

Kondensacja Bosego-Einsteina

W opisie kwantowo-mechanicznym stan konkretnego układu fizycznego jest określony poprzez funkcję falową $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots)$, gdzie \vec{r}_i oznaczają położenia poszczególnych cząstek. Ze względu na nierozróżnialność cząstek dla obiektów o spinie całkowitym funkcja falowa ma własność symetryczności na zamianę miejscami dowolnej pary cząstek

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots) = + \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots) \quad (1)$$

Symetryczność funkcji falowej (1) implikuje, że stany kwantowe mogą być zajmowane przez arbitralną liczbę takich cząstek.

W układzie cząstek swobodnych wygodnym oznaczeniem stanów kwantowych jest wektor kwazipędu \vec{k} zaś postać stanów własnych hamiltonianu ma postać fal płaskich

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2)$$

o dopuszczalnych poziomach energetycznych

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (3)$$

W układzie wielu cząstek pozostających w równowadze termodynamicznej ze sobą prawdopodobieństwo obsadzenia poszczególnych poziomów energetycznych jest określone funkcją rozkładu Bosego-Einsteina

$$f_{BE}(\varepsilon_{\vec{k}}, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu}{k_B T}\right) - 1}. \quad (4)$$

Aby określić rozkład cząstek na poszczególnych poziomach należy dopasować położenie potencjału chemicznego $\mu \equiv \mu(T)$ na podstawie znajomości średniej liczby cząstek w układzie

$$\begin{aligned}
N &= \sum_{\vec{k}} f_{BE}(\varepsilon_{\vec{k}}, T) \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3/V} \int d\vec{k} \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_{\vec{k}} - \mu}{k_B T}\right) - 1} \\
&= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int k^2 dk \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2 k^2/2m - \mu}{k_B T}\right) - 1}. \tag{5}
\end{aligned}$$

Ze względu na wymóg, aby prawdopodobieństwo (4) było nieujemne potencjał chemiczny $\mu(T)$ nie może znajdować się powyżej najniższego z dostępnych poziomów energetycznych, czyli w tym wypadku $\varepsilon_{\vec{k}} = 0$. Sprawdźmy teraz czy istnieje taka temperatura T_c (nazwijmy ją *krytyczną*), gdy potencjał chemiczny osiąga asymptotycznie wartość $\mu(T \rightarrow T_c^+) = 0$ implikując nieskończenie wielkie prawdopodobieństwo obsadzenia stanu $\varepsilon_{\vec{k}} = 0$?

W przypadku trójwymiarowych cząstek swobodnych warunek określający T_c może być wyznaczony w następujący sposób

$$\begin{aligned}
N &= \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \int k^2 dk \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2 k^2/2m}{k_B T_c}\right) - 1} \quad \left\{ t \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2mk_B T_c} \right\} \\
&= \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2mk_B T_c}{\hbar^2}\right)^{3/2} \underbrace{\int_0^\infty dt \frac{\sqrt{t}}{e^t - 1}}_{=2,31}. \tag{6}
\end{aligned}$$

Na podstawie (6) temperatura krytyczna zależy od masy m i koncentracji cząstek $n \equiv N/V$ poprzez relację

$$T_c = 3,31 \frac{\hbar^2}{2mk_B} n^{2/3}. \tag{7}$$

Powstaje teraz pytanie w jaki sposób wygląda dystrybucja cząstek w temperaturach niższych od T_c ? Aby zrozumieć tę kwestię powinniśmy uwzględnić, że potencjał chemiczny zachowuje się w następujący sposób

$$\begin{cases} \mu(T) < 0 & \text{dla } T > T_c \\ \mu(T) = 0 & \text{dla } T \leq T_c. \end{cases} \quad (8)$$

Wyznaczając liczbę cząstek \tilde{N} z zakresu energetycznego $0 < \varepsilon < \infty$ przy użyciu schematu analogicznego do (6) znajdujemy

$$\tilde{N} = 2,31 \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2mk_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (9)$$

Na podstawie wyrażeń (6,9) względna liczba

$$\frac{\tilde{N}}{N} = \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2}. \quad (10)$$

Pozostała ilość cząstek

$$N_0 \equiv N - \tilde{N} = \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right]. \quad (11)$$

ulega "zamrożeniu" na najniższym poziomie energetycznym $\varepsilon = 0$ (a więc w stanie o pędzie $\vec{k} = 0$), którego prawdopodobieństwo obsadzenia w temperaturach $T \leq T_c$ jest nieskończenie duże. Tego rodzaju "zamrożone" obiekty nazywane są przez fizyków *kondensatem Bosego-Einsteina*.

Uwagi historyczne

Koncepcję kondensacji, czyli "zamrożenia" makroskopowej liczby cząstek w jednym stanie kwantowym o najniższej energii, wprowadził w 1925 roku Albert Einstein. Inspiracją były dla niego wyniki hinduskiego fizyka (Satyendra

Nath Bose), który w 1924 roku wyprowadził wyrażenie opisujące rozkład energii gazu fotonowego w oparciu o statystykę kwantowo-mechaniczną. A. Einstein był jednak dość sceptycznie nastawiony do możliwości praktycznej realizacji kondensatu.

Kondensacja BE oznacza, że poniżej temperatury T_c makroskopowa (porównywalna do liczby Avogadro) liczba cząstek N_0 znajduje się w identycznym stanie kwantowym. Kondensat jest więc czymś w rodzaju gigantycznego superatomu. Można go również traktować jako koherentną (spójną) paczkę fal materii - czyli maser.

Biorąc pod uwagę wzór na temperaturę krytyczną (7) kondensaty atomów jest tym łatwiej uzyskać im lżejsze są atomy. Inną możliwością jest ewentualne zwiększanie ich koncentracji poprzez przyłożenie ciśnienia. W normalnych warunkach atmosferycznych oszacowanie temperatury krytycznej bozonowych atomów ^4He przewiduje $T_c \sim 3,1$ K. Dopiero kilkanaście lat później niemiecki fizyk F. London skojarzył powyższe oszacowanie temperatury krytycznej (dokonane przez A. Einsteina) z odkrytym w 1937 roku zjawiskiem nadciekłości. Stan nadciekły został doświadczalnie zaobserwowany przy nieco niższej temperaturze $T_\lambda = 2,17$ K.

Zanim przejdziemy do omówienia właściwości fizycznych nadciekłego helu (patrz następny rozdział) zastanówmy się *czy kondensacja BE realizuje się również w innych wymiarach?* Zjawisko kondensacji BE jest dość subtelnym efektem, który w istotny sposób zależy od takich czynników jak:

a) wymiarowość układu,

- b) zależność dyspersyjna $\varepsilon = \varepsilon_{\vec{k}}$,
 - c) oddziaływanie cząstek,
 - d) profil potencjału w układach o ograniczonych rozmiarach przestrzennych,
- itp.

Stosunkowo łatwo można przeanalizować wpływ wymiarowości układu fizycznego. Na przykład dla cząstek o parabolicznej zależności dyspersyjnej $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ w układach dwuwymiarowych oszacowanie temperatury krytycznej daje

$$\begin{aligned}
 N &= \frac{V}{(2\pi)^2} \int d\vec{k} \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar^2 k^2 / 2m}{k_B T_c}\right) - 1} \\
 &= \frac{V}{2\pi} \frac{mk_B T_c}{\hbar^2} \underbrace{\int_0^\infty dt \frac{1}{e^t - 1}}_{=\infty} .
 \end{aligned} \tag{12}$$

Rozbieżność pojawiającej się w (12) całki implikuje, że

$$T_c^{dim=2} = 0 . \tag{13}$$

Również w układach jednowymiarowych dla cząstek o parabolicznej zależności dyspersyjnej zjawisko kondensacji BE nie realizuje się.

Omówienie wpływu oddziaływań zostanie przedstawione osobno przy okazji analizy charakteru wzbudzeń jednocząstkowych w nadcieczach kwantowych. Kondensaty BE atomów w pułapkach przedstawione zostaną również w dalszych rozdziałach w kontekście współczesnych technik wykorzystujących chłodzenie laserowe do pułapu temperatur 100 nK.

Fenomenologiczna interpretacja kondensatu BE

Fenomenologiczne uzasadnienie zjawiska kondensacji można podać w oparciu

o koncepcję de Broglie'a fal materii. Według takiego scenariusza pęd cząstek $|\vec{p}| \rightarrow h/\lambda$, zatem średnia energia kinetyczna

$$\frac{|\vec{p}|^2}{2m} = \frac{(h/\lambda)^2}{2m} \quad (14)$$

z uwzględnieniem zasady ekwipartycji

$$\frac{|\vec{p}|^2}{2m} = \frac{3}{2}k_B T \quad (15)$$

implikuje długość de Broglie'a

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}. \quad (16)$$

W wysokich temperaturach oraz dla dużych mas cząstek długość fali (16) jest znacznie mniejsza niż odległości między cząstkami dlatego można je traktować w przybliżeniu jako biekty punktowe. Przy stopniowym ochładzaniu $\lambda(T)$ ulega wydłużeniu, aż w pewnej charakterystycznej temperaturze T_c staje się porównywalna do odległości międzycząsteczkowej d . Jest to niemal równoważne warunkowi (7) wyrażonemu przez Einsteina. Podstawiając do

$$k_B T_c = 3,31 \frac{\hbar^2}{2m} n^{2/3} \quad (17)$$

długość de Broglie'a (16) uzyskujemy

$$\frac{h^2}{3m\lambda^2} = 3,31 \frac{h^2}{(2\pi)^2 m} \left[\frac{1}{d} \right]^{2/3}. \quad (18)$$

Po prostych przekształceniach algebraicznych otrzymujemy, że

$$\lambda = \frac{2\pi}{\sqrt{9,93}} d \simeq d. \quad (19)$$

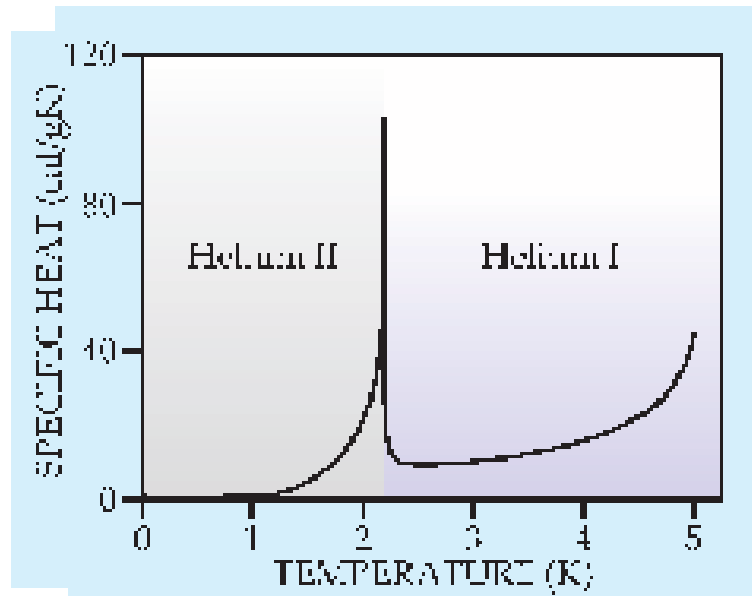
Kondensacja oznacza więc powstanie przekrywających się paczek falowych. Zsynchronizowanie fal de Broglie'a powoduje pojawienie się kolektywnego zachowania cząstek. Powyższy schemat rozumowania jest jedynie pogładowy i należy traktować go z ostrożnością gdyż nie uwzględnia wielu ważnych czynników wpływających na kondensacje BE (np. oddziaływań, wymiarowości itp.)

Nadciekłość helu ^4He

Hel (czyli "pierwiastek słoneczny") jest wyjątkowym pośród wielu różnych pierwiastków. Jako jedyny nie solidifikuje w warunkach naturalnych przy ciśnieniu jednej atmosfery, pozostając cieczą nawet do najniższych temperatur w pobliżu zera bezwzględnego. Faza stała powstaje dopiero pod ciśnieniem 25 atmosfer.

Skroplenia helu dokonał po raz pierwszy Kammerlingh Onnes w 1908 roku w Lejdzie (Holandia). W kolejnych latach spowodowało to intensywne badania właściwości fizycznych helu w fazie ciekłej. W badaniach uczestniczyły początkowo głównie tylko 3 laboratoria na świecie Cambridge, Lejda i Toronto (a nieco później też Moskwa), gdzie uzyskiwane temperatury umożliwiały zejście poniżej punktu skroplenia. Oto ważniejsze odkrycia dokonane w pierwszej połowie dwudziestego wieku.

W 1927 roku Mieczysław Wolfke oraz W.H. Keeson wykazali, że ciekły hel występuje w dwóch różnych fazach (obecnie nazywanych jako He-I, He-II). Przy normalnym ciśnieniu przejście pomiędzy fazami zachodzi w temperaturze $T_\lambda = 2,17 \text{ K}$. Jakościowe różnice wymienionych faz zostały wykazane na podstawie pomiarów przenikalności elektrycznej i ciepła właściwego. Temperaturowa zależność ciepła właściwego przypomina kształt greckiej litery λ , dlatego tę przemianę fazową nazwano *przejściem lambda*.



W 1932 roku Mc. Lennan (Toronto) stwierdził, że poniżej T_λ zachodzi gwałtowna zmiana wyglądu ciekłego helu, który staje się idealnie przezroczysty bez jakichkolwiek pęcherzyków.

Wkrótce później, w 1937 roku, zaobserwowano zanik lepkości (nadciekłość) fazy He-II. Inaczej mówiąc, hel przepływa nawet przez mikroskopijnej wielkości kapilary bez zauważalnej straty energii. Odkrycia tego dokonali niemal równocześnie:

- P. Kapitza , Nature **141**, 74 (1938)
- J. Allen, D. Misener, Nature **141**, 75 (1938)

Za wymienione odkrycie Piotr Kapitza otrzymał w 1978 roku Nagrodę Nobla.

Oprócz charakterystycznego ciepła właściwego i zaniku lepkości stwierdzono również szereg następujących dodatkowych cech:

- a) nadciekła faza He-II posiada przewodnictwo cieplne, które o 6 rzędów wielkości przewyższa przewodnictwo zwykłej fazy He-I,

b) zjawisko mechanokaloryczne

W układzie dwóch naczyń połączonych kapilarą pod wpływem ciśnienia działającego na jedno naczynie dochodzi do przepływu cieczy. Z powodu małej średnicy kapilary przepływa jedynie składowa nadciekła, która nie niesie ze sobą żadnej entropii. W konsekwencji ilość entropii na jednostkę masy ulega zróżnicowaniu. Przejawia się to jako ogrzewanie się naczynia, do którego przyłożono ciśnienie.

c) efekt fontannowy

Jest to zjawisko odwrotne do efektu mechanokalorycznego. Polega ono na wytworzeniu w naczyniach różnicy ciśnień spowodowanej podgrzaniem jednego naczynia z helem.

d) efekt pierwszego i drugiego dźwięku

Tzw. "drugi dźwięk" oznacza przepływ ciepła (fale entropii) spowodowany na przemian zgromadzoną cieczą zwykłą i bezlepką. Ten rodzaj dźwięku pojawia się wyłącznie w zakresie temperatur $T < T_\lambda$. Zjawisko to było teoretycznie przewidziane przez L. Tiszę i potwierdzone doświadczalnie w 1944 roku przez Pieszkowa. Temperaturową zależność prędkości pierwszego i drugiego dźwięku wykonali dwa lata później C. Lane, H. Fairbank i W. Fairbank.

e) pełzanie

Nadciekły hel wykazuje nietrywą zdolność pełzania po powierzchniach ciał stałych pod wpływem siły grawitacyjnej lub gradientu temperatury.

Warstwa pełzająca ma zwykle grubość około 10^{-6} cm. Szybkość pełzania zależy od czynników zewnętrznych ale nie może przekraczać wartości krytycznej ~ 75 cm/s. Zazwyczaj nadciekła ciecz pełzając po ściankach naczynia ogrzewa się i stopniowo wyparowuje.

Z dzisiejszej perspektywy wiadomo ponad wszelką wątpliwość, iż właściwości nadciekłego He-II poniżej T_λ są makroskopowymi przejawami kolektywnych cech oddziałujących cząstek typu bozonowego w obecności zjawiska kondensacji Bosego-Einsteina. Poglądowo możemy sobie wyobrazić, że pewna frakcja cząstek ρ_s stanowi składową nadciekłą zaś pozostała ρ_n zachowuje się jak ciecz normalna. Gęstość całkowita jest sumą składowych

$$\rho = \rho_s + \rho_n. \quad (20)$$

Model dwucieczowy zaproponował Tisza (1938 r.), koncepcję tę rozwijali zaś później Landau (1941 r.) i Lifszyc (1959 r.) oraz Khalatnikov (1965 r.).

Stosowalność takiego scenariusza dwucieczowego potwierdzona została przez doświadczenie Andronikashvilli'ego w 1946 roku. W tym celu na walcu zanurzone w ciekłym helu przymocowano układ tarcz odległych od siebie o około 0,2 mm. Obracając walcem, w ruch wprowadzona została jedynie składowa normalna helu. Zmierzony moment bezwładności całego układu pozwolił wyznaczyć temperaturową zależność poszczególnych frakcji

$$\frac{\rho_n(T)}{\rho} = \begin{cases} \left(\frac{T}{T_\lambda}\right)^{5,6} & \text{dla } T < T_\lambda \\ 1 & \text{dla } T \geq T_\lambda. \end{cases} \quad (21)$$

Współczesne metody oparte na pomiarach prądu płynącego w helu potwierdzają wcześniejsze wyniki z doświadczenia Andronikashvilli'ego.

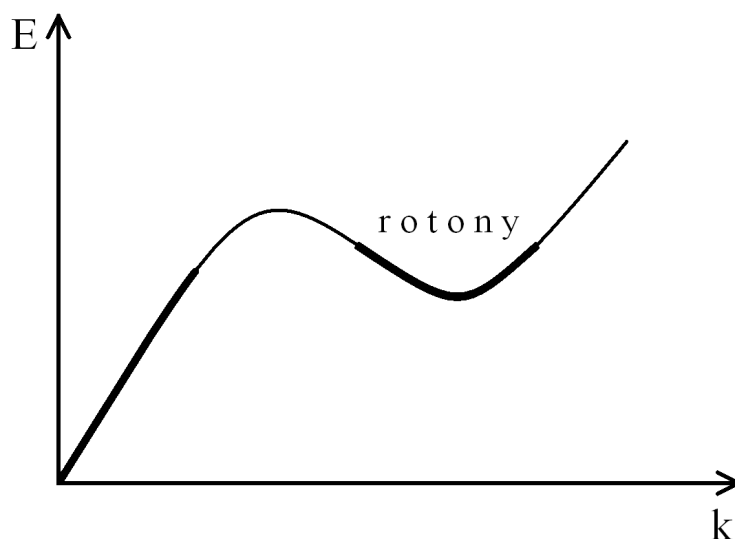
Niewątpliwie warto również przytoczyć szczegół analizy Landaua dotyczący charakteru wzbudzeń efektywnych nadcieczy. Na podstawie dość wczesnych pomiarów ciepła właściwego znane były następujące właściwości:

a) $c_v(T) \sim T$ dla małych temperatur do około 1,5 K

b) $c_v(T) \sim e^{\Delta/k_B T}$ dla temperatur wyższych.

Landau wywnioskował na tej podstawie, że efektywna zależność dyspersyjna powinna mieć postać:

$$E_{\vec{k}} = \begin{cases} c|\vec{k}|, & \text{dla małego } |\vec{k}| \\ \Delta + \frac{\hbar^2}{2m_R} |\vec{k} - \vec{k}_R|^2 & \text{gdy } |\vec{k}| > 0,25\text{\AA}^{-1}. \end{cases} \quad (22)$$



Liczbowe oszacowanie Landaua $c = 238$ m/s (prędkość dźwięku), $\Delta/k_B = 9,6$ K (minimalna energia rotonów), $k_R = 1,95$ \AA^{-1} (kwazipęd rotonowego minimum), $m_R = 0,77 m_{He}$ (masa rotonów) okazały się bardzo precyzyjne. Współcześnie znane wartości nie różnią się od oszacowań Landaua o więcej niż 5 procent. Po raz pierwszy widmo zilustrowane na powyższym rysunku udało się bezpośrednio zaobserwować w 1957 roku. Najdokładniejszą informację o widmie

wzbudzeń dostarczają pomiary wykorzystujące rozpraszanie neutronowskie.

Nadciężki hel charakteryzuje się jeszcze jedną szczególną właściwością. Wprawianie nadciężkiego helu w ruch obrotowy powoduje powstawanie uporządkowanej sieci wirów kwantowych. W miejscu występowania wiru składowa nadciężka zanika. Wiry można więc traktować jako defekty topologiczne nadciężczy. Strumień wirów kwantowych jest ponadto wielkością skwantowaną

$$\oint \vec{v} \cdot d\vec{l} = n \frac{h}{2m_{He}} \quad (23)$$

gdzie n oznacza liczbę całkowitą. Kwantowanie powyższe potwierdził doświadczalnie W. Vienen w 1961 roku.

W latach 60. dwudziestego wieku A. Abrikosov przewidział teoretycznie uporządkowanie wirów kwantowych w strukturę typu sieci heksagonalnej. Wiry w helu były jednak bardzo duże co sprawiało trudność obserwacji tworzenia się sieci wirów. Dopiero w przypadku skondensowanych ultrazimnych atomów udało się otrzymać sieci złożone z kilkudziesięciu lub nawet ponad stu wirów kwantowych. Pomimo niejednorodności kondensatów atomów struktura wirów okazała się idealnie heksagonalna, aż po skrajne obszary pułapek magnetoop-tycznych. Takie sieci wirów są obecnie nazywane jako *sieć Abrikosova*.

Opis nadciekłości oddziałujących bozonów

Zjawisko nadciekłości jest ściśle powiązane z kondensacją Bosego-Einsteina cząstek typu bozonowego, ale może powstać dzięki wzajemnym oddziaływaniom cząstek. Rola oddziaływań międzycząsteczkowych jest jednak dla kondensatów bozonów również destrukcyjna. Aby zrozumieć subtelności związane z wpływem oddziaływań rozpatrzmy poniżej model gazu słabo oddziałujących bozonów (*weakly interacting bose gas* czyli w skrócie WIBG). Należy od razu zaznaczyć, że model ten raczej nie nadaje się do opisu nadciekłego He-II ponieważ oddziaływania między atomami helu są bardzo silne. Nie mniej jednak scenariusz WIBG jest pomocnym punktem startowym do analizy nadciekłości umożliwiającym zrozumienie takich zagadnień jak: wzbudzenia kolektywne, porządek dalekozasięgowy, spontaniczne łamanie symetrii itp.

1^o. Formalizm teorii pola

Niech $\hat{\psi}(\vec{r})$ oznacza operator anihilacji zaś $\hat{\psi}^\dagger(\vec{r})$ operator kreacji cząstki w położeniu \vec{r} . Dla obiektów typu bozonowego operatory pola spełniają następujące warunki komutacyjne

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}_1), \hat{\psi}(\vec{r}_2) \right] = 0 = \left[\hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \right], \quad (24)$$

$$\left[\hat{\psi}(\vec{r}_1), \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \right] = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (25)$$

Operator energii całkowitej (w wielkim zespole kanonicznym) ma postać

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) - \mu \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \\ & + \frac{1}{2} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) U(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (26)$$

Do opisu słabo oddziałujących bozonów wygodną reprezentacją jest baza fal płaskich

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}},$$

które są wektorami własnymi operatora pędu i energii kinetycznej. W bazie takich stanów operatory pola bozonowego mogą być zapisane jako

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}(t) |\vec{k}\rangle \quad (27)$$

$$\hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger(t) \langle \vec{k}| \quad (28)$$

Podstawiając operatory pola (27,28) do hamiltonianu (26) i wycałkowując względem współrzędnych położeniowych otrzymujemy

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} + U \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}' - \vec{q}} \hat{a}_{\vec{k} + \vec{q}}, \quad (29)$$

gdzie $\varepsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$ jest energią kinetyczną cząstek o pędzie \vec{k} . Dla prostoty założyliśmy, że potencjał oddziaływania ma charakter punktowy

$$U(\vec{r} - \vec{r}') = U \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (30)$$

Dla cząstek typu bozonowego stany o pędzie \vec{k} mogą być obsadzone przez arbitralną liczbę cząstek. Stosując oznaczenie liczby obsadzeń można zdefiniować

$$|N_{\vec{k}}\rangle \equiv \frac{(\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger)^{N_{\vec{k}}}}{\sqrt{N_{\vec{k}}!}} |\text{vacuum}\rangle \quad (31)$$

W działaniu na tak zdefiniowane (obsadzeniowe) stany zachodzi

$$\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger |N_{\vec{k}}\rangle = \sqrt{N_{\vec{k}} + 1} |N_{\vec{k}} + 1\rangle \quad (32)$$

$$\hat{a}_{\vec{k}} |N_{\vec{k}}\rangle = \begin{cases} \sqrt{N_{\vec{k}}} |N_{\vec{k}} - 1\rangle & \text{gdy } N_{\vec{k}} \neq 0 \\ 0 & \text{gdy } N_{\vec{k}} = 0. \end{cases} \quad (33)$$

2^o. Przybliżenie Bogoliubova

Bogoliubov zasugerował, że dla makroskopowo obsadzonego stanu podstawowego (w tym wypadku dla stanu o pędzie $\vec{k} = 0$) dodanie lub odjęcie jednej cząstki ma zanedbywalny wpływ. Z tego powodu operatory jednocząstkowe \hat{a}_0 oraz \hat{a}_0^\dagger można w przybliżeniu traktować jak liczby

$$\hat{a}_0^\dagger |N_0\rangle = \sqrt{N_0 + 1} |N_0 + 1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle \quad (34)$$

$$\hat{a}_0 |N_0\rangle = \sqrt{N_0} |N_0 - 1\rangle \approx \sqrt{N_0} |N_0\rangle \quad (35)$$

Przybliżenia zastosowane w (34,35) są słuszne o ile ilość skondensowanych bozonów jest duża. W makroskopowych układach warunek taki jest spełniony w praktyce niemal w całym zakresie temperatur poniżej T_c .

Uwzględniając podstawienie Bogoliubova (34, 35) wyjściowy hamiltonian można przedstawić

$$\hat{H} = \hat{T} + \sum_{i=0}^{i=7} \hat{V}_i, \quad (36)$$

gdzie \hat{T} oznacza operator energii kinetycznej natomiast poszczególne składowe oddziaływań między bozonami mają następujący sens

$$\hat{V}_0 = \frac{1}{2} U n_0^2 \quad (37)$$

$$\hat{V}_1 = \frac{U}{2} n_0 \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}, \quad (38)$$

$$\hat{V}_2 = \frac{U}{2} n_0 \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger, \quad (39)$$

$$\hat{V}_3 = U n_0 \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}, \quad (40)$$

$$\hat{V}_4 = U n_0 \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{-\vec{k}}, \quad (41)$$

$$\hat{V}_5 = \frac{U}{2} \frac{\sqrt{n_0}}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{q}}, \quad (42)$$

$$\hat{V}_6 = \frac{U}{2} \frac{\sqrt{n_0}}{N} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}, \quad (43)$$

$$\hat{V}_7 = \frac{U}{2N} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'-\vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}}, \quad (44)$$

i $n_0 = N_0/N$ oznacza koncentrację skondensowanych bozonów. W powyższych wyrażeniach wyrazy V_3 oraz V_4 są identyczne z powodu założenia punktowego potencjału oddziaływania. W ogólności zależność potencjału od położenia wprowadza konieczność uwzględnienia transformaty $U(\vec{k})$ i wówczas wymienione wyrazy różnią się gdyż jeden z nich zawiera składkowe $U(\vec{k} \neq 0)$ natomiast drugi $U(\vec{k} = 0)$.

W dalszej dyskusji zaniedbamy wpływ oddziaływań \hat{V}_5 i \hat{V}_6 opisujących rozpraszanie trzech cząstek spoza kondensatu a także \hat{V}_7 , który opisuje rozpraszanie z udziałem czterech cząstek nieskondensowanych. Take założenie może być stosowalne wtedy, gdy:

a) oddziaływania U są słabe i

b) i temperatura jest wyraźnie mniejsza od T_c . Po podstawieniu Bogoliubova hamiltonian i zaniebaniu wymienionych rodzajów oddziaływań hamiltonian redukuje się do struktury biliniowej, która jest ściśle rozwiązywalna. Jedną z możliwych dróg prowadzących do ścisłego rozwiązania jest diagonalizacja za pomocą transformacji kanonicznej

$$\hat{\alpha}_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger, \quad (45)$$

$$\hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger = v_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} + u_{\vec{k}} \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger. \quad (46)$$

Bozonowe warunki komutacyjne pozostają zachowane jeżeli $u_{\vec{k}} = u_{-\vec{k}}$, $v_{\vec{k}} = v_{-\vec{k}}$, $u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$. Warunek diagonalizacji

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger \hat{\alpha}_{\vec{k}} + \text{const} \quad (47)$$

wymaga aby

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right] \quad (48)$$

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right] \quad (49)$$

gdzie efektywne energie kwazicząstek są zdefiniowane przez

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}^2 + 2Un_0\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}}} \quad (50)$$

i $\tilde{\varepsilon}_{\vec{k}} = \varepsilon_{\vec{k}} - \mu + 2Un_0$. W szczególności, w zakresie niskoenergetycznych stanów (tzw. granicy długofalowej) zależność dyspersyjna (50) przyjmuje charakterystyczną relację typu fali dźwiękowej

$$E_{\vec{k}} \simeq \sqrt{\frac{n_0 U \hbar^2}{m}} |\vec{k}|. \quad (51)$$

Prędkość uzyskanego kolektywnego dźwięku jest zależna zarówno od ilości skondensowanych bozonów n_0 jak również od intensywności oddziaływań U . Oba te czynniki są więc elementem koniecznym dla zaistnienia nadciekłości.

3^o. Stan podstawowy

Rozpatrzmy prawdopodobieństwo obsadzenia stanu energii o pędzie \vec{k} dla temperatury zera bezwzględnego. Obliczenia można łatwo przeprowadzić korzystając z transformacji Bogoliubova (45,46)

$$\begin{aligned}
\langle n_{\vec{k}} \rangle &= \langle \text{gr. state} | \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}} | \text{gr. state} \rangle \\
&= \langle \text{gr. state} | \left(u_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}}^\dagger - v_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{-\vec{k}} \right) \left(u_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger \right) | \text{gr. state} \rangle \\
&= v_{\vec{k}}^2 \langle \text{gr. state} | \hat{\alpha}_{-\vec{k}} \hat{\alpha}_{-\vec{k}}^\dagger | \text{gr. state} \rangle = v_{\vec{k}}^2.
\end{aligned} \tag{52}$$

Wynik ten wskazuje, że w temperaturze $T = 0$ pewna część bozonów obsadza stany energetyczne $\vec{k} \neq 0$. Ubytek (ang. *depletion*) skondensowanych bozonów wynosi

$$\tilde{N} = N - N_0 = \sum_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 \tag{53}$$

Pierwszego poważniejszego oszacowania liczby atomów \tilde{N} poza kondensatem dla nadciekłego helu dokonali w 1957 roku K.A. Brückner i K. Sawada. Według współczesnych danych w temperaturze zera bezwzględnego około 93 % atomów helu jest wybitych poza kondensat Bosego-Einsteina.

4^o. Porządek dalekozasięgowy

Wykorzystując przedstawienie operatorów pola (27,28) w bazie fal płaskich zbadamy teraz przestrzenny zasięg korelacji pomiędzy bozonami. Dla prostoty ograniczymy się do przypadku temperatury zera bezwzględnego. Spośród różnych możliwych funkcji korelacji zbadajmy na początek następującą

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) &= \langle \text{gr. state} | \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_2) | \text{gr. state} \rangle \\
&= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} e^{i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 - \vec{k}_2 \vec{r}_2)} \langle \text{gr. state} | \hat{a}_{\vec{k}_1}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}_2} | \text{gr. state} \rangle
\end{aligned} \tag{54}$$

Analogicznie do schematu obliczeń zastosowanych w wyrażeniu (52) po prostych przeliczeniach uzyskujemy

$$\rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} u_{\vec{k}}^2. \tag{55}$$

Wynik (55) pokazuje, że nawet w granicy bardzo różnych odległości korelacje pomiędzy cząstkami nie zanikają

$$\lim_{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty} |\rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)| \neq 0. \quad (56)$$

Kondensat Bosego-Einsteina jest więc odpowiedzialny za uporządkowanie *dalekiego zasięgu*. W poglądowy sposób można to uzasadnić jako przejaw kolektywnego zachowania się cząstek.

Porządek dalekozasięgowy pojawia się nie tylko dla funkcji korelacji typu $\rho(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Podobne efekty realizują się również w tzw. pozadiagonalnych funkcjach korelacyjnych, np. dla

$$\begin{aligned} \rho_{12}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) &= \langle \text{gr. state} | \hat{\psi}(\vec{r}_1) \hat{\psi}(\vec{r}_2) | \text{gr. state} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} e^{i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2)} \langle \text{gr. state} | \hat{a}_{\vec{k}_1} \hat{a}_{\vec{k}_2} | \text{gr. state} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}. \end{aligned} \quad (57)$$

Ideę diagonalnego i pozadiagonalnego uporządkowania dalekiego zasięgu dyskutowali w kontekście kwantowych nadcięczy Penrose oraz Onsager (1956 r.) i rozwinął później Yang (1962 r.) zwracając uwagę na związek ze spontanicznie łamaną symetrię układu.

5^o. Korelacje wielociałowe

Efektywne wzbudzenia typu fali dźwiękowej (51) manifestują się pośrednio także w korelacjach dwuciałowych. Weźmy jako przykład operator gęstości bozonów

$$\rho(\vec{r}) = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) \quad (58)$$

którego transformata Fouriera w przestrzeni pędowej ma następującą postać

$$\rho_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}} . \quad (59)$$

Przy pomocy takiego operatora gęstości cząstek można m.in. łatwo wyrazić oddziaływania między bozonami

$$\sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}'-\vec{q}} \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}} = \sum_{\vec{q}} \rho_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}} . \quad (60)$$

W obecności kondensatu operator (59) składa się trzech jakościowo różnych komponentów

$$\rho_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k} \neq 0} \left(\hat{a}_{\vec{k}}^\dagger \hat{a}_{\vec{k}+\vec{q}} + \sqrt{N_0} \hat{a}_{\vec{k}} + \sqrt{N_0} \hat{a}_{-\vec{k}}^\dagger + N_0 \right) . \quad (61)$$

Pojawienie się kondensatu Bosego-Einsteina ma istotne znaczenie dla korelacji typu gęstość-gęstość (które są mierzalne za np. pomocą spektroskopii rozpraszania neutronowego), ponieważ funkcja spektralna przyjmuje ostry pik jeżeli energia rozpraszanych neutronów $\omega = E_{\vec{q}}$. Metoda pomiaru rozpraszanie neutronów (zaproponowana przez R. Feynmana) jest wygodnym narzędziem empirycznego określenia charakteru widma wzbudzeń jednocząstkowych. Pomiaru takie faktycznie potwierdziły występowanie zarówno niskoenergetycznej gałęzi typu fali dźwiękowej jak również obszar zdominowany wzbudzeniami typu rotonowego.

Kondensaty ultrazimnych atomów

Potencjał pułapkujący ma zwykle kształt paraboliczny

$$V_{ext}(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \quad (62)$$

gdzie ω_i można profilować trzema przeciwbieżnymi wiązkami laserowymi.

Zaniedbując oddziaływania między atomami dozwolone są stany energetyczne (stany własne oscylatora harmonicznego)

$$\varepsilon_{\vec{n}} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_x \left(n_y + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_y \left(n_z + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_z \quad (63)$$

gdzie $n_i = 0, 1, 2, 3, \dots$ oznaczają liczby naturalne.

Najniższy poziom energetyczny

$$\varepsilon_{\vec{0}} = \frac{1}{2} (\hbar\omega_x \hbar\omega_y + \hbar\omega_z) \quad (64)$$

odpowiada funkcji falowej

$$\phi_{\vec{0}}(\vec{r}) = \left(\frac{m\tilde{\omega}}{\pi\hbar}\right)^{3/4} \exp\left[-\frac{m}{2\hbar} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)\right] \quad (65)$$

gdzie $\tilde{\omega} = (\omega_x \omega_y \omega_z)^{1/3}$. Funkcja (65) jest wektorem własnym hamiltonianu 3-wymiarowego oscylatora harmonicznego.

Jeżeli stan podstawowy oscylatora jest obsadzony przez N_0 cząstek (w tym wypadku atomów) to gęstość takich cząstek wynosi

$$n_{\vec{0}}(\vec{r}) = N_0 |\phi_{\vec{0}}(\vec{r})|^2 . \quad (66)$$

Przestrzenny kształt rozkładu gęstości ma postać gaussowską

$$n_{\vec{0}}(\vec{r}) = N_0 \left(\frac{m\tilde{\omega}}{\pi\hbar}\right)^{3/2} \exp\left[-\frac{m}{\hbar} (\omega_x x^2 + \omega_y y^2 + \omega_z z^2)\right]. \quad (67)$$

Dla wybranego kierunku, np. x , szerokość gaussowska wynosi

$$\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_x}} \quad (68)$$

zatem średnia geometryczna poszerzenia gaussowskiego oscylatora harmonicznego wynosi

$$a_{ho} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\tilde{\omega}}} . \quad (69)$$

W zwykłych warunkach doświadczalnych dla ultrazimnych gazów atomowych a_{ho} wynosi rzędu

$$a_{ho} \sim 1\mu\text{m} = 10^{-6}\text{m} . \quad (70)$$

Tylko niewielka ilość cząstek zajmuje stan podstawowy jeżeli temperatury $T \gg \hbar\omega_{ho}/k_B$, w takich warunkach można więc opisać rozkład przestrzenny cząstek klasyczną funkcją dystrybucji

$$\begin{aligned} n_{cl}(\vec{r}) &= \text{const} \exp\left[-\frac{V_{ext}(\vec{r})}{k_B T}\right] \\ &= \text{const} \exp\left[-\frac{m}{2k_B T} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)\right] . \end{aligned} \quad (71)$$

Klasyczny rozkład gęstości cząstek ma również kształt gaussowski, jednakże jego szerokość połówkowa wynosi

$$R_T = \left(\frac{2k_B T}{m\tilde{\omega}^2}\right)^{\frac{1}{2}} = a_{ho} \left(\frac{2k_B T}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^{\frac{1}{2}} . \quad (72)$$

Szerokość ta zwykle znacznie przekracza wartości a_{ho} , dlatego kondensacja BE atomów w pułapkach przejawia się w postaci wąskiego piku gaussowskiego na tle szerokiego rozkładu klasycznego o połówkowej szerokości gaussowskiej R_T . Do pomiaru rozkładu cząstek wykorzystywana jest metoda mierzenia czasu czasu

przelotu (ang. *time of flight*, czyli w skrócie TOF) stosowana po wyłączeniu laserów, które utrzymują atomy w pułapce.

Wpływ oddziaływań ultrazimnych atomów

W obecności oddziaływań dwuciałowych pojawienie się kondensatu Bosego-Einsteina prowadzi do wygenerowania stanu nadciekłego. Obserwacja właściwości nadciekłych jest w praktyce dość trudna. Nie mniej jednak istnieją doświadczalne metody jednoznacznie potwierdzające nadciekły charakter kondensatów atomowych, np. poprzez obserwację sieci wirów kwantowych, charakterystyczną temperaturową zależność ciepła właściwego czy kolektywne cechy w widmie wzbudzeń mierzonych tunelową spektroskopią w zakresie radiofalowym (ang. *radio-frequency spectroscopy*).

Aby określić nadciekłe właściwości niejednorodnych kondensatów atomowych wygodnie jest skorzystać z formalizmu opracowanego w latach sześćdziesiątych dwudziestego wieku niezależnie przez L.P. Pitajewskiego oraz E.P. Grossa. Poniżej przedstawiony będzie schemat takiego postępowania.

1^o. Równanie Grossa-Pitajewskiego

Dla niejednorodnego układu atomów spuląpkowanych potencjałem harmonicznym $V_{ext}(\vec{r}) = \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2)$ w obecności wzajemnych oddziaływań dwuciałowych potencjałem $U(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ hamiltonian układu jest opisany przez

$$\begin{aligned} \hat{H} = \int d\vec{r} \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) - \mu \right] \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \\ + \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}, t) \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) U(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t), \end{aligned} \quad (73)$$

gdzie $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ są bozonowymi operatorami pola. Gdy w układzie pojawia się kon-

densat Bosego-Einsteina propozycja Bogoliubova uzasadnia traktowanie operatorów cząstek z kondensatu poprzez zwykłe liczby (lub ewentualnie liczby zespolone). Uogólnienie takiego przybliżenia Bogoliubova na przypadek niejednorodny (względem współrzędnych położeniowych i czasowych) polega na następującym podstawieniu

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}, t) + \delta\hat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (74)$$

Funkcja zespolona $\Phi(\vec{r}, t)$ ma sens makroskopowej funkcji falowej kondensatu zaś $\delta\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ oznacza operator pola pozostałych (nieskondensowanych) atomów. Dla porównania podstawienie (74) w przypadku jednorodnym miałyby następujące znaczenie

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k}\vec{r}} \\ &= \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}} a_0(t)}_{\Phi(\vec{r}, t)} + \underbrace{\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k} \neq 0} \hat{a}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k}\vec{r}}}_{\delta\hat{\Psi}(\vec{r}, t)}. \end{aligned} \quad (75)$$

W układach przestrzennie jednorodnych funkcja kondensatu nie zależy od położenia chociaż dopuszczalne mogą być fluktuacje czasowe.

W obecnie omawianej sytuacji funkcja falowa (74) jest w tradycyjny sposób związana z koncentracją kondensatu poprzez

$$n_c(\vec{r}, t) = \left| \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \right|^2. \quad (76)$$

Oprócz amplitudy również faza funkcji kondensatu spełnia ważne znaczenie, gdyż jej gradient determinuje gęstość prądu atomów.

Na podstawie kwantowomechanicznego równania ruchu

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = [\hat{\Psi}(\vec{r}, t), \hat{H}] \quad (77)$$

dla operatorów pola uzyskujemy następujące warunek

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(\vec{r}) - \mu \right) \hat{\Psi}(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\vec{r}', t) U(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}', t) \hat{\Psi}(\vec{r}, t). \quad (78)$$

Założmy, że dwuciałowe oddziaływania są krótkozasięgowe i mogą być opisane w postaci potencjału punktowego

$$V(\vec{r} - \vec{r}') = g\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (79)$$

gdzie parametr g wiąże się z długością rozpraszania a zdefiniowaną poprzez

$$g \equiv \frac{4\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (80)$$

Podstawiając (74) do równania Heisenberga (78) uzyskujemy wówczas słynne równanie Grossa-Pitajewskiego (GP)

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + gn_c(\vec{r}, t) - \mu \right] \Phi(\vec{r}, t). \quad (81)$$

Nieliniowe równanie (81) opisuje dynamikę kondensatu uwzględniając wpływ zarówno oddziaływań jak też niejednorodności. Ogólne rozwiązanie równania GP jest niemożliwe, dlatego zwykle w konkretnych warunkach doświadczalnych jest ono rozwiązywane numerycznie.

Zespolona funkcja $\Phi(\vec{r}, t)$ może być wyrażona za pomocą amplitudy $|\Phi(\vec{r}, t)|$ oraz fazy $\theta(\vec{r}, t)$

$$\Phi(\vec{r}, t) = \sqrt{n_c(\vec{r}, t)} e^{i\theta(\vec{r}, t)}.$$

Za pomocą takich zmiennych łatwo jest określić gęstość prądu skondensowanych atomów $\mathbf{j}_c(\vec{r}, t) \equiv \frac{\hbar}{2i} (\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^*)$. Tzw. nadprąd $\mathbf{j}_c(\vec{r}, t)$ (ang. *superfluid current*) przyjmuje następującą postać

$$\mathbf{j}_c(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2i} (\Phi^* \vec{\nabla} \Phi - \Phi \vec{\nabla} \Phi^*) = \hbar n_c(\vec{r}, t) \nabla \theta(\vec{r}, t). \quad (82)$$

Na podstawie struktury wyrażenia (82) wnioskujemy, że nadprąd jest bezwirowy

$$\nabla \times \mathbf{j}_c(\vec{r}, t) = 0. \quad (83)$$

Jedynie w sytuacjach, gdy faza $\theta(\vec{r}, t)$ posiada osobliwości mogą pojawić się wiry. Z tego powodu kwantowe wiry są określane jako topologiczne defekty. Abrikosov wykazał, że najkorzystniejsze energetycznie jest układanie się wirów w strukturę sieci heksagonalnej.

Przedstawiając równanie Grossa-Pitajewskiego (81) w postaci warunku dla amplitudy oraz fazy uzyskujemy

$$\frac{\partial}{\partial t} n_c(\vec{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j}_c(\vec{r}, t) = 0 \quad (84)$$

$$m \left(\frac{\partial \mathbf{v}_c(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \frac{v_c^2(\vec{r}, t)}{2} \right) = -\nabla [V_{eff} + gn_c - \mu] \quad (85)$$

gdzie $V_{eff}(\vec{r}, t) = V_{ext}(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2m\sqrt{n_c(\vec{r}, t)}} \nabla^2 \sqrt{n_c(\vec{r}, t)}$ zaś prędkość nadcieczy $\mathbf{v}_c(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla \theta(\vec{r}, t)$. Pierwsze z powyższych równań (84) dotyczy prawa zachowania (masy), które w hydrodynamice jest nazywane równaniem ciągłości. Drugie równanie (85) jest natomiast identyczne z równaniem Eulera cieczy idealnej (tzn. bezlepkiej).

Wyprowadzone powyżej sformułowanie hydrodynamiczne (stosowalne w tzw. granicy bezkolizyjnej) wykazuje, że faktycznie kondensacja Bosego-Einsteina

oraz oddziaływania między bozonami konstytuują stan nadciekły. Przejście do stanu nadciekłego jest przejściem drugiego rodzaju. Poniżej temperatury krytycznej rolę parametru porządku pełni zespolona funkcja kondensatu, która z formalnego punktu widzenia jest nieznikającą wartością średnia operatora pola $\langle \hat{\Psi}(\vec{r}, t) \rangle = \Phi(\vec{r}, t)$. Parametr porządku implikuje pojawienie się daleko-osięgowych korelacji pomiędzy bozonami w kanale normalnym (DLRO) i anomalnym (ODLRO).

2^o. Stan podstawowy

Stacjonarne rozwiązanie równania Grossa-Pitajewskiego dla stanu podstawowego, w którym nie występują przepływy atomów można sparametryzować separowalną postacią $\Phi(\vec{r}, t)$

$$\Phi(\vec{r}, t) = \Phi(\vec{r}) e^{-i\mu t} \quad (86)$$

gdzie część stacjonarna $\Phi(\vec{r})$ określa ilość skondensowanych atomów $N_0 = \int d\vec{r} |\Phi(\vec{r})|^2$ natomiast μ jest potencjałem chemicznym. Podstawienie (86) do (81) prowadzi do uzyskania równania Schrödingera

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + g |\Phi(\vec{r})|^2 \right) \Phi(\vec{r}) = \mu \Phi(\vec{r}). \quad (87)$$

Potencjał chemiczny odgrywa więc rolę energii własnej zagadnienia stacjonarnego.

Numeryczna analiza oddziaływań odpychających ($g > 0$) i przyciągających ($g < 0$) wykazały znaczący wpływ oddziaływań na:

- a) ilość skondensowanych atomów N_0 ,
- b) profil rozkładu gęstości $n_c(\vec{r})$.

Oddziaływania odpychające wybijają atomy z kondensatu, powodując ubytek (*depletion*) N_0 i jednocześnie silnie zmniejszają funkcję $n_c(\vec{r})$ w centrum pułapki. Przyciągające oddziaływania mają zupełnie odwrotny wpływ, który przejawia się poprzez wzrost gęstości skondensowanych atomów w centralnej części pułapki. Niestety przyciąganie atomów jest jednak również destrukcyjne dla kondensatu atomów gdyż prowadzi do zjawiska zapadania się (tzw. kolaps). Na przykład dla bozonowych atomów izotopu ${}^7\text{Li}$ oddziałujących na siebie siłami przyciągania kolapsowanie realizuje się już dla około $N \simeq 1400$ atomów.

3^o. Wzbudzenia elementarne

Do określenia małych fluktuacji (oscylacji) parametru porządku rozpatrzmy ponownie równanie Grossa-Pitaiewskiego (81) zakładając następującą postać funkcji kondensatu

$$\Phi(\vec{r}, t) = e^{-i\mu t} [\Phi(\vec{r}) + u(\vec{r})e^{-i\omega t} + v^*(\vec{r})e^{i\omega t}]. \quad (88)$$

Funkcje $u(\vec{r})$ oraz $v(\vec{r})$ są amplitudami fluktuacji dla częstości odpowiednio $\mp\omega$. Zakładając, że amplitudy te są małe (w porównaniu do $|\Phi(\vec{r})|$) gęstość kondensatu jest określona przez

$$\begin{aligned} |\Phi(\vec{r}, t)|^2 &= [\Phi(\vec{r}) + u^*(\vec{r})e^{i\omega t} + v(\vec{r})e^{-i\omega t}] [\Phi(\vec{r}) + u(\vec{r})e^{-i\omega t} + v^*(\vec{r})e^{i\omega t}] \\ &\simeq \Phi^2(\vec{r}) + \Phi(\vec{r}) [u^*(\vec{r}) + v(\vec{r})] e^{i\omega t} + \Phi(\vec{r}) [u(\vec{r}) + v^*(\vec{r})] e^{-i\omega t}. \end{aligned} \quad (89)$$

Podstawienie (88) oraz przybliżonego wyrażenia (89) do równania Grossa-Pitaiewskiego z dokładnością do członów liniowych względem fluktuacji prowadzi do następującego układu równań

$$\hbar\omega u(\vec{r}) = \left[\hat{H}_0 - \mu + 2g\Phi^2(\vec{r}) \right] u(\vec{r}) + g\Phi^2(\vec{r})v(\vec{r}) \quad (90)$$

$$-\hbar\omega v(\vec{r}) = \left[\hat{H}_0 - \mu + 2g\Phi^2(\vec{r}) \right] v(\vec{r}) + g\Phi^2(\vec{r})u(\vec{r}) \quad (91)$$

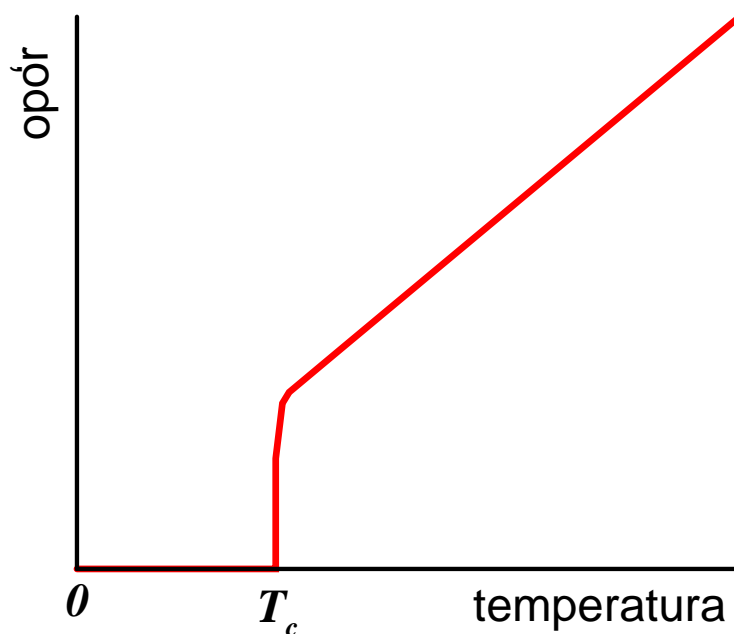
gdzie $\hat{H}_0 = -\hbar^2\nabla^2/2m - V_{ext}(\vec{r})$. Wyznaczenie nietrywialnych rozwiązań układu równań (90,91) determinuje energie dopuszczalnych wzbudzeń $\hbar\omega$ kondensatu oddziałujących bozonów. Zwykle rozpatrywane są charakterystyczne mody radialne i aksjalne dla przypadku, gdy $\omega_x = \omega_y \neq \omega_z$. Poza nielicznymi przypadkami wzbudzenia takie wyznaczyć trzeba metodami numerycznymi.

Przedstawiona powyżej procedura (zaproponowana w 1961 roku przez Pita-jewskiego) prowadząca do równań (90,91) jest jakościowo równoważna metodzie transformacji Bogoliubova zaniedbującej wyrazy z trzema i czterema operatorami $\delta\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$ cząstek spoza kondensatu. Równoważność obu podejść jest dość łatwa do wykazania.

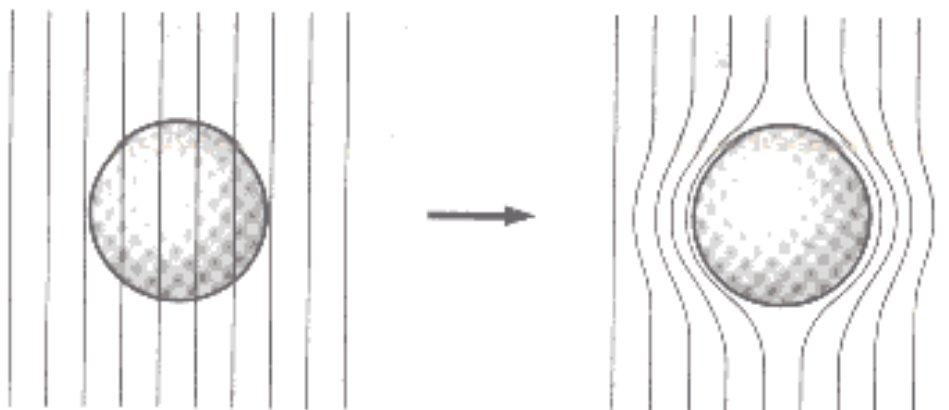
Nadprzewodnictwo układów fermionowych

Na nadprzewodnictwo składają się dwie następujące właściwości fizyczne:

a) całkowity zanik oporu stałoprądowego



b) wypychanie pola magnetycznego czyli idealny diamagnetyzm



Teoria Londonów

Pierwszą fenomenologiczną dyskusję dotyczącą konsekwencji fizycznych zaniku oporu (tzn. bezdyssypatywnego ruchu elektronów) opracowali bracia [F. London, H. London, Proc. Roy. Soc. A **149**, 71 (1935).] Mimo, iż analiza Londonów nie była w pełni konsystentną (bazując na klasycznie nieuzasadnionych założeniach) wskazała jednak na bardzo ważne powiązanie zaniku oporu z pojawieniem się idealnego diamagnetyzmu. Ponadto bracia Londonowie zasugerowali, iż nadprzewodzące elektrony muszą być traktowane jako wspólny makroskopowy stan - z dzisiejszej perspektywy moglibyśmy ten sugerowany stan określić jako kondensat Bosego-Einsteina par elektronowych.

Do prześledzenia toku rozumowania braci Londonów rozpatrzmy ruch elektronów o ładunku $q = -e$ w zewnętrznym polu magnetycznym \vec{E} . Według prawa Newtona siła kulombowska $q\vec{E}$ pod nieobecność dyssypacji powoduje stały przyrost prędkości elektronu

$$m \frac{d}{dt} \vec{v} = q\vec{E}. \quad (92)$$

Ze względu na fakt, iż ruch ładunków w skali makroskopowej przejawia się poprzez przepływ prądu możemy napisać, że

$$\vec{j} = qn\vec{v}, \quad (93)$$

gdzie n oznacza koncentrację (nadprzewodzących) nośników. Brak oporu prowadzi ze względu na relację (93) do następującego *pierwszego równania Londonów*

$$\frac{d}{dt} \vec{j} = \frac{nq^2}{m} \vec{E} = \frac{ne^2}{m} \vec{E}. \quad (94)$$

Aby określić związek gęstości prądu \vec{j} z polem magnetycznym \vec{B} możemy skorzystać z prawa Faraday'a

$$\text{rot}\vec{E} = -\frac{\partial}{\partial t}\vec{B}. \quad (95)$$

Uwzględniając pierwsze równanie Londonów (94) uzyskujemy

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\text{rot}\vec{j} + \frac{ne^2}{mc}\vec{B} \right) = 0. \quad (96)$$

Na podstawie prawa Ampere'a

$$\text{rot}\vec{B} = \frac{4\pi}{c}\vec{j}, \quad (97)$$

gęstość prądu \vec{j} jest więc zależna od pola magnetycznego \vec{B} poprzez następującą relację

$$\text{rot}\vec{j} + \frac{ne^2}{mc}\vec{B} = \text{const.} \quad (98)$$

Londonowie zaproponowali, aby w formalnym rozwiązaniu (98) wybrać wartość stałej równą zero. Tym samym, uzyskuje się tzw. *drugie równanie Londonów* w następującej postaci

$$\text{rot}\vec{j} = -\frac{ne^2}{mc}\vec{B}. \quad (99)$$

Warto tutaj zwrócić uwagę, że wybór zerowej stałej jest niemożliwy do uzasadnienia w oparciu o traktowanie na podstawie fizyki klasycznej. Dopiero opis przy użyciu mechaniki kwantowej (patrz rozdział dotyczący mechanizmu Andersona-Higgsa) dostarcza niezbędnej argumentacji.

Nie mniej jednak warto przeanalizować wnioski wynikające z drugiego równania Londonów (99). Działając operacją rotacji na obie strony równania uzyskujemy

$$\begin{aligned}\operatorname{rot}(\operatorname{rot}\vec{B}) &= \frac{4\pi}{c}\operatorname{rot}\vec{B} \\ &= \frac{4\pi}{c}\left(-\frac{ne^2}{mc}\right)\vec{B}.\end{aligned}\quad (100)$$

Na podstawie tożsamości matematycznej $\operatorname{rot} \cdot \operatorname{rot} = -\Delta$ dostajemy ostatecznie

$$\Delta\vec{B} = \frac{1}{\lambda_L^2}\vec{B}, \quad (101)$$

gdzie

$$\lambda_L \equiv \sqrt{\frac{mc^2}{4\pi ne^2}} \quad (102)$$

oznacza tzw. *londonowską głębokość wnikanía*. Znaczenie tej wielkości fizycznej można łatwo zrozumieć gdy rozpatrzmy zależność pola magnetycznego od położenia np. w kierunku x . Jeśli nadprzewodnik zajmuje półprzestrzeń $x \geq 0$ wówczas rozwiązanie równania (99) ma następującą postać

$$\vec{B}(x) = \begin{cases} \vec{B}_0 & \text{dla } x < 0, \\ \vec{B}_0 e^{-x/\lambda_L} & \text{dla } x \geq 0. \end{cases} \quad (103)$$

Pole magnetyczne wykładniczo zanika w obszarze nadprzewodnika (o ile natężenie B nie przekracza wartości krytycznej B_c) dlatego nadprzewodniki są jednocześnie idealnymi diamagnetykami. Analogicznie do równania (103) można również wykazać, iż gęstość indukowanego w warstwie przypowierzchniowej prądu ekranującego wynosi

$$\vec{j}(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0, \\ \vec{j}_0 e^{-x/\lambda_L} & \text{dla } x \geq 0. \end{cases} \quad (104)$$

Dla nadprzewodników klasycznych głębokość wnikanía λ_L przyjmuje zwykle wartości z zakresu od 100 Å do około 1000 Å.

Głębokość wnikania jest ponadto zależna również od temperatury. Wynika to z temperaturowej zależności frakcji nadprzewodzących nośników $n = n(T)$, która zanika w granicy $T \rightarrow T_c^-$. Dla izotropowych nadprzewodników wykazano empirycznie, że spełniona jest w przybliżeniu następująca zależność

$$\lambda(T) \simeq \frac{\lambda(0)}{\sqrt{1 - (T/T_c)^4}}. \quad (105)$$

W przedstawionym powyżej sposobie rozumowania braci Londonów nie uwzględnione zostały efekty kwantowo-mechaniczne. Fritz London przedstawił jednak również schemat uwzględniający takie efekty. W tym celu należy przypomnieć, że rolę kanonicznego pędu w obecności pola elektromagnetycznego pełni

$$\vec{p} = m\vec{v} + \frac{e}{c} \vec{A}. \quad (106)$$

Taki kanoniczny pęd powinien mieć na średnio wartość zerową $\langle \vec{p} \rangle = 0$, z czego wynika prosty wniosek

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{-e}{mc} \vec{A}. \quad (107)$$

W rezultacie wektor gęstości prądu przyjmuje postać

$$\vec{j} = ne \langle \vec{v} \rangle = \frac{-ne^2}{mc} \vec{A}, \quad (108)$$

która implikuje relację (101). Należy podkreślić, że przedstawione wyżej wyprowadzenie jest słuszne jedynie przy wyborze cechowania typu $\text{div}A=0$.

Fenomenologiczna teoria Ginzburga Landaua

Przejście ze stanu normalnego w stan nadprzewodzący (które jest przejściem fazowym drugiego rodzaju) jest ściśle powiązane z pojawieniem się parametru porządku. W tym konkretnym przypadku ma to związek z kondensacją Bosego-Einsteina efektywnych kwazicząstek. W 1950 roku Ginzburg i Landau (GL) zaproponowali wprowadzenie zespolonego parametru porządku $\Psi(\vec{r})$ o następujących właściwościach

$$\begin{aligned}\Psi(\vec{r}) &= 0, & \text{gdy } T > T_c \\ \Psi(\vec{r}) &\neq 0 & \text{dla } T \leq T_c.\end{aligned}\tag{109}$$

W bliskim otoczeniu temperatury krytycznej T_c wartość bezwzględna $|\Psi(\vec{r})|$ jest infinitezymalnie mała, dlatego energię swobodną nadprzewodnika F_s można wówczas przedstawić korzystając z rozwinięcia względem wartości F_n stanu normalnego

$$F_s = F_n + a|\Psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2}b|\Psi(\vec{r})|^4 + \dots\tag{110}$$

gdzie a oraz b oznaczają pewne rzeczywiste parametry. Pod nieobecność zewnętrznych pól parametr porządku nie powinien zależeć od zmiennych przestrzennych, dlatego Ginzburg i Landau dodali do powyższego rozwinięcia (110) również wyraz proporcjonalny do $|\nabla\Psi(\vec{r})|$, który jest odpowiedzialny za tłumienie przestrzennej zmiany parametru porządku. W analogii do równania Schrödingera wyraz ten można zapisać w postaci

$$\frac{1}{2m^*}|\nabla\Psi(\vec{r})|^2,\tag{111}$$

gdzie m^* oznacza masę efektywną.

W obecności zewnętrznych pól wyraz "masowy" (111) powinien mieć postać niezmienniczą na transformację cechowania. Taki wymóg narzuca następującą strukturę dla wyrazu "masowego"

$$\frac{1}{2m^*} \left| \left(i\hbar\nabla - \frac{q^*}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) \right| \quad (112)$$

gdzie q^* jest efektywnym ładunkiem kwazicząstek. Ostatecznie gęstość energii swobodnej możemy wyrazić jako

$$F_s = F_n + a|\Psi(\vec{r})|^2 + \frac{1}{2}b|\Psi(\vec{r})|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(i\hbar\nabla - \frac{q^*}{c} \vec{A}(\vec{r}) \right) \Psi(\vec{r}) \right| + \frac{1}{8\pi} B^2 \quad (113)$$

gdzie ostatni człon opisuje gęstość energii pola magnetycznego $\vec{B} = \text{rot}\vec{A}$.

Gęstość kwazicząstek nadprzewodzących

$$|\Psi(\vec{r})|^2 \equiv n_s(\vec{r}) \quad (114)$$

skonfrontowana z faktami doświadczalnymi prowadzi do następujących spostrzeżeń

$$q^* = -2e, \quad (115)$$

$$m^* = 2m_e. \quad (116)$$

W polu zewnętrznym \vec{H} całkowita energia swobodna Gibbsa dana jest wyrażeniem

$$G[\Psi, \vec{A}] = \int d\vec{r} \left(F_s - \frac{1}{4\pi} \vec{B} \cdot \vec{H} \right). \quad (117)$$

Warunek stabilności wymaga aby wielkość ta (117) była stacjonarna względem dowolnych zmian parametru porządku oraz potencjału wektorowego \vec{A}

$$\frac{\delta G[\Psi, \vec{A}]}{\delta \Psi} = 0, \quad (118)$$

$$\frac{\delta G[\Psi, \vec{A}]}{\delta \vec{A}} = 0. \quad (119)$$

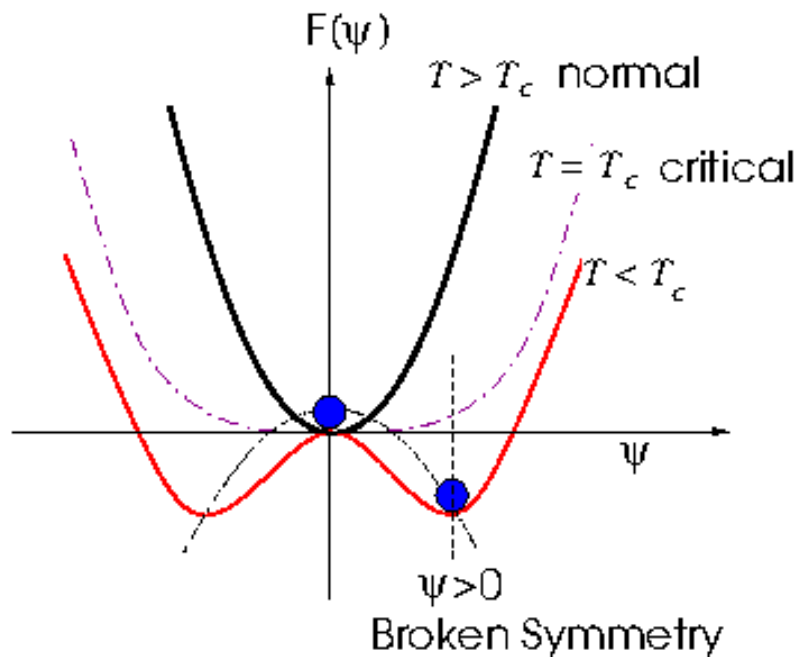
W oparciu o rachunek wariacyjny znajdujemy w rezultacie układ następujących równań Ginzburga Landaua

$$a\Psi(\vec{r}) + b|\Psi(\vec{r})|^2\Psi(\vec{r}) + \frac{1}{2m^*} \left(i\hbar\nabla - \frac{q^*}{c}\vec{A}(\vec{r}) \right)^2 \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (120)$$

$$\frac{\hbar q^*}{2im^*} (\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) - \frac{(q^*)^2}{m^*c} |\Psi|^2 \vec{A} = \frac{c}{4\pi} \text{rot}\vec{B}. \quad (121)$$

Poniżej przedstawimy wnioski wynikające z analizy równań Ginzburga Landaua dla kilku reprezentatywnych przypadków.

Przykład 1: *Przypadek bez zewnętrznego pola $\vec{A} = 0$*



W nieobecności zewnętrznego pola rozwiązanie jednorodne ma prostą postać

$$|\Psi|^2 = \begin{cases} 0 & \text{dla stanu normalnego powyżej } T_c \\ -a/b & \text{gdy } T \leq T_c. \end{cases} \quad (122)$$

W drugim przypadku zależność energii swobodnej od rzeczywistej i urojonej części parametru porządku przypomina kształt "meksykańskiego kapelusza". Dołączony rysunek ilustruje przekrój takiej zależności.

Wartość pola krytycznego wynosi odpowiednio

$$(H_c(T))^2 = 4\pi \frac{a^2}{b} \quad (123)$$

zatem dla $b > 0$ energia swobodna ma minimum zilustrowane jako punkt w niebieskim kolorze na powyższym rysunku. Według oszacowania Ginzburga i Landaua temperaturowa zależność parametru a przyjmuje następującą postać

$$a(T) = a_0 (T_c - T) \quad \text{gdzie } a_0 = \text{const} \quad (124)$$

zatem

$$H_c(T) = \sqrt{\frac{4\pi}{b}} a_0 (T_c - T) \quad (125)$$

i w podobny sposób zależy również koncentracja $n_s(T) \propto (T_c - T)$.

Przykład 2: Model jednowymiarowy bez pola magnetycznego

Analizując zależność parametru porządku względem współrzędnej z możemy wyrazić pierwsze równanie Ginzburga Landaua (120) jako

$$a\Psi(z) + b|\Psi(z)|^2\Psi(z) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi(z) = 0. \quad (126)$$

Założmy, że $\Psi(z)$ jest funkcją rzeczywistą. Jej asymptotyczna wartość wynosi

$$\Psi(\infty) = \sqrt{\frac{|a|}{b}} \quad (127)$$

wprowadźmy więc wygodną bezwymiarową wielkość

$$f(z) = \frac{\Psi(z)}{\Psi(\infty)} \quad (128)$$

dla której równanie (126) redukuje się do postaci

$$f(z) - f^3(z) + -\frac{\hbar^2}{2m^*|a|} \frac{d^2}{dz^2} f(z) = 0. \quad (129)$$

Powyższe równanie determinuje skalę przestrzenną zmian parametru porządku.

Aby zbadać ten aspekt wygodnie jest wprowadzić tzw. *długość koherencji*

Ginzburga Landaua zdefiniowaną jako

$$\xi(T) = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|a(T)|}}. \quad (130)$$

Wartości asymptotyczne $f(\infty) = 1$ oraz $f(0) = 0$ implikują, że funkcja $f(z)$

jest określona równaniem

$$-\xi^2 \frac{d^2}{dz^2} f(z) = f(z) (1 - f^2(z)), \quad (131)$$

które przyjmuje rozwiązanie w postaci

$$f(z) = \operatorname{tgh} \left(\frac{z}{\sqrt{2}\xi} \right). \quad (132)$$

Zmiany parametru porządku zachodzą więc na odległościach porównywalnych

do długości koherencji ξ . Z takim zachowaniem związany jest również zanik

pola magnetycznego, które jest w stanie wnikać do obszaru nadprzewodnika

na głębokość λ . Można wyróżnić dwa odmienne jakościowo zakresy, w których

parametr Ginzburga Landaua $\xi \equiv \lambda/\xi$ przyjmuje wartość dużo większą lub dużo mniejszą od 1, zależnie od typu nadprzewodnika.

Przykład 3: *Obszar jednorodnego parametru porządku*

Przyjmijmy, że parametr porządku jest niemal jednorodny, tzn.

$$\Psi(z) \simeq \Psi(\infty). \quad (133)$$

Wówczas drugie równanie Ginzburga Landaua (121) określa prąd pochodzący od nadprzewodzących nośników

$$\vec{j}(\vec{r}) = - \frac{(q^*)^2}{m^*c} n^*(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}). \quad (134)$$

Ze względu na fakt, że $m^* = 2m_e$ oraz $n^*(\vec{r}) = \frac{1}{2}n_s(\vec{r})$ otrzymujemy warunek

$$\vec{j}(\vec{r}) = - \frac{e^2}{m_e c} n_s(\vec{r}) \vec{A}(\vec{r}) \quad (135)$$

równoważny fenomenologicznemu równaniu Londonów

$$\vec{j}(\vec{r}) = - \frac{c}{4\pi\lambda^2} \vec{A}(\vec{r}). \quad (136)$$

Głębokość penetracji jest więc związana z koncentracją nadciekłych nośników poprzez relację

$$\lambda(T) = \sqrt{\frac{m^*c}{4\pi(q^*)^2 n^*(T)}}. \quad (137)$$

Jako wielkość zespolona parametr porządku może być przedstawiony poprzez amplitudę i fazę

$$\Psi(\vec{r}) = |\Psi(\vec{r})| e^{i\phi(\vec{r})}. \quad (138)$$

Jeżeli amplituda jest jednorodna (co ma miejsce w sytuacji, gdy koncentracja nadciekłych nośników jest stała w przestrzeni) wówczas gęstość prądu $\vec{j}(\vec{r})$ jest zdeterminowana przez argument fazowy, przyjmując następującą postać

$$\begin{aligned}\vec{j}(\vec{r}) &= \frac{q^*\hbar}{2im^*} [|\Psi|e^{-i\phi}|\Psi|e^{i\phi}i\nabla\phi - |\Psi|e^{i\phi}|\Psi|e^{-i\phi}(-i\nabla\phi)] - \frac{(q^*)^2}{m^*c}|\Psi|^2\vec{A} \\ &= \frac{q^*\hbar}{m^*}|\Psi|^2\nabla\phi - \frac{(q^*)^2}{m^*c}|\Psi|^2\vec{A}\end{aligned}\quad (139)$$

W równoważnej formie równanie (139) możemy zapisać w postaci

$$\vec{A}(\vec{r}) + \frac{m^*c}{(q^*)^2|\Psi|^2}\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar c}{q^*}\nabla\phi(\vec{r}).\quad (140)$$

Przeprowadzimy całkowanie (141) po konturze zamkniętej (znajdującej się całkowicie w obszarze nadprzewodnika)

$$\oint d\vec{l} \cdot \vec{A} + \frac{m^*c}{(q^*)^2} \oint d\vec{l} \cdot \frac{\vec{j}}{|\Psi|^2} = \frac{\hbar c}{q^*} \oint d\vec{l} \cdot \nabla\phi(\vec{r}).\quad (141)$$

Skorzystajmy z twierdzenia Stokes'a

$$\oint d\vec{l} \cdot \vec{A} = \iint d\vec{S} \cdot \text{rot}\vec{A} = \iint d\vec{S} \cdot \vec{B}\quad (142)$$

oraz tożsamości

$$\oint d\vec{l} \cdot \nabla\phi(\vec{r}) = \oint d\vec{l} \cdot \frac{d\phi(\vec{r})}{d\vec{l}} = 2\pi n,\quad (143)$$

gdzie n oznacza dowolną liczbę całkowitą. Na tej podstawie równanie (142) uzyskujemy wniosek, iż

$$\iint d\vec{S} \cdot \vec{B} + \frac{m^*c}{(q^*)^2} \oint d\vec{l} \cdot \frac{\vec{j}}{|\Psi|^2} = n \frac{\hbar c}{q^*}\quad (144)$$

Prawa strona równania (144) zawiera wielokrotność tzw. fluksonów

$$\Phi_0 \equiv \frac{\hbar c}{q^*} = \frac{\hbar c}{2e},\quad (145)$$

czyli kwantów strumienia pola magnetycznego. Oznacza to, że pole magnetyczne może wnikać do materiału wyłącznie w postaci skwantowanych porcji strumienia Φ_0 . Wniosek ten jest słuszny również poza zakresem bliskim temperaturze krytycznej T_c .

Ze względu na wartość parametru Ginzburga Landaua χ można wyróżnić następujące rodzaje nadprzewodników:

typ I, gdy $\chi < 1/\sqrt{2}$ (czyli $\xi > \sqrt{2}\lambda$),

typ II, gdy $\chi > 1/\sqrt{2}$ (czyli $\xi < \sqrt{2}\lambda$).

W przypadku nadprzewodników I-ego rodzaju pole magnetyczne jest całkowicie ekranowane w zakresie poniżej wartości krytycznej H_c . Energia powierzchniowa jest dodatnia więc układy te cechują się dużą jednorodnością.

Nadprzewodniki II-ego rodzaju posiadają ujemną energię powierzchniową dlatego powstają w nich defekty topologiczne w postaci wirów kwantowych, gdzie pole magnetyczne częściowo wnika w obszar materiału. Taki zakres fazy mieszanej realizuje się w zakresie pól magnetycznych $H_{c1} < H < H_{c2}$. Wynik ten został przewidziany przez A. Abrikosova w 1957 roku oraz potwierdzony doświadczalnie w latach 70. XX wieku. Wiry kwantowe organizują się w charakterystyczną strukturę typu heksagonalnego.

Nadprzewodnictwo układów fermionowych

W klasycznych nadprzewodnikach temperatura krytyczna T_c zależy od masy izotopowej M atomów sieci krystalicznej poprzez relację

$$T_c \propto M^{-\alpha}, \quad (146)$$

gdzie zazwyczaj współczynnik $\alpha \simeq 0,5$. Taki fakt empiryczny był cenną wskazówką, iż zanik oporu elektronów pasma przewodnictwa jest (w klasycznych nadprzewodnikach) zależny od sieci krystalicznej. Taki wpływ sieci krystalicznej na układ elektronowy jest realizowany poprzez oddziaływania drgań sieci z gazem elektronowym.

1^o. Oddziaływanie elektron-fonon

Potencjał oddziaływania elektronu w położeniu \vec{r}_i z jonom w miejscu \vec{R}_n można przedstawić w postaci

$$V(\vec{r}_i - \vec{R}_n) = V(\vec{r}_i - \vec{R}_n^0) - \nabla V(\vec{r}_i - \vec{R}_n^0) \cdot [\vec{R}_n - \vec{R}_n^0] + \dots \quad (147)$$

gdzie \vec{R}_n^0 oznacza położenie n -tego jonu w stanie równowagi. Drugi wyraz po prawej stronie wzoru (147) opisuje sprzężenie drgań sieci krystalicznej (fononów) z układem elektronowym.

W reprezentacji operatorów drugiej kwantyzacji operator oddziaływania przyjmuje postać

$$\hat{V}_{el-ph} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} U_{\vec{q}}^{el-ph} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \sigma} (\hat{a}_{\vec{q}} + \hat{a}_{-\vec{q}}^\dagger) \quad (148)$$

gdzie $\hat{a}_{\vec{q}}$ są operatorami fononu o pędzie \vec{q} , $\hat{c}_{\vec{k}, \sigma}$ dotyczą elektronów o pędzie \vec{k} i

spinie σ natomiast $U_{\vec{q}}^{el-ph}$ jest elementem macierzowym potencjału ich wzajemnego oddziaływania.

2^o. Transformacja Fröhlicha

Hamiltonian układu elektronów oddziałujących z fononami

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_{ph} + \hat{V}_{el-ph} \quad (149)$$

można w pierwszym kroku zbadać rachunkiem zaburzeniowym względem członu oddziaływania \hat{V}_{el-ph} . Schemat zaburzeniowy oparty na transformacji unitarnej został opracowany w 1950 roku przez H. Fröhlicha [Phys. Rev. **79**, 845 (1950)].

Idea ogólna polega na zastosowaniu transformacji tożsamościowej \hat{U}

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi \\ \hat{U}\hat{H}\psi &= E\hat{U}\psi \\ \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}\hat{U}\psi &= E\hat{U}\psi \\ \hat{\tilde{H}}\tilde{\psi} &= E\tilde{\psi}, \end{aligned} \quad (150)$$

gdzie $\hat{\tilde{H}} = \hat{U}\hat{H}\psi$ oznacza przetransformowany hamiltonian zaś $\tilde{\psi} = \hat{U}\psi$ jest przetransformowaną funkcją falową. Wartości własne są niezmiennicze dla takiej transformacji.

Pomijając szczegóły techniczne analizowany tutaj problem sprzężenia można wyeliminować wybierając

$$\hat{U} \equiv e^{\hat{S}} \quad (151)$$

gdzie antyhermitowski operator generujący jest wybrany jako

$$\hat{S} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} \frac{U_{\vec{q}}^{el-ph}}{\xi_{\vec{k}+\vec{q}} - \xi_{\vec{k}} + \omega_{\vec{q}}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}, \sigma} \hat{a}_{\vec{q}} - \text{h.c.} \quad (152)$$

W powyższym wyrażeniu $\omega_{\vec{q}}$ oznacza zależność energii fononów od pędu zaś $\xi_{\vec{k}}$ jest energią elektronów mierzona od poziomu Fermiego.

W przetransformowanym efektywnym hamiltonianie \tilde{H} energie elektronów a także fononów ulegają renormalizacji. Innym jakościowo bardzo ważnym efektem jest wyindukowanie oddziaływania dwuciałowego pomiędzy elektronami

$$\hat{V}_{eff} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \sum_{\sigma, \sigma'} g_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \hat{c}_{\vec{k}+\frac{\vec{q}}{2}, \sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}'-\frac{\vec{q}}{2}, \sigma'}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}'+\frac{\vec{q}}{2}, \sigma'} \hat{c}_{\vec{k}-\frac{\vec{q}}{2}, \sigma} \quad (153)$$

gdzie potencjał efektywnego oddziaływania ma postać

$$g_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} = \frac{|U_{\vec{q}}^{el-ph}|^2 \omega_{\vec{q}}}{(\xi_{\vec{k}+\vec{q}} - \xi_{\vec{k}})^2 - \omega_{\vec{q}}^2} + \left(\vec{k} \leftrightarrow \vec{k}' \right) \quad (154)$$

Potencjał oddziaływań $g_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}}$ ma charakter przyciągający gdy zakres energii elektronów znajduje się w przedziale o szerokości ω_D (tzn. energii Debye'a) względem poziomu Fermiego.

W rzeczywistości należy uwzględnić również oddziaływania kulombowskie o potencjale

$$V_{Coul}(\vec{q}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(\vec{q}^2 + \kappa^2)} \quad (155)$$

gdzie κ uwzględnia efekty ekranowania. W zakresie energetycznym

$$-\omega_D \leq \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_F \leq \omega_D \quad (156)$$

wyindukowane korekta oddziaływań dwuciałowych może być dominująca, o ile potencjał sprzężenia elekttronowo-fonowego jest odpowiednio duży.

Współczesne metody fizyki teoretycznej umożliwiły potwierdzenie wniosków uzyskane przez Fröhlicha w oparciu o bardziej wyrafinowane metody, takie jak: formalizm Eliashberga (stosowalny w zakresie silnych oddziaływań) oraz niezaburzeniową procedurę ciągłej transformacji kanonicznej.

Dla uproszczenia dalszej analizy przyjmiemy, iż w zakresie określonym warunkiem (156) całkowity potencjał oddziaływań między elektronami charakteryzuje się niemal stałą wartością ujemną

$$V_{total} \simeq -U, \quad (157)$$

która w przybliżeniu wynosi $U \simeq |U^{el-ph}|^2/\omega_D$.

3^o. Problem Coopera

Wpływ oddziaływań przyciągających ma diametralne znaczenie dla zachowania elektronów w otoczeniu powierzchni Fermiego. Po raz pierwszy wykazał ten fakt Leon Cooper [Phys. Rev. **104**, 1189 (1956)] analizując problem dwóch elektronów oddziałujących przyciągająco. Funkcja falowa takich dwóch elektronów może być wybrana w postaci

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_{\vec{k}} \chi_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_2} \quad (158)$$

gdzie współczynniki $\chi_{\vec{k}}$ spełniają równanie

$$\chi_{\vec{k}} = U \sum_{\vec{k}'} \frac{\chi_{\vec{k}'}}{2\xi_{\vec{k}'} - E} \quad (159)$$

Energia E układu takich dwóch przyciągających się elektronów wynosi odpowiednio

$$E \simeq 2\varepsilon_F - 2\omega_D e^{\frac{-2}{U\rho(\varepsilon_F)}}, \quad (160)$$

gdzie $\rho(\varepsilon_F)$ jest gęstością stanów elektronowych na poziomie Fermiego. Wynik (160) wskazuje, iż energia związanych elektronów jest mniejsza od energii elektronów swobodnych. Można więc wnioskować, że „morze Fermiego jest niestabilne względem tworzenia się par elektronowych”, które nazywane są obecnie parami Coopera (o ile proces ten realizuje się w przestrzeni pędowej).

4^o. Mikroskopowa teoria BCS

Badania Fröhlicha oraz Coopera stały się ważnym krokiem w kierunku opracowania całościowej teorii nadprzewodnictwa. Mikroskopową teorię opracowali wspólnie John Bardeen, Leon Cooper oraz Robert Schrieffer [Phys. Rev. **108**, 1175 (1957)], która w swoim charakterze jest teorią średniego pola ale z istotnym uwzględnieniem pozadiagonalnego parametru porządku odpowiedzialnego za spontaniczne łamanie symetrii cechowania.

Poniżej przedstawiony zostanie zarys teorii BCS dla przypadku elektronów oddziałujących potencjałem przyciągającym $-U$ pomiędzy przeciwnie skierowanymi spinami i pędami

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \sigma} - U \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}. \quad (161)$$

W przybliżeniu Hartree-Focka-Bogoliubova wyraz oddziaływań można zredukować do następującej postaci

$$\begin{aligned} -U \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow} &\simeq - \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger U \sum_{\vec{k}'} \langle \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow} \rangle \\ -U \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \rangle \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow} &+ U \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \rangle \langle \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow} \rangle \end{aligned} \quad (162)$$

Wprowadźmy następnie pomocniczy parametr o wymiarze energii

$$\Delta \equiv U \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} \rangle, \quad (163)$$

kiedy (226) przyjmuje postać zredukowanego hamiltonianu BCS

$$\hat{H} \simeq \sum_{\vec{k},\sigma} (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) \hat{c}_{\vec{k},\sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k},\sigma} - \left(\Delta \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger + \text{h.c.} \right) \quad (164)$$

Hamiltonian (164) jest ściśle rozwiązywalny kilkoma równoważnymi metodami. W obecnej dyskusji posłużymy się metodą opartą na unitarnej transformacji Bogoliubova -Valatina diagonalizującej hamiltonian układu.

Idea transformacji polega na zdefiniowaniu pomocniczych operatorów typu fermionowego w postaci superpozycji cząstki i antycząstki

$$\hat{\gamma}_{\vec{k},\uparrow} = u_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} + v_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \quad (165)$$

$$\hat{\gamma}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger = -v_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} + u_{\vec{k}} \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow}^\dagger \quad (166)$$

w bazie których hamiltonian (164) przyjmuje postać diagonalną. Warunek antykomutacji (typowej dla operatorów typu fermionowego) jest uzyskany jeżeli

$$u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1 \quad (167)$$

natomiast wymóg diagonalizacji sprowadza się do warunku

$$u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} \quad (168)$$

W rezultacie współczynniki określone są jako

$$u_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right) \quad (169)$$

$$v_{\vec{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right) \quad (170)$$

gdzie

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\xi_{\vec{k}}^2 + \Delta^2}. \quad (171)$$

W rezultacie Hamiltonian BCS przyjmuje postać

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \sigma} E_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}, \sigma} + \text{const} \quad (172)$$

W wyrażeniach na współczynniki diagonalizacji występuje wielkość Δ . Określimy teraz równanie służące do wyznaczenia tej wielkości

$$\begin{aligned} \Delta &\equiv U \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow} \rangle \\ &= U \sum_{\vec{k}} \left(-u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}, \uparrow} \rangle + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \langle \hat{\gamma}_{-\vec{k}, \downarrow} \hat{\gamma}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \rangle \right) \\ &= U \sum_{\vec{k}} \left(-u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \langle f_{FD}(E_{\vec{k}}) \rangle + u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} [1 - f_{FD}(E_{\vec{k}})] \right) \\ &= U \sum_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} [1 - 2f_{FD}(E_{\vec{k}})] \end{aligned} \quad (173)$$

czyli

$$\Delta = U \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} [1 - 2f_{FD}(E_{\vec{k}})] = U \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} \text{tgh} \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right). \quad (174)$$

Warto omówić dwa skrajne przypadki, dla których można podać analityczne oszacowanie rozwiązanie równania (174).

a) Stan podstawowy ($T \rightarrow 0$)

W granicy temperatury zera bezwzględnej tangens hiperboliczny przyjmuje asymptotyczną wartość +1 zatem

$$\Delta = U \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} = U \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta}{2E_{\vec{k}}} \text{tgh} \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right). \quad (175)$$

Wprowadzając gęstość stanów $\sum_{\vec{k}} \dots = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \dots$ powyższe równanie daje

$$\begin{aligned} 1 &\simeq \frac{U}{2} \rho(\varepsilon_F) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} d\xi \frac{1}{\xi^2 + \Delta^2} \\ &= \frac{U}{2} \rho(\varepsilon_F) \ln \left(\frac{\sqrt{\omega_D^2 + \Delta^2} + \omega_D}{\sqrt{\omega_D^2 + \Delta^2} - \omega_D} \right) \end{aligned} \quad (176)$$

które w granicy $\Delta \ll \omega_D$ implikuje

$$1 \simeq U \rho(\varepsilon_F) \ln \left(\frac{2\omega_D}{\Delta} \right). \quad (177)$$

W rezultacie wartość Δ w stanie podstawowym wynosi

$$\Delta \simeq 2\omega_D e^{\frac{-1}{U\rho(\varepsilon_F)}}. \quad (178)$$

b) Temperatura krytyczna T_c

Zbliżając się do temperatury krytycznej od dołu $\Delta(T) \rightarrow 0^+$. Równanie na przerwę energetyczną

$$1 \simeq \frac{U}{2} \rho(\omega_F) \int_{-\omega_D}^{\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \operatorname{tgh} \left(\frac{\xi}{2k_B T_c} \right) \quad (179)$$

po przecałkowaniu prowadzi odpowiednio do następującego oszacowania

$$k_B T_c \simeq 1,13 \omega_D e^{\frac{-1}{U\rho(\varepsilon_F)}}. \quad (180)$$

Na podstawie (178) i (180) możemy więc zauważyć, że dla klasycznych nadprzewodników wartość $\Delta(T=0)$ skaluje się względem temperatury krytycznej poprzez relację

$$\frac{\Delta(T=0)}{k_B T_c} \simeq \frac{4}{1,13} = 3,52. \quad (181)$$

W przypadku nadprzewodników z anizotropową (tzn. z zależną od kierunków wektora \vec{k}) przerwą energetyczną $\Delta_{\vec{k}}$ wartość takiego ilorazu jest nieco wyższa.

Na przykład w przypadku anizotropii typu fali d wynosi ona około 4.

Stała relacja pomiędzy wartością $\Delta(0)$ oraz T_c wskazuje, iż temperatura przejścia fazowego do stanu nadprzewodzącego jest (w klasycznych nadprzewodnikach) ściśle związana z procesem pojawienia się par fermionowych. Inaczej

mówiąc, temperatura krytyczna T_c jest zdeterminowana przez amplitudę tzw. parametru porządku.

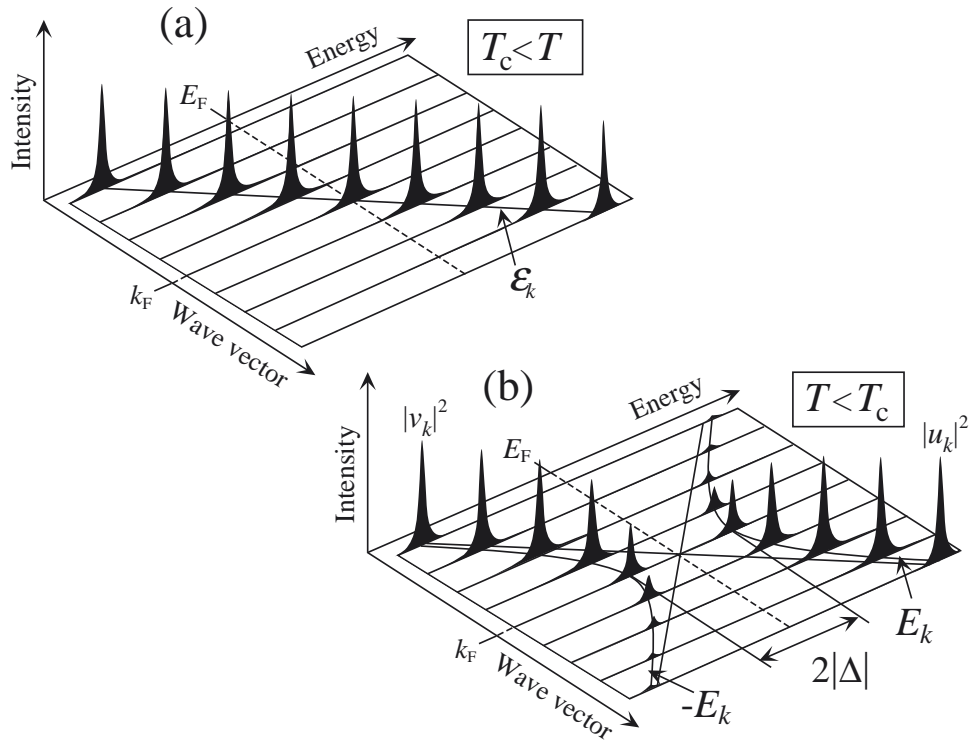
Wiele współczesnych danych doświadczalnych pokazuje natomiast, że powyższe wnioski nie stosują się do nadprzewodników wysokotemperaturowych. Aby to lepiej zrozumieć zbadajmy charakter wzbudzeń jednocząstkowych w stanie nadprzewodzącym.

W tym celu wyznaczmy prawdopodobieństwo obsadzenia poziomu stanu fizycznego charakteryzowanego wektorem falowym \vec{k} . Na podstawie transformacji Bogoliubova Valatina można łatwo sprawdzić, że

$$\begin{aligned} \langle \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}\uparrow} \rangle &= \langle (u_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger + v_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow}) (u_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow} + v_{\vec{k}} \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger) \rangle \\ &= u_{\vec{k}}^2 \langle \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{\gamma}_{\vec{k}\uparrow} \rangle + v_{\vec{k}}^2 \langle \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow} \hat{\gamma}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \rangle \\ &= u_{\vec{k}}^2 f_{FD}(E_{\vec{k}}) + v_{\vec{k}}^2 [1 - f_{FD}(E_{\vec{k}})] \end{aligned} \quad (182)$$

Powyższy wynik (182) sugeruje, że $u_{\vec{k}}^2$ jest amplitudą (prawdopodobieństwem) obsadzenia przez cząstki stanu energetycznego o energii $E_{\vec{k}}$ natomiast $v_{\vec{k}}^2$ dotyczy odpowiednio prawdopodobieństwa obsadzenia dziur (czyli pustych stanów). Widmo dopuszczalnych wzbudzeń dla stanu opisanego wektorem \vec{k} i dowolnej energii ω może więc być przedstawione jako superpozycja stanów cząstkowych i dziurowych

$$A(\vec{k}, \omega) = u_{\vec{k}}^2 \delta(\omega - E_{\vec{k}}) + v_{\vec{k}}^2 \delta(\omega + E_{\vec{k}}) \quad (183)$$



Dołączony rysunek ilustruje charakterystykę widma wzbudzeń stanu nadprzewodzącego (183) prównując je z widmem stanu normalnego. Zauważmy następujące charakterystyczne cechy:

- w zakresie energetycznym $-\Delta \leq \omega \leq \Delta$ wokół energii Fermiego (tutaj oznaczonej jako $\omega = 0$) wzbudzenia jednoelektronowe są wzbronione,
- poza przerwą energetyczną (tzn. dla energii $|\omega| > \Delta$) wzbudzenia cząstkowe są splątane z dziurowymi.

Obie właściwości są konsekwencją faktu, iż w obecnym zagadnieniu rolę efektywnych kwazicząstek pełnią obiekty (nazywane bogoliubonami) zdefiniowane w transformacji Bogoliubova Valatina. Manifestuje się to również w strukturze funkcji falowej stanu podstawowego, który jest określony w następującej postaci

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) |vac\rangle \quad (184)$$

gdzie $|vac\rangle$ oznacza stan próżni.

5^o. Porządek dalekozasięgowy zasięgu

Wraz z pojawieniem się niezerowej wartości przerwy energetycznej Δ jest powiązany bardzo ważny fakt, dotyczący dalekozasięgowych korelacji pomiędzy elektronami. Ma to zasadnicze znaczenie dla kolektywnego zachowywania się elektronów w stanie nadprzewodzącym.

Aby przekonać się o obecności uporządkowania dalekozasięgowego rozpatrzmy następujące dwie wielkości średnie (w sensie statystycznym)

$$\langle \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{r}_1) \hat{c}_\uparrow(\vec{r}_2) \rangle = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \left[u_{\vec{k}}^2 f_{FD}(E_{\vec{k}}) + v_{\vec{k}}^2 f_{FD}(-E_{\vec{k}}) \right] \quad (185)$$

$$\langle \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{r}_1) \hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{r}_2) \rangle = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \left[f_{FD}(E_{\vec{k}}) - f_{FD}(-E_{\vec{k}}) \right] \quad (186)$$

Nawet w granicy $\lim_{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty}$ obie wielkości średnie (185,186) przyjmują różną od zera wartość ! W szczególności przypadek (186) implikuje

$$\lim_{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \rightarrow \infty} \langle \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{r}_1) \hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{r}_2) \rangle \neq 0, \quad (187)$$

co świadczy o nieznikającym (w przestrzeni położeniowej jak również względem czasu) skorelowaniu ruchu elektronów i dziur. Taką wielkość nazywa się poza-diagonalnym parametrem porządku ODLRO (*off-diagonal long range order*). Dalszą istotną konsekwencją porządku pozadiagonalnego jest również mechanizm Higgasa odpowiedzialny za zjawisko Meissnera (problem ten dyskutowany jest w oddzielnym rozdziale).

W związku z uporządkowaniem dalekiego zasięgu przerwa energetyczna Δ jest niekiedy żargonowo nazywana parametrem porządku. Jest to w pełni uzasadnione dla nadprzewodników klasycznych, których temperatura prześcia $T_c \propto \Delta$. Zupełnie inna sytuacja ma miejsce w nadprzewodnikach wysokotemperaturowych, gdzie przerwa energetyczna nie zanika nawet w dużym zakresie temperatur powyżej T_c . Pary elektronowe tworzą się w przestrzeni rzeczywistej dlatego sens parametru porządku może być wówczas zdefiniowany poprzez

$$\langle \hat{c}_{m\uparrow}^\dagger \hat{c}_{n\downarrow}^\dagger \rangle \equiv |\chi| e^{i\phi}, \quad (188)$$

gdzie m oraz n oznaczają położenia \vec{r}_m, \vec{r}_n sąsiednich węzłów sieci krystalicznej, zaś amplituda $|\chi|$ parametru porządku (188) determinuje przerwę energetyczną. Istnieje przekonanie, że temperatura krytyczna nadprzewodników wysokotemperaturowych charakteryzuje warunki ustalenia się koherencji (zgodności) fazowej par elektronowych. Inaczej mówiąc, powyżej T_c faza ϕ parametru porządku staje się chaotyczną dlatego zanika uporządkowanie dalekiego zasięgu.

Opis zagadnienia nadprzewodnictwa w ujęciu formalizmu całek po trajektoriach

Termodynamiczne właściwości układu fizycznego opisanego arbitralnym hamiltonianem \hat{H} mogą być jednoznacznie określone w oparciu o znajomość wielkiej sumy statystycznej

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \\ &= \sum_n \langle n | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | n \rangle \end{aligned} \quad (189)$$

gdzie $\beta = (k_B T)^{-1}$, zaś $|n\rangle$ oznacza zestaw funkcji stanowiących bazę zupełną opisywanego problemu. Zazwyczaj jako baza wybierana jest reprezentacja liczby obsadzeń. Zamiast takiego wyboru można jednak posłużyć się (nadzupełną) bazą tzw. *stanów koherentnych* zdefiniowanych jako wektory własne operatorów anihilacji i kreacji pól fermionowych

$$\hat{c} |\psi\rangle = \psi |\psi\rangle, \quad (190)$$

$$\langle\psi| \hat{c}^\dagger = \langle\psi| \bar{\psi}. \quad (191)$$

W powyższych wyrażeniach (190,191) wielkości ψ oraz $\bar{\psi}$ są *liczbami Grassmanna* spełniającymi właściwości antykomutacyjne.

Wyznaczenie wielkiej sumy statystycznej (189) w oparciu o formalizm stanów koherentnych $|\psi\rangle$ oraz $\langle\psi|$ sprowadza się do całkowania po zmiennych grassmannowskich

$$Z = \int d\bar{\psi} d\psi e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i} \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} | n \rangle, \quad (192)$$

gdzie czynnik $e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i}$ kompensuje nadzupełność bazy stanów koherentnych. Po elementarnych przekształceniach suma statystyczna (192) wyraża się jako

$$Z = \int D(\bar{\psi}, \psi) e^{-S[\bar{\psi}, \psi]} \quad (193)$$

gdzie działanie euklidesowskie S jest zdefiniowane przez

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau [\bar{\psi} \partial_\tau \psi + H(\bar{\psi}, \psi) - \mu N(\bar{\psi}, \psi)] \quad (194)$$

z formalnym oznaczeniem

$$D(\bar{\psi}, \psi) \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M d\bar{\psi}_i d\psi_i \quad (195)$$

i fermionowymi warunkami brzegowymi $\psi(\beta) = -\psi(0)$, $\bar{\psi}(\beta) = -\bar{\psi}(0)$.

Całkowanie względem urojonego czasu $\tau = it$ wygodnie jest wykonać przechodząc do współrzędnych Fouriera

$$\psi(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \psi(i\omega_n) \quad (196)$$

$$\bar{\psi}(\tau) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\omega_n} e^{i\omega_n \tau} \bar{\psi}(i\omega_n) \quad (197)$$

z fermionowymi częstościami Matsubary $\omega_n = (2n + 1)\pi\beta^{-1}$ ze względu na warunki antyperiodyczności względem τ . Przy pomocy takich współrzędnych uzyskujemy wówczas

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\tau \bar{\psi} \partial_\tau \psi &= \int_0^\beta d\tau \left[\frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\omega_n} e^{i\omega_n \tau} \bar{\psi}(i\omega_n) \right] \partial_\tau \left[\frac{1}{\sqrt{\beta}} \sum_{i\omega_n} e^{-i\omega_n \tau} \psi(i\omega_n) \right] \\ &= \sum_{i\omega_n, i\omega_m} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau (-i\omega_m) e^{i(\omega_n - \omega_m)\tau} \bar{\psi}(i\omega_n) \psi(i\omega_m). \end{aligned} \quad (198)$$

Tożsamość matematyczna

$$\frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - \omega_m)\tau} = \delta_{m,n} \quad (199)$$

implikuje następnie, że

$$\int_0^\beta d\tau \bar{\psi} \partial_\tau \psi = \sum_{i\omega_n} (-i\omega_n) \bar{\psi}(i\omega_n) \psi(i\omega_n). \quad (200)$$

Podobnie można wprowadzić transformaty Fouriera dla hamiltonianu oraz członu $\mu N(\bar{\psi}, \psi)$ uzyskując w rezultacie działanie o następującej strukturze

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int d\vec{r} \sum_{i\omega_n} \left[\bar{\psi}(\vec{r}, i\omega_n) \left(-i\omega_n - \mu - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi(\vec{r}, i\omega_n) + V_{int}[\bar{\psi}, \psi] \right] \quad (201)$$

gdzie V_{int} jest wyrazem opisującym oddziaływania dwuciałowe.

Problem analizy stanu nadprzewodzącego sprowadza się do zbadania wpływu oddziaływań. W praktyce interesuje nas efektywne oddziaływania o charakterze przyciągającym, które może być indukowane wymianą fononów, magnonów lub innych bozonowych cząstek pośredniczących. Prowadzą one do powstawania par, które zachowują się w sposób kolektywny. Jako nietrywialną ilustrację rozpatrzmy przypadek efektywnego potencjału punktowego

$$U(\vec{r} - \vec{r}') = -g \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (202)$$

gdzie $g > 0$ oznacza amplitudę potencjału sił przyciągających. Hamiltonian

$$\hat{H} = \sum_\sigma \int d\vec{r} \hat{c}_\sigma^\dagger(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \mu \right) \hat{c}_\sigma(\vec{r}) - g \int d\vec{r} \hat{c}_\uparrow^\dagger(\vec{r}) \hat{c}_\downarrow^\dagger(\vec{r}) \hat{c}_\downarrow(\vec{r}) \hat{c}_\uparrow(\vec{r}) \quad (203)$$

w reprezentacji stanów koherentnych prowadzi do działania

$$S[\bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \left[\sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma(\vec{r}, \tau) \left(\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi_\sigma(\vec{r}, \tau) - g \bar{\psi}_\uparrow(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\downarrow(\vec{r}, \tau) \psi_\downarrow(\vec{r}, \tau) \psi_\uparrow(\vec{r}, \tau) \right] \quad (204)$$

Główny problem w analizie działania (204) wynika z obecności wyrazu oddziaływania (*quartic term*), który jest niecałkowalny. Człon ten można ściśle wyeliminować wprowadzając pomocnicze pola typu bozonowego. W kontekście

zagadnienia nadprzewodnictwa tego typu pomocnicze pole bozonowe mogą być zdefiniowane w kanale parowania poprzez następującą transformację Hubbarda-Stratonovicha

$$\begin{aligned}
& e^{g \int d\tau \int d\vec{r} \bar{\psi}_\uparrow(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\downarrow(\vec{r}, \tau) \psi_\downarrow(\vec{r}, \tau) \psi_\uparrow(\vec{r}, \tau)} \\
&= \int D[\bar{\Delta}, \Delta] e^{-\int d\tau \int d\vec{r} \left[\frac{1}{g} |\Delta(\vec{r}, \tau)|^2 - \bar{\Delta}(\vec{r}, \tau) \psi_\downarrow(\vec{r}, \tau) \psi_\uparrow(\vec{r}, \tau) - \Delta(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\uparrow(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\downarrow(\vec{r}, \tau) \right]}, \quad (205)
\end{aligned}$$

gdzie

$$D[\bar{\Delta}, \Delta] \equiv \frac{1}{2\pi i g} d\bar{\Delta} d\Delta. \quad (206)$$

Po zastosowaniu transformacji Hubbarda-Stratonovicha działanie (204) redukuje się do całkowalnej postaci biliniowej

$$Z[\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi] = \int D(\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi) e^{-S[\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi]} \quad (207)$$

gdzie

$$\begin{aligned}
S[\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \left[\sum_\sigma \bar{\psi}_\sigma(\vec{r}, \tau) \left(\partial_\tau - \mu - \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \right) \psi_\sigma(\vec{r}, \tau) + \frac{1}{g} |\Delta(\vec{r}, \tau)|^2 \right. \\
\left. - \bar{\Delta}(\vec{r}, \tau) \psi_\downarrow(\vec{r}, \tau) \psi_\uparrow(\vec{r}, \tau) - \Delta(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\uparrow(\vec{r}, \tau) \bar{\psi}_\downarrow(\vec{r}, \tau) \right]. \quad (208)
\end{aligned}$$

Dodatkowym kosztem jest jednak konieczność uwzględnienia bozonowego pola parowania $\Delta(\vec{r}, \tau)$.

Dla bardziej zwartej zwartej zapisu wprowadźmy spinorową notację Nambu

$$\bar{\Psi} \equiv (\bar{\psi}_\uparrow, \psi_\downarrow) \quad (209)$$

$$\Psi \equiv \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \bar{\psi}_\downarrow \end{pmatrix} \quad (210)$$

Przy takim oznaczeniu uzyskujemy, że

$$\bar{\Delta}\psi_{\downarrow}\psi_{\uparrow} + \Delta\bar{\psi}_{\uparrow}\bar{\psi}_{\downarrow} = \bar{\Psi} \begin{pmatrix} 0 & \Delta \\ \bar{\Delta} & 0 \end{pmatrix} \Psi \quad (211)$$

oraz

$$\sum_{\sigma} \bar{\psi}_{\sigma} (\partial_{\tau} - \mu - h(\vec{r})) \psi_{\sigma} = \bar{\Psi} \begin{pmatrix} \partial_{\tau} + h(\vec{r}) - \mu & 0 \\ 0 & \partial_{\tau} - h(\vec{r}) - \mu \end{pmatrix} \Psi \quad (212)$$

gdzie $h(\vec{r}) \equiv \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m}$ oraz wykorzystaliśmy całkowanie przez części dla fermionowego pola spinów $\sigma = \downarrow$. Reasumując, działanie (208) przyjmuje następujący skrótowy zapis

$$S[\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi] = \int d\tau \int d\vec{r} \left\{ \bar{\Psi}(\vec{r}, \tau) \begin{pmatrix} \partial_{\tau} + h(\vec{r}) - \mu & -\Delta \\ -\bar{\Delta} & \partial_{\tau} - h(\vec{r}) + \mu \end{pmatrix} \Psi(\vec{r}, \tau) + \frac{|\Delta(\vec{r}, \tau)|^2}{g} \right\} \quad (213)$$

Zdefiniujmy teraz dodatkowo operator

$$G(\vec{r}, \tau) \equiv \begin{pmatrix} \partial_{\tau} + h(\vec{r}) - \mu & -\Delta \\ -\bar{\Delta} & \partial_{\tau} - h(\vec{r}) + \mu \end{pmatrix}^{-1} \quad (214)$$

który w kwantowej teorii pola ma sens jednocząstkowej funkcji Greena. Suma statystyczna może być wówczas zapisana jako

$$Z[\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi] = \int D(\bar{\Delta}, \Delta, \bar{\psi}, \psi) e^{-\int d\tau \int d\vec{r} \left[\frac{|\Delta(\vec{r}, \tau)|^2}{g} - \bar{\Psi}(\vec{r}, \tau) G^{-1}(\vec{r}, \tau) \Psi(\vec{r}, \tau) \right]}. \quad (215)$$

Obecną biliniową postać (215) można ściśle wycałkować względem zmiennych grassmannowskich. Dla przejrzystości przejdźmy ponadto do współrzędnych pędowych \vec{k} (zamiast położeniowych \vec{r}) oraz częstości Matsubary $i\omega_n$ (zamiast czasu urojonego τ). Jako pouczający przykład rozpatrzmy przypadek statycznego, jednorodnego pola bozonowego

$$\Delta(\vec{r}, \tau) \simeq \Delta_0, \quad (216)$$

który jest określany jako tzw. przybliżenie punktu siodłowego. Uwzględniając tożsamość

$$\begin{aligned} & \int d\tau \int d\vec{r} \bar{\Psi}(\vec{r}, \tau) G^{-1}(\vec{r}, \tau) \Psi(\vec{r}, \tau) \\ &= \beta^{-1} \sum_{i\omega_n} \sum_{\vec{k}} \bar{\Psi}(\vec{k}, i\omega_n) \begin{pmatrix} i\omega_n - \xi_{\vec{k}} & \Delta_0 \\ \bar{\Delta}_0 & i\omega_n + \xi_{\vec{k}} \end{pmatrix} \Psi(\vec{k}, i\omega_n) \end{aligned} \quad (217)$$

gdzie $\xi_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m - \mu$, otrzymujemy ostatecznie

$$Z = \exp \left\{ -\frac{|\Delta_0|^2}{g} + \ln \det G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) \right\} \quad (218)$$

Symbol wyznacznika dotyczy w obecnym zapisie zarówno współrzędnych pędowych \vec{k} , Matsubary $i\omega_n$ oraz spinorów Nambu. Oznacza to, że

$$\begin{aligned} \det G^{-1}(\vec{k}, i\omega_n) &= \beta^{-1} \sum_{i\omega_n} \sum_{\vec{k}} [(i\omega_n)^2 - \xi_{\vec{k}}^2 - |\Delta_0|^2] \\ &= \beta^{-1} \sum_{i\omega_n} \sum_{\vec{k}} [(i\omega_n)^2 - E_{\vec{k}}^2], \end{aligned} \quad (219)$$

gdzie

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right)^2 + |\Delta_0|^2} \quad (220)$$

jest charakterystyczną zależnością dyspersyjną kwazicząstek w teorii BCS.

Przejsie do termodynamiki odbywa się poprzez przyporządkowanie energii swobodnej według następującej standardowej relacji

$$Z = e^{-\beta F}. \quad (221)$$

Warunek służący do ustalenia statycznej i jednorodnej wartości pola parowania $\Delta(\vec{r}, \tau) = \Delta_0$ określimy minimalizując energię swobodną względem Δ_0

$$\frac{\partial F}{\partial \bar{\Delta}_0} = 0. \quad (222)$$

Wyznaczając pochodną energii swobodnej

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \bar{\Delta}_0} &= \frac{\partial}{\partial \bar{\Delta}} \left(-\frac{\Delta_0 \bar{\Delta}_0}{g} + \sum_{\vec{k}} \beta^{-1} \sum_{i\omega_n} \ln [(i\omega_n)^2 - E_{\vec{k}}^2] \right) \\ &= -\frac{\Delta_0}{g} + \sum_{\vec{k}} \beta^{-1} \sum_{i\omega_n} \frac{\Delta_0}{\omega_n^2 + E_{\vec{k}}^2} \\ &= -\frac{\Delta_0}{g} + \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta_0}{2E_{\vec{k}}} \operatorname{tgh} \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right) \end{aligned} \quad (223)$$

uzyskujemy znane równanie teorii BCS na przerwę energetyczną

$$\Delta_0 = g \sum_{\vec{k}} \frac{\Delta_0}{2E_{\vec{k}}} \operatorname{tgh} \left(\frac{E_{\vec{k}}}{2k_B T} \right). \quad (224)$$

Wymierną korzyścią wynikającą z formalizmu całek po trajektoriach jest stosunkowo łatwa możliwość wyjścia poza schemat średniego pola (czyli rozwiązanie punktu siodłowego). W tym celu można uwzględnić wpływ fluktuacji pola parowania względem statycznej i jednorodnej wartości Δ_0 . Zakładając, iż fluktuacje te są niewielkie możemy napisać

$$\Delta(\mathbf{r}, \tau) = \Delta_0 + \delta\Delta(\mathbf{r}, \tau) \quad (225)$$

i następnie rozwinąć energię swobodną względem fluktuacji $\delta\Delta(\vec{r}, \tau)$ do dowolnej potęgi. Na ogół analiza wpływu fluktuacji kwantowych staje się dość skomplikowana dlatego tego typu postępowanie jest zwykle wykorzystywane do dyskusji fluktuacji kwadratowych (tzw. poprawek gaussowskich).

Nie mniej jednak zwróćmy uwagę, iż formalnie wyrażenie na działanie (213) jest ściśle i ten aspekt jest również cenny w sytuacjach, gdy zachodzi konieczność badania nadprzewodnictwa w układach z silnym potencjałem oddziaływań

parujących. Sformułowanie całek po trajektoriach jest więc bardzo pomocne w każdej próbie wyjścia poza ograniczenia przybliżenia średniego pola. Jest to między innymi wykorzystywane w numerycznych procedurach kwantowych symulacji komputerowych (QMC).

Faza Wilczka

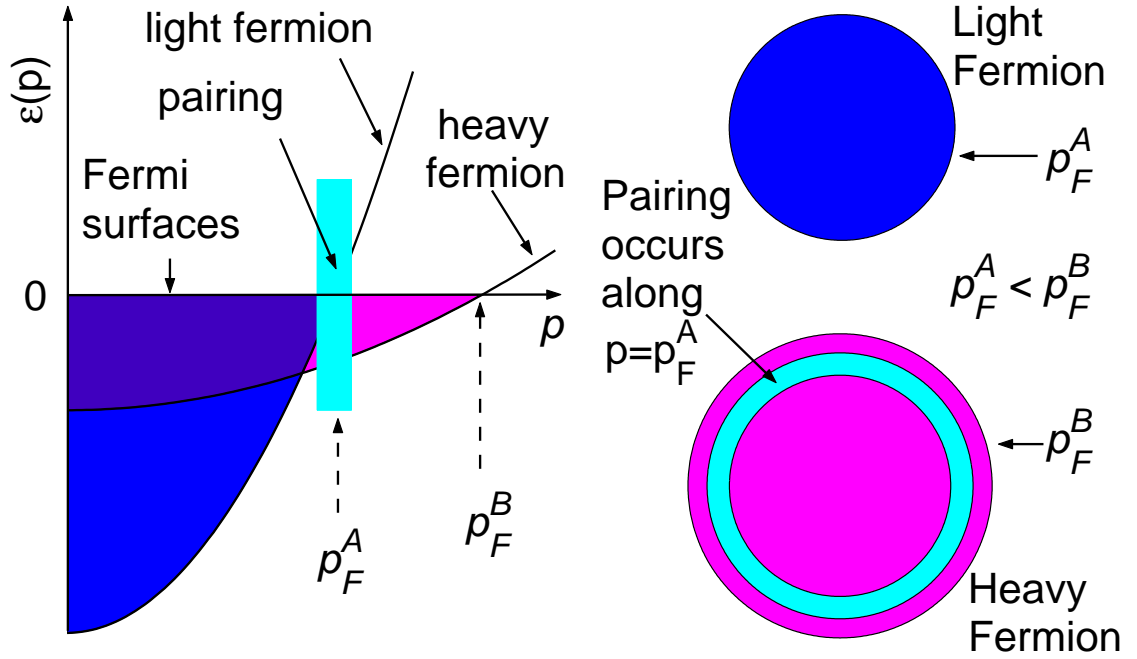
Zjawisko tworzenia się par i ewentualnej nadciekłości/nadprzewodnictwa cząstek typu fermionowego nie jest ograniczone jedynie do układów elektronowych w materii skondensowanej. Realizuje się ono również wśród nukleonów (w fizyce jądrowej) w układach ultrazimnych atomów (w fizyce atomowej i sieciach optycznych) a także pomiędzy kwarkami (w subjądrowej fizyce opisanej chromodynamiką kwantową).

Jako szczególny i dość egzotyczny wariant stanu nadprzewodzącego /nadciekłego przeanalizowany był przypadek, gdy parujące fermiony bardzo znacznie różnią się masami. W materii kwarkowej taka sytuacja mogłaby mieć miejsce na przykład dla mieszaniny lekkich kwarków u i ciężkich kwarków s . W ultrazimnych gazach atomowych mogłaby być realizowana dla mieszaniny lekkich atomów ${}^6\text{Li}$ i ciężkich atomów ${}^{40}\text{K}$. Nietypowe cechy tego typu stanu nadciekłego/nadprzewodzącego przeanalizowali Frank Wilczek ze współpracownikami [Phys. Rev. Lett. **90**, 047002 (2003)].

Z formalnego punktu widzenia problem nadprzewodnictwa może w dalszym ciągu opisać hamiltonianem typu BCS

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} \sum_{\sigma=A,B} (\varepsilon_{\vec{k}}^{\sigma} - \mu^{\sigma}) \hat{c}_{\vec{k},\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k},\sigma} - g \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k},A}^{\dagger} \hat{c}_{-\vec{k},B}^{\dagger} \hat{c}_{-\vec{k}',B} \hat{c}_{\vec{k}',A}, \quad (226)$$

gdzie rolę liczby kwantowej σ odgrywają dwa rodzaje fermionów o odpowiednich (różniących się) masach m_A oraz m_B . W pierwszych pracach Franka Wilczka na ten temat (w kontekście kwarków s i u) rozpatrzono szczególną sytuację, gdy $m_A < m_B$ i $\mu_A > \mu_B$.



Ze względu na różne pędy Fermiego dla cząstek lekkich p_F^A oraz ciężkich p_F^B problem tworzenia par staje się skomplikowany. Gdyby pary były tworzone z poszczególnych powierzchni Fermiego, to całkowity pęd par musiałby być różny od zera. Taki wariant (stan Larkina Ovchinnikova Fulde Ferrella) jest bardzo słabo stabilny. Innym potencjalnym wariantem zaproponowanym przez F. Wilczka był stan podstawowy typu

$$|\text{gr. state}\rangle = \prod_{|\vec{k}| \leq k_\Delta} \left(u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k},A}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k},B}^\dagger \right) \prod_{|\vec{k}| > k_\Delta} \hat{c}_{\vec{k},B}^\dagger |vac\rangle. \quad (227)$$

Lekkie fermiony z otoczenia powierzchni Fermiego $|\vec{k}| \sim k_F^A$ łączą się w tym przypadku w pary o całkowitym pędzie zero (podobnie jak w standardowej teorii BCS) przy współudziale ciężkich fermionów, które znajdują się poniżej swojej powierzchni Fermiego. Ze względu na parowanie stanów położonych głęboko po powierzchni Fermiego określono taki stan jako tzw. *interior superfluidity*.

Mechanizm Andersona Higgsa

Na bardzo istotną konsekwencję spowodowaną pojawieniem się parametru porządku

$$\Delta(\vec{r}, t) = |\Delta(\vec{r}, t)| e^{-\phi(\vec{r}, t)} \quad (228)$$

zwrócił uwagę P.W Anderson. Amplituda $|\Delta(\vec{r}, t)|$ znajduje odzwierciedlenie w przerwie energetycznej (mierzalnej za pomocą takich doświadczalnych tunelowania jak STM, ARPES) natomiast faza ma znaczenie dla przepływu ładunku (w postaci superprądów) jeżeli nadprzewodnik umieszczony zostanie w zewnętrznym polu elektromagnetycznym $\vec{A}(\vec{r}, t)$.

Układ elektronowy umieszczony w polu elektromagnetycznym doznaje wpływu pola, co efektywnie modyfikuje operator energii kinetycznej do następującej postaci

$$\hat{T} = \int d\vec{r} \sum_{\sigma} \frac{1}{2m} \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left[-i\hbar\nabla - e\vec{A}(\vec{r}, t) \right]^2 \hat{c}_{\sigma}(\vec{r}) \quad (229)$$

Człon ten jest oczywiście niezmienniczy ze względu na transformację cechowania

$$\hat{c}_{\sigma}(\vec{r}) \rightarrow e^{i\alpha(\vec{r})} \hat{c}_{\sigma}(\vec{r}) \quad (230)$$

$$\hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \rightarrow e^{-i\alpha(\vec{r})} \hat{c}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \quad (231)$$

$$\vec{A}(\vec{r}, t) \rightarrow \vec{A}(\vec{r}, t) + \frac{\hbar}{2e} \nabla\alpha(\vec{r}). \quad (232)$$

Cechowanie ma jednak również wpływ na parametr porządku, który na poziomie mikroskopowym może być zdefiniowany jako

$$\Delta(\vec{r}, t) = U \langle \hat{c}_{\downarrow}(\vec{r}) \hat{c}_{\uparrow}(\vec{r}) \rangle. \quad (233)$$

Uwzględnienie transformacji cechowania prowadzi do

$$\Delta(\vec{r}) \rightarrow e^{2i\alpha(\vec{r})} \Delta(\vec{r}), \quad (234)$$

czyli faza parametru porządku ulega przeskalowaniu do

$$\phi(\vec{r}) \rightarrow \phi(\vec{r}) + 2\alpha(\vec{r}). \quad (235)$$

W oparciu o standardowe wyrażenie na gęstość prądu możemy zauważyć, że gradient fazy $\nabla\phi(\vec{r})$ implikuje powstawanie superądów. Daje to dodatkowy wkład do energii swobodnej

$$F_s = F_n + \int d\vec{r} \frac{\rho_s}{2} (\nabla\phi(\vec{r}))^2, \quad (236)$$

gdzie ρ_s oznacza tzw. sztywność fazową. Taki dodatkowy wyraz nie jest niestety niezmienniczy na transformację cechowania. Energia swobodna transformuje się w następujący sposób:

$$\begin{aligned} F_s &\rightarrow F_n + \int d\vec{r} \frac{\rho_s}{2} \left(\nabla\phi(\vec{r}) - \frac{2e}{\hbar} \vec{A}(\vec{r}) \right)^2 \\ &= F_n + \int d\vec{r} \frac{Q}{2} \left(\vec{A}(\vec{r}) - \frac{\hbar}{2e} \nabla\phi(\vec{r}) \right)^2, \end{aligned} \quad (237)$$

gdzie $Q = (2e)^2 \rho_s / \hbar^2$.

Ponieważ F_n jest niezmiennicze na transformację cechowania więc można przededefiniować potencjał wektorowy pola elektromagnetycznego do postaci

$$\vec{\tilde{A}}(\vec{r}, t) \equiv \vec{A}(\vec{r}, t) - \frac{\hbar}{2e} \nabla\alpha(\vec{r}). \quad (238)$$

Z chwilą jednak gdy parametr porządku (ściślej mówiąc faza parametru porządku) jest "połknięty" dochodzi do wygenerowania wyrazu "masowego"

$$F_s = F_n + \int d\vec{r} \frac{4e^2 \rho_s}{2\hbar^2} \left(\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2. \quad (239)$$

Taki wyraz masowy jest odpowiedzialny za efekt Meissnera zaś odwrotność parametru sztywności fazowej bezpośrednio określa głębokość wnikania pola magnetycznego.

Pod względem formlnym bardziej szczegółowe omówienie wspomnianego tutaj mechanizmu Andersona Higgsa można znaleźć np. w rozdz. 4.4 monografii: John W. Negele and Henri Orland, *Quantum Many-Particle Systems* Perseus Books, Reading (1998).

Przejście od stanu BCS do BEC (*crossover*)

Nadprzewodnictwo cząstek typu fermionowego jest zagadnieniem, które do chwili obecnej stanowi jeden z głównych nurtów badań fizyki. Poza różnymi (egzotycznymi) mechanizmami odpowiedzialnymi za efektywne oddziaływania przyciągające zainteresowanie wzbudza również problem ewolucji stanu układu, gdy potencjał sił przyciągających zmienia się od infinitesimalnie małych do bardzo dużych wartości. Na pierwszy rzut oka tak postawione zagadnienie wydaje się czysto abstrakcyjne. Dzięki jednak rozwojowi technik chłodzenia i wykorzystaniu rezonansów Feshbacha do atomów typu fermionowego (w praktyce najczęściej potasu ^{40}K i litu ^6Li) można za pomocą pola magnetycznego kontrolować i w dowolny sposób zmieniać wartość potencjału efektywnych oddziaływań. Tym samym szereg teoretycznych przewidywań może być teraz poddane weryfikacji.

Dla głębszego zrozumienia postawionego wyżej problemu wykorzystajmy modelowy hamiltonian w postaci

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \sigma} (\varepsilon_{\vec{k}} - \mu) \hat{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}, \sigma} - U \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \hat{c}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}', \downarrow} \hat{c}_{\vec{k}', \uparrow}. \quad (240)$$

i załóżmy, że oddziaływania przyciągające dotyczą wszystkich fermionów w układzie. Jako pomocną skalę energetyczną wprowadźmy energię Fermiego, która dla trójwymiarowego gazu swobodnych cząstek wynosi

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}} \equiv k_B T_F, \quad (241)$$

gdzie n oznacza całkowitą koncentrację fermionów o spinie \uparrow i \downarrow . Analogicznie można wprowadzić promień kuli Fermiego

$$k_F = (3\pi^2 n)^{\frac{1}{3}} \quad (242)$$

jako skalę porównawczą dla pędów cząstek. Potencjał oddziaływań wyrazimy natomiast poprzez tzw. długość rozpraszania a zdefiniowaną w następującej relacji

$$U = \frac{2\pi\hbar^2 a}{m}. \quad (243)$$

1^o. Granica BCS

Jako punkt wyjściowy przedstawimy najpierw rozwiązanie w granicy małego potencjału U , czyli w sytuacji opisywalnej mikroskopową teorią BCS. W granicy słabych oddziaływań przyciągających morze Fermiego traci stabilność z powodu powstawania par (tzw. par Coopera).

Według oszacowania teorii BCS dopuszczalne wzbudzenia energetyczne elektronów mają postać $E_{\vec{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + \Delta^2}$, gdzie przerwa energetyczna jest zdefiniowana jako

$$\Delta \equiv U \sum_{\vec{k}} \langle \hat{c}_{-\vec{k},\downarrow} \hat{c}_{\vec{k},\uparrow} \rangle. \quad (244)$$

Wyznaczenie przerwy energetycznej (244) oraz podobnych uśrednionych statystycznie wielkości wymaga całkowania po wszystkich stanach pędowych. Aby całkowanie było dobrze określone (nierozbieżne) konieczne jest dokonanie tzw. regularyzacji. Pod względem technicznym wątek ten można ująć wprowadzając zrenormalizowany potencjał \tilde{U}

$$\frac{1}{\tilde{U}} = \frac{m}{4\pi\hbar^2 a} - \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2}. \quad (245)$$

wynikający z niskoenergetycznej granicy dwu-ciałowej macierzy T . Rozbieżność jest wówczas usunięta poprzez narzucenie obcięcia całki do granicy górnej (tzw. *ultraviolet cutoff*).

W rezultacie teoria BCS dla stanu podstawowego daje następujący warunek na przerwę energetyczną

$$\frac{m}{4\pi\hbar^2 a} = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left(\frac{m}{\hbar^2 k^2} - \frac{1}{2E_{\vec{k}}} \right), \quad (246)$$

zaś potencjał chemiczny jest określony równaniem

$$n = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}} \right). \quad (247)$$

W przypadku słabych oddziaływań i dla odpowiednio dużej koncentracji fermionów położenie potencjału chemicznego jest w przybliżeniu równoważne energii Fermiego $\mu \sim \varepsilon_F$. Oszacowanie przerwy energetycznej dla stanu podstawowego w granicy BCS daje

$$\Delta \simeq \frac{8}{e^2} \varepsilon_F e^{\frac{\pi}{2k_F a}} \quad (248)$$

gdzie w tym wypadku $e \simeq 2,71$. Temperatura krytyczna (czyli temperatura, poniżej której pojawia się niezerowa przerwa energetyczna) wynosi wówczas odpowiednio

$$T_c \simeq 0,28 T_F e^{\frac{\pi}{2k_F a}}. \quad (249)$$

Fakt, iż przerwa energetyczna jest znacznie mniejsza od energii Fermiego sprawia, że pędowy rozkład cząstek $n_{\vec{k}}$ przypomina w takich warunkach funkcję schodkową $\theta(k_F - k)$ z nieznacznym rozmyciem wokół promienia Fermiego.

2^o. Granica BEC

Sytuacja fizyczna ulega jakościowej zmianie, gdy rozpatrujemy granicę silnego oddziaływania U (lub ewentualnie przypadek bardzo małej koncentracji fermionów). Zwiększając U (lub zmniejszając n) potencjał chemiczny określony warunkiem (247) stopniowo obniża swoje położenie względem energii Fermiego. Przy odpowiednich warunkach jego położenie wypada poniżej dostępnych poziomów energetycznych fermionów. Przypadek $\mu \sim 0$ (tzw. granica unitarna) jest bardzo trudny do analizy zajmiemy się więc ekstremalnym przypadkiem, gdy poziom chemiczny jest znacznie poniżej dna pasma energetycznego fermionów.

Uwzględniając dostępne wzbudzenia energetyczne $E_{\vec{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\vec{k}} - \mu)^2 + \Delta^2} \simeq \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}$ rolę efektywnej przerwy w widmie spełnia wówczas

$$\Delta_{gap} = \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}. \quad (250)$$

Poziom chemiczny w granicy BEC można w przybliżeniu utożsamiać jako połowę energii wiązania sparowanych molekuł

$$\mu \simeq -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (251)$$

dlatego

$$\Delta \simeq \sqrt{\frac{16}{3\pi k_F a}} \varepsilon_F \ll |\mu|. \quad (252)$$

Efektywna przerwa energetyczna w widmie wynosi więc ostatecznie

$$\Delta_{gap} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} + \frac{3a\pi\hbar^2 n}{m}. \quad (253)$$

Pędowa dystrybucja fermionów, która dla stanu postawowego jest dana przez znany wzór teorii BCS $n_{\vec{k}} = 2v_k^2 = 1 - \frac{\varepsilon_{\vec{k}}}{E_{\vec{k}}}$, przyjmuje zależność

$$n_{\vec{k}} = \frac{4(k_F a)^3}{3\pi(1 + k^2 a^2)^2}. \quad (254)$$

W granicy BEC $n_{\vec{k}}$ asymptotycznie dąży więc do zależności typu $1/k^4$, która w diametralny sposób odróżnia się od właściwości granicy BCS.

Z fizycznego punktu widzenia rozpatrywany tutaj przypadek bardzo dużej energii oddziaływań parujących prowadzi do powstawania ciasno związanych par. Tworzenie się par samo w sobie nie gwarantuje, że w układzie powstanie stan nadprzewodzący/nadciekły. Warunkiem koniecznym do zaistnienia takiego stanu jest kondensowanie ciasno związanych par. Aby określić jaki wpływ na temperaturę kondensacji ma potencjał parowania możemy zauważyć, że masa efektywna par jest proporcjonalna do U (mobilność par jest tym trudniejsza im ciasniej są związane ze sobą fermiony). Z tego powodu temperatura krytyczna monotonicznie maleje ze wzrostem potencjału U . Bardziej szczegółowa analiza teoretyczna oszacowuje, że

$$T_c \sim \exp \left[\frac{-1}{U\rho(\varepsilon_F)} \right]. \quad (255)$$

3^o. Cechy uniwersalne

Powyżej zarysowana analiza wykazała jakościowo odmienne właściwości stanu nadprzewodzącego/nadciekłego w granicach BCS (dla słabego potencjału parującego U) i BEC (gdy powstają ciasno związane pary, które mogą ewentualnie kondensować w sensie Bosego-Einsteina). Owe cechy charakterystyczne stopniowo przechodzą jedne w drugie wraz ze zmianą wartości potencjału U .

Zagadnienie ciągłej ewolucji (w terminologii anglojęzycznej określanej jako *BCS to BEC crossover*) było analizowane przez szereg znakomitych fizyków. Historycznie rzecz ujmując, istotny wkład do tego rodzaju badań wnieśli:

- 1) D. Eagles [Phys. Rev. **186**, 456 (1969)]

Jako pierwszy wskazał na możliwość parowania bez konieczności nadprzewodnictwa w układach o bardzo małej koncentracji elektronów.

- 2) A.J. Leggett [„Modern trends in the theory of condensed matter”, Springer-Verlag, Berlin (1980)]

Wykazał identyczność funkcji falowej stanu podstawowego BCS z funkcją falową skondensowanych molekuł dwuatomowych.

- 3) P. Nozieres, S. Schmitt-Rink, [J. Low Temp. Phys. **59**, 195 (1985)]

Wyznaczyli zależność T_c od potencjału U stosując przybliżenie macierzy T .

- 4) R. Micnas, J. Ranninger, S. Robaszkiewicz,

[Rev. Mod. Phys. **62**, 113 (1990)]

Wprowadzili pojęcie ”niekoherentnych par” dla nieskondensowanych ciasno związanych par i różnymi metodami wyznaczyli diagram fazowy układu względem temperatury i U .

- 5) Sa de Mello, M. Randeria, J. Engelbrecht [Phys. Rev. Lett. **71**, 3202 (1993)]

Sformułowali problem przejścia od stanu BCS do BEC za pomocą formalizmu całek funkcjonalnych.

Jednym z poważniejszych idei stymulujących badania problematyki *crossover* była praca A. Leggetta, który wykazał podobieństwo funkcji falowej BCS

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\vec{k}} \left(u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}\uparrow}^\dagger \hat{c}_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger \right) |\text{vac}\rangle \quad (256)$$

do funkcji falowej kondensatu Bosego-Einsteina ciasno związanych molekuł dwuskładnikowych (np. lokalnych par elektronowych lub di-atomowych stanów molekularnych). Dla kondensatu działanie operatorów cząstek jest równoważne domnażaniu przez liczby zespolone $\hat{b}_0 \simeq b_0$ oraz $\hat{b}_0^\dagger \simeq b_0^*$ dlatego funkcję $N_p = \frac{N}{2}$ skondensowanych par (gdzie N oznacza liczbę fermionów tworzących pary) można wyrazić w postaci

$$|\text{BEC}\rangle = \exp(\sqrt{N_p} b_0^*) |\text{vac}\rangle \quad (257)$$

Szczególnie klarowne uzasadnienie struktury (257) jest możliwe we ujęciu funkcjonalnym, odwołując się do bozonowych stanów koherentnych.

Z dokładnością do czynnika normującego można pokazać, że funkcja (256) jest identyczna z funkcją (257) jeżeli dla współczynników $u_{\vec{k}}$, $v_{\vec{k}}$ teorii BCS użyjemy następującego podstawienia

$$v_{\vec{k}} = \frac{N_p}{\sqrt{1 + N_p}}, \quad (258)$$

$$u_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{1 + N_p}}. \quad (259)$$

Analiza zagadnienia *crossover* jest w ostatnich latach nadal kontynuowana przy cennym wykorzystaniu metod opartych na symulacjach numerycznych.

Literatura

- 1) C.J. Pethick, H. Smith,
Bose-Einstein condensation in dilute gases,
Cambridge University Press, Cambridge (2008).
- 2) L. Pitaevskii, S. Stringari,
Bose-Einstein condensation,
Claredon Press, Oxford (2003).
- 3) A. Griffin,
Excitations in a Bose-condensed liquid,
Cambridge University Press, Cambridge (1993).
- 4) G.D. Mahan,
Many-particle physics,
Kluwer Academic Plenum Publ., N. York (2000).
- 5) I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger,
Many-body physics with ultracold gases,
Rev. Mod. Phys. 80, 885 (2008).
- 6) A. Griffin, T. Nikuni, E. Zaremba,
Bose-condensed gases at finite temperatures,
Cambridge University Press, Cambridge (2009).