{6\pi^2}\right)^{2/3}, \quad (1.61)$$

gdzie $m_{av} = m_B \frac{1-n/2}{1-n} = \frac{m_1+m_2}{2}$ jest średnią masą kwazicząstek. Rozwiązując to równanie możemy w łatwy sposób obliczyć resztę parametrów (zależą analitycznie od n_1).

W następnym rozdziale możemy więc przystąpić do rozwiązywania problemu Coopera mając dane energię Fermiego ϵ_F , wektory falowe Fermiego $k_{F\sigma}$, obsadzenia podpasem spinowych n_σ oraz masy efektywne kwazicząstek m_σ . Przyjmujemy także, że kwazicząstki wykazują się relacją dyspersji

$$\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\sigma} - \sigma \epsilon_B. \quad (1.62)$$

1.5 Układ dwuwymiarowy

Zanim omówimy rozwiązanie problemu Coopera ze spinowo-zależnymi masami kwazicząstek przedstawimy jeszcze wyniki dotyczące zmodyfikowanej teorii Landaua cieczy Fermiego dla układu *dwuwymiarowego*. Motywowane jest to faktem, że związek CeCoIn₅, w którym zaobserwowano rozszczepione masy jest kwazidwuwymiarowy oraz obliczenia w dwóch wymiarach dają analityczne wyniki.

Równania wyjściowe dla układu dwuwymiarowego różnią się od poprzednich (1.56) - (1.60) tylko zależnością wektorów Fermiego $k_{F\sigma}$ od wypełnienia podpasem spinowych n_σ

$$m_\sigma = m_B \frac{1 - n/2}{1 - n} - \sigma m_B \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{2(1 - n)}, \quad (1.63)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\uparrow}^2}{2m_\uparrow} - \epsilon_B, \quad (1.64)$$

$$\epsilon_F = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{F\downarrow}^2}{2m_\downarrow} + \epsilon_B, \quad (1.65)$$

$$n = n_\uparrow + n_\downarrow, \quad (1.66)$$

$$k_{F\sigma} = \sqrt{4\pi \frac{n_\sigma}{S_{elem}}}. \quad (1.67)$$

Wielkość S_{elem} oznacza powierzchnię komórki elementarnej. Rozwiązując powyższy układ, otrzymujemy następujące wyrażenia na występujące w teorii cieczy Fermiego wielkości fizyczne

$$n_\sigma^{2D} = \frac{n}{2} + \sigma \left(\sqrt{C^2 + (1 - n/2)^2} - C \right), \quad (1.68)$$

$$\frac{m_\sigma^{2D}}{m_B} = \frac{1 - n/2}{1 - n} - \sigma \frac{\sqrt{C^2 + (1 - n/2)^2} - C}{1 - n}, \quad (1.69)$$

$$\epsilon_F^{2D} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_B S_{elem}} \frac{n(1 - n)}{2 - n} + \epsilon_B \frac{2}{2 - n} (\sqrt{C^2 + (1 - n/2)^2} - C), \quad (1.70)$$

gdzie $C \equiv \frac{\pi\hbar^2(1-n)}{\epsilon_B m_B S_{elem}}$. Ciekawym przypadkiem jest granica słabego pola magnetycznego $\frac{\pi\hbar^2(1-n)}{\epsilon_B m_B S_{elem}} \rightarrow \infty$. Wówczas powyższe równania upraszczają się do

$$n_\sigma^{2D} = \frac{n}{2} + \sigma \frac{S_{elem} m_B (1 - n/2)^2}{2\pi\hbar^2 (1 - n)} \epsilon_B, \quad (1.71)$$

$$\frac{m_\sigma^{2D}}{m_B} = \frac{1 - n/2}{1 - n} - \sigma \frac{S_{elem} m_B (1 - n/2)^2}{2\pi\hbar^2 (1 - n)^2} \epsilon_B, \quad (1.72)$$

$$\epsilon_F^{2D} = \frac{2\pi\hbar^2}{m_B S_{elem}} \frac{n(1 - n)}{2 - n} + \frac{2}{2 - n} \frac{S_{elem} m_B (1 - n/2)^2}{2\pi\hbar^2 (1 - n)} \epsilon_B^2. \quad (1.73)$$

Widać, że masy kwazicząstek m_σ oraz wypełnienia podpasem spinowych n_σ zależą liniowo od pola, natomiast energia Fermiego ϵ_F zmienia się kwadratowo z polem. Takie zachowanie jest zgodne z otrzymanym numerycznie (patrz część 3.2.1) dla układów trójwymiarowych.

Rozdział 2

Nieruchoma para Coopera ($Q = 0$) dla spinowo-zależnych mas kwazicząstek ($m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$)

Pierwszy krok do rozwiązania problemu kwantowomechanicznego, a takim jest omawiane parowanie kwazicząstek, stanowi sformułowanie hamiltonianu. Nasz hamiltonian jest efektywny na dwóch poziomach. Po pierwsze, opisuje on oddziaływanie parujące poprzez potencjał efektywny $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, a po drugie, nie uwzględnia dokładnie oddziaływań wielociałowych prowadzących do rozszczepienia mas kwazicząstek. Pojawia się więc kluczowe pytanie: jak wprowadzić do hamiltonianu spinowo-zależne masy? Jest to kwestia o tyle ważna, że ma fundamentalne konsekwencje dla postaci i symetrii funkcji falowej.

W tym rozdziale sformułujemy więc problem Coopera przy spinowo-zależnych masach na dwa różne sposoby. W pierwszym z naszych modeli masa kwazicząstek występująca w startowym hamiltonianie efektywnym jest skalarem, natomiast w drugim modelu wprowadzamy masę jako operator. Okazuje się, że drugie podejście ma pewne zasadnicze zalety, więc to z niego będziemy korzystać w kolejnych rozdziałach. Zawiera ono przede wszystkim uogólnienie podejścia opisanego wcześniej [10, 11].

W obu omawianych przypadkach poprzez wyraz Zeemana uwzględnimy pole magnetyczne, gdyż jak już wspominaliśmy, odpowiada ono za efekt rozszczepienia mas.

Przypominamy, że relacje dyspersji mają postać (1.62)

$$\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{\sigma}} - \sigma \epsilon_B. \quad (2.1)$$

2.1 Model ze skalarną masą efektywną

Pierwszym sposobem wprowadzenia do hamiltonianu spinowo-zależnych mas jest założenie, że pierwszy elektron ma spin do góry, a więc masę $m_\uparrow = m_1$, natomiast drugi elektron ma spin w dół i masę $m_\downarrow = m_2$ [20]. Wówczas hamiltonian pary cząstek możemy zapisać następująco

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 - \sigma_1\epsilon_B - \sigma_2\epsilon_B + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.2)$$

gdzie $\epsilon_B = g_s\mu_B\frac{\hbar}{2}B$ jest wartością energii spinowego momentu magnetycznego elektronu w polu B . Założenie, że jeden z elektronów ma spin w górę i masę m_1 , a drugi spin w dół i masę m_2 łamie oczywiście zasadę nierozróżnialności cząstek, ale rozpatrywane cząstki są **rozzróżnialne!** Można je bowiem odróżnić ze względu na masę. Podobnie ma się sprawa w przypadku rozważania atomu wodoru, gdzie masa protonu jest zdecydowanie różna od masy elektronu (oczywiście wtedy różne są także znaki ładunków cząstek tworzących atom). Więcej na ten temat powiemy w rozdziale 3. W przypadku modelu ze skalarną masą część spinowa funkcji falowej ma oczywiście postać

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2) = |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle, \quad (2.3)$$

natomiast całkowita funkcja falowa pary wygląda następująco

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle. \quad (2.4)$$

Powyższa postać funkcji falowej wynika z faktu, że jeżeli przyjętym hamiltonianem (2.2) zadziałalibyśmy na stan o części spinowej $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$, to dostalibyśmy wynik niefizyczny. W tym stanie pierwszy elektron ma spin w dół, tymczasem hamiltonian przypisałby mu wartość masy m_\uparrow . Wobec tego hamiltonian (2.2) poprawnie działa tylko w przestrzeni funkcji falowych postaci (2.4). W szczególności nie możemy więc za pomocą tego hamiltonianu analizować funkcji będących superpozycją

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) (\lambda_1|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle + \lambda_2|1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle), \quad (2.5)$$

a takie funkcje falowe są dla nas szczególnie ważne, gdyż mogą redukować się przy $m_1 = m_2$ do stanu singletowego ($\lambda_1 = -\lambda_2$), bądź trypletowego ($\lambda_1 = \lambda_2$). Jest to o tyle istotne, że pozwoli nam w ramach jednej funkcji falowej opisać parę kwazicząstek *nierozróżnialnych* (w stanie singletowym, bądź trypletowym) i przejście przy zwiększaniu pola \mathbf{B} do kwazicząstek *rozzróżnialnych* (w stanie $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ lub $|1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$), które nastąpi dopiero dla pewnego niezerowego rozszczepienia mas.

Podkreślamy raz jeszcze, że zakładając hamiltonian ze skalarną masą (2.2) nie mamy możliwości opisu singletowej funkcji falowej, bo hamiltonian działa na nią niepoprawnie, źle przyporządkowując masy.

Mimo tego ograniczenia, rozwiążemy tutaj model ze skalarną masą, gdyż przebieg rozwiązania jest prawie identyczny, jak dla modelu z masą będącą operatorem.

Startujemy więc od hamiltonianu (2.2), składającego się z części jednocząstkowej $-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_2^2 - \sigma_1\epsilon_B - \sigma_2\epsilon_B$ oraz części odpowiedzialnej za oddziaływanie parujące $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. W przypadku z rozszczepionymi masami i polem magnetycznym morze elektronów Fermiego zmienia swoje właściwości, jak opisano w części 1.3.2.

Przestrzenną funkcję falową konstruujemy analogicznie, jak poprzednio (1.5)

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_2}. \quad (2.6)$$

Podobnie, jak w oryginalnym podejściu Coopera [9] przechodzimy do współrzędnych środka masy. Jednak teraz transformacja ta wygląda inaczej ze względu na różne masy kwazicząstek [20], a mianowicie

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 m_1 + \mathbf{r}_2 m_2}{m_1 + m_2}; \quad \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad (2.7)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2}. \quad (2.8)$$

Transformując hamiltonian (2.2) oraz funkcję falową (2.6) do nowych zmiennych otrzymujemy

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\mathbf{r}}^2 - \sigma_1\epsilon_B - \sigma_2\epsilon_B + V(r), \quad (2.9)$$

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{V} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (2.10)$$

Wyrażenia te są zupełnie analogiczne do otrzymanych wcześniej (1.10), (1.9). Różnica polega na innej definicji masy zredukowanej i całkowitej (teraz $M = m_1 + m_2$, $\mu = m_1 m_2 / M$) oraz przede wszystkim, jak się zaraz okaże, na innej definicji potencjału.

Postępując analogicznie jak w standardowym podejściu Coopera (wstawiając funkcję falową do równania Schrödingera i rzutując równanie na stany bazowe) możemy otrzymać wzór na współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}}$

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (2.11)$$

Potencjał definiujemy podobnie, jak w poprzednim rozdziale

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_1} - \epsilon_B, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_2} + \epsilon_B, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_1^2}{2m_1} - \epsilon_B, \frac{\hbar^2 \mathbf{k}'_2^2}{2m_2} + \epsilon_B \in [\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D], \\ 0, & \text{w pozostałych przypadkach.} \end{cases} \quad (2.12)$$

Taka definicja oznacza, że oddziałują tylko cząstki, których energie $\epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} = \frac{\hbar^2\mathbf{k}_i^2}{2m_i} - \sigma_i\epsilon_B$ mieszczą się w odpowiednich warstwach wzbudzeń ponad powierzchnią Fermiego, czyli $\epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} \in [\epsilon_F, \epsilon_F + \hbar\omega_D]$.

W przypadku układów ze spinowo-zależnymi masami $\hbar\omega_D$ nie musi oznaczać energii Debye'a. W tych układach możemy mieć bowiem do czynienia z niefononowymi mechanizmami parowania [21]. Od tej pory zatem, $\hbar\omega_D$ ma znaczenie szerokości obszaru wzbudzeń, niekoniecznie fononowych.

Energie Fermiego dla obu cząstek odpowiadają tutaj innym wektorom Fermiego. Wobec tego obszary W_i zdefiniowane przez

$$W_i = \{\mathbf{k} \mid \epsilon_F \leq \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m_i} - \sigma_i\epsilon_B \leq \epsilon_F + \hbar\omega_D\}, \quad i = 1, 2, \quad (2.13)$$

nie będą już sobie równe $W_1 \neq W_2$. W konsekwencji obszar

$$\overline{W}_{\mathbf{Q}} = \{\mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1m_2 - \mathbf{k}_2m_1}{m_1 + m_2} \mid \mathbf{k}_1 \in W_1 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_2 \wedge \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2\}. \quad (2.14)$$

będzie trochę bardziej skomplikowany (patrz rys. 2.1). Ostatecznie, potencjał jest dany przez

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}} \vee \mathbf{k}' \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \end{cases} \quad (2.15)$$

natomiast równanie na energię pary przedstawia się następująco

$$1 = \frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (2.16)$$

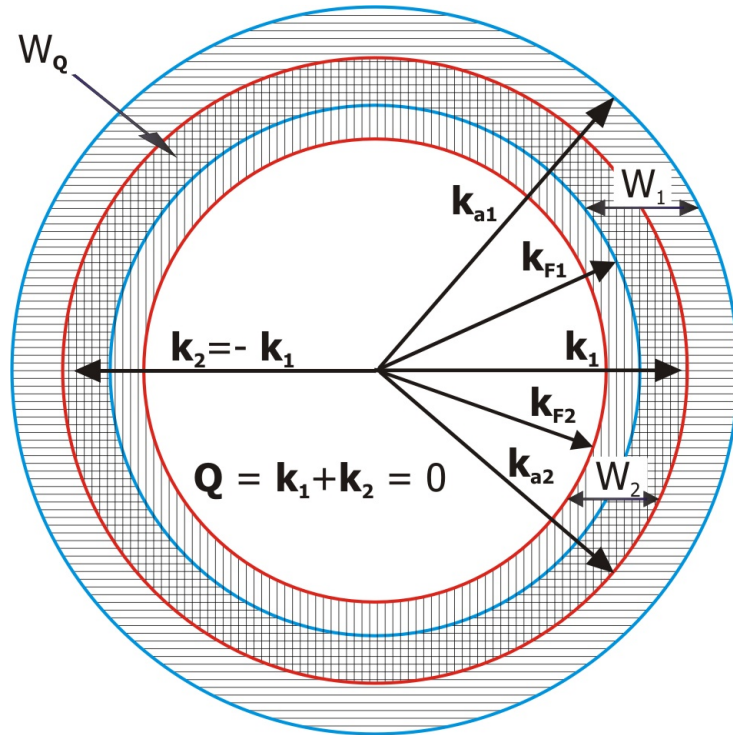
Postaci tych wyrażeń są dokładnie takie same, jak w rozdziale 1. Jedyne istotne różnice tkwią w obszarze $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$. W tym rozdziale interesuje nas nieruchoma para Coopera, dla której $\mathbf{Q} = 0$. Wstawiając ten warunek do praw transformacji (2.7, 2.8) dostajemy $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2$. Dzięki temu obszar całkowania $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ jest sferycznie symetryczny. Mamy bowiem na podstawie (2.14)

$$\begin{aligned} \overline{W}_{\mathbf{Q}=0} &= \{\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}_2 \mid \mathbf{k}_1 \in W_1 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_2\} \\ &= \{\mathbf{k} \mid \mathbf{k} \in W_1 \wedge \mathbf{k} \in -W_2\} \\ &= W_1 \cap W_2, \end{aligned} \quad (2.17)$$

gdzie skorzystaliśmy z tego, że $W_i = -W_i$, $i = 1, 2$, co wynika z symetrii sferycznej W_i . Widzimy, że $\overline{W}_{\mathbf{Q}=0}$ powstaje jako część wspólna W_1 i W_2 . (patrz rys. 2.1). Wracając do równania na energię pary (2.16) zamieniamy sumę na całkę według znanej reguły

$$\sum_{\mathbf{k}}(\dots) = \int d\mathbf{k} \rho_{\sigma}(\mathbf{k})(\dots), \quad (2.18)$$

gdzie $\rho_{\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3}$ to gęstość stanów w przestrzeni odwrotnej. Dostajemy



Rysunek 2.1: Zakres całkowania \overline{W}_Q dla $Q = 0$ powstaje jako część wspólna obszarów W_1 i W_2 , dzięki czemu jest on sferycznie symetryczny. Wektory \mathbf{k}_{a1} i \mathbf{k}_{a2} są zdefiniowane przez $\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{ai}^2}{2m_i} = \epsilon_F + \sigma_i \epsilon_B + \hbar \omega_D$, $i = 1, 2$.

$$\frac{(2\pi)^3 N}{V V_0} = \int_{\overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{d\mathbf{k}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (2.19)$$

Korzystając ze sferycznej symetrii obszaru całkowania $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ zamieniamy powyższą całkę na jednowymiarową

$$\frac{2\pi^2 N}{V V_0} = \int_{k_{F1}}^{k_{a<}} \frac{k^2 dk}{\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - E}, \quad (2.20)$$

gdzie $k_{a<}$ jest zdefiniowane przez $k_{a<} = \min\{k_{a1}, k_{a2}\}$. Aby uprościć rachunki dokonamy następującego, jedyne w naszym wyprowadzeniu, przybliżenia $k^2 \approx k k_{F1}$

$$\frac{2\pi^2 N}{V V_0} = k_{F1} \int_{k_{F1}}^{k_{a<}} \frac{k dk}{\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - E}. \quad (2.21)$$

Teraz całka daje się łatwo policzyć przez podstawienie $z = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$. Wynikiem końcowym jest równanie

$$e^{\frac{2\pi^2 \hbar^2 N}{V V_0 k_{F1} \mu}} = \frac{\frac{\hbar^2 k_{a<}^2}{2\mu} - E}{\frac{\hbar^2 k_{F1}^2}{2\mu} - E}. \quad (2.22)$$

Dalsze postępowanie zależy od tego, która z wartości k_{a1} i k_{a2} jest mniejsza, co uwarunkowane jest przez wielkość $\hbar\omega_D$ (patrz rys. 1.3). Najpierw rozważymy przypadek, kiedy $\hbar\omega_D$ spełnia warunek $\hbar\omega_D \leq \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F$, gdzie $\Delta m \equiv m_2 - m_1$, dzięki czemu $k_{a1} \geq k_{a2}$.

I przypadek $k_{a1} \geq k_{a2}$, $\hbar\omega_D \leq \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F$

Korzystając z tego, że $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}$ oraz $E = 2\epsilon_F - \Delta$ możemy przekształcić równanie (2.22) do postaci

$$e^{\frac{2\pi^2 \hbar^2 N}{V V_0 k_{F1} \mu}} = \frac{\frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{2m_2} - 2\epsilon_F + \Delta}{\frac{\hbar^2 k_{F1}^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 k_{F1}^2}{2m_2} - 2\epsilon_F + \Delta}. \quad (2.23)$$

Teraz wystarczy skorzystać z definicji wektora \mathbf{k}_{a2} , $\frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{2m_2} = \epsilon_F - \epsilon_B + \hbar\omega_D$ zauważając także, że $\frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{2m_1} = \frac{m_2}{m_1}(\epsilon_F - \epsilon_B + \hbar\omega_D)$ i podobnie przekształcając mianownik. Dostajemy w ten sposób wyrażenie na energię wiązania Δ

$$\Delta = \frac{1}{e^{\frac{2\pi^2 \hbar^2 N}{V V_0 k_{F1} \mu}} - 1} \left[\hbar\omega_D \frac{M}{m_1} - (\epsilon_B M - \epsilon_F \Delta m) \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} e^{\frac{2\pi^2 \hbar^2 N}{V V_0 k_{F1} \mu}} \right) \right]. \quad (2.24)$$

Energia wiązania w zerowym polu magnetycznym $\mathbf{B} = 0$ sprowadza się do znanego wyrażenia

$$\Delta = \frac{2\hbar\omega_D}{e^{\frac{2}{V_0\rho}(\epsilon_F)} - 1}. \quad (2.25)$$

Kolejną cechą wyprowadzonego wzoru jest liniowe obniżanie się energii wiązania wraz ze wzrostem pola. Aby to zobaczyć, przekształcamy wyrażenie (2.24) do postaci

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D \frac{M}{m_1}}{e^{\frac{2\pi^2\hbar^2 N}{V_0 k_{F1}\mu}} - 1} - (\epsilon_B M - \epsilon_F \Delta m) \frac{1}{e^{\frac{2\pi^2\hbar^2 N}{V_0 k_{F1}\mu}} - 1} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} e^{\frac{2\pi^2\hbar^2 N}{V_0 k_{F1}\mu}} \right). \quad (2.26)$$

Widać, że energia wiązania składa się z wyrazu analogicznego do wyrażenia (2.25), który w przybliżeniu nie zmienia się z polem oraz człon, który obniża energię wiązania (jako, że $\epsilon_B M > \epsilon_F \Delta m$) o wielkość w przybliżeniu proporcjonalną do wartości pola magnetycznego. Dla małych pól mamy bowiem $\Delta m \sim B$ oraz z definicji $\epsilon_B = g_s \mu_B \frac{\hbar}{2} B$, czyli także $\epsilon_B \sim B$.

II przypadek $k_{a1} < k_{a2}$, $\hbar\omega_D > \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F$

Korzystając z analogicznych zależności, jak w poprzednim przypadku, dostajemy następujący wzór

$$\Delta = \frac{\hbar\omega_D \frac{M}{m_2}}{e^{\frac{2\pi^2\hbar^2 N}{V_0 k_{F1}\mu}} - 1} - \frac{1}{m_2} (\epsilon_B M - \epsilon_F \Delta m). \quad (2.27)$$

Ponownie na energię wiązania Δ składa się wyraz analogiczny do wyrażenia przy równych masach (2.25) oraz człon obniżający tę energię o wartość w przybliżeniu proporcjonalną do wartości pola magnetycznego \mathbf{B} .

Sprawdzono, że rozwiązania (2.26) i (2.27) pokrywają się przy $\hbar\omega_D = \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F$. Dostajemy więc ciągły wzór na energię wiązania w funkcji $\hbar\omega_D$

$$\Delta = \begin{cases} \frac{\hbar\omega_D \frac{M}{m_1}}{e^C - 1} - (\epsilon_B M - \epsilon_F \Delta m) \frac{1}{e^C - 1} \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} e^C \right), & \text{dla } \hbar\omega_D \leq \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F, \\ \frac{\hbar\omega_D \frac{M}{m_2}}{e^C - 1} - \frac{1}{m_2} (\epsilon_B M - \epsilon_F \Delta m), & \text{dla } \hbar\omega_D > \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F, \end{cases} \quad (2.28)$$

gdzie $C \equiv \frac{2\pi^2\hbar^2 N}{V_0 k_{F1}\mu}$. W zerowym polu magnetycznym $C = \frac{2}{V_0\rho(\epsilon_F)}$ i wzór (2.28) odtwarza poprawnie wynik Coopera (2.25).

2.2 Model z masą będącą operatorem

Aby zdefiniować hamiltonian w taki sposób, żeby działał on poprawnie na funkcję falową postaci (2.5)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left(\lambda_1 |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle + \lambda_2 |1 \downarrow\rangle |2 \uparrow\rangle \right) \quad (2.29)$$

możemy zamiast mas m_1 i m_2 wstawić operatory masy $\hat{m}_i(\sigma_i^z)$. Idea polega na tym, aby hamiltonian działając na funkcję falową poznawał, czy dany elektron ma spin w górę, czy w dół odpowiednio przyporządkowując masę.

Hamiltonian przy masie zdefiniowanej jako $\hat{m}_i = m_{av} - \frac{1}{2} \sigma_i^z \Delta m$ ma postać

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_{av} - \sigma_1^z \Delta m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{av} - \sigma_2^z \Delta m} \nabla_2^2 - \sigma_1^z \epsilon_B - \sigma_2^z \epsilon_B + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.30)$$

która jest równoważna z poniższą

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{4m_{av}^2 - (\Delta m)^2} \sum_{i=1}^2 (2m_{av} + \sigma_i^z \Delta m) \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^2 \sigma_i^z \epsilon_B + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (2.31)$$

Hamiltonian ten nie komutuje z operatorem kwadratu całkowitego spinu $[\tilde{H}, (\mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2)^2] \neq 0$. Oznacza to, że dobra baza jest teraz rozpinana przez funkcje $\chi_1(\sigma_1, \sigma_2) = |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ oraz $\chi_2(\sigma_1, \sigma_2) = |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$, a nie przez funkcję singletową $\chi_S(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle - |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle)$ i trypletową $\chi_T(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle + |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle)$, jak to ma miejsce dla cząstek nierozróżnialnych.

Standardowo, funkcja falowa będąca stanem własnym hamiltonianu (2.30) z masą zdefiniowaną przy pomocy operatora spinu ma więc określone rzuty spinów obu elektronów na oś kwantowania. W przypadku spinowo-zależnych mas naturalny jest opis nie przez funkcje singletową i trypletową, tylko $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ oraz $|1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$.

Możemy być uparci i spróbować zadziałać hamiltonianem (2.30) na ogólną funkcję falową (2.5)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left(\lambda_1 |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle + \lambda_2 |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle \right). \quad (2.32)$$

W kontekście tego, co powiedzieliśmy powyżej o naturalnej bazie dla hamiltonianu (2.30) funkcje tej postaci są superpozycją dwóch stanów własnych hamiltonianu o częściach spinowych $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ oraz $|1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$. Pytanie, czy taka superpozycja może być również stanem własnym hamiltonianu? Jak się zaraz okaże, taka możliwość istnieje. Hamiltonian (2.30) działając na funkcję (2.32) zwróci dwa składniki

$$\begin{aligned} \tilde{H}\Psi = & \lambda_1 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_\uparrow} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_\downarrow} \nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle + \\ & \lambda_2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m_\downarrow} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_\uparrow} \nabla_2^2 + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right) \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Stosując podejście Coopera i zapisując funkcję falową $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ jako superpozycję funkcji falowych elektronów nieoddziałujących

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2}, \quad (2.34)$$

z równania Schrödingera $H\Psi = E\Psi$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} \lambda_1 \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E \right) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle + \\ \lambda_2 \left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_1} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E \right) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} |1 \downarrow\rangle |2 \uparrow\rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Rzutując powyższe równanie na stany $\langle 1 \uparrow | \langle 2 \downarrow |$ oraz $\langle 1 \downarrow | \langle 2 \uparrow |$ dostajemy

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E \right) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} = 0, \quad (2.36)$$

$$\left(\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_1} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E \right) \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} = 0. \quad (2.37)$$

Różnica między tymi równaniami tkwi w zamienionych masach. Należy podkreślić, że aby funkcja (2.32) była rozwiązaniem hamiltonianu (2.30) równania te muszą być spełnione równocześnie. Mamy więc do czynienia z dwoma problemami Coopera, które są ze sobą sprzężone. Powinny one dawać takie same energie E oraz takie same wartości współczynników $\alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$.

W celu rozwiązania powyższych równań przeprowadzamy w nich dwie różne transformacje zmiennych. Pierwsza transformacja jest taka sama, jak w modelu ze skalarną masą (2.7, 2.8). W równaniu (2.36) przechodzimy więc do współrzędnych środka masy i współrzędnych względnych

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 m_1 + \mathbf{r}_2 m_2}{m_1 + m_2}; \quad \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad (2.38)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2}. \quad (2.39)$$

Jedynie co zmienia się w drugiej transformacji, którą zastosujemy do równania (2.37) to sposób występowania mas we wzorze na $\tilde{\mathbf{R}}$ oraz $\tilde{\mathbf{k}}$

$$\tilde{\mathbf{R}} = \frac{\mathbf{r}_1 m_2 + \mathbf{r}_2 m_1}{m_1 + m_2}; \quad \tilde{\mathbf{Q}} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad (2.40)$$

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \quad \tilde{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}_1 m_1 - \mathbf{k}_2 m_2}{m_1 + m_2}. \quad (2.41)$$

Po powyższych transformacjach równania (2.36, 2.37) sprowadzają się do następujących wyrażeń na współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}}$ i $\alpha_{\tilde{\mathbf{k}}}$

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}, \quad (2.42)$$

$$\alpha_{\tilde{\mathbf{k}}} = -\frac{1}{N} \frac{\sum_{\tilde{\mathbf{k}}'} V_{\tilde{\mathbf{k}}\tilde{\mathbf{k}}'} \alpha_{\tilde{\mathbf{k}}'}}{\epsilon_{\tilde{\mathbf{Q}}} + \epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} - E}. \quad (2.43)$$

Potencjał wprowadzamy analogicznie jak poprzednio

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}} \vee \mathbf{k}' \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \end{cases} \quad (2.44)$$

gdzie

$$\overline{W}_{\mathbf{Q}} = \left\{ \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2} \mid \mathbf{k}_1 \in W_1 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_2 \wedge \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \right\}. \quad (2.45)$$

Tutaj pojawia się następujący problem. Odruchowo chcielibyśmy wprowadzić potencjał tak, aby w drugim równaniu był on równy

$$V_{\tilde{\mathbf{k}}\tilde{\mathbf{k}}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \tilde{\mathbf{k}}, \tilde{\mathbf{k}}' \in \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}}, \\ 0, & \text{dla } \tilde{\mathbf{k}} \notin \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}} \vee \tilde{\mathbf{k}}' \notin \tilde{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}}, \end{cases} \quad (2.46)$$

gdzie

$$\tilde{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}} = \left\{ \tilde{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{k}_1 m_1 - \mathbf{k}_2 m_2}{m_1 + m_2} \mid \mathbf{k}_1 \in W_2 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_1 \wedge \tilde{\mathbf{Q}} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \right\}. \quad (2.47)$$

Nie możemy jednak tego zrobić, ponieważ potencjał parujący może być tylko jeden (musi być jednoznacznie zdefiniowany)! Jednakże, dla rozważanego przypadku nieruchomej pary Coopera, mamy $\mathbf{Q} = 0$ oraz $\tilde{\mathbf{Q}} = 0$, dzięki czemu obszary $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ oraz $\tilde{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}}$ są sobie równe (dowód przebiega jak w 2.17)

$$\tilde{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}=0} = \overline{W}_{\mathbf{Q}=0} = W_1 \cap W_2. \quad (2.48)$$

Wobec tego definicje potencjałów (2.44, 2.46) są równoważne, a równania (2.42, 2.43) sprowadzają się do

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \frac{V_0}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E}, & \text{dla } \mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0} \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}=0} \end{cases} \quad (2.49)$$

$$\alpha_{\tilde{\mathbf{k}}} = \begin{cases} \frac{V_0}{N} \frac{\sum_{\tilde{\mathbf{k}}' \in \overline{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}=0}} \alpha_{\tilde{\mathbf{k}}'}}{\epsilon_{\tilde{\mathbf{k}}} - E}, & \text{dla } \tilde{\mathbf{k}} \in \overline{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}=0} \\ 0, & \text{dla } \tilde{\mathbf{k}} \notin \overline{W}_{\tilde{\mathbf{Q}}=0} \end{cases} \quad (2.50)$$

Tutaj widać już, że równania te są ekwiwalentne, to znaczy dają takie same rozwiązania na energię E oraz współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}}$ i $\alpha_{-\mathbf{k}}$. Co więcej, są one dokładnie takie same, jak dla modelu ze skalarną masą, dzięki czemu, w przypadku nieruchomej pary, energia wiązania stanu (2.32)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \left(\lambda_1 |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle + \lambda_2 |1 \downarrow\rangle |2 \uparrow\rangle \right). \quad (2.51)$$

nie zależy od współczynników λ_1, λ_2 , więc jest dokładnie taka sama, jak policzona wcześniej energia stanu (2.4)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle. \quad (2.52)$$

Ponieważ przeprowadzone rachunki nie zależą od współczynników λ_1, λ_2 , to możemy je wybrać dowolnie. Gdy będziemy więc chcieli opisać stan nadprzewodzący, to wybierzemy dla nieruchomej pary $\lambda_1 = -\lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ otrzymując stan singletowy przy rozszczepionych masach. Przy opisie nadciekłości ${}^3\text{He}$ przyjęlibyśmy natomiast $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ otrzymując nieruchomą parę w stanie trypletowym z $s_1^z + s_2^z = 0$.

2.3 Podsumowanie

W tym rozdziale wprowadziliśmy do hamiltonianu masy zależne od spinu na dwa sposoby. Pierwszy z nich zakładał skalarny charakter masy. Za jego pomocą można analizować tylko funkcje falowe o części spinowej $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle$ lub $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = |1 \downarrow\rangle |2 \uparrow\rangle$. Drugi model wprowadza masę jako operator zależny od operatora rzutu spinu na kierunek pola σ_i^z . Przy jego pomocy można badać ogólniejsze funkcje falowe z częścią spinową w postaci $\chi(\sigma_1, \sigma_2) = \lambda_1 |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle + \lambda_2 |1 \downarrow\rangle |2 \uparrow\rangle$. W szczególności mogą to być stany singletowe i trypletowe. Wprowadzony formalizm pozwala także przy pomocy jednej funkcji falowej analizować przejście $B \rightarrow 0 \Leftrightarrow \Delta m \equiv m_2 - m_1 \rightarrow 0$, czyli do przypadku kwazicząstek o równych masach. Takie przejście oznacza *transformację kwazicząstek rozróżnialnych w nierozróżnialne*, co jest bardzo ciekawym i jeszcze niezbadanym zjawiskiem, do którego wrócimy w części 3.3.5.

Szczęśliwie okazuje się, że dla nieruchomej pary Coopera rozwiązania obu modeli mają taką samą energię i przestrzenną funkcję falową (później pokażemy, że spełnia ona warunki symetrii). Rozwiązując problem parowania kwazicząstek o masie zależnej od spinu wyprowadziliśmy przybliżone wzory analityczne (2.26) oraz (2.27) na energię wiązania Δ . Wzory te dotyczą nieruchomej pary Coopera ($\mathbf{Q} = 0$).

Przejdziemy obecnie do rozważań pary Coopera z niezerowym pędem środka masy $\mathbf{Q} \neq 0$. Okaze się, że taki stan w przypadku spinowo-zależnych mas posiada największą energię wiązania, czyli prowadzi do spontanicznie poruszających się par Coopera jako stanu stabilnego układu.

Rozdział 3

Poruszająca się para Coopera ($\mathbf{Q} \neq 0$) przy spinowo-zależnych masach ($m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$)

W rozdziale tym zaprezentujemy rozwiązanie numeryczne, w ramach którego szukamy stanu pary cząstek o najniższej energii minimalizując ją względem pędu \mathbf{Q} . Jak się okazuje, rozwiązanie z niezerowym pędem $\mathbf{Q} \neq 0$ jest korzystniejsze energetycznie od rozwiązania nieruchomego z $\mathbf{Q} = 0$ realizującego się dla $m_{\uparrow} = m_{\downarrow} = m$ (a także dla małych rozszczepień mas Δm).

Pojedyncza, ruchoma para Coopera ($\mathbf{Q} \neq 0$) jest prekursorem stanu FFLO¹ [2, 3, 4] opisywanego przez N-cząstkową funkcję falową, w której pary elektronów mają niezerowy pęd środka masy ($\mathbf{Q} \neq 0$).

Postulowana przez nas funkcja falowa poruszającej się pary jest w stanie spinowym $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ nie posiadającym odpowiedniej symetrii względem zamiany cząstek, a więc niezgodnym z twierdzeniem spin-statystyka [13] i łamiącym zasadę nierozróżnialności cząstek. Uzasadnienie, dlaczego możemy w taki sposób opisać parę Coopera w przypadku spinowo-zależnych mas przedstawimy w części 3.3. Następnie w części 3.4, wprowadzimy ogólną antysymetryczną funkcję falową zgodną z twierdzeniem spin-statystyka. Pokażemy, że jej energia wiązania jest zawsze niższa od energii wiązania stanu łamiącego symetrię $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ (poza przypadkiem $\mathbf{Q} = 0$, kiedy energie obu funkcji pokrywają się). Wobec tego funkcja $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ jest korzystniejsza energetycznie od funkcji spełniającej twierdzenie spin-statystyka.

Funkcja falowa stanu FFLO jest zgodna z twierdzeniem spin-statystyka, ponieważ do jej konstrukcji używa się formalizmu drugiego kwantowania [22]. W formalizmie tym wprowadza się odpowiednie reguły antykomutacji, które zapewniają antysymetrię funkcji względem transformacji przestawienia cząstek. Brak antysymetrii funkcji falowej poruszającej się pary Coopera stanowi o

¹W analogii do tego, jak nieruchoma para Coopera jest prekursorem stanu BCS

fundamentalnej różnicy pomiędzy zwykłymi parami Coopera i tymi ze spinowo-zależnymi masami.

Problem parowania się kwazicząstek w tym rozdziale jest postawiony identycznie, jak w poprzednim (patrz część 1.4). Zakładamy więc, że znamy wszystkie parametry morza Fermiego wraz z masami kwazicząstek.

3.1 Stan $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ łamiący zasadę nierozróżnialności cząstek

Startujemy ze znanego z poprzedniego rozdziału hamiltonianu z masą będącą operatorem

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_{av} - \sigma_1^z \Delta m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{av} - \sigma_2^z \Delta m} \nabla_2^2 - \sigma_1^z \epsilon_B - \sigma_2^z \epsilon_B + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (3.1)$$

Funkcję falową postulujemy jako

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle, \quad (3.2)$$

czyli w ogólnej funkcji falowej (2.5) wybieramy $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0$. Takie podejście jest bardzo podobne (a rachunkowo identyczne) do rozwiązywania hamiltonianu ze skalarną masą. Dlaczego wybraliśmy taką funkcję, a nie na przykład stan singletowy? Jak już argumentowaliśmy w poprzednim rozdziale, hamiltonian nie komutuje z kwadratem całkowitego spinu, wobec czego nasz wybór jest zupełnie naturalny (wkrótce powiemy więcej na ten temat).

Nie będziemy tutaj przedstawiali wyprowadzenia wszystkich równań, bo jest ono identyczne, jak w rozdziale poprzednim. Przytoczymy tylko kluczowe wyniki.

Przestrzenną funkcję falową zapisujemy jako superpozycję stanów własnych hamiltonianu bez oddziaływania

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2}. \quad (3.3)$$

Transformacja do zmiennych środka masy i względnych przedstawia się następująco

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 m_1 + \mathbf{r}_2 m_2}{m_1 + m_2}; \quad \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad (3.4)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2}. \quad (3.5)$$

Równanie Schrödingera prowadzi do następującego wyrażenia na współczynniki rozwinięcia $\alpha_{\mathbf{k}}$

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (3.6)$$

Element macierzowy potencjału parującego $V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ postulujemy jako

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}} \vee \mathbf{k}' \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \end{cases} \quad (3.7)$$

gdzie obszar oddziaływania $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ dany jest przez

$$\overline{W}_{\mathbf{Q}} = \left\{ \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2} \mid \mathbf{k}_1 \in W_1 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_2 \wedge \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \right\}, \quad (3.8)$$

$$W_i = \left\{ \mathbf{k} \mid \epsilon_F \leq \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_i} - \sigma_i \epsilon_B \leq \epsilon_F + \hbar \omega_D \right\}, \quad i = 1, 2. \quad (3.9)$$

Taka definicja potencjału prowadzi do poniższego równania na przerwę $\Delta \equiv 2\epsilon_F - E$

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - 2\epsilon_F + \Delta}. \quad (3.10)$$

Do tej pory rozważaliśmy zawsze parę nieruchomą z $\mathbf{Q} = 0$, dla której obszar całkowania $\overline{W}_{\mathbf{Q}=0} = W_1 \cap W_2$ jest sferycznie symetryczny, a energia kinetyczna $\epsilon_{\mathbf{Q}}$ jest równa zero. Te własności problemu prowadziły do analitycznych wyników (2.26, 2.27). Teraz wyrzucimy z naszych rozważań więź $\mathbf{Q} = 0$ i policzymy energię Δ w zależności od pędu środka masy pary \mathbf{Q} .

Aby rozwiązać równanie na przerwę (3.10) musimy wiedzieć, po jakim obszarze wykonujemy sumowanie. Korzystając z definicji (3.8) możemy otrzymać następujące wyrażenie na obszar $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$

$$\begin{aligned} \overline{W}_{\mathbf{Q}} &= \left(W_1 - \frac{m_1}{M} \mathbf{Q} \right) \cap \left(W_2 + \frac{m_2}{M} \mathbf{Q} \right) = \\ &= W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q}) - \frac{m_1}{M} \mathbf{Q}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

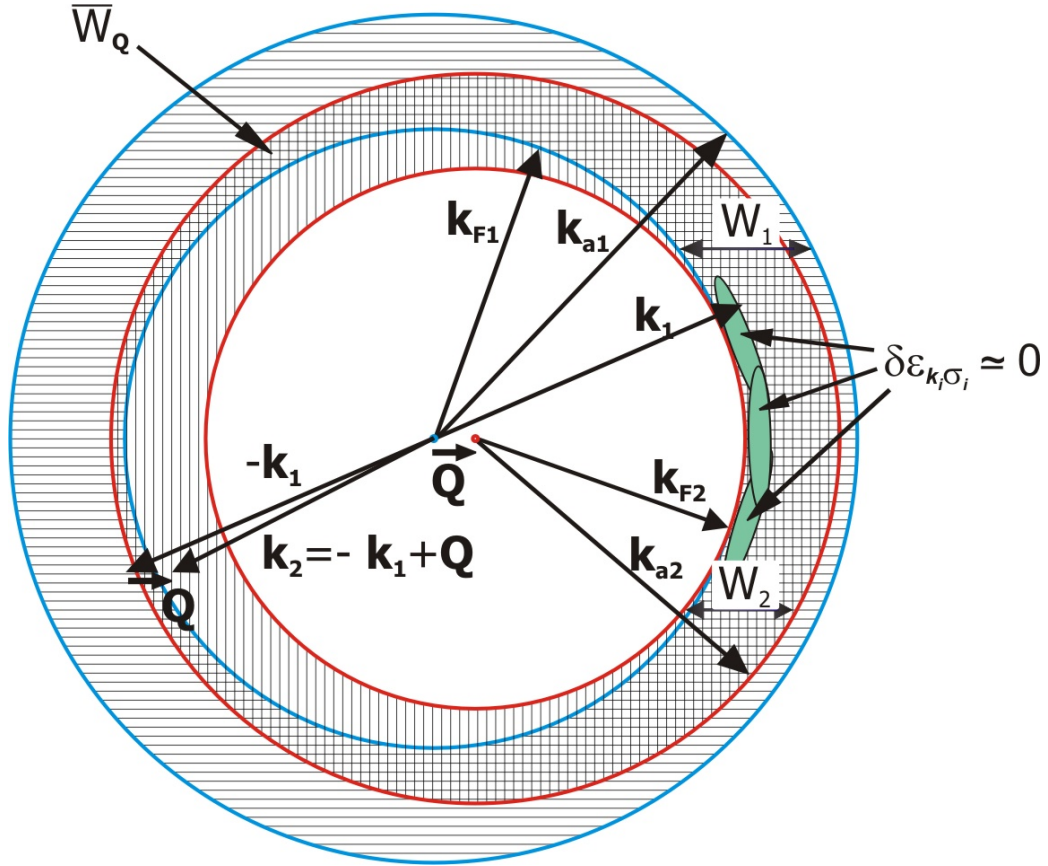
gdzie przez dodawanie wektora do obszaru rozumiemy przesunięcie tego obszaru o dany wektor. Widać, że obszar całkowania nie jest już sferycznie symetryczny (patrz rys. 3.1), przez co równanie (3.10) nie daje się rozwiązać analitycznie.

Zanim zaczniemy całkować przekształćmy jeszcze równanie na przerwę (3.10) do bardziej intuicyjnej postaci. Po pierwsze, wykonamy w nim transformację z powrotem do zmiennych jedno-cząstkowych \mathbf{k}_1 i \mathbf{k}_2 . Korzystając z praw transformacji (3.4, 3.5) możemy otrzymać następujące związki

$$\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} + \frac{m_1}{M} \mathbf{Q}, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{k}_2 = \mathbf{k} - \frac{m_2}{M} \mathbf{Q}. \quad (3.13)$$

Wobec tego, na podstawie (3.11), całkowanie w zmiennej \mathbf{k} po $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ jest równoważne z całkowaniem w zmiennej \mathbf{k}_1 po obszarze $W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})$, który łatwiej sparametryzować. Dodatkowo



Rysunek 3.1: Zakres całkowania \bar{W}_Q dla $Q \neq 0$ powstaje jako część wspólna obszarów W_1 i $W_2 + Q$ przesunięta o $-\frac{m_1}{M}Q$ (3.11). Wektory k_{a1} i k_{a2} są zdefiniowane przez $\frac{\hbar^2 k_{ai}^2}{2m_i} = \epsilon_F + \sigma_i \epsilon_B + \hbar\omega_D$, $i = 1, 2$. Zaznaczono obszary o największym wkładzie do energii wiązania, dla których $\delta\epsilon_{k_i\sigma_i} \simeq 0$.

przekształcimy mianownik równania (3.10) korzystając z następującego związku dla energii kinetycznych

$$\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}_1\uparrow} + \epsilon_{\mathbf{k}_2\downarrow}, \quad (3.14)$$

gdzie $\epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i} - \sigma_i \epsilon_B$, $i = 1, 2$ jest energią jednocząstkową. Oprócz tego zmieniamy w równaniu na przerwę (3.10) całkę na sumę według znanej reguły (1.28). Po tych uproszczeniach równanie na przerwę przekształca się do

$$\frac{N}{V_0} = \frac{V}{8\pi^3} \int_{W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})} \frac{d^3 k_1}{\epsilon_{\mathbf{k}_1\uparrow} + \epsilon_{\mathbf{k}_2\downarrow} - 2\epsilon_F + \Delta}. \quad (3.15)$$

Definiując wzbudzenie cząstek ponad poziom Fermiego

$$\delta\epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} - \epsilon_F, \quad i = 1, 2, \quad (3.16)$$

dostajemy najbardziej intuicyjną postać równania na przerwę

$$\frac{N}{V_0} = \frac{V}{8\pi^3} \int_{W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})} \frac{d^3 k_1}{\delta\epsilon_{\mathbf{k}_1\uparrow} + \delta\epsilon_{\mathbf{k}_2\downarrow} + \Delta}. \quad (3.17)$$

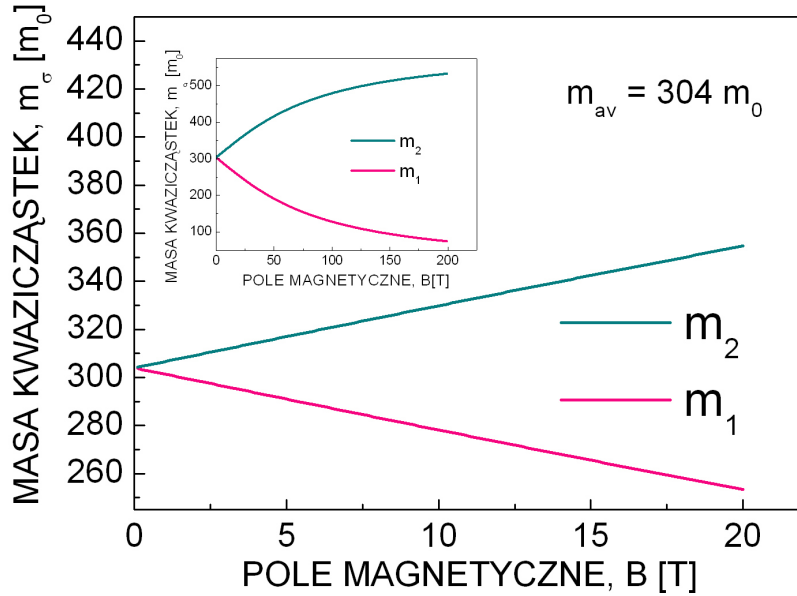
Z powyższego równania wynika, że największy wkład do energii wiązania przyniosą te rejony obszaru całkowania $W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})$, w których cząstki są najmniej wzbudzone ponad swoją powierzchnię Fermiego (czyli $\delta\epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} \simeq 0$, patrz rys. 3.1). Wkład od takich obszarów oraz objętość obszaru całkowania to czynniki determinujące, jak silne jest wiązanie. Ich analiza pozwala wyjaśnić prawie wszystkie obserwowane zależności energii wiązania od różnych parametrów.

3.2 Energia wiązania pary - wyniki numeryczne

Przedstawimy tutaj jedno z głównych rezultatów pracy, czyli wyniki obliczeń numerycznych. Najpierw pokażemy zależność od pola magnetycznego \mathbf{B} parametrów samego morza Fermiego przy spinowo-zależnych masach. Dopiero potem przejdziemy do wyników dotyczących problemu parowania.

Wszystkie nasze obliczenia będą dotyczyły przypadku, kiedy średnia masa kwazicząstek jest równa $m_{av} = 304 m_0$, natomiast objętość komórki elementarnej wynosi $V_{elem} = 161 \text{ \AA}^3$. Taki wybór wynika z porównania z innym modelem nadprzewodnictwa przy spinowo-zależnych masach rozważanym w naszym zespole krakowsko-katowickim [M. Maśka, M. Mierzejewski, J. Spałek i inni] oraz z dopasowania do rzeczywistego układu CeCoIn₅.

Oprócz powyższych parametrów musieliśmy także ustalić szerokość obszaru oddziaływania powyżej powierzchni Fermiego $\hbar\omega_D = 20 K$, wypełnienie pasma $n = 0.97$ oraz wartość poten-



Rysunek 3.2: Wykres zależności mas kwazicząstek m_σ w funkcji pola magnetycznego B . Widać liniowy charakter wykresu dla pól do $20 T$. Wklejka: nieliniowość w silnych polach.

cjału przyciągającego $V_0 = 50 K$. Przy tak dobranych parametrach masa pasmowa jest równa $m_B = 18 m_0$.

Rozważany zakres wartości pola magnetycznego to $B = 0 - 20 T$, ponieważ w układzie $CeCoIn_5$ górne pole krytyczne wynosi $H_{c2}^{\parallel} = 12 T$, $H_{c2}^{\perp} = 5 T$ [6].

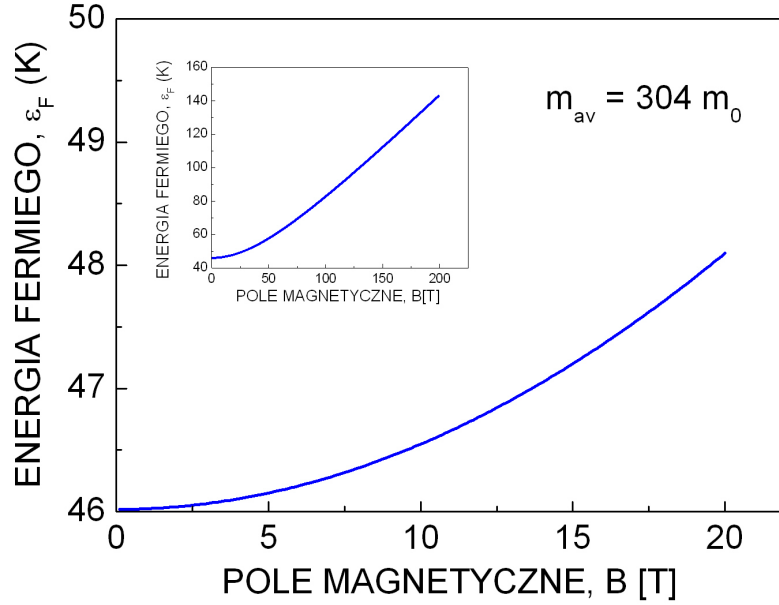
3.2.1 Morze Fermiego kwazicząstek ze spinowo-zależnymi masami

Korzystając z wprowadzonych w pierwszym rozdziale równań (1.56 - 1.60) obliczamy parametry morza Fermiego w zależności od pola magnetycznego.

Wszystkie wykresy przedstawiają zakres pola magnetycznego od $0 T$ do $20 T$. Wklejki ukazują granicę silnych pól magnetycznych (do $200 T$). Granica ta jest nieosiągalna w laboratorium, ale bardzo podobne efekty można otrzymać w niższych polach dla układów o cięższych masach. Dzieje się tak, ponieważ zwiększając masę zmniejszamy szerokość pasma. Zatem potrzeba mniejszych pól, aby wyraz Zeemana był istotny w porównaniu z energią Fermiego, co prowadzi do nieliniowości.

Na rys. 3.2 przedstawiono wykres zależności mas m_σ od pola magnetycznego B . Masy zależą w przybliżeniu liniowo od pola. Dla bardzo dużych pól niższa masa asymptotycznie dąży do masy pasmowej $m_\uparrow \rightarrow m_B$.

Zależność energii Fermiego ϵ_F od pola pokazano na rys. 3.3. Dla interesującego nas zakresu pól



Rysunek 3.3: Wykres zależności energii Fermiego ϵ_F od pola magnetycznego \mathbf{B} . Energia Fermiego w rozważanym zakresie pól nie zmienia się znacznie.

energia Fermiego mało zmienia się wraz z polem.

Magnetyzacja układu zdefiniowana przez $\bar{\mu} \equiv \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n}$ przedstawiona jest na rys. 3.4. Zależność magnetyzacji od pola jest liniowa, ale dla dużych pól magnetyzacja dąży do wartości 1.

Wartości wektorów Fermiego przedstawione są na rys. 3.5. Wraz ze wzrostem pola, powierzchnie Fermiego ulegają coraz większemu rozszczepieniu.

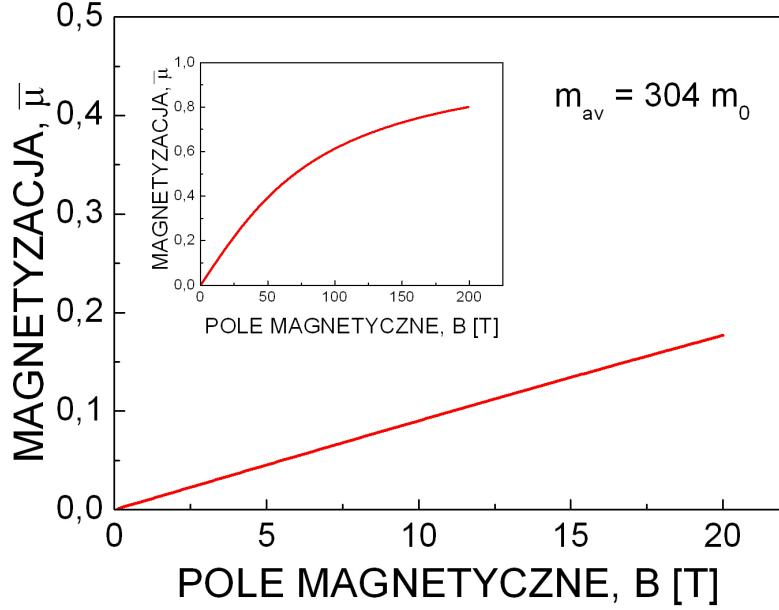
Z przedstawionych wyników widać, że w obszarze pól $B = 0 - 20 \text{ T}$ masy kwazicząstek, wektory Fermiego oraz magnetyzacja zmieniają się liniowo z polem. Odstępstwa od tego zachowania następują dopiero dla bardzo silnych pól. Można zatem założyć, że w rozpatrywanym obszarze pól zachodzi

$$\bar{\mu} = \chi B, \quad (3.18)$$

gdzie χ jest podatnością magnetyczną na cząstkę. Przy takim przybliżeniu, masy kwazicząstek i wypełnienia podpasem spinowych można prosto zapisać jako funkcje pola magnetycznego

$$m_{\sigma}(B) = m_{av} - \sigma \frac{\chi^n}{2(1-n)} B, \quad (3.19)$$

$$n_{\sigma}(B) = \frac{n}{2}(1 + \sigma \chi B). \quad (3.20)$$



Rysunek 3.4: Wykres zależności magnetyzacji $\bar{\mu} = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n}$ od pola magnetycznego \mathbf{B} . Dla bardzo mocnych pól (w tym przypadku ok. 900 T) magnetyzacja osiągnęłaby wartość 1.

Powyższych, przybliżonych, zależności nie wykorzystaliśmy jednak w tej pracy, prowadząc obliczenia przy uwzględnieniu dokładnych wzorów.

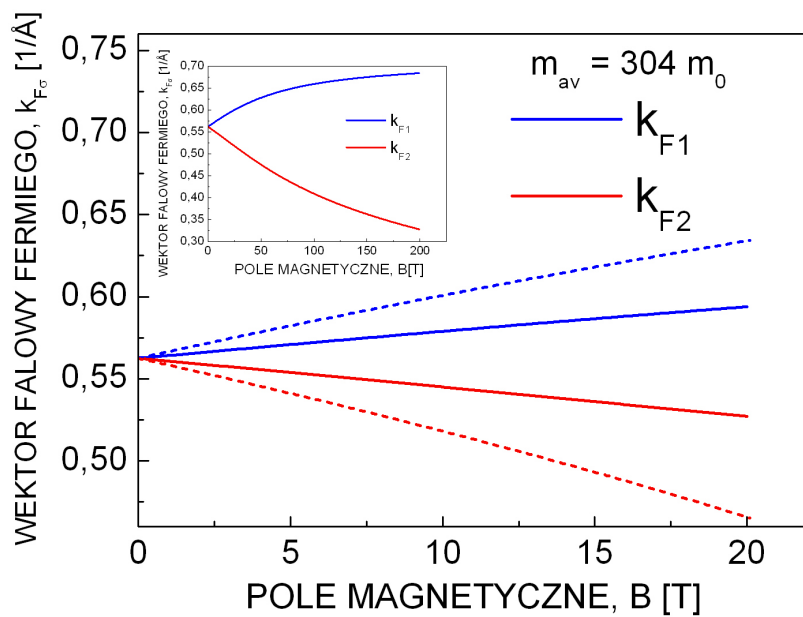
3.2.2 Stan związany pary

Przedstawiamy tutaj rozwiązania równania na przerwę (3.17)

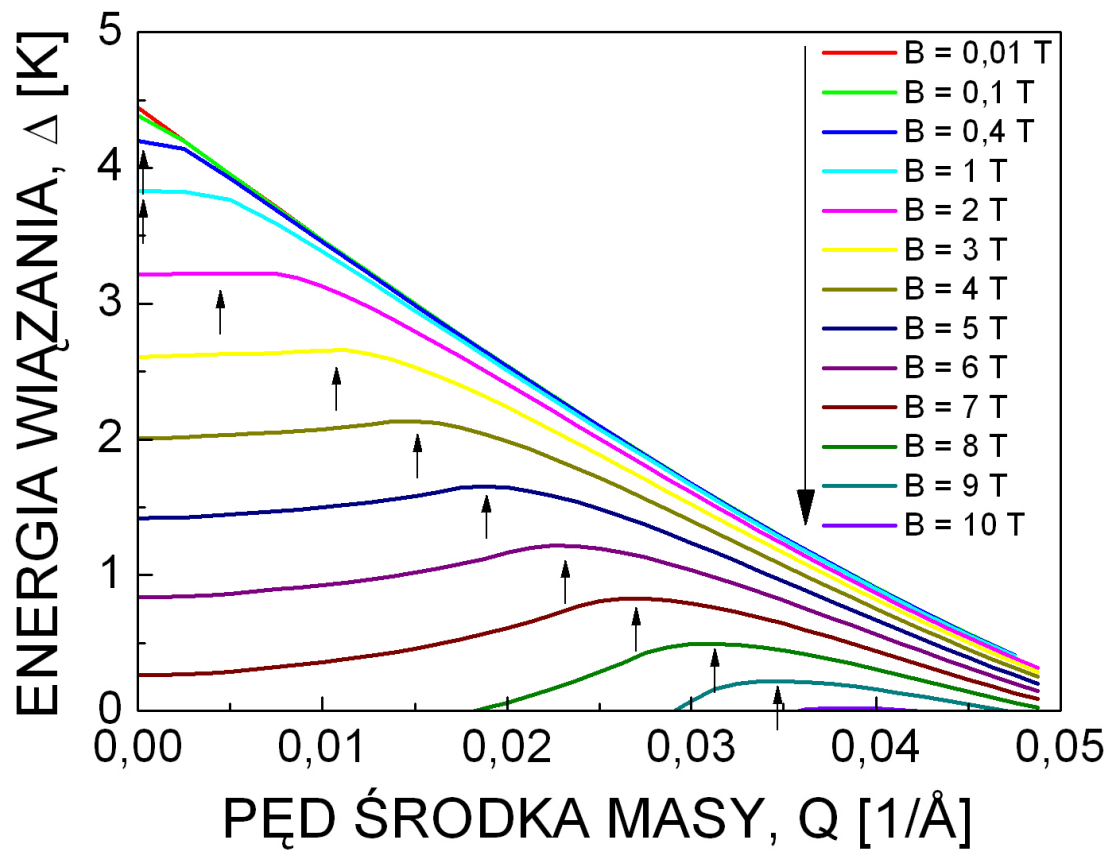
$$\frac{N}{V_0} = \frac{V}{8\pi^3} \int_{W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})} \frac{d^3 k_1}{\delta\epsilon_{\mathbf{k}_{1\uparrow}} + \delta\epsilon_{\mathbf{k}_{2\downarrow}} + \Delta}. \quad (3.21)$$

Równanie to było rozwiązywane numerycznie przez wykonywanie odpowiednio sparametryzowanej całki po obszarze $W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})$ dla ustalonej wartości energii wiązania Δ . Taka procedura pozwala nam otrzymać zależność potencjału V_0 od energii wiązania. Ponieważ bardziej interesują nas zależności odwrotne (Δ od V_0 oraz \mathbf{Q}), to wykonujemy interpolację, otrzymując wartość energii wiązania przy ustalonym potencjale i pędzie środka masy.

Otrzymany w ten sposób wykres $\Delta(\mathbf{Q})$ dla różnych wartości pola \mathbf{B} przedstawia rys. 3.6. Wiadac, że dla słabych pól maksymalną energię wiązania otrzymujemy przy $\mathbf{Q} \simeq 0$. Dla silniejszych pól pojawia się maksimum energii wiązania dla $\mathbf{Q} \neq 0$. Przy pewnej wartości pola \mathbf{B} zaczyna ono dominować i układ przechodzi do stanu FFLO (z niezerowym pędem środka masy pary). Widzimy także, że maksimum energii wiązania dla większych pól występuje przy większym pędzie \mathbf{Q} .



Rysunek 3.5: Wykres zależności wektorów falowych Fermiego $k_{F\sigma}$ od pola magnetycznego B . Linia przerywaną zaznaczono wyniki dla układu z masami niezależnymi od spinu ($m_1 = m_2$). Widać, że w takim przypadku rozszczepienie wektorów Fermiego $\Delta k_F \equiv k_{1F} - k_{2F}$ jest większe niż przy masach spinowo-zależnych.



Rysunek 3.6: Wykres zależności energii wiązania od pędu środka masy przy ustalonym polu magnetycznym w bezwzględnej skali pędu środka masy. Wartości parametrów $m_{av} = 304 m_0$, $\hbar\omega_D = 20 K$, $V_0 = 50 K$. Strzałkami oznaczono maksimum energii wiązania.

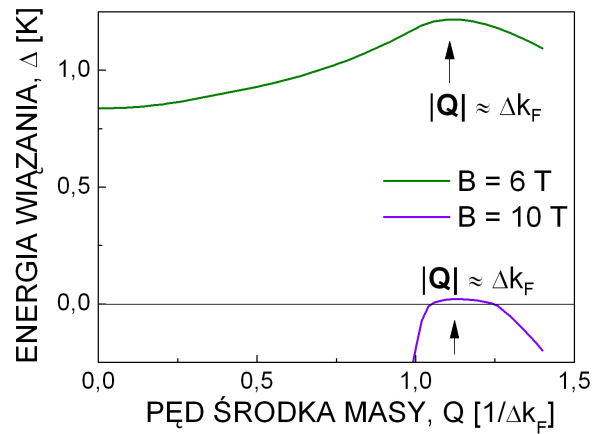
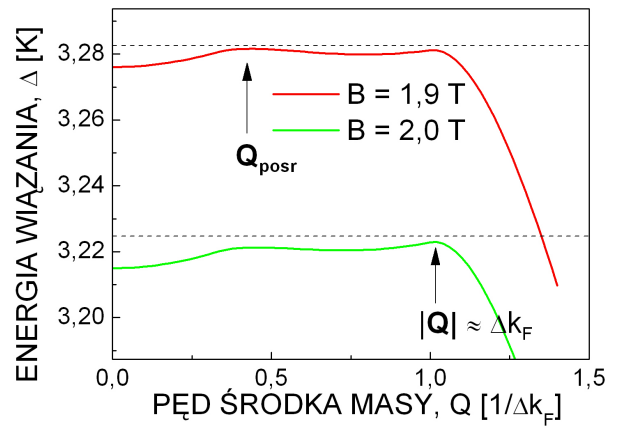
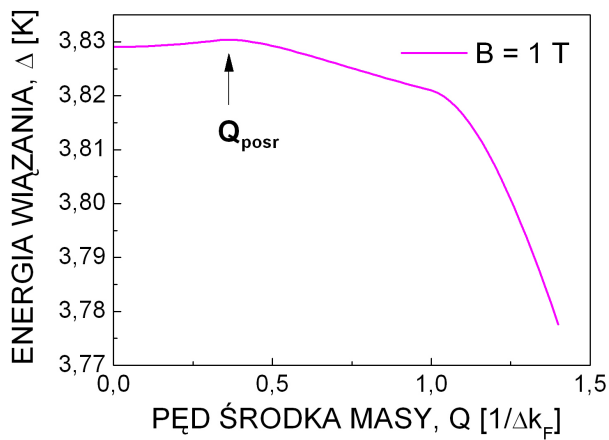
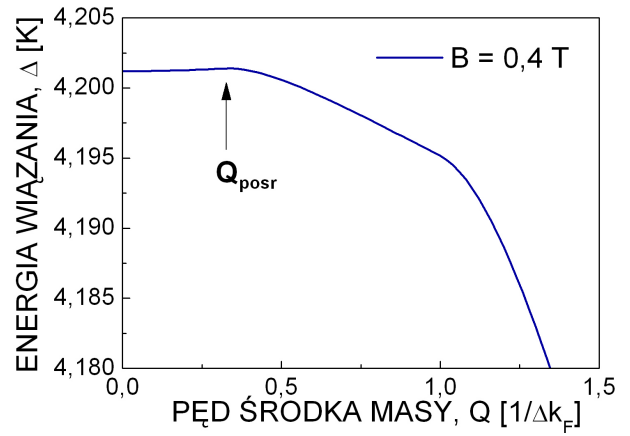
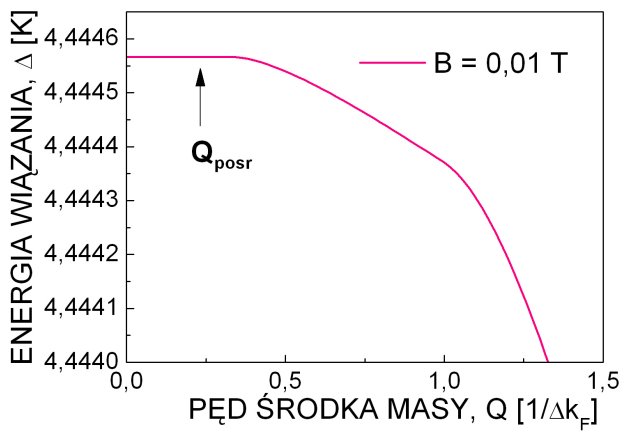
Przyczyną jest fakt, że równanie (3.21) posiada naturalną skalę wartości \mathbf{Q} . Mianowicie, pęd środka masy należy podawać w jednostkach rozszczepienia sfer Fermiego $\Delta k_F = k_{F1} - k_{F2}$. Drugie maksimum pojawia się dla wartości $|\mathbf{Q}| = (0,9 \div 1,1) \Delta k_F$, ponieważ dla tych wartości pędu środka masy w zakresie całkowania $W_1 \cap (W_2 + \mathbf{Q})$ istnieje duży obszar o małych wzbudzeniach $\delta\epsilon_{\mathbf{k}_i\sigma_i} \simeq 0$ (patrz rys. 3.1). Skoro rozszczepienie sfer Fermiego Δk_F rośnie z polem (patrz rys. 3.5), to rośnie z nim także optymalna wartość pędu \mathbf{Q} . Zależność energii wiązania od pędu środka masy w nowych jednostkach przedstawiono na rys 3.7.

Optymalny pęd środka masy w zależności od pola magnetycznego przedstawia rys. 3.8. Z rysunków 3.7 oraz 3.8 wynika, że oprócz rozwiązań z $\mathbf{Q} = 0$ i $|\mathbf{Q}| \simeq \Delta k_F$ pojawia się trzecie rozwiązanie z $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_{\text{posr}}$ leżącym pomiędzy tymi wartościami². Rozwiązanie to posiada jednak energię niewiele większą od energii przy zerowym pędzie środka masy (różnica wynosi najwyżej 5 mK). Za rozwiązaniem tym nie stoi więc żadna głęboka fizyka - jest ono najprawdopodobniej cechą przyjętego modelu i nie sądzimy, aby zaobserwowanie go było możliwe. Wartość pędu \mathbf{Q}_{posr} , dla tego trzeciego rozwiązania zależy mocno od parametru $\hbar\omega_D$. Przez dobranie odpowiedniego $\hbar\omega_D$ możemy sterować wartością pędu w zakresie od $\mathbf{Q}_{\text{posr}} = 0$ (dla $\hbar\omega_D = \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F \simeq 32 K$) do $|\mathbf{Q}_{\text{posr}}| \simeq \Delta k_F$ (dla małych $\hbar\omega_D < 10 K$) powodując pokrywanie się tego rozwiązania z dwoma "oczywistymi" rozwiązaniami.

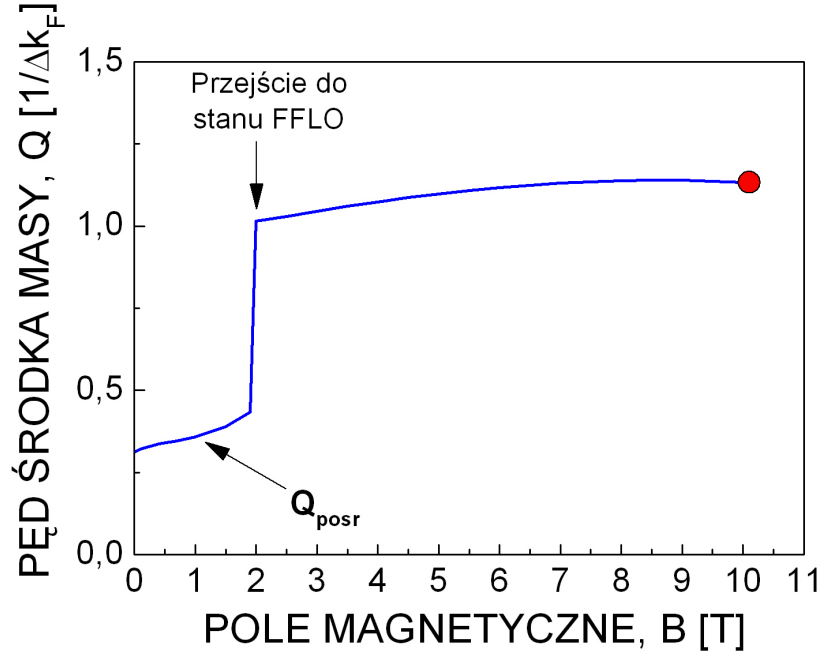
Szukając maksimum energii wiązania Δ w zależności od pędu środka masy \mathbf{Q} dla różnych wartości pola magnetycznego B otrzymujemy zależność $\Delta(B)$ przedstawioną na rys. 3.9. Widać tutaj energię pary nieruchomej oraz energię pary z niezerowym pędem środka masy. Energia pary nieruchomej zależy liniowo od pola, co jest zgodne z wyprowadzonymi wcześniej wzorami (2.26) oraz (2.27). Pokazano także analogiczny wykres w przypadku, kiedy masy nie zależą od spinu. Jest ewidentne, że wówczas energia wiązania spada dużo szybciej z polem. Pole krytyczne w tym przypadku jest równe $B_c = 2,8 T$, podczas gdy dla mas zależnych od spinu wynosi ono ponad trzy razy więcej $B_c = 10,1 T$. Oczywiście rozwiązanie z niezerowym pędem środka masy pary w przypadku równych mas jest niepoprawne fizycznie, gdyż kwazicząstki tworzące parę są wówczas nierozróżnialne, a funkcja falowa poruszającej się pary nie spełnia twierdzenia spin-statystyka (co pokażemy w następnym podrozdziale). Mimo tego, przedstawiliśmy energię takiego stanu dla porównania.

Otrzymane wyniki nasuwają wniosek, że zależność mas od spinu nie przeszkadza, a nawet pomaga zjawisku nadprzewodnictwa. Dzieje się tak dlatego, że przy masach zależnych od spinu wektory falowe Fermiego ulegają mniejszemu rozszczepieniu niż przy $m_1 = m_2$ (patrz rys. 3.5). To właśnie rozszczepienie sfer Fermiego odpowiada za osłabienie parowania, skąd wynika mniejsza energia wiązania dla układów bez zależności mas od spinu.

²W zasadzie maksimum energii wiązania przy $\mathbf{Q} = 0$ nie pojawia się wcale. Istnieje ono tylko dla $B = 0$, co jest oczywiście nierealistyczne.



Rysunek 3.7: Wykres zależności energii wiązania od pędu środka masy przy ustalonym polu magnetycznym. Strzałkami oznaczono maksima energii wiązania. Linie przerywane pozwalają zorientować się, gdzie jest maksimum. Wartości parametrów $m_{av} = 304 m_0$, $\hbar\omega_D = 20 K$, $V_0 = 50 K$.



Rysunek 3.8: Wykres zależności optymalnego pędu środka masy Q od pola magnetycznego B . Wartości parametrów jak poprzednio. W silnych polach $|Q|/\Delta k_F \simeq 1$.

3.3 Dyskusja braku antysymetrii funkcji falowej

Zbadamy teraz własności funkcji falowej pary przy transformacji zamiany cząstek

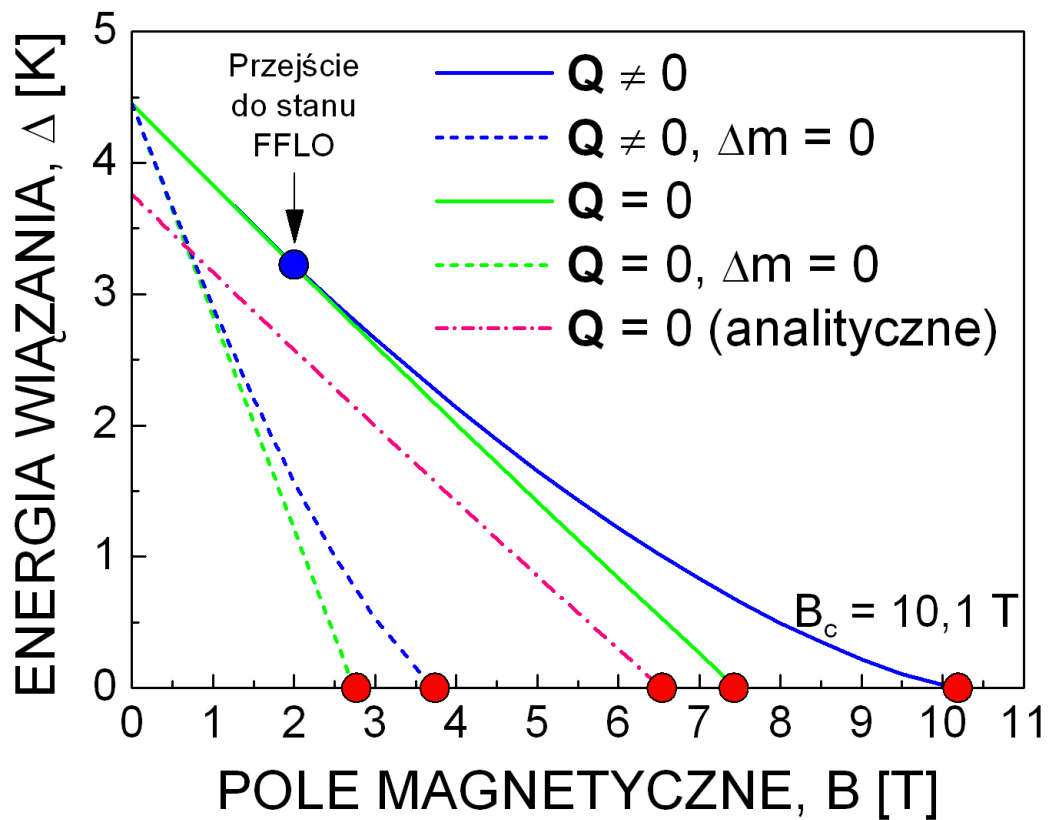
$$(\mathbf{r}_1, \sigma_1) \leftrightarrow (\mathbf{r}_2, \sigma_2). \quad (3.22)$$

Twierdzenie spin-statystyka Pauliego [13] mówi, że funkcje falowe każdych nierozróżnialnych cząstek powinny przy powyższej transformacji być symetryczne (bozony), bądź antysymetryczne (fermiony)³

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \pm \Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \sigma_2, \sigma_1). \quad (3.23)$$

Ponieważ opisywane przez nas kwazicząstki wywodzą się z fermionów (elektronów), chcielibyśmy otrzymać dla nich antysymetryczną funkcję falową. Wobec tego w powyższym równaniu wystąpi znak minus. Poniżej zbadamy własności funkcji falowej pary Coopera przy rozszczepionych masach w kontekście twierdzenia spin-statystyka.

³Spinową liczbę kwantową traktujemy tutaj jako współrzędną.



Rysunek 3.9: Wykres zależności energii wiązania Δ od pola magnetycznego B . Wartości parametrów jak poprzednio. Liniami przerywanymi oznaczono wyniki przy założeniu, że masy nie zależą od spinu. Rezultaty otrzymane na podstawie wyniku analitycznego (2.24) oznaczono linią kropka-kreska.

3.3.1 Rozważania ogólne

Postulowana przez nas funkcja falowa jest zawsze rozseparowana na część przestrzenną i spinową

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (3.24)$$

wobec czego jej własności przy transformacji (3.22) zależą od zachowania tychże części. Aby funkcja falowa $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ była antysymetryczna, jedna z funkcji $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ i $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ musi być symetryczna, a druga antysymetryczna. W nadprzewodnictwie zwykle część spinowa jest antysymetryczna (stan singletowy), więc od części przestrzennej wymagamy symetryczności. W nadciekłości ${}^3\text{He}$, odwrotnie, funkcja spinowa jest symetryczna (stan trypletowy), a funkcja przestrzenna antysymetryczna. Poniżej zbadamy zachowanie obu części funkcji falowej pary Coopera o rozszczepionych masach przy transformacji zamiany cząstek.

Część spinowa

Zachowanie części spinowej $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ pod wpływem transformacji (3.22) jest bardzo proste. Możemy mieć tu do czynienia ze stanem z określonym kwadratem całkowitego spinu (singlet lub tryplet). Wówczas funkcja spinowa ma określoną symetrię (jest odpowiednio antysymetryczna lub symetryczna). Tak jest w naszym modelu dla pary nieruchomej. Alternatywnie, część spinowa może być stanem z określonymi rzutami spinów na oś pola magnetycznego $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$. W stanie takim jest poruszająca się para Coopera. Funkcja taka nie posiada określonej symetrii i przy zamianie cząstek transformuje się do zupełnie innej funkcji $|1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$ (patrz rys. 3.10).

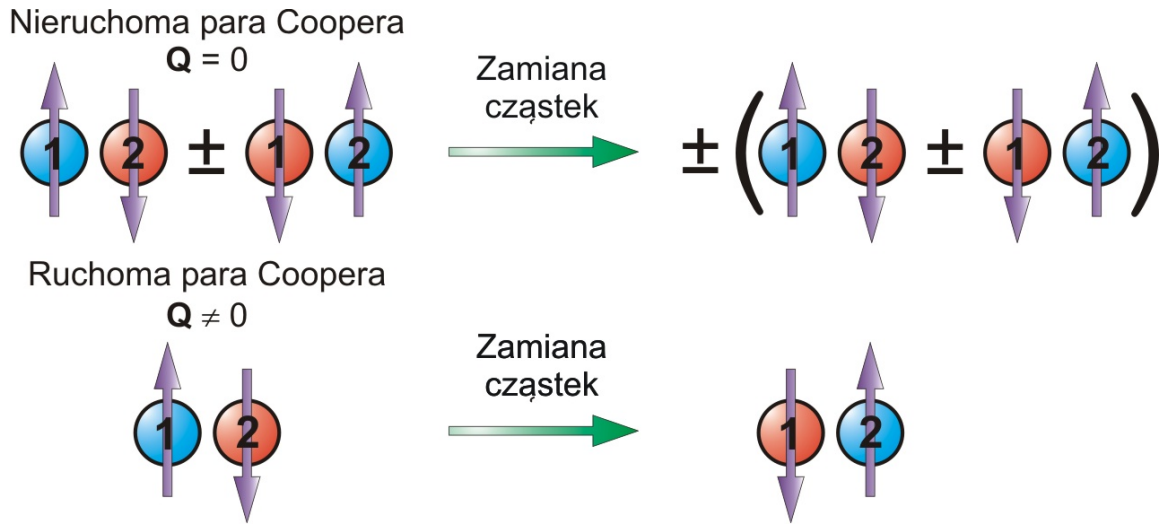
Część przestrzenna

Postać funkcji przestrzennej $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, nie jest już tak trywialna. Dana jest ona zawsze przez superpozycję (1.5)

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \Psi_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1) \Psi_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2}. \quad (3.25)$$

Antycypując, możemy powiedzieć, że nie zawsze funkcja ta posiada "odpowiednią" symetrię (w rozważanym przypadku nadprzewodnictwa oznacza to, że nie jest symetryczna). Jej własności bardzo silnie związane są z pędem środka masy \mathbf{Q} .

Pierwszym zagadnieniem, które musimy rozwiązać, aby przeanalizować symetrię funkcji falowej pary, jest przejście z rozważaniami do układu środka masy, w którym rozwiązaliśmy problem Coopera. Można sprawdzić na podstawie (3.4, 3.5), że transformacja przestawienia cząstek (3.22) jest



Rysunek 3.10: Stany spinowe nieruchomej i poruszającej się pary Coopera. Dla nieruchomej pary Coopera funkcja falowa spełnia twierdzenie spin-statystyka, więc możemy mówić o kwazicząstkach nierozróżnialnych. Dla pary poruszającej się, część spinowa funkcji falowej nie ma określonej symetrii, zatem mamy do czynienia z kwazicząstkami rozróżnialnymi.

równoważna z zamianą

$$\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = -\mathbf{r}, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}' = \mathbf{R} + \mathbf{r} \frac{\Delta m}{M}. \quad (3.27)$$

Powyższe wzory dają nam przepis na działanie transformacji zamiany cząstek w układzie środka masy.

3.3.2 Funkcja falowa pary w spoczynku - kwazicząstki nierozróżnialne

Pokażemy tutaj, że funkcja falowa $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ nieruchomej pary posiada własność antysymetrii ze względu na przestawienie cząstek, $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \sigma_2, \sigma_1)$, nawet w przypadku, kiedy $\Delta m \neq 0$. Rozważymy sytuację, w której masy kwazicząstek są różne, co jest bardziej ogólne.

Z rozdziału 2 znamy następującą postać przestrzennej funkcji falowej (2.10)

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{V} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (3.28)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \alpha_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - E}. \quad (3.29)$$

Przyjmujemy definicję potencjału (2.15)

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}} \vee \mathbf{k}' \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}}. \end{cases} \quad (3.30)$$

Wykorzystując fakt, że w rozważanym przypadku $\mathbf{Q} = 0$, więc $\epsilon_{\mathbf{Q}} = 0$ oraz oznaczając $C \equiv \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \alpha_{\mathbf{k}}$, dostajemy wzór na współczynniki rozwinięcia $\alpha_{\mathbf{k}}$

$$\alpha_{\mathbf{k}} = \begin{cases} \frac{CV_0/N}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E}, & \text{dla } \mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}. \end{cases} \quad (3.31)$$

Dla nieruchomej pary mamy więc ostatecznie

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}} \frac{CV_0/N}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (3.32)$$

Przy transformacji (3.26, 3.27) funkcja ta przechodzi w

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \rightarrow \Phi(\mathbf{R}', \mathbf{r}') &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}} \frac{CV_0/N}{\epsilon_{\mathbf{k}} - E} e^{i\mathbf{k}(-\mathbf{r})} = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{-\mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}} \frac{CV_0/N}{\epsilon_{-\mathbf{k}'} - E} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}_{\mathbf{Q}=0}} \frac{CV_0/N}{\epsilon_{\mathbf{k}'} - E} e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} = \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Przy przekształceniach skorzystaliśmy ze sferycznej symetrii obszaru $\overline{W}_{\mathbf{Q}=0}$ (por. rys. 2.1) oraz z tego, że $\epsilon_{-\mathbf{k}'} = \epsilon_{\mathbf{k}'}$. Widzimy, że przestrzenna funkcja falowa jest symetryczna przy transformacji zamiany cząstek (3.22). W związku z tym, że część spinowa jest antysymetryczna (stan sigletowy), całkowita funkcja falowa jest również antysymetryczna. Gdyby nasze rozważania dotyczyły nadciężkości w ${}^3\text{He}$, to część spinowa byłaby symetryczna (stan trypletowy), natomiast część przestrzenna antysymetryczna, dając antysymetrię całkowitej funkcji falowej.

Podsumowując, pokazaliśmy, że stan o zerowym pędzie środka masy $\mathbf{Q} = 0$ posiada zawsze symetrię zgodną z twierdzeniem spin-statystyka, nawet jeśli kwazicząstki mają różną masę. Jest to związane także z tym, że dla $\mathbf{Q} = 0$ część funkcji falowej opisująca ruch środka masy ($e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}}$) ma trywialną postać i transformacja (3.27) niczego nie zmienia.

Przypadek, kiedy $\Delta m = 0$ (a więc i $\mathbf{Q} = 0$) jest przypadkiem szczególnym powyższych rozważań. Jako taki, również posiada on odpowiednią symetrię.

3.3.3 Rozróżnialność kwazicząstek dla poruszającej się pary

Oczywiście pamiętamy, że poruszająca się para jest w stanie spinowym bez określonej symetrii $|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle$ (patrz rys. 3.10), więc z definicji nie może spełniać twierdzenia spin-statystyka [13]. Jest tak, ponieważ wartość spinu pary jest wtedy nieokreślona.

Ciekawe jest natomiast zbadanie przestrzennej funkcji falowej poruszającej się pary $\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Okazuje się, że funkcja ta nie jest symetryczna ze względu na zamianę cząstek (3.22). Przyczyną braku symetrii jest nietrywialna transformacja czynnika $e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}}$ oraz brak sferycznej symetrii obszaru całkowania $\bar{W}_{\mathbf{Q}}$ (patrz rys. 3.1).

Chcielibyśmy móc coś powiedzieć ilościowo o symetrii przestrzennej funkcji falowej poruszającej się pary. W tym celu rozłożymy ją na sumę części symetrycznej $\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ i antysymetrycznej $\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (3.34)$$

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1/2 \left[\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \right], \quad (3.35)$$

$$\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 1/2 \left[\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \Phi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \right]. \quad (3.36)$$

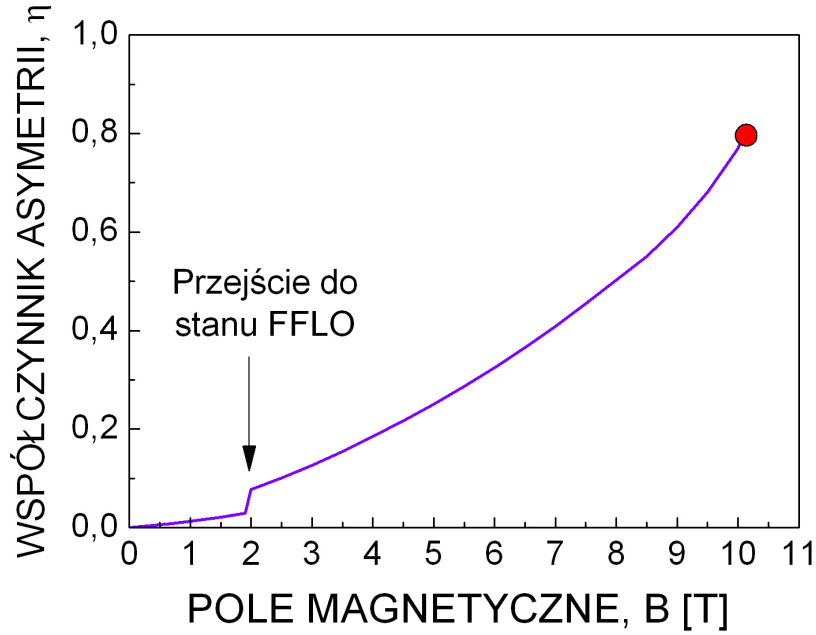
Widać, że funkcje $\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ i $\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ pod wpływem transpozycji (3.22) są symetryczne i antysymetryczne odpowiednio. Korzystając z wprowadzonego powyżej rozkładu możemy "zmierzyć", jak bardzo przestrzenna funkcja falowa pary odbiega od funkcji symetrycznej. Miarą tego odbiegania będzie współczynnik asymetrii η zdefiniowany w następujący sposób

$$\eta \equiv \frac{\int_V |\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2}{\int_V |\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 d^3r_1 d^3r_2}. \quad (3.37)$$

Współczynnik ten powie nam, jak duży jest stosunek funkcji antysymetrycznej $\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ do części symetrycznej $\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Dla nieruchomej pary będziemy oczywiście mieli $\eta = 0$, bo jej funkcja jest symetryczna. Zwiększając pole magnetyczne \mathbf{B} , a więc i rozszczepienie mas Δm , doprowadzimy w pewnym momencie do przejścia układu do stanu FFLO, dla którego $\mathbf{Q} \neq 0$, co pociąga za sobą $\eta \neq 0$. Zależność współczynnika η od pola magnetycznego dla rozważanych przez nas parametrów przedstawia rys. 3.11.

3.3.4 Dlaczego brakuje symetrii?

Brak antysymetrii funkcji falowej $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ przy transformacji zamiany cząstek (3.22) oznacza, że rozważane kwazicząstki nie są nierozróżnialne! Jest to kluczowa kwestia, ponieważ oprócz nowej, ciekawej fizyki rodzi pytanie o poprawność przedstawionych wyników. Zastanówmy się więc, dlaczego brak antysymetrii mógłby być w tym przypadku uzasadniony.



Rysunek 3.11: Wykres zależności współczynnika asymetrii η od pola magnetycznego B . Wartości parametrów $m_{av} = 304 m_0$, $\hbar\omega_D = 20 K$, $V_0 = 50 K$.

Jak już wspominaliśmy, wprowadzony przez nas hamiltonian jest efektywny na dwóch poziomach. W kontekście braku symetrii istotna jest jego efektywność przy uwzględnieniu efektów prowadzących do rozszczepienia mas. Zamiast opisywać układu N cząstek wraz z oddziaływaniami typu Hubbarda prowadzącymi do rozszczepienia mas, hamiltonian ten opisuje jedynie dwie cząstki efektywne - kwazicząstki. Rozszczepione masy są do niego wprowadzone w sposób sztuczny (nie wynikają z postaci hamiltonianu wyjściowego). Można się spodziewać, że gdybyśmy uwzględnili wszystkie oddziaływania w układzie i policzyli N -cząstkową funkcję falową to spełniałaby ona twierdzenie spin-statystyka. Nie ma potrzeby wymagać od dwucząstkowej funkcji falowej tego samego, bo ta jest stanem własnym hamiltonianu efektywnego ze spinowo-zależnymi masami (zaniedbującego oddziaływania Hubbardowskie prowadzące do rozszczepienia mas). Innymi słowy, hamiltonian startowy ze spinowo-zależnymi masami jest *modelem efektywnym*.

Można zatem stwierdzić, że brak antysymetrii funkcji falowej w naszym przypadku nie jest w sprzeczności z twierdzeniem spin-statystyka Pauliego, ponieważ rozważana przez nas funkcja falowa dotyczy obiektów efektywnych (pojedynczych par kwazicząstek wydzielonych ze środowiska).

Należy zwrócić uwagę, że także układ wielu cząstek z masami zależnymi od spinu może łamać twierdzenie spin-statystyka. Oczywiście w ramach zespołu cząstek o jednakowym rzucie spinu na oś pola, cząstki wciąż będą nierozróżnialne. Jednak funkcja falowa może nie mieć określonej symetrii ze względu na przestawienie cząstki ze spinem w górę z cząstką ze spinem w dół, czyli takie cząstki są

już rozróżnialne. Będziemy w tym przypadku mieć zatem do czynienia z dwoma różnymi zbiorami cząstek nierozróżnialnych. W granicy zerowego pola magnetycznego wystąpi degeneracja i te dwa zbiory cząstek połączą się w jeden.

Rozważana przez nas sytuacja jest w pewnym sensie analogiczna do układu takiego jak atomy mionowe. W tychże atomach jeden z elektronów jest zastąpiony przez mion μ . Ze względu na większą masę mionu ($m_\mu = 206,7 m_0$), gęstość prawdopodobieństwa znalezienia go w okolicach jądra atomu jest bardzo duża, w przeciwieństwie do gęstości prawdopodobieństwa znalezienia tam elektronu. Wynika stąd brak antysymetrii funkcji falowej układu ze względu na zamianę elektronu z mionem. Atom mionowy jest więc prostym układem, w którym różne masy cząstek prowadzą do braku symetrii funkcji falowej. W tym przypadku nie budzi to oczywiście naszego sprzeciwu, ponieważ mion i elektron są różnymi cząstkami, a nie różnymi stanami tej samej cząstki.

3.3.5 Kwazicząstki rozróżnialne

Wprowadzony przez nas formalizm jest interesujący również dlatego, że pozwala zamodelować przejście od kwazicząstek nierozróżnialnych (dla małego pola \mathbf{B} i stanu z $\mathbf{Q} = 0$) do kwazicząstek rozróżnialnych (dla większych pól \mathbf{B} i stanu z niezerowym pędem \mathbf{Q}). Przeanalizujmy teraz, jak w naszym przypadku wygląda taka transformacja. Załóżmy na chwilę, że tak dobraliśmy wartość $\hbar\omega_D$, że rozwiązanie z \mathbf{Q}_{posr} pokrywa się z rozwiązaniem z zerowym pędem środka masy⁴. Wyobraźmy sobie, że mamy układ ze spinowo-zależnymi masami w niskiej temperaturze i stopniowo zwiększamy pole. Dla zerowego pola magnetycznego kwazicząstki występujące w układzie są nierozróżnialne, ponieważ charakteryzują się taką samą masą. Dla słabych pól, w których rozwiązanie nieruchome ma największą energię, mamy niezerowe rozszczepienie mas, a więc cząstki rozróżnialne ze względu na masę. Jednak funkcja falowa pary Coopera

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \frac{1}{\sqrt{2}} (|1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle - |1 \downarrow\rangle |2 \uparrow\rangle) \quad (3.38)$$

dalej spełnia twierdzenie spin-statystyka, czyli stan układu o najniższej energii jest wciąż symetryczny ze względu na przestawienie cząstek. Dopiero dla pewnej znacznej wartości pola magnetycznego (w naszym przypadku $B \simeq 2T$, por. rys. 3.8, 3.9, 3.11) układ wykorzystuje możliwość przejścia do stanu bez określonej symetrii, którą daje mu rozróżnialność cząstek. W tym przypadku funkcja falowa jest postaci (por. rys. 3.10)

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{V} e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} |1 \uparrow\rangle |2 \downarrow\rangle. \quad (3.39)$$

⁴Albo uznajmy, że rozwiązanie z \mathbf{Q}_{posr} jest cechą modelu i odrzucmy je przyjmując, że rzeczywisty układ jest w stanie z $\mathbf{Q} = 0$ zamiast \mathbf{Q}_{posr} .

Można więc powiedzieć, że zwiększając pole magnetyczne w naszym modelu powodujemy transformację kwazicząstek nierozróżnialnych w kwazicząstki rozróżnialne, przy czym przejście to jest nieciągłe (dla przyjętych parametrów występuje około $B = 2T$).

Interesujący jest również fakt, że zrzucenie więzu na funkcję falową wynikającego z twierdzenia spin-statystyka dopiero dla pola $B = 2T$ prowadzi do stanu o niższej energii niż stan zgodny z twierdzeniem spin-statystyka.

3.4 Ogólna funkcja falowa spełniająca warunki symetrii i jej nieadekwatność

Rozważymy tutaj najogólniejszą funkcję falową antysymetryczną względem zamiany cząstek (3.22) i pokażemy, że jej energia spada ze wzrostem pędu środka masy pary \mathbf{Q} oraz jest niższa od energii rozpatrywanego przez nas stanu łamiącego symetrię (3.2). Funkcje spinowe o określonej symetrii to funkcja singletowa i trypletowa

$$\chi_S(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle - |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle), \quad (3.40)$$

$$\chi_T(\sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle + |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle). \quad (3.41)$$

Wobec tego możemy ogólną funkcję spełniającą warunki symetrii rozłożyć w bazie funkcji singletowej i trypletowej. Przez rozkład ten nie tracimy na ogólności, ponieważ funkcje bazowe rozpinają całą przestrzeń z zetową składową całkowitego spinu równą zero $s_1^z + s_2^z = 0$

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_S(\sigma_1, \sigma_2) + \Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_T(\sigma_1, \sigma_2). \quad (3.42)$$

Skoro funkcja Ψ ma być antysymetryczna, to funkcja Φ_S musi być symetryczna, natomiast Φ_A antysymetryczna. Stan (3.42) nie ma określonej symetrii ze względu na zamianę samych zmiennych przestrzennych ($\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$), ani samych zmiennych spinowych ($\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$). Jednak zamiana jednych i drugich prowadzi do zmiany znaku funkcji Ψ . Podkreślamy jeszcze raz, że funkcja (3.42) jest **najogólniejszym** stanem antysymetrycznym ze względu na zamianę cząstek. Funkcje z przestrzeni rzeczywistej Φ_S oraz Φ_A przedstawiamy w następujący sposób (w rachunkach pomijamy czynnik normalizacyjny $\frac{1}{V}$)

$$\Phi_A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} - e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1} \right), \quad (3.43)$$

$$\Phi_S(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \beta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left(e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} + e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1} \right). \quad (3.44)$$

Dzięki takiej konstrukcji, antysymetria i symetria funkcji Φ_A oraz Φ_S jest od razu zapewniona i nie zależy od wyboru współczynników rozwinięcia $\alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ oraz $\beta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$. Zerując współczynniki $\alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ lub $\beta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}$ odtwarzamy stan trypletowy⁵, bądź singletowy.

Rozwiążemy teraz problem Coopera z ogólną funkcją falową (3.42) spełniającą twierdzenie spin-statystyka. Rozważamy hamiltonian (2.30) z masą będącą operatorem

$$\tilde{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_{av} - \sigma_1^z \Delta m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_{av} - \sigma_2^z \Delta m} \nabla_2^2 - \sigma_1^z \epsilon_B - \sigma_2^z \epsilon_B + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (3.45)$$

Jak już powiedzieliśmy w rozdziale 2, naturalną bazą funkcji spinowych dla powyższego hamiltonianu jest $\{|1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle, |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle\}$. Wobec tego funkcję falową (3.42) przekształcamy do następującej postaci

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[(\lambda_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} + \gamma_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1}) |1 \uparrow\rangle|2 \downarrow\rangle - (\gamma_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} + \lambda_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1}) |1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle \right], \quad (3.46)$$

gdzie nowe współczynniki wiążą się ze starymi poprzez relacje

$$\lambda_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \beta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} + \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}, \quad (3.47)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} = \beta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} - \alpha_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}. \quad (3.48)$$

Po zadziałaniu hamiltonianem na funkcję falową, a następnie zrzutowaniu na stany spinowe $\langle 1 \uparrow | \langle 2 \downarrow |$ oraz $\langle 1 \downarrow | \langle 2 \uparrow |$ dotajemy na podstawie równania Schrödingera następujący układ równań

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \lambda_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_2} - E + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} + \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_1} - E + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1} = 0, \quad (3.49)$$

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_1} - E + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2} + \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \lambda_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \left[\frac{\hbar^2 \mathbf{k}_1^2}{2m_1} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_2^2}{2m_2} - E + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] e^{i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_1} = 0. \quad (3.50)$$

Następnie, przeprowadzamy transformację do zmiennych środka masy i względnych, jak poprzednio

⁵Oczywiście para cząstek w stanie trypletowym nie stworzy stanu związanego, ponieważ rozpatrujemy parowanie typu s.

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 m_1 + \mathbf{r}_2 m_2}{m_1 + m_2}; \quad \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \quad (3.51)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2; \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2}. \quad (3.52)$$

Przy zastosowaniu powyższej transformacji, w nietrywialny sposób przekształcają się wyraz pod eksponentą $i\mathbf{k}_1\mathbf{r}_2 + i\mathbf{k}_2\mathbf{r}_1 = i\mathbf{Q}\mathbf{R} + ir(-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})$ oraz wyraz kinetyczny $\frac{\hbar^2\mathbf{k}_1^2}{2m_2} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}_2^2}{2m_1} = \frac{\hbar^2\mathbf{Q}^2}{2M} + \frac{\hbar^2(\mathbf{k} - \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})^2}{2\mu}$. Ostatecznie układ równań (3.49, 3.50) przyjmuje następującą postać

$$\sum_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \left[T_{\mathbf{k}} + V(r) \right] e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R} + i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \left[T_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} + V(r) \right] e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R} + ir(-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})} = 0, \quad (3.53)$$

$$\sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \gamma_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \left[T_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} + V(r) \right] e^{i\mathbf{Q}\mathbf{R} + i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \lambda_{\mathbf{Q},\mathbf{k}} \left[T_{\mathbf{k}} + V(r) \right] e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r} + ir(-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})} = 0, \quad (3.54)$$

gdzie wyraz kinetyczny jest zdefiniowany przez $T_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\hbar^2\mathbf{Q}^2}{2M} + \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2\mu} - E$.

Oba równania z układu mnożymy przez $e^{-i\mathbf{Q}'\mathbf{R}}$ i wykonujemy całkowanie w zmiennej \mathbf{R} po całej objętości. Okazuje się wówczas, że pęd środka masy jest zachowany, wobec czego cały problem rozważamy odtąd dla ustalonego \mathbf{Q} , a współczynników λ i γ nie sumujemy już po \mathbf{Q} . Następnie, w tych sumach układu (3.53, 3.54), w których pod eksponentą występuje wyraz $ir(-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})$ przesuwamy skalę wektorów falowych $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}$. Dzięki temu możemy połączyć sumy, a równania przyjmują prostą postać

$$\sum_{\mathbf{k}} (\lambda_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}}) [T_{\mathbf{k}} + V(r)] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 0, \quad (3.55)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} (\lambda_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} + \gamma_{\mathbf{k}}) [T_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} + V(r)] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 0. \quad (3.56)$$

Mnożąc oba równania przez $e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}$ i wykonując całkowanie w zmiennej \mathbf{r} po całej objętości oraz korzystając z definicji potencjału $V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \equiv \frac{N}{V} \int_V e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} V(r) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3r$ dostajemy

$$\lambda_{\mathbf{k}'} + \gamma_{-\mathbf{k}' + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} = \frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}} (\lambda_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}}) V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}{T_{\mathbf{k}'}} , \quad (3.57)$$

$$\lambda_{-\mathbf{k}' + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} + \gamma_{\mathbf{k}'} = \frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}} (\lambda_{-\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} + \gamma_{\mathbf{k}}) V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}{T_{-\mathbf{k}' + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}}} . \quad (3.58)$$

W drugim równaniu z powyższego układu przesuwamy skalę wektorów falowych w następujący sposób $\mathbf{k}' \rightarrow -\mathbf{k}' + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}$, $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}$. Prowadzi to do nowego układu, w którym równania są bardzo podobne

$$\lambda_{\mathbf{k}'} + \gamma_{-\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} = \frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}} (\lambda_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}}) V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}}{T_{\mathbf{k}'}} \quad (3.59)$$

$$\lambda_{\mathbf{k}'} + \gamma_{-\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}} = \frac{1}{N} \frac{\sum_{\mathbf{k}} (\lambda_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}}) V_{(-\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})(-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})}}{T_{\mathbf{k}'}} \quad (3.60)$$

Jest oczywiste, że aby powyższy układ nie był sprzeczny, musi zachodzić równość elementów macierzowych potencjału

$$V_{(-\mathbf{k}'+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})(-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M})} = V_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}. \quad (3.61)$$

Przy jej spełnieniu równania (3.59) oraz (3.60) są sobie równoważne. Chcemy wprowadzić potencjał w formie przyciągającej studni w obszarze W^*

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in W^*, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin W^* \vee \mathbf{k}' \notin W^*. \end{cases} \quad (3.62)$$

Warunek (3.61) wprowadza wówczas następujące ograniczenie na obszar W^*

$$W^* = -W^* + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}. \quad (3.63)$$

Problemem jest jak zdefiniować obszar W^* , aby był on fizycznie uzasadniony. Obszar wzbudzeń $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$, który przyjmowaliśmy wcześniej, niestety nie spełnia warunku (3.61), więc nie możemy użyć $W^* = \overline{W}_{\mathbf{Q}}$. Możemy natomiast z $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ dostać obszar spełniający żądany warunek biorąc następujący iloczyn

$$W^* = \overline{W}_{\mathbf{Q}} \cap (-\overline{W}_{\mathbf{Q}} + \mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}). \quad (3.64)$$

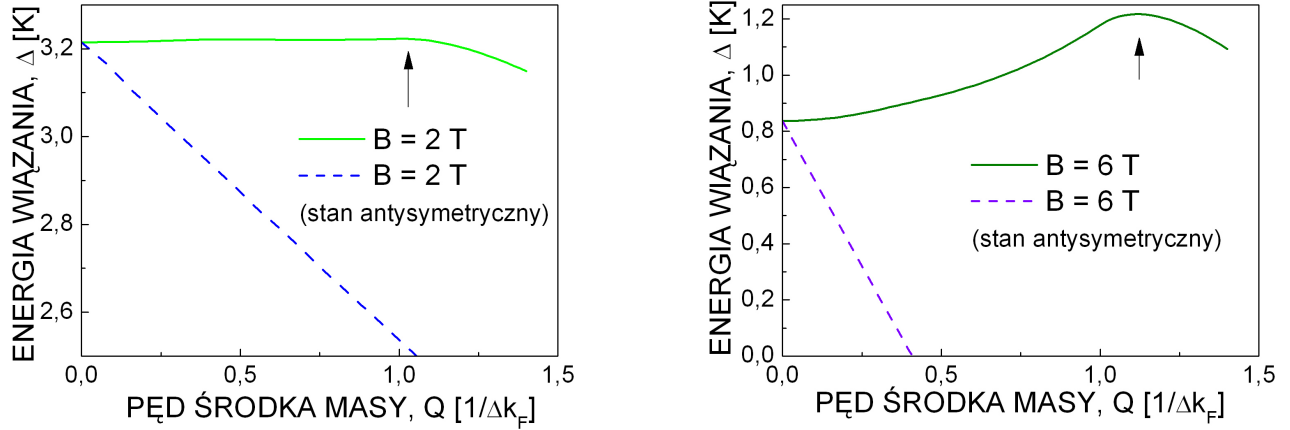
Tak zdefiniowany obszar całkowania jest uzasadniony fizycznie. Aby to zobaczyć, korzystając z definicji $\overline{W}_{\mathbf{Q}}$ (2.14) pokazujemy, że obszar W^* jest dany przez

$$W^* = \left\{ \mathbf{k} = \frac{\mathbf{k}_1 m_2 - \mathbf{k}_2 m_1}{m_1 + m_2} \mid \mathbf{k}_1 \in W_1 \cap W_2 \wedge \mathbf{k}_2 \in W_2 \cap W_1 \wedge \mathbf{Q} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \right\}, \quad (3.65)$$

$$W_i = \left\{ \mathbf{k} \mid \epsilon_F \leq \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_i} - \sigma_i \epsilon_B \leq \epsilon_F + \hbar \omega_D \right\}, \quad i = 1, 2. \quad (3.66)$$

Z powyższego równania widać, że zamiana wektorów falowych ($\mathbf{k}_1 \leftrightarrow \mathbf{k}_2$) nie wyprowadza poza obszar W^* . Jest to związane z nierozróżnialnością cząstek. Dodatkowo, wektory falowe mieszczą się w obszarach wzbudzeń W_i . Te dwa fakty świadczą o tym, że wprowadzenie tak zdefiniowanego obszaru oddziaływania ma sens fizyczny.

Równanie na energię wiązania możemy dostać sumując równanie (3.59) lub (3.60) po $\mathbf{k}' \in W^*$ i skracając przez $\sum_{\mathbf{k} \in W^*} (\lambda_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}+\mathbf{Q}\frac{\Delta m}{M}})$



Rysunek 3.12: Energia wiązania pary dla stanu (3.2) łamiącego symetrię (linia ciągła) oraz ogólnego stanu antysymetrycznego (3.42) (linia przerywana).

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in W^*} \frac{1}{T_{\mathbf{k}}} = \sum_{\mathbf{k} \in W^*} \frac{1}{\frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2M} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2\mu} - E}. \quad (3.67)$$

Widać, że powyższe równanie na przerwę jest takie samo jak poprzednie (3.10) otrzymane dla funkcji w stanie spinowym $|1 \downarrow\rangle|2 \uparrow\rangle$

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}_{\mathbf{Q}}} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{Q}} + \epsilon_{\mathbf{k}} - 2\epsilon_F + \Delta}, \quad (3.68)$$

z tym że sumowanie odbywa się teraz po mniejszym obszarze W^* . Wynika stąd automatycznie, że para w ogólnym stanie antysymetrycznym (3.42) będzie miała mniejszą energię wiązania Δ niż w stanie łamiącym symetrię (3.2). Dla nieruchomej pary ($\mathbf{Q} = 0$) oba stany mają taką samą energię, ponieważ wówczas całkowanie odbywa się po identycznym obszarze. Numeryczne wyniki otrzymane z równania (3.67) pokazują, że energia wiązania stanu antysymetrycznego (3.42) spada ze wzrostem pędu \mathbf{Q} (patrz rys. 3.12).

Mniejsza energia wiązania stanu antysymetrycznego (3.42) jest dowodem na to, że funkcja falowa nie spełniająca twierdzenia spin-statystyka może być znacznie korzystniejsza energetycznie. Ten fundamentalny rezultat może mieć bardzo poważne konsekwencje dla układów ze spinowo-zależnymi masami. Oznacza bowiem, że formułując teorię wielociałową typu BCS zakładanie relacji antykomutacji kwazicząstek o spinie w górę z kwazicząstkami o spinie w dół może prowadzić do stanu o wyższej energii niż stan podstawowy. W tym przypadku stan podstawowy niekoniecznie musi być antysymetryczny ze względu na zamianę kwazicząstki ze spinem w górę z kwazicząstką ze spinem w dół, co nie jest sprzeczne z twierdzeniem spin-statystyka ze względu na różne masy tychże cząstek.

Rozdział 4

Opis w ramach teorii BCS, przy $m_{\uparrow} \neq m_{\downarrow}$

Podamy tutaj opis stanu nadprzewodzącego przy spinowo-zależnych masach w ramach teorii typu BCS w formalizmie Bogoljubowa [23]. Nasze rachunki ograniczymy do opisu stanu nadprzewodzącego z zerowym pędem środka masy par Coopera. Nie będziemy natomiast omawiać tutaj teorii BCS przy równych masach. Jej opis można znaleźć w oryginalnej pracy Bardeena, Coopera i Schrieffera [14], bądź w podręcznikach [15]. W punkcie wyjścia mamy daną, podobnie jak w poprzednich rozdziałach, teorię stanów elektronowych układu nieoddziałującego oraz zależność mas od magnetyzacji - wzory (1.56) do (1.60).

4.1 Problem parowania

Rozważanym problemem w przypadku teorii typu BCS nie jest już problem pojedynczej pary, ale całego N-cząstkowego układu elektronów przy obecności potencjału parującego. Jest to zagadnienie wielociałowe, wobec czego do jego opisu używamy języka drugiego kwantowania [22]. Tak więc, w tym rozdziale mamy już do czynienia z całym morzem Fermiego cząstek parujących się, a nie z "nieaktywnym" morzem Fermiego i dwiema cząstkami oddziałującymi. W przypadku równych mas, startowy hamiltonian w teorii BCS ma następującą postać

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}, \quad (4.1)$$

gdzie $n_{\mathbf{k}\sigma} = a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma}$ jest operatorem liczby cząstek w stanie $\{\mathbf{k}\sigma\}$. Relacja dyspersji jest tutaj niezależna od spinu. To, co zmieni się w powyższym hamiltonianie przy przejściu układu ze spinowo-zależnymi masami, to właśnie relacje dyspersji. Przypominamy, że przy masach zależnych od spinu relacje te mają postać (1.62)

$$\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_{\sigma}} - \sigma \epsilon_B. \quad (4.2)$$

Teraz jednak za początek skali energii przyjmiemy poziom Fermiego¹, zatem

$$\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_\sigma} - \sigma \epsilon_B - \epsilon_F. \quad (4.3)$$

Wobec tego hamiltonian, przy pomocy którego opiszemy nadprzewodnictwo ze spinowo-zależnymi masami przy nieruchomych parach Coopera, ma następującą postać

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \epsilon_{\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow}) + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}'\downarrow} a_{\mathbf{k}'\uparrow}. \quad (4.4)$$

4.2 Diagonalizacja hamiltonianu

Wprowadzimy teraz operatory kreacji i anihilacji pary

$$b_{\mathbf{k}}^\dagger = a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; \quad b_{\mathbf{k}} = a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (4.5)$$

Wyraz z oddziaływaniem zastąpimy przez odpowiednie wartości średnie stosując przybliżenie Hartree-Focka

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}'} \simeq \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left(b_{\mathbf{k}}^\dagger \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle + \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle b_{\mathbf{k}'} - \langle b_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle \right). \quad (4.6)$$

Wprowadzimy jeszcze następujące oznaczenie

$$\Delta_{\mathbf{k}} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle, \quad (4.7)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{k}} \langle b_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle. \quad (4.8)$$

Przyjmując standardową definicję potencjału (stały potencjał przyciągający w obszarze wzbudzeń \overline{W} powyżej i poniżej odpowiednich powierzchni Fermiego - patrz rys. 4.1)

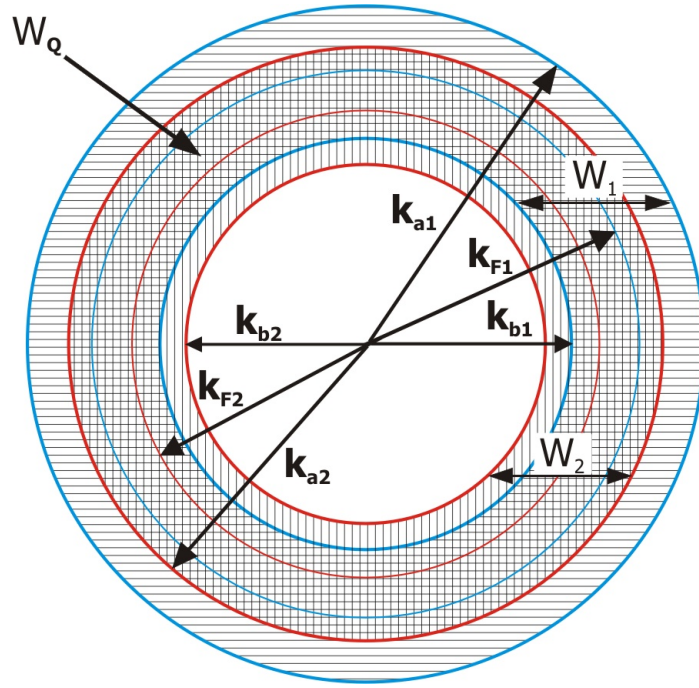
$$V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \begin{cases} -V_0, & \text{dla } \mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \overline{W}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W} \vee \mathbf{k}' \notin \overline{W} \end{cases} \quad (4.9)$$

otrzymujemy uproszczone wyrażenia na parametr $\Delta_{\mathbf{k}}$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} -\frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}} \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle, & \text{dla } \mathbf{k} \in \overline{W}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}, \end{cases} \quad (4.10)$$

$$\Delta_{\mathbf{k}}^* = \begin{cases} -\frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}' \in \overline{W}} \langle b_{\mathbf{k}'}^\dagger \rangle, & \text{dla } \mathbf{k} \in \overline{W}, \\ 0, & \text{dla } \mathbf{k} \notin \overline{W}. \end{cases} \quad (4.11)$$

¹Nie uwzględniamy tutaj zmiany potencjału chemicznego w stanie nadprzewodzącym, przyjmując $\mu = \epsilon_F = \text{const.}$



Rysunek 4.1: Obszar oddziaływania kwazicząstek $\bar{W} = W_1 \cap W_2$. Wektory k_{bi} , k_{ai} są zdefiniowane przez $\frac{\hbar^2 k_{bi}^2}{2m_i} = \epsilon_F + \sigma_i \epsilon_B - \hbar\omega_D$, $\frac{\hbar^2 k_{ai}^2}{2m_i} = \epsilon_F + \sigma_i \epsilon_B + \hbar\omega_D$, $i = 1, 2$.

Zauważmy, że przy takim potencjale wartość $\Delta \equiv -\frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}' \in \bar{W}} \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle$ jest stała w obszarze oddziaływania \bar{W} . W związku z tym, indeks \mathbf{k} będziemy pomijać w poniższych obliczeniach, pamiętając, że dla wektorów \mathbf{k} spoza obszaru oddziaływania \bar{W} wartość parametru Δ jest zerowa.

Jaki jest teraz obszar oddziaływania \bar{W} ? Po przeanalizowaniu definicji potencjału i sposobu jego występowania w hamiltonianie można dojść do wniosku, że obszar \bar{W} jest znowu iloczynem odpowiednich obszarów wzbudzeń jednocząstkowych (patrz rys. 4.1)

$$\bar{W} = W_1 \cap W_2, \quad (4.12)$$

$$W_i = \{\mathbf{k} \mid \epsilon_F - \hbar\omega_D \leq \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_i} - \sigma_i \epsilon_B \leq \epsilon_F + \hbar\omega_D\}, \quad i = 1, 2. \quad (4.13)$$

Ponieważ obszary W_1 i W_2 są sferycznie symetryczne, to \bar{W} też będzie posiadał symetrię sferyczną.

Po zastosowaniu wszystkich powyższych oznaczeń, hamiltonian (4.4) przedstawia się następująco

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\uparrow} + \epsilon_{\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger a_{\mathbf{k}\downarrow} + \Delta a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger + \Delta^* a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}) + N \frac{|\Delta|^2}{V_0}. \quad (4.14)$$

Wprowadzamy notację dwukomponentową

$$a_{\mathbf{k}} \equiv \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}; \quad a_{\mathbf{k}}^\dagger \equiv (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{-\mathbf{k}\downarrow}). \quad (4.15)$$

Można pokazać, że hamiltonian (4.14) po zastosowaniu powyższej notacji sprowadza się do

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger, a_{-\mathbf{k}\downarrow}) \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}1} & \Delta \\ \Delta^* & -\epsilon_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}2} + N \frac{|\Delta|^2}{V_0}. \quad (4.16)$$

Diagonalizując macierz występującą w hamiltonianie, dostajemy następujące wartości własne

$$\lambda_{\mathbf{k}\pm} = \pm \sqrt{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2} - \Delta \epsilon_{\mathbf{k}}, \quad (4.17)$$

gdzie $\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\epsilon_{\mathbf{k}1} + \epsilon_{\mathbf{k}2}}{2}$, $\Delta \epsilon_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\epsilon_{\mathbf{k}2} - \epsilon_{\mathbf{k}1}}{2}$.

Macierz diagonalizująca hamiltonian (4.14) jest macierzą unitarną ($U_{\mathbf{k}} U_{\mathbf{k}}^T = 1$), której wiersze tworzą wektory własne do odpowiednich wartości własnych

$$U_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & -v_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}} \right)^{1/2}, \quad (4.19)$$

$$v_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}}{\sqrt{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2}} \right)^{1/2}. \quad (4.20)$$

Po przeprowadzeniu diagonalizacji hamiltonian sprowadza się do następującej postaci

$$H = \sum_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \beta_{\mathbf{k}}) \begin{pmatrix} \lambda_{\mathbf{k}+} & 0 \\ 0 & \lambda_{\mathbf{k}-} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}2} + N \frac{|\Delta|^2}{V_0}, \quad (4.21)$$

gdzie nowe operatory $\alpha_{\mathbf{k}}$ oraz $\beta_{\mathbf{k}}$ dostajemy ze starych poprzez transformację unitarną

$$\begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{k}} \\ \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} = U_{\mathbf{k}}^T \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ -v_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}. \quad (4.22)$$

Można sprawdzić, że operatory $\alpha_{\mathbf{k}}$ oraz $\beta_{\mathbf{k}}$ spełniają fermionowe relacje antykomutacji. Opisują więc one kwazicząstkowe wzbudzenia typu fermionowego. Wykonując w hamiltonianie (4.21) mnożenie macierzy z dwukomponentowymi operatorami, dostajemy

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \left[\left(\sqrt{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2} - \Delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + \left(\sqrt{\bar{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + |\Delta|^2} + \Delta \epsilon_{\mathbf{k}} \right) \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \right] + \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}2} + \lambda_{\mathbf{k}-}) + N \frac{|\Delta|^2}{V_0}. \quad (4.23)$$

Widać, że mamy do czynienia z dwiema różnymi relacjami dyspersji dla kwazicząstek o operatorach $\alpha_{\mathbf{k}}$ oraz $\beta_{\mathbf{k}}$. Te relacje dyspersji są przesunięte względem siebie o wielkość $2\Delta \epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}2} - \epsilon_{\mathbf{k}1}$, czyli

o różnicę energii w obu podpasmach spinowych przy ustalonym \mathbf{k} . Wielkość ta zmienia się wraz z \mathbf{k} i może nawet zmieniać znak. Z ostatecznej postaci hamiltonianu (4.23) wynika także interpretacja wielkości Δ jako przerwy energetycznej.

4.3 Równanie na przerwę

W celu obliczenia wartości przerwy, wracamy do jej definicji (4.10)

$$\Delta = -\frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k}' \in \bar{W}} \langle b_{\mathbf{k}'} \rangle. \quad (4.24)$$

Zapisując operator anihilacji pary $b_{\mathbf{k}'}$ poprzez operatory anihilacji elektronów (4.5), a następnie te operatory zastępując operatorami $\alpha_{\mathbf{k}}$ oraz $\beta_{\mathbf{k}}$ (4.22) dostajemy

$$\Delta = -\frac{V_0}{N} \sum_{\mathbf{k} \in \bar{W}} \left(u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle + u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \langle \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \rangle - 1 \right). \quad (4.25)$$

Korzystaliśmy z tego, że $\langle \beta_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \rangle = 0$ oraz z fermionowych relacji antykomutacji $\{\beta_{\mathbf{k}}^\dagger, \beta_{\mathbf{k}}\} = \{\alpha_{\mathbf{k}}^\dagger, \alpha_{\mathbf{k}}\} = 1$. Z fermionowego charakteru operatorów $\alpha_{\mathbf{k}}$ i $\beta_{\mathbf{k}}$ wynika, że średnie występujące we wzorze na Δ możemy zastąpić przez wyrażenia znane ze statystyki Fermiego-Diraca

$$\langle \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} - \Delta \epsilon_{\mathbf{k}})} + 1}; \quad \langle \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{k}} + \Delta \epsilon_{\mathbf{k}})} + 1}, \quad (4.26)$$

gdzie $\beta = \frac{1}{k_B T}$, $E_{\mathbf{k}} \equiv \sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta^2}$. Po podstawieniu tych wyrażeń, równanie na przerwę przechodzi w

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \bar{W}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \Delta \epsilon_{\mathbf{k}})}. \quad (4.27)$$

4.4 Obliczenie $\Delta_0 \equiv \Delta(T = 0)$

Obliczymy teraz energię wiązania w temperaturze $0 K$. Granica $T \rightarrow 0$ jest ekwiwalentna z $\beta \rightarrow \infty$. Można pokazać, że równanie na przerwę (4.27) jest wówczas równoważne z

$$\frac{2N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \bar{W}} \frac{1}{\sqrt{\epsilon_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}} \frac{1}{1 + e^{\beta(\Delta \epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}})}}. \quad (4.28)$$

Zachowanie powyższej sumy zależy od wyrażenia w wykładniku $\Delta \epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}}$

$$\frac{1}{1 + e^{\beta(\Delta \epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}})}} = \begin{cases} 1, & \text{dla } \Delta \epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} < 0, \\ 0, & \text{dla } \Delta \epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} > 0. \end{cases} \quad (4.29)$$

Jak się okazuje po skorzystaniu z odpowiednich definicji

$$\Delta\epsilon_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}} < 0 \Leftrightarrow -\epsilon_{\mathbf{k}1}\epsilon_{\mathbf{k}2} < \Delta_0^2. \quad (4.30)$$

Dla małych pól magnetycznych i rozszczepień mas warunek powyższy zachodzi w całym obszarze całkowania \overline{W} , wobec czego równanie na przerwę (4.28) przybiera postać

$$\frac{2N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \overline{W}} \frac{1}{\sqrt{\overline{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}}. \quad (4.31)$$

Dla pól tak silnych, że kryterium (4.30) przestaje zachodzić, musielibyśmy wydzielić z zakresu całkowania te obszary, dla których warunek nie obowiązuje. Można pokazać, że warunek (4.30) jest jeszcze prawdziwy w całym zakresie całkowania, jeżeli energia wiązania spełnia nierówność

$$\Delta_0 > \frac{|\epsilon_B M - \epsilon_F \Delta m|}{2\sqrt{m_1 m_2}}. \quad (4.32)$$

Dla rozważanych przez nas parametrów nierówność ta jest spełniona w zakresie do pola mniej więcej równego polu krytycznemu ($B_c = 11, 2T$). Wobec tego wzór analityczny, który zaraz podamy, będzie obowiązywał w zakresie pola od $B = 0T$ do $B \simeq B_c$. Możemy już teraz rozwiązać równanie na przerwę (4.31). Pierwszym krokiem będzie zamiana sumy na całkę

$$\frac{16\pi^3 N}{VV_0} = \int_{\overline{W}} \frac{d^3k}{\sqrt{\overline{\epsilon}_{\mathbf{k}}^2 + \Delta_0^2}}. \quad (4.33)$$

Po skorzystaniu ze sferycznej symetryczności obszaru całkowania i z definicji $\overline{\epsilon}_{\mathbf{k}}$ dostajemy

$$\frac{4\pi^2 N}{VV_0} = \int_{k_{b1}}^{k_{a2}} \frac{k^2 dk}{\sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{4\mu} - \epsilon_F\right)^2 + \Delta_0^2}}. \quad (4.34)$$

Wektory k_{b1} , k_{a2} są zdefiniowane przez

$$\frac{\hbar^2 k_{b1}^2}{2m_1} = \epsilon_F + \epsilon_B - \hbar\omega_D, \quad (4.35)$$

$$\frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{2m_2} = \epsilon_F - \epsilon_B + \hbar\omega_D. \quad (4.36)$$

Następnie dokonujemy przybliżenia $k^2 \simeq \tilde{k}_F k$, $\tilde{k}_F \equiv (k_{F1} + k_{F2})/2$, dzięki czemu całka daje się łatwo policzyć

$$\frac{4\pi^2 N}{VV_0 \tilde{k}_F} = \frac{2\mu}{\hbar^2} \ln \left[\frac{\hbar^2 k^2}{4\mu} - \epsilon_F + \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{4\mu} - \epsilon_F\right)^2 + \Delta_0^2} \right]_{k_{b1}}^{k_{a2}}. \quad (4.37)$$

Rozwiązując powyższe równanie na Δ_0 dostajemy następujący wynik

$$\Delta_0 = \frac{2e^{C/2}}{e^{2C} - 1} \sqrt{\left[\epsilon_F - \frac{\hbar^2 k_{b1}^2}{4\mu} + e^C \left(\frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{4\mu} - \epsilon_F \right) \right] \left[\frac{\hbar^2 k_{a2}^2}{4\mu} - \epsilon_F + e^C \left(\epsilon_F - \frac{\hbar^2 k_{b1}^2}{4\mu} \right) \right]}, \quad (4.38)$$

gdzie $C \equiv \frac{2\pi^2 \hbar^2 N}{V V_0 k_F \mu}$. Wyrażenie powyższe możemy jeszcze uprościć korzystając z definicji wektorów k_{b1} oraz k_{a2} (4.35, 4.36)

$$\Delta_0 = \frac{\hbar\omega_D + \epsilon_F \frac{\Delta m}{M} - \epsilon_B}{\sinh C} \sqrt{\frac{M^2}{4\mu^2} + \frac{M}{\mu} \sinh^2 \frac{C}{2}}. \quad (4.39)$$

W granicy zerowego pola magnetycznego $\mathbf{B} \rightarrow 0 \Leftrightarrow \Delta m \rightarrow 0$ wyrażenie na Δ_0 sprowadza się do tego znanego z teorii BCS

$$\begin{aligned} \Delta_0 &= \frac{\hbar\omega_D}{\sinh C} \sqrt{4 + 4 \sinh^2 \frac{C}{2}} = \\ &= \frac{\hbar\omega_D}{\sinh C} 2 \cosh \frac{C}{2} = \\ &= \frac{\hbar\omega_D}{\sinh \frac{C}{2}}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

W rozpatrywanej granicy równych mas można pokazać, że $C = \frac{2}{\rho(\epsilon_F) V_0}$, wobec czego równanie (4.40) poprawnie odtwarza wynik ze standardowej teorii BCS

$$\Delta_0 = \frac{\hbar\omega_D}{\sinh \frac{1}{\rho(\epsilon_F) V_0}} \simeq 2\hbar\omega_D e^{-\frac{1}{\rho(\epsilon_F) V_0}}. \quad (4.41)$$

Standardowa teoria BCS daje także analityczny wzór na temperaturę krytyczną T_c . Niestety w przypadku rozszczepionych spinowo mas równanie na przerwę (4.27) jest zbyt skomplikowane, aby udało się z niego otrzymać taki rezultat.

4.5 Wyniki numeryczne

Przedstawimy teraz wyniki numeryczne dla teorii nadprzewodnictwa typu BCS w układzie ze spinowo-zależnymi masami. W porównaniu z teorią pojedynczej pary dochodzi tutaj dodatkowy parametr - temperatura T . Wobec tego przeanalizujemy zależność energii wiązania Δ od temperatury T i pola magnetycznego \mathbf{B} . Do analizy numerycznej posłużymy nam równanie na przerwę

$$\frac{N}{V_0} = \sum_{\mathbf{k} \in \bar{W}} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}}} \frac{\sinh(\beta E_{\mathbf{k}})}{\cosh(\beta E_{\mathbf{k}}) + \cosh(\beta \Delta \epsilon_{\mathbf{k}})}. \quad (4.42)$$

Przyjeliśmy parametry podobne do wcześniejszych, tzn. taką samą masę $m_{av} = 304 m_0$, $\hbar\omega_D = 10 K$ (teraz całkowanie odbywa się po obszarze o szerokości $2\hbar\omega_D$, więc

taka wartość parametru odpowiada $\hbar\omega_D = 20 K$ dla problemu Coopera) oraz potencjał parujący dobrany tak, aby wartość pola krytycznego była zbliżona do wcześniejszych wyników $V_0 = 40 K$.

Zależność energii wiązania od pola magnetycznego przy ustalonej temperaturze przedstawiona jest na rys. 4.2. Ukazano tam także tę samą zależność w przypadku równych mas $\Delta m = 0$ oraz wyniki otrzymane ze wzoru analitycznego (4.39). Widać, że rezultaty analityczne bardzo dobrze pokrywają się z wykresem otrzymanym numerycznie dla $T = 1 mK$. Dodatkowo punkt, w którym przestaje obowiązywać wzór (4.39) pokrywa się z punktem przejścia fazowego. Te dwa fakty świadczą o dużej dokładności wzoru analitycznego na energię wiązania (4.39).

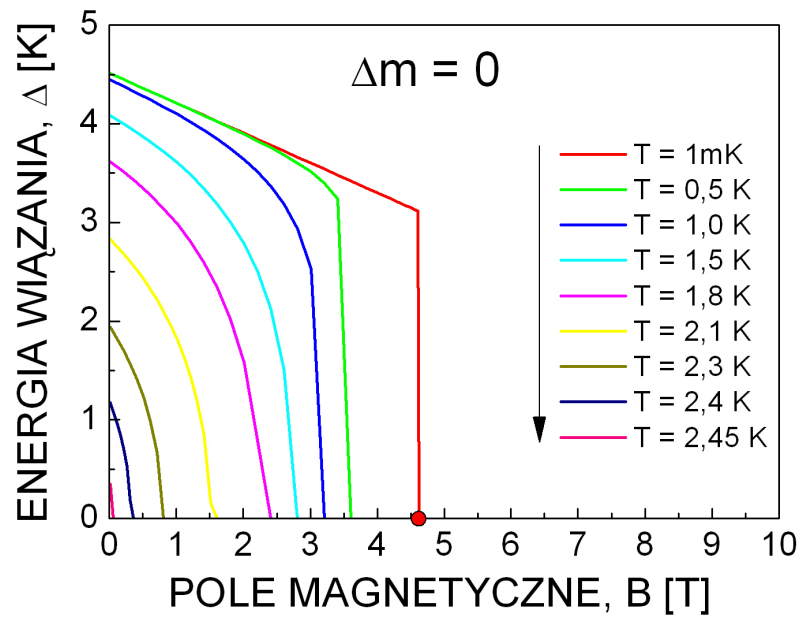
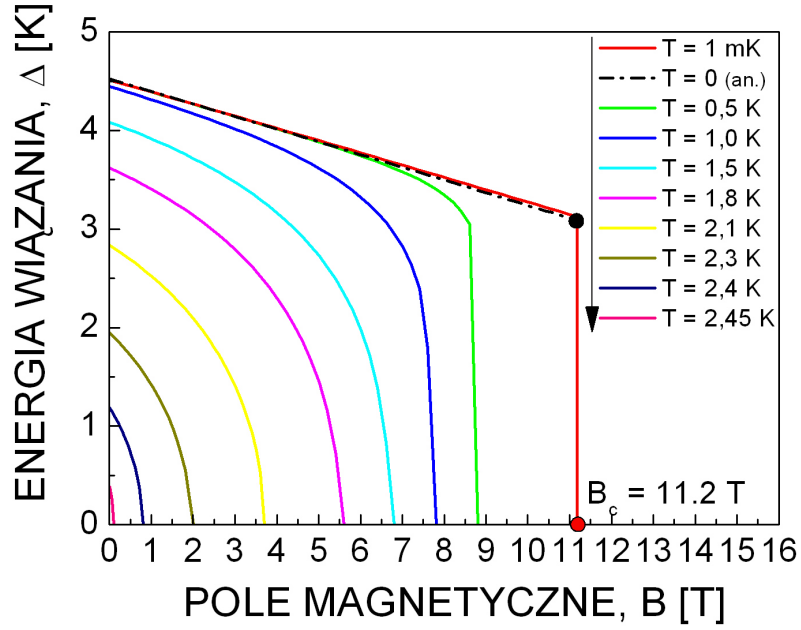
Na rys. 4.2 widać zmianę rzędu przejścia fazowego do stanu nadprzewodzącego. Dla niskich temperatur jest to przejście pierwszego rodzaju, natomiast dla temperatur powyżej około $1 K$ - drugiego rodzaju. Z przedstawionych wykresów wynika, że w przypadku mas zależnych od spinu zjawisko nadprzewodnictwa jest mocniejsze (podobnie jak w teorii pojedynczej pary). Stan nadprzewodzący występuje wówczas w dużo silniejszych polach niż przy masach niezależnych od spinu. Przyczyną takiego zachowania układu jest oczywiście mniejsze rozszczepienie wektorów Fermiego Δk_F przy masach zależnych od spinu (patrz rys. 3.5).

Na rysunku 4.3 przedstawiono zależność energii wiązania od temperatury przy ustalonym polu magnetycznym. Przypadek $B = 0$ odpowiada standardowej teorii BCS. Widać, że poprawnie odtwarzany jest charakter zależności $\Delta(T)$. Także w tym wypadku mamy dwa rodzaje przejścia nadprzewodnik-stan normalny. Dla niskich pól jest to przejście drugiego rodzaju, natomiast dla pól wysokich - pierwszego rodzaju. Diagram fazowy rozważanego układu przedstawiono na rys. 4.4. Oznaczono tam w szczególności zmianę rzędu przejścia fazowego.

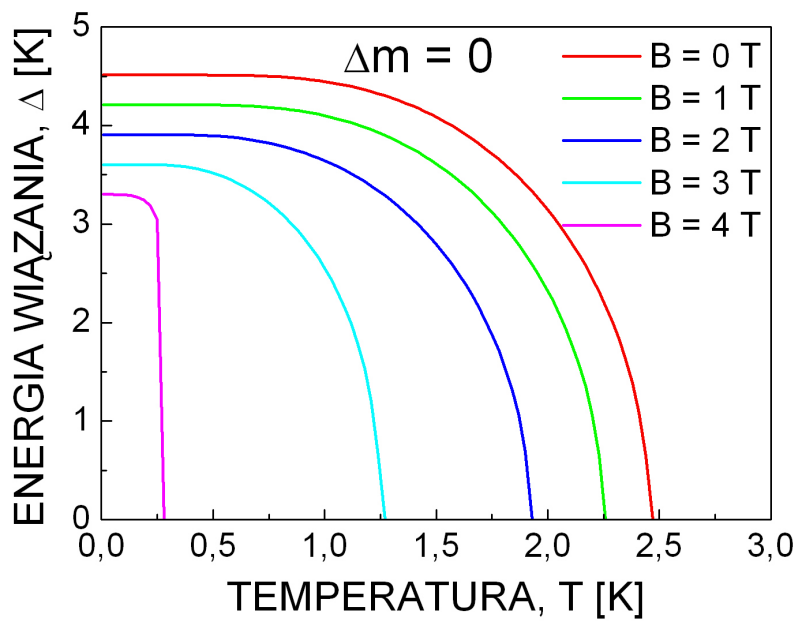
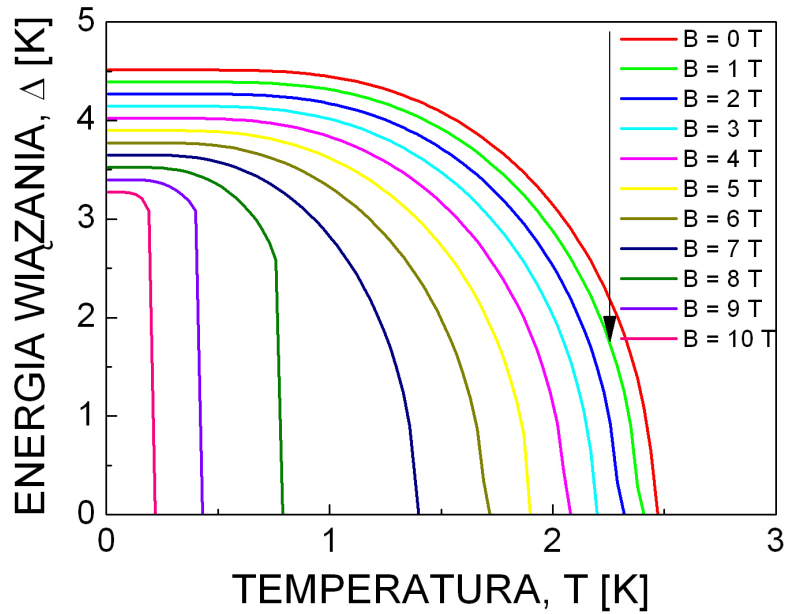
Matematycznie możliwość pojawienia się przejścia fazowego pierwszego rodzaju wynika z niemonotonicznego charakteru zależności $V_0(\Delta)$. W przeciwieństwie do problemu Coopera, dla teorii BCS przy niektórych parametrach B i T zachodzi $V_0(\Delta > 0) < V_0(\Delta = 0)$. Oznacza to, że do wystąpienia w układzie niezerowej energii wiązania Δ potrzeba słabszego potencjału niż do wystąpienia zerowej energii wiązania. Osłabiając w tym wypadku nadprzewodnictwo (na przykład przez zwiększanie pola B) otrzymujemy w punkcie przejścia fazowego skok z $\Delta > 0$ do stanu normalnego, czyli przejście fazowe pierwszego rodzaju.

Otrzymane przez nas wyniki można porównać z rezultatami dla fazy FFLO wynikającej nie z rozszczepienia mas, lecz z obecności w układzie silnego magnetyzmu Pauliego. W pracy [4] omówiono dokładne wyprowadzenie równania na przerwę. Przedstawione tam równania (2.10), (2.11) są analogiczne do otrzymanych przez nas (4.25), (4.27).

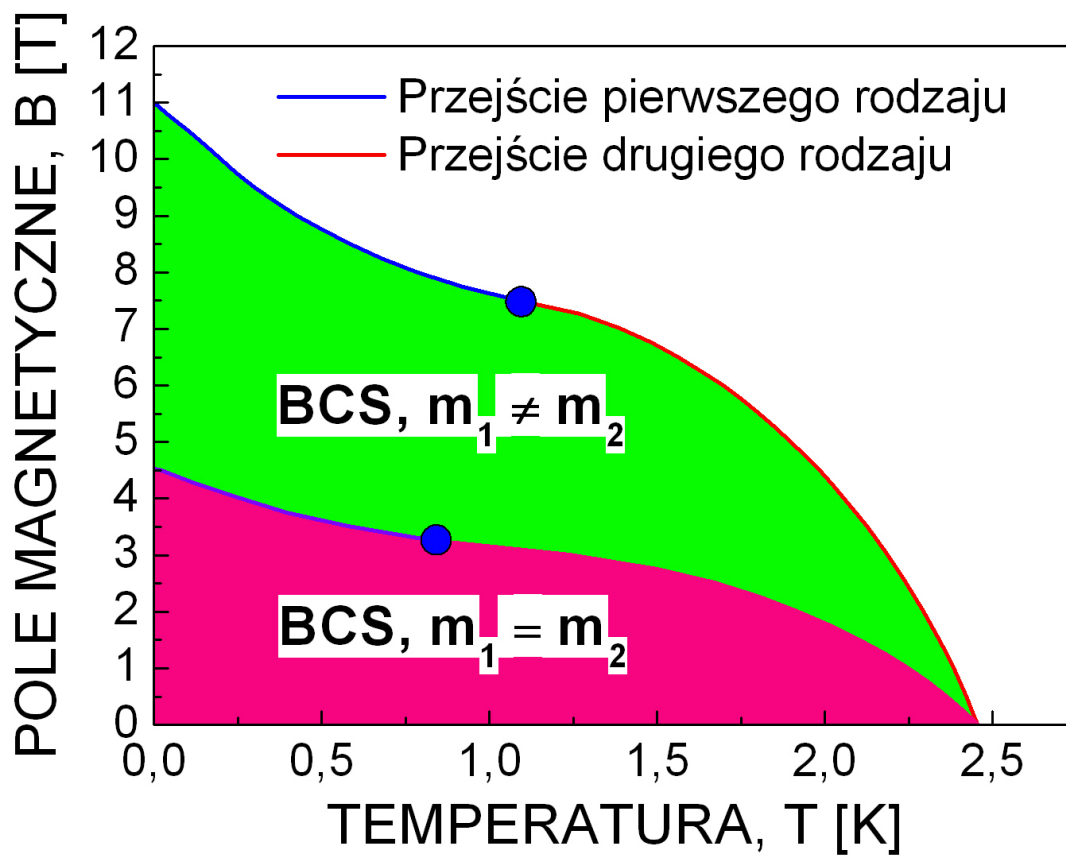
Oczywiście zaprezentowane tu podejście jest jedynie wstępem do sformułowania teorii wielociałowej nadprzewodnictwa przy masach zależnych od spinu. W pełnym opisie musielibyśmy uwzględnić m. in. zmianę potencjału chemicznego przy przejściu do stanu nadprzewodzącego oraz przede wszystkim stan z niezerowym pędem środka masy \mathbf{Q} (stan FFLO).



Rysunek 4.2: Energia wiązania Δ w funkcji pola magnetycznego \mathbf{B} przy ustalonej temperaturze T . Górny wykres przedstawia wyniki dla układu ze spinowo-zależnymi masami, dolny dla układu z równymi masami. Czarną linią kropka-kreska oznaczono rozwiązanie analityczne (4.39). Czarna kropka wskazuje miejsce, w którym warunek (4.30) przestaje być spełniony. Pokrywa się ono z punktem przejścia fazowego. Dla małych temperatur ($T < 1\text{ K}$) obserwujemy przejście fazowe pierwszego rodzaju, natomiast dla temperatur powyżej 1 K - drugiego rodzaju. Przyjęto parametry $m_{av} = 304 m_0$, $\hbar\omega_D = 10\text{ K}$, $V_0 = 40\text{ K}$.



Rysunek 4.3: Energia wiązania Δ w funkcji temperatury T przy ustalonej wartości pola magnetycznego B . Górny wykres przedstawia wyniki dla układu ze spinowo-zależnymi masami, dolny dla układu z równymi masami. Wartości parametrów jak poprzednio.



Rysunek 4.4: Diagram fazowy rozważanego układu. Zaznaczono różnymi kolorami rząd przejścia fazowego. Dolna linia odpowiada przypadkowi równych mas; górna - mas zależnych od spinu. Widać, że zależność mas od spinu poszerza obszar nadprzewodzący do dużo silniejszych pól magnetycznych.

Rozdział 5

Podsumowanie i konkluzje

W pierwszej części pracy (rozdziały 2, 3) przeanalizowano stan związany pary Coopera, gdy masa kwazicząstek zależy od spinu. W takim przypadku obecność zewnętrznego pola, uwzględniona poprzez wyraz Zeemana w hamiltonianie oraz zależność mas od magnetyzacji, prowadzi do stabilnego stanu z pędem środka masy $\mathbf{Q} \neq 0$. Stan taki jest prekursorem stanu typu Fulde-Ferrella-Larkina-Owczynnikowa (FFLO) dla układu wieloelektronowego [2, 3, 4].

Oczywiście pełne podejście wymagałoby uwzględnienia wpływu pola magnetycznego na orbitalne stopnie swobody. Jednak w rozważanych układach parametr Makiego [7] zdefiniowany przez $\alpha = \sqrt{2}H_{orb}/H_P$, gdzie H_{orb} i H_P są polami krytycznymi wynikającymi tylko z efektów orbitalnych oraz tylko z magnetyzmu Pauliego odpowiednio, jest bardzo wysoki. Mianowicie, pokazano [6], że dla układu CeCoIn_5 mamy w polu magnetycznym równoległym i prostopadłym do płaszczyzny ab odpowiednio $\alpha^{\parallel} = 4.6$, $\alpha^{\perp} = 5.0$. W związku z tym *magnetyzm Pauliego przeważa nad efektami orbitalnymi* i nie spodziewamy się znacznej poprawy wyników przy uwzględnieniu tych ostatnich.

W drugiej części pracy (rozdział 4) rozpatrzono stan BCS dla układu ze spinowo-zależnymi masami kwazicząstek. W obecnej pracy przeanalizowano tylko stan BCS, natomiast stan FFLO stanowić będzie rozszerzenie wprowadzonego formalizmu i następny etap pracy nad teorią nadprzewodnictwa w układach ciężkofermionowych.

W ramach całej pracy zakładano symetrię s funkcji falowej pary Coopera. Przedstawione wyniki dają się w prosty sposób uogólnić na symetrie p i d . W tych przypadkach zamiast potencjału stałego $-V_0$ bierze się wyższe harmoniki sferyczne $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} = -\sqrt{\frac{2l+1}{2}}P_l(\theta)|v_l(k, k')|$ (kąt $\theta \equiv \arccos(\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{kk'})$). Następnie zakłada się stałość elementu macierzowego $v_l(k, k')$ w obszarze wzbudzeń. W rezultacie otrzymuje się podobne równanie na przerwę, w którym zamiast V_0 występuje v_l . Powyższa uwaga ma duże znaczenie, ponieważ w układzie CeCoIn_5 najprawdopodobniej występuje parowanie typu d [24, 25, 26], natomiast w ${}^3\text{He}$ zachodzi parowanie typu p .

W całej pracy przyjęto konwencję oznaczania szerokości obszaru wzbudzeń przez $\hbar\omega_D$. W rozważanych układach mogą występować parowania typu niefononowego [21]. Wobec tego nie należy

myśleć o parametrze $\hbar\omega_D$ jako o energii Debye'a, tylko jako szerokości obszaru wzbudzeń, niekoniecznie fononowych.

Zauważmy także, że dla układów ze spinowo-zależnymi masami nie obowiązuje skala wielkości znana z teorii BCS. W tej teorii były spełnione relacje $\epsilon_F \gg \hbar\omega_D \gg \Delta_0$. Teraz natomiast energia Fermiego ϵ_F jest niewiele większa od szerokości obszaru wzbudzeń $\hbar\omega_D$. Wobec tego nie tylko powierzchnia Fermiego bierze udział w parowaniu. Uczestniczy w nim prawie całe morze Fermiego. Dalej mamy zwykle $\epsilon_F > \hbar\omega_D > \Delta_0$, ale wielkości te różnią się typowo o czynnik 2 – 8.

Porównanie przedstawionych wyników z rezultatami dla równych mas $m_\uparrow = m_\downarrow$ pokazuje, że zależność mas od spinu wpływa na intensywność zjawiska nadprzewodnictwa. Układ ze spinowo-zależnymi masami jest nadprzewodzący w dużo silniejszych polach. Oczywiście powodem takiego zachowania jest mniejsze rozszczepienie wektorów falowych Fermiego w przypadku mas zależnych od spinu.

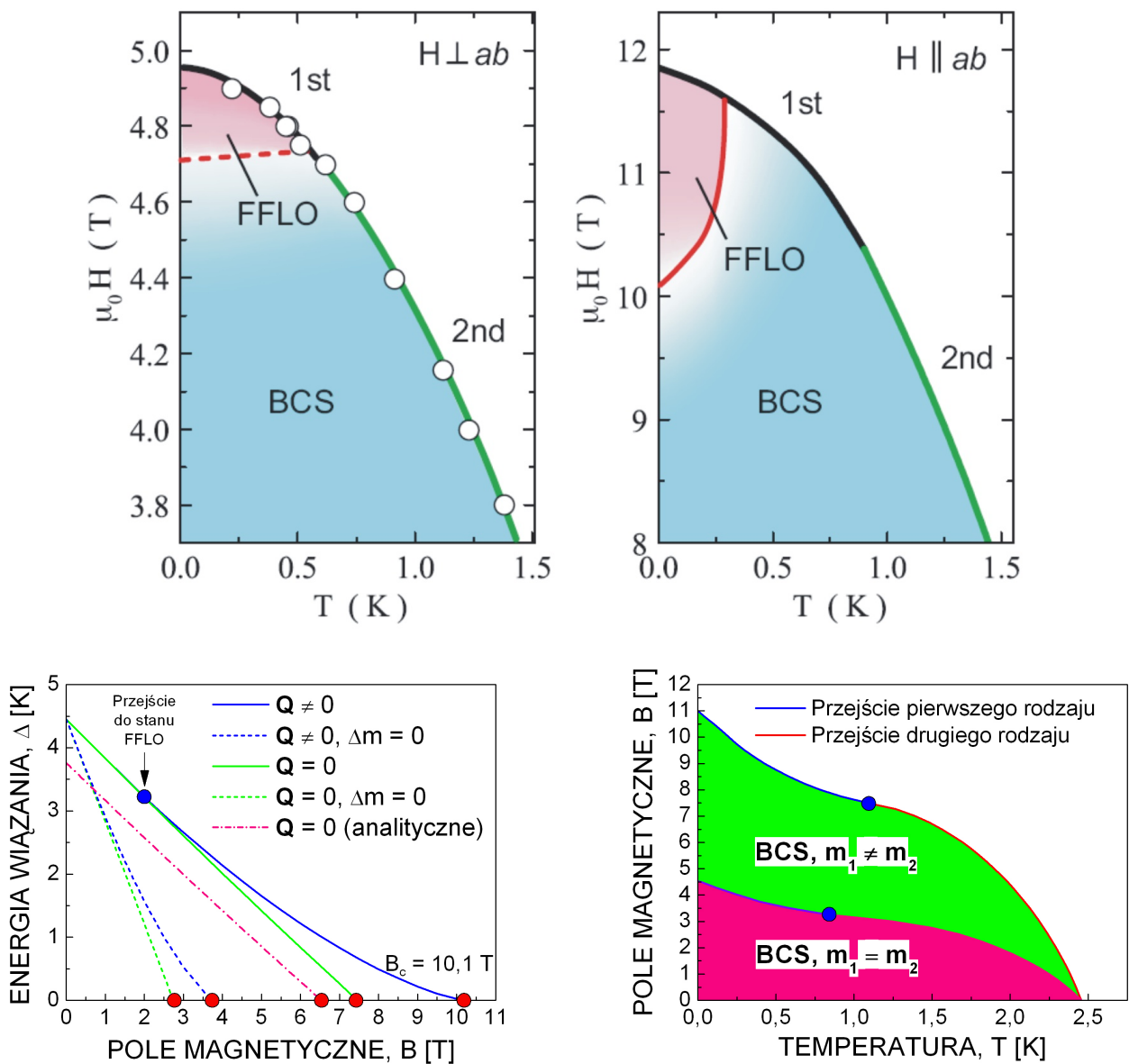
5.1 Odniesienie do wyników eksperymentalnych dla CeCoIn₅

Porównamy tutaj przedstawione przez nas rezultaty z wynikami eksperymentalnymi otrzymanymi dla układu ciężkofermionowego CeCoIn₅. Układ ten ma strukturę tetragonalną HoCoGa₅ o stałych sieci $a = 4,62\text{\AA}$, $c = 7,56\text{\AA}$ [27]. Temperatura krytyczna wynosi $T_c = 2,3\text{ K}$, natomiast wartości pola krytycznego dla kierunków prostopadłego i równoległego do płaszczyzny ab są równe $H_{c2}^{\parallel} = 12\text{ T}$, $H_{c2}^{\perp} = 5\text{ T}$ [6] (patrz rys. 5.1).

Na rysunku 5.1 oprócz rezultatów eksperymentalnych powtórzyliśmy wyniki numeryczne dla modelu pary Coopera (rys. 3.9) oraz diagram fazowy otrzymany w teorii typu BCS (rys. 4.4). Porównanie tych wyników pozwala stwierdzić, że otrzymane pole krytyczne $B_c = 11,2\text{ T}$ jest w przybliżeniu zgodne z eksperymentalnym $H_{c2}^{\parallel} = 12\text{ T}$. Nic w tym dziwnego, ponieważ tak wybraliśmy parametry, aby tą zgodność otrzymać. Z eksperymentem zgadza się także wartość temperatury krytycznej (u nas $T_c = 2,45\text{ K}$, eksperyment daje $T_c^{exp} = 2,3\text{ K}$) i ten fakt nie jest już wynikiem dopasowania parametrów. Oczywiście zmieniając m_{av} , $\hbar\omega_D$, czy też V_0 moglibyśmy otrzymać różne wartości T_c . Jednak zmiana tych parametrów tak, aby wciąż zachodziło $B_c = 11 - 12\text{ T}$ nie zmienia znacząco temperatury krytycznej T_c ¹. Wobec tego nasza metoda daje bardzo zbliżoną do eksperymentu wartość temperatury krytycznej, co jest zaskakujące biorąc pod uwagę prostotę zastosowanego opisu.

Oczywiście chcielibyśmy porównać z eksperymentem także wielkości T_c oraz pola krytycznego B_c wynikające z modelu pojedynczej pary Coopera. Niestety model ten nie daje wartości T_c . Może-

¹Przykładowo, w "rozsądnych" granicach parametru $\hbar\omega_D$ dla teorii pary Coopera temperatura krytyczna nie zmienia się więcej niż o czynnik 3. Dokładniejszą analizę problemu w zależności od parametrów pozostawiamy do dalszych badań.



Rysunek 5.1: Na górze: wyniki eksperymentalne - diagram fazowy układu CeCoIn_5 (rysunek zaczerpnięty z pracy [6]). Na dole powtarzamy nasze wyniki numeryczne - zależność energii wiązania pary od pola w modelu pojedynczej pary (rys. 3.9) oraz diagram fazowy otrzymany w teorii typu BCS (rys. 4.4).

my ją jednak oszacować korzystając ze znanej z teorii BCS zależności $\frac{2\Delta_0}{k_B T_c} = 3,53$. Taki rachunek daje wynik $T_c^{Cooper} = 2,55 K$, który również jest bliski eksperymentowi, podobnie jak wartość pola krytycznego $B_c = 10,1 T$ (patrz. rys. 3.9, 5.1). Zauważmy, że obliczając temperaturę i pole krytyczne dla układu bez zależności mas od spinu nie dostalibyśmy takiej zgodności z eksperymentem dla modelu pary Coopera. Dla teorii BCS dostalibyśmy zgodność pola krytycznego $B_c = 4,5 T$ z eksperymentalną wartością $H_{c2}^\perp = 5 T$. Porównanie otrzymanych wyników z eksperymentem podsumowano w poniższych tabelkach

	Pole krytyczne	Temperatura krytyczna
Eksperyment	$H_{c2}^\parallel = 12 T, H_{c2}^\perp = 5 T$	$2,3 K$
Para Coopera	$10 T$	$2,6 K$
Teoria BCS	$11 T$	$2,5 K$

Dla równych mas ($m_1 = m_2$)

	Pole krytyczne	Temperatura krytyczna
Para Coopera	$2,8 T$	$2,6 K$
Teoria BCS	$4,5 T$	$2,5 K$

Możnaby sądzić, że na taką zależność pola krytycznego od orientacji względem płaszczyzny ab w układzie $CeCoIn_5$ może mieć wpływ charakter mas kwazicząstek. Przy polu równoległym do płaszczyzny ab masa kwazicząstek mogłaby inaczej zależeć od pola niż przy polu przyłożonym prostopadle do tej płaszczyzny. Jednak wyciąganie wniosków na temat charakteru mas z przedstawionych danych nie jest możliwe, ponieważ w grę wchodzi tutaj wiele innych efektów. Przykładowo, efekty orbitalne będą bardziej wpływały na ruch kwazicząstek przy polu prostopadłym do płaszczyzny ab . Wierzimy jednak, że wiele z obserwowanych zjawisk dla układu $CeCoIn_5$ da się wyjaśnić przy pomocy teorii nadprzewodnictwa ze spinowo-zależnymi masami kwazicząstek. Do jej pełnego sformułowania brakuje nam jeszcze uwzględnienia stanu FFLO, który będzie obiektem naszych dalszych badań.

5.2 Co dalej?

Powiemy teraz o tym, czego nie zrobiono w tej pracy, a co może być rozwinięciem przedstawionych wyników.

Przez całą pracę zakładano kwadratową relację dyspersji jak dla gazu elektronowego. W rzeczywistych układach mamy jednak do czynienia z bardziej skomplikowanymi relacjami dyspersji.

Uwzględnienie ich w obliczeniach przyniosłoby na pewno poprawę wyników. Można więc na przykład założyć $\epsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{W_\sigma}{2}(\cos k_x a_x + \cos k_y a_y + \cos k_z a_z)$, w ramach przybliżenia ciasnego wiązania (Tight Binding Approximation - TBA).

Wprowadzony formalizm można w prosty sposób zastosować dla układów dwuwymiarowych. Jest to z jednej strony uzasadnione fizycznie, ponieważ CeCoIn₅ jest kwazidwuwymiarowy. Z drugiej strony jest prostsze niż analizowanie układu trójwymiarowego. W tym przypadku można otrzymać analityczne wyniki dla zmodyfikowanej poprzez rozszczepione masy teorii Landaua cieczy Fermiego. Nie sądzimy natomiast, aby w dwóch wymiarach problem Coopera z niezerowym pędem był rozwiązywalny analitycznie, ponieważ wciąż całkowanie odbywa się po dość nieregularnym obszarze. Alternatywnie, można wprowadzić elipsoidalną relację dyspersji (z nieizotropową masą) w celu uwzględnienia kwazidwuwymiarowości opisywanego układu.

Pole magnetyczne zostało uwzględnione tylko poprzez wyraz Zeemana. Na pewno dokładniejszy opis oddziaływania układu z polem wniosłby poprawę wyników. Jednak nie spodziewamy się, żeby dokonanie tego opisu było proste. Ponadto, jak już argumentowaliśmy, efekty orbitalne w rozpatrywanych układach grają mniejszą rolę, niż uwzględniany przez nas magnetyzm Pauliego.

W pracy nie przedstawiono dokładnie zależności wyników od niektórych parametrów. W szczególności od wypełnienia pasma n , szerokości obszaru wzbudzeń $\hbar\omega_D$ oraz wartości potencjału przyciągającego V_0 . Nie zrobiono tego, ponieważ nie wniosłoby to żadnej nowej ciekawej fizyki prowadząc tylko do namnożenia wyników. Tutaj pokrótce omówimy wpływ powyższych parametrów na rezultaty. Przyjęcie n bliższego 1 prowadzi do zwiększenia średniej masy m_{av} , a to z kolei powoduje wypłaszczenie pasma. W takim przypadku potrzeba mniejszych V_0 i $\hbar\omega_D$ do związania elektronów w parę. Można się także spodziewać, że dla bardzo dużych mas (powyżej $m_{av} = 1000 m_0$) wystąpią efekty nieliniowe w zmodyfikowanej teorii Landaua cieczy Fermiego. Zmniejszenie parametru V_0 powoduje oczywiście obniżenie energii wiązania. W przypadku spinowo-zależnych mas w niezerowym polu magnetycznym występuje dolny potencjał krytyczny potrzebny do związania elektronów w parę (w przeciwieństwie do standardowego problemu Coopera). Szerokość obszaru wzbudzeń $\hbar\omega_D$ ma z kolei wpływ na wielkość pędu środka masy dla rozwiązania z \mathbf{Q}_{posr} . Przez dobranie odpowiedniego $\hbar\omega_D$ możemy sterować wartością tego pędu w zakresie od 0 (dla $\hbar\omega_D = \epsilon_B \frac{M}{\Delta m} - \epsilon_F$) do Δk_F (dla małych $\hbar\omega_D < 10K$).

Oczywiście największym krokiem naprzód będzie przeprowadzenie obliczeń energii wiązania dla par z niezerowym pędem środka masy $\mathbf{Q} \neq 0$ w ramach teorii typu BCS. Taki stan układu (stan FFLO) został oryginalnie opisany dla przypadku kiedy rozszczepienie powierzchni Fermiego wywołane domieszkami magnetycznymi prowadziło do stanu z ruchomymi parami Coopera jako tego o najniższej energii [2, 3, 4]. W przypadku ze spinowo-zależnymi masami zrzucenie więzu o symetrii funkcji falowej wynikającego z twierdzenia spin-statystyka może prowadzić do całkiem nowego stanu wielocząstkowego układu. Stan ten charakteryzowałby się funkcją falową bez określonej symetrii

ze względu na zamianę cząstki o masie m_{\uparrow} z cząstką o masie m_{\downarrow} . Aby go skonstruować nie można zakładać relacji antykomutacji pomiędzy kwazicząstkami o spinie w górę i tymi o spinie w dół.

5.3 Najważniejsze wyniki pracy

Poniżej wymieniamy najważniejsze rezultaty niniejszej pracy

- Wprowadzono formalizm, w którym pojawiają się w naturalny sposób **kwazicząstki rozróżnialne**. Nasze podejście pozwala także na opis transformacji kwazicząstek nierozróżnialnych w rozróżnialne przy zwiększaniu pola magnetycznego w ramach jednej funkcji falowej.
- Pokazano, że para Coopera o funkcji falowej łamiącej symetrię względem przestawienia cząstek jest **korzystniejsza energetycznie** od pary o funkcji zgodnej z twierdzeniem spin-statystyka. Wobec tego przy formułowaniu teorii wielociałowej typu BCS dla układów ze spinowo-zależnymi masami mogą zmienić się relacje antykomutacji. Zakładanie relacji antykomutacji pomiędzy kwazicząstkami o spinie w górę i tymi o spinie w dół może bowiem prowadzić do stanu układu o energii wyższej niż stan podstawowy.
- Pokazano, że **zależność mas od spinu wzmacnia nadprzewodnictwo**. A mianowicie układ ze spinowo-rozszczepionymi masami jest nadprzewodzący w dużo silniejszych polach, niż układ bez zależności mas od spinu, co może się wydawać nieintuicyjne.
- Otrzymano dobrą **zgodność z wynikami eksperymentalnymi** dla układu CeCoIn_5 pomimo prostego formalizmu zaniedbującego m. in. efekty wielociałowe oraz efekty orbitalne pola magnetycznego i opierającego się na stanach gazu elektronów swobodnych.

Bibliografia

- [1] A. McCollam, S. R. Julian, P. M. C. Rourke, D. Aoki, J. Flouquet, *Anomalous de Haas–van Alphen Oscillations in CeCoIn₅*, Phys. Rev. Lett. **94**, 186401 (2005).
- [2] P. Fulde, R. A. Ferrel, *Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field*, Phys. Rev. **135**, A550 (1964).
- [3] A. I. Larkin, Yu. N. Ovchinnikov, J. Exp. Theor. Phys., **47**, 1136 (1964) (*Inhomogeneous State of Superconductors*, Sov. Phys.,- JETP, **20**, 762 (1965)).
- [4] H. Shimahara, *Fulde-Ferrell state in quasi-two-dimensional superconductors*, Phys. Rev. B **50**, 12760 (1994).
- [5] K. Kakuyanagi, M. Saitoh, K. Kumagai, S. Takashima, M. Nohara, H. Takagi, Y. Matsuda, *Texture in the Superconducting Order Parameter of CeCoIn₅ Revealed by Nuclear Magnetic Resonance* Phys. Rev. Lett. **94**, 047602 (2005).
- [6] K. Kumagai, M. Saitoh, T. Oyaizu, Y. Furukawa, S. Takashima, M. Nohara, H. Takagi, Y. Matsuda, *Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state in a perpendicular field of quasi two-dimensional CeCoIn₅* arXiv:cond-mat/0605394 (2006).
- [7] K. Maki, *Effect of Pauli Paramagnetism on Magnetic Properties of High-Field Superconductors*, Phys. Rev. **148**, 362 (1966).
- [8] L. W. Gruenberg, L. Gunther, *Fulde-Ferrell Effect in Type-II Superconductors*, Phys. Rev. Lett. **16**, 996 (1966).
- [9] L. Cooper, *Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas*, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [10] J. Spałek, P. Gopalan, *Almost-Localized Electrons in a Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2823 (1990);
P. Korbel, J. Spałek, W. Wójcik, M. Acquarone, *Spin-split masses and metamagnetic behavior of almost-localized fermions*, Phys. Rev. B **52**, R2213 (1995).

- [11] Prace przeglądowe:
 J. Spałek, *Magnetic properties of almost localized fermions revisited: spin dependent masses and quantum critical behavior*, phys. stat. sol. **243**, 78 (2006);
 J. Spałek, *Spin-split masses and a critical behavior of almost localized narrow-band and heavy-fermion systems*, Physica B, **378 - 380**, 654 (2006);
 J. Spałek, W. Wójcik, *Almost Localized Fermions and Mott-Hubbard Transitions at Nonzero Temperatures*, Springer Series in Solid State Sciences, **119**, 41 (1995).
- [12] J. Bauer, A. C. Hewson, *Field dependent quasiparticles in the infinite dimensional Hubbard model*, arXiv:cond-mat/0705.3824v1 (2007).
- [13] W. Pauli, *The Connection Between Spin and Statistics*, Phys. Rev. **58** 716 (1940).
- [14] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [15] J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, W. A. Benjamin, Inc., 1964.
- [16] L. Taillefer, R. Newbury, G. G. Lonzarich, Z. Fisk, J. L. Smith, *Direct observation of heavy quasiparticles in UPt₃ via the dHvA effect*, J. Magn. Magn. Mat. **63 - 64**, 372-376 (1987).
- [17] W. V. Liu, F. Wilczek, *Interior Gap Superfluidity*, Phys. Rev. Lett. **90**, 047002 (2003).
- [18] J. Kaczmarczyk, J. Spałek, *Cooper Pair with Nonzero Momentum in System with Spin Dependent Mass of Quasiparticles*, Acta. Phys. Polon. A **111**, 595 (2007).
- [19] P. Wróbel, Praca magisterska, Uniwersytet Jagielloński, Kraków, 1999.
- [20] P. Wróbel, Z. Starypan, J. Kaczmarczyk, J. Spałek, *Cooper pair in two nonstandard situations*, Acta. Phys. Polon. A **109**, 541 (2006).
- [21] P. Monthoux, D. Pines, G. G. Lonzarich, *Superconductivity without phonons*, nieopublikowana.
- [22] A. L. Fetter, J. D. Walecka, *Kwantowa Teoria Układów Wielu Cząstek*, Warszawa 1982, PWN.
- [23] J. Spałek, *notatki z wykładów KTCS*, UJ, Kraków, niepublikowane.
- [24] R. Movshovich, M. Jaime, J. D. Thompson, C. Petrovic, Z. Fisk, P. G. Pagliuso, J. L. Sarrao, *Unconventional Superconductivity in CeIrIn₅ and CeCoIn₅: Specific Heat and Thermal Conductivity Studies*, Phys. Rev. Lett. **86**, 5152 (2001).

- [25] K. Izawa, H. Yamaguchi, Yuji Matsuda, H. Shishido, R. Settai, Y. Onuki, *Angular Position of Nodes in the Superconducting Gap of Quasi-2D Heavy-Fermion Superconductor CeCoIn₅*, Phys. Rev. Lett. **87**, 057002 (2001).
- [26] P. M. C. Rourke, M. A. Tanatar, C. S. Turel, J. Berdeklis, C. Petrovic, J. Y. T. Wei, *Spectroscopic Evidence for Multiple Order Parameter Components in the Heavy Fermion Superconductor CeCoIn₅*, Phys. Rev. Lett. **94**, 107005 (2005).
- [27] H. Shishido, R. Settai, D. Aoki, S. Ikeda, H. Nakawaki, N. Nakamura, T. Iizuka, Y. Inada, K. Sugiyama, T. Takeuchi, K. Kindo, T. C. Kobayashi, Y. Haga, H. Harima, Y. Aoki, T. Namiki, H. Sato, Y. Onuki, *Fermi Surface, Magnetic and Superconducting Properties of LaRhIn₅ and CeTIn₅ (T: Co, Rh and Ir)*, J. Phys. Soc. Jpn. **71**, 162 (2002).