KoKoJevy

Rozměr Cooperova páru

David Linhart

Ústav fyziky kondenzovaných látek

1 Zadání

Střední kvadratický poloměr Cooperova páru je definovaný jako:

$$\rho^2 = \frac{\int r^2 |\psi(\boldsymbol{r})|^2 d^3\boldsymbol{r}}{\int |\psi(\boldsymbol{r})|^2 d^3\boldsymbol{r}}, \tag{1}$$

kde $\psi(\boldsymbol{r})$ je vlnová funkce Cooperova páru definovaná následovně:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} g_{\boldsymbol{k}}, \tag{2}$$

kde velikost vektoru $\boldsymbol{r}$ je relativní vzdálenost mezi elektrony tvořícími Cooperův pár, koeficienty $g_{\boldsymbol{k}}$ odpovídají Fourierově transformaci relativního pohybu oněch elektronu a udávají pravděpodobnost nalezení jednoho elektronu s vlnovým vektorem $\boldsymbol{k}$ a druhého s $-\boldsymbol{k}$.

Naším úkolem je vyjádřit:

1. střední kvadratický poloměr pomocí koeficientů $g_{\boldsymbol{k}}$ z výrazu pro vlnovou funkci Cooperova páru
2. střední poloměr Cooperova páru pomocí vazebné energie a Fermiho rychlosti s využitím $g_{\boldsymbol{k}}$ z přednášky

$$g_{\boldsymbol{k}} = \frac{C}{2\varepsilon - 2E_F - E_b} \tag{3}$$

2 Vyjádření pomocí $g_{\boldsymbol{k}}$

Začneme přirozeně s tím, že uvedené výrazy pro vlnovou funkci dosadíme do obou integrálů. Pro integrál v čitateli postupujeme následovně:

- Přesuneme $\sqrt{\Omega}$ před integrál, protože ta na $\boldsymbol{r}$ samozřejmě nezávisí a zároveň si rozepíšeme druhou mocniny sumy na součin dvou komplexně sdružených sumy.
- Poté využijeme rovností $\nabla_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} = i r e^{i\boldsymbol{kr}}$ a $\nabla_{\boldsymbol{k'}} e^{-i\boldsymbol{k'r}} = -i r e^{-i\boldsymbol{k'r}}$ čímž se zbavíme členu r^2.
- V dalším kroku využijeme následujícího obratu:

$$\sum_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}} \nabla_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} \rightarrow \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} g_{\boldsymbol{k}} \nabla_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} d^3\boldsymbol{k} =$$

$$\oiint_{S(V)} \mathbf{F}\, \mathrm{d}\mathbf{S} = \iiint_V \nabla \mathbf{F}\, \mathrm{d}V \quad \Big| \quad \nabla_{\boldsymbol{k}}(g_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}}) = g_{\boldsymbol{k}} \nabla_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} + e^{i\boldsymbol{kr}} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}$$

$$\rightarrow \iiint_V g_{\boldsymbol{k}} \nabla_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} d^3\boldsymbol{k} = \oiint_{S(V)} g_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} d^3\boldsymbol{k}\, \mathrm{d}\mathbf{S} - \iiint_V e^{i\boldsymbol{kr}} d^3\boldsymbol{k} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}$$

$$= \underbrace{\frac{\Omega}{(2\pi)^3} \oiint_{S(V)} g_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}}\, \mathrm{d}\mathbf{S}}_{0} - \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\boldsymbol{kr}} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}} d^3\boldsymbol{k} \rightarrow \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}$$

  abychom dostali výraz s $e^{i\boldsymbol{kr}}$ mimo působení gradientu a naopak působily gradientem na $g_{\boldsymbol{k}}$. Integrál přes plochu je roven 0, protože: $\left|e^{i\boldsymbol{kr}}\right| \leq 1;\ \ g_{\boldsymbol{k}} \approx 0$ dál než kousek od Fermiho koule.
- Tím jsme osamostatnili výrazy $e^{i\boldsymbol{kr}}$ a $e^{-i\boldsymbol{k'r}}$ a zároveň jsme se zbavili ostatních závislostí na r po zaměnění pořadí sumace a integrace[1] tak můžeme provést integraci, která nám dá Kroneckerovo delta.
- Tím se z dvojité sumy stane jednoduchá a můžeme výraz zjednodušit do výsledného tvaru.

$$\int r^2 |\psi(\boldsymbol{r})|^2 d^3\boldsymbol{r} = \int r^2 \left| \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} g_{\boldsymbol{k}} \right|^2 d^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\Omega} \int r^2 \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} g_{\boldsymbol{k}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}}\, e^{i\boldsymbol{kr}} e^{-i\boldsymbol{k'r}} d^3\boldsymbol{r}$$

$$= \frac{1}{\Omega} \int \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} g_{\boldsymbol{k}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}}\, r e^{i\boldsymbol{kr}} r e^{-i\boldsymbol{k'r}} d^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\Omega} \int \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} g_{\boldsymbol{k}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}}\, \nabla_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} \nabla_{\boldsymbol{k'}} e^{-i\boldsymbol{k'r}} d^3\boldsymbol{r}$$

$$= \frac{1}{\Omega} \int \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} e^{i\boldsymbol{kr}} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}\, e^{-i\boldsymbol{k'r}} \nabla_{\boldsymbol{k'}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}} d^3\boldsymbol{r} \ = \frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} \overbrace{\int e^{i\boldsymbol{kr}} e^{-i\boldsymbol{k'r}} d^3\boldsymbol{r}}^{\Omega \delta_{\boldsymbol{kk'}}} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}\ \nabla_{\boldsymbol{k'}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}}$$

$$= \frac{\Omega}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} \nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}\ \nabla_{\boldsymbol{k}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}} \left|\nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}\right|^2$$

Postup pro integrál ve jmenovateli je v podstatě stejný:

$$\int |\psi(\boldsymbol{r})|^2 d^3\boldsymbol{r} = \int \left| \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{kr}} g_{\boldsymbol{k}} \right|^2 d^3\boldsymbol{r} = \frac{1}{\Omega} \int \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} g_{\boldsymbol{k}} g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}}\, e^{i\boldsymbol{kr}} e^{-i\boldsymbol{k'r}} d^3\boldsymbol{r}$$

$$= \frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k'}} \overbrace{\int e^{i\boldsymbol{kr}} e^{-i\boldsymbol{k'r}} d^3\boldsymbol{r}}^{\Omega \delta_{\boldsymbol{kk'}}} g_{\boldsymbol{k}}\ g^{\dagger}_{\boldsymbol{k'}} = \frac{\Omega}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}\ g^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} = \sum_{\boldsymbol{k}} |g_{\boldsymbol{k}}|^2$$

Podělením obou integrálů dostáváme výraz pro střední kvadratický poloměr Cooperova páru:

$$\rho^2 = \frac{\sum_{\boldsymbol{k}} \left|\nabla_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}}\right|^2}{\sum_{\boldsymbol{k}} |g_{\boldsymbol{k}}|^2}. \tag{4}$$

[1] Tiše předpokládáme, že jako obvykle máme funkce vhodně zavedené, abychom mohly řadu funkcí integrovat člen po členu, tedy že splňují Lebesgue's Dominated Convergence Theorem.

3 Vyjádření pomocí vazebné energie a Fermiho rychlosti

- Začneme přirozeně s tím, že do výrazu odvozeného v minulé části dosadíme závislost $g_{\boldsymbol{k}}$ z přednášky (3) a rovnou vytkneme konstantu C před sumu.
- V dalším kroku přejdeme ze sumy přes $\boldsymbol{k}$ na integrál z energie, do integrálu nesmíme opomenout přidat hustotu stavů $D(\varepsilon)$ a pro $\nabla_{\boldsymbol{k}}$ využijeme následující vztah:[2]

$$\frac{\partial}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\frac{\partial}{\partial k}\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\frac{\hbar^2 k}{m} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon}\hbar\frac{\hbar k}{m} = \hbar\frac{\partial}{\partial \varepsilon}v(\varepsilon) \tag{5}$$

- V dalším postupu předpokládáme, že vzhledem k tomu, že jsem blízko Fermiho mezi, tak můžeme použít $D(\varepsilon) = D(E_F)$ a $v(\varepsilon) = v_F$. Spolu s tím, se nám upraví i meze integrálu na slupku nad Fermiho energií o šířce dané energií fononů.
- V dalším kroku zavedeme substituci $\xi = \varepsilon - E_F$, platí tedy:
  - $2\varepsilon - 2E_F - E_b = 2\xi - E_b$
  - Spodní mez $\varepsilon = E_F \to \xi = 0$
  - Horní mez $\varepsilon = E_F + \hbar\omega_d \to \xi = \hbar\omega_d$
- V dalším kroku je už jednoduché výraz v integrálu v čitateli zderivovat. Z výsledku vytkneme -2 před integrál.
- Zavedeme další substituci tentokrát $u = 2\xi - E_b$, platí:
  - Spodní mez $\xi = 0 \to u = -E_b$
  - Horní mez $\xi = \hbar\omega_d \to u = 2\hbar\omega_d - E_b$ vzhledem k tomu, že $\hbar\omega_d \gg E_b$[3] můžeme oproti E_b považovat tuto mez za $\approx \infty$.
- V dalších krocích už výraz pouze zintegrujeme a upravíme do patřičného tvaru.

$$\rho^2 = \frac{\sum_{\boldsymbol{k}}\left|\nabla_{\boldsymbol{k}}\frac{C}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right|^2}{\sum_{\boldsymbol{k}}\left|\frac{C}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right|^2} = \frac{C^2\sum_{\boldsymbol{k}}\left|\nabla_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right|^2}{C^2\sum_{\boldsymbol{k}}\left|\frac{1}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right|^2} = \frac{\int_0^\infty D(\varepsilon)\hbar^2\left[\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left(\frac{1}{2\varepsilon-2E_F-E_b}v(\varepsilon)\right)\right]^2 d\varepsilon}{\int_0^\infty D(\varepsilon)\left[\frac{1}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right]^2 d\varepsilon}$$

$$= \frac{D(E_F)\hbar^2 v_F^2\int_{E_F}^{E_F+\hbar\omega_D}\left[\frac{\partial}{\partial\varepsilon}\left(\frac{1}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right)\right]^2 d\varepsilon}{D(E_F)\int_{E_F}^{E_F+\hbar\omega_D}\left(\frac{1}{2\varepsilon-2E_F-E_b}\right)^2 d\varepsilon} = \frac{(\hbar v_F)^2\int_0^{\hbar\omega_d}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{1}{2\xi-E_b}\right)\right]^2 d\xi}{\int_0^{\hbar\omega_d}\left(\frac{1}{2\xi-E_b}\right)^2 d\xi}$$

$$= \frac{(\hbar v_F)^2\int_0^{\hbar\omega_d}\left(\frac{-2}{(2\xi-E_b)^2}\right)^2 d\xi}{\int_0^{\hbar\omega_d}\left(\frac{1}{2\xi-E_b}\right)^2 d\xi} = 4(\hbar v_F)^2\frac{\int_{-E_b}^\infty u^{-4}2du}{\int_{-E_b}^\infty u^{-2}2du} = 4(\hbar v_F)^2\frac{\left[\frac{u^{-3}}{-3}\right]_{-E_b}^\infty}{\left[\frac{u^{-1}}{-1}\right]_{-E_b}^\infty} = \frac{4}{3}(\hbar v_F)^2\frac{E_b^{-3}}{E_b^{-1}} = \frac{4}{3}\frac{(\hbar v_F)^2}{E_b^2}$$

Nakonec výsledek odmocníme a dostaneme vztah pro střední poloměr Cooperova páru, po dosazení typických hodnot $v_F = 10^6$ ms^{-1} a $E_b = 1$ meV pro supravodiče, můžeme řádově odhadnout rozměr Cooperova páru.

$$\rho = \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{\hbar v_F}{E_b} \approx \frac{2}{\sqrt{3}}\frac{6,582\cdot 10^{-13}\text{ meVs }\cdot 10^6\text{ ms}^{-1}}{1\text{ meV}} \approx 0,75\,\mu\text{m} \tag{6}$$

[2]Záměnu gradientu za obyčejnou parciální derivaci si můžeme dovolit zejména díky jednoduché (sfĕricky symetrické) parabolické disperzní relaci, kterou máme, protože se stále nacházíme v jednom pásu, pro energii $\varepsilon_{\boldsymbol{k}}$ v pásu $\boldsymbol{k}$, platí: $\varepsilon_{\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

[3]V E_b stejně jako v $k_b T_c$ vystupuje faktor $e^{-1/\lambda}$, který oba faktory, výrazně zmenší oproti $\hbar\omega_d$.