HIBRID RENDSZEREK TRANSZPORT TULAJDONSÁGAI

Koltai János

Eötvös Loránd Tudományegyetem, Természettudományi Kar Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

Témavezető: Dr. Cserti József, kandidátus, egyetemi docens



PhD értekezés

ELTE TTK, Fizika Doktori Iskola

Statisztikus fizika, biológiai fizika és kvantumrendszerek fizikája program Iskolavezető: Dr. Horváth Zalán, az MTA rendes tagja, tanszékvezető egyetemi tanár Programvezető: Dr. Vicsek Tamás, az MTA rendes tagja, tanszékvezető egyetemi tanár

Budapest, 2004.

KINGA ANNÁNAK

Köszönetnyilvánítás

Ehelyütt a visszaemlékezés eufórikus sorainak kellene állnia. Az elmúlt évek élményei megszépülve, rózsaszínen tárulnak elénk. Csak szép és jó történt velünk. Ám valójában, mint mindenki, én is órákat várakoztam témavezetőimre, rámtörtek olykor a csüggedés hullámai, ha egy számolás elakadt, vagy a számítógép szórakozott velem. Bámultak értetlenkedve a felismerés pillanatában, miközben dadogva próbáltam elmagyarázni nekik, amit már régen tudtak. A munka közben akadtak felejthetetlen élmények is, mint például az általános képletünk megünneplése magyar témavezetőmmel, Cserti Józseffel, avagy a nagy kirakós játék angol témavezetőm, Colin J. Lambert szobájának padlóján, térdelve az ábrák tengerében.

Elismerésem és tiszteletem ennek a két embernek, akiktől rengeteget tanultam, mint fizikus és mint ember egyaránt. Az ő gondolkodásuk a világról és a fizikáról erősen vonzott. ("Megházasodni másodrendű fázisátalakulás, szülővé válni elsőrendű fázisátalakulás.")

Köszönet a Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék munkatársainak és doktoranduszainak, külön köszönet Csordás Andrásnak, Dervadelin Gergelynek és Pollner Péternek dolgozatom beadás előtti átolvasásáért és értékes észrevételeikért.

A legfőbb csodálatom és szerelmem feleségemnek, Annának, aki lelkesített a disszertáció megírása során ("Írjad!"), és elviselte morgásaimat és dühkitöréseimet munkám során. Remek társ és kitűnő támasz Ő nekem.

IV

Tartalomjegyzék

1.	Bev	rezetés	1		
	1.1.	Mezoszkopikus rendszerek	2		
		1.1.1. Nanotechnológia és káoszkutatás	2		
		1.1.2. Mezoszkopikus rendszerek típusai	2		
		1.1.3. Normál–szupravezető hibrid rendszerek	5		
	1.2.	Normál–szupravezető hibrid rendszerek	5		
		1.2.1. Szupravezetés	5		
		1.2.2. Fáziskoherencia szupravezetők jelenlétében	$\overline{7}$		
	1.3.	Spintronika	8		
	1.4.	A dolgozat felépítése	10		
2.	Hib	rid rendszerek leírása	11		
	2.1.	A Bogoljubov–de Gennes-egyenlet	12		
	2.2.	Homogén szupravezető	16		
	2.3.	Andrejev-visszaverődés	19		
	2.4.	Részecske- és töltésáramok	24		
	2.5.	Az önkonzisztens megoldásokról	27		
3.	Negatív hosszúságú pályák 29				
	3.1.	Bevezetés	30		
	3.2.	A szórási mátrix	33		
		3.2.1. Az üres cső Green-függvénye	34		
		3.2.2. A pontszerű szennyező esete	34		
		3.2.3. A szupravezető határfeltétel illesztése	36		
	3.3.	Szemiklasszikus közelítés hibrid rendszerben	38		
	3.4.	Eredmények	40		
	3.5.	Összefoglalás	44		
4.	And	lrejev-biliárdok	45		
	4.1.	Bevezetés	46		
	4.2.	Szekuláris egyenlet hibrid rendszerekre	48		

	4.2.1. A dobozbiliárd szekuláris egyenlete	52
4.3.	Weyl-formula hibrid rendszerekre	53
	4.3.1. Weyl-formula dobozbiliárdra	54
4.4.	Az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítése	56
	4.4.1. NS dobozbiliárd	58
4.5.	Eredmények	60
	4.5.1. Korongbiliárd	61
	4.5.2. Sarokbiliárd	65
4.6.	Összefoglalás	67
5. Ne:	m-lokális áramok	69
5.1.	Bevezetés	70
5.2.	Modell	71
5.3.	Eredmények	76
	5.3.1. Geometriai optimalizálás	76
	5.3.2. Rezonáns transzport	80
	5.3.3. Mágneses tér szerepe	81
5.4.	Összefoglalás	82
Függe	lék	83
А.	Visszatérési valószínűségek kiszámítása	83
	A.1. Dobozbiliárd	84
	A.2. Korongbiliárd	84
В.	A Green-függvény kiszámítása rácson	86
	B.1. Rekurzív Green-függvény módszer	86
	B.2. Decimálás	88
	B.3. Félvégtelen cső Green-függvénye	90
С.	Szórási mátrix	93

Irodalomjegyzék

1. fejezet

Bevezetés

1.1. Mezoszkopikus¹ rendszerek

1.1.1. Nanotechnológia és káoszkutatás

A XX. század utolsó évtizedeiben a transzport jelenségek vizsgálatának kedvelt rendszereivé a mezoszkopikus rendszerek váltak. A terület különösen intenzíven fejlődött, mivel az ipari technológiák és a tudományos érdeklődés látványosan egymásra találtak és kölcsönösen egymásra is voltak utalva. A technológiai fejlődés, a félvezetőipar technikai tökéletesítése és fejlesztése meghatározóan a miniatürizálás irányában haladt. Egyre bonyolultabb és összetettebb szerkezetek előállításának igénye lépett fel. Az általánosan elfogadott Moore-törvény szerint az egyetlen csipbe integrált alkatrészek száma exponenciálisan növekszik az évek múlásával [3], ami értelemszerűen együtt jár a méreteik csökkenésével is. Míg az első tranzisztorok (1947 után) jellemzően cm-es nagyságúak, addig például a 2002-ben forgalomba hozott Intel Itanium 2 processzor [4] 38, 5 mm × 38, 5 mm × 3, 447 mm térfogatában 221 millió tranzisztort zsúfoltak össze. Az alkalmazott technológia 0, 18 μ m vastagságú "drótokból" építkezik, és egy tranzisztor karakterisztikus mérete 0, 25 μ m. A méretek csökkenése már önmagában is érdekes kérdéseket vet fel. Meddig írható le a transzport a klasszikus Boltzmann-egyenletekkel? Mikor lehet megfigyelni kvantummechanikai effektusokat, például elektronelektron interferenciát?

Másfelől a káoszkutatók is érdeklődni kezdtek a nanoszerkezetek vezetési jelenségei iránt. A káoszkutatás a XX. századi tudomány egyik fontos és inspiratív területe. A rend és a káosz (rendezetlen) vetélkedése jelen van mindennapjainkban, a minket körülölelő természetes és mesterséges környezetben. Klasszikusan egy rendszert akkor nevezünk kaotikusnak, ha az egyébként determinisztikus egyenletek megoldásaként kapott trajektóriák az időben exponenciálisan távolodnak egymástól. Másképpen fogalmazva van a rendszernek pozitív Ljapunov-exponense [5]. A kvantumkáosz kutatói arra a kérdésre keresték a választ, hogy létezik-e káosz a kvantummechanikában [6]. Hogyan lehet itt a káoszt mérni, miközben trajektóriákról nincs is értelme beszélni? Hogyan nyilvánul meg a kvantummechanikában az, hogy a rendszer klasszikus megfelelője kaotikus? A kapott elméleti eredmények kísérleti ellenőrzésére eleinte kevés esély mutatkozott, a kvantumkáosz jeleit csak elektromágneses térbe helyezett Rydberg-atomok mozgásának illetve mikrohullámú üregrezonátorok rezgési módusainak tanulmányozásakor mutatták ki [7]. A mezoszkopikus rendszerek hasznos eszköznek bizonyultak a kvantumkáosz kísérleti megfigyelésére is, ezért a nanotechnológia és a káoszkutatás egymást támogató, együttesen fejlődő területté váltak.

1.1.2. Mezoszkopikus rendszerek típusai

Az egyes rendszereket a jellegzetes hosszúságaik aránya alapján osztályozhatjuk. Makroszkopikus rendszerekben a rendszer L mérete sokkal nagyobb a $\lambda_{\rm F}$ de-Broglie hullámhossznál (a vezetésben résztvevő elektronok mozgási energiájából $\lambda_{\rm F} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE_{\rm F}}}$), a $\lambda_{\rm el}$ rugalmas szabad úthossznál (a szennyezőkön egymást követő ütközések között megtett út átlagos hossza) és az L_{φ} fáziskoherencia-hossznál (az a távolság, amelyen az elektron fázisa lényegesen nem változik meg). A mikroszkopikus rendszerekben $L \ll \lambda_{\rm F}, L_{\varphi}$ teljesül. A

 $^{^{1}}$ Az elnevezés vélhetőleg van Kampentől származik [1]. Mezoszkopikus közelítésnek azt az eljárást nevezte, amikor a mikroszkopikus egyenletek felírása és megoldása helyett a makroszkopikus egyenletekben a fluktuációkat véletlen zajjal veszik figyelembe [2].



1.1. ábra. Példák mezoszkopikus rendszerekre. A középső és a jobb oldali ábrán a fehér csík 1μ m-nek felel meg. Az ábrákat rendre [9] [10b] illetve [11b] cikkekből vettem.

két eset között található az úgynevezett mezoszkopikus tartomány, amire az elnevezés – mesos görögül középsőt, közepest jelent – is utal. Ezen rendszerek mérete nagyobb a de-Broglie hullámhossznál, de kisebb a fáziskoherencia-hossznál, emiatt a transzport során a fáziskoherenciából származó jelenségek megjelenését várjuk. Ilyen rendszerek kísérletileg is elérhetők, sőt a félvezetőipar fejlődése révén nagy jelentőséggel bírnak. Különböző félvezetőkből egymásra rétegeket növesztve úgynevezett heteroszerkezeteket lehet előállítani. Ezekben a félvezető rétegek határán az elektronok mozgása merőleges irányban gátolt lehet, ezért a határrétegben egy kétdimenziós elektrongáz (2DEG) alakulhat ki. Az elektron-fonon illetve elektron-elektron kölcsönhatásokat átlagtérrel helyettesítve az egész rendszert Bloch-elektronok szabad gázának tekinthetjük. Az irodalom ezeket a kvázirészecskéket is egyszerűen elektronként szokta említeni. Az első kísérletekben alkalmazott GaAs/AlGaAs heteroszerkezetben az elektronok effektív tömege a szabad elektron nyugalmi tömegének 0,067-szerese, a töltéshordozók sűrűségének tipikus értéke $n_{\rm s} \sim 3 \times 10^{11} \, \frac{1}{\rm cm^2}$. A kétdimenziós elektrongázban az állapotsűrűség a Fermi-energiától függő állandó, ahonnan ezekben a rendszerekben a de-Broglie hullámhossz körülbelül 40 nm-nek adódik. A fáziskoherencia-hossz a kísérletekben ($100 \,\mathrm{mK} - 4 \,\mathrm{K}$ hőmérsékleteken) elérhette akár a $10\,\mu\text{m}$ nagyságot is, de beszámoltak már szobahőmérsékleten becsült $0, 12\,\mu\text{m-es}$ fáziskoherencia-hosszról is [8]! Ha a vizsgált heteroszerkezeten kialakított rendszer mérete néhány tized mikron és pár mikron közé esik, akkor az elméleti mezoszkopikus tartományban vagyunk és a fáziskoherens jelenségek szerepe nem lesz elhanyagolható. A méreteket összevetve az Intel által alkalmazott technológia adataival láthatjuk, hogy az iparban már igen közel járnak a mezoszkopikus tartományhoz.

A mezoszkopikus rendszereket a szennyezés mértéke szerint is csoportokba lehet osztani. Az erősen szennyezett rendszerekben a rugalmas szabad úthossz kicsi, ilyenkor a vezetőképességet a szennyezőkön bekövetkező ütközések szabják meg. Ezeket diffúz rendszereknek nevezzük. Ha egy félvezető doppolása 10^{-18} cm³, akkor a szennyező atomok átlagos távolsága 10 nm, emiatt például egy 0, 1 µm élű kockában csak N = 1000 szennyező atom van. A szennyezők száma a kiválasztott térfogatban \sqrt{N} -nel eltérhet az átlagtól, ami a doppolás 3,3%-ának felel meg. Mivel a vezetés a szennyezőkön való ütközésektől függ, a szennyezők sűrűségének nagy fluktuációja miatt a vezetés mintáról mintára különböző, amit a sokaságátlagolás hiányának neveznek a mezoszkopikus rendszerekben.

A kevéssé szennyezett, ún. ballisztikus rendszerekben a rugalmas szabad úthossz nagyobb a rendszer





a.) A kísérletben mért ellenállás a kapufeszültség függvényében valamint a pont-kontaktus vázlatos rajza.

b.) A vezetőképesség a kapufeszültség függvényében, a drótok ellenállásának levonása után. A platók a $(12,9 \, \mathrm{k} \Omega)^{-1}$ többszöröseinél találhatók.

1.2. ábra. Kvantált vezetőképesség mezoszkopikus pont-kontaktusban. A pont-kontaktus szélességét a kapufeszültséggel lehet a mérésekben változtatni. Az ábrákat a [12] hivatkozásból vettem.

méreténél, ekkor a vezetést a falakon és kontaktuson történő ütközések határozzák meg. Egy makroszkopikus drótdarab vezetőképessége az Ohm-törvény szerint arányos a vezető keresztmetszetével (W) és egy anyagra jellemző állandóval (σ), illetve fordítottan arányos a drót hosszával (L)

$$G = \sigma \frac{W}{I}$$

Ballisztikus mezoszkopikus drótok esetében a kísérletek új jelenségeket mutattak, amelyeket az Ohm-törvény nem írt le helyesen [12,13]. A vezetőképesség a hosszúság csökkenésével nem divergált, hanem egy M/12,9 k Ω értékhez tartott, ahol M a drót vastagságával arányos mennyiség. A drót vastagságának csökkentésekor a vezetőképesség is (12,9 k $\Omega)^{-1}$ lépésekben csökkent. Az előbbi jelenséget kontakt ellenállásnak nevezik, az utóbbi a kvantummechanikai leírásból a nyitott csatornák számának diszkrét változását jelzi. Mindkét jelenséget sikeresen magyarázza a Landauer-formula, melyet először *Landauer* korrelálatlan hőtartályokhoz kapcsolódó, két kontaktusú, normál rendszerekre írt fel [14]:

$$G = \frac{2e^2}{h}MT,$$

ahol e az elemi töltés, h a Planck-állandó, M a nyitott csatornák száma a drótban és végül T az elektronok átjutási valószínűsége a drót egyik végétől a másikig. A $2e^2/h$ faktor éppen megegyezik a kísérletekben tapasztalt $(12, 9k\Omega)^{-1}$ ugrásokkal. A Landauer-formulát *Büttiker* általánosította több hőtartály (terminál) és terminálonként több be- illetve kimenő módus esetére [15]. *Baranger és Stone* a lineáris válaszelmélet alapján kiterjesztette a formalizmust mágneses térbe helyezett rendszerek esetére is [16].

A fáziskoherencia miatt egy sor új és érdekes jelenség lép színre, mint például az univerzális vezetőképesség-fluktuáció, az Aharonov-Bohm effektus, vagy éppen a gyenge lokalizáció. Az új jelenségek jelentős részét a véletlen mátrix elmélet illetve szemiklasszikus közelítések segítségével sikerült megmagyarázni. A mezoszkopikus fizikáról remek összefoglalókat olvashatunk, melyek közül *Datta* [17] illetve *Ferry és* *Goodnick* [8] elsősorban a transzport folyamatokra helyezte a hangsúlyt, míg *Jalabert* [18] illetve *Richter* [19] a szemiklasszikus közelítés irányából nyújt áttekintést.

1.1.3. Normál–szupravezető hibrid rendszerek

A már említett kettősség jegyében kétféle motivációnk is lehet normál fém és szupravezető tartományokból álló mezoszkopikus rendszerek – ezeket nevezzük normál–szupravezető hibrid vagy röviden hibrid rendszereknek – tanulmányozására. Egyfelől a nanotechnológiában az egyik legfőbb probléma a komplexitás és az eszközsűrűség növekedésével a keletkező hő elvezetése. Megoldásként ott is termlszetesen vetődik fel szupravezetők alkalmazása az áramok disszipációmentes továbbítására. A mezoszkopikus kísérletekben szokásos alacsony hőmérsékleteken több fém (pl. *Nb*) egyébként is szupravezetővé válik. Másfelől *Beenakker és munkatársai* azt találták, hogy a normál–szupravezető hibrid rendszerek energiaszintjei lényegesen eltérnek aszerint, hogy a normál tartomány klasszikusan integrálható vagy kaotikus [20,21]. Eredményeik alapján eljárást javasoltak normál biliárdok integrálhatóságának eldöntésére; a vizsgálandó normál biliárdot egy szupravezetővel kell érintkezésbe hozni és az így létrejövő hibrid rendszer – ún. Andrejev-biliárd – energiaszintjeit kell tekinteni. Ha a normál rendszer klasszikusan integrálható, akkor az Andrejev-biliárd állapotsűrűsége lineárisan indul, míg a kaotikus esetben egy mini-gap (a "mini" jelző a szupravezető gaptől való megkülönböztetésre szolgál) található a Fermi-energián. A továbbiakban hibrid rendszerekről lesz szó, ezért először röviden bemutatom a szupravezetés jelenségét, majd a fáziskoherencia szerepét szupravezető részeket is tartalmazó mezoszkopikus rendszerekben.

1.2. Normál–szupravezető hibrid rendszerek

1.2.1. Szupravezetés

A "szupravezetés" és "szupravezető" szavak azon ritka fizikai fogalmak közé tartoznak, amelyek a laikusokat is képesek lázba hozni. Az érdeklődés érthető, hiszen a gazdasági élet résztvevőinek nagyon csábítóan hangzik az ellenállás nélküli vezetés, a veszteség nélküli szállítás lehetősége. Ennek ellenére a szupravezetők¹ térhódítása a vártnál sokkal lassúbb, 2003-ban – az utóbbi évek jelentős növekedése mellett is – még csak 2,8G€ a szupravezető piac teljes forgalma (összehasonlításul a félvezetőipar egyik jelentős résztvevőjének 2000-es eladási bevétele meghaladta a 30 G€-t). Szupravezetőből épített erős mágneseket főként gyorsítókban illetve a gyógyászati mágneses rezonancia vizsgálat (MRI) során alkalmaznak. Kétségkívül látványos alkalmazás a MAGLEV (magnetic levitation = mágneses lebegtetés) vonatok fejlesztése, amelyek súrlódás nélkül suhanhatnának a pálya felett. Elterjedésüket – a technikai problémákon túl – a nagy mágneses terek okozta élettani kockázat gátolja. 2001-ben Koppenhágában próbaüzemben kb. 150 ezer háztartás elektromos áramellátását vezették át egy 30 méter (!) hosszú szupravezető darabon, ugyanabban az évben az USA-ban három darab 400 láb (≈ 130 m) hosszúságú magas hőmérsékleti szupravezetőn 100MW teljesítményű áramot sikerült átvezetni. Ezekből is látszik, hogy még messze van a szupravezető alkalmazása távvezetékként, viszont túláram kapcsolóként (a kritikus áram felett a szupravezető elveszti az ellenállás nélküli vezetését,

¹A szupravezetéssel illetve szupravezető anyagokkal kapcsolatos legújabb technikai eredmények és gazdasági adatok például a http://www.supercondoctors.org honlapon és linkjein találhatók meg.



1.3. ábra. A gap hőmérsékletfüggése a BCS-elméletben. Az ábrát a [32] hivatkozásból vettem.

és ezáltal nagyon gyors kapcsolóként alkalmazható) illetve elektromos áram tárolóként (SMES, egy szupravezető gyűrűben tárolt energia kis hálózati ingadozásoknál rásegítve növeli a rendszer stabilitását) már megtalálhatóak a korszerű elektromos hálózatokban.

Történetileg az első szupravezető a higany, melyről Kamerlingh Onnes 1911-ben fedezte fel, hogy a hélium forráspontján (4, 2 K) az ellenállása zérusra csökken [22]. Ezt követően egy sor anyagról fedezték fel, hogy kellően alacsony hőmérsékleten ellenállása lecsökken, azonban az extrém kicsi átalakulási hőmérséklet miatt ilyen szupravezetők ipari-kereskedelmi hasznosítása nem gazdaságos. A szupravezetők történetében jelentős áttörést jelentett a magas hőmérsékletű szupravezetők felfedezése 1986-ban. Bednorz és Müller egy kerámia (YBa₂Cu₃O₇) mintában mértek 92 K-es átalakulási hőmérsékletet [23]. Bár ez a hőmérséklet már a nitrogén forráspontja feletti, ami lehetővé tette a szupravezetés bemutatását akár egy középiskolai órán is (*lebegtetés*), a várt gazdasági áttörést ez sem hozta meg; 2003-ban is még csak $50 \text{ M} \in$ a piaci részesedésük, aminek oka elsősorban a kerámiák meglehetősen rossz mechanikai tulajdonságaiban rejlik.

A szupravezetők legfontosabb tulajdonságait (zérus ellenállás, perzisztens áramok, Meissner–Ochsenfeldjelenség, kritikus tér, anomális fajhő) fenomenologikus elméletekkel le lehet írni [24]. A London testvérek kétfolyadék-modell alapján felírt elektrodinamikai egyenletei [25] megmagyarázzák például a zérus ellenállást, sőt a Meissner–Ochsenfeld-jelenséget [26] is (legalábbis a szupravezetők egy fajtájára). A Ginzburg–Landauelmélet pedig a másodrendű fázisátalakulások esetén sikerrel alkalmazott Landau-elméletet igazította a szupravezetőkhöz [27]. Ez a leírás a kritikus terek és anomális fajhők létezését is képes kimutatni. A szupravezetés mikroszkopikus leírásában mérföldkőnek bizonyult Fröhlich [28] és Bardeen [29] feltételezése, akik az elektronfonon kölcsönhatásban keresték a szupravezetés okát. Cooper megmutatta, hogy az elektron-fonon kölcsönhatás hatására a Fermi-gázban elektronok párjaiból kötött állapot jöhet létre [30]. Ezeket a párokat nevezi az irodalom Cooper-pároknak. 1957-ben Bardeen, Cooper és Schrieffer a Cooper-párokból kiindulva kidolgozták a szupravezetés mikroszkopikus elméletét [31], amelyet a neveik kezdőbetűi után BCS-elméletnek szokás nevezni. A leírás felteszi, hogy a rendszer kizárólag Cooper-párok kondenzátumából áll, térben homogén, a kölcsönhatás erőssége állandó a Fermi-energia közelében, máshol pedig zérus (Debye-levágás). A modellből számolt gap hőmérsékletfüggése kiváló egyezést mutat az elsőfajú szupravezetők kísérleti eredményeivel. Ha véges kiterjedésű mintát (kísérletileg mindig ez a helyzet) vagy különböző tartományokból felépülő rendszer akarunk tanulmányozni, akkor valamilyen inhomogén rendszerek leírására alkalmas módszert kell keresnünk. Az egyik lehetőség a 2.1 pontban részletes bemutatásra kerülő Bogoljubov–de Gennes-egyenlet [33,34] felírása és megoldása. Mivel az egyenlet önkonzisztens megoldása nagyon bonyolult lehet, ezért inhomogén szupravezetők esetében többnyire inkább a Ginzburg–Landau-egyenletet szokták alkalmazni [24].

1.2.2. Fáziskoherencia szupravezetők jelenlétében

Az 1990-es években a nanotechnológia fejlődése lehetővé tette mezoszkopikus méretű, ballisztikus félvezető rendszerek és szupravezető tartományok összekapcsolását, ezáltal hibrid rendszerek fáziskoherens vezetési tulajdonságainak illetve gerjesztési spektrumának vizsgálatát. 1991-ben Petrashov és Antonov [35] illetve Kastalskij és munkatársai [36] számoltak be először olyan mérésekről, amelyben fáziskoherens vezetést figyeltek meg szupravezető-félvezető kontaktusban. Ezekben a rendszerekben egy elektron (lyuk) koherensen lyukká (elektronná) alakul a félvezető-szupravezető határrétegben. Ezt a jelenséget 1964-ben Andrejev ismerte fel [37] és retroreflexiónak nevezte, később az irodalomban az Andrejev-reflexió elnevezés terjedt el. Az Andrejev-reflexió hatását nanoszerkezetek vezetési tulajdonságaira természetesen már sokan vizsgálták. Legalacsonyabb rendben az alagutazási Hamilton-operátor közelítés figyelmen kívül hagyja az Andrejev-reflexió szerepét, és azt jósolja, hogy az egyenáramú vezetőképesség arányos az állapotsűrűséggel. Később megmutatták, hogy egy normál fém-szigetelő-szupravezető átmenetben az Andrejev-reflexió miatt jelentős gap alatti vezetés lehetséges [38–40]. A Blonder, Tinkham és Klapwijk által kidolgozott – és neveik kezdőbetűi után BTK elméletként emlegetett – elmélet [39] a vezetőképességben egy csúcsot jósolt $eV \approx \Delta$ feltételnél (itt e az elektron töltése, V az előfeszítés és Δ a szupravezető gap nagysága) és minimumot V = 0 zérus előfeszítésnél. A szigetelőt Dirac-féle deltafüggvénnyel modellezték, és az erősségét növelve visszakapták az alagútazásos eset eredményeit. A Kastalskij és munkatársai által ismertetett kísérletben viszont V = 0 zérus előfeszítésnél is jelentős vezetést mértek [36]. A jelenséget zérus előfeszítés anomáliának (ZBA) nevezték el. További kísérletekben is rendre találtak ZBA-t [41, 42], Xiong és munkatársai a geometria [43], Bakker és munkatársai [44] egy kapufeszültség változtatásával a ZBA nagyságát szabályozni tudták, sőt akár a BTK határt is elérhették. Az ezt követő évek során több csoportnak sikerült Andrejev-reflexiót megfigyelnie ballisztikus kétdimenziós elektrongázban [10, 45, 46]. 1994-ben három csoport jelentette be egymástól függetlenül, hogy sikerült Andrejev-interferométert létrehozniuk [10, 47, 48]. Az elméleti jóslatok szerint az Andrejev-interferométer vezetőképessége oszcilláló függvénye a két szupravezető fáziskülönbségének [49], amit a kísérletek igazoltak. Az oszcillációk amplitúdója – szemben a Josephson-áramoknál tapasztalt exponenciális lecsengéssel – itt a $T/T_{\rm c}$ normált hőmérséklet hatványfüggvényével cseng le. Több kontaktusú hibrid rendszerek esetén Allsop és munkatársai [50] megmutatták, hogy negatív vezetőképességet lehet mérni, ha a rendszerben az Andrejev-transzmisszió – egyik kontaktusból a másik kontaktusba történő retroreflexió – a domináns folyamat. Den Hartog és munkatársainak mérései igazolták is ezt a feltevést [11].

A kísérletek felsorolásánál nem törekedtem semmilyen szempontból sem teljességre, csupán érzékeltetni kívántam, hogy az Andrejev-reflexió mennyire sokféle módon jelentkezhet a transzport folyamatokban. A kísérleti eredmények bőséges összefoglalóját lehet találni az [51] hivatkozásban, illetve annak irodalomjegyzékében. Az összes elméleti próbálkozás felsorolását meg sem kísérlem, a legfontosabbakról pedig később lesz szó részletesen. Munkánk során mindig a Bogoljubov-de Gennes-egyenlet megoldásával vizsgáltuk a normálszupravezető hibrid rendszerek különböző tulajdonságait, ezért a 2. fejezetben először ezeket az egyenleteket mutatom be és oldom meg a legegyszerűbb esetekre. A Landauer-formalizmust sikerült szupravezető részeket is tartalmazó rendszerekre általánosítani, amiről bővebben az 5. fejezet bevezetőjében lesz szó.

1.3. Spintronika

A tranzisztor 1947-es felfedezéséhez hasonló jelentőséggel bír az óriás mágneses ellenállás (GMR) felfedezése [52, 53]. Bár először csak 1988-ban *Baibich és munkatársai* [54], egy évvel később *Binasch és munkatársai* [55] számolnak be ferromágneses többréteg mintában mért óriás mágneses ellenállásról, mégis alig hat évvel később megjelent az első kereskedelmi alkalmazása érzékelőkben [56], sőt 1997-ben az IBM által piacra dobott 16,8 GB-os merevlemezek olvasófeje már ezen az elven alapult [57]. Az elmúlt évtizedben nyugodtan kijelenthetjük, hogy új tudományág nőtt ki a felfedezésből, a spintronika; spin-függő elektronika ("spintronics", "spin transport electronics" vagy "spin-based electronics").

Természetesen spin-polarizált vezetésről lehet beszélni minden olyan esetben, amikor eltérő a különböző spinű állapotok betöltöttsége a Fermi energián. Ez leggyakrabban ferromágneses fémekben fordul elő, ahol a fel- illetve le-spinű állapotok sűrűsége közel egyenlő, de energiában el vannak tolódva egymáshoz képest (lásd az ábrát jobbra). Ez a sávok eltérő betöltéséhez vezet, ami mágneses momentum áram forrása lehet, vagy a fel- és le-spinű töltéshordozók számának vagy mozgékonyságának eltérését okozhatja. Az adott spinű töltéshordozók száma szerint megkülönböztetünk az adott ferromágnesben többségi és kisebbségi spint. A GMR effektusban ellentétes spin beállású ferromágneses rétegekből álló struktúra ellenállását mérték, és óriási ellenállást találtak.



a.) normai és b.) ferromágneses anyagok állapotsűrűségének sematikus rajza.

A jelenséget az okozza, hogy az egyik rétegben többségi spinhez tartozó töltéshordozók a másik rétegben kisebbségi spinhez tartoznak, és abban az állapotok hiánya nagyobb ellenálláshoz vezet. Mágneses tér alkalmazásával a ferromágneses rétegek párhuzamos állapotba forgathatóak, és akkor az ellenállás lecsökken. Ezt a tulajdonságot használják ki érzékelőknél, megfelelő rétegekből egészen kis mágneses terekre érzékeny cella alakítható ki.

Magától értetődően az effektus annál drasztikusabb, minél nagyobb az áramok spin polarizációja, ezért intenzív kutatások folynak erősen polarizált ferromágneses (vezető) anyagok előállítására. Elméletben a 100%-osan polarizált ferromágneseket – amelyekben csak többségi töltéshordozók vannak – félfémeknek is szokás nevezni, gyakorlatban az erősen ferromágneses anyagokban (Fe, Ni, Co) és ötvözeteikben 40-50%-os a spin polarizáció.

Elektromos eszközök tervezésében fontos a ferromágneses anyagok polarizációjának pontos meghatározása. 1998-ban de Jong és Beenakker javaslata [58] nyomán Soulen és munkatársai [59] valamint Upadhyay és munkatársai [60] különböző ötvözetek spin-polarizációját mérték ferromágnes (F)-szupravezető (S) átmenetekben az Andrejev reflexió lecsökkenéséből. Ezek a kísérletek irányították az érdeklődést (újra) az FS hibrid rendszerekre. Ezekben a rendszerekben a szupravezető gap mellett egy újabb energiaskála jelenik meg: a kicserélődési felhasadás a ferromágnesben, a két jelenség versengését okozva. Éppen emiatt az első elméleti érvelések a proximity-jelenség – normál–szupravezető határfelületen a Cooper-párok behatolhatnak a normál fémbe és azt enyhén szupravezetővé tehetik – lecsökkenését jósolták. A kísérletek azonban mást mutattak, *Tedrow és Meservey* korai munkája [61] után *Lawrence és Giordano* SFS átmenetben váratlanul nagy mágneses ellenállásról számol be. *Giroud és munkatársai* ferromágneses (Co) gyűrű és szupravezető (Al) rendszerben, *Petrashov és munkatársai* ferromágneses (Ni) drót és szupravezető (Al) rendszerben a differenciális vezetőképesség mérésekor tapasztaltak szokatlanul erős proximity-jelenséget a ferromágnese oldalán [62,63]. *Vas'ko és munkatársai* a ferromágneses rétegben folyó áram hatására a kritikus áram lecsökkenését tapasztalta a szupravezetőben [64]. *Wong és munkatársai* a szupravezető kritikus hőmérsékletében figyeltek meg oszcillációkat (Fe/V) többrétegekben a ferromágneses réteg vastagságának változtatásakor [65], további kísérletek más anyagokon hol mutattak oszcillációkat [66], hol nem [67]. *Bourgeois és munkatársai* gyengén ferromágneses (Gd) szemcsékkel szennyezett pont kontaktusban az Andrejev-reflexió *növekedésé-ről* értekeznek [68]. *Aarts és munkatársai* kimutatták, hogy a felületek átlátszósága csökken a kicserélődési energia növelésével [69].

A kísérletekkel párhuzamosan elméletek roppant tömege is keletkezett. A spin-pálya csatolás figyelembevételével egyaránt sikerült a kritikus hőmérséklet oszcilláló és nem oszcilláló viselkedését megmagyarázni [70]. Žutić és Valls a Bogoljubov-de Gennes-egyenletet spin-polarizált esetben, nem-tökéletes (F/S) átmenetre, lépcsőfüggvény közelítésben megoldva a felületek átlátszósága miatti ellenállást sikeresen megindokolták [71]. Zareyan és munkatársai kvázi-klasszikus leírásukban az Eilenberger-egyenlet megoldásával Andrejev-állapotokat találtak ferromágnes filmben [72, 73]. A film vastagságát változtatva az állapotsűrűségben oszcillációk láthatók [73]. Krawiec és munkatársai spin-polarizált Hartree-Fock-Gorkov egyenletek önkonzisztens megoldásával kimutatták, hogy Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov [74] állapotok – véges momentummal rendelkező Cooper-párok – jönnek létre (F/S) hibrid rendszerekben. Ezen állapotok helyfüggő szupravezető rendparaméterre vezetnek. Segítségükkel leírhatóak a különleges kísérleti eredmények, mint például a szokatlanul erős proximity-jelenség [75] valamint spontán spin-polarizált áramok megjelenése [76]. Taddei és munkatársai rekurzív Green-függvény módszerrel a sávszerkezet figyelembevételével végzett számolásaik eredményeképpen felhívták a figyelmet a GMR lecsökkenésére [77] szupravezető kontaktus esetén, amivel korrigálni kell Soulen és munkatársai eredményeit is [59]. A terület részletesebb összefoglalása megtalálható a [78] hivatkozásban.

Végül kiemelném a *Falci és munkatársai* által javasolt geometriát, ami az 1.4 ábrán látható; két ellentétesen polarizált ferromágnes egy szupravezetőhöz csatolódik. A legfontosabb folyamatok a rendszerben a különböző kontaktusokból származó elektronok együttes alagútazása és Cooper-párrá alakulása a szupravezetőben. Ezek a folyamatok nem-lokálisak és a csövek távolságával exponenciálisan csökkenő valószínűségűek. A rendszer élénk érdeklődést váltott ki az összefonódott állapotok [80] kutatóiból, mivel az eddigi foton kísérletek mellett összefonódott elektron állapotok megfigyelését teheti lehetővé [81–83]. A folyamatok exponenciálisan kicsi valószínűsége miatt az áramok is kicsik. A geometria módosításával illetve mágneses tér alkalmazásával az effektus amplitúdóját nagyságrendekkel sikerült megnövelnünk.



1.4. ábra. Falci és munkatársai által vizsgált rendszerek. A szürke \mathbf{A} , \mathbf{B} , $(\mathbf{C}, \mathbf{D}$ és \mathbf{E}) jelű részek a ferromágneses fémből készült drótok. Balra fent látható rendszerben az \mathbf{A} jelű csőre kapcsolt $V_{\mathbf{A}}$ feszültség hatására az $I_{\mathbf{A}}$ -val egyező irányú áram lép fel \mathbf{B} csőben, ezt nevezem nem-lokális áramnak. Az ábrát a [79] cikkből vettem.

1.4. A dolgozat felépítése

A 2. fejezetben ismertetem a Bogoljubov-de Gennes-egyenleteket, valamint azok megoldását a legegyszerűbb esetekben. Az ezt követő három fejezetben saját eredményeket mutatok be, amelyeket négy cikkben tettünk közzé. A 3. fejezetben NS hibrid rendszerek pályahossz-eloszlását tanulmányozom. Diffúzív szórócentrumot tartalmazó rendszer esetén negatív hosszúságoknál is találtunk csúcsokat, amelyeket a klasszikus pályáknak tudtunk megfeleltetni. A fejezet eredményeit a [84] publikációban közöltük. A 4. fejezetben Andrejev-biliárdok energiaszintjeit határoztam meg a szupravezető gap alatti tartományban. Már a legegyszerűbb doboz illetve korong geometriák esetén is szingularitások sorát találjuk az állapotsűrűségben. A Bohr–Sommerfeld közelítés segítségével megmutatom ezen szingularitások eredetét. Ehhez a fejezethez két publikáció kapcsolódik [85,86]. Az 5. fejezetben bemutatom hogyan lehet a *Falci és munkatársai* által felfedezett nem-lokális áramokat a geometria tökéletesítésével illetve mágneses tér alkalmazásával maximalizálni. Az eredmények egy részét a [87] hivatkozásban ismertettük. Végül a Függelékekben bemutatom a visszatérési valószínűség kiszámolásának geometriai módszerét (A.), a Green-függvény kiszámítását rácson (B.), illetve a szórási mátrix amplitúdók és a Green-függvény kapcsolatát (C.).

2. fejezet

Hibrid rendszerek leírása

Inhomogén szupravezetők leírásának egyik lehetséges módja a Bogoljubov-de Gennes egyenletek – ezentúl röviden BdG-egyenletek – felírása és megoldása. A BdG-egyenletekkel tetszőleges inhomogén elektrongáz leírható külső potenciál jelenlétében. A külső potenciál segítségével szennyezőket illetve határfelületeket (falakat) modellezhetünk a rendszerben. Az egyenletekben a mágneses tér szerepe is figyelembe vehető a szokásos Peierls-helyettesítéssel [88]. A BdG-egyenlet lényegében a Hartree–Fock-közelítés alkalmazása szupravezetők esetében. A 2.1 alfejezetben *de Gennes* tárgyalását [34] követve bevezetem a BdG-egyenleteket. A 2.2 alfejezetben a legegyszerűbb (homogén) megoldást ismertetem. Ezt követően a 2.3 pontban kiszámolom az Andrejev-reflexiót BTK-közelítésben egy normál–szupravezető határfelületen. A kapott eredményeket felhasználva a 2.4 pontban felírom a részecske- és töltésáramok megmaradását leíró egyenleteket. Végül a 2.5 alfejezetben a BTK-közelítés alkalmazhatóságát vizsgálom meg.

2.1. A Bogoljubov-de Gennes-egyenlet

Ebben az alfejezetben *de Gennes* tárgyalását [34] követve bevezetem a BdG-egyenleteket. Írjuk fel a Hamilton-operátort a következő módon definiált téroperátorok segítségével:

$$\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) = \sum_{k} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \quad \text{illetve} \quad \Psi(\mathbf{r}\alpha) = \sum_{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}\alpha}, \quad (2.1)$$

ahol $a_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger}$ $(a_{\mathbf{k}\alpha})$ a szokásos keltő (eltüntető) operátor a **k** hullámszámú és $\alpha = \uparrow$ vagy $\alpha = \downarrow$ spin beállású állapotban! A léptető operátorokra vonatkozó antikommutátor relációk miatt a téroperátorokra is antikommutátor relációk teljesülnek:

$$\left\{\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha),\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}'\beta)\right\} = \left\{\Psi(\mathbf{r}\alpha),\Psi(\mathbf{r}'\beta)\right\} = 0$$
(2.2a)

$$\left\{\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha),\Psi(\mathbf{r}'\beta)\right\} = \delta_{\alpha\beta}\,\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'). \tag{2.2b}$$

A részecskeszám-operátort pedig a

$$N = \sum_{\mathbf{k}\alpha} a^{\dagger}_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}\alpha} = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha)$$
(2.3)

kifejezés határozza meg. A Hamilton-operátor a \mathcal{H}_0 egyrészecskés Hamilton-operátor és a \mathcal{H}_1 kölcsönhatási tag összegeként írható fel, a fenti jelölésekkel:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \tag{2.4}$$

$$\mathcal{H}_{0} = \sum_{\alpha} \int \mathrm{d}\mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) H_{\mathrm{e}} \Psi(\mathbf{r}\alpha)$$
(2.5)

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{V}{2} \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{r} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\beta) \Psi(\mathbf{r}\beta) \Psi(\mathbf{r}\alpha)$$
(2.6)

$$H_{\rm e}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\left(\mathbf{p} - e.\mathbf{A}(\mathbf{r})\right)^2}{2m} + U_0(\mathbf{r}) - E_{\rm F}\right]$$
(2.7)

ahol m az elektronok effektív tömege, e az elemi töltés, $E_{\rm F}$ a Fermi-energia az elektrongáz rendszerben, valamint feltettük, hogy

- az $U_0(\mathbf{r})$ külső tér hatása spin-független,
- a vezetési elektronok spinje nem csatolódik az $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ vektorpotenciállal leírt mágneses térhez, és
- az elektron-elektron kölcsönhatás spin-független és pontszerű, tehát egyetlen V együtthatóval jellemezhető. A δ -kölcsönhatás miatt szokásos regularizációt – levágás $\hbar\omega_D$ Debye-energián – kell majd később alkalmazni.

Az elektron-elektron kölcsönhatásban a $V\Psi^{\dagger}\Psi^{\dagger}\Psi\Psi$ kétrészecske kölcsönhatást átlagtér-közelítéssel vesszük figyelembe, így egy részecske a többivel való kölcsönhatásból egy eredő átlagos teret érez. A rendszer a következő effektív Hamilton-operátorral közelíthető:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \int d\mathbf{r} \bigg\{ \sum_{\alpha} \big[\Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) H_{\text{e}}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}\alpha) + U(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha) \big] + \Delta(\mathbf{r}) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\downarrow) + \Delta^{*}(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}\downarrow) \Psi(\mathbf{r}\uparrow) \bigg\}, \quad (2.8)$$

ahol $U(\mathbf{r})$ és $\Delta(\mathbf{r})$ egyelőre tetszőleges, ismeretlen potenciálok, amiket önkonzisztensen határozunk majd meg. Az U-val arányos tag nem változtatja, a Δ -t tartalmazó tag kettővel növeli, míg a Δ^* -os tag kettővel csökkenti a részecskeszámot. Az utóbbi két tag miatt \mathcal{H}_{eff} sajátfüggényei az N részecskeszám-operátornak nem sajátfüggvényei. A $\Psi(\mathbf{r}\uparrow)\Psi(\mathbf{r}\uparrow)$ és hasonló tagok az antikommutátor relációk miatt tűnnek el. Diagonalizáljuk \mathcal{H}_{eff} -et a következő unitér transzformációval:

$$\Psi(\mathbf{r}\uparrow) = \sum_{n} \left(\gamma_{n\uparrow} u_n(\mathbf{r}) - \gamma_{n\downarrow}^{\dagger} v_n^*(\mathbf{r}) \right)$$

$$\Psi(\mathbf{r}\downarrow) = \sum_{n} \left(\gamma_{n\downarrow} u_n(\mathbf{r}) + \gamma_{n\uparrow}^{\dagger} v_n^*(\mathbf{r}) \right),$$
(2.9)

ahol az új $\gamma_{n\alpha}$ és $\gamma^{\dagger}_{n\alpha}$ operátorok is fermionokat írnak le, ezért antikommutálnak: $\{\gamma_{n\alpha}, \gamma_{m\beta}\} = \{\gamma^{\dagger}_{n\alpha}, \gamma^{\dagger}_{m\beta}\} = 0$ illetve $\{\gamma^{\dagger}_{n\alpha}, \gamma_{m\beta}\} = \delta_{nm} \,\delta_{\alpha\beta}$. A megoldásoknak teljesíteniük kell az ortogonalitási és teljességi relációkat is, azaz

$$\int d\mathbf{r} \left(u_m^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) + v_m^*(\mathbf{r}) v_n(\mathbf{r}) \right) = \delta_{mn}$$
(2.10a)

$$\int d\mathbf{r} \left(v_m(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) - u_m(\mathbf{r}) v_n(\mathbf{r}) \right) = 0$$
(2.10b)

$$\sum_{n} \left(u_n^*(\mathbf{r})u_n(\mathbf{r}') + v_n^*(\mathbf{r})v_n(\mathbf{r}') \right) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(2.10c)

$$\sum_{n} \left(u_n^*(\mathbf{r}) v_n(\mathbf{r}') - v_n(\mathbf{r}) u_n^*(\mathbf{r}') \right) = 0.$$
(2.10d)

A jól megválasztott (2.9) transzformáció diagonalizálja a (2.8) effektív Hamilton-operátort, azaz:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = E_0 + \sum_{n\alpha} \epsilon_n \gamma_{n\alpha}^{\dagger} \gamma_{n\alpha}, \qquad (2.11)$$

ahonnan

$$\left[\mathcal{H}_{\text{eff}}, \gamma_{n\alpha}^{\dagger}\right] = \epsilon_n \gamma_{n\alpha}^{\dagger} \qquad \text{illetve} \qquad \left[\mathcal{H}_{\text{eff}}, \gamma_{n\alpha}\right] = -\epsilon_n \gamma_{n\alpha}. \tag{2.12}$$

A $[\Psi, \mathcal{H}_{eff}]$ típusú kommutátorokat kiszámolhatjuk \mathcal{H}_{eff} (2.8) definíciójából a (2.2) antikommutátor relációk felhasználásával:

$$[\Psi(\mathbf{r}\uparrow), \mathcal{H}_{\text{eff}}] = (H_{\text{e}}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r}\uparrow) + \Delta(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}\downarrow)$$
(2.13)

$$[\Psi(\mathbf{r}\downarrow), \mathcal{H}_{\text{eff}}] = (H_{\text{e}}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r}\downarrow) - \Delta(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}\uparrow).$$
(2.14)

Behelyettesítve mindkét oldalon $\gamma_{n\alpha}$ -k (2.9) definícióját, a kommutátort most a (2.12) relációk segítségével végezve el, algebrai átalakítások után a két oldalon a $\gamma_{n\uparrow}$ illetve $\gamma_{n\downarrow}^{\dagger}$ tagok együtthatói szerint rendezve a következő egyenletek kaphatók:

$$\epsilon_n u_n(\mathbf{r}) = (H_e(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})) u_n(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) v_n(\mathbf{r})$$

$$\epsilon_n v_n(\mathbf{r}) = -(H_e(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}))^* v_n(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}),$$
(2.15)

amit úgy is felfoghatunk, hogy az $\epsilon \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \underline{\widehat{H}} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ sajátértékprobléma ϵ_n sajátértékű $\begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}$ sajátvektorát keressük a (2.10) normálással. A sajátértékproblémát teljesen kiírva:

$$\epsilon u(\mathbf{r}) = (H_{e}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})) u(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r})v(\mathbf{r})$$

$$\epsilon v(\mathbf{r}) = -(H_{e}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}))^{*} v(\mathbf{r}) + \Delta^{*}(\mathbf{r})u(\mathbf{r}).$$
(2.16)

Megjegyzések:

- $H_{\rm e}=H_{\rm e}^*$ csak zérus mágneses tér esetén teljesül,
- $\underline{\widehat{H}}$ operátor hermitikus a (2.10 a-b) skalárszorzattal, ezért az $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ sajátvektorok ortogonálisak,
- minden $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$ sajátvektorra $\begin{pmatrix} -v^* \\ u^* \end{pmatrix}$ is megoldás, $-\epsilon$ sajátenergiával.

A (2.16) egyenleteket szokás Bogoljubov-de Gennes-egyenletnek (BdG-egyenlet) nevezni.

Mindeddig az $U(\mathbf{r})$ és $\Delta(\mathbf{r})$ potenciálok megválasztásáról nem beszéltünk. Ezeket a potenciálokat úgy kell meghatározni, hogy a \mathcal{H}_{eff} diagonalizálásával kapott állapotok ($\mathcal{H}_{\text{eff}}|\Phi\rangle = E_{\Phi}|\Phi\rangle$) a szabadenergiát minimalizálják. A szabadenergia definíció szerint

$$F = \langle H \rangle - TS, \tag{2.17}$$

aholTa hőmérséklet, S az entrópia és a szokásos $\beta = (kT)^{-1}$ jelöléssel

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_{\Phi} \langle \Phi | H | \Phi \rangle \exp(-\beta E_{\Phi})}{\sum_{\Phi} \exp(-\beta E_{\Phi})}.$$
(2.18)

A szabadenergia minimumában a variációja zérus, azaz $\delta \langle H \rangle - T \delta S = 0$. Ha H helyére egymás után beírjuk \mathcal{H}_{eff} és \mathcal{H} téroperátorral kifejezett alakjait, akkor a két esetben elvégzett variációkat összevetve a potenciálokra kapunk feltételt. Az utóbbi esetben a Wick-tétel segítségével a négy téroperátor szorzatának átlagolását az összes lehetséges párosításra felírt két-két téroperátort tartalmazó átlagok szorzatának összegeként lehet elvégezni:

$$\langle \Psi^{\dagger}(1)\Psi^{\dagger}(2)\Psi(3)\Psi(4)\rangle = \langle \Psi^{\dagger}(1)\Psi(4)\rangle \langle \Psi^{\dagger}(2)\Psi(3)\rangle - \langle \Psi^{\dagger}(1)\Psi(3)\rangle \langle \Psi^{\dagger}(2)\Psi(4)\rangle + \langle \Psi^{\dagger}(1)\Psi^{\dagger}(2)\rangle \langle \Psi(3)\Psi(4)\rangle,$$
(2.19)

amit felhasználva a variáció:

$$\delta F = \int d\mathbf{r} \bigg\{ \sum_{\alpha} \delta \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) H_{\mathbf{e}} \Psi(\mathbf{r}\alpha) \rangle - V \sum_{\alpha\beta} \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha) \rangle \delta \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\beta) \Psi(\mathbf{r}\beta) \rangle + V \sum_{\alpha} \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha) \rangle \delta \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha) \rangle - V \left(\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\uparrow) \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\downarrow) \rangle \delta \langle \Psi(\mathbf{r}\downarrow) \Psi(\mathbf{r}\uparrow) \rangle + k.k. \right) \bigg\} - T \delta S, \quad (2.20)$$

ahol a harmadik tagban elhagytuk az átlagoláskor zérust adó $\langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha)\Psi(\mathbf{r}\cdot\alpha)\rangle = 0$ típusú kifejezéséket. A \mathcal{H}_{eff} effektív Hamilton-operátorral definiált szabadenergia variációja pedig:

$$\delta F' = \int d\mathbf{r} \left\{ \sum_{\alpha} \delta \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}\alpha) \left[H_{\rm e} + U(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}\alpha) \rangle + (\Delta^{*}(\mathbf{r}) \delta \langle \Psi(\mathbf{r}\downarrow) \Psi(\mathbf{r}\uparrow) \rangle + k.k.) \right\} - T \delta S.$$
(2.21)

A két variáció összevetéséből a potenciálokra az alábbi feltétel adódik:

$$U(\mathbf{r}) = -V \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r} \uparrow) \Psi(\mathbf{r} \uparrow) \rangle \equiv -V \langle \Psi^{\dagger}(\mathbf{r} \downarrow) \Psi(\mathbf{r} \downarrow) \rangle$$
(2.22)

(ez a szokásos Hartree-közelítéssel megegyező tag) illetve:

$$\Delta(\mathbf{r}) = -V \langle \Psi(\mathbf{r}\downarrow)\Psi(\mathbf{r}\uparrow) \rangle \equiv V \langle \Psi(\mathbf{r}\uparrow)\Psi(\mathbf{r}\downarrow) \rangle, \qquad (2.23)$$

ahol $\Delta(\mathbf{r})$ -et szupravezető párpotenciálnak szokás nevezni. A téroperátorokat (2.9) szerint $\gamma_{n\alpha}$ -kal kifejezve az átlagolást a $\gamma_{n\alpha}$ -kra lehet elvégezni a

$$\langle \gamma_{n\alpha}^{\dagger} \gamma_{m\alpha} \rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} f_n \quad \text{illet ve} \quad \langle \gamma_{n\alpha} \gamma_{m\alpha} \rangle = 0$$
 (2.24)

szabályok szerint, ahol $f_n = (\exp(\beta \epsilon_n) + 1)^{-1}$. A potenciálokra így u_n, v_n és f_n kifejezésekkel az önkonzisz-

tencia feltételek a következőképpen néznek ki:

$$U(\mathbf{r}) = -V \sum_{n} \left[|u_n(\mathbf{r})|^2 f_n + |v_n(\mathbf{r})|^2 (1 - f_n) \right]$$
(2.25a)

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_{n} v_n^*(\mathbf{r}) u_n(\mathbf{r}) (1 - 2f_n).$$
(2.25b)

Ezek szerint az önkonzisztens eljárás a következő; kiindulunk valamilyen potenciálokból, diagonalizáljuk a hozzájuk rendelt effektív Hamilton-operátor sajátértékproblémáját, majd abból a (2.25) feltételekkel kiszámoljuk a potenciálok új értékét. Ezt a két lépést elvileg addig kell ismételgetni, ameddig a potenciálok már nem módosulnak az egymást követő lépések során. Gyakorlatilag gyakran alkalmazzák az úgynevezett lépcsőfüggvény közelítést, amikor a párpotenciálról felteszik, hogy szupravezetőkben állandó véges érték, normál fémekben pedig azonosan zérus. Ennek a közelítésnek a mikéntjét fogom rövidesen megmutatni, amihez először egy homogén végtelen szupravezető hullámfüggvényét számolom ki a Bogoljubov-de Gennes-egyenlet alkalmazásával.

2.2. Homogén szupravezető

Az eddigiekben ismertetett módszer szemléltetésére tekintsük a végtelen homogén szupravezető esetét! A szilárdtestfizikában szokásos módon tekintsünk egy d-dimenziós, L^d térfogatú, homogén dobozt periodikus határfeltétellel. Legyen $H_e = \mathbf{p}^2/2m - E_F$ az egyrészecskés Hamilton-operátor, ahol $p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r_j}$ a szokásos impulzusoperátor, m az elektron effektív tömege, E_F a vezetési elektronok Fermi-energiája a rendszerben! Tegyük fel, hogy az $U(\mathbf{r})$ potenciál azonosan zérus, míg a $\Delta(\mathbf{r})$ párpotenciál egy komplex állandó $\Delta = \Delta_0 e^{i\Phi}$. Ezeket felhasználva a (2.16) BdG-egyenlet a következőképpen alakul:

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - E_{\rm F} & \Delta \\ \Delta^* & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + E_{\rm F} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} u(\mathbf{r}) \\ v(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$
(2.26)

Keressük az elemi gerjesztéseket haladó síkhullámok formájában, azaz $u(\mathbf{r}) = u_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ illetve $v(\mathbf{r}) = v_k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, amiből rendezés után:

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E_{\rm F} - \epsilon & \Delta \\ \Delta^* & -\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + E_{\rm F} - \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_k \\ v_k \end{pmatrix} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 0.$$
(2.27)

Ennek az egyenletnek akkor van nem-triviális megoldása, ha a bal oldalon álló mátrix determinánsa zérus:

$$\epsilon^2 - \xi_k^2 - |\Delta|^2 = 0, \qquad (2.28)$$

ahol bevezettem a $\xi_k = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E_F$ jelölést. Egy adott k-hoz két energiasajátérték tartozik, az általános megjegyzésekben találtaknak megfelelően, egyforma abszolútértékűek, de ellentétes előjelűek:

$$\epsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}.$$
 (2.29)



2.1. ábra. A Bogoljubov-de Gennes-egyenlet megoldása homogén rendszerekben

Az energiasajátértékeket a **k** hullámszám függvényében ábrázolva kapjuk meg a 2.1 ábrán vázolt diszperziós relációt. Az ábrán is látható, hogy nincsen valós **k**-hoz tartozó megoldás az $\epsilon < \Delta_0$ energiákon, ebben az értelemben Δ gapként viselkedik. Az egyes megoldásokhoz tartozó csoportsebesség a diszperziós reláció hullámszám szerinti deriválásával meghatározható:

$$\mathbf{v}_{\rm cs} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \pm \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_{\rm F}}{\sqrt{\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_{\rm F}\right)^2 + |\Delta|^2}}.$$
(2.30)

A csoportsebesség és a hullámszám iránya szerint megkülönböztetünk kétféle kvázirészecskét: a párhuzamos helyzetben elektronszerű–, az ellenkező beállásban lyukszerű gerjesztésekről beszélünk.

Térjünk vissza a sajátérték
probléma megoldásához! A nyilvánvaló szimmetria miatt elegendő csak az
 $\epsilon > 0$ pozitív sajátértékekhez tartozó sajátvektorokat meghatározni. A (2.27) egyenletből csak u_k/v_k arány

határozható meg:

$$\frac{u_k}{v_k} = \frac{\Delta}{\epsilon - \xi_k},\tag{2.31}$$

ahol az $|u_k|^2$ és $|v_k|^2$ értékeket a (2.10a) ortogonalitási reláció rögzíti:

$$1 = \int d\mathbf{r} \left(|u(\mathbf{r})|^2 + |v(\mathbf{r})|^2 \right) = L^d \left(|u_k|^2 + |v_k|^2 \right) = L^d |v_k|^2 \left(1 + \frac{|\Delta|^2}{\left(\xi_k - \epsilon\right)^2} \right),$$

ahonnan

$$|v_k|^2 = \frac{1}{2L^d} \left(1 - \frac{\xi_k}{\epsilon} \right) \qquad \text{és} \qquad |u_k|^2 = \frac{1}{2L^d} \left(1 + \frac{\xi_k}{\epsilon} \right), \qquad (2.32)$$

de még mindig marad a hullámfüggvény fázisának szabadsága, amit rögzíthetünk úgy is, hogy v_k legyen valós:

$$v_k = \sqrt{\frac{1}{2L^d} \left(1 - \frac{\xi_k}{\epsilon}\right)} \qquad \text{és} \qquad u_k = \Delta \sqrt{\frac{1}{2L^d} \frac{1}{\epsilon(\epsilon - \xi_k)}}.$$
(2.33)

Az így meghatározott $u_k,\,v_k\text{-}kat$ behelyettesítve a konzisztencia feltételekbe:

$$U(\mathbf{r}) = -V \sum_{k} \left\{ |u(\mathbf{r})|^2 f_k + |v(\mathbf{r})|^2 \left(1 - f_k\right) \right\}$$
(2.34)

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_{k} v^*(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) \left(1 - 2f_k\right).$$
(2.35)

Eltolás invariáns rendszerben sem $U(\mathbf{r})$ sem $\Delta(\mathbf{r})$ nem függ a helytől, ezért:

$$U = -V \sum_{k} \left\{ |u_k|^2 f_k + |v_k|^2 \left(1 - f_k\right) \right\}$$
(2.36)

$$\Delta = V \sum_{k} v_k^* u_k (1 - 2f_k) = \frac{V}{L^d} \sum_{k} \frac{\Delta(1 - 2f_k)}{2\epsilon}.$$
(2.37)

Az $(1-2f_k)$ azonos átalakításokkal:

$$1 - 2f_k = 1 - \frac{2}{e^{\beta\epsilon} + 1} = \frac{e^{\beta\epsilon/2} - e^{-\beta\epsilon/2}}{e^{\beta\epsilon/2} + e^{-\beta\epsilon/2}} = \tanh\frac{\beta\epsilon}{2} = \tanh\frac{\beta}{2}\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}$$

alakra hozható, amit felhasználva az alábbi eredmény adódik:

$$1 = \frac{V}{L^d} \sum_k \frac{\tanh \frac{\beta}{2} \sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}}{2\sqrt{\xi_k^2 + |\Delta|^2}},$$
(2.38)

ahol, ha a **k** szerinti összegzést ξ szerinti integrálásra cseréljük, akkor a prefaktorokban éppen a normál fém állapotsűrűsége ($\rho(E) = \frac{1}{L^d} \sum_k \delta(\epsilon - \xi_k)$) jelenik meg:

$$1 = V\rho(E_{\rm F}) \int d\xi \frac{\tanh\frac{\beta}{2}\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}}.$$
(2.39)

Ez az utolsó egyenlet megegyezik a gap hőmérsékletfüggésére a BCS-elméletből jól ismert eredménnyel [24]. Az energia szerinti integrál a δ -kölcsönhatás miatt divergál, ezért a $\hbar\omega_{\rm D}$ Debye-levágással kell végessé tenni. A 2.1 ábrán a gap hőmérsékletfüggésének jellegzetes alakja figyelhető meg (vö. az 1.3 ábrával). A (2.36) egyenletből általában egy véges (térben állandó) értéket kapunk az $U(\mathbf{r})$ potenciálra, ami (2.16) illetve (2.7) egyenletekből láthatóan csak egy eltolást jelent a tényleges Fermi-energiához képest. A dolgozat további részében csak zérus hőmérsékleten számolt eredményeket közlök, és a következő fejezetben tárgyalt módszer szerint az önkonzisztencia feltételek teljesítése helyett lépcsőfüggvény közelítésben határozom meg normál– szupravezető rendszerek energiaspektrumát illetve transzport együtthatóit.

2.3. Andrejev-visszaverődés

Ebben az alfejezetben a legegyszerűbb inhomogén szupravezető rendszert tanulmányozom: a szóródást egy két irányban eltolás invariáns (kvázi egydimenziós) normál–szupravezető határfelületen. A kvantummechani-kában szokott módon mindkét tartományban felírom a hullámfüggvény általános alakját, és a határnál illesztem őket. Mivel szórási jelenséget figyelek meg, a normál tartományban egy bemenő síkhullámot feltételezek, és a visszavert illetve áthaladó síkhullámok amplitúdóját határozom meg. A transzverzális irányokban szeparálódik a hullámegyenlet, amit megoldva a $\nabla^2 \chi^m(\mathbf{r}_{\perp}) = -(\mathbf{k}_{\perp}^m)^2 \chi^m(\mathbf{r}_{\perp})$ transzverzális hullámfüggvények (és hullámszámok) megkaphatók. A hullámfüggvények a transzverzális hullámfüggvényekkel kifejthetők. A jelölések egyszerűségének érdekében elhagyom a transzverzális módusok indexelését. A teljes (két- vagy háromdimenziós) megoldás felírásához a következőkben ismertetendőkhez képest csak annyit kell módosítani, hogy például a (2.44)-ben minden *m* transzverzális módus esetében le kell vonni a transzverzális hullám-számot: $q_{\parallel,\pm}^m = k_{\rm F} \sqrt{1 - \left(\frac{k_{\perp}^m}{k_{\rm F}}\right)^2 \pm i\eta}$, míg például a (2.46) általános megoldásban összegezni kell az összes lehetséges *m* transzverzális módusa. Az η konkrét alakját lásd a (2.43) egyenlet feletti szövegben.

A rendszer elvileg felfogható egy inhomogén szupravezetőként, ahol a párpotenciál az alábbi módon változik:

$$\Delta(z) = \Delta\Theta(z) = \Delta_0 e^{i\Phi}\Theta(z), \qquad (2.40)$$

itt $\Theta(z)$ a Heaviside-lépcsőfüggvény (értéke egységnyi, ha argumentuma nagyobb zérusnál, egyébként zérus). A BdG-egyenletet erre az esetre megoldva helyfüggő $(u(\mathbf{r}), v(\mathbf{r}))$ párokat kapnánk, amit az önkonzisztencia feltételbe behelyettesítve módosítanunk kellene a párpotenciálra tett kiinduló feltevésünket, majd újra kiszámolni az $(u(\mathbf{r}), v(\mathbf{r}))$ párt. Az eljárást addig kellene folytatni, míg $u(\mathbf{r}), v(\mathbf{r}), \Delta(\mathbf{r})$ és $U(\mathbf{r})$ konvergál. Ehelyett *Blonder és munkatársai* felvetését [39] követve veszem a két tartományban külön-külön érvényes általános megoldást állandó véges illetve zérus párpotenciál mellett, és a határnál a hullámfüggvényeket illetve deriváltjukatt illesztem. Az így kapott ún. BTK-közelítés és az önkonzisztens számolás közötti eltérésről a 2.5 alfejezetben bővebben lesz szó. Elvileg kezelhető a probléma akkor is, ha a két tartományban nem egyezik meg az effektív tömeg $(m^{(N)} \neq m^{(S)})$ és a Fermi-energia $(E_{\rm F}^{(N)} \neq E_{\rm F}^{(S)})$, illetve a határon egy gátpotenciált is figyelembe lehet venni $(V = \lambda \delta(z))$. Most ettől tekintsünk el, és vizsgáljuk meg a legegyszerűbb esetet! A (2.27) egyenlet szerint homogén szupravezetőben a BdG-egyenlet megoldásait síkhullám alakban kereshetjük:

$$u(z) = u_k e^{ikz} \qquad \text{és} \quad v(z) = v_k e^{ikz}, \tag{2.41}$$

ahol a továbbiakban u_k -ban és v_k -ban elhagyom a k-függést, megkülönböztetésül – ha szükséges – a z-függést fogom jelezni. Láttuk, hogy homogén esetben a BdG-egyenletből az energia-sajátértékekre a következő feltétel tejesül:

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E_{\rm F}\right)^2 = \epsilon^2 - \Delta(z)^2, \qquad (2.42a)$$

míg a sajátvektorokra:

$$\frac{u}{v} = \frac{\Delta(z)}{\epsilon - \left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E_{\rm F}\right)}.$$
(2.42b)

Ezeket az eredményeket felhasználva először a szupravezetőben ($z \ge 0$) írom fel a hullámfüggvényt. Érdemes kétfelé választani a felírást aszerint, hogy a gapnél kisebb vagy nagyobb energiát tekintünk.

1. $\epsilon < \Delta_0$, gap alatti eset. Vezessük be az $\eta = \frac{\sqrt{\Delta_0^2 - \epsilon^2}}{E_F}$ új paramétert, amit felhasználva a (2.42a) egyenlet a következő alakot ölti:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(q^2 - k_{\rm F}^2 \right) = \pm i\eta E_{\rm F}.$$
(2.43)

Most szórást akarunk vizsgálni, tehát rögzített ϵ -nál kell a lehetséges k hullámszámokat kifejezni:

$$q_{e/h} = k_{\rm F} \sqrt{1 \pm i\eta},\tag{2.44}$$

ahol az e index a + előjelhez tartozik, és elektronszerű állapotot jelöl, míg a h index a – előjellel olvasandó ki, és lyukszerű állapotnak felel meg. Az elnevezések okáról majd a gapnél nagyobb energiák (és a normál fém) leírásánál bővebben lesz szó. A sajátvektorokat is kényelmesebb alakba hozhatjuk:

$$\frac{u}{v} = \frac{\Delta_0 e^{i\Phi}}{\epsilon \mp i \sqrt{\Delta_0^2 - \epsilon^2}} = \frac{\epsilon \pm i \sqrt{\Delta_0^2 - \epsilon^2}}{\Delta_0} e^{i\Phi} = e^{\pm i \operatorname{arc} \cos \frac{\epsilon}{\Delta_0}} e^{i\Phi} = \gamma_{e/h}, \tag{2.45}$$

ahol az első lépésben felhasználtuk a (2.42a) egyenlőséget és Δ definícióját, a második lépésben a törtet alul-felül a nevező komplex konjugáltjával beszorozva, a tört nevezőjét valóssá tettük. A harmadik lépéshez ideiglenesen bevezetve α -t a $\cos \alpha = \frac{\epsilon}{\Delta_0}$ módon, látható, hogy $\sin \alpha = \sqrt{1 - \cos^2 \alpha} = \frac{\sqrt{\Delta_0^2 - \epsilon^2}}{\Delta_0}$, amiknek a segítségével észrevehető, hogy a kifejezésünk a kettő összege, végül felhasználva a $\cos \alpha \pm i \sin \alpha = e^{\pm i\alpha}$ összefüggéseket kapjuk az u/v arány legutolsó alakját. Ebből a felírásból azonnal látszik, hogy u/v aránya egységnyi abszolútértékű szám, valamint, ha $\begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix}$ az egyik sajátvektorunk, akkor a másik sajátvektor

 $e^{2i\Phi}\begin{pmatrix}v_0\\u_0\end{pmatrix}$. Ezeket a jelöléseket felhasználva felírhatjuk a szupravezetőben a gap alatt érvényes általános megoldást:

$$\Psi^{(S)}(z) = b^{e,+} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{iq_e z} + b^{e,-} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{-iq_e z} + b^{h,+} \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{iq_h z} + b^{h,-} \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{-iq_h z},$$
(2.46)

ahol azért van négy tagunk, mert két (u, v) megoldást találtunk, és a (2.42a) egyenletből láthatóan k és -k egyszerre megoldások. Az utolsó két tagban az $e^{2i\Phi}$ fázist bevontam a $b^{h,\pm}$ együtthatókba. Mivel a $q_{e/h}$ hullámszámoknak képzetes része is van, az $e^{iq_{e/h}z}$ exponensek nagysága helyfüggő. Emiatt figyelni kell arra, hogy a hullámfüggvény a végtelenben se divergáljon. A hullámszám (2.44) kifejezéséből látható, hogy Im $q_e > 0$. Emiatt a $z \to \infty$ határesetben az $e^{-iq_e z}$ exponens felcsengő, ezért a $b^{e,-}$ együttható csak zérus lehet. Teljesen hasonlóan Im $q_h < 0$ miatt $\lim_{z\to\infty} e^{iq_h z} = \infty$, amiért a $b^{h,+} = 0$ megszorítást kell az

együtthatóra tenni.

Essen ehelyütt pár szó a hullámfüggvények normálásáról (illetve annak elmaradásáról). A homogén esetben kötött állapotokat kerestünk, és a normálást véges tartományban periodikus határfeltétel mellett a (2.10) egyenleteknek megfelelően végeztük el. A szórási probléma esetén úgy kell normálni, hogy a bejövő síkhullám által szállított részecske- és töltésáram megmaradjon; szokásosan a bejövő síkhullám amplitúdója egységnyi, a többi síkhullám amplitúdói a szórási mátrix megfelelő elemei. Ha csak az energia-sajátértékeket akarjuk meghatározni (mint a dolgozat 3. és 4. fejezeteiben), akkor egyáltalán nem szükséges a hullámfüggvényt normálnunk. Ilyenkor egy kényelmes lehetőség a v = 1 választás, ugyanis ekkor az általános megoldás az alábbi alakot ölti:

$$\Psi^{(S)}(z) = b^{e,+} \begin{pmatrix} \gamma_e \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq_e z} + b^{h,-} \begin{pmatrix} \gamma_h \\ 1 \end{pmatrix} e^{-iq_h z}, \qquad (2.47)$$

Ennek a választásnak előnye, hogy az u-k és v-k nem keverednek össze egymással, hanem csak egy $\gamma_{e/h}$ jelenik meg a kifejezésekben.

2. A teljesség kedvéért tekintsük át a gap feletti energiákon ($\epsilon > \Delta_0$) lehetséges állapotokat is! Ehhez most vezessük be a $\kappa = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta_0^2}}{E_{\rm F}}$ változót, aminek segítségével a (2.42a) egyenlet ezúttal

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(k^2 - k_{\rm F}^2\right) = \pm \kappa E_{\rm F} \tag{2.48}$$

alakú lesz. Szórási problémában az energia rögzített, a lehetséges hullámszámokat a

$$k_{e/h} = k_{\rm F} \sqrt{1 \pm \kappa} \tag{2.49}$$

kifejezés adja. Míg a sajátvektorok komponenseire:

$$\frac{u}{v} = \frac{\Delta_0 e^{i\Phi}}{\epsilon \mp \sqrt{\epsilon^2 - \Delta_0^2}} = \frac{\epsilon \pm \sqrt{\epsilon^2 - \Delta_0^2}}{\Delta_0} e^{i\Phi} = e^{\pm \operatorname{Ar}\operatorname{ch}\frac{\epsilon}{\Delta_0}} e^{i\Phi}$$
(2.50)

összefüggés teljesül, ahol az utolsó lépésben α -t úgy vezettük be, hogy ch $\alpha = \frac{\epsilon}{\Delta_0}$, ahonnan így sh $\alpha = \sqrt{\operatorname{ch}^2 \alpha - 1} = \frac{\sqrt{\epsilon^2 - \Delta_0^2}}{\Delta_0}$ adódik, amiket felhasználva a kifejezésünk ismét a kettő összege, amit a ch $\alpha \pm \operatorname{sh} \alpha = e^{\pm \alpha}$ azonosságok segítségével írunk át. Ebből a felírásból látszik, hogy ha $\begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix}$ az egyik sajátvektorunk, akkor a másik sajátvektor $\begin{pmatrix} v_0^* \\ u_0^* \end{pmatrix}$. Ezeket a jelöléseket felhasználva felírhatjuk a szupravezetőben a gap felett

érvényes általános megoldást:

$$\Psi^{(S)}(z) = c^{e,+} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{ik_e z} + c^{e,-} \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{-ik_e z} + c^{h,+} \begin{pmatrix} v_0^* \\ u_0^* \end{pmatrix} e^{ik_h z} + c^{h,-} \begin{pmatrix} v_0^* \\ u_0^* \end{pmatrix} e^{-ik_h z}$$
(2.51)

Ha a $z \leq 0$ tartományban normál fémet szeretnénk leírni, akkor a gap feletti megoldás alakban a $\Delta = 0$ határesetet kell tekinteni. Ekkor a (2.27) BdG-egyenlet szétcsatolódik *u*-ban és *v*-ben, vagy másképp

fogalmazva a sajátvektorok $\begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}$ illetve $\begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}$ lesznek. A hullámszámra vonatkozó (2.49) kifejezés:

$$k_{e/h} = k_{\rm F} \sqrt{1 \pm \epsilon/E_{\rm F}},\tag{2.52}$$

az általános megoldás pedig:

$$\Psi^{(N)}(z) = c^{e,+} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} e^{ik_e z} + c^{e,-} \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix} e^{-ik_e z} + c^{h,+} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} e^{ik_h z} + c^{h,-} \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix} e^{-ik_h z}.$$
 (2.53)

Ha kiszámoljuk az egyes tagokra a csoportsebességeket a (2.30) kifejezésnek megfelelően, akkor azt találjuk, hogy az első két tag csoportsebességének előjele megegyezik k előjelével, azaz rendre jobbra illetve balra haladó elektronszerű gerjesztéseket írnak le. A második két tagnál a csoportsebesség ellentétes k-val, azaz ezek a tagok rendre balra illetve jobbra haladó lyukszerű gerjesztéseket írnak le. Ebből az előjel-konvencióból származik a korábban a gap alatti esetben említett elektronszerű illetve lyukszerű elnevezés, bár ott csoportsebességről nincs értelme beszélni. Mivel a normál tartományban bejövő elektronok szóródását szeretnénk vizsgálni, a $c^{e,+}$ együtthatót egységnek, a $c^{h,-}$ -t pedig zérusnak választjuk. A hullámfüggvény általános alakja így a normál tartományban:

$$\Psi^{(N)}(z) = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} e^{ik_e z} + a \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} e^{ik_h z} + b \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} e^{-ik_e z}$$
(2.54a)

illetve a szupravezetőben

$$\Psi^{(S)}(z) = c \begin{pmatrix} u_0 \\ v_0 \end{pmatrix} e^{iq_e z} + d \begin{pmatrix} v_0 \\ u_0 \end{pmatrix} e^{-iq_h z}.$$
(2.54b)

A hullámfüggvény a z = 0 pontbeli folytonosságából, illetve a deriváltak illesztéséből az elektron– illetve lyukszerű állapotokra egyaránt két-két egyenlet adódik:

$$1 + b = u_0 c + v_0 d \tag{2.55a}$$

$$a = v_0 c + u_0 d \tag{2.55b}$$

$$ik_e(1-b) = iq_e u_0 c - iq_h v_0 d$$
 (2.55c)

$$ik_h a = iq_e v_0 c - iq_h u_0 d, \tag{2.55d}$$

ami négy egyenlet a négy ismeretlen együtthatóra, *a*-ra, *b*-re, *c*-ra és *d*-re, tehát általában megoldható. Ha feltesszük, hogy $\Delta \ll E_{\rm F}$, akkor érvényes az Andrejev-közelítés [37], amely szerint $k_e \approx k_h \approx q_e \approx q_h \approx k_{\rm F}$, amennyiben ezek nem az exponensekben szerepelnek. A fenti négy egyenlet megoldása ebben az esetben rendkívüli módon leegyszerűsödik, az eredmény:

$$b = d = 0$$
 , $a = \frac{v_0}{u_0}$ és $c = \frac{1}{u_0}$. (2.56)

A kapott eredmények azt mondják, hogy nincsen visszavert elektron a normál tartományban (b = 0), azaz a normál reflexió (elektron bejön, elektron visszaverődik) zérus. Van viszont visszavert lyuk állapot $(a \neq 0)$, azaz az Andrejev-reflexió véges (bejövő elektron lyukká alakul és úgy verődik vissza). A szupravezetőben érdekesebb a helyzet, hiszen a hagyományos értelemben nincsenek tiszta lyuk vagy elektron állapotok, de a korábbi elnevezések szerint d = 0 azt jelenti, hogy nincsen lyukszerű állapot a szupravezetőben, azaz az Andrejev-transzmisszió (a bejövő elektron lyukszerű kvázirészecskévé alakul át, és úgy hatol be a szupravezetőbe) zérus, míg $c \neq 0$ miatt véges a normál transzmisszió (elektron elektronszerű állapotban halad tovább a szupravezetőben).

Behelyettesítve a (2.56) együtthatókat a hullámfüggvények (2.54) kiinduló alakjába meghatározhatjuk a rendszer hullámfüggvényét:

$$\Psi^{(N)}(z) = \begin{pmatrix} f^{(N)} \\ g^{(N)} \end{pmatrix} \qquad \Psi^{(S)}(z) = \begin{pmatrix} f^{(S)} \\ g^{(S)} \end{pmatrix}, \qquad (2.57)$$

ahol

$$f^{(N)} = e^{ik_e z} \qquad f^{(S)} = e^{iq_e z}$$

$$g^{(N)} = \frac{v_0}{u_0} e^{ik_h z} \qquad g^{(S)} = \frac{v_0}{u_0} e^{iq_e z}.$$
 (2.58)

Érdemes két vagy több dimenzióban meggondolni a reflektálódást egy határfelületen. A normál reflexió során, egy bejövő $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ síkhullámmal jellemezhető részecske hullámszámának felületre merőleges komponense



2.2. ábra. Normál- és Andrejev-reflexió kétdimenziós normál–szupravezető határfelületen. A bejövő elektron (pirossal) vagy elektronként normálisan verődik vissza (pirossal), vagy lyukként retroreflexiót szenved el (kékkel) a határon. A visszavert sugár eltolására csak az ábra áttekinthetősége érdekében volt szükség, valójában pontszerű visszaverődésről van szó.

előjelet vált, míg a párhuzamos komponensek változatlanok. Ez arra vezet, hogy a részecske a felületről a beesési síkban, a beesési merőlegesre tükrözött irányban (azonos szög alatt) verődik vissza. Andrejev reflexió esetén – a (2.54a) kifejezésből is láthatóan – a hullámszám merőleges komponense nem vált előjelet, sőt csak csekély mértékben változik (Andrejev közelítésben egyáltalán nem is változik), azaz a hullámszám a visszaverődés után nagyjából megegyezik a bejövő hullámszámmal. Viszont a részecske csoportsebessége most a hullámszámmal ellentétes előjelűvé válik, azaz ugyanaz a hullámszám most éppen ellentétes irányban haladó síkhullámot ír le, tehát a 2.2 ábrán látható módon a részecske az eredeti beesési irányban verődik vissza. Ez az újfajta visszaverődés egy sor új jelenséget hozott NS hibrid rendszerekben a normál rendszerekhez képest, amelyek megértéséhez a szemiklasszikus módszereket általánosítani, módosítani kell(ett).

A következő pontban a (2.57) megoldáshoz rendelhető részecske– és töltésáramokat fogom megvizsgálni az időfüggő Bogoljubov–de Gennes-egyenletek tanulmányozásával.

2.4. Részecske- és töltésáramok

Ha megengedjük, hogy a hullámfüggvényeink időfüggőek legyenek ($\Psi(z,t) = \begin{pmatrix} f(z,t) \\ g(z,t) \end{pmatrix}$), akkor az időfüggő Schrödinger-egyenlethez hasonlóan a Bogoljubov–de Gennes-egyenleteknek is felírható az időfüggő alakja:

$$i\hbar\frac{\partial f(z,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - E_{\rm F} + V(z)\right]f(z,t) + \Delta(z)g(z,t)$$
(2.59a)

$$i\hbar \frac{\partial g(z,t)}{\partial t} = -\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - E_{\rm F} + V(z)\right] g(z,t) + \Delta^*(z) f(z,t).$$
(2.59b)

Egyszerűen belátható, hogy az időfüggő egyenletből az időfüggésre a kvantummechanikában szokásos

$$f(z,t) = ue^{ikz - i\epsilon t/\hbar} \qquad \text{és} \qquad g(z,t) = ve^{ikz - i\epsilon t/\hbar}$$
(2.60)

feltételezésekkel visszakapjuk a (2.27) időfüggetlen BdG-egyenleteket.

Szintén a kvantummechanikában megismert részecskesűrűség definícióhoz ($\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$) hasonlóan próbáljuk meg a részecskesűrűséget az elektron- és lyukszerű gerjesztések sűrűségének összegeként adni meg:

$$P(z,t) = |f(z,t)|^2 + |g(z,t)|^2.$$
(2.61)

Ahhoz, hogy ez a mennyiség valóban részecskék sűrűségét határozza meg, meg kell követelnünk, hogy teljesüljön rá egy

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \nabla \mathbf{.j}_{\mathrm{P}} = 0 \tag{2.62}$$

típusú megmaradási tétel, ahol \mathbf{j}_{P} a részecskék árama. Ehhez számoljuk ki a feltételezett részecskesűrűség időderiváltját:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = f^* \frac{\partial f}{\partial t} + f \frac{\partial f^*}{\partial t} + g^* \frac{\partial g}{\partial t} + g \frac{\partial g^*}{\partial t}$$
(2.63)

a deriváltakat az időfüggő BdG-egyenletből kifejezve, rendezés után csak a következő tagok maradnak meg:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{i\hbar}\bigg\{f^*\nabla^2 f - f\nabla^2 f^* - g^*\nabla^2 g + g\nabla^2 g^*\bigg\}$$
(2.64)

amit $f^* \nabla^2 f = \nabla (f^* \nabla f) - (\nabla f^*) (\nabla f)$ jellegű összefüggések segítségével átalakítva:

$$\frac{i\hbar}{2m} \bigg\{ \nabla (\underbrace{f^* \nabla f - f \nabla f^*}_{2i \operatorname{Im}(f^* \nabla f)}) + \nabla (g \nabla g^* - g^* \nabla g) \bigg\},$$
(2.65)

ahonnan az áramra

$$\mathbf{j}_{\mathrm{P}} = \mathbf{j}_{e} + \mathbf{j}_{h} = \frac{\hbar}{m} \bigg\{ \operatorname{Im}(f^{*} \nabla f) + \operatorname{Im}(g \nabla g^{*}) \bigg\}$$
(2.66)

eredmény adódik. Felhívom a figyelmet arra, hogy a lyukak áramában a második tag van konjugálva, ami a képzetes részben ellentétes előjelet eredményez. Ez megfelel azon elvárásunknak, miszerint a lyukak "időtükrözött" részecskék.

Ha az elektronokhoze,a lyukakhoz-etöltést rendelünk, akkor a töltéssűrűséget a

$$Q(z,t) = e\left(|f(z,t)|^2 - |g(z,t)|^2\right)$$
(2.67)

kifejezés definiálja. A részecskesűrűséghez hasonló eljárással megmaradási tételt írunk fel a töltéssűrűségre is. Ebben az esetben azt találjuk, hogy

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}_{\mathbf{Q}} = \mathbf{S}, \qquad (2.68)$$

ahol a töltésáram:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{Q}} = e\left(\mathbf{j}_{e} - \mathbf{j}_{h}\right) \tag{2.69}$$

a forrástag:

$$S = \frac{4e}{\hbar} \bigg\{ \operatorname{Im} \left(f^* \Delta g \right) \bigg\}.$$
(2.70)

A (2.69) áramdefinícióban a negatív előjel arra utal, hogy a lyukak árama az elektronokkal ellentétes töltést szállít. Megjegyzem, hogy *Blonder és munkatársai* egyformán definiálják az elektronok és lyukak áramát, így náluk a részecskeáram $\mathbf{j}_{\mathrm{P}} = \mathbf{j}_{e} - \mathbf{j}_{h}$ alakú, míg a töltésáram $\mathbf{j}_{\mathrm{Q}} = e(\mathbf{j}_{e} + \mathbf{j}_{h})$. Ők úgy érvelnek, hogy az "időtükrözött részecske által szállított, ellenkező előjelű töltés járuléka éppen ugyanakkora, mint az elektronoké" [34].

Tekintsük a normál–szupravezető határfelületnél fellépő áramokat a gapnél kisebb energiákon ($\epsilon < \Delta$)! Ehhez helyettesítsük be a (2.58) megoldásokat a (2.66) részecske- illetve (2.69) töltésáram kifejezésekbe. A normál fémben:

$$\mathbf{j}_{\mathrm{P}}^{(\mathrm{N})} = \frac{\hbar}{m} k_{\mathrm{F}} \left\{ 1 - \frac{|v_0|^2}{|u_0|^2} \right\} = 0, \qquad (2.71)$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{Q}}^{(\mathbf{N})} = \frac{e\hbar}{m} k_{\mathbf{F}} \left\{ 1 + \frac{|v_0|^2}{|u_0|^2} \right\} = 2ev_{\mathbf{F}},\tag{2.72}$$

ahol az Andrejev-közelítésben $k_e \approx k_h \approx k_F$ vehető. A (2.45) kifejezésben rögtön látszik, hogy az u/vmegoldás egységnyi abszolútértékű, ezért a kapcsos zárójelbeli kifejezés a részecskeáram esetén zérus, míg a töltésáramban 2. $E_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2 = \frac{m}{2}v_F^2$ miatt egyszerűen látható, hogy $\frac{\hbar}{m}k_F = v_F$ teljesül, amit az utolsó lépésben kihasználtam. A normál tartományban eszerint nincsen részecskeáram (illetve a lyukak árama éppen kiegyenlíti az elektronok áramát), van viszont egy véges töltésáram, amely teljesen normális módon a sebességgel és a töltéssel arányos. A kettes faktor azt mutatja, hogy az elektron–lyuk párok kétszeres töltést szállítanak. A normál fémben a forrástag zérus, ami szintén megfelel az elvárásainknak. Lássuk most a szupravezető oldalt!

$$\mathbf{j}_{\rm P}^{\rm (S)} = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ i q_e e^{i (q_e - q_e^*) z} \left(1 - \frac{|v_0|^2}{|u_0|^2} \right) \right\} = 0,$$
(2.73)

$$\mathbf{j}_{Q}^{(S)} = \frac{e\hbar}{m} \operatorname{Im} \left\{ iq_{e} e^{i(q_{e} - q_{e}^{*})z} \left(1 + \frac{|v_{0}|^{2}}{|u_{0}|^{2}} \right) \right\}$$
(2.74)

ahol a részecskeáram ugyanúgy lesz zérus, mint a normál esetben. A töltésáramban az Andrejev közelítés szerint az exponensben q_e -t nem közelíthetjük egyszerűen $k_{\rm F}$ -fel, hanem a sorfejtés elsőrendű tagját is figyelembe vesszük, azaz $q_e = k_{\rm F}\sqrt{1+i\eta} \approx k_{\rm F} \left(1+\frac{i\eta}{2}\right)$ az exponensben, amiből:

$$\mathbf{j}_{\mathbf{Q}}^{(\mathrm{S})} = \frac{2e\hbar}{m} k_{\mathrm{F}} e^{-k_{\mathrm{F}} \eta z} = 2ev_{\mathrm{F}} e^{-z/\lambda},\tag{2.75}$$

ahol a λ karakterisztikus hosszra

$$\lambda = \frac{1}{k_{\rm F}\eta} = \frac{\hbar v_{\rm F}}{2\Delta} / \sqrt{1 - \left(\frac{\epsilon}{\Delta}\right)^2} \tag{2.76}$$

adódik. Ez a hosszúság az $\epsilon \to \Delta$ határesetben (gaphez közeli energiákon) divergál, egyébként a szupravezető koherenciahossz nagyságrendjébe esik (emlékeztetőül a szupravezető koherenciahossz $\xi_0 = \frac{\hbar v_F}{2\Delta}$). A kvázirészecskék töltésárama nagyjából koherenciahosszon zérusra csökken a szupravezetőben. Az árammegmaradást a forrástag integrálásával meghatározandó szuperáram teljesíti:

$$\mathbf{j}_{\rm S}(z) = \int_{0}^{z} \mathrm{d}z' \mathcal{S}(z') = 2ev_{\rm F} \left(1 - e^{-z/\lambda}\right).$$
(2.77)

Ezek szerint a kvázirészecskék töltésárama és a szuperáram együtt valóban teljesíti az árammegmaradást a szupravezetőben, és az összegük éppen egyenlő a normál fémben kiszámolt árammal.

2.5. Az önkonzisztens megoldásokról

A normál–szupravezető határfelületnek a fenti eredmény egy fizikailag értelmes interpretációja, de a Bogoljubov–de Gennes-egyenleteknek nem önkonzisztens megoldása. Mivel az önkonzisztens megoldás sokkal számolásigényesebb lenne, ezért az irodalomban általánosan elterjedt az imént ismertetett lépcsőfüggvény közelítés alkalmazása.

McMillan [89] illetve később Kieselmann [90] alaposan megvizsgálta normál–szupravezető határrétegben a szupravezető gap helyfüggését. Kiindultak a gap lépcsőfüggvényszerű helyfüggéséből (a normál fém és a szupravezető határán ugrik a szupravezető gap) és önkonzisztens módszerekkel – McMillan Gorkov-féle Green-függvény módszert, Kieselmann egy numerikus iterációt illetve egy szemiklasszikus módszert is alkalmazott – módosították a gap helyfüggését. Eredményeik azt mutatták, hogy nincsen jelentős eltérés a kiinduló feltételhez képest, csak az éles ugrás helyett egy lágyabb lecsengés van, amelyet a szupravezető koherenciahossz ($\xi_0 = \frac{\hbar v_{\rm F}}{2\Delta}$) határoz meg.



2.3. ábra. Az önkonzisztens megoldás csak egy szupravezető koherenciahossz szélességű tartományban tér el a szupravezető belsejében érvényes értéktől. Az ábrákat rendre *McMillan* [89] illetve *Kieselmann* [90] cikkeiből vettem.



2.4. ábra. Az önkonzisztens megoldás nem tökéletes határfelületeknél is csak egy szupravezető koherenciahossz szélességű tartományban tér el a szupravezető belsejében érvényes értéktől. Az ábrákat *Kieselmann* [90] cikkéből vettem.

Kieselmann megvizsgálta azt az esetet is, ha a felületek nem tökéletesen illeszkednek. Ekkor eltérő Fermi-sebességeket engedett meg a szupravezetőben illetve a normál fémben, valamint egy gátpotenciált is figyelembe vett a határfelületen. Az eredményei ebben az esetben is azt mutatták, hogy a gap csak a felület koherenciahossznyi környezetében változik.

Plehn és munkatársai normál–szupravezető többrétegek energiaszintjeit illetve állapotsűrűségét vizsgálták. Megmutatták, hogy nincsen jelentős eltérés az önkonzisztens módon és a lépcsőfüggvény közelítéssel számolt eredmények között.



2.5. ábra. A szupravezető gap önkonzisztens módszerrel illetve lépcsőfüggvény közelítésben megoldva. Az ábrát *Plehn és munkatársai* cikkéből vettem. [91].

Ezek az eredmények feljogosítanak minket, hogy Andrejev-biliárdok energiaszintjeit, illetve NS hibrid rendszerek reflexiós amplitúdóját lépcsőfüggvény közelítéssel határozzuk meg, csak a paraméterek megválasztásakor arra is kell figyelnünk, hogy a rendszer mérete lényegesen nagyobb legyen, mint a szupravezető koherenciahossz. Ebben az esetben ugyanis a felület közelében kissé változó szupravezető gap várhatóan nem rontja el az általunk megfigyelni kívánt jelenséget. 3. fejezet

Negatív hosszúságú pályák

Mezoszkopikus rendszerek szupravezető tartományhoz csatolása egyaránt kihívás az elmélet és a kísérlet számára. Az ilyen normál–szupravezető hibrid (NS) rendszerekben fontos szerepet játszik az Andrejevreflexió, melynek során a normál–szupravezető határfelületen az elektron lyukként verődik vissza. Ebben a fejezetben az Andrejev-reflexió hatását vizsgálom meg a pályahossz-eloszlásra. Ezt az irodalomban előttünk még senki sem vizsgálta, eredményeinket a [84] cikkben publikáltuk.

3.1. Bevezetés

Két kontaktusú, szennyezetlen, normál fém rendszerekben többen vizsgálták a pályahossz-eloszlást [92–98], amit továbbiakban az angol rövidítésnek megfelelően röviden PLS-nek fogok nevezni. A pályahossz-eloszlás a kvantummechanikai reflexiós vagy transzmissziós együttható Fermi-hullámszám szerinti teljesítményspektruma:

$$\hat{r}_{mn}(L) := \left| \int_{k_{min}}^{k_{max}} e^{-ik_{\rm F}L} r_{mn}(k_{\rm F}) \mathrm{d}k_{\rm F} \right|^{2} \qquad (3.1)$$

$$\hat{t}_{mn}(L) := \left| \int_{k_{min}}^{k_{max}} e^{-ik_{\rm F}L} t_{mn}(k_{\rm F}) \mathrm{d}k_{\rm F} \right|^{2},$$

ahol $r_{mn}(k_{\rm F})$ $[t_{mn}(k_{\rm F})]$ a bejövő kontaktusbeli *n*-edik állapotból a bejövő [kimenő] kontaktusbeli *m*-edik állapotba szóródás amplitúdója rögzített $k_{\rm F}$ Fermi-hullámszám mellett. Már a felvetés is figyelemre méltó: bár ismert, hogy a kvantummechanikában nincs a részecskéknek pályája, mégis megvizsgálták a "nem-létező" pályák hosszúságának eloszlását. Ennek tükrében a szerzők igazán meglepő eredményre jutottak: a PLS-ben csúcsokat találnak, azaz nagy valószínűségű pályahosszakat. A PLS-ben talált csúcsok nagy részét sikeresen azonosították a kontaktusokon kezdődő és végződő klasszikus elektronpályák hosszával, ezenfelül a kvantummechanikai eredmény és a szemiklasszikus közelítés közt általában jó egyezésről számoltak be, de említést tettek arról is, hogy előfordultak ún. szellempályák, amelyek csak a kvantummechanikai eredményben jelentek meg [95].

Mielőtt rátérnénk az NS hibrid rendszer vizsgálatára, tárgyaljuk meg a diffrakció szerepét a normál rendszerek pályahossz-eloszlásában [99]! Szemiklasszikus közelítésben a részecskék egy diffraktív szennyezőről tetszőleges irányban szóródhatnak, mivel ezekben a pontokban a klasszikus dinamika nincsen egyértelműen definiálva [100, 101]. Vattay és munkatársai pontszerű szennyezőket és törési pontokat mint diffraktív szórócentrumokat vizsgáltak kétdimenziós hullámvezetőben [99]. Megmutatták, hogy a reflexiós amplitúdóban csúcsok találhatók a klasszikus pályáknak megfelelő hosszúságoknál. Ezek a pályák egyszeri vagy többszöri szóródás után érték el ismét a bejövő csövet. A 3.1a ábra egy nagy Fermi-hullámhossznál tipikus pályát mutat több szóródással. Egy ilyen pálya két darabból áll: a bejövő kontaktust és a szórócentrumot összekötő szakaszból, amely oda-vissza összesen $2z_0$ hosszúságú, illetve a szórócentrumtól kezdődő és ugyanott végződő tetszőleges számú hurokból. Ennek lehetséges hosszai esetünkben:

$$L_{pqr} = 2x_0p + 2(W - x_0)q + 2Wr, (3.2)$$


3.1. ábra. Diffraktív pontszerű szennyezőt tartalmazó hullámvezető rendszer a.) nyitott véggel illetve b.) szupravezetőhöz csatlakoztatva. Egy-egy jellemző pályát feltüntettem; az áttekinthetőség kedvéért kiterjedt pontszennyezőt rajzoltam illetve az oda-vissza haladó pályarészeket kis eltolással ábrázoltam.

ahol p, q, r természetes számok tetszőleges számú pattogásnak felelnek meg. Az első tag a diffraktív szórócentrum és az egyik fal, a második tag a szórócentrum és a másik fal, a harmadig tag pedig a két fal közti pattogásokat írja le. A 3.2 ábra a PLS-t mutatja egy normál rendszer esetén. A legnagyobb csúcs $L = 2z_0 = 2,0$ -nál, a lehető legrövidebb pályánál van, aminél kisebb (vagy negatív) hosszúságoknál nincsenek csúcsok, a további csúcsok a diffrakciónak megfelelő erős hierarchia szerint következnek. A csövek csatlakozásánál bekövetkező diffrakció segítségével a szellempályák is megmagyarázhatók.



3.2. ábra. A reflexiós amplitúdó pályahossz-eloszlása egy pontszennyezőt tartalmazó normál rendszer esetén. Paraméterek: a cső szélessége W = 1, 0, a Dirac-delta szennyező erőssége $\lambda = 20, 0$ és helye az $(x_0, z_0) = (0, 8; 1, 0)$ pont.

Tekintsük most azt a hibrid rendszert, amit úgy kapunk, hogy a rendszer egyik oldalán a normál félvégtelen hullámvezetőt szupravezetőre cseréljük le a 3.1b ábrán látható módon! Ekkor az r_{mn} reflexiós amplitúdó kiszámításakor figyelembe kell venni a NS felületen bekövetkező Andrejev-(retro)reflexiót is. A Bogoljubovde Gennes-egyenletet egy NS határfelületnél megoldva megmutatható, hogy elektronszerű kvázirészecskék (elektron) a szupravezető felszínt elérve lyukszerű kvázirészecskékként (lyuk) koherensen verődnek vissza. A kvatummechanikai számolásban a BdG-egyenletet megoldva határozhatjuk meg a reflexiós amplitúdókat, amiknek a Fourier-transzformáltja megadja a keresett pályahossz-eloszlást. Ahhoz, hogy értelmezzük a PLSben kapott csúcsokat, szükségünk van a PLS szemiklasszikus közelítésére. A szemiklasszikus leírásban a hullámfüggvény, a Green-függvény vagy éppen a reflexiós amplitúdók felírhatók $A_j e^{i\varphi_j}$ alakú tagok összegeként, ahol A_j egy amplitúdó, a φ_j fázis a klasszikus hatással arányos, j pedig egy lehetséges pályát jelöl [6]. A klasszikus hatás egy a q' és q'' pontokat összekötő pálya mentén:

$$S(q',q'') = \int_{q'}^{q''} dq p(q),$$
(3.3)

ahol p(q) a részecske impulzusa a pálya menti q pontban. Ha a pálya érinti a szupravezetőt, akkor a hatásnak lesz elektronszerű és lyukszerű része egyaránt. Ha egy q' pontból induló elektron egy Andrejev-reflexió után lyukként a q' pontba visszatér, akkor az ehhez tartozó hatást a következőképpen írhatjuk fel:

$$S(q',q') = k_{\rm F}L(q',q^*) - k_{\rm F}L(q^*,q') = 0, \qquad (3.4)$$

ahol $L(q_1, q_2)$ a pálya q_1 és q_2 pontjai közti távolságot jelöli, a második tag negatív előjele az impulzus és a sebesség ellentétes iránya miatt van [102]. Mivel a lyuk visszaverődése után visszafele végigjárja az elektron pályáját, ezért egy elektron-lyuk pálya mentén a teljes hatás mindig zérus lesz. Ennek következtében az elektron-lyuk (e-h) reflexiós együtthatóban egyetlen nagy csúcs várható, L = 0-nál, az elektron-elektron reflexiós együtthatóban pedig pozitív hosszúságoknál várhatók csúcsok. Sokkal érdekesebb az az eset, ha a rendszerben diffraktív szórás is előfordulhat. Ekkor ugyanis a diffraktív szórócentrumot érintő pályák nem egyértelműen definiáltak, emiatt egy Andrejev-reflexiót követően a lyuk pályájának csak a diffraktív szórócentrum első érintéséig szükséges az elektron pályájával megegyeznie, a szórócentrumon más szögben is szóródhat, mint a beeső elektron. Erre a lehetőségre Beenakker már felhívta a figyelmet szennyezett normál– szupravezető pont-kontaktusok esetén [103, 789. oldal]. Következésképpen diffrakció jelenlétében a pályák több elektronszerű és lyukszerű részből épülnek fel, a klasszikus hatás ezekre a részekre vett összegként írható fel:

$$S = \sum_{i} k_{\rm F}(\pm L_i), \tag{3.5}$$

ahol az összegzés az összes pályarészre történik, L_i az egyes részek hosszúságának, + (-) előjel pedig elektronnak (lyuknak) felel meg. A diffrakciómentes esettől eltérően a teljes hatás nem feltétlenül zérus, hanem lehet pozitív, sőt negatív is aszerint, hogy elektronszerű vagy lyukszerű részek vannak túlsúlyban egy adott pálya esetén. Az \mathbf{S}_{mn}^{e-e} elektron-elektron reflexiós amplitúdó PLS-ében csúcsok jelenhetnek meg negatív hosszúságoknál is. Ez merőben új a megfelelő normál rendszer PLS-éhez vagy éppen egy nem-diffraktív hibrid rendszer PLS-éhez képest is.

A 3.2. pontban bemutatom az \mathbf{S}_{mn}^{e-e} reflexiós amplitúdó kiszámolásának részleteit, majd a 3.3. pontban vázolom a szemiklasszikus közelítést, végül 3.4. pontban ismertetem és értelmezem a bemutatott módszerrel

kapott eredményeket.

3.2. A szórási mátrix

Ebben az alfejezetben a 3.1b ábrán látható rendszer transzport együtthatóit fogom meghatározni. A szupravezető gapnél kisebb energiákon a kvázirészecskék nem képesek a szupravezetőbe behatolni, hanem részben normál, részben Andrejev-reflexiót szenvednek el. Ennek megfelelően a szórási mátrixnak csak reflexiós elemei lesznek. Egy beeső kvázirészecske reflektálódhat elektronként vagy lyukként, azaz a szórási mátrix egy 2×2 hipermátrix:

$$\mathbf{S}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{e-e}(E) & \mathbf{S}^{e-h}(E) \\ \mathbf{S}^{h-e}(E) & \mathbf{S}^{h-h}(E) \end{pmatrix},$$
(3.6)

ahol e(h) jelöli az elektront (lyukat); $\mathbf{S}_{mn}^{e-h}(E)$ például az *n*-edik lyukszerű állapotból az *m*-edik elektronszerű állapotba szórás valószínűsége *E* energián. A [103]-ben leírtakat követve a szórási mátrix elemei kifejezhetők a 3.1a ábrán látható normál rendszer szórási mátrixának elemeivel:

$$\mathbf{S}_{0}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}^{11}(E) & \mathbf{t}^{12}(E) \\ \mathbf{t}^{21}(E) & \mathbf{r}^{22}(E) \end{pmatrix},$$
(3.7)

ahol **r** reflexiót, **t** transzmissziót jelöl, és 1 illetve 2 jelöli a rendszer bal illetve jobb oldalát, r_{mn}^{22} például a rendszer jobb oldalán *n*-edik állapotban bejövő részecske *m*-edik állapotba való visszaverődésének valószínűsége. A reflexió és transzmisszió a Fisher–Lee-reláció szerint a Green-függvény projektálásával kapható meg [104]:

$$r_{nm}^{11}(E) = \delta_{nm} - i\sqrt{v_n(E)v_m(E)} \int dx dx' \chi_n^*(x) G^+(x, z_1, x', z_1; E) \chi_m(x')$$
(3.8a)

$$t_{nm}^{12}(E) = i\sqrt{v_n(E)v_m(E)} \int dx dx' \chi_n^*(x) G^+(x, z_1, x', z_2; E) \chi_m(x')$$
(3.8b)

$$t_{nm}^{21}(E) = i\sqrt{v_n(E)v_m(E)} \int dx dx' \chi_n^*(x) G^+(x, z_2, x', z_1; E) \chi_m(x')$$
(3.8c)

$$r_{nm}^{22}(E) = \delta_{nm} - i\sqrt{v_n(E)v_m(E)} \int dx dx' \chi_n^*(x) G^+(x, z_2, x', z_2; E) \chi_m(x'), \qquad (3.8d)$$

ahol $v_n(E)$ az *n*-edik állapot csoportsebessége; szabad részecske közelítésben $v_n(E) = \hbar k_n(E)/m^*$, ha m^* a részecske effektív tömege; z_1 (z_2) a szórócentrumtól elég távol balra (jobbra) fekvő pontok koordinátája, $G^+(x, z, x', z'; E)$ pedig a retardált Green-függvény. A Green-függvényt az alábbi egyenlet megoldásaként definiáljuk:

$$\left(\mathcal{E} - H\left(\mathbf{r}\right)\right) G\left(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \mathcal{E}\right) = \delta\left(\mathbf{r} - \mathbf{r}'\right),\tag{3.9}$$

ahol \mathcal{E} egy komplex szám, $H(\mathbf{r})$ a Hamilton-operátor, δ a Dirac-delta. Ha $\mathcal{E} = E + i\varepsilon$ és ε -nal felülről tartunk zérushoz, akkor kapjuk meg a retardált Green-függvényt. A Hamilton-operátor két tagra bontható:

$$H\left(\mathbf{r}\right) = H_{0}\left(\mathbf{r}\right) + H_{1}\left(\mathbf{r}\right),\tag{3.10}$$

ahol H_0 az üres rendszer Hamilton-operátora (a szabad részecske Hamilton-operátora), és $H_1(\mathbf{r}) = \lambda \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ az \mathbf{r}_0 helyen lévő, λ erősségű, pontszerű szennyezővel való kölcsönhatás Hamilton-operátora. Először meghatározom a H_0 -hoz tartozó G_0 Green-függvényt, azután a Dyson-egyenlethez hasonló módon figyelembe veszem a pontszerű szennyező hatását.

3.2.1. Az üres cső Green-függvénye

A rendszer hullámfüggvényének ismeretében a Green-függvény a

$$G(\mathcal{E}) = \sum_{n} \frac{|\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|}{\mathcal{E} - E_n} + \int \mathrm{d}n \frac{|\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|}{\mathcal{E} - E_n}$$
(3.11)

összefüggéssel számolható ki, ahol az összegzés az összes diszkrét, az integrálás az összes folytonos sajátállapotra történik [105]. Legyen H_0 a szabad egyrészecske Hamilton-operátor, Ψ_{qn} a sajátállapotai, E_{qn} sajátértékkel:

$$H_0(\mathbf{r})\Psi_{q\,n}(\mathbf{r}) = E_{q\,n}\Psi_{q\,n}(\mathbf{r}) \tag{3.12a}$$

$$\Psi_{q\,n}(\mathbf{r}) = \chi_n(x)e^{iqz} \tag{3.12b}$$

$$E_{q\,n} = q^2 + \frac{n^2 \pi^2}{W^2},\tag{3.12c}$$

ahol $\chi_n(x)$ hullámfüggvény kielégíti az 'x' irányban érvényes merev fal határfeltételt:

$$\chi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n\pi x}{W}\right). \tag{3.13}$$

Ezek ismeretében a retardált Green-függvény $(G^+(E) = \lim_{\varepsilon \to 0} G(E + i\varepsilon))$ az alábbi összegként írható fel:

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \lim_{\varepsilon \to 0} \sum_{n=1}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}q}{2\pi} \frac{\Psi_{q\,n}^*(\mathbf{r})\Psi_{q\,n}(\mathbf{r}')}{E - E_{q\,n} + i\varepsilon},\tag{3.14}$$

ahol a q szerinti integrálást a reziduum-tétellel elvégezhetjük. A $\varepsilon \to 0$ határesetben megkapjuk az üres cső Green-függvényét:

$$G_0^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}', E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\chi_n(x)\chi_n(x')}{2ik_n} e^{ik_n|z-z'|},$$
(3.15)

ahol $k_n = \sqrt{E - \frac{n^2 \pi^2}{W^2}}.$

3.2.2. A pontszerű szennyező esete

Legyen $H(\mathbf{r}) = H_0(\mathbf{r}) + H_1(\mathbf{r})$, és keressük az

$$(E - H(\mathbf{r})) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$
(3.16)

egyenlet megoldását! Tegyük fel, hogy

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'), \qquad (3.17)$$

ahol $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ megoldása az $(E - H_0(\mathbf{r})) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ egyenletnek! Ekkor behelyettesítve (3.17)-t (3.16)-ba, rendezve $(\mathbf{r} = \mathbf{r}'')$:

$$(E - H_0(\mathbf{r}'')) G_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = H_1(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}').$$
(3.18)

Beszorozva $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'')$ -vel balról, majd \mathbf{r}'' -re integrálva:

$$\int d\mathbf{r}'' \underbrace{G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \left(E - H_0(\mathbf{r}'')\right)}_{\delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r})} G_1(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') = \int d\mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') H_1(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$$

$$G_1(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') H_1(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}'' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') H_1(\mathbf{r}'') G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}')$$
(3.19)

Felhasználva $H_1(\mathbf{r}) = \lambda \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ konkrét alakját, a (3.19) egyenletből az integrálást a jobb oldalon \mathbf{r}'' -re elvégezve:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \lambda G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) G(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'), \qquad (3.20)$$

ahol $G(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}')$ -re is fel lehet írni hasonló egyenletet:

$$G(\mathbf{r}_{0},\mathbf{r}') = G_{0}(\mathbf{r}_{0},\mathbf{r}') + \lambda G_{0}(\mathbf{r}_{0},\mathbf{r}_{0}) G(\mathbf{r}_{0},\mathbf{r}').$$
(3.21)

Ezekből az egyenletekből kifejezhető a keresett $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ az üres cső G_0 Green-függvényével és a pontszerű szennyező paramétereivel:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \frac{\lambda G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}')}{1 - \lambda G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)}.$$
(3.22)

Behelyettesítve a G_0 (3.15) alakját a (3.22) egyenletbe megkapjuk a szennyezett normál rendszer teljes Green-függvényét. A Green-függvény ismeretében a (3.8a-d) Fisher–Lee-relációkkal kiszámolhatjuk a normál rendszer reflexiós és transzmissziós mátrixának elemeit:

$$r_{nm}^{11}(E) = -\Lambda \frac{\chi_n^*(x_0)}{\sqrt{k_n}} e^{ik_n z_0} \frac{\chi_m(x_0)}{\sqrt{k_m}} e^{ik_m z_0}$$
(3.23a)

$$t_{nm}^{12}(E) = \delta_{nm} e^{ik_n L} + \Lambda \frac{\chi_n^*(x_0)}{\sqrt{k_n}} e^{ik_n z_0} \frac{\chi_m(x_0)}{\sqrt{k_m}} e^{ik_m (L_0 - z_0)}$$
(3.23b)

$$t_{nm}^{21}(E) = \delta_{nm} e^{ik_n L} + \Lambda \frac{\chi_n^*(x_0)}{\sqrt{k_n}} e^{ik_n (L_0 - z_0)} \frac{\chi_m(x_0)}{\sqrt{k_m}} e^{ik_m z_0}$$
(3.23c)

$$r_{nm}^{22}(E) = -\Lambda \frac{\chi_n^*(x_0)}{\sqrt{k_n}} e^{ik_n (L_0 - z_0)} \frac{\chi_m(x_0)}{\sqrt{k_m}} e^{ik_m (L_0 - z_0)}, \qquad (3.23d)$$

ahol $\Lambda = \frac{\lambda}{2i(1-\lambda G_0(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}_0))}.$

3.2.3. A szupravezető határfeltétel illesztése

Ebben az alpontban illesztem a normál rendszerhez a szupravezető tartományt. Az illesztést a Beenakkerféle általános módszernek megfelelően végzem el [103, IV. fejezet]. A módszer feltételezi, hogy az ismert szórási mátrixú, szennyezett (diffúz) normál fém tartományt egy-egy tiszta normál fém tartomány fogja közre. A szórási mátrixot a tiszta normál tartományokon érvényes bázisban ismerjük. A szupravezető az egyik oldalon a tiszta normál fémhez kapcsolódik a 3.3 ábrán látható módon. Esetünkben a szennyezett tartomány az egyetlen Dirac-delta szennyezőből fog állni.



3.3. ábra. Egy tetszőleges, de ismert szórási mátrixú rendezetlen normál tartományt (középen) illesztünk egy szupravezetőhöz (jobbról). e(h) elektronszerű (lyukszerű) kvázirészecskéket jelöl, 1 (2) a bal (jobb) oldalnak felel meg, és +/- az exponenciálisbeli előjel. A nyilak szemléltetik, hogy egy adott együttható, mely irányba haladó megoldásnak felel meg.

A tiszta normál fém tartományokban a BdG-egyenlet általános megoldása (2.53) szerint a következő alakú:

$$\psi_n^{e\pm}(x,z) = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \chi_n(x) e^{\pm ik_n^e z}$$

$$\psi_n^{h\pm}(x,z) = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \chi_n(x) e^{\pm ik_n^h z},$$
(3.24)

ahol $k_n^{e/h} = k_F \sqrt{1 \pm \frac{\varepsilon}{E_F} - \frac{E_n}{E_F}}$, ε az elektronok ($-\varepsilon$ a lyukak) energiája az E_F Fermi-energiától mérve, és $\chi_n(x)$ a kereszthullámfüggvény E_n energiával. Ebben a bázisban írjuk fel a bal és jobb oldalon a hullámfüggvényt:

$$\Psi_{1} = c_{1n}^{e+} \psi_{n}^{e+} + c_{1n}^{e-} \psi_{n}^{e-} + c_{1n}^{h-} \psi_{n}^{h-} + c_{1n}^{h+} \psi_{n}^{h+}$$

$$\Psi_{2} = c_{2n}^{e+} \psi_{n}^{e+} + c_{2n}^{e-} \psi_{n}^{e-} + c_{2n}^{h-} \psi_{n}^{h-} + c_{2n}^{h+} \psi_{n}^{h+}$$
(3.25)

és keressük a teljes rendszer szórási mátrixának $\mathbf{S}^{e-e},\,\mathbf{S}^{e-h},\,\mathrm{stb.}$ elemeit:

$$\mathbf{c}_{1}^{e-} = \mathbf{S}^{e-e} \mathbf{c}_{1}^{e+} + \mathbf{S}^{e-h} \mathbf{c}_{1}^{h-}$$

$$\mathbf{c}_{1}^{h+} = \mathbf{S}^{h-e} \mathbf{c}_{1}^{e+} + \mathbf{S}^{h-h} \mathbf{c}_{1}^{h-},$$

(3.26)

ahol $\mathbf{c}_{1/2}^{e/h\pm}$ a $c_{1/2n}^{e/h\pm}$ -kből álló vektor. A szennyezett normál tartomány szempontjából belépő állapotokra a $\mathbf{c}_N^{be} = (\mathbf{c}_1^{e+}, \mathbf{c}_2^{e-}, \mathbf{c}_1^{h-}, \mathbf{c}_2^{h+})$, illetve a kilépő állapotokra a $\mathbf{c}_N^{ki} = (\mathbf{c}_1^{e-}, \mathbf{c}_2^{e+}, \mathbf{c}_1^{h+}, \mathbf{c}_2^{h-})$ jelölést bevezetve a

$$\mathbf{c}_N^{ki} = \mathbf{S}_N(\varepsilon) \mathbf{c}_N^{be} \tag{3.27}$$

egyenlet írja le a normál szórást, ahol

$$\mathbf{S}_{N}(\varepsilon) = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_{0}(\varepsilon) & 0\\ 0 & \mathbf{S}_{0}^{*}(-\varepsilon) \end{pmatrix}.$$
(3.28)

 \mathbf{S}_N diagonális, mert a normál tartományban elektronok és lyukak között nincs semmilyen kölcsönhatás. $\mathbf{S}_0(\varepsilon)$ a normál rendszer (3.7) alakú szórási mátrixa az elektronokra, ahol az ε energiát az $E_{\rm F}$ Fermi-energiától mérjük. Ekkor $\mathbf{S}_0^*(-\varepsilon)$ írja le a $-\varepsilon$ energiájú lyukak szórását, ahol '*' a komplex konjugálást jelöli.

A Bogoljubov–de Gennes-egyenletet egy normál–szupravezető határfelületnél megoldva az együtthatók között a következő kapcsolatot találjuk:

$$\mathbf{c}_{2}^{e^{-}} = \alpha e^{i\Phi} \mathbf{c}_{2}^{h^{-}}$$

$$\mathbf{c}_{2}^{h^{+}} = \alpha e^{-i\Phi} \mathbf{c}_{2}^{e^{+}},$$
(3.29)

ahol $\alpha = e^{-i \arccos(\varepsilon/|\Delta|)}$ és $\Delta = |\Delta|e^{i\Phi}$ a szupravezető gap. Általában, ha a rendszerben csak egyetlen szupravezető van, akkor $\Phi = 0$ választható, mérhető mennyiségekben úgysem szerepel majd. Ha $\varepsilon \ll |\Delta|$, akkor általában elegendő az $\alpha \approx -i$ közelítést alkalmazni.

Felhasználva az együtthatókra érvényes (3.29) és (3.27) egyenleteket, a (3.26) definíciónak megfelelő szórási mátrixok algebrai átalakítások után az alábbi alakot öltik [103]:

$$\mathbf{S}^{e-e}(\varepsilon) = \mathbf{r}^{11}(\varepsilon) + \alpha^2 \mathbf{t}^{12}(\varepsilon) \left(\mathbf{r}^{22}(-\varepsilon)\right)^* \mathbf{M}^e(\varepsilon) \mathbf{t}^{21}(\varepsilon)$$
(3.30a)

$$\mathbf{S}^{e-h}(\varepsilon) = \alpha e^{i\Phi} \mathbf{t}^{12}(\varepsilon) \mathbf{M}^{h}(\varepsilon) \left(\mathbf{t}^{21}(-\varepsilon)\right)^{*}$$
(3.30b)

$$\mathbf{S}^{h-e}(\varepsilon) = \alpha e^{-i\Phi} \left(\mathbf{t}^{12}(-\varepsilon) \right)^* \mathbf{M}^e(\varepsilon) \mathbf{t}^{21}(\varepsilon)$$
(3.30c)

$$\mathbf{S}^{h-h}(\varepsilon) = \left(\mathbf{r}^{11}(-\varepsilon)\right)^* + \alpha^2 \left(\mathbf{t}^{12}(-\varepsilon)\right)^* \mathbf{r}^{22}(\varepsilon) \mathbf{M}^h(\varepsilon) \left(\mathbf{t}^{21}(-\varepsilon)\right)^*$$
(3.30d)

ahol

$$\mathbf{M}^{e}(\varepsilon) = \left[1 - \alpha^{2} \mathbf{r}^{22}(\varepsilon) \left(\mathbf{r}^{22}(-\varepsilon)\right)^{*}\right]^{-1}$$
(3.31a)

$$\mathbf{M}^{h}(\varepsilon) = \left[1 - \alpha^{2} \left(\mathbf{r}^{22}(-\varepsilon)\right)^{*} \mathbf{r}^{22}(\varepsilon)\right]^{-1}.$$
(3.31b)

Egy szórócentrum esetén az általános eredménybe behelyettesíthető az \mathbf{r}^{11} , \mathbf{t}^{12} ,... mátrixok (3.23) konkrét alakja. A továbbiakban az elektron-elektron reflexió mátrixának kiszámításához behelyettesítem (3.23d)-t a (3.30a) egyenletbe, és figyelembe veszem, hogy az $\varepsilon \ll |\Delta|$ Andrejev-közelítésben $\alpha \approx -i$. Az $\mathbf{M}^e(\varepsilon)$ -beli invertálás kiszámításánál kihasználom, hogy $\mathbf{M}^e(\varepsilon)$ felírható diád alakban, ugyanis

$$M_{nl}^{e} = \left[\delta_{nl} + |\Lambda|^{2} Z_{1} \underbrace{\frac{\chi_{l}^{*}(x_{0})}{k_{l}^{e}} e^{ik_{l}^{e}(L_{0} - z_{0})}}_{\mathbf{a}_{l}} \underbrace{\frac{\chi_{n}(x_{0})}{(k_{n}^{h})^{*}} e^{i(k_{n}^{h})^{*}(L_{0} - z_{0})}}_{\mathbf{b}_{n}}\right]^{-1},$$
(3.32)

ahonnan

$$M_{nl}^{e} = \left[1 + |\Lambda|^{2} Z_{1} \mathbf{a} \circ \mathbf{b}\right]_{nl}^{-1} = \left[1 - \frac{|\Lambda|^{2} Z_{1} \mathbf{a} \circ \mathbf{b}}{1 + \mathbf{a} \mathbf{b}}\right]_{nl},$$
(3.33)

ahol $Z_1 = \mathbf{ab}$. Elvégezve a (3.30a)-beli mátrix szorzásokat:

$$\mathbf{S}_{ij}^{e-e}(\varepsilon) = r_{ij}^{11} - \underbrace{\Lambda \underbrace{\frac{\chi_i^*(x_0)}{\sqrt{k_i^e}} e^{ik_i^e z_0} \frac{\chi_j(x_0)}{\sqrt{k_j^e}}}_{r_{ij}^{11}} e^{ik_j^e z_0} \left(\frac{\Lambda^*}{\Lambda} \frac{(1+\Lambda Z_1)^2}{1+|\Lambda|^2 Z_1^2}\right),$$
(3.34)

ahol kihasználtuk, hogy nyitotti,jcsatornák esetén $k^e_i = (k^e_i)^*$. Kiemelve r^{11}_{ij} -t, és a normál rendszer szórási mátrixának unitaritását — $\Lambda + \Lambda^* + 2|\Lambda|^2 Z_1 = 0$ — felhasználva:

$$\mathbf{S}_{ij}^{e-e}(\varepsilon) = r_{ij}^{11}(\varepsilon) \frac{2}{1 + |\Lambda|^2 Z_1^2}.$$
(3.35)

Ha $\varepsilon \ll E_{\rm F}$, akkor $k_i^e \approx k_i^h \equiv k_i$, és belátható, hogy $Z_1 = -2 {\rm Im} G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0, E_{\rm F})$. Bevezetve a $\mathcal{D} = \frac{-i\lambda}{1-\lambda G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)} \equiv 2\Lambda$ diffrakciós állandót:

$$\mathbf{S}_{ij}^{e-e}(k_{\rm F}) = \frac{2r_{ij}^{11}(k_{\rm F})}{1 + |\mathcal{D}|^2 \left[\operatorname{Im} G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)\right]^2},\tag{3.36}$$

ahol a jelölésben elhagytam ε -t, és helyette az $E_{\rm F} = \frac{\hbar^2}{2m}k_{\rm F}^2$ összefüggésnek megfelelően a $k_{\rm F}$ Fermihullámszámtól függést jelölöm. A (3.36) összefüggés a kiindulópontja továbbiakban mind a kvantummechanikai számolásnak, mind a szemiklasszikus közelítésnek. Megjegyzem, hogy ebben a közelítésben a részecskék és a lyukak egyaránt Fermi-energiával rendelkeznek.

3.3. Szemiklasszikus közelítés hibrid rendszerben

Az $\mathbf{S}_{ij}^{e^-e}$ elektron-elektron reflexiós amplitúdót szemiklasszikus közelítésben úgy határozhatjuk meg, hogy (3.36) kifejezésbe behelyettesítjük r_{nm}^{11} és $G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$ szemiklasszikus alakját. A normál rendszer r_{nm}^{11} reflexiós amplitúdóját a (3.8) Fisher–Lee-relációból kaphatjuk meg, ha a Green-függvény helyére a szemiklasszikus Green-függvényt helyettesítjük [99]. A szemiklasszikus Green-függvény a diffraktív pontot tartalmazó esetben az alábbi formában írható fel [99]:

$$G_d(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \mathcal{D}(\Phi_{in}, \Phi_{out}) G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'), \qquad (3.37)$$

ahol $\mathcal{D}(\Phi_{in}, \Phi_{out})$ a diffrakciós együttható Φ_{in} (Φ_{out}) bemenő (kimenő) szög esetén és $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r'})$ a szabad részecske szemiklasszikus Green-függvénye [99]:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum \frac{(-1)^{n_p}}{8\pi k_{\rm F} l_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} e^{ik_{\rm F} l_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - i3\pi/4},$$
(3.38)

ahol az összegzés a lehetséges pályákra történik, $l_p(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ a pálya hossza, n_p a falnak ütközések száma. A (3.8) Fisher–Lee-relációbeli integrálok elvégzéséhez a transzverzális hullámfüggvényeket exponenciálisok összegére kell bontani:

$$\chi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{n\pi x}{W}\right) = \frac{1}{2i} \sqrt{\frac{2}{W}} \left(e^{+in\pi x/W} - e^{-in\pi x/W}\right),$$
(3.39)

így az exponenciálisbeli előjelek négy lehetséges kombinációjának megfelelően a reflexiós amplitúdó négy tag összegeként áll elő:

$$r_{nm}^{11} = r_{nm}^{++} + r_{nm}^{-+} + r_{nm}^{+-} + r_{nm}^{--}.$$
(3.40)

Nyeregpont-módszerrel elvégezhetők az integrálások az egyes tagokban, melyek eredménye pontszerű diffraktív (azaz izotróp) szennyezőre:

$$r_{nm}^{\pm\pm} = e^{\pm inx_0/W \pm imx_0/W} \frac{i}{4W\sqrt{k_nk_m}} e^{ik_n z_0 ik_m z_0 - i\nu\pi/2} \frac{\lambda}{1 - \lambda G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)},$$
(3.41)

ahol $\nu = \pm 1 \pm 1$. A $G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$ kiszámításához szüksées a diffraktív szennyezőn kezdődő és végződő összes lehetséges pálya meghatározása. A lehetséges pályák hosszúsága:

$$l_p(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) = \begin{cases} 2W(p+1) \\ 2x_0 + 2Wp \\ 2(W - x_0) + 2Wp \end{cases}$$
(3.42)

ahol p tetszőleges természetes szám. Evvel (3.36) szemiklasszikus közelítéséhez minden ismert, csak fel kell összegezni (3.38)-at a (3.42)-beli lehetséges pályákra, majd a kapott eredményt be kell helyettesíteni (3.41) kifejezésbe és végül (3.36) egyenletbe. (3.36) átírható (sorba fejthető) többszörös diffrakciók soraként:

$$\mathbf{S}_{nm}^{e-e}(k_{\rm F}) = 2r_{nm}^{11}(k_{\rm F}) \left\{ 1 - |\mathcal{D}|^2 \left[\operatorname{Im} G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) \right]^2 + |\mathcal{D}|^4 \left[\operatorname{Im} G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) \right]^4 \cdots \right\}.$$
(3.43)

Ezen felírás jelentősége abban rejlik, hogy szemléletesebb képet ad a pályák megértéséhez, amit az eredmények tárgyalásánál részletesebben bemutatok majd. Megjegyzem, hogy Im $G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$ -ban $G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$ mellett megjelenik $G_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$ komplex konjugáltja is, így az $e^{+k_{\rm F}l_p}$ exponenciálisok mellett megjelenő $e^{-k_{\rm F}l_p}$ exponenciálisok a lyukak által bejárt pályarészeknek felelnek meg. Im G_0 hatványait (3.38)-val kifejezve \mathbf{S}_{nm}^{e-e} a következő alakra hozható:

$$\mathbf{S}_{nm}^{e-e}(k_{\rm F}) = \sum_{j} A_j e^{iS_j},\tag{3.44}$$

ahol S_j (3.5) alakú.

3.4. Eredmények

A (3.36) illetve (3.43) képletek beprogramozásával tetszőleges $k_{\rm F}$ Fermi-hullámszám mellett kiszámolhatók a kvantummechanikai és a szemiklasszikus reflexiós amplitúdók. A dimenziótlanítás során célszerű a Fermi-hullámszám helyett az $\tilde{M} = \frac{k_{\rm F}W}{\pi}$ mennyiséget használni, ugyanis a két mennyiség egymással lineáris kapcsolatban áll és \tilde{M} egészrésze a nyitott csatornák száma a hullámvezetőben. Ekkor minden hosszúság $\frac{W}{\pi}$ (W a hullámvezető szélessége) egységekben értendő, így a pályahossz-eloszlás is. Kiszámítottam a szórási amplitúdókat N darab egyenletesen növelt Fermi-hullámszámnál, majd egy diszkrét Fourier-transzformáció (FFT) [106] algoritmussal előállítottam a pályahossz-eloszlást. Ha $\Delta k_{\rm F}$ a hullámszámban a tartomány nagysága, akkor a legkisebb hosszúságok $\delta L = \frac{2\pi}{\Delta k_{\rm F}}$ nagyságúak lehetnek [107]. Az alábbiakban az $\tilde{M} = 10...110$



3.4. ábra. A reflexiós amplitúdóból számolt pályahossz-eloszlás az egy pontszennyezőt tartalmazó normál fém (balra) illetve NS hibrid (jobbra) rendszer esetén. Paraméterek: a téglalap alakú tartomány hossza $L_0 = 4W$, a szennyező erőssége $\lambda = 10,0$ és helye az $(x_0, z_0) = (0,7;0,5)W$ pont.

tartományban N = 8192 pontot vettem fel a PLS kiszámításához. Ez $\delta L \approx 0,02$ felbontást eredményez, ami elegendő a pályák megkülönböztetéséhez. Az N megválasztásánál arra kell figyelni, hogy $L_{max} = \frac{2N\pi}{\Delta k_{\rm F}}$ elég nagy legyen ahhoz, hogy nagy amplitúdójú csúcsok ne tolódjanak be a tartomány alsó részébe (mivel diszkrét Fourier-transzformáció során minden periodikus 2*N*-ben). Az ilyen csúcsok a tartomány növelésével szabályosan eltolódnak a PLS-ben, míg a fizikailag releváns csúcsok változatlanok.

A Dirac-delta λ erősségét úgy választottam meg, hogy elég erős legyen ahhoz, hogy többszörös diffrakcióval létrejövő pályák is megfigyelhetők legyenek. Ha λ kicsi, akkor csak az egyszeres diffrakcióval létrejövő $2 \cdot z_0 = 1,0$ pályához tartozó erősen elmosódott csúcs látható. A szennyező helyét úgy érdemes megválasztani, hogy

 $2x_0$ és $2(W-x_0)$ illetve többszöröseik halmaza lehetőleg elkülöníthető legyen, de arra is érdemes figyelni, hogy egyik se legyen nagyon kicsi, mert akkor δL -t lesz nehezebb megválasztani. Az $x_0 = 0,7$ ideális választásnak tűnt, z_0 tetszőleges lehet, csak a negatív hosszúságú csúcsok megfigyelhetősége érdekében nem szabad túl nagynak lennie.

A szupravezetőhöz csatolt rendszer hosszának kiválasztásánál még arra kell figyelni, hogy (3.30a) levezetésénél kihasználtuk, hogy a szennyező és az NS határfelület között van egy elég hosszú normál tartomány. Ugyanis a diffraktív szennyezőről elvileg zárt csatornába is történik szórás, ezt azonban el lehet hagyni, ha normál tartomány elég hosszú ahhoz, hogy a zárt módusok lecsengjenek. Ezek a hosszak a PLS-ben nem jelennek meg, ugyanis ebben a részben minden pálya esetében teljesül, hogy az elektronként és lyukként megtett pályaszakasz kioltja egymást. Az alábbi eredmények egységesen $L_0 = 4W$ csatornahossz mellett készültek.

A 3.4 ábrán az N rendszer reflexiója \mathbf{r}^{11} illetve az NS rendszer elektron-elektron reflexió \mathbf{S}_{11}^{e-e} egy-egy elemének teljesítmény-spektruma látható mind kvantummechanikai számolásban, mind szemiklasszikus közelítésben. Az ábrán látszik, hogy szembeötlő különbség a két ábra között csak a negatív hosszúságoknál van, itt csak a hibrid rendszerben találhatók csúcsok. A szemiklasszikus közelítés a normál esetben tökéletesen egyezik a kvantummechanikai eredménnyel, míg a hibrid rendszerre a negatív hosszúságoknál a csúcsok helyét kiválóan közelíti, ámde egyes csúcsok amplitúdója eltér a kvantummechanikai eredménytől. Ennek az az oka, hogy (3.43) felírásban csak az első nemtriviális tagot vettem figyelembe.



3.5. ábra. A reflexiós amplitúdóból számolt pályahossz-eloszlás az egy pontszennyezőt tartalmazó normál rendszer esetén. A csúcsok melletti számhármasok a 3.1 táblázatbeli pqr értékeknek felelnek meg. Paraméterek: a szennyező erőssége $\lambda = 10, 0$ és helye az $(x_0, z_0) = (0, 7; 0, 5)W$ pont.

A 3.5 ábrán kinagyítva látható a normál rendszer reflexiós amplitúdójából számolt pályahossz-eloszlás. A főbb csúcsokat megjelöltem az

$$L_{pqr} = 2x_0p + 2(W - x_0)q + 2Wr ag{3.45}$$

képletben szereplő *pqr* paraméter-hármassal. Minél többször érinti egy pálya a diffraktív szennyezőt, a többszörös szóródás miatt annál kisebb az amplitúdója. Ez még módosulhat, ha egy hossz többféleképpen is előáll. A lehetséges pályákat a 3.1 táblázatban foglaltam össze.

p	q	r	$2z_0 + L_{pqr}$	N_{patt}
0	0	$1; 2; 3; \ldots$	$3; 5; 7; \ldots$	2
1	1	$0; 1; 2; \ldots$	$3; 5; 7; \ldots$	
0	1	$0; 1; 2; \ldots$	$1,6;\ 3,6;\ 5,6\ ;\ldots$	2
1	0	$0; 1; 2; \ldots$	$2,4;\ 4,4;\ 6,4;\ \ldots$	2
0	2	$0; 1; 2; \ldots$	$2,2;\ 4,2;\ 6,2;\ \ldots$	3
2	0	$0; 1; 2; \ldots$	$3,8; 5,8; 7,8; \ldots$	3

3.1.táblázat. A normál rendszer lehetséges pályahosszai. A színek rendre megfelelnek a 3.5ábrán használt színeknek.

Az NS hibrid rendszer esetében az elektron-elektron, illetve az elektron-lyuk reflexiós amplitúdóból számolt pályahossz-eloszlása egyaránt tekinthető. Az előbbi esetében a pozitív hosszúságoknál nincsen jelentős változás a normál rendszer PLS-éhez képest, mert a lyukszerű részeket is tartalmazó többszörösen diffraktív pályák nem képesek a pozitív hosszúságoknál megfigyelhető csúcsokat létrehozni, így lényegében a szupravezetőt nem is érintő normál pályák eloszlása dominál. A negatív hosszúságoknál megjelenő csúcsokat a 3.6 ábrán jelöltem, és a főbb pályákat a 3.2 táblázatban foglaltam össze.

<i>p</i>	q	r	$2z_0 + L_{pqr}$	N_{patt}
0	0	$\overline{1}; \overline{2}; \overline{3}; \ldots$	1. 9. 5.	4
Ī	ī	$\overline{0}; \overline{1}; \overline{2}; \ldots$	-1; -0; -0;	6
0	1	$\overline{0}; \overline{1}; \overline{2}; \ldots$	0 4. 1 6. 2 6.	4
1	0	$\overline{1}; \ \overline{2}; \ \overline{3}; \ \ldots$	$0,4,-1,0,-3,0,\ldots$	4
1	0	$\overline{0}; \overline{1}; \overline{2}; \ldots$	0.4. 9.4. 4.4.	4
0	1	$\overline{1}; \ \overline{2}; \ \overline{3}; \ \ldots$	$-0,4; -2,4; -4,4; \ldots$	4
0	2	1	0.2	L.
$\overline{2}$	0	1	0,2	5

3.2. táblázat. A hibrid rendszer főbb, negatív pályahosszai. A felülvonás a lyukként megtett szakaszokat jelenti. A színek rendre megfelelnek a 3.6 ábrán használt színeknek.

Az elektron-lyuk reflexiós amplitúdóból számolt PLS-ben L = 0-nál egy nagy csúcs található, ami azoknak a pályáknak felel meg, amelyek a diffraktív szennyezőt nem érintik, vagy érintik ugyan, de az elektronként és a lyukként bejárt pályarészek hossza egyenlő. Ez a csúcs akkora súllyal bír, hogy mellette a többi csúcs eltörpül. A 3.7a ábrán az elektron-lyuk szimmetriának megfelelő elektron-lyuk reflexiós amplitúdóból számolt PLS látható.



3.6. ábra. Az elektron-elektron reflexiós amplitúdóból számolt pályahossz-eloszlás az egy pontszennyezőt tartalmazó hibrid rendszer esetén. A csúcsok melletti számhármasok a 3.2 táblázatbeli pqr értékeknek felelnek meg. Paraméterek: a téglalap alakú tartomány hossza $L_0 = 4,0W$, a szennyező erőssége $\lambda = 10,0$ és helye az $(x_0, z_0) = (0,7; 0,5)W$ pont.

Az NS hibrid rendszerekre kiterjesztett Landauer-formula szerint a vezetőképesség [51]:

$$G = \frac{4e^2}{h} \operatorname{Tr} \left(\mathbf{S}_{h-e} \mathbf{S}_{h-e}^{\dagger} \right), \qquad (3.46)$$

ahol † az adjungálást jelöli. Könnyen belátható, hogy a komplex konjugálás miatt a fázisinformáció elvész, és ezáltal a pályahossz-eloszlásban csak az L = 0-nál lesz egy csúcs. A vezetőképességet, illetve a hullámszám szerinti teljesítmény-spektrumát a 3.7b ábra mutatja.

Végül pár szó a kísérleti ellenőrzés lehetőségéről: technikailag lehetséges megfelelő tisztaságú, kívánt geometriájú minta előállítása, illetve elegendően alacsony hőmérséklet elérése. A vezetőképességet aránylag egyszerű volna mérni, de annak PLS-e triviális. A kvantummechanikai szórási amplitúdók mérése általában nem egyszerű, de *Morpurgo és munkatársai* [108] eredményei alapján jogos feltételezni, hogy készíthető olyan kísérleti elrendezés, amelyben közvetve megfigyelhetők a különböző pályákhoz tartozó eltérő fázisok. Normál–szupravezető határrétegekben a kisérleti megvalósítás során az anyagi paraméterek, a nem tökéletes illesztés vagy a magasabb energiájú állapotok járulékai miatt az Andrejev-reflexió mellett mindig megjelenik normál reflexió is. A negatív hosszúságoknál található csúcsok robusztusan viselkednek az effajta eltérésékkel szemben.





a.) Az elektron-lyuk reflexiós amplitúdóból számolt pályahossz-eloszlás az egy pontszennyezőt tartalmazó normál rendszer esetén. A főcsúcs amplitúdója 5 nagyságrenddel nagyobb a kisebbeknél. Ez a görbe az elektron-lyuk szimmetria miatt páros függvénye a hosszúságnak.

b.) A vezetőképesség a nyitott csatornák számának (Fermi-hullámszám) függvényében. ($\tilde{M} = \frac{k_{\rm F}W}{\pi}$). Feketével a szennyezetlen, piros szaggatott vonallal a szennyezett normál rendszer vezetőképessége és zöld pontozott vonallal a szennyezett NS hibrid rendszer vezetőképessége kettővel leosztva. Belül: a vezetőképesség Fourier-transzformáltja.

3.7. ábra. Paraméterek: a téglalap alakú tartomány hossza $L_0 = 4,0W$, a szennyező helye az $(x_0, z_0) = (0,7; 0,5)W$ pont és a szennyező erőssége $\lambda = 10,0$ illetve $\lambda = 2,0$.

3.5. Összefoglalás

Fokozódó érdeklődés kíséri mezoszkopikus rendszerekben a diffraktív szennyezők szerepének tanulmányozását [109]. A normál–szupravezető rendszerekre kiterjesztett módszerek új lehetőségeket nyújthatnak mind a szórási folyamatok szemiklasszikus leírására, mind az ilyen rendszerek energiaszint-eloszlásának tanulmányozására. A fentiekben a diffraktív szennyezőt tartalmazó normál–szupravezető hibrid rendszerek pályahosszeloszlásának első elméleti vizsgálatát mutattam be. Kiemeltem, hogy ezen rendszerek pályahossz-eloszlása alapvetően abban különbözik a normál rendszerekétől, hogy negatív hosszoknál is megjelennek csúcsok. A diffraktív szennyező jelenléte meghatározó a negatív hosszúságoknál megjelenő csúcsok szempontjából. A jelenséget a legegyszerűbb diffraktív szennyezővel, a Dirac-delta szennyezővel mutattam be, de lehetséges más diffraktív szórócentrumok (élek, törési pontok [99]) vagy bonyolultabb geometriák [51] vizsgálata is. A Bogoljubov–de Gennes-egyenlet megoldásával kapott eredményt egy szemiklasszikus közelítéssel is összehasonlítottam, mely az előbbivel kiváló egyezést mutatott. A szemiklasszikus közelítéssel sikerült a pályahosszeloszlás főbb csúcsaihoz tartozó pályákat azonosítanom. Remélhetőleg a pályák azonosítása ehhez hasonló geometriákban kísérletileg is megtörténik a közeljövőben. 4. fejezet

Andrejev-biliárdok

Andrejev-biliárdnak általában ballisztikus normál fémből (N) és hozzá gyengén csatolt szupravezetőből (S) álló rendszereket szokás nevezni [110]. Ha egy normál biliárd falait vagy falainak egy részét eltávolítjuk és helyére gyengén csatolt szupravezetőt illesztünk, akkor eredményül Andrejev-biliárdot kapunk, amire egy-két példa a 4.1 ábrán látható. Az Andrejev-biliárdok spektruma a normál–szupravezető határfelületen bekövetkező retroreflexió (Andrejev-reflexió) miatt jelentősen eltérhet a normál biliárdok spektrumától. Az irodalomban az Andrejev-biliárdok spektrumát többnyire csak a Fermi-energia közelében, ún. Andrejevközelítésben határozták meg. Ebben a fejezetben az Andrejev-reflexió hatását tanulmányozom biliárdok spektrumára, Andrejev-közelítésen túlmenően. Eredményeinket egy Phys. Rev. B illetve egy Phys. Rev. Lett. cikkben közöltük [85,86].

4.1. Bevezetés

Először Andrejev mutatott rá, hogy két szupravezető közötti normál fém réteg egyrészecske gerjesztései a retroreflexió miatt diszkrét energia spektrumot alkothatnak [37]. A Bogoljubov–de Gennes-egyenletből [34] kiindulva de Gennes és Saint-James egy szupravezetőhöz csatolt normál fém gerjesztési szintjeit vizsgálta [111]. A '90-es években sokan tanulmányoztak különböző geometriájú SN rendszereket [20,21,110,112–116]



4.1. ábra. Példák Andrejev-biliárdokra; a ferdén vonalkázott részek szupravezető tartományokat jelölnek.

és SNS (Josephson) kontaktusok kötött állapotait [117–119]. Ezekben a cikkekben a vezetőképességet, az állapotszámot – adott energia alatti energia-sajátállapotok száma –, az állapotsűrűséget (DOS) – adott ε energia δ környezetében $\rho(\varepsilon)\delta$ állapot található –, vagy a lokális állapotsűrűséget (LDOS) – a Green-függvény képzetes része – vizsgálták. Hoppe és munkatársai egy félvégtelen normál és félvégtelen szupravezető síkból álló rendszer vezetőképességét tanulmányozták erős mágneses térben [120]. Az Andrejev-biliárdok spektruma jelentősen különbözhet attól függően, hogy a normál tartomány klasszikusan kaotikus vagy integrálható [20,114–116]. A véletlen mátrix elmélet (RMT) alkalmazásával megmutatták, hogy a klasszikusan kaotikus normál tartomány esetében a hibrid rendszer állapotsűrűségében egy mini-gap található, míg az integrálható esetben az állapotsűrűség lineárisan indul [20]. Ezekben a munkákban a spektrumot csak a Fermi-energiához közel számolták ki, hiszen itt érvényes az Andrejev-közelítés (bővebben a 22. oldalon), de a spektrum érdekes jellegzetességeket mutathat az egész energiatartományon. Már a legegyszerűbb doboz alakú geometria esetén egyenlő távolságokra elhelyezkedő szingularitások találhatók az NS rendszer állapotsűrűségben (DOS) [85], lásd még a 4.2 ábrát.

Az egyik célom ezeknek a szingularitásoknak vizsgálata az NS hibrid rendszerek állapotsűrűségében. Ehhez először kiszámolom az energiaszinteket: a Bogoljubov–de Gennes-egyenletet nem konzisztens közelítésben oldom meg tetszőleges, ismert szórási mátrixú normál tartomány és nem tökéletes normál–szupravezető határfelület esetében. A továbbiakban ezeket az energiaszinteket és az általuk meghatározott mennyiségeket



4.2. ábra. Egy egyszerű Andrejev-biliárd (balra) normált állapotsűrűsége és állapotszáma (jobbra). Pontozott vonallal a DOS Fermi-energiához közeli lineáris viselkedése van kiemelve.

egzaktnak fogom nevezni. Az elnevezést az indokolja, hogy nem alkalmazok Andrejev-közelítést a kiszámításuk során. Ha a normál rendszer szórási mátrixa diagonális (a hullámfüggvények szeparálhatók egy keresztirányú és egy hosszanti hullámfüggvényre az egész normál rendszerben), akkor a kvantálási feltétel kifejezhető $\Phi_m(\varepsilon)$ fázisokkal. Ezek a fázisok az elektronok NS határfelületen kezdődő és végződő pályája mentén kiszámolt klasszikus hatással kapcsolhatók össze.

Több szerző [20,21,114–116] levezette már az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítését, és azt találták, hogy az állapotsűrűség kifejezhető a P(s) visszatérési valószínűséggel (P(s) annak valószínűsége, hogy s hosszúságú út megtétele után a részecske visszatér az NS határfelületre). A következőkben a kvantálási feltételből kiindulva újra levezetjük az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítését, és analitikus kifejezést adunk a P(s) visszatérési valószínűségre a $\Phi_m(\varepsilon)$ fázisok függvényében. P(s) csak a normál rendszer geometriájától és az NS határfelület helyzetétől függ. Az állapotsűrűségbeli szingularitások a P(s)-beli szingularitások következményei; másképpen fogalmazva speciális, klasszikus dinamikából meghatározható elektronpályák adják meg a kvantummechanikai állapotsűrűségben található szingularitások helyét.

Az N(E) állapotszámfüggvény megadja egy kvantumrendszer E energia alatti energiaszintjeinek számát. Ez diszkrét szintek esetében egy lépcsősfüggvény, amely az energiaszinteknél eggyel, vagy a degenerált energiaszinteknél a degeneráció fokával növekszik. Az állapotszámot fel lehet írni egy sima és egy fluktuáló tag összegeként. Ilyenkor a sima részt a Weyl-formula adja meg [121, 122]. Az egzakt kvantálási feltételből kiindulva levezetek egy az NS hibrid rendszerekre használható elsőrendű Weyl-formulát.

A fejezet felépítése a következő: bemutatom az általános Andrejev-biliárd energiaszintjeinek kiszámítását (4.2. alfejezet), a Weyl-formula levezetését (4.3. alfejezet), az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítését (4.4. alfejezet), példaképpen minden alpontban részletesen ismertetem a doboz alakú geometria esetét. A 4.5 pontban a korongbiliárd [85] és a sarokbiliárd [86] eredményeit tárgyalom a számítások részletezése nélkül, végül a 4.6 pontban összefoglalom a főbb eredményeket.

4.2. Szekuláris egyenlet hibrid rendszerekre

Ebben az alfejezetben egy tetszőleges alakú, kétdimenziós, normál elektrongáz rendszer félvégtelen szupravezető csőhöz illesztését mutatom be. Az energiaszinteket az illesztés során kapott egyenlet megoldásaként lehet kiszámolni. A normál rendszer – a 4.3 ábrán látható módon – egy W szélességű nyakkal csatlakozik a szupravezetőhöz. A nyak hosszúsága tetszőleges lehet, konkrét esetben akár nullához is tarthat. Ebben a nyakban és a szupravezető csőben megegyeznek a keresztirányú hullámfüggvények:

$$\chi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin \frac{n\pi y}{W}.$$
(4.1)

Feltételezem, hogy a normál tartomány kizárólag a nyak felé nyitott, és a nyaknál ismert a reflexiós amplitúdó a keresztirányú hullámfüggvények bázisában. A tökéletlen normál–szupravezető határfelületet alag-



4.3. ábra. A vizsgált rendszerek illusztrációja: egy zárt normál fém tartomány egy nyakkal kapcsolódik a szupravezetőhöz. A nyilak az általános megoldás egyes komponenseiben a síkhullámok haladási irányát szemléltetik.

útpotenciállal valamint a két tartományban eltérő Fermi-energiával és effektív tömeggel lehet figyelembe venni [123]. Az alagútpotenciált, mivel csak egyetlen paraméterrel akarom jellemezni, Dirac-deltával modellezem: $V(x, y) = U_0 \delta(x)$ [39]. A szupravezető $\Delta(\mathbf{r})$ párpotenciál állandó Δ_0 a szupravezetőben, zérus a normál fémben, és a Bogoljubov-de Gennes-egyenletet a 2. fejezetben bemutatott lépcsőfüggvény közelítésben oldom meg. A hibrid rendszert a következő BdG-egyenlet írja le:

$$\begin{pmatrix} H_0(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta(\mathbf{r})^* & -H_0(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \Psi(\mathbf{r}), \qquad (4.2)$$

ahol $\Psi(\mathbf{r})$ az elektronszerű és lyukszerű állapotoknak megfelelő kétkomponensű hullámfüggvény, $H_0(\mathbf{r}) = \mathbf{p}^2/2m(\mathbf{r}) - \mu(\mathbf{r})$ a szabad egyrészecske Hamilton-operátor, és ahol az effektív tömeg $m(\mathbf{r}) = m_{\rm N}$ illetve $m(\mathbf{r}) = m_{\rm S}$, a Fermi-energia pedig $\mu(\mathbf{r}) = E_{\rm F}^{(N)}$ illetve $\mu(\mathbf{r}) = E_{\rm F}^{(S)}$ rendre a normál illetve a szupravezető tartományban. A BdG egyenlet általános megoldása a szupravezetőben (S) illetve a normál nyakban (N) a

fent leírt feltételek mellett:

$$\Psi^{(S)}(x,y) = \sum_{n} \left[\begin{pmatrix} \gamma_e \\ 1 \end{pmatrix} e^{-iq_n^{(e)}x} b_n^{(e)} + \begin{pmatrix} \gamma_h \\ 1 \end{pmatrix} e^{iq_n^{(h)}x} b_n^{(h)} \right] \chi_n(y)$$

$$(4.3a)$$

$$\Psi^{(N)}(x,y) = \sum_{n} \left[\begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \frac{e^{ik_{n}^{(e)}x}}{\sqrt{k_{n}^{(e)}}} c_{n}^{(e,+)} + \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \frac{e^{-ik_{n}^{(e)}x}}{\sqrt{k_{n}^{(e)}}} c_{n}^{(e,-)} + \right.$$

$$\left. + \begin{pmatrix} 0\\0 \end{pmatrix} \frac{e^{ik_{n}^{(h)}x}}{\sqrt{k_{n}^{(e)}}} c_{n}^{(h,+)} + \begin{pmatrix} 0\\0 \end{pmatrix} \frac{e^{-ik_{n}^{(h)}x}}{\sqrt{k_{n}^{(e)}}} c_{n}^{(h,-)} \right] \chi_{n}(y).$$

$$(4.3b)$$

$$+ \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \frac{e^{ik_n^{(h)}x}}{\sqrt{k_n^{(h)}}} c_n^{(h,+)} + \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \frac{e^{-ik_n^{(h)}x}}{\sqrt{k_n^{(h)}}} c_n^{(h,-)} \bigg] \chi_n(y),$$

ahol $q_n^{(e)}(\varepsilon) = k_{\rm F}^{(S)} \sqrt{1 \pm i\eta - \left(\frac{n\pi}{k_{\rm F}^{(S)}W}\right)^2}$ és $q_n^{(h)}(\varepsilon) = \left[q_n^{(e)}(\varepsilon)\right]^*$ rendre az elektronszerű illetve lyukszerű gerjesztések hullámszámai a szupravezetőben, bevezetve az $\eta = \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_0^2}}{E_{\rm F}^{(S)}}$, a $\gamma_e = \frac{\Delta_0}{\varepsilon - \sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_0^2}}$ és a $\gamma_h = \gamma_e^*$ jelöléseket. A szupravezető csőben csak a végtelenben lecsengő megoldásokat: $e^{-iq_n^{(e)}x}$ és $e^{iq_n^{(h)}x}$ tartottuk meg, a felrobbanókat: $e^{iq_n^{(e)}x}$ és $e^{-iq_n^{(h)}x}$ elhagytuk. A normál nyakban a hullámszám elektronra $k_n^{(e)}(\varepsilon) = k_{\rm F}^{(N)} \sqrt{1 + \frac{\varepsilon}{E_{\rm F}^{(N)}W}} - \left(\frac{n\pi}{k_{\rm F}^{(N)}W}\right)^2}$ míg lyukra $k_n^{(h)}(\varepsilon) = k_n^{(e)}(-\varepsilon)$ teljesül. A $c_n^{(e,+)}, c_n^{(e,-)}, c_n^{(h,+)}$ és $c_n^{(h,-)}$ együtthatókban e,h rendre elektron illetve lyukszerű megoldást jelöl, míg a +,- az általános megoldásban az exponenciálisbeli előjelet jelzi. Az együtthatók jelentését a 4.3 ábra szemlélteti. A reflexiós amplitúdó a következő kapcsolatot adja közöttük:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{c}^{(e,-)} \\ \mathbf{c}^{(h,+)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{S}_0(\varepsilon) & 0 \\ 0 & \mathbf{S}_0^*(-\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^{(e,+)} \\ \mathbf{c}^{(h,-)} \end{pmatrix},$$
(4.4)

ahol a $\mathbf{c}^{(e,+)}$, $\mathbf{c}^{(h,-)}$, $\mathbf{b}^{(e)}$ és $\mathbf{b}^{(h)}$ vektorokat rendre a $c_n^{(e,+)}$, $c_n^{(h,-)}$, $b_n^{(e)}$ és $b_n^{(h)}$ együtthatók alkotják, továbbá $\mathbf{S}_0(\varepsilon)$ a normál rendszer reflexiós amplitúdója adott $E_{\mathrm{F}} + \varepsilon$ energián. Ekkor $\mathbf{S}_0^*(-\varepsilon)$ írja le a lyuk szórását. Válasszuk az NS határfelületet az x = 0 pontban. Itt a hullámfüggvénynek és deriváltjának folytonossági feltétele további egyenleteket ad:

$$\Psi_m^{(N)}\Big|_{x=0} = \Psi_m^{(S)}\Big|_{x=0}$$
 (4.5a)

$$\frac{d}{dx} \left(\Psi_m^{(N)} - \frac{m_{\rm N}}{m_{\rm S}} \Psi_m^{(S)} \right) \Big|_{x=0} = 2 \left. \frac{m_{\rm N}}{\hbar^2} U_0 \Psi_m^{(S)} \right|_{x=0}, \tag{4.5b}$$

ahol $\Psi_m^{(S/N)}(x) = \int dy \chi_m^*(y) \Psi^{(S/N)}(x, y)$. Behelyettesítve a hullámfüggvények (4.3a) és (4.3b) alakjait a (4.5a) egyenletbe:

$$\frac{1}{\sqrt{k_n^{(e)}}} \left[c_n^{(e,+)} + c_n^{(e,-)} \right] = \gamma_e b_n^{(e)} + \gamma_h b_n^{(h)}$$
(4.6a)

$$\frac{1}{\sqrt{k_n^{(h)}}} \left[c_n^{(h,+)} + c_n^{(h,-)} \right] = b_n^{(e)} + b_n^{(h)}, \tag{4.6b}$$

amiből a (4.4) összefüggést felhasználva $c_n^{(e,-)}$ és $c_n^{(h,+)}$ eliminálható, zérusra rendezés után:

$$\frac{1}{\sqrt{k_n^{(e)}}} \left[\mathbf{1} + \mathbf{S}_0(\varepsilon) \right]_{nl} c_l^{(e,+)} - \gamma_e b_n^{(e)} - \gamma_h b_n^{(h)} = 0$$
(4.7a)

$$\frac{1}{\sqrt{k_n^{(h)}}} \left[\mathbf{1} + \mathbf{S}_0^*(-\varepsilon) \right]_{nl} c_l^{(h,-)} - b_n^{(e)} - b_n^{(h)} = 0$$
(4.7b)

egyenletek kaphatók. Teljesen hasonlóan a (4.5b) egyenletből az alábbi adódik:

$$0 = i\sqrt{k_n^{(e)}} \left[\mathbf{1} - \mathbf{S}_0(\varepsilon)\right]_{nl} c_l^{(e,+)} + \gamma_e \left(-\frac{2m_{\rm N}U_0}{\hbar^2} + \frac{m_{\rm N}}{m_{\rm S}}iq_n^{(e)}\right) b_n^{(e)} + \gamma_h \left(-\frac{2m_{\rm N}U_0}{\hbar^2} - \frac{m_{\rm N}}{m_{\rm S}}iq_n^{(h)}\right) b_n^{(h)} \quad (4.8a)$$

$$0 = -i\sqrt{k_n^{(h)}} \left[\mathbf{1} - \mathbf{S}_0^*(-\varepsilon) \right]_{nl} c_l^{(h,-)} + \left(-\frac{2m_{\rm N}U_0}{\hbar^2} + \frac{m_{\rm N}}{m_{\rm S}} iq_n^{(e)} \right) b_n^{(e)} + \left(-\frac{2m_{\rm N}U_0}{\hbar^2} - \frac{m_{\rm N}}{m_{\rm S}} iq_n^{(h)} \right) b_n^{(h)}.$$
(4.8b)

Bevezetve a $\mathbf{K}^{(e)} = \delta_{nm} \sqrt{k_n^{(e)}}$, $\mathbf{K}^{(h)} = \delta_{nm} \sqrt{k_n^{(h)}}$, $\mathbf{Q}^{(e)} = \delta_{nm} q_n^{(e)}$ valamint $\mathbf{Q}^{(h)} = \left[\mathbf{Q}^{(e)}\right]^*$ hullámszám mátrixokat, a következő mátrixokat definiálhatjuk:

$$\mathbf{D}_{e}(\varepsilon) = \mathbf{K}^{(e)^{-1}} \left[\mathbf{1} + \mathbf{S}_{0}(\varepsilon) \right]$$
(4.9a)

$$\mathbf{D}_{h}(\varepsilon) = \mathbf{K}^{(h)^{-1}} \left[\mathbf{1} + \mathbf{S}_{0}^{*}(-\varepsilon) \right]$$
(4.9b)

$$\mathbf{D}_{e}^{\prime}(\varepsilon) = i\mathbf{K}^{(e)}\left[\mathbf{1} - \mathbf{S}_{0}(\varepsilon)\right]$$
(4.9c)

$$\mathbf{D}_{h}^{\prime}(\varepsilon) = -i\mathbf{K}^{(h)}\left[\mathbf{1} - \mathbf{S}_{0}^{*}(-\varepsilon)\right]$$
(4.9d)

$$\mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_2 = -1 \tag{4.9e}$$

$$\mathbf{B}_{1}'(\varepsilon) = -\frac{2m_{\mathrm{N}}U_{0}}{\hbar^{2}}\mathbf{1} + i\frac{m_{\mathrm{N}}}{m_{\mathrm{S}}}\mathbf{Q}^{(e)}$$
(4.9f)

$$\mathbf{B}_{2}^{\prime}(\varepsilon) = -\frac{2m_{\mathrm{N}}U_{0}}{\hbar^{2}}\mathbf{1} - i\frac{m_{\mathrm{N}}}{m_{\mathrm{S}}}\mathbf{Q}^{(h)}.$$
(4.9g)

Ezt a jelölést felhasználva a (4.7a), (4.7b), (4.8a) és (4.8b) egyenletek egy 4×4 -es hipermátrix alakban írhatók fel:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}_{e} & 0 & \gamma_{e}\mathbf{B}_{1} & \gamma_{h}\mathbf{B}_{2} \\ 0 & \mathbf{D}_{h} & \mathbf{B}_{1} & \mathbf{B}_{2} \\ \mathbf{D}_{e}' & 0 & \gamma_{e}\mathbf{B}_{1}' & \gamma_{h}\mathbf{B}_{2}' \\ 0 & \mathbf{D}_{h}' & \mathbf{B}_{1}' & \mathbf{B}_{2}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}^{(e,+)} \\ \mathbf{c}^{(h,-)} \\ \mathbf{b}^{(e)} \\ \mathbf{b}^{(h)} \end{pmatrix} = 0.$$
(4.10)

A (4.10) egyenletnek akkor vannak nem-triviális megoldásai, amikor a mátrix determinánsa zérus. Ebből a feltételből egyenletet kapunk ε -ra, amit megoldva megkaphatók a rendszer sajátenergiái:

$$X = \det \begin{pmatrix} \mathbf{D}_e & 0 & \gamma_e \mathbf{B}_1 & \gamma_h \mathbf{B}_2 \\ 0 & \mathbf{D}_h & \mathbf{B}_1 & \mathbf{B}_2 \\ \mathbf{D}'_e & 0 & \gamma_e \mathbf{B}'_1 & \gamma_h \mathbf{B}'_2 \\ 0 & \mathbf{D}'_h & \mathbf{B}'_1 & \mathbf{B}'_2 \end{pmatrix} = 0.$$
(4.11)

Ez utóbbi egyenletet nevezem szekuláris egyenletnek. A (4.10) egyenlet felfogható sajátérték problémaként is, ekkor a zérus sajátértékhez tartozó sajátvektorokat keressük, és ez ad feltételt az ε lehetséges sajátenergiákra. Kiszámolva a sajátvektorokat is, a (4.6a) és (4.6b) összefüggéseket felhasználva a hullámfüggvény (4.3a) vagy (4.3b) alakjába behelyettesítve a hullámfüggvény a szupravezetőben vagy a nyakban meghatározható.

A számítási igények csökkentése érdekében a hipermátrix kifejtési tételét [124] kétszer egymás után felhasználva a $4M \times 4M$ -es mátrix determinánsa helyett elegendő a következő $M \times M$ -es determinánsokat kiszámolni:

$$X = \det \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{e} & 0\\ 0 & \mathbf{D}_{h} \end{pmatrix} \det \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{e}\mathbf{B}_{1}^{\prime} & \gamma_{h}\mathbf{B}_{2}^{\prime}\\ \mathbf{B}_{1}^{\prime} & \mathbf{B}_{2}^{\prime} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{e}^{\prime} & 0\\ 0 & \mathbf{D}_{h}^{\prime} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{D}_{e}^{-1} & 0\\ 0 & \mathbf{D}_{h}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_{e}\mathbf{B}_{1} & \gamma_{h}\mathbf{B}_{2}\\ \mathbf{B}_{1} & \mathbf{B}_{2} \end{pmatrix} \end{bmatrix} = \\ = \det \mathbf{D}_{e} \det \mathbf{D}_{h} \det \begin{bmatrix} \gamma_{e}(\mathbf{B}_{1}^{\prime} - \mathbf{D}_{e}^{\prime}\mathbf{D}_{e}^{-1}\mathbf{B}_{1}) & \gamma_{h}(\mathbf{B}_{2}^{\prime} - \mathbf{D}_{e}^{\prime}\mathbf{D}_{e}^{-1}\mathbf{B}_{2})\\ \mathbf{B}_{1}^{\prime} - \mathbf{D}_{h}^{\prime}\mathbf{D}_{h}^{-1}\mathbf{B}_{1} & \mathbf{B}_{2}^{\prime} - \mathbf{D}_{h}^{\prime}\mathbf{D}_{h}^{-1}\mathbf{B}_{2} \end{bmatrix} = \\ = \det \mathbf{D}_{e} \det \mathbf{D}_{h} \det (\mathbf{B}_{2}^{\prime} - \mathbf{D}_{h}^{\prime}\mathbf{D}_{h}^{-1}\mathbf{B}_{2}) \det \left(\gamma_{e}(\mathbf{B}_{1}^{\prime} - \mathbf{D}_{e}^{\prime}\mathbf{D}_{e}^{-1}\mathbf{B}_{1}) - \\ - \gamma_{h}(\mathbf{B}_{2}^{\prime} - \mathbf{D}_{e}^{\prime}\mathbf{D}_{e}^{-1}\mathbf{B}_{2})(\mathbf{B}_{2}^{\prime} - \mathbf{D}_{h}^{\prime}\mathbf{D}_{h}^{-1}\mathbf{B}_{2})^{-1}(\mathbf{B}_{1}^{\prime} - \mathbf{D}_{h}^{\prime}\mathbf{D}_{h}^{-1}\mathbf{B}_{1}) \end{pmatrix},$$
(4.13)

ahol kihasználtuk, hogy det $\mathbf{D}_e \neq 0$, det $\mathbf{D}_h \neq 0$ és det $(\mathbf{B}'_2 - \mathbf{D}'_h \mathbf{D}_h^{-1} \mathbf{B}_2) \neq 0$. Ezek feltételek a triviális eseteket illetve a normál rendszer szintjeit zárják ki, ezért általában (4.13) helyett elegendő az alábbi egyenletet megoldani:

$$0 = \det\left(\mathbf{1} - \frac{\gamma_h}{\gamma_e}(\mathbf{B}'_1 - \mathbf{D}'_e \mathbf{D}_e^{-1} \mathbf{B}_1)^{-1} (\mathbf{B}'_2 - \mathbf{D}'_e \mathbf{D}_e^{-1} \mathbf{B}_2) (\mathbf{B}'_2 - \mathbf{D}'_h \mathbf{D}_h^{-1} \mathbf{B}_2)^{-1} (\mathbf{B}'_1 - \mathbf{D}'_h \mathbf{D}_h^{-1} \mathbf{B}_1)\right).$$
(4.14)

Az energiaspektrumot a (4.14) nemlineáris komplex egyenlet megoldásai adják. Abban az esetben, ha $\mathbf{D}_h(\varepsilon) = [\mathbf{D}_e(-\varepsilon)]^*, \mathbf{D}'_h(\varepsilon) = [\mathbf{D}'_e(-\varepsilon)]^*$ valamint $\mathbf{B}'_2(\varepsilon) = [\mathbf{B}'_1(-\varepsilon)]^*$ teljesülnek, a szekuláris egyenlet egy ekvivalens valós egyenletté alakítható át. Ezek a feltételek ezt jelentik, hogy a zárt csatornák a normál tartományban lecsengenek, vagy legalább nem keverednek a nyitott csatornákkal. Evvel a feltétellel bevezetve az

$$S_{\text{eff}}(\varepsilon) = (\mathbf{B}_1' - \mathbf{D}_e'\mathbf{D}_e^{-1}\mathbf{B}_1)^{-1}(\mathbf{B}_2' - \mathbf{D}_e'\mathbf{D}_e^{-1}\mathbf{B}_2)$$
(4.15)

effektív szórási mátrixot, a szekuláris egyenlet:

$$\det\left(\mathbf{1} - \frac{\gamma_h}{\gamma_e} S_{\text{eff}}(\varepsilon) S_{\text{eff}}^*(-\varepsilon)\right) = 0, \qquad (4.16)$$

alakba írható [125].

Ha a rendszerben időtükrözési szimmetria teljesül (nincsen külső mágneses tér), akkor az \mathbf{S}_0 reflexiós amplitúdó mátrix egy szimmetrikus mátrix. Ebből és \mathbf{S}_0 unitaritásából következik, hogy $\mathbf{1} = \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_0^{\dagger} = \mathbf{S}_0 (\mathbf{S}_0^T)^* = \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_0^*$. Ezt felhasználva belátható, hogy $\mathbf{D}'_e \mathbf{D}_e^{-1}$ valós mátrix:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{D}'_{e} \mathbf{D}_{e}^{-1} \end{bmatrix}^{*} = -i \mathbf{K}^{(e)}(\varepsilon) \begin{bmatrix} \mathbf{1} - \mathbf{S}_{0}^{*}(\varepsilon) \end{bmatrix} \left\{ \mathbf{K}^{(e)}(\varepsilon)^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{1} + \mathbf{S}_{0}^{*}(\varepsilon) \end{bmatrix} \right\}^{-1} = \\ = -i \mathbf{K}^{(e)} \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{0}(\varepsilon) - \mathbf{1} \end{bmatrix} \mathbf{S}_{0}^{*}(\varepsilon) \begin{bmatrix} (\mathbf{S}_{0}(\varepsilon) + \mathbf{1}) \mathbf{S}_{0}^{*}(\varepsilon) \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{K}^{(e)} = i \mathbf{K}^{(e)} \begin{bmatrix} \mathbf{1} - \mathbf{S}_{0}(\varepsilon) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{1} + \mathbf{S}_{0}(\varepsilon) \end{bmatrix}^{-1} \mathbf{K}^{(e)} = \mathbf{D}'_{e} \mathbf{D}_{e}^{-1}.$$

Teljesen hasonlóan belátható, hogy $\mathbf{D}_{h}^{\prime}\mathbf{D}_{h}^{-1}$ is valós mátrix, továbbá $\mathbf{B}_{2}^{\prime}(\varepsilon) = [\mathbf{B}_{1}^{\prime}(\varepsilon)]^{*}$ és $\gamma_{h} = \gamma_{e}^{*}$, ezenkívül $\mathbf{B}_{1}^{\prime}(\varepsilon)$ és $\mathbf{B}_{2}^{\prime}(\varepsilon) \varepsilon$ páros függvénye. Ezeket figyelembe véve látható, hogy a (4.12) determináns olyan alakú, hogy a második oszlop az első komplex konjugáltja; det $\begin{pmatrix} a & a^{*} \\ b & b^{*} \end{pmatrix}$, amely tulajdonságot felhasználva a determináns a következő módon fejthető ki:

$$\det \begin{pmatrix} a & a^* \\ b & b^* \end{pmatrix} = \det b^* \det(a - a^* b^{*-1} b)$$
$$= \det b \det b^* \det \left[ab^{-1} - a^* b^{*-1} \right]$$
$$= \det b \det b^* \det \left[2i \operatorname{Im} \left\{ ab^{-1} \right\} \right].$$

Esetünkben det $b \neq 0$ teljesül, ezért a (4.11) szekuláris egyenlet a következő valós egyenletté írható át:

$$\det \left[\operatorname{Im} \left\{ ab^{-1} \right\} \right] = \det \left[\operatorname{Im} \left\{ \gamma_e \left(\mathbf{B}'_1 - \mathbf{D}'_e \mathbf{D}_e^{-1} \mathbf{B}_1 \right) \left(\mathbf{B}'_1 - \mathbf{D}'_h \mathbf{D}_h^{-1} \mathbf{B}_1 \right)^{-1} \right\} \right] = \\ = \det \left[\operatorname{Im} \left\{ \gamma_e \left(\mathbf{B}'_1 \mathbf{D}_e + \mathbf{D}'_e \right) \mathbf{D}_e^{-1} \mathbf{D}_h \left(\mathbf{B}'_1 \mathbf{D}_h + \mathbf{D}'_h \right)^{-1} \right\} \right] = 0. \quad (4.17)$$

Konkrét alkalmazáskor ellenőrizni kell, hogy teljesülnek-e az utolsó átalakítások feltételei, és aszerint eldönteni, hogy a (4.13), (4.14) vagy (4.17) egyenletek közül melyiket célszerű alkalmazni.

4.2.1. A dobozbiliárd szekuláris egyenlete

Alkalmazásként tekintsük a legegyszerűbb rendszert: egy W vastagságú, d hosszúságú, egyik végén lezárt csődarabot csatlakoztassunk a szupravezetőhöz, ebből így egy olyan doboz lesz, aminek egy oldala szupravezető. A normál tartomány reflexiós amplitúdója:

$$\left[\mathbf{S}_{0}(\varepsilon)\right]_{mn} = -\delta_{mn}e^{2ik_{n}(\varepsilon)d},\tag{4.18}$$

ahol $k_n(\varepsilon)$ a nyakban definiált hullámszám. Mivel \mathbf{S}_0 diagonális, a (4.9a-4.9g) kifejezésekkel definiált mátrixok mind diagonálisak. Mivel nincsen mágneses tér, valamint nyitott és zárt csatornák közötti keveredés, elegendő a (4.17) valós determináns zérushelyeit keresni. Diagonális mátrix determinánsa a diagonálisban található elemek szorzata, ezért az egyes elemek zérushelyei lesznek a determináns zérushelyei. Azaz minden lehetséges *n*-re a következő kifejezés zérushelyeit kell megkeresni:

$$\operatorname{Im}\left\{\gamma_{e}\frac{Z-i\frac{m_{\mathrm{N}}}{m_{\mathrm{S}}}q_{n}^{(e)}+k_{n}^{(e)}\operatorname{ctg}\left(k_{n}^{(e)}\right)}{Z-i\frac{m_{\mathrm{N}}}{m_{\mathrm{S}}}q_{n}^{(e)}+k_{n}^{(h)}\operatorname{ctg}\left(k_{n}^{(h)}\right)}\right\},\tag{4.19}$$

ahol $Z = \frac{2m_N}{\hbar^2} U_0$. A fenti kifejezésben a törtet a nevező komplex konjugáltjával alul-felül beszorozva egy szimmetrikus alakra hozható, miközben a zérushelyek változatlanok maradnak, mert a nevező abszolútértéke

csak azokon az energiákon zérus, ahol a nyitott csatornák száma változik (nyitási pontok):

$$\operatorname{Im}\left\{\gamma_e D_n^{(e)}(\varepsilon) D_n^{(h)}(\varepsilon)\right\} = 0, \qquad (4.20)$$

ahol

$$D_n^{(e/h)}(\varepsilon) = Z \mp i \frac{m_{\rm N}}{m_{\rm S}} q_n^{(e/h)}(\varepsilon) + k_n^{(e/h)}(\varepsilon) \operatorname{ctg}\left(k_n^{(e/h)}(\varepsilon)\right).$$
(4.21)

Megjegyzem, hogy a levezetés során kihasználtam, hogy det $\mathbf{D}_{(e/h)} \neq 0$ azaz sin $k_n^{(e/h)} d \neq 0$ teljesül. Azok az energiák, ahol ez a feltétel nem teljesül, éppen a normál doboz Dirichlet-határfeltétellel vett szekuláris egyenletének a megoldásait adják vissza, tehát az NS rendszer szintjei szempontjából érdektelen pontokat hagyunk el. A (4.20) egyenlet numerikus megoldásával megkeresett energiaszintekből kiszámolt N(E) állapotszám a 4.2 ábrán fekete vonallal látható.

4.3. Weyl-formula hibrid rendszerekre

Zárt rendszerekben az N(E) állapotszám azoknak az állapotoknak a száma, amelyek energiája kisebb vagy egyenlő E-vel. Az állapotszám energia szerinti deriváltja az állapotsűrűség (DOS). Az állapotszám sima részét $\tilde{N}(E)$ egy üregrezonátor esetében Weyl vezette le először [121], részletesebb leírást a [122]-ből vettem. $\tilde{N}(E)$ vezető tagját a $\Theta(E - H_{\rm kl}(\mathbf{p}, \mathbf{r}))$ egész fázistérre vett integrálja adja h^d -tel leosztva, ahol d a rendszer dimenziója. Itt Θ a Heaviside-(lépcső-)függvény és $H_{\rm kl}$ a megfelelő klasszikus rendszer Hamilton-függvénye. Kétdimenziós normál rendszerre az állapotszám sima része:

$$\tilde{N}(E) = \frac{1}{h^2} \int \mathrm{d}^2 p \mathrm{d}^2 r \Theta(E - H_{\mathrm{kl}}(\mathbf{p}, \mathbf{r})).$$
(4.22)

Ezek szerint a Δ_0 szupravezető gapnél kisebb ε energiájú Andrejev-állapotokhoz meg kell próbálni klasszikus Hamilton-függvényt definiálni, és abból az állapotszám sima részét a (4.22) képlet szerint kiszámolni. Egy alternatív eljárással az állapotsűrűség kiszámolható a szekuláris egyenletből kiindulva [126, 127]. A továbbiakban meghatározom a szeparálható (diagonális) NS hibrid rendszerekre vonatkozó Weyl-formulát a szekuláris egyenletből kiindulva.

Ha a normál rendszer szórási mátrixa diagonális, akkor a (4.17) szekuláris egyenlet mindig (4.20) alakra hozható, és $D_m^{(e)}(\varepsilon) = [\mathbf{B}'_1 - \mathbf{D}'_e \mathbf{D}_e^{-1} \mathbf{B}_1]_{mm}$ illetve $D_m^{(h)}(\varepsilon) = [\mathbf{B}'_2 - \mathbf{D}'_h \mathbf{D}_h^{-1} \mathbf{B}_2]_{mm}$ lesz. Tetszőleges m kvantumszám esetén definiálható az NS rendszer $\Phi_m(\varepsilon)$ sajátfázisa:

$$\left[D_m^{(e)}(\varepsilon)\right]^* / D_m^{(e)}(\varepsilon) = e^{i\Phi_m(\varepsilon)}, \tag{4.23}$$

amelyről feltesszük, hogy ε monoton növekvő függyénye. A (4.20) szekuláris egyenlet tovább egyszerűsíthető:

$$\Phi_m(\varepsilon) - \Phi_m(-\varepsilon) - 2 \arccos \frac{\varepsilon}{\Delta_0} = 2n\pi,$$
(4.24)

ahol $n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$. A (4.24) egyenlet az NS rendszer nagyon egyszerű kvantálási feltétele. A megoldásai határozzák meg a Δ_0 szupravezető gap alatti ε_{mn} energiaszinteket. Ez az egyenlet kedvező kiindulópont

az állapotsűrűség és az állapotszám sima részének kiszámolásához, de numerikus számolásokhoz általában kedvezőbb a (4.17) egyenlet alkalmazása.

Az állapotsűrűség definíció szerint $\rho(\varepsilon) = \sum_{m=1}^{M(\varepsilon)} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{mn})$, ahol $M(\varepsilon)$ a keresztmódusok száma – azon megoldások száma, amelyhez valós longitúdinális hullámszám tartozik – adott ε energián. Felhasználva a (4.24) egyenlőséget az NS rendszer állapotsűrűsége:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{m=1}^{M(\varepsilon)} \left| \frac{dF_m(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right| \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(F_m(\varepsilon) - n), \qquad (4.25)$$

ahol $2\pi F_m(\varepsilon) = \Phi_m(\varepsilon) - \Phi_m(-\varepsilon) - 2 \arccos(\varepsilon/\Delta_0)$. Mivel a $\Phi_m(\varepsilon)$ sajátfázis az ε monoton növekvő függvénye, a $dF_m(\varepsilon)/d\varepsilon$ derivált pozitív lesz, ezért az abszolútérték a (4.25) egyenletben elhagyható. A második összegzést Poisson-összegzés [122, 128] segítségével elvégezve:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{m=1}^{M(\varepsilon)} \frac{dF_m(\varepsilon)}{d\varepsilon} \left[1 + 2\sum_{k=1}^{\infty} \cos(2\pi k F_m(\varepsilon)) \right].$$
(4.26)

Az állapotsűrűség két részre bomlik: sima illetve oszcilláló részekre, a (4.26)-beli k = 0 illetve $k \ge 1$ tagoknak megfelelően. Csak a sima tagot megtartva a Weyl-formula – az állapotszám sima része – az állapotsűrűség energia szerinti integrálja lesz:

$$\tilde{N}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=1}^{M(\varepsilon)} \left[\Phi_m(\varepsilon) - \Phi_m(-\varepsilon) \right] + M(\varepsilon) \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{\varepsilon}{\Delta_0} \right).$$
(4.27)

Ez az NS hibrid rendszerre vonatkozó Weyl-formula vezető rendben. Hasonlóan jártak el Schomerus és Beenakker [115] Andrejev-biliárdok állapotsűrűségének Bohr–Sommerfeld közelítése során. Ahhoz, hogy a Weyl-formulára analitikus kifejezés adódjon, a (4.27) egyenletben a keresztmódusok száma szerinti összegzést integrálásra kell cserélni [127]. Láthatóan a Weyl-formula a (4.23) definíció szerinti $\Phi_m(\varepsilon)$ sajátfázisokkal van kifejezve. Megjegyzem, hogy emiatt a fenti Weyl-formula csak szeparálható normál–szupravezető hibrid rendszerekre alkalmazható.

4.3.1. Weyl-formula dobozbiliárdra

Alkalmazásként forduljunk ismét a legegyszerűbb rendszerhez, és egyszerűsítsünk még rajta; tegyük fel, hogy tökéletes az NS felület, azaz Z = 0 ($U_0 = 0$), $m_{\rm N} = m_{\rm S}$ és $E_{\rm F}^{(N)} = E_{\rm F}^{(S)}$! A jelölés egyszerűsítése érdekében $k_{\rm F} = k_{\rm F}^{({\rm N})} = k_{\rm F}^{({\rm S})}$ és $E_{\rm F} = E_{\rm F}^{({\rm N})} = E_{\rm F}^{({\rm S})}$. A (4.21) és (4.23) egyenletekből Andrejev-közelítésben ($\Delta_0/E_{\rm F} \ll 1$ miatt $k_m^{(e)} \approx q_m^{(e)}$ kivéve ha a hullámszám exponensben jelenik meg) meghatározhatjuk a sajátfázisokat:

$$\Phi_m(\varepsilon) = 2k_m^{(e)}d. \tag{4.28}$$

Ebből a (4.24) kvantálási feltétel:

$$\left(k_m^{(e)} - k_m^{(h)}\right)d = n\pi + \arccos\left(\varepsilon/\Delta_0\right). \tag{4.29}$$

Megjegyzem, hogy ez az eredmény levezethető a Bohr–Sommerfeld-kvantálásból is. Valójában $\hbar \Phi_m(\varepsilon)$ az x tengellyel párhuzamos, a szupravezető és az x = d merevfal közötti elektronpálya mentén kiszámított klasszikus hatás.

Ahhoz, hogy analitikus kifejezést nyerjünk a Weyl-formulára, a (4.27) egyenletben az összegzést integrálással közelítjük:

$$\tilde{N}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \rho^{(N)} E_{\rm F} g(\frac{\varepsilon}{E_{\rm F}}) + M_h \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\varepsilon/\Delta_0\right) \right], \tag{4.30}$$

ahol

$$g(x) = \sqrt{2x(1-x)} + (1+x)\arcsin\sqrt{(1-x)/(1+x)} - \frac{\pi}{2}(1-x), \tag{4.31}$$

és $\rho^{(N)} = 2mA/(4\pi\hbar^2)$ az A = Wd területű izolált normál elektrongáz rendszer állapotsűrűsége. Itt M_h a nyitott módusok száma a lyukszerű kvázirészecskére: $M_h = [k_{\rm F}W/\pi\sqrt{1-\varepsilon/E_{\rm F}}]$, ahol a szögletes zárójel az egészrész-függvényt jelöli. $x \ll 1$ (tipikusan x < 0, 1) esetén $g(x) \approx \pi x$, ebből az Andrejev-állapotok számának sima része $\tilde{N}(\varepsilon) \approx 2\varepsilon\rho^{(N)}$. Az elektronszerű és a lyukszerű kvázirészecskék egyenlő arányban járulnak az állapotsűrűséghez, emiatt van a Weyl-formulában a kettes faktor. A (4.4) ábrán látható az egzakt állapotszám, valamint a Weyl-formula (4.27) összegzéses illetve (4.30) analitikus alakja. Az egzakt állapotszám a Weyl-formulából kapott érték körül oszcillál; az analitikus közelítés csak a szupravezető gaphez közeli energián tér el jelentősen az egzakttól.



4.4. ábra. A szekuláris egyenletből meghatározott – egzakt – állapotszám (feketével), a Weyl-formula (4.27) összeg alakja (kékkel), illetve a (4.30) analitikus közelítés (pirossal) NS dobozbiliárdban. Az egzakt állapotszámban fodrozódások láthatók. A Weyl-formulák elég jól közelítik az egzakt eredményt, csak a tartomány egyhez közeli részén romlik el az analitikus közelítés. A paraméterek d/W = 3, $k_{\rm F}W/\pi = 87,9$ és $\Delta_0/E_{\rm F} = 0,02$.

4.4. Az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítése

Az $N(\varepsilon)$ egzakt állapotszámban bizonyos energiáknál fodrozódások láthatók (például a 4.4 ábrán 0,085; 0,25; stb. energiáknál). Ezeken a helyeken az állapotsűrűségben szingularitások vannak. A csúcsok egyenlő távolságokra helyezkednek el az energiatartományban. Hasonló szingularitásokat találtak de Gennes és Saint-James [111] vagy Ihra és munkatársai [116] NS hibrid rendszerek, Lodder és Nazarov Andrejev-biliárdok [114], Šipr és Györffy pedig SNS rendszerek [129] állapotsűrűségében. Ebben az alpontban ezen szingularitások eredetét vizsgálom meg.

Több szerző [20, 114–116] levezette már az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítését normál– szupravezető hibrid rendszerben:

$$\rho_{\rm BS}(\varepsilon) = M \int_0^\infty \mathrm{d}s P(s) \sum_{n=0}^\infty \delta\left(\varepsilon - \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar v_{\rm F}}{s}\right),\tag{4.32}$$

ahol M a normál biliárdhoz csatolt szupravezető csőbeli nyitott csatornák száma, P(s) a visszatérési valószínűség – annak valószínűsége, hogy egy klasszikusan pattogó részecske s út megtétele után tér vissza a normál–szupravezető határfelületre. A (4.24) szekuláris egyenletből kiindulva újra levezetem a (4.32) egyenletet, és közben P(s)-re is adok összefüggést a $\Phi_m(\varepsilon)$ sajátfázisok függvényében. P(s)-ben különböző s-eknél szingularitások fordulhatnak elő, amikkel meg lehet érteni az állapotszámban talált fodrozódások szerkezetét.

A (4.24) szekuláris egyenlet megoldásai adják a NS hibrid rendszer diszkrét energiaszintjeit. Mivel $\varepsilon < \Delta_0$ és általában $\Delta_0 \ll E_{\rm F}$ is teljesül, az ε szerint első rendig sorba fejtett (4.24) szekuláris egyenlet megoldásai:

$$\varepsilon_{n\,m} = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi}{\Phi'_m(0)},$$
(4.33)

ahol $\Phi'_m(0)$ a $\Phi_m(\varepsilon) \varepsilon$ szerinti deriváltját jelöli a Fermi-energián ($\varepsilon = 0$), m = 1, 2, ..., M pedig az M darab keresztmódust indexeli. A (4.33) kifejezésben a szekuláris egyenlet Andrejev-reflexiónak megfelelő arc $\cos(\varepsilon/\Delta_0)$ tagját az $\varepsilon \to 0$ határesetnek megfelelő $\pi/2$ -lel helyettesítettem. Később megmutatom, hogy a sorfejtésben az arc $\cos(\varepsilon/\Delta_0)$ tagot figyelembe véve milyen módosításokra lesz szükség.

Induljunk ki az állapotsűrűség $\rho(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{M} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{nm})$ alakjából! Behelyettesítve ε_{nm} (4.33) alakját, végezzük el a következő azonos átalakítást:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{M} \int \mathrm{d}s \delta\left(\varepsilon - \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \pi v_{\mathrm{F}}}{s}\right) \delta\left(s - \hbar v_{\mathrm{F}} \Phi'_{m}(0)\right).$$
(4.34)

Diracdeltára teljesül a $\delta(f(x)) = |f'(x)|^{-1} \delta(x - x_0)$ egyenlőség, ahol f'(x) az f függvény x szerinti deriváltja, és x_0 az az egyetlen pont, amire $f(x_0) = 0$. Ezt a második Diracdeltára alkalmazva:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \int \mathrm{d}s\delta\left(\varepsilon - \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\pi v_{\mathrm{F}}}{s}\right) \sum_{m=1}^{M} \frac{\delta\left(m - m^*\right)}{\left|\frac{\partial\Phi'_{m}(0)}{\partial m}\right|_{m=m^*}},\tag{4.35}$$

ahol m^* -ot a (4.38) egyenlet határozza meg. Az m szerinti összegzést a Poisson összegzési szabály segítségével

elvégezve:

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{n=0}^{\infty} \int \mathrm{d}s \delta\left(\varepsilon - \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\pi v_{\mathrm{F}}}{s}\right) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_{1/2}^{M+1/2} \mathrm{d}m \frac{\delta\left(m - m^*\right)}{\left|\frac{\partial \Phi'_{m}(0)}{\partial m}\right|_{m=m^*}|} e^{i2\pi km}.$$
(4.36)

Csak a k = 0 nem-oszcilláló tagot tartva meg, az m szerinti integrál elvégzése után megkapjuk az állapotsűrűség (4.32) Bohr–Sommerfeld közelítését, és leolvashatjuk a P(s) visszatérési függvényt a sajátfázisokkal kifejezve:

$$P(s) = \frac{\Theta\left(M - m^*\right)\Theta\left(m^* - 1\right)}{M\hbar v_{\rm F} \left| \frac{\partial \Phi'_m(0)}{\partial m} \right|_{m = m^*} \right|},\tag{4.37}$$

ahol az s-függő m^{\ast} eleget tesz a

$$\hbar v_{\rm F} \left. \Phi'_m(0) \right|_{m=m^*} = s \tag{4.38}$$

egyenletnek, $\Theta(x)$ a Heaviside-lépcsőfüggvény, valamint kihasználtam, hogy m^* egész és $1 \le m^* \le M$. Végrehajtva a (4.32) egyenletben az s szerinti integrálást:

$$\rho_{\rm BS}(\varepsilon) = \frac{M}{\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} s_n(\varepsilon) P(s_n(\varepsilon)), \qquad (4.39)$$

ahol

$$s_n(\varepsilon) = \frac{\left(n + \frac{1}{2}\right)\pi\hbar v_{\rm F}}{\varepsilon}.$$
(4.40)

Az állapotszám az állapotsűrűség energia szerinti integrálja, azaz:

$$N_{\rm BS}(\varepsilon) = \int_{0}^{\varepsilon} d\varepsilon' \rho_{\rm BS}(\varepsilon') = M \sum_{n=0}^{\infty} \int_{s_n(\varepsilon)}^{\infty} ds P(s).$$
(4.41)

A fontos, új eredmény itt az, hogy a (4.37) egyenletben P(s)-t kifejeztük a $\Phi_m(\varepsilon)$ sajátfázisok segítségével. Belátható, hogy az így definiált P(s) s szerinti integrálja 1, azaz a visszatérési valószínűség egyre normalált. Megjegyzem, hogy korábban azt találtuk, hogy $\hbar \Phi_m(0)$ a klasszikus hatás egy Fermi-energiával rendelkező elektronra a szupravezető határfelületen történő két reflexió közötti pálya mentén. A hatás energia szerinti deriváltja a repülési idő, amit a $v_{\rm F}$ Fermi-sebességgel beszorozva a pálya hosszát kapjuk meg, azaz $\hbar v_{\rm F} \Phi'_m(0)$, ami megegyezik a korábban a (4.38) definícióval önkényesen bevezetett s-sel.

Most vegyük figyelembe az arc cos (ε/Δ_0) tagot elsőrendben a szekuláris egyenlet sorba fejtésekor: arc cos $(\varepsilon/\Delta_0) \approx \frac{\pi}{2} - \frac{\varepsilon}{\Delta_0}!$ A (4.33) energiaszintek most: $\varepsilon_{n\,m} = \frac{(n+\frac{1}{2})\pi}{\Phi'_m(0)+\frac{1}{\Delta_0}}$ alakúak. Evvel a fenti eljárás megismételhető, és az adódik, hogy az állapotsűrűség

$$\rho_{\rm BS}(\varepsilon) = \frac{M}{\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \left(s_n(\varepsilon) + \xi_0 \right) P(s_n(\varepsilon)), \tag{4.42}$$

ahol $\xi_0 = \frac{\hbar v_{\rm F}}{\Delta_0}$ a szupravezető koherenciahossz, valamint

$$s_n(\varepsilon) = \frac{\left(n + \frac{1}{\pi} \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\varepsilon}{\Delta_0}\right]\right) \pi \hbar v_{\rm F}}{\varepsilon}$$
(4.43)

lesz, ahol a szögletes zárójelben felismerhető az arc cos (ε/Δ_0) tag sorfejtése. Az állapotsűrűséget energia szerint integrálva azt találjuk, hogy az állapotszámra változatlanul a (4.41) összefüggés érvényes. A teljes spektrum vizsgálatakor az $\varepsilon \approx \Delta_0$ esetet is kezelnünk kell, és ekkor az arc cos (ε/Δ_0) elsőrendű sorfejtése sem kellően pontos már, de annak eredményéből kiindulva próbálkozzunk a következő közelítéssel: helyettesítsük az elsőrendű $\left[\frac{\pi}{2} - \frac{\varepsilon}{\Delta_0}\right]$ kifejezés helyére az Andrejev-reflexió miatti energiafüggő fáziseltolás eredeti alakját:

$$s_n(\varepsilon) = \frac{\left(n + \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{\varepsilon}{\Delta_0}\right)\right) \pi \hbar v_{\rm F}}{\varepsilon}!$$
(4.44)

Az állapotszámot változatlanul a (4.41) összefüggésből határozhatjuk meg, míg az állapotsűrűséget kiszámíthatjuk az állapotszám deriváltjaként:

$$\rho_{\rm BS}(\varepsilon) = \frac{\mathrm{d}N_{\rm BS}}{\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{M}{\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \left[s_n(\varepsilon) + \frac{\xi_0}{\sqrt{1 - (\varepsilon/\Delta_0)^2}} \right] P(s_n(\varepsilon)). \tag{4.45}$$

Megjegyzem, hogy a (4.45) eredmény az itteni feltételezéseknél általánosabb esetben is levezethető [130], akkor is, ha a szekuláris egyenlet nem írható fel a $\Phi_m(\varepsilon)$ sajátfázisokkal. Akkor P(s)-re (4.37)-hez hasonló analitikus alak nem adható, de P(s) geometriai megfontolásokkal, vagy numerikus módszerrel meghatározható.

Tegyük fel, hogy az $s \cdot P(s)$ visszatérési hossz valamely s^{szing} pályahossznál szinguláris. Ekkor a (4.43) egyenletből megadhatjuk azokat az energiákat, amelyeken $P(s_n(\varepsilon))$ és emiatt $\rho_{\text{BS}}(\varepsilon)$ állapotsűrűség szinguláris:

$$\varepsilon_n^{\text{szing}} = \frac{(n+1/2)\pi}{1+s^{\text{szing}}/\xi_0}\,\Delta_0,\tag{4.46}$$

ahol n tetszőleges egész, amelyre teljesül, hogy $\varepsilon_n^{\text{szing}} < \Delta_0$. Ebből a kifejezésből látszik, hogy a szingularitások egyenlő távolságokra helyezkednek el egymástól, és az egész $0 < \varepsilon < \Delta_0$ energiatartományban megtalálhatók. P(s) analitikus alakja, ezáltal az állapotsűrűségbeli szingularitások elhelyezkedése az izolált normál biliárd geometriájától függ. Megjegyzem, hogy a Bohr–Sommerfeld közelítés csak a tökéletes normál–szupravezető határfelület esetén alkalmazható.

4.4.1. NS dobozbiliárd

Alkalmazzuk a Bohr–Sommerfeld közelítésünket a korábbiakban már megismert példára, az NS dobozbiliárdra; megint csak a tökéletes határfelület esetét tekintve, legyen Z = 0 ($U_0 = 0$), $k_{\rm F} = k_{\rm F}^{(\rm N)} = k_{\rm F}^{(\rm S)}$ és $E_{\rm F} = E_{\rm F}^{({\rm N})} = E_{\rm F}^{({\rm S})}!$ Korábban kiszámoltam már a dobozbiliárd (4.28) sajátfázisait. Ezeket felhasználva:

$$\Phi_m(\varepsilon) = 2k_{\rm F}d \sqrt{1 + \frac{\varepsilon}{E_{\rm F}} - \left(\frac{m\pi}{k_{\rm F}W}\right)^2} \tag{4.47}$$

$$\Phi'_{m}(0) = \frac{2d}{\hbar v_{\rm F}} \left(1 - \left(\frac{m\pi}{k_{\rm F}W}\right)^2 \right)^{-1/2} =: \frac{s}{\hbar v_{\rm F}}$$
(4.48)

$$\frac{\partial}{\partial m} \Phi'_m(0) = \frac{2d}{\hbar v_{\rm F}} \left(1 - \left(\frac{m\pi}{k_{\rm F}W}\right)^2 \right)^{-3/2} \frac{m\pi^2}{k_{\rm F}^2 W^2},\tag{4.49}$$

ahol a (4.48) kifejezés az s definíciója, amiből:

$$\frac{m\pi}{k_{\rm F}W} = \sqrt{1 - \left(\frac{2d}{s}\right)^2}.\tag{4.50}$$

Behelyettesítve ezeket a P(s)-re kapott (4.37) összefüggésbe azt találjuk, hogy

$$P(s) = \frac{4d^2}{s^3 \sqrt{1 - \left(\frac{2d}{s}\right)^2}} \Theta(s - s_{\min}),$$
(4.51)

ahol $\Theta(s - s_{\min})$ az s (4.48) definíciójából következik, és $s_{\min} = 2d \left(1 - \frac{1}{M^2}\right)^{-1/2}$, ahol $M = \frac{k_F W}{\pi}$ a kereszt módusok (csatornák) száma. Ha sok módus van a rendszerben, akkor $M \gg 1$ miatt $s_{\min} = 2d$ adódik. Ez szemléletesen a szupravezető határfelület és a szemközti fal közötti pattogásnak felel meg. Szabad részecskék egyenesek mentén haladnak, és a normál határfelületeknél normál reflexiót szenvednek el. Ebben a képben nem is lehet olyan 2*d*-nél rövidebb pályát elképzelni, amely az NS határfelületen kezdődik és ugyanott végződik. Az A függelékben megmutatom, hogy P(s) kiszámolható tisztán geometriai megfontolások alapján is [131], és ugyanezt a kifejezést kapjuk.

Vegyük észre, hogy $s \cdot P(s)$ szinguláris az $s_{\text{szing}} = 2d$ pontban, ezért az állapotsűrűségben a (4.46) energiáknál szingularitás látható, míg az integrált állapotsűrűségben, azaz állapotszámban ezekben a pontokban kezdődnek az újabb fodrozódások. A 4.5 ábrán az állapotszám és az állapotsűrűség látható egy doboz alakú Andrejev-biliárd esetén. A (4.46) képletnek megfelelő szinguláris energiákat a tengelyen kereszttel megjelöltem. Az ábrán feltüntettem a szekuláris egyenlet numerikus megoldásaként kiszámolt energiaszintekkel készült lépcsőfüggvényt, valamint annak különböző rendű Bohr–Sommerfeld közelítéseit. A különböző Bohr–Sommerfeld közelítések az Andrejev-reflexióból származó arc cos (ε/Δ_0) fázis figyelembevételének felelnek meg; "BS 0.rend" a (4.40) nulladrendű (arc cos (ε/Δ_0) = $\pi/2$), "BS 1.rend" a (4.43) elsőrendű közelítés, végül "BS" a fázis egzakt tekintetbe vételével kapott (4.44) szerinti eredmény. Az ábrán jól látható, hogy a nulladrendű közelítés csak kis energiákon ad jó eredményt, az 1. rendű korrekció már csak az energiatartomány legtetején romlik el, míg az Andrejev-reflexió fázisával számoló eljárás az egész tartományon kiváló egyezést mutat a kvantummechanikai számolás eredményével.

Az energiaszintekből numerikus deriválással meghatározható az állapotsűrűség. Ha elég sok szintet ismerünk, akkor az energiatartományt egyenlő intervallumokra oszthatjuk, és összeszámolhatjuk az egyes



4.5. ábra. A normál–szupravezető hibrid doboz állapotszáma és állapotsűrűsége. Az egzakt állapotszám (feketével), a 0-ad rendű Bohr–Sommerfeld közelítése (zölddel), az 1. rendű (kékkel), és az Andrejev-reflexió fázisát figyelembe vevő közelítés (pirossal). Balra fent: egy törési pont nagyítása. Jobbra lent: az egzakt normált állapotsűrűség (feketével) és Bohr–Sommerfeld közelítése (pirossal). A paraméterek $d/W = 1, 3, k_F W/\pi = 171, 8$ és $\Delta_0/E_F = 0,025$.

intervallumokba eső energiaszintek számát. Az így kapott számok arányosak lesznek az intervallum közepéhez tartozó állapotsűrűséggel. Normálás után a numerikus deriválással számolt állapotsűrűség összevethető az állapotsűrűség (4.45) Bohr–Sommerfeld közelítésével. Az állapotsűrűséget a megfelelő A területű normál biliárd állapotsűrűségének kétszeresével normáltam. A kétszeres faktor az elektron–lyuk kettőződés miatt lép fel; $\text{DOS} = \frac{\rho_{\text{BS}}(\varepsilon)}{2\rho^{(N)}}$, ahol $\rho^{(N)} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{A}{4\pi}$, ha A a normál biliárd területe [24].

4.5. Eredmények

Az előzőekben bemutatott módszerek a dobozbiliárdnál bonyolultabb és érdekesebb rendszerekre is sikeresen alkalmazhatók. Az egyik ilyen rendszer a korongbiliárd [85], ahol a két koncentrikus kör közötti tartomány normál fém, és a belső körön belül helyezkedik el a szupravezető. Ez a rendszer polárkoordinátákban a doboz geometriájú rendszerhez hasonlóan szeparálható, a szórási mátrixa diagonális, így meg tudjuk határozni a sajátfázisokat, Weyl-formulát adhatunk rá és a visszatérési valószínűséget is kiszámolhatjuk. Végül egy nemdiagonális esetet is bemutatok, a sarokbiliárdot vizsgálom meg [86]. Ez egy háromszög alakú tartományból és egy nyakból áll, amely akár zérus hosszúságú is lehet. A P(s) ebben az esetben nem határozható meg a (4.37) képlettel, ugyanis már a sajátfázisok sem definiálhatók. Geometriai megfontolásokkal mégis meghatározhatjuk a visszatérési valószínűséget, amit az állapotsűrűséggel összevetve azt találjuk, hogy a spektrumban megjelenő mini-gap a leghosszabb lehetséges pályák hosszúságával áll kapcsolatban.



4.6. ábra. NS hibrid korong- (a.) és sarokbiliárd (b.) rendszer, a jellemző paramétereikkel.

4.5.1. Korongbiliárd

A 4.6*a* ábrán látható korongbiliárd rendszer több szempontból hasonló a korábbiakban mintarendszerként használt dobozbiliárdhoz. Ha (r, ϕ) polárkoordinátákban írjuk fel a rendszert, akkor a hullámfüggvény szeparálható; a transzverzális hullámfüggvények $e^{im\phi}$ alakúak az egész rendszerben, míg a longitudinális (radiális) hullámfüggvények Bessel- és Neumann-függvények kombinációi. A szupravezető tartomány ugyan most nem félvégtelen, de az origóban a Neumann-függvények felrobbannának, így ott csak Bessel-megoldásokat kell figyelembe venni. Az $r = R_{\rm S}$ felületnél itt is illeszteni kell a normál és a szupravezető rendszerben érvényes megoldásokat, azaz most is a lépcsőfüggvény közelítésben keressük az energiaszinteket. Ehhez a szupravezető koherenciahossznak sokkal kisebbnek kell lennie a belső kör sugaránál $\xi_0 \ll R_{\rm S}$, ellenkező esetben a szupravezetőben létrejövő kvázirészecskék hullámfüggvénye nem csengene le a szupravezető korongban, hanem azon áthaladna. Az illesztésből a dobozbiliárd (4.20) szekuláris egyenletével egyező feltételt kapunk, csak $D_m(\varepsilon)$ egy kicsit bonyolultabb lesz, hengerfüggvények kombinációjának 2 × 2-es determinánsa. A sajátfázisokat a (4.23) definícióból a hengerfüggvények aszimptotikájával meg lehet határozni. Az eljárás során az derül ki, hogy három tartományt kell megkülönböztetni (a $\pm m$ degenerációtól eltekintve, csak az $m \geq 0$ esetre): I. $m < k_h R_{\rm S} - \sqrt[3]{k_h R_{\rm S}}$. Ebben a tartományban a sajátfázis:

$$\Phi_m(\varepsilon) = 2\left[\vartheta_m(k_e R_{\rm N}) - \vartheta_m(k_e R_{\rm S})\right] + 2k_{\rm F} R_{\rm S} - m\pi - \frac{\pi}{2},\tag{4.52}$$

ahol $k_{e/h} = k_{\rm F} \sqrt{1 \pm \frac{\varepsilon}{E_{\rm F}}}$ és $\vartheta_m(x) = \sqrt{x^2 - m^2} - |m| \arccos \frac{|m|}{x}$. A (4.52) sajátfázisban az első két tagot \hbar -sal beszorozva éppen a két kör között mozgó elektron radiális hatását kapjuk. A további három tag független a ε energiától és így nincs szerepe az elektron dinamikájában. Ezek a pályák Andrejev-állapotok, a szupravezetőtől indulva: először elektronként a külső falon normál reflexiót szenvednek el, majd újra a szupravezetőn lyukként verődnek vissza, most lyukként pattannak vissza a normál falról és a szupravezetőnek ütközve elektronná alakulva záródik pályájuk, a 4.7 ábra a.) illusztrációjának megfelelően. Az Andrejev-



4.7. ábra. Balra: példa Andrejev-állapotra (a.) illetve suttogó módusra (b.). Jobbra: a korongbiliárd rendszer energiaszintjei az m kvantumszám függvényében. Piros vonalak választják el a szövegben leírt tartományokat. A paraméterek: $R_{\rm S}/R_{\rm N} = 0, 7, \ \Delta_0/E_{\rm F} = 0, 1,$ és $k_{\rm F}R_{\rm S} = 350$.

állapotok járuléka a Weyl-formulában (4.27) szerint:

$$\tilde{N}_{AS}(\varepsilon) = \frac{1}{\pi} \sum_{|m| < M_{AS}} \left[\vartheta_m(k_e R_N) - \vartheta_m(k_e R_S) - \vartheta_m(k_h R_N) + \vartheta_m(k_h R_S) \right] + 2M_{AS} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arccos \frac{\varepsilon}{\Delta_0} \right), \quad (4.53)$$

ahol $M_{\rm AS} = \left[k_h R_{\rm S} - \sqrt[3]{k_h R_{\rm S}}\right]$ a legnagyobb *m*, amelyre még létezik Andrejev-állapot. II. $m > k_e R_{\rm S} + \sqrt[3]{k_e R_{\rm S}}$. Ezen feltétel mellett a szekuláris egyenlet lényegesen egyszerűsíthető:

$$J_m(k_e R_N) J_m(k_h R_N) = 0, (4.54)$$

ahol $J_m(x)$ az m-ed rendű elsőfajú Bessel-függvény. Megjegyzem, hogy a (4.54) szekuláris egyenletben nem szerepelnek a szupravezetőt leíró paraméterek. Ez arról árulkodik, hogy ezek a megoldások nem tartalmaznak Andrejev-reflexiót, azaz a hozzájuk tartozó pályák nem érintik a szupravezetőt, hanem a normál falon pattogva körbejárják a korongot. Ezeket a megoldásokat suttogó állapotoknak (Whispering Galery States) nevezik [132], lásd a 4.7 ábra b.) illusztrációját. A (4.54) szekuláris egyenlethez nem lehet a (4.23) definíció szerinti sajátfázist meghatározni, mert abban $D_m^{(e)}(\varepsilon)$ zérus lehet, a szekuláris egyenletből mégis közvetlenül kiszámítható a suttogó állapotok járuléka a Weyl-formulában:

$$\tilde{N}_{\text{WGS}}(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \sum_{m=M_{\text{WGS}}}^{k_e R_{\text{N}}} \vartheta_m(k_e R_{\text{N}}) - \frac{2}{\pi} \sum_{m=M_{\text{WGS}}}^{k_h R_{\text{N}}} \vartheta_m(k_h R_{\text{N}}), \qquad (4.55)$$



4.8. ábra. Az egzakt állapotszám (feketével), Weyl-formulával (zölddel) és Bohr–Sommerfeld közelítéssel (piros szaggatottal) együtt, korongbiliárd rendszerben. Az állapotsűrűségbeli szingularitások itt is fodrozódásokat eredményeznek az állapotszámban. A Bohr–Sommerfeld közelítés az egész tartományon remek egyezést mutat, az egzakt állapotszám a Weyl-formula által meghatározott görbe körül oszcillál. A keresztek a (4.46) szinguláris energiákat jelölik. Paraméterek: $R_S/R_N = 2/7$, $\Delta_0/E_F = 0.05$ és $k_FR_S = 100$.

ahol $M_{\text{WGS}} = [k_e R_{\text{S}} + \sqrt[3]{k_e R_{\text{S}}}]$ a legkisebb *m*, amire létezik suttogó állapot. III. $k_h R_{\text{S}} - \sqrt[3]{k_h R_{\text{S}}} < m < k_e R_{\text{S}} + \sqrt[3]{k_e R_{\text{S}}}$. Közbülső állapotokról beszélünk. Ezeket azonban elhagyhatjuk a közelítő formuláinkban, mivel sokkal kevesebben vannak az előző két csoportnál. A (4.7) ábrán vonalak választják el egymártól a három tartományt. A középső tartományba érzékelhetően sokkal kevesebb energiaszint esik, mint a másik kettőbe.

A Weyl-formula a hibrid korongbiliárd esetében az Andrejev-állapotok és a suttogó állapotok járulékának összegével közelíthető. A (4.53) és (4.55) kifejezésekben az m szerinti összegzést integrálásra cserélve és elvégezve:

$$\tilde{N}(\varepsilon) = \frac{k_{\rm F}^2 R_{\rm N}^2}{2} \frac{\varepsilon}{E_{\rm F}} - \frac{k_{\rm F}^2 R_{\rm S}^2}{2} g(\frac{\varepsilon}{E_{\rm F}}) + 2k_{\rm F} R_{\rm S} \sqrt{1 - \frac{\varepsilon}{E_{\rm F}}} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \arccos\frac{\varepsilon}{\Delta_0}\right),\tag{4.56}$$

ahol

$$g(x) = \frac{3}{\pi}\sqrt{2x(1-x)} + \frac{1}{\pi}(1+x)\arcsin\sqrt{\frac{1-x}{1+x}} - (1-x)\left[\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi}\arccos\sqrt{\frac{1-x}{1+x}}\right].$$

A 4.8 ábrán a korongbiliárd állapotszáma és a (4.56) Weyl-formula látható. Az energiaszintekből számolt állapotszám a Weyl-formula körül oszcillál. Megjegyzem, hogy $x \ll 1$ esetén (a Fermi-energia közelében) g(x) = x vezető rendben, ahonnan $\tilde{N}(\varepsilon) = 2\rho^{(N)}\varepsilon$, ahol $\rho^{(N)} = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{A}{4\pi}$ az $A = (R_N^2 - R_S^2)\pi$ területű normál korongbiliárd állapotsűrűsége. A (4.56) Weyl-formulában az utolsó tag az Andrejev-reflexió fázisából jön.

Az Andrejev-állapotokra a (4.52) sajátfázisok ismeretében (4.37) segítségével meghatározhatjuk a vissza-



4.9. ábra. A visszatérési valószínűség és az állapotsűrűség korongbiliárd esetében. A visszatérési valószínűségbeli szingularitás miatt az állapotsűrűségben egyenlő távolságonként szingularitások lépnek fel. Fermienergián is véges az állapotsűrűség! Paraméterek: $R_{\rm S}/R_{\rm N} = 0, 7, \Delta_0/E_{\rm F} = 0, 1 k_{\rm F}R_{\rm S} = 350.$

térési valószínűséget:

$$P(s) = \frac{1}{4 s^2 R_{\rm S}} \frac{s_{\rm max}^4 - s^4}{\sqrt{[s_{\rm max}^4/s_{\rm min}^2 - s^2] [s^2 - s_{\rm min}^2]}} \Theta(s_{\rm max} - s) \Theta(s - s_{\rm min}), \tag{4.57}$$

ahol $s_{\min} = 2(R_N - R_S)$ valamint $s_{\max} = 2\sqrt{R_N^2 - R_S^2}$. A P(s) a 4.9 ábrán látható függvény, $s < s_{\min}$ és $s > s_{\max}$ helyeken mindenhol zérus értékű, viszont sP(s) az $s^{szing} = s_{\min}$ pontban szinguláris, ezért az állapotsűrűségben a korábban már ismertetett okból kifolyólag szingularitások sora jelenik meg a (4.46) energiáknál, egyenlő távolságokban. Az Andrejev-állapotok állapotsűrűségének Bohr–Sommerfeld közelítését a

$$\rho_{\rm AS}(\varepsilon) = \frac{2k_{\rm F}R_{\rm S}}{\varepsilon} \sum_{n=0}^{\infty} \left(s_n(\varepsilon) + \xi_0\right) P(s_n(\varepsilon)) \tag{4.58}$$

kifejezés adja. Az A függelékben bemutatok egy geometriai megfontolásokon alapuló levezetést is, amely a P(s)-re a fenti eredményt adja vissza [131].

A suttogó állapot
ok állapotsűrűségét a szekuláris egyenletből kiszámolva állandónak találjuk a
z ε energia szerint:

$$\rho_{\rm WGS} = \frac{\left(k_{\rm F}R_{\rm N}\right)^2}{2E_{\rm F}} \left[1 - \frac{2}{\pi} \left(\frac{R_{\rm S}}{R_{\rm N}} \sqrt{1 - \left(\frac{R_{\rm S}}{R_{\rm N}}\right)^2} + \arcsin\frac{R_{\rm S}}{R_{\rm N}} \right) \right]. \tag{4.59}$$

A közbenső állapotok járulékától eltekintve az állapotsűrűség $\rho(\varepsilon) = \rho_{\text{WGS}}(\varepsilon) + \rho_{\text{AS}}(\varepsilon)$ alakú Bohr–

Sommerfeld közelítése a 4.9 ábrán látható. Az állapotsűrűséget a megfelelő normál korongbiliárd állapotsűrűségének kétszeresével normáltam. Az $\varepsilon \to 0$ határesetben a doboztól eltérően az állapotsűrűség nem zérushoz, hanem egy állandóhoz tart. Ezt a suttogó módusok jelenléte okozza.

Az állapotsűrűség integrálásával az állapotszám Bohr–Sommerfeld közelítését is kiszámoltuk, és összevetettük a szekuláris egyenlet megoldásaként kapott, egzakt energiaszintekből előállított lépcsőfüggvénnyel. A két módszer kiváló egyezést mutat, amint az a 4.8 ábrán látható. Az ábrán a (4.46) képletnek megfelelő "szinguláris" energiákat kereszttel jelöltem.

4.5.2. Sarokbiliárd

A 4.6b ábrán látható sarokbiliárdra is sikerrel alkalmazható a korábbiakban bemutatott módszer. A normál tartomány reflexiós mátrixát úgy határozhatjuk meg, hogy a ferde részben hengerfüggvényekkel kifejtett hullámfüggvényt illesztjük a nyakban érvényes (4.3b) alakhoz. Az illesztés során a nyakban és a ferde részben egyenlő számú megoldást kell tekinteni, ekkor határozott az együtthatókra felírt lineáris egyenletrendszer. A számítás során az \mathbf{S}_0 mátrix unitaritásához annyi zárt módust kell figyelembe venni, hogy az unitaritástól való eltérés minimális legyen. Az \mathbf{S}_0 ismeretében a (4.17) egyenlet numerikus megoldásával a rendszer egzakt energiaszintjei megkereshetők. Mivel ez a rendszer nem diagonális, a sajátfázisok nem számolhatók ki, emiatt Weyl-formulánk sem alkalmazható rá. A Bohr–Sommerfeld közelítés ezzel szemben működik, az állapotszám-ra a (4.41), az állapotsűrűségre a (4.45) kifejezés érvényes, ahol $s_n(\varepsilon)$ -t a (4.44) összefüggés határozza meg.



4.10. ábra. Az állapotszám (feketével) és Bohr–Sommerfeld közelítése (színessel) három különböző szögű, véges hosszúságú nyakkal rendelkező sarokbiliárd esetén. Paraméterek: $M = \frac{k_{\rm F}W}{\pi} = 55, 5, \Delta/E_{\rm F} = 0,015$, a nyak hosszúsága pedig úgy változik, hogy a biliárd területe állandó legyen: $A = 5W^2$, ahol W a nyak szélessége.

P(s)-t most a sajátfázisokból nem tudjuk meghatározni, de geometriai módszerekkel numerikusan mindig kiszámolható, illetve speciális szögek esetén analitikusan is kifejezhető [131]. Az eredmények a 4.10 és 4.11 ábrákon láthatók. A Bohr–Sommerfeld közelítés remekül egyezik az egzakt eredményekkel. A véges nyakkal rendelkező biliárd esetében itt is megjelennek a fodrozódások az energiában egyenlő távolságokban. $\alpha = 45^{o}$ esetén könnyel belátható, hogy $s^{\text{szing}} = 2 * (d + W)$ hossznál sP(s) szinguláris (ahol d a nyak hosszúsága), ahonnan a "szinguláris energiák" kiszámíthatók. Ezeket az ábrákon kereszttel fel is tüntettem. A zérus nyak esetében görbénk eléggé eltér a korábbiaktól, amennyiben kis energiákon egyáltalán nincsenek energiaszintek, azaz egy mini-gap figyelhető meg a spektrumban. Ebben az esetben a (4.12) ábrán felrajzoltam a visszatérési valószínűséget és az állapotsűrűséget is. Látható, hogy a visszatérési valószínűségek megegyeznek abban, hogy mindegyikben van egy levágás, azaz egy olyan hosszúság, aminél hosszabb pályák a rendszerben nem fordulnak elő. A (4.44) kifejezésben látható, hogy ez az s^{\max} maximális hosszúság egy ε_{gap} minimális energiaszintet ad. Ez az eredmény első pillanatban ellentmondani tűnik Beenakker és munkatársai jóslatának [20], ami szerint integrálható normál tartományú biliárdban nincsen gap és az állapotsűrűség lineárisan indul a Fermi-energián. Beenakker és munkatársai levezetésükben feltették, hogy a $\tau_{\rm esc}$ kiszökési idő (az az idő, amíg a részecske újra a normál–szupravezető határfelületnek ütközik) sokkal nagyobb a $\tau_{\rm erg}$ ergodikus időnél (az az idő, amíg az egész fázisteret bejárja). Esetünkben ez a feltétel nem teljesül, tehát nincs ellentmondás.



4.11. ábra. Az állapotszám (feketével) és Bohr–Sommerfeld közelítése (színessel) három különböző szögű, zérus hosszúságú nyakkal rendelkező sarokbiliárd esetén. Paraméterek: $M = \frac{k_{\rm F}W}{\pi} = 55, 5, \, \Delta/E_{\rm F} = 0,015.$


4.12. ábra. A visszatérési valószínűség és az állapotsűrűség három különböző szögű, zérus hosszúságú nyakkal rendelkező sarokbiliárd esetén. A visszatérési valószínűségbeli felső levágás okozza az állapotsűrűségben látható mini-gapet. Paraméterek: ugyanazok, mint 4.11 ábrán.

4.6. Összefoglalás

A nanotechnológia fejlődésével lehetővé vált ballisztikus félvezető és szupravezető részekből álló hibrid rendszerek előállítása, ami ezen rendszereket mind a kísérleti, mind az elméleti fizikusok érdeklődésének körébe helvezte. Sokan vizsgálták sokféle hibrid rendszer (Andrejev-biliárdok, SNS átmenetek) állapotsűrűségét, vezetőképességét a Fermi-energiához közel. Ha a normál tartomány klasszikusan kaotikus, akkor a hibrid rendszer állapotsűrűségében egy mini-gapet találtak, míg klasszikusan integrálható rendszer állapotsűrűsége lineárisan indult a Fermi-energián. Ebben a fejezetben Andrejev-biliárdoknak a szupravezető gap alatti teljes spektrumát tanulmányoztam. Ehhez a Bogoljubov-de Gennes-egyenletet oldottam meg tetszőleges geometriájú, ismert szórási mátrixú normál tartományt egy nyakkal egy félvégtelen szupravezetőhöz csatlakoztatva. Az így kapott szekuláris egyenletet megoldva meghatároztam különböző rendszerek energiaszintjeit. Az állapotszámban megjelenő fodrozódások illetve az állapotsűrűségben megjelenő szingularitások eredetét keresve levezettem az állapotszám és az állapotsűrűség Bohr–Sommerfeld közelítését, és diagonális esetben összefüggést adtam a BS közelítésben megjelenő klasszikus visszatérési valószínűség kiszámítására. A visszatérési valószínűségben felbukkanó szinguláris hosszúságok – sokszorosan degenerált pályák – az állapotsűrűségben egyenlő távolságokban megjelenő szingularitásokat, az állapotszámban fodrozódásokat okoznak. A Weyl-formula az állapotszám sima részét közelíti klasszikus mennyiségekkel (felület, térfogat). Diagonális biliárdok esetében megadtam a hibrid rendszerre alkalmazható Weyl-formulát. A fejezetben mindenütt a legáltalánosabb tárgyalásra törekedtem, konkrét példaként a hibrid dobozbiliárdot részletesen ismertettem. A bemutatott módszerek sikeresen alkalmazhatók bonyolultabb rendszerek esetében is, ezek közül a korongbiliárdot és a sarokbiliárdot vázoltam. A korongbiliárd esetében a dobozbiliárdhoz hasonlóan az állapotsűrűségben szingularitások sora jelent meg. A legfőbb különbség a két rendszer között a korongbiliárd nem-zérus állapotsűrűsége Fermi-energián. Ennek oka az úgynevezett suttogó állapotok szerepe a rendszerben, amelyek a szupravezetőtől függetlenül jöhetnek létre. A nyak nélküli sarokbiliárd állapotsűrűségében – bár kvázi-integrálható rendszerről van szó – egy mini-gapet találtunk, aminek létét a P(s)-beli felső levágással magyaráztuk. A véges nyakkal rendelkező sarokbiliárd állapotsűrűségében – a másik két rendszerhez hasonlóan – egyenlő távolságonként szingularitások tűnnek fel. 5. fejezet

Nem-lokális áramok

Ferromágnesből és szupravezetőből készített átmenetek vezetési tulajdonságainak kísérleti vizsgálata olyan új jellegzetességekre derített fényt, amelyek normál fémből és szupravezetőből készült átmenetekre nem jellemzők [59, 60, 62–64, 68, 133]. Az új jellemzőket az okozza, hogy az elektron-lyuk korrelációk lecsengenek a ferromágnesben. Ha a spin-forgató kölcsönhatás elhanyagolható, akkor további effektusokat jósolnak elméleti munkák, például a GMR lecsökkenését diffúz mágneses többrétegekben a szupravezető kontaktus miatt [77], vagy nem-lokális áramok megjelenését két ellentétesen polarizált ferromágneses cső spin-szinglett szupravezetőhöz csatolásakor [79, 134]. Falci és társai az 1.4 ábrán látható átmeneteket tanulmányozták alagutazási határesetben, és a ferromágneses csövek távolságával exponenciálisan csökkenő, nem-lokális áramot találtak. Ebben a fejezetben arra a kérdésre keressük a választ, hogy lehetséges-e a nem-lokális áram nagyságát jelentősen megnövelni, és arra a válaszra jutunk, hogy igen [87], ha egy $A = L \cdot (2M_f + M)$ területű normál tartományt helyezünk a ferromágnesek és a szupravezető közé az 5.1a ábrán látható módon. Az effektus akkor a legnagyobb, amikor a normál tartomány közel négyzet alakú [87]. A normál tartományban merőleges mágneses teret alkalmazva tovább növelhető a nem-lokális áram nagysága.

5.1. Bevezetés

Először tekintsük a Landauer-formalizmus [14] általánosítását normál–szupravezető hibrid rendszerekre! A normál fém (nem szupravezető) csövekkel hőtartályokhoz csatolt hibrid rendszer áram-feszültség összefüggéseit lineáris válasz közelítésben először C. J. Lambert írta fel [135]:

$$I_{1} = \frac{2e^{2}}{h} \left[\left(N - R_{0} + R_{A} \right) \left(v_{1} - v \right) + \left(T_{A}' - T_{0}' \right) \left(v_{2} - v \right) \right]$$
(5.1a)

$$I_{2} = \frac{2e^{2}}{h} \left[(T_{A} - T_{0}) (v_{1} - v) + (N - R'_{0} + R'_{A}) (v_{2} - v) \right],$$
(5.1b)

ahol rendre I_1 és I_2 áramok folynak ki a v_1 illetve v_2 feszültségű 1 és 2 hőtartályokból, v a hibrid rendszer feszültsége. R_0 , (R'_0) , $[R_A, (R'_A)]$ együtthatók azon valószínűségek, hogy egy elektron az 1 (2) hőtartályból elektronként [lyukként] visszaszóródik az 1 (2) hőtartályba, míg T_0 , (T'_0) , $[T_A, (T'_A)]$ együtthatók az 1 (2) hőtartályból származó elektronok 2 (1) hőtartályba elektronként [lyukként] átjutásának valószínűségét adják meg. Minden együtthatót a Fermi-energián kell kiszámítani, a hibrid rendszer szórási mátrixából a megfelelő almátrix átlósösszegeként. A szórási mátrix unitaritásából az együtthatókra teljesülnek az

$$N = R_0 + R_A + T_0 + T_A = R'_0 + R'_A + T'_0 + T'_A$$
(5.2)

egyenlőségek, ahol N a nyitott csatornák száma a csövekben. Az (5.1) formulák zérus hőmérsékleten, kis feszültségkülönbségek esetén érvényesek. Az (5.1) összefüggések segítségével NS hibrid rendszerek széles körének vezetési tulajdonságai kényelmesen leírhatók [51]. Például, ha a 2-es cső egy feszültségmérő csatlakozójaként működik, akkor nagyjából teljesül, hogy nem folyik benne áram, azaz $I_2 \approx 0$. Ekkor az (5.1b) egyenletből adódik, hogy

$$(v_2 - v) / (v_1 - v) = (N - R'_0 + R_A) / (T_0 - T_A).$$
(5.3)

Ha nincsenek Andrejev-folyamatok, ez az arány mindig pozitív. Ezzel szemben, ha az Andrejev-transzmisszió felülmúlja a normál transzmissziót, akkor az arány negatív is lehet, ami egy új negatív négypont vezetőképességet eredményez normál-szupravezető hibrid rendszerekben [50]. Ehhez teljesen hasonlóan bukkannak fel a nem-lokális áramok hibrid rendszerekben. Ha most a 2-es hőtartályt és a hibrid struktúrát egyforma feszültségekre kapcsoljuk, azaz $v_2 - v = 0$ esetén azt találjuk, hogy:

$$I_{1} = \frac{2e^{2}}{h} \left(N - R_{0} + R_{A} \right) \left(v_{1} - v \right) = \frac{2e^{2}}{h} \left(2R_{A} + T_{0} + T_{A} \right) \left(v_{1} - v \right)$$
(5.4a)

$$I_2 = \frac{2e^2}{h} \left(T_{\rm A} - T_0 \right) \left(v_1 - v \right), \tag{5.4b}$$

ahol felhasználtuk a szórási mátrix unitaritásából nyert 5.2 összefüggéseket. Ha nincsenek Andrejevfolyamatok, azaz $T_{\rm A} = R_{\rm A} = 0$ esetén belátható, hogy az (5.4) egyenletek az

$$I_2 = -I_1 = -\frac{2e^2}{h} T_0 \left(v_1 - v \right) \tag{5.5}$$

eredményre vezetnek. Ez éppen az áramok megmaradása a normál rendszerben; ami az 1 hőtartályból kifolyik, az a 2 hőtartályban jelenik meg.

Hasonlóan, ha
a $T_0=R_{\rm A}=0$ feltétel teljesül, akkor

$$I_2 = +I_1 = \frac{2e^2}{h} T_A \left(v_1 - v \right).$$
(5.6)

Ez már érdekesebb az előző példánknál, ekkor ugyanis az 1-es csőben befolyó áram a 2-es csőből is "beszív" egy vele egyirányű, egyenlő nagyságú áramot. Ezt nevezem nem-lokális áramnak, mert ez a lyukáram úgy jön létre a 2-es csőben, hogy az 1-es csőre kapcsoltam feszültségkülönbséget. Gondoljuk meg most, hogy mi történik két ellentétes, teljesen spin polarizált ferromágneses cső esetében! Az egyik csövön beérkező elektron a másik csőhöz eljutva nem tudja azon elhagyni a rendszert, mert abban nincsenek neki megfelelő elektronállapotok. Emiatt az első csőből a második csőbe normál transzmisszió nem lehetséges, azaz $T_0 = 0$. Ha a szupravezető-normál határfelülethez elér, akkor egy Andrejev-reflexió során ellentétes spinű lyukként verődik vissza. Ekkor viszont nem tud visszaverődni abba csőbe, ahol bejött, mert most abban nincsen neki megfelelő spin-beállású lyukállapot, emiatt az első csőbe az Andrejev-reflektálódás sem lehetséges, azaz $R_{\rm A} = 0$ is teljesül. Ilyen rendszereket fogok a továbbiakban megvizsgálni.

A fejezet felépítése a következő: először az 5.2 alfejezetben ismertetem az alkalmazott modellt, majd az 5.3 alfejezetben bemutatom és értelmezem a kapott eredményeket, végül az 5.4 pontban összefoglalom a legfontosabb következtetéseinket. A numerikus számítások során alkalmazott módszereket a (B) függelékben ismertetem.

5.2. Modell

A Bogoljubov–de Gennes-egyenletet oldjuk meg szoros kötésű közelítésben (TBA), kétdimenziós négyzetrácson. Rekurzív Green-függvény módszerrel meghatározzuk a rendszer felületi Green-függvényét a ferromág-



5.1. ábra. Az általam vizsgált rendszerek. Két (ellentétesen) polarizált ferromágneses cső (F), egy normál elválasztó tartománnyal kapcsolódik a szupravezetőhöz. A normál tartományban egy merőleges mágneses teret is alkalmazhatunk, és a.) esetben a normál régió lehet ballisztikus vagy diffúz is. A b.) rendszer a ferromágneses csövekre merőleges irányban végtelen kiterjedésű, a normál tartomány csak tiszta lehet. A ferromágneses csövek mindkét esetben v_1 (v_2) feszültségű hőtartályokhoz kapcsolódnak, míg a szupravezető v feszültségre van kötve.

neses csövek csatlakozásánál. Ezekből a Fischer–Lee-relációkkal meghatározhatők a szórási mátrix megfelelő elemei. A szórási mátrix elemeinek segítségével a vezetőképesség illetve az áram-feszültség összefüggések megkaphatók.

Az 5.1 ábrán látható rendszerhez egy a geometriához illeszkedő négyzetrácsot definiálunk. A négyzetrácsot egyetlen paraméter, az a rácsállandó írja le, és minden rácsponthoz egy \vec{l} rácsvektor rendelhető. A (2.16) BdG-egyenletet ezen a négyzetrácson diszkretizáljuk és oldjuk meg. Az egyes rácspontokhoz elektronszerű illetve lyukszerű gerjesztéseknek, valamint a kétféle spinbeállásnak megfelelően összesen négy szabadsági fok rendelhető, melyeket rendre $\Psi^{(\sigma)}(\vec{l})$ illetve $\Phi^{(\sigma)}(\vec{l})$ jelöljön, ahol $\sigma = \pm 1$ a kétféle spinbeállás. A ferromágnességet Stoner-modellel [24,136] írjuk le; az ellentétes spinű elektronok között egy $h(\vec{l})$ kicserélődési felhasadást veszünk figyelembe. Az s-szinglett szupravezetőt a $\Delta(\vec{l})$ rendparaméterrel jellemezzük. A normál fém tartomány egy merőleges mágneses térbe helyezhető, amelyet a Peierls-helyettesítéssel vehetünk figyelembe [24, 88]; $\vec{k} \rightarrow (\vec{p} + e \cdot \vec{A}(\vec{l}))/\hbar$, ahol $\vec{A}(\vec{l})$ a vektorpotenciál, *e* az elemi töltés. A diszkretizált BdG-egyenlet a fenti feltevésekkel a következő alakú lesz:

$$E\Psi^{(\sigma)}(\vec{l}) = \left[\epsilon(\vec{l}) - \sigma h(\vec{l})\right]\Psi^{(\sigma)}(\vec{l}) - \sum_{\vec{\delta}}\gamma(\vec{l})\Psi^{(\sigma)}(\vec{l}+\vec{\delta}) + \sigma\Delta(\vec{l})\Phi^{(-\sigma)}(\vec{l})$$

$$E\Phi^{(\sigma)}(\vec{l}) = -\left[\epsilon(\vec{l}) - \sigma h(\vec{l})\right]\Phi^{(\sigma)}(\vec{l}) + \sum_{\vec{\delta}}\gamma(\vec{l})\Phi^{(\sigma)}(\vec{l}+\vec{\delta}) - \sigma\Delta^{*}(\vec{l})\Psi^{(-\sigma)}(\vec{l}),$$
(5.7)

ahol az összegzést az \vec{l} rácsponttal szomszédos összes $\vec{l} + \vec{\delta}$ rácspontra kell elvégezni. Az (5.7) kifejezésben az első tag a rácsponti energia, amelyben összeadódnak a diszkretizálás során diagonális tagok, úgymint az $E_{\rm F}$, $U_0(\mathbf{r})$, $U(\mathbf{r})$ potenciálok illetve a Laplace-operátor diagonális része. A második tag az átfedési energia, amely térben off-diagonális és a diszkretizálás során a Laplace-operátorból származik. A harmadik, spinben off-diagonális tag pedig a spinek közti kölcsönhatást írja le a szupravezetőben.

Az alábbiakban az egyes tagok fizikai jelentését részletesebben bemutatom; a diagonális tagot további



5.2. ábra. A vezetőképesség különböző erősségű rendezetlenség mellett. A görbék y-tengelymetszete adja meg az elasztikus szabad úthosszt.

két részre bontom: a spin-független $\epsilon(\vec{l})$ energiára és a spin-függő kicserélődési felhasadásra.

A normál fémbeli rácspontokhoz definiált $\epsilon(\vec{l})$ energia az $[\epsilon_0 - \epsilon_W/2, \epsilon_0 + \epsilon_W/2]$ tartományon egyenletes eloszlással generált véletlen szám. A $\epsilon(\vec{l})$ energiára sokaság átlagot képezve így lehetséges diffúzív normál fémek leírása, ahol az ϵ_W nagyságának változtatásával lehet a λ_{el} elasztikus szabad úthosszt hangolni. Tetszőleges λ_{el} elasztikus szabad úthossz modellezéséhez választható egy ϵ_W érték. Ezt a választást egy önálló számolásban tesszük meg, ahol normál hőtartályhoz csatlakozó, L hosszúságú, W szélességű, téglalap alakú, normál, diffúz tartomány átlagolt vezetőképességét ábrázoljuk különböző L hosszúságok mellett (lásd az 5.2 ábrát). A Drude-modellben a fajlagos vezetőképességre a $\sigma = \frac{ne^2 \tau_{el}}{m}$ összefüggés érvényes, ahol $\tau_{el} = \lambda_{el}/v_F$ az elasztikus ütközések között eltelt idő, m a töltéshordozó tömege, e a töltése és n az állapotok száma egységnyi térfogatban. Ezek szerint kétdimenziós esetben, ha ábrázoljuk a $\sigma = GL/W$ mennyiséget az L függvényében (itt G a vezetőképesség $2e^2/h$ egységekben), akkor (legalábbis egy bizonyos tartományban) állandó függvényt kapunk, melynek metszete az y tengellyel az elasztikus szabad úthosszt adja meg $2a/\sqrt{k_F \cdot a}$ egységekben. Ilyen módon tetszőleges ϵ_W -hez tartozó λ_{el} leolvasható. A továbbiakban ϵ_W -t úgy választjuk meg, hogy az elasztikus szabad úthossz kb. 10 rácsállandó nagyságú legyen. Ha $\epsilon_W = 0$, akkor tiszta határesetről beszélünk. A szupravezetőben $\epsilon(\vec{l}) = \epsilon_0$ míg a ferromágneses csövekben $\epsilon(\vec{l}) = \epsilon_1$ a rácsponthoz definiált energia.

A kicserélődési felhasadás a ferromágneses csövekbeli rácspontokra $h(\vec{l}) = h_k$, ahol k = 1, 2 a csöveket indexeli. Ellentétesen polarizált ferromágneses csövek esetében $h_1 = -h_2 = \epsilon_M$ teljesül, míg párhuzamosan polarizált csövekre $h_1 = h_2 = \epsilon_M$ igaz a jelölésünkben. A másik két régióban a kicserélődési felhasadás zérus $(h(\vec{l}) = 0)$.

A mágneses tér hatását egy fázisként lehet az átfedési energiába beépíteni a következő módon: $\gamma(\vec{l}) = \gamma e^{-ie\vec{A}(\vec{l}).\vec{\delta}/\hbar}$, ahol a vektorpotenciált Landau-mértékben választjuk meg: $\vec{A}(\vec{l}) = (0, B_z \cdot l_x, 0)$ a normál részben, és zérus máshol. Ellenőrizhető, hogy a vektorpotenciál ilyetén megválasztása egy z-irányú, azaz a síkra merőleges mágneses teret ír le, és a határfeltételeket is kielégíti.

Ha \vec{l} a szupravezetőben lévő rácspontra mutat, akkor $\Delta(\vec{l}) = \Delta_0$, máshol $\Delta(\vec{l}) = 0$. Ez a szokásos



5.3. ábra. (Normál) ferromágneses cső diszperziós relációjának szemléltetése. A két oldalon a kétféle energiaskála értékei láthatók. A fekete vonalak a cos-os diszperziót mutatják a különböző kvantumszámokra. A Fermi-energia vonala és a diszperziós görbék metszési pontjaiban piros (kék) pontok jelölik a jobbra (balra) haladó megoldások hullámszámait. A két zöld vonal a kicserélődési felhasadás miatti eltolást jelöli az egyes spinekre.

lépcsőfüggvény közelítés normál-szupravezető hibrid rendszerekben.

A modell jobb megértése érdekében bemutatok egy egyszerű példát: a (nem-szupravezető) ferromágneses cső esetét zérus mágneses térben. Az (5.7) Hamilton-operátorral definiált rendszer diszperziós relációja ekkor a következő alakot ölti:

$$E = \epsilon_0 - \sigma h - 2\gamma \cos\left(k_m^z \cdot a\right) - 2\gamma \cos\frac{m\pi}{M_f + 1},\tag{5.8}$$

ahol a jelölések megegyeznek a Hamilton-operátor definíciójában használtakkal, valamint $M_f \cdot a$ a cső szélessége. Normál (nem-ferromágneses) csövek esetében a kicserélődési felhasadás zérus (h = 0). Mivel a cos függvény értékei ±1 között lehetnek, a rendszerben a minimális energia $\epsilon_0 - 4\gamma$, míg a maximum $\epsilon_0 + 4\gamma$ lehet, a rendszer sávszélessége 8 γ . A Fermi-energiának az E = 0 felel meg, ami átskálázás után – ha a minimális energiát tekintjük zérusnak – $E_{\rm F} = 4\gamma - \epsilon_0$ lesz. Mint tudjuk, a szabad részecske diszperziós relációja parabolikus. Ha a $k \cdot a \ll 1$ feltétel teljesül, a cos függvény parabolával közelíthető: $\cos(k_i \cdot a) \approx 1 - (k_i \cdot a)^2/2$, ahol i = z, x. A modellben a Fermi-hullámszámot mindig ebben a határesetben szokás definiálni, azaz $k_{\rm F} \cdot a \approx \sqrt{\frac{4\gamma - \epsilon_0}{\gamma}}$. Annál jobb az egyezés a parabolikus diszperziós relációval, minél inkább teljesül a $k_{\rm F} \cdot a \ll 1$ feltétel.

Az 5.3 ábrán szemléltetésül egy $M_f = 7$ cső diszperziós relációját vázoltam. A két oldalon a kétféle energiaskála értékeit ábrázoltam. A fekete vonalak a cos-os diszperziót mutatják a különböző kvantumszámokra (összesen $M_f = 7$ darab). A Fermi-energia vonala és a diszperziós görbék metszési pontjaiban piros (kék) pontok jelölik a jobbra (balra) haladó megoldások hullámszámait. A két zöld vonal a kicserélődési felhasadás miatti eltolást jelöli az egyes spinekre. Valójában a szinteket kellene eltolni $\pm h$ -val, és továbbra is a Fermi-energián tekinteni az elérhető állapotokat, de egyszerűbb gondolatban (és az ábrán) a Fermienergiát tologatni. Az ábrán látható helyzetben az egyik spinre egyáltalán nincsen elérhető állapot, az ilyen esetet félfémnek nevezi az irodalom. A piros görbe a parabolikus diszperziós relációt mutatja összevetésül. Ha minden kvantumszámra a cos függvény minimuma közelében van a metszéspont, akkor a szoros kötésű közelítés jól írja le a szabad elektrongázt. Ehhez az ábrán az $E_{\rm F}$ Fermi-energiát lefelé kellene elmozdítani, akkor viszont kevés állapotunk lenne, és a csövek vastagságát kellene növelni ahhoz, hogy valósághű legyen a modellünk. A csövek vastagságával viszont a számítógépes futási idő köbösen nőne. Általában kompromisszumra kell jutnunk a rendelkezésre álló gépidő és közelítések alkalmazhatósága között. A kísérletileg elérhető tartományban mindenképpen teljesülnek a $\Delta_0 \ll E_{\rm F}$ és $M_f > k_{\rm F} \cdot a$ feltételek, ezért ennek megfelelően választottam meg a paramétereket. A cos függvény-szerű és a parabolikus sávszerkezet között pedig többnyire nincsen érdemi eltérés, a jelenségek nagy része az előbbivel jól reprodukálható, de az eredmények értelmezésénél gondolni kell arra is, hogy nem csak a szoros kötésű közelítés okozta jelenséget találtunk-e. A választott paraméterek ennek megfelelően $\gamma = 1$, $\epsilon_0 = 0, 2$, $\Delta_0 = 0, 1$ és $M_f = 10$. Ezen paraméterek mellett $\epsilon_{\rm M} = 3, 8$ választás 100%-osan polarizált ferromágneseket eredményez, a továbbiakban általában ezt az esetet hasonlítom össze a normál ($\epsilon_{\rm M} = 0$) csövekkel.

Vizsgáljuk meg az (5.7) Hamilton-operátorral definiált rendszerek vezetési tulajdonságait! Ehhez az áramokra vonatkozó (5.4b) egyenletben $T_{\rm A}$ -t és T_0 -t kell meghatározni. Az eljárás során először a Greenfüggvényt kell kiszámítani a ferromágneses csövek csatlakozási pontjaiban, majd ezt felhasználva – a (C) fejezetben leírt módszerrel – a szórási mátrix szükséges elemei megadhatók. Mivel alapvetően a 100%osan polarizált elrendezés áll az érdeklődésünk központjában, és ott a vezetőképesség csak a $T_{\rm A}$ Andrejevtranszmisszió függvénye, így vizsgálódásaim nagy részében csak ezen szórási mátrix amplitúdó kiszámítását követem majd nyomon.

Ehhez első lépésben a rendszer Green-függvényét a ferromágneses csövek csatlakozásánál lévő rácspontokban kell kiszámolni. Az egész rendszer Green-függvényét a (B.1) függelékben leírt módszerrel határozom meg: a félvégtelen ferromágneses csövek Green-függvényét a szórási tartomány Hamilton-operátorával kapcsolom a félvégtelen szupravezető cső Green-függvényéhez:

$$G = [1 - gh_{\text{eff}}]^{-1} g, \qquad (5.9)$$

ahol G a teljes rendszer Green-függvénye, g a félvégtelen csövek Green-függvénye és h_{eff} a szórási tartományt leíró Hamilton-operátor. A félvégtelen csövek Green-függvénye a (B.26) egyenletekből közvetlenül beprogramozható. Elvileg az ábrán baloldalt csatlakozó két ferromágneses cső egy csőként (az elválasztó szigetelő tartománnyal együtt) kezelhető volna, de akkor nehéz lenne numerikusan szétválogatni az egyes csövekhez tartozó módusokat, és emiatt nehézkes lenne az egyes szórási mátrix amplitúdók meghatározása. Így ehelyett külön-külön számolom ki a két félvégtelen cső g₁,g₂ felületi Green-függvényét, és abból felépítem a rendszer teljes $M + 2M_f$ szélességének felületi Green-függvényét (az elválasztó szigetelő tartománynál zérussal kell a mátrixokat feltölteni):

$$\mathbf{g}^{\mathrm{B}} = \begin{pmatrix} \underline{\mathbf{g}_{1}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{g}_{2} \end{pmatrix}.$$
 (5.10)

A félvégtelen szupravezető cső felületi Green-függvénye adja a g^J jobb oldali felületi Green-függvényt.

A szórási tartományt leíró Hamilton-operátor rengeteg belső szabadsági fokot is tartalmaz, amelyeket

célszerű eliminálni a (B.2) függelékben leírt decimálással. A decimálás akkor igazán hatékony, hogyha a rendszert olyan szeletekre tudjuk osztani, amelyekre igaz, hogy csak a szomszédos szeletek között van kölcsönhatás. Ehhez az (5.1a) ábrán látható geometria esetében a rendszert horizontálisan (függőleges vonalakkal) kell felszeletelni. A decimálás eredményeképpen a szórási tartomány két szeletre és a köztük ható csatolásra egyszerűsödik, amelyet egy effektív Hamilton-operátorként foghatunk fel. Ennek az eljárásnak nagy előnye, hogy a szórási tartomány L hosszúságával csak lineárisan nő a futási idő.

A normál szórási tartományt a decimálás módszerével egyetlen effektív csatolási állandóba sűrítem a (B.2) függelékben ismertetett módszerrel. Végül a (B.6) egyenlettel az összetett rendszer felületi Green-függvénye kiszámolható. Az 5.1b geometria esetében a ferromágneses csövek felületi Green-függvénye mellett a hosszanti (az ábrán függőleges) NS hibrid cső Green-függvényét kell a ferromágneses csövek becsatlakozásánál lévő pontokra kiszámolni. Ehhez most vízszintes vonalak mentén szeletelem fel ezt a régiót. A szeletek $M + M_{\rm S}$ méretűek lesznek, ahol a szupravezető $M_{\rm S}$ szélességét úgy választom meg, hogy a szupravezető koherenciahossznál nagyobb legyen, mert így a gap alatti energiákon az NS felületnél bekövetkező Andrejev-reflexiók során a szupravezető oldalon gerjesztett kvázirészecskék amplitúdója lecseng és nem kell a külső falról visszaszóródást figyelembe venni. Ha a szeletekre eltolásinvariancia teljesül (nincsen rendezetlenség, és a vektorpotenciál is jól van megválasztva), akkor a (B.3) függelékben leírt végtelen rendszer Green-függvényét a ferromágneses csövek csatlakozási pontjaiban kell kiértékelni, és végül a különböző részek Green-függvényét a (B.5) képlettel lehet összekapcsolni. Hangsúlyozom, hogy ebben a geometriában csak tiszta normál fémet tudunk kezelni, mivel az NS hibrid csőre feltettük az eltolásinvarianciát.

A modellben spin-forgató folyamatokat nem vettem figyelembe, és az s-szinglett szupravezető a fel-spinű (le-spinű) elektronokat a le-spinű (fel-spinű) lyukakkal kapcsolja össze, ezért az egész rendszer kettéválasztható: fel-spinű elektronok és le-spinű lyukak illetve le-spinű elektronok és fel-spinű lyukak alrendszerére. Ez a numerikus számolásoknál nagy előny, ugyanis minden mátrix mérete felére csökken, ami a diagonalizálásoknál 8-szoros futásidő megtakarítást jelent.

5.3. Eredmények

A numerikus számolások során egyrészt arra törekedtem, hogy minél nagyobb Andrejev-transzmissziót, és ezáltal a második csőben minél nagyobb áramerősséget érjek el. Ehhez a geometriai paramétereket (M, L) és mágneses teret változtattam. Másrészt igyekeztem megérteni a rendszert, a rendszerben zajló transzport folyamatokat. Diffúz esetben egyszerű rezisztor modellel értelmezhetők az eredmények. Amikor a ferromágneses kontaktusok esetén átlagoltam a diffúz rendezetlenségre, akkor a fluktuációk nem csökkentek a minták számának növelésével olyan mértékben, mint a normál (nem-ferromágneses) kontaktusok esetében. A vezetés ekkor rezonáns jellegű, amely tulajdonságot aztán alaposan megvizsgáltam.

5.3.1. Geometriai optimalizálás

Először zérus mágneses tér mellett a téglalap alakú diffúz tartomány geometriai paramétereit változtattam. A csövek vastagsága változatlanul $M_f = 10$ a számolások során, a másik két hosszparamétert 1 és 150 rácsállandó között szisztematikusan változtattam. A rendezetlen minták száma 500 és 10000 között változott



5.4. ábra. Az I_2 áramerősség a csövek közti távolság függvényében különböző vastagságú diffúz réteg esetében. Látható, hogy az áram előjele ellentétes normál (pirossal) illetve ferromágneses csövekre (kékkel). Megjegyzem, hogy a jobb áttekinthetőség érdekében az ellentétes előjelű áramokat különböző skálán ábrázoltam. Jobbra: a diffúz réteg vastagságának lecsökkenésével határesetben a *Falci és társai* által talált exponenciális távolság–áram (abszolútérték) összefüggés adódik.

egy-egy átlagolás során. A nagyobb rendszerméreteknél jelentős a méret miatti önátlagolás, ezért ott elegendő kisebb mintákkal átlagolni és ezáltal – bár egy-egy realizáció számításigénye nagyobb – kivárható futásidőket lehet elérni.

Az 5.4 ábrán a második csőbeli áramerősséget ábrázoltam normál illetve ellentétesen polarizált félfém csövek esetén a csövek távolságának függvényében. A pozitív előjel felel meg a hőtartályból a hibrid rendszer felé folyó áramnak. Az ábra a várakozásnak megfelelően azt mutatja, hogy egy nem-lokális áram jelenik meg a második csőben, ha a normál transzmissziót dominálja az Andrejev-transzmisszió, ebben a helyzetben a ferromágneses csőbeli módusok hiánya miatt. Ennek az áramnak az iránya (és nagysága) megegyezik az első csőben folyó áram irányával (és nagyságával). Az is megfigyelhető, hogy az áram nagyságának csökkenése a csövek távolságának növelésével nem szükségszerűen exponenciális, hanem annál sokkal enyhébb lehet (1/M, ahogy látni fogjuk). Ha a diffúz réteg vastagságát erősen lecsökkentettük (1-2 rácsállandóra), akkor exponenciális csökkenést találtunk, egyezésben *Falci és társai* eredményével [79].

Láttuk, hogy a ferromágneses csövek esetében az áramerősséget (vezetőképességet) az Andrejevtranszmisszió valószínűsége határozza meg. Így magától értetődik, hogy elsősorban ezt vizsgáljuk meg alaposabban. A normál esetben ugyan a vezetőképesség a normál és az Andrejev-transzmisszió különbségétől függ, azonban az 5.5 és 5.6 ábrán látható, hogy a két esetben hasonló a rendezetlenségre átlagolt vezetőképesség, csak a normál csövek esetében sokkal kisebbek a fluktuációk. Emiatt érdemes a normál rendszer Andrejev-transzmisszióját vizsgálni, feltételezvén, hogy az ott tapasztalt összefüggések a ferromágneses csöveknél is megállják a helyüket.

Bár a rendszer túl bonyolult ahhoz, hogy teljesen átlássuk a benne zajló transzport folyamatokat, és a



5.5. ábra. Az Andrejev-transzmisszió függése a normál réteg L vastagságától, különböző M távolságban elhelyezkedő csövek esetén.

geometria analitikus számoláshoz sem kedvező, az Andrejev-transzmisszió függése a geometriai paraméterektől egyszerűen megérthető. Ha vékony a normál réteg (L = 1, 2), akkor a *Falci és társai* által megfigyelt exponenciálisan csökkenő amplitúdót találjuk a csövek közti távolság növelésével. Ezt az 5.4 ábra betétjében láthatjuk, az áram ugyanis arányos a vezetőképességgel, ami arányos az Andrejev transzmisszióval; $\frac{2e^2}{h}T_{\rm A} = G = I_2/(v_1 - v) \sim exp(-2M/\pi\xi_0)$, ahol ξ_0 a szupravezető koherenciahossz.

A másik három tartományt szemlélteti az 5.7 ábra. Kis *L*-ekre (vékony normál rétegre) az Andrejevtranszmisszió lineárisan növekszik *L*-lel az Ohm-törvénynek megfelelően. Amíg a rendszer karakterisztikus mérete kisebb az elasztikus szabad úthossznál ($M, L \leq \lambda_{el}$), a rendszer a ballisztikus rezsimben van, és ekkor



5.6. ábra. Az Andrejev-transzmisszió függése a csövek M távolságától a normál réteg különböző L vastagsága mellett.



5.7. ábra. Az Andrejev-transzmisszió részletes vizsgálata normál csövek esetén. A csövek közti távolságok: M = 0, 5, 10, 20, 30, 60, 100 rendre.

a vezetőképességhez illeszthető egyenes meredeksége változatlan M függvényében. Ez látható az 5.7 ábra y tengelyhez közeli részén. Ellenkező esetben $(M, L \ge \lambda_{\rm el})$ a rendszer diffúz. A karakteriszikus hosszúságok szerint két tartományt különböztethetünk meg, az egyikben a normál réteg vékony $(L \ll M)$, ekkor az ellenállás nagy része abból ered, hogy a részecskék az egyik csőtől a másik csőig el kell jussanak. Az $M + 2 \cdot M_f$ hosszúságú és L szélességű diffúz normál réteg vezetőképessége ekkor: $G \sim \sigma L/(M + 2 \cdot M_f)$, ami szintén lineáris függést jelent az L vastagság függvényében, csak az M távolság növelésével az egyenesek meredeksége csökken. Ez látható az 5.7 ábrán "Diffúz I" címkével jelzett részen. Végül abban az esetben, ha a rendszer sokkal vastagabb, mint a kontkatusok távolsága, akkor két sorbakapcsolt ellenállásként fogható fel, először míg az elektron eljut a normál–szupravezető határfelülethez, majd lyukként visszaverődik a másik csőhöz. Ennek során kétszer halad végig a L hosszúságú és $M + 2 \cdot M_f$ szélességű diffúz tartományon, amelynek a vezetőképessége most: $G \sim \sigma(M + 2 \cdot M_f)/2L$, ami most 1/L-es függést mutat. Ez a "Diffúz II" címkével jelzett tartomány az 5.7 ábra betétjében látható, ahol a log – log skálán a –1 meredekségű egyenes felel meg az 1/L-es függésnek. A két diffúz tartományon tapasztalt ellentétes L-függésből látszik, hogy van egy olyan L érték, amelyre a vezetőképesség maximális, és ez az $L \approx (M + 2 \cdot M_f)$. Ekkor a normál tartomány közelítőleg négyzet alakú.

5.3.2. Rezonáns transzport

Mint már említettem, a ferromágneses kontaktusok esetén a rendezetlenségre történő átlagolás során sokkal lassabban csökkentek a fluktuációk, mint a teljesen hasonló paraméterekkel rendelkező, normál csövekhez kapcsolt rendszerben. Ennek a különbségnek a felderítésére mindkét típusú kontaktus esetében megvizsgáltuk a szórási amplitúdók energiafüggését. Az eltérés szembeötlő, amint az az 5.8a ábrán is látható. Míg a normál csövek esetében az Andrejev-transzmisszió lassan változó, sima függvénye az energiának, addig



5.8. ábra. Az Andrejev-transzmisszió energiafüggése, diffúz illetve tiszta rendszerben, háromféle kontaktus esetén: félfém, normál, illetve gyengén csatolt normál (extra potenciálgátat vezettem be a kontaktusnál). A "+" jelek a zárt rendszer energiaszintjeit jelölik. Paraméterek: M = 10, L = 30, egyébként lásd az 5.3.1 alfejezetben megadott értékeket!

a félfém csöveknél majdnem zérus alapszintre keskeny, hegyes csúcsok ülnek rá. Ez utóbbi viselkedés a rezonáns transzportra emlékeztet. Gyengén csatolt kontaktusok esetén a transzport a rendszer energiaszintjein keresztül történik, azaz amikor van a rendszernek elérhető energiaszintje, akkor a részecskék beugranak az energiaszintre, majd onnan a másik kontaktusra kiugranak. Ehhez a transzmissziós együtthatókra az úgynevezett Breit–Wigner rezonancia-feltételnek kell teljesülnie [8,137]:

$$T(E) = \sum_{n} \frac{\Gamma_n^1 \Gamma_n^2}{(E - E_n)^2 + (\Gamma_n^1 + \Gamma_n^2)^2/4},$$
(5.11)

ahol az összegzés a zárt rendszer E_n energiaszintjeire történik, és Γ_n^i a potenciálgát "szélessége" az *i*-dik kontaktusnál, az *n*-dik energiaszinten. Első pillanatra nem világos, hogy a ferromágneses csövekhez kapcsolt rendszerben miért lenne gyenge a csatolás, hiszen a csatolási állandó – a normál esethez hasonlóan – megegyezik a rendszerben érvényes átfedési energiával ($\gamma = 1$). Kiderül viszont, hogy a lokális állapotsűrűség a ferromágneses kontaktusoknál közel zérus, így érvényes a rezonáns transzport feltétele. Ennek ellenőrzésére egyrészt módosítottam a rendszert: a kontaktusoknál egy alagutazási potenciálgátat vezettem be, ami megvalósítja a gyenge csatolás esetét. Azt találtam ekkor, hogy mindkét típusú kontaktus esetén hasonló jelleget ölt a transzport, sőt a legtöbb csúcs helye is megegyezik. Másrészt kiszámoltam a tiszta, normál–szupravezető doboz energiaszintjeit, valamint a rendszer Andrejev-transzmisszióját a tiszta határesetben. Az 5.8b ábrán látszik, hogy a transzmisszió csúcsainak helye elég jól megegyezik a rendszer energiaszintjeivel.

5.3.3. Mágneses tér szerepe

A kísérletekben a minta aránylag egyszerűen mágneses térbe helyezhető, ezért fontos megvizsgálni a mágneses tér hatását a rendszerben fellépő nem-lokális áramokra. Modellünkben a Peierls-helyettesítéssel nehézség nélkül bevezethető egy a síkra merőleges mágneses tér, ezért csak ilyen terek hatását vizsgáltam meg. A mágneses tér bevezetésével az előzőekben megfigyelt nem-lokális áram megmaradt, sőt esetenként az amplitúdója is megnövekedett.



5.9. ábra. Az Andrejev-transzmisszió függése a mágneses tértől egy adott szennyező konfiguráció illetve átlagolás mellett normál és félfém kontaktusok esetén. Az ábrán Φ a rendszeren áthatoló teljes mágneses fluxus, $\Phi_0 = h/e$ az elemi fluxuskvantum. Paraméterek: M = 10, L = 30, egyébként lásd az 5.3.1 alfejezetben megadott értékeket!

Az 5.9a ábrán az Andrejev-transzmisszió függését ábrázoltam az egész rendszeren átfolyó mágneses fluxus függvényében. Ez az ábra véletlen szennyezők egyfajta elhelyezkedése mellett készült, de a tiszta határesetben is teljesen hasonló görbék kaphatók. Látható, hogy az energiafüggésre kapott eredményhez (lásd az 5.8 ábrát!) hasonlóan most is a normál fém és a félfém kontaktusok esete jelentősen eltérő; míg normál kontaktusok esetén az Andrejev-transzmisszió lassan változó, sima függvénye a térnek, addig félfém kontaktusok esetén csúcsok jelennek meg. Az (5.11) Breit–Wigner rezonancia-feltételben a mágneses fluxus az energiaszintekben egy eltolásként jelenik meg: rögzített energia mellett most az energiaszinteket tologatjuk el, és emiatt lesznek – az energiafüggő esethez hasonlóan – rezonancia csúcsok a transzport együtthatókban.

A kísérletekben természetesen a szennyezőkre átlagolt mennyiségeket lehet mérni, ezért az 5.9b ábrán a szennyezők elhelyezkedésére átlagolt Andrejev-transzmissziót ábrázoltam. Mindkét esetben jelentősen megnőtt az Andrejev-transzmisszió valószínűsége a zérus térhez képest. Kis fluxusnál ($\Phi \leq \Phi_0$) egy kinyitás látható, ezenfelül az átlagolt mennyiségben oszcillációk jelentek meg. A rezonáns transzport kép ennek megértéséhez nem nyújt segítséget, ugyanis abban a képben ez az energiaszintek számának növekedését jelentené, amire nincsen szemléletes magyarázat. Ehelyett érdemes szemiklasszikusan meggondolni a rendszerbeli transzport folyamatot. Zérus mágneses tér esetében az elektronok (és lyukak) egyenesek mentén mozognak. Az elektron (lyuk) az NS határfelületen azonos irányban, ellentétes spinű lyukként (elektronként) visszaverődik, és a beeső részecske pályáját visszafelé bejárja. Ily módon az elsődleges folyamat az Andrejev-reflexió (kivéve, ha a félfém kontaktusok esetén az gátolva van). Ezzel szemben, ha egy kis mágneses teret kapcsolunk be, akkor az elektronok (lyukak) a ciklotron sugárnak megfelelő köríveken haladnak. Ha egy elektron (lyuk) az NS határfelületen Andrejev-reflektálódik, akkor a visszavert lyuk (elektron) pályája elkanyarodik a beeső részecskéétől, és megfelelő geometriai feltételek teljesülése esetén eljuthat a másik csőhöz. Ilyenkor az elsődleges folyamat lehet az Andrejev-transzmisszió is, ami a kis fluxusnál látható kinyitást is megmagyarázza. Ezt a jelenséget mágneses fókuszálásnak nevezik [138,139], és a transzport együtthatókban szintén csúcsokat eredményez. Mivel a rendszerünkben a rezonáns transzport és a mágneses fókuszálás egyszerre lép fel, a kettőt nehéz megkülönböztetni. Az egyik lehetőség a rendszer "megnyitása" az 5.1b ábrán látható módon. Ebben az elrendezésben folytonos a rendszer energiaspektruma, a diszkrét energiaszintekhez kapcsolódó rezonáns transzport eltűnik. A módosított rendszernek és szemiklasszikus megfelelőjének tanulmányozására később kerül majd sor.

5.4. Összefoglalás

Ebben a fejezetben egy FNS hibrid rendszer transzport tulajdonságait vizsgáltam egzakt rekurzív Greenfüggvény módszerrel. Az elrendezés a *Falci és társai* által javasolthoz hasonló: két ellentétesen polarizált ferromágneses cső egy szupravezetőhöz csatlakozott, csak most egy normál (diffúz) réteggel is kiegészítettem a rendszert. Ezáltal az alagutazási határeset miatt exponenciálisan kicsi nem-lokális áram amplitúdója több nagyságrenddel megnövekedett. Egy rezisztor modell segítségével megmagyaráztam az Andrejevtranszmisszió alapvető jellegzetességeit a geometriai paraméterek különböző tartományaiban. Elrendezésünkben a ferromágneses csövek rezonáns transzportra vezettek, amit alagútazási potenciálgát bevezetésével és az energiaszintek kiszámításával igazoltam. A normál tartományban mágneses tér alkalmazásával az áramok nagysága tovább növelhető.

Függelék

A. Visszatérési valószínűségek kiszámítása

Először gondoljuk meg, hogy v sebességű, a fázistérben homogén eloszlással rendelkező részecskék egy A felületű lapnak ütközve, milyen sebességeloszlással fognak rendelkezni (a szög függvényében). Ha ugyanis feltételezzük, hogy a rendszerünkbe egy felületen olyan részecskék érkeznek, amelyek a fentieknek megfelelő rezervoárból származnak, és kizárólag izotróp folyamatokon esnek át a rendszerbe belépés előtt, akkor éppen a beérkezési feltételből kiszámolt eloszlással kell "belőni" őket. A részecskék adott $T, T + \Delta T$ időintervallumban $v\Delta T$ utat tesznek meg. Az A felületre az ábrán látható paralelogramma alakú térfogatelemből juthatnak el részecskék, ennek magassága az A felülere merőlegesen: $m_A = v\Delta T \cos \alpha$, így térfogata: $V = A.m_A$. Ebben a térfogatelemben $V.\rho \frac{d\alpha}{2\pi}$ azon részecskék száma, amelyek sebességének iránya α szög d α környezetében van, ahol ρ a részecskék sűrűsége.

Ebből együttesen az adódik, hogy

$$P(\alpha)d\alpha = Av\Delta T\cos\alpha\rho\frac{d\alpha}{2\pi}.$$
(A.1)

Általában a szögeloszlást 1-re szokás normálni, azaz

$$1 = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} P(\alpha) d\alpha = Av \Delta T \alpha \rho \frac{2}{2\pi}$$
(A.2)

egyenletből ρ megválasztható úgy, hogy az eloszlás normált legyen. Végeredményben a keresett eloszlás:

$$P(\alpha)d\alpha = \frac{1}{2}\cos\alpha d\alpha.$$
(A.3)

Ez az eloszlás kiindulópont a visszatérési valószínűségek kiszámításához. Ha szimulációval akarjuk meghatározni egy rendszer P(s)ds visszatérési valószínűségét, akkor a felületen egyenletesen, a szögben az (A.3)



eloszlással kell belőni részecskéket, és statisztikát készíteni arról, hogy mekkora s utat tesznek meg a felületre való visszaérkezésig.

Néhány esetben lehetőség nyílik a visszatérési valószínűség analitikus meghatározására. Ehhez meg kell ismerni az α - s közötti összefüggést, majd a $P(\alpha)d\alpha$ eloszlásfüggvény transzformációjával megadható a keresett P(s)ds visszatérési valószínűség.

A.1. Dobozbiliárd

Tegyük fel, hogy egy kétdimenziós, $W \times d$ méretű doboz bal oldali, W hosszúságú falán belőtt részecskék visszatérési valószínűségét akarjuk meghatározni. A falakon visszaverődést az adott falra történő tükrözéssel helyettesítve a dobozbeli trajektória egyetlen egyenessé transzformálható. A részecske akkor tér vissza a belövési felületre, amikor az egyenes eléri a 2d távolságnyira tükrözött falat (lásd az A.1a ábrát!). A megtett út hossza s, és az ábrából is leolvasható, hogy s kifejezhető α -val és a doboz jellemzőivel: $s \cos \alpha = 2d$, vagy α -ra rendezve: $\alpha = \arccos \frac{2d}{s}$. A valószínűségi változó transzformációjához szükség van az összefüggés deriváltjára:

$$d\alpha = \frac{-1}{\sqrt{1 - \left(\frac{2d}{s}\right)^2}} \left(-\frac{2d}{s^2}\right) ds.$$
(A.4)

Ezt felhasználva:

$$P(s)ds = 2 P(\alpha)d\alpha = 2 \frac{\cos\alpha}{2} \frac{-1}{\sqrt{1 - \left(\frac{2d}{s}\right)^2}} \left(-\frac{2d}{s^2}\right) ds,$$
(A.5)

ahol a 2-es faktor a cos függvény paritása miatt van; adott s-hez egy-egy pozitív illetve negatív α érték tartozik. s definíciójából cos $\alpha = \frac{2d}{s}$, amit felhasználva rendezés után:

$$P(s)ds = \frac{4d^2}{s^3\sqrt{1 - \left(\frac{2d}{s}\right)^2}}ds.$$
 (A.6)

Ez az eredmény láthatóan független a doboz W szélességétől, a levezetésben használt tükrözéses módszer is azt sugallja, hogy d vastagságú, végtelen hosszú szupravezető-normál-szigetelő (S-N-I) rétegre is alkalmazható. Az eredmény megegyezik a 4.4.1 fejezetben a sajátfázisokkal kiszámolt (4.51) visszatérési valószínűséggel.

A.2. Korongbiliárd

Most számoljuk ki két koncentrikus körvonal közötti biliárd esetén a visszatérési valószínűséget! A belső körvonalról kiinduló és oda visszaérkező lehetséges pályák az A.1b ábrán láthatók. A belső kör sugarát *r*-rel jelöljük, a külsőét *R*-rel, az α szöget az ábrán látható módon az AO egyeneshez mérjük. A belövési szögek eloszlására most is az A.3 eloszlásfüggvényt használjuk. A pálya hossza $s = 2\overline{AB}$ lesz, így először \overline{AB} -t kell meghatározni. Ehhez írjuk fel az ABO háromszögben a koszinusz tételt az A csúcsnál fekvő szögre. Mivel α a BAO \measuredangle szög kiegészítő szöge, a tételben a $\cos(180^\circ - \alpha) = -\cos \alpha$ szerepel:

$$R^2 = r^2 + l^2 + 2rl\cos\alpha, \tag{A.7}$$



A.1. ábra. Illusztráció a visszatérési valószínűségek kiszámolásához.

teljes négyzetté alakítva, a gyökvonásnál csak a pozitív megoldást tartva meg (*l*-re pozitív megoldást keresünk) rendezés után kapható, hogy:

$$s = 2l = 2\left(\sqrt{R^2 - r^2 \sin^2 \alpha} - r \cos \alpha\right),\tag{A.8}$$

vagy α -ra rendezve:

$$\alpha = \arccos \frac{R^2 - r^2 - s^2/4}{rs}.$$
 (A.9)

Differenciális alakban:

$$d\alpha = \frac{-1}{\sqrt{1 - \left(\frac{R^2 - r^2 - s^2/4}{rs}\right)^2}} \left(\frac{-\frac{s}{2}rs - (R^2 - r^2 - s^2/4)r}{(rs)^2}\right) ds$$
(A.10)

Ezt felhasználva:

$$P(s)ds = 2 P(\alpha)d\alpha = 2 \frac{\cos\alpha}{2} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{R^2 - r^2 - s^2/4}{rs}\right)^2}} \frac{(R^2 - r^2 + s^2/4)}{rs^2} ds,$$
(A.11)

ahol a 2-es faktor ismét a cos függvény paritásának következménye. Behelyettesítve α (A.9) alakját az alábbi kifejezés adódik:

$$P(s)ds = \frac{\left(R^2 - r^2\right)^2 - s^4/16}{r^2 s^3 \sqrt{1 - \left(\frac{R^2 - r^2 - s^2/4}{rs}\right)^2}} ds.$$
 (A.12)

Egyszerűen belátható, hogy a legrövidebb lehetséges pálya a két körvonal közötti sugár kétszerese, míg a leghosszabb pálya az, amely éppen csak érinti a belső kört. Az előbbinél a koszinusz tétel elfajul és $s_{\min} = 2(R - r)$ adódik, míg az utóbbi esetben Pitagorasz-tételbe megy át, ahonnan: $s_{\max} = 2\sqrt{R^2 - r^2}$.

Ezekből a definíciókból r és R kifejezhetők:

$$r = \frac{s_{\max}^2 - s_{\min}^2}{4s_{\min}} \quad \text{illetve} \quad R = \frac{s_{\max}^2 + s_{\min}^2}{4s_{\min}}.$$
 (A.13)

Ezeket az összefüggéseket kihasználva algebrai átalakítások után a keresett visszatérési valószínűség az alábbi alakban írható fel:

$$P(s)ds = \frac{s_{\max}^4 - s^4}{4rs^2 \sqrt{\left(s^2 - s_{\min}^2\right) \left(\frac{s_{\max}^4}{s_{\min}^2} - s^2\right)}} ds,$$
(A.14)

ami megegyezik a 4.5 fejezetben a korongbiliárd esetében bemutatott eredménnyel.

B. A Green-függvény kiszámítása rácson

Egy mezoszkopikus rendszer vezetőképessége a Landauer formula szerint meghatározható a transzport együtthatókkal. Ezen együtthatók kiszámításának egyik gyakran alkalmazott módja a Green-függvények ismeretén alapul. Ehhez alapvető feladat, hogy minél bonyolultabb szerkezetek esetén ki tudjuk számolni a Green-függvényt. Ennek egyik kulcsa a rekurzív Green-függvény módszer, ami lehetővé teszi a rendszer teljes Green-függvényének alktotórészekből való felépítését. A fejezet felépítése a következő: a B.1. pontban bemutatom a rekurzív Green-függvény módszert, a B.2. pontban a szórási tartomány Hamilton-operátorának decimálását, végül a B.3. pontban egy félvégtelen, ismétlődő struktúra (\equiv cső) Green-függvényének kiszámítását.

B.1. Rekurzív Green-függvény módszer

A módszert *Thouless és Kirkpatrick* rendezetlen lineáris láncok vezetőképességének kiszámolására javasolta először az 1980-as évek elején [140]. A módszert, illetve továbbfejlesztett változatait sikerrel alkalmazták topologikus rendezetlenségek [141], kétdimenziós Anderson-lokalizáció [142], mágneses térbe helyezett nanostruktúrák [143] vagy bonyolult alakú, rendezetlen szennyezett rendszerek [144] tanulmányozására.



B.1. ábra. Egy pont hozzáragasztása egy lánchoz. A pontok jelölhetnek tényleges rácspontokat vagy láncokat és alsíkokat két- illetve többdimenziós esetben.

Először bemutatom egy kvázi-egydimenziós rendszerben, hogyan lehet egy ismert Green-függvényű lánchoz egy pontot egy kölcsönhatással hozzákapcsolni. Tekintsünk egy olyan rendszert, ami pontokból és a szomszédos pontok közötti kölcsönhatásokból áll! A pontok tetszőleges m szabadságfokúak lehetnek. Ha m = 1, akkor valódi egydimenziós rendszerről van szó. Ha m > 1, akkor egy adott rácsponton a hullámfüggvényt jelölje $|n\rangle$, ami egy m dimenziós vektor. A G Green-függvényt a rácson egy olyan mátrix reprezentálja, aminek a $G_{nn'} = \langle n | G(nm n'm'; E) | n' \rangle$ elemei $m \times m'$ dimenziós mátrixok.

Tegyük fel, hogy ismerjük a B.1 ábrán látható rendszer G^0 Green-függvényét, amikor az n' - 1 és n' pontok közötti nincsen kölcsönhatás. A két pont közötti V kölcsönhatást bekapcsolva a pontszennyezőkre vonatkozó Dyson-egyenlet

$$G = G^0 + G^0 V G \tag{B.1}$$

alakú. A rácson ennek a fenti reprezentációja a következő lesz:

$$G_{n\,n'} = G^0_{n\,n'} + \sum_{i,j} G^0_{n\,i} V_{i\,j} G^0_{j\,n'},\tag{B.2}$$

ahol $V_{ij} = \langle i | V | j \rangle$, és i, j indexeket az összes rácspontra kell összegezni. Mivel a kölcsönhatás pontszerű, csak $V_{n'n'+1} \neq 0$ és $V_{n'+1n'} \neq 0$. Figyelembe véve, hogy $G_{nn'}^0 = 0$ és $G_{n'-1n'}^0 = 0$, az összegzések elvégzése után csak a következő tagok maradnak meg:

$$G_{nn'} = G_{nn'-1}^{0} V_{n'-1n'} G_{n'n'}$$

$$G_{n'n'} = G_{n'n'}^{0} + G_{n'n'}^{0} V_{n'n'-1} G_{n'-1n'},$$
(B.3)

ahol a jobb oldalon megjelenő ismeretlen $G_{n'-1 n'}$ -re is fel kell írni a Dyson-egyenletet:

$$G_{n'-1\,n'} = G_{n'-1\,n'-1}^0 V_{n'-1\,n'} G_{n'n'}.$$
(B.4)

A 3 ismeretlenhez 3 egyenlet tartozik, így a meghatározandó Green-függvény mátrixelemek kifejezhetők:

$$G_{n\,n'} = G_{n\,n'-1}^{0} V_{n'-1\,n'} \left[1 - G_{n'n'}^{0} \Sigma_{n'}^{0} \right]^{-1} G_{n'n'}^{0}$$

$$G_{n'n'} = \left[1 - G_{n'n'}^{0} \Sigma_{n'}^{0} \right]^{-1} G_{n'n'}^{0}, \qquad (B.5)$$

ahol $\Sigma_{n'}^0 = V_{n'n'-1}G_{n'-1\,n'-1}^0 V_{n'-1\,n}$ az új pont és a lánc kölcsönhatásának sajátenergiája. Látható, hogy az új G Green-függvény kiszámításához csak a $G_{n'-1\,n'-1}^0$, $G_{n\,n'-1}^0$ és $G_{n'n'}^0$ elemek ismeretére volt szükségünk. Ha most egy újabb, n' + 1-dik pontot akarunk a rendszerhez ragasztani, akkor az imént kiszámított $G_{n\,n'}$ és $G_{n'n'}$ mellett az új pont saját $G_{n'+1\,n'+1}$ Green-függvényére van szükségünk. Kiindulhatunk egy félvégtelen periodikus láncból, amihez az imént ismertetett módon pontonként hozzákapcsolhatunk egy rendezetlen tartományt. Innen ered a rekurzív elnevezés. Látszik az is, hogy akár minden pontban egy ismert Green-függvényű oldallánc is csatlakoztatható.

Látható, hogy abban az esetben, ha az egyes pontok szabadsági foka m > 1, akkor a (B.5) egyenletben mátrix invertálásokat és mátrix szorzásokat kell elvégezni. Mivel az ezekből felépített rekurzió elég nagy műveletigényű, egy továbbfejlesztett módszert alkalmazunk. Jelölje $g = \begin{pmatrix} g^{\rm B} & 0 \\ 0 & g^{\rm J} \end{pmatrix}$ a csövek felületi Green-

függvényének mátrixát, és legyen $h_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 0 & V \\ V^+ & 0 \end{pmatrix}$ a kölcsönhatás mátrixa. Ekkor a teljes rendszer Green-

függvénye:

$$G = [1 - gh_{\text{eff}}]^{-1} g.$$
 (B.6)

Bevezetve a fenti jelölés
t $g^{\rm B}=G^0_{n\,n},\,g^{\rm J}=G^0_{n'n'},\,V=V_{n\,n'}$ és $V=V_{n'n}:$

$$1 - gH_{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 1 & -G_{n\,n}^0 V_{n\,n'} \\ -G_{n'n'}^0 V_{n'n} & 1 \end{pmatrix},\tag{B.7}$$

ez a hipermátrixok inverzének particionált alakú felírása szerint [145] a következő alakra hozható:

$$\left[1 - gH_{\text{eff}}\right]^{-1} = \begin{pmatrix} 1 + G_{n\,n}^{0} V_{n\,n'} X^{-1} G_{n'n'}^{0} V_{n'n} & G_{n\,n}^{0} V_{n\,n'} X^{-1} \\ X^{-1} G_{n'n'}^{0} V_{n'n} & X^{-1} \end{pmatrix},$$
(B.8)

ahol $X = 1 - G_{n'n'}^0 V_{n'n} G_{nn}^0 V_{nn'} = 1 - G_{n'n'}^0 \Sigma_{n'}^0$. Behelyettesítve B.8 eredményt a (B.6) képletbe belátható, hogy a megfelelő hipermátrix-elemek megegyeznek a rekurzív Green-függvény módszerrel kapott (B.5) egyenlet speciális n' - 1 = n esetével.

Az eljárás a fentiek szerint a következő lesz: a szórási tartományt egyetlen H_{eff} kölcsönhatással kifejezem, majd a (B.6) egyenlettel a csövekhez kapcsolom. Megjegyzem még, hogy mivel általában $|g| \neq 0$ teljesül, a (B.6) kifejezés helyett $G = \left[g^{-1} - H_{\text{eff}}\right]^{-1}$ is használható. Előfordulhat olyan eset, hogy pontosabb eredményt ad a két invertálás alkalmazása, mint egy invertálás és két szorzás; ezt a konkrét alkalmazáskor kell eldönteni.

B.2. Decimálás

A B.2 ábrán látható rendszer transzportja szempontjából elegendő a Green-függvényt a csövek csatlakozásában lévő pontok halmazán (\mathcal{M}) ismerni. A rendszert felbonthatjuk a csövekre, amiknek külön-külön meghatározhatjuk a Green-függvényét (lásd például a következő fejezetben), és egy szórási tartományra. A decimálás módszer segítségével a szórási tartomány transzport szempontjából kevéssé fontos szabadsági fokait elimináljuk.

A tartományt szoros kötésű közelítésben az alábbi Hamilton-operátor írja le:

$$H = \sum_{i} |i\rangle \,\varepsilon_i \langle i| - \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} |i\rangle \, V_{ij} \langle j|,$$

ahol $|i\rangle$ az *i* rácspont körül lokalizált állapot. A Schrödinger-egyenlet a rácson a következő M + N darab egyenlet:

$$\sum_{j=1}^{M+N} H_{ij} \Psi_j = E \Psi_i, \tag{B.9}$$

ahol *i* egy tetszőleges állapot, $\Psi_i = \langle i | \Psi \rangle$ jelöli a hullámfüggvény értékét az *i*-dik rácsponton, $H_{ij} = \langle i | H | j \rangle$ a Hamilton-operátor a rácson, az összegzés az \mathcal{M} pontjain, és a belső N szabadsági fokra történik. Legyen



B.2. ábra. A vizsgált rendszer egy tetszőleges alakú szórási tartományból és a hozzá kapcsolódó nanodrótokból áll.

legy tetszőleges belső szabadsági fok! Ekkor:

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq l}}^{M+N} H_{ij}\Psi_j + H_{il}\Psi_l = E\Psi_i.$$
 (B.10)

Ha a (B.10) egyenletet felírjuk az i = l esetben, akkor kifejezhetjük belőle Ψ_l -et:

$$\Psi_{l} = \frac{1}{E - H_{l\,l}} \sum_{\substack{j=1\\j \neq l}}^{M+N} H_{l\,j} \Psi_{j}.$$
(B.11)

Behelyettesítve a hullámfüggvény (B.11) alakját a (B.10) egyenletbe

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq l}}^{M+N} \left(H_{ij} + \frac{H_{il}H_{lj}}{E - H_{ll}} \right) \Psi_j = E\Psi_i \tag{B.12}$$

kapható. Ezt tekinthetjük úgy, hogy a hullámfüggvényünk változatlan, a Hamilton-operátor megváltozik, és eggyel csökkent a szabadsági fokok (egyenletek) száma:

$$\sum_{j=1}^{M+N-1} H'_{ij} \Psi_j = E \Psi_i,$$

ahol $H'_{i\,j}=H_{i\,j}+\frac{H_{i\,l}H_{l\,j}}{E-H_{l\,l}}.$ Az eljárást mindaddig folytathatjuk, mígMszabadsági fokunk marad meg:

$$\sum_{j=1}^{M} \tilde{H}_{ij} \Psi_j = E \Psi_i. \tag{B.13}$$

Az így kapott \tilde{H} és H sajátfüggvényei megegyeznek minden \mathcal{M} -beli pontban. Az eljárás során minden lépésben az összes rácspontra ki kellett számolni H' új értékét. Abban az esetben, ha a rendszer szeletekre

B.3. ábra. $H_{\rm eff}$ előállításának szemléltetése. A vastag fekete vonalak a szeleteket, a vékonyak a kölcsönhatásokat jelölik. Szürke az adott lépésben eliminált szelet. A szaggatott vastag vonal az üres szeletet szimbolizálja.

bontható, és csak a szomszédos szeletek között van kölcsönhatás, az eljárás hatékonysága növelhető. Vegyünk három szeletet H_1 -et, H_2 -őt és H_3 -at, illetve a köztük ható V_{12} és V_{23} kölcsönhatásokat. Világos, hogy ha a középső szelet (H_2) pontjait kezdjük eliminálni, akkor megváltozik H_1 , H_3 , és létrejön egy V_{13} kölcsönhatás is, azonban semmilyen más szeletet nem érint az eljárás. A B.3 ábra szemlélteti, hogy hogyan járunk el; a középső szelet rácspontjait teljesen elfogyasztjuk, azután újabb szeletet veszünk hozzá a rendszerhez, és megint a középső szeletet elimináljuk. A rendszer két szélén egy-egy üres szeletet csatolunk, amik a csövek csatlakozási helyeinek felelnek meg. Köztük minden szeletet eliminálunk, így kapjuk meg H_{eff} -et, amivel összekapcsoljuk – az előző fejezetben ismertetett módon – a csövek Green-függvényét.

B.3. Félvégtelen cső Green-függvénye

A félvégtelen cső Green-függvényét a végtelen cső Green-függvényéből határozzuk meg, a határfeltétel illesztésével. Elvileg lehetséges a félvégtelen rendszer hullámfüggvényéből közvetlenül kiszámolni a Green-függvényt, azonban talán valamivel kényelmesebb ez a módszer.

Végtelen cső Green-függvénye

Végtelen csövön olyan rendszert értünk, amely ismétlődő szeletek végtelen láncaként áll elő. Legyen H_0 a szeletek Hamilton-operátora, H_1 jelölje a szeletek közötti kölcsönhatást, z irányban végtelen, periodikus a rendszer. H_0 lehet egyetlen szám, ez a lineáris egydimenziós lánc esete, lehet két dimenzióban a keresztirány Hamilton-operátora, de lehet akár egy láncdarab, ami ismétlődik. A rendszer Hamilton-operátora végtelen dimenziós, tridiagonális, a főátlóban a H_0 , mellette jobbra illetve balra rendre H_1 és H_1^{\dagger} ismétlődik:

$$H_{ij} = H_0 \delta_{ij} + H_1 \delta_{ij+1} + H_1^{\dagger} \delta_{i+1j}, \tag{B.14}$$

ahol $\delta_{i\,j}$ a Kronecker-delta. A rendszer Schrödinger-egyenlete a következő alakú lesz:

$$H_0|\Psi(z)\rangle + H_1|\Psi(z+1)\rangle + H_1^{\dagger}|\Psi(z-1)\rangle = E|\Psi(z)\rangle$$
(B.15)

Végtelen periodikus rendszer hullámfüggvénye felírható a $|\Psi(z)\rangle = e^{ik_{\parallel}z}|k_{\parallel}\rangle$ Bloch-függvényekkel [24]. Nullára rendezve a következő egyenlet kapható:

$$\left(H_0 + H_1 e^{ik_{\parallel}} + H_1^{\dagger} e^{-ik_{\parallel}} - E\right) |k_{\parallel}\rangle = 0.$$
(B.16)

A (B.16) sajátérték-egyenletnek akkor van megoldása, ha a szekuláris egyenletnek van:

$$\det\left(H_0 + H_1 e^{ik_{\parallel}} + H_1^{\dagger} e^{-ik_{\parallel}} - E\right) = 0.$$
(B.17)

Ha ezt az egyenletet rögzített k_{\parallel} mellett megoldjuk, akkor kapjuk az $E = E(k_{\parallel})$ diszperziós egyenletet. Szórási problémák megoldásakor viszont rögzített E mellett kell meghatározni a $(k_{\parallel}, |k_{\parallel}\rangle)$ párokat. Bár egy gyökkereső algoritmussal a (B.17) szekuláris egyenlet gyökeit meg lehetne keresni, de kényelmesebb ehelyett egy ekvivalens sajátérték-problémát oldani meg:

$$\mathcal{H}\begin{pmatrix} \chi\\ \Phi \end{pmatrix} = \mathcal{Z}\begin{pmatrix} \chi\\ \Phi \end{pmatrix},\tag{B.18}$$

ahol

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -H_1^{-1}(H_0 - E) & -H_1^{-1}H_1^{\dagger} \\ \underline{1} & \underline{0} \end{pmatrix}.$$
 (B.19)

Belátható, hogy a két probléma ekvivalens, abban az esetben, ha H_1 invertálható, és ekkor $Z = e^{ik_{\parallel}}, \chi = |k_{\parallel}\rangle$ és $\Phi = \chi/Z$. Ha $H_0 \ M \times M$ dimenziós mátrix, akkor B.17 egyenletben $Z = e^{ik_{\parallel}}$ helyettesítéssel mindkét probléma szekuláris egyenlete Z-nek 2*M*-fokú polinomja, aminek pontosan 2*M* megoldása van. Viszont a $|k_{\parallel}\rangle$ sajátvektorok egy *M* dimenziós vektortér elemei, amiben csak *M* független vektor van. A kettes faktor annak felel meg, hogy a *z* irány szerint megkülönböztetünk balra haladó (lecsengő) illetve jobbra haladó (lecsengő) módusokat. Ha k_{\parallel} képzetes része pozitív (negatív), akkor az egy jobbra (balra) lecsengő módus.



B.4. ábra. Végtelen periodikus rendszer (cső) Hamilton-operátorának szemléltetése.

Mivel egy párosfokú polinom esetén minden megoldás komplex konjugáltja is megoldás, ezért minden jobbra lecsengő módushoz tartozik egy balra lecsengő módus is. Ha k_{\parallel} valós és a $v_{cs} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k_{\parallel})}{\partial k_{\parallel}}$ csoportsebesség pozitív (negatív), akkor jobbra (balra) haladó megoldásról beszélünk. A továbbiakban $k_{\parallel}^{l,+}$ ($k_{\parallel}^{l,-}$) a jobbra (balra) haladó megoldásról beszélünk. A továbbiakban $k_{\parallel}^{l,+}$ ($k_{\parallel}^{l,-}$) a jobbra (balra) haladó vagy lecsengő módusokat jelöli. Megjegyezzük, hogy abban az esetben, ha $H_1 = H_1^{\dagger}$, akkor minden k_{\parallel} megoldáshoz $-k_{\parallel}$ is megoldás, azonos $|k_{\parallel}\rangle$ sajátfüggvénnyel. Ez azonos jobbra és balra haladó (lecsengő) megoldást jelent, azaz a rendszer az időtükrözésre invariáns.

A rendszer Green-függvényének egyenlete a (B.15) Schrödinger-egyenlet zérusra rendezett alakjából származtatható oly módon, hogy kiegészül egy forrás taggal:

$$(H_0 - E)G_{z\,z'} + H_1G_{z+1\,z'} + H_1^{\dagger}G_{z-1\,z'} = \delta_{z\,z'},\tag{B.20}$$

ahol $\delta_{z\,z'}$ a Kronecker-szimbólum. A Green-függvény a hullámfüggvények ismeretében formálisan $G = \sum \frac{|\Psi\rangle\langle\Psi|}{E-H}$ összegként írható, ahol az összegzés az összes állapotra történik. Ennek kiértékelése helyett próbálkozzunk a következő ansatz-cal:

$$G_{z\,z'} = \begin{cases} \sum_{l=1}^{M} |k_{\parallel}^{l,+}\rangle \, e^{ik_{\parallel}^{l,+}(z-z')} \langle A^{l,+}| & \text{ha } z \ge z' \\ \\ \sum_{l=1}^{M} |k_{\parallel}^{l,-}\rangle \, e^{ik_{\parallel}^{l,-}(z-z')} \langle A^{l,-}| & \text{ha } z \le z' \end{cases}$$
(B.21)

ahol kihasználtuk, hogy a Green-függvény a z = z' ponttól eltekintve egy hullámfüggvény, és megköveteltük, hogy a $\pm \infty$ határokon lecsengő legyen. Az $\langle A^{l,\pm} |$ vektorok meghatározásához a (B.21) alakot be kell helyettesíteni a (B.20) egyenletbe, valamint meg kell követelni a Green-függvény egyértékűségét a z = z' pontban. Ezekből egy tetszőleges végtelen cső Green-függvénye a következő lesz;

$$G_{z\,z'} = \begin{cases} \sum_{l=1}^{M} |k_{\parallel}^{l,+}\rangle \, e^{ik_{\parallel}^{l,+}(z-z')} \langle k_{\parallel}^{l,+} | \mathcal{V}^{-1} & \text{ha } z \ge z' \\ \sum_{l=1}^{M} |k_{\parallel}^{l,-}\rangle \, e^{ik_{\parallel}^{l,-}(z-z')} \langle k_{\parallel}^{l,-} | \mathcal{V}^{-1} & \text{ha } z \le z' \end{cases}$$
(B.22)

ahol

$$\mathcal{V} = \sum_{l=1}^{M} H_{1}^{\dagger} \left[|k_{\parallel}^{l,+}\rangle \, e^{-ik^{l,+}} \langle k_{\parallel}^{l,+}| - |k_{\parallel}^{l,-}\rangle \, e^{-ik^{l,-}} \langle k_{\parallel}^{l,-}| \right]. \tag{B.23}$$

Határfeltétel illesztése

Tekintsünk először egy bal oldali félvégtelen csövet, azaz $z_0 - 1$ legyen a cső első szelete, és a cső a $-\infty$ felé folytatódjon. A félvégtelen cső Green-függvényét a végtelen cső (B.22) Green-függvényének ismeretében fogjuk meghatározni. Egy Green-függvény a z = z' ponttól eltekintve egyszerű hullámfüggvény, így a hullámfüggvényhez hasonló határfeltételt kell kielégítenie, ebben az esetben:

$$G_{z \, z_0} = G_{z_0 \, z'} = 0. \tag{B.24}$$

Green-függvényhez hullámfüggvények tetszőleges lineáris kombinációját hozzáadva szintén Green-függvényt kapunk, így keressük a félvégtelen cső Green-függvényét a végtelen cső Green-függvénye és a következő kifejezés összegeként:

$$|\Delta(z, z', z_{0})\rangle = \begin{cases} \sum_{l=1}^{M} C^{l,+}(z', z_{0}) |k_{\parallel}^{l,+}\rangle e^{ik_{\parallel}^{l,+}z} & \text{ha } z \ge z' \\ \sum_{l=1}^{M} C^{l,-}(z, z_{0}) |k_{\parallel}^{l,-}\rangle e^{ik_{\parallel}^{l,-}z'} & \text{ha } z \le z' \end{cases}$$
(B.25)

ahol $C^{l,\pm}$ együtthatók a (B.24) határfeltételből határozhatók meg. Algebrai számolások után a $g^{\rm B} = G_{z_0-1 z_0-1}$ bal oldali, felületi Green-függvényre következő eredmény adódik:

$$g^{\rm B} = \left[1 - \sum_{l,l'=1}^{M} |k_{\parallel}^{l',-}\rangle \, e^{-ik^{l',-}} \langle k_{\parallel}^{l',-}| \, |k_{\parallel}^{l,+}\rangle \, e^{ik^{l,+}} \langle k_{\parallel}^{l,+}| \right] \mathcal{V}^{-1}. \tag{B.26a}$$

Teljesen hasonló eljárással kapható a jobb oldali felületi Green-függvény:

$$g^{\rm J} = \left[1 - \sum_{l,l'=1}^{M} |k_{\parallel}^{l',+}\rangle e^{ik^{l',+}} \langle k_{\parallel}^{l',+}| |k_{\parallel}^{l,-}\rangle e^{-ik^{l,-}} \langle k_{\parallel}^{l,-}| \right] \mathcal{V}^{-1}.$$
(B.26b)

Megjegyzem, hogy nyilvánvalóan g_B és g_J nem függ z_0 -tól, ami az eltolási invariancia következménye. Ha a rendszer időtükrözésre invariáns, akkor a bal-jobb szimmetria a felületi Green-függvényeken is látszik.

C. Szórási mátrix

Egy ismert Hamilton-operátorú nyílt rendszerben E energián a bejövő és kimenő síkhullám megoldásokat a szórási mátrix kapcsolja össze:

$$|\operatorname{KI}\rangle = \mathbf{S}(E) |\operatorname{BE}\rangle. \tag{C.1}$$

Ha a rendszer két nem-szupravezető félvégtelen csővel két normál rezervoárhoz van kötve, akkor a szórási mátrixot egy 2×2 hipermátrixként szokás felírni:

$$\mathbf{S}(E) = \begin{pmatrix} \mathbf{r}(E) & \mathbf{t}'(E) \\ \mathbf{t}(E) & \mathbf{r}'(E) \end{pmatrix}, \tag{C.2}$$

ahol $\mathbf{r}_{mn}(E)$ ($\mathbf{r}'(E)_{mn}$) reflexiós amplitúdó az első (második) csőben bejövő *n*-edik módust köti össze az első (második) csőben kimenő *m*-edik módussal, illetve $\mathbf{t}_{mn}(E)$ ($\mathbf{t}'(E)_{mn}$) transzmissziós amplitúdó az első (második) csőben bejövő *n*-edik módust kapcsolja össze a második (első) csőben kimenő *m*-edik módussal.

Most keressük a szórási mátrix elemeit, ha a rendszert egy adott energián a (B.26) felületi Greenfüggvénnyel írhatjuk le! Ha $|\Psi(z)\rangle$ a B.3 fejezetben használt hullámfüggvény, akkor a szokásos módon a szórócentrumtól elég távol a következőképpen írható fel:

$$|\Psi(z)\rangle = \begin{cases} \frac{e^{ik_{\parallel}^{l,+}z}}{\sqrt{v^{l,+}}}|k_{\parallel}^{l,+}\rangle + \sum_{n}\frac{e^{ik_{\parallel}^{n,-}z}}{\sqrt{v^{n,-}}}r_{nl}|k_{\parallel}^{n,-}\rangle & \text{ha } z \le 0\\ \sum_{n}\frac{e^{ik_{\parallel}^{n,+}z}}{\sqrt{v^{n,+}}}t_{nl}|k_{\parallel}^{n,+}\rangle & \text{ha } z \ge L \end{cases}$$
(C.3)

ahol z = 0 és z = L olyan pontok, amik elég távol vannak a szórócentrumtól. A szokásos módon az amplitúdókat a csoportsebesség gyökével kell normálni, mert így **S** unitaritása az áramok megmaradását fejezi ki. Az n-edik jobbra (balra) haladó módus csoportsebessége definíció szerint:

$$v^{n,\pm} = \frac{\partial E\left(k_{\parallel}^{n,\pm}\right)}{\hbar \partial k_{\parallel}^{n,\pm}} = \frac{i}{\hbar} \langle k_{\parallel}^{n,\pm} | H_1 e^{ik_{\parallel}^{n,\pm}} - H_1^{\dagger} e^{-ik_{\parallel}^{n,\pm}} | k_{\parallel}^{n,\pm} \rangle.$$
(C.4)

A végtelen periodikus rendszer esetén könnyen belátható, hogy a felületi Green-függvényből a következő projektorok segítségével tetszőleges módushoz tartozó hullámfüggvény kinyerhető:

$$\mathcal{P}^{n,\pm}(z') = \mathcal{V} \; \frac{e^{ik_{\parallel}^{n,\pm}z'}}{\sqrt{v^{n,\pm}}} |k_{\parallel}^{n,\pm}\rangle. \tag{C.5}$$

Ezt a projekciót a szennyezett rendszer Green-függvényére alkalmazva, és a (C.3) hullámfüggvénnyel összevetve a szórási amplitúdók megkaphatók:

$$r_{nm} = -\delta_{nm} + \sqrt{\frac{v^{n,-}}{v^{m,+}}} \langle k_{\parallel}^{n,-} | G_{0\,0} \mathcal{V} | k_{\parallel}^{m,+} \rangle$$

$$t_{nm} = \sqrt{\frac{v^{n,+}}{v^{m,+}}} e^{-ik_{\parallel}^{m,+}L} \langle k_{\parallel}^{n,+} | G_{L\,0} \mathcal{V} | k_{\parallel}^{m,+} \rangle, \qquad (C.6)$$

és teljesen hasonlóan a jobb oldalon elhelyezett forrással r'_{nm} , t'_{nm} amplitúdók is megadhatók:

$$t'_{nm} = \sqrt{\frac{v^{n,-}}{v^{m,-}}} e^{ik_{\parallel}^{m,-}L} \langle k_{\parallel}^{n,-} | G_{0L} \mathcal{V} | k_{\parallel}^{m,-} \rangle$$

$$r'_{nm} = -\delta_{nm} + \sqrt{\frac{v^{n,+}}{v^{m,-}}} \langle k_{\parallel}^{n,+} | G_{LL} \mathcal{V} | k_{\parallel}^{m,-} \rangle.$$
 (C.7)

A szórási amplitúdókból a reflexió illetve transzmisszió valószínűsége is kiszámolható:

$$T = Tr(t^{\dagger}t) T' = Tr(t'^{\dagger}t) (C.8)$$
$$R = Tr(r^{\dagger}r) R' = Tr(r'^{\dagger}r').$$

Mivel a leírás egyelőre semmit sem feltételezett a z-irányú lánc pontjainak belső szabadsági fokairól, így minden további nélkül alkalmazható szupravezetőt is tartalmazó rendszer esetén is. Ekkor minden ponthoz elektron- és lyukállapotokat kell egyaránt hozzárendelni. A hullámfüggvényeket, Green-függvényt, szórási mátrixot az eddig leírtakhoz teljesen hasonlóan kell kiszámítani, csak arra kell vigyázni, hogy a számolás során végig ugyanabba az vektor- illetve mátrixkomponensekbe kerüljenek az elektron- és lyukállapotok. Módosításra csak az utolsó lépésben van szükség, amennyiben az átlósösszeg képzése során most csak a megfelelő almátrixra kell az összeget képezni:

$$T_{0} = \operatorname{Tr}(t_{e-e}^{\dagger}t_{e-e}) \qquad T_{0}' = \operatorname{Tr}(t_{e-e}'^{\dagger}t_{e-e}) \\
 T_{A} = \operatorname{Tr}(t_{e-h}^{\dagger}t_{e-h}) \qquad T_{A}' = \operatorname{Tr}(t_{e-h}'^{\dagger}t_{e-h}') \\
 R_{0} = \operatorname{Tr}(r_{e-e}^{\dagger}r_{e-e}) \qquad R_{0}' = \operatorname{Tr}(r_{e-e}'^{\dagger}r_{e-e}') \\
 R_{A} = \operatorname{Tr}(r_{e-h}^{\dagger}r_{e-h}) \qquad R_{A}' = \operatorname{Tr}(r_{e-h}'^{\dagger}r_{e-h}'),$$
(C.9)

ahol t_{e-e} a t mátrix elektronállapotból elektronállapotba, t_{e-h} az lyukállapotból elektronállapotba történő transzmissziót leíró része, stb. A szórási mátrix unitaritása miatt ezek a valószínűségek a t_{h-h} , t_{h-e} , r_{h-h} stb. amplitúdókkal is kifejezhetők. Összességében, mivel H_0 -ra csak a hermeticitást és H_1 -re az invertálhatóságot tettük fel, az ismertetett módszerrel sokféle rendszer vezetési tulajdonságai vizsgálhatók. Természetesen az eljárás általánosítható kettőnél több cső és rezervoár esetére is, ott azonban a decimálás gyorsított változata általában nem használható.

Irodalomjegyzék

- [1] Y. Imry, Introduction to Mesoscopic Physics (Oxford Univ. Press, New York, 1997)
- [2] N. G. van Kampen, Stochastic Processes in Physics and Chemistry (North-Holland, Amsterdam, 1981).
- [3] G. E. Moore, Electronics **38**, Number 8, (April 19, 1965).
- [4] http://www.intel.com
- [5] P. Szépfalusy és T. Tamás, A káosz, (Akadémiai Kiadó, 1982).
- [6] The Chaosbook, http://www.nbi.dk/ChaosBook.
- [7] H.-J. Stöchmann, Quantum Chaos: An Introduction (Cambridge Univ. Press, 1999).
- [8] D. K. Ferry and S. M. Goodnick, Transport in Nanostructures (Cambridge Univ. Press, 1997).
- [9] P. Charlat, H. Courtois, Ph. Gandit, D. Mailly, A. F. Volkov and B. Pannetier, Phys. Rev. Lett. 77, 4950 (1996).
- [10] B. J. van Wees, A. Dimoulas, J. P. Heida, T. M. Klapwijk, W. v. d. Graaf and G. Borghs, Physica B 203, 284 (1994); A. Dimoulas, J. P. Heida, B. J. van Wees, T. M. Klapwijk, W. v. d. Graaf and G. Borghs, Phys. Rev. Lett. 74, 602 (1995).
- [11] S. G. den Hartog, C. M. A. Kapteyn, B. J. van Wees, T. M. Klapwijk, W. van der Graaf and G. Borghs, Phys. Rev. Lett. **76**, 4592 (1996); S. G. den Hartog, C. M. A. Kapteyn, B. J. van Wees, T. M. Klapwijk and G. Borghs, Phys. Rev. Lett. **77**, 4954 (1996).
- [12] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. 60, 848 (1988).
- [13] D. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie and G. A. C. Jones, J. Phys. C 21, L209 (1988).
- [14] R. Landauer, IBM J. Res. Dev. 1, 223 (1957); Phylos. Mag. 21, 863 (1970).
- [15] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. 57, 1761 (1986).
- [16] H. U. Baranger and A. D. Stone, Phys. Rev. B 40, 8169 (1989).
- [17] S. Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* (Cambridge Univ. Press, 1997).
- [18] R. A. Jalabert, The semiclassical tool in mesoscopic physics, Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi "New Directions in Quantum Chaos", Course CXLIII, G. Casati, I. Guarneri and U. Smilansky (eds.), IOS Press Amsterdam (2000), cond-mat/9912038.

- [19] K. Richter, Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems (Springer-Verlag, Berlin, 2000).
- [20] J. A. Melsen, P. W. Brouwer, K. M. Frahm and C. W. J. Beenakker, Eur. Phys. Lett. 35, 7 (1996).
- [21] J. A. Melsen, P. W. Brouwer, K. M. Frahm and C. W. J. Beenakker, Physica Sripta T69, 223 (1997).
- [22] H. Kamerlingh Onnes, Commun. Phys. Lab., **12**, 120 (1911).
- [23] J. G. Bednorz and K. A. Müller, Z. Phys. B 64, 189 (1986).
- [24] Sólyom Jenő: A modern szilárdtestfizika alapjai I.-II., ELTE Eötvös Kiadó, Budapest (2002-2003).
- [25] F. London and H. London, Proc. Roy. Soc. A149, 71 (1935).
- [26] W. Meissner and R. Oschenfeld, *Naturwiss.* 21, 787 (1933).
- [27] V. L. Ginzburg and L. D. Landau, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20, 1064 (1950).
- [28] H. Fröhlich, Phys. Rev. **79**, 845 (1950).
- [29] J. Bardeen, Phys. Rev. 79, 167 (1950), Phys. Rev. 80, 567 (1950), Phys. Rev. 81, 829 (1951).
- [30] L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- [31] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [32] P. Townsend and J. Sutton, Phys. Rev. **128**, 591 (1962).
- [33] N. N. Bogoliubov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 34, 58 (1958).
- [34] P. G. de Gennes, Superconductivity of Metals and Alloys (Benjamin, New York, 1996).
- [35] V. T. Petrashov and V. N. Antonov, JETP Lett. 54, 241 (1991).
- [36] A. Kastalsky, A. W. Kleinasser, L. H. Greene, R. Bhat, F. P. Milliken and J. P. Harbison, Phys. Rev. Lett. 67, 3026 (1991).
- [37] A. F. Andreev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 46, 1823 (1964), [Sov. Phys. JETP, 19, 1228 (1964)].
- [38] A. L. Shelankov, JETP Lett. 32, 111 (1980); Sov. Phys.-Solid State 26, 981 (1984).
- [39] G. E. Blonder, M. Tinkham and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B 25, 4515 (1982).
- [40] G. E. Blonder and M. Tinkham, Phys. Rev B 27, 112 (1983).
- [41] Ch. Nguyen, H. Kroemer and E. L. Hu, Phys. Rev. Lett. 69, 2847 (1992).
- [42] P. H. C. Magnée, N. van der Post, P. H. M. Kooistra, B. J. van Wees and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B 50, 4594 (1994).
- [43] P. Xiong, G. Xiao and R. B. Laibowitz, Phys. Rev. Lett. 71, 1907 (1993).
- [44] S. J. M. Bakker, E. van der Drift, T. M. Klapwijk, H. M. Jaeger and S. Radelaar, Phys. Rev. B 49, 13275 (1994).
- [45] H. M. Marsh, D. A. Williams and H. Ahmed, Phys. Rev. B 50, 8118 (1994).
- [46] H. Takayanagi and T. Akazaki, Phys. Rev. B 52, R8633 (1995); H. Takayanagi, E. Toyoda and T. Akazaki, Czech. J. Phys. 46, 2507 (1996).

- [47] P. G. N. de Vegvar, T. A. Fulton, W. H. Mallison and R. E. Miller, Phys. Rev. Lett. 73, 1416 (1994).
- [48] H. Pothier, S. Guéron, D. Esteve and M. H. Devoret, Phys. Rev. Lett. 73, 2488 (1994); Physica B 203, 226 (1994).
- [49] B. Z. Spivak and D. E. Khmel'nitskii, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 35, 334 (1982), [JETP Lett. 35, 412 (1982)]; B. L. Al'tshuler and B. L. Spivak, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 92, 609 (1987), [Sov. Phys. JETP 65, 343 (1987)].
- [50] N. K. Allsopp, V. C. Hui, C. J. Lambert and S. J. Robinson, J. Phys.: Condens. Matter 6, 10475 (1994).
- [51] C. J. Lambert and R. Raimondi, J. Phys.: Condens. Matter 10, 901 (1998).
- [52] G. A. Prinz, Science **282**, 1660 (1998).
- [53] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger, Science 294, 1488 (2001).
- [54] M. N. Baibich, et al. Phys. Rev. Lett. 61, 2472 (1988).
- [55] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach and W. Zinn, Phys. Rev. B 39, R4828 (1989).
- [56] J. Daughton, J. Brown, E. Chen, R. Beech, A. Pohm and W. Kude, IEEE Trans. Magn. 30, 4608 (1994).
- [57] Wall Street Journal, 10 November 1997, p. B8.
- [58] M. J. M. de Jong and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. 74, 1657 (1995).
- [59] R. J. Soulen *et al.*, Science **282**, 85 (1998).
- [60] S. K. Upadhyay, A. Palanisami, R. N. Louie and R. A. Buhrman, Phys. Rev. Lett. 81, 3247 (1998).
- [61] P. M. Tedrow and R. Meservey, Phys. Rev. Lett. 26, 192 (1971).
- [62] M. Giroud, H. Courtois, K. Hasselbach, D. Mailly and B. Pannetier, Phys. Rev. B58, R11872 (1998).
- [63] V. T. Petrashov, I. A. Sosnin, I. Cox, A. Parsons and C. Troadec, Phys. Rev. Lett. 83, 3281 (1999).
- [64] V. A. Vas'ko, V. A. Larkin, P. A. Krauss, K. R. Nikolaev, D. E. Grupp, C. A. Nordmann and A. M. Goldmann, Phys. Rev. Lett. 78, 1134 (1997).
- [65] H. K. Wong, B. Y. Jin, H. Q. Yang, J. B. Ketterson and J. E. Hilliard, J. Low Temp. Phys. 63, 307 (1986).
- [66] J. S. Jiang et al., Phys. Rev. Lett. 74, 314 (1995); Y. Obi et al., Physica C317-318, 149 (1999);
 V. Mercaldo et al., Phys. Rev. B 53, 14040 (1995); J. Q. Xiao et al., Phys. Rev. Lett. 76, 1727 (1996).
- [67] P. Koorevaar et al., Phys. Rev. B 49, 441 (1994); C. Strunk et al., Phys. Rev. B 49, 4053 (1994);
 G. Verbanck et al., Phys. Rev. B 57, 6029 (1998).
- [68] O. Bourgeois, P. Gandit, J. Lesueur, R. Mélin, A. Sulpice, X. Grison and J. Chaussy, cond-mat/9901045
- [69] J. Aarts, J. M. E. Geers, E. Brück, A. A. Golubov and R. Coehoorn, Phys. Rev B 56, 2779 (1997).
- [70] S. Oh, Y.-H. Kim, D. Youm and W. R. Beasley, Phys. Rev. B 63, 52501 (2000).
- [71] I. Żutić and O. T. Valls, Phys. Rev. B 60, 6320 (1999); Phys. Rev. B 61, 1555 (2000).
- [72] M. Zareyan, W. Belzig and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. Lett. 86, 308 (2001).

- [73] M. Zareyan, W. Belzig and Yu. V. Nazarov, Phys. Rev. B. 65, 184505 (2002).
- [74] P. Fulde and A. Ferrel, Phys. Rev. 135, A550 (1964); A. Larkin and Y. Ovchinnikov, Sov. Phys. JETP 20, 762 (1965).
- [75] M. Krawiec, B. L. Györffy and J. F. Annett, Physica C387, 7 (2003).
- [76] M. Krawiec, B. L. Györffy and J. F. Annett, Phys. Rev. B 66, 172505 (2002); Eur. Phys. J. B 32, 163 (2003).
- [77] F. Taddei, S. Sanvito, J. H. Jefferson and C. J. Lambert, Phys. Rev. Lett. 82, 4938 (1999).
- [78] M. Krawiec: "Ferromagnet/Superconductor Heterostructures" at RTN COMPUTATIONAL MAGNETOELECTRONICS, 2nd Ann. Meet. & Mid-Term Review, held on Oleron Island, 2002. elérhető: http://psi-k.dl.ac.uk/newsletters/News 53/Highlight 53.pdf
- [79] G. Falci, D. Feinberg and F. Hekking, Europhysics Letters 54, 255 (2001).
- [80] A. Einstein, B. Podolski and N. Rosen, Phys. Rev. 47, 777 (1935).
- [81] G. B. Lesovik, T. Martin and G. Blatter, Eur. Phys. J. B 24, 287 (2001).
- [82] M. S. Choi, C. Bruder and D. Loss, Phys. Rev. B 62, 13569 (2000).
- [83] R. Mélin, J. Phys.: Condens. Matter 13, 6445 (2001).
- [84] J. Cserti, G. Vattay, J. Koltai, F. Taddei and C. J. Lambert, Phys. Rev. Lett. 85, 3704 (2000).
- [85] J. Cserti, A. Bodor, J. Koltai and G. Vattay, Phys. Rev. B 66, 064528 (2002).
- [86] J. Cserti, A. Kormányos, Z. Kaufmann, J. Koltai and C. J. Lambert, Phys. Rev. Lett. 89, 057001 (2002).
- [87] C. J. Lambert, J. Koltai and J. Cserti, 'Non-local current correlations in ferromagnet/superconductor nanojunction', in *Towards the Controllable Quantum States, Mesoscopic Superconductivity and Spintronics*, (eds.: H. Takayanagi and J. Nitta), World Scientific, New Jersey, pp. 119-124 (2003). (Proceedings of the International Symposium on Mesoscopic Superconductivity and Spintronics (MS+S2002).)
- [88] R. Peierls, Z. Phys. 80, 763 (1933).
- [89] W. L. McMillan, Phys. Rev. 175, 559 (1968).
- [90] G. Kieselmann, Phys. Rev. B 35, 6762 (1987).
- [91] H. Plehn, O.-J. Wacker and R. Kümmel, Phys. Rev. B 49, 12140 (1994).
- [92] R. A. Jalabert, H. U. Baranger and A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. 65, 2442 (1990).
- [93] H. U. Baranger, R. A. Jalabert and A. D. Stone, Chaos 3, 665 (1993).
- [94] H. Ishio and J. Burgdörfer, Phys. Rev. B 51, 2013 (1995).
- [95] L. Wirtz, J. Tang and J. Burgdörfer, Phys. Rev. B 56, 7589 (1997).
- [96] J. Tang, L. Wirtz and J. Burgdörfer, Phys. Rev. B 57, 9875 (1998).
- [97] C. D. Schwieters, J. A. Alford and J. B. Delos, Phys. Rev. B 54, 10652 (1996).

- [98] W. A. Lin and R. V. Jensen, Phys. Rev. B 53, 3638 (1996).
- [99] G. Vattay, J. Cserti, G. Palla and G. Szálka, Chaos, Solitons & Fractals 8, 1031 (1997).
- [100] J. B. Keller, J. Opt. Soc. Am. **52**, 116 (1962).
- [101] G. Vattay, A. Wirzba and P. E. Rosenqvist, Phys. Rev. Lett. **73**, 2304 (1994); N. Pavloff and C. Schmit, Phys. Rev. Lett. **75**, 61 (1995) (Erratum ibid. p.3779).; H. Bruus and N. D. Whelan, Nonlinearity **9**, 1023 (1996).
- [102] H. A. Blom, A. Kadigrobov, A. M. Zagoskin, R. I. Shekhter and M. Jonson, Phys. Rev. B 57, 9995 (1998).
- [103] C. W. J. Beenakker, Rev. Mod. Phys. 69, 731 (1997).
- [104] D. S. Fisher and P. A. Lee, Phys. Rev. B 23, 6851 (1981).
- [105] E. N. Economou, Green's functions in Quantum Physics (Springer-Verlag, Berlin, Germany, 1983), 2nd ed.
- [106] IMSL Libraries, http://www.vni.com/products/imsl/.
- [107] Csákány Antal: Jelfeldolgozás (Egyetemi jegyzet, ELTE, Budapest, 1992).
- [108] A. F. Morpurgo, S. Holl, B. J. van Wees, T. M. Klapwijk and G. Borghs, Phys. Rev. Lett. 78, 2636 (1997).
- [109] J. S. Hersch, M. R. Haggerty, E. J. Heller, Phys. Rev. Lett. 83, 5342 (1999); Phys. Rev. E 62, 4873 (2000); M. Sieber, J. Phys. A 32, 7679 (1999); J. Phys. A 33, 6263 (2000); E. Bogomolny, P. Leboeuf, C. Schmit, nlin.CD/0003016.
- [110] I. Kosztin, D. L. Maslov and P. M. Goldbart, Phys. Rev. Lett. 75, 1735 (1995).
- [111] P. G. de Gennes and D. Saint-James, Phys. Lett. 4, 151 (1963).
- [112] A. Altland and M. R. Zirnbauer, Phys. Rev. Lett. 76, 3420 (1996).
- [113] G. B. Lesovik, A. L. Fauchère and G. Blatter, Phys. Rev. B 55, 3146 (1997).
- [114] A. Lodder and Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B 58, 5783 (1998).
- [115] H. Schomerus and C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. 82, 2951 (1999).
- [116] W. Ihra, M. Leadbeater, J. L. Vega and K. Richter, Eur. Phys. J. B 21, 425 (2001).
- [117] I. O. Kulik, Zh. Éksp. Teor. Fiz. 57, 1745 (1969), [Sov. Phys. JETP 30, 944 (1970)]; J. Bardeen and J. L. Johnson, Phys. Rev. B 5, 72 (1972).
- [118] C. W. J. Beenakker, Phys. Rev. Lett. 67, 3836 (1991), [68, 1442, (1992) (Erratum)]; C. W. J. Beenakker, in *Transport Phenomena in Mesoscopic Systems*, edited by H. Fukuyama and T. Ando (Springer-Verlag, Berlin, 1992), pp. 235–253.
- [119] P. F. Bagwell, Phys. Rev. B 46, 12573 (1992).
- [120] H. Hoppe, U. Zülicke and G. Schön, Phys. Rev. Lett. 84, 1804 (2000).
- [121] H. Weyl, Nachr. Akad. Wiss. 110 (1911).

- [122] M. Brack and R. K. Bhaduri, in *Semiclassical Physics*, edited by D. Pines (Addison-Wesley Pub. Co., Inc., Amsterdam, 1997).
- [123] Y. Asano and T. Kato, J. Phys. Soc. Jpn. 69, 1125 (2000).
- [124] Rózsa Pál: Lineáris algebra és alkalmazásai (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976) 319. oldal. Ha $|\mathbf{A}| \neq 0$, akkor

$$\det \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} = \det \mathbf{A} \det \left(\mathbf{D} - \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} \right),$$

avagy, ha $|\mathbf{D}| \neq 0$, akkor

$$\det \left(\begin{array}{cc} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{array} \right) = \det \mathbf{D} \det \left(\mathbf{A} - \mathbf{B} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{C} \right)$$

- [125] C. W. J. Beenakker, in *Mesoscopic Physics, Les Houches Summer School*, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J. L. Pichard and J. Zinn-Justin (Elsevier Science B. V., Amsterdam, 1995).
- [126] E. Doron and U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. 68, 1255 (1992).
- [127] U. Smilansky, in Mesoscopic Quantum Physics, Les Houches Summer School, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J. L. Pichard and J. Zinn-Justin (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1995).
- [128] M. Berry, in *Chaos and Quantum Physics, Les Houches Summer School*, edited by M.-J. Giannoni, A. Voros and J. Zinn-Justin (Elsevier Science B. V., Amsterdam, The Netherlands, 1991).
- [129] O. Šipr and B. L. Györffy, J. Phys.: Condens. Matter 8, 169 (1996); O. Šipr and B. L. Györffy, J. Low. Temp. Phys. 106, 315 (1997).
- [130] Kormányos Andor, a [116] alapján, kiadatlan közlés.
- [131] Kaufmann Zoltán, kiadatlan közlés.
- [132] Suttogó módusok: a Szt. Pál katedrális kupolájában található Suttogó Galéria (Whispering Galery) a névadó. A Robert Hooke ötletei és Christopher Wren tervei alapján készült kupolában a hang körbejár a galérián, így a leghalkabb suttogás is jól hallható a galéria mentén. Egyesek Robert Hookeban a mikroszkóp angol atyját illetve a modern tudományok ihlető atyját tisztelik.
- [133] M. D. Lawrence and N. Giordano, J. Phys.: Condens. Matter 8, L563 (1996).
- [134] G. Deutscher and D. Feinberg, App. Phys. Lett. 76, 487 (2000).
- [135] C. J. Lambert, J. Phys.: Condens. Matter 3, 6579 (1991).
- [136] E. C. Stoner, Proc. R. Soc. Lond. A 165, 372 (1938).
- [137] G. Breit and E. Wigner, Phys. Rev. 49, 519 (1936).
- [138] V. J. Goldman, Physica B 280, 372 (2000); V. J. Goldman, B. Su and J. K. Jain, Phys. Rev. Lett. 72, 2065 (1994).
- [139] H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, M. E. I. Broekaart, P. H. M. van Loosdrecht, B. J. van Wees, J. E. Mooij, C. T. Foxon and J. J. Harris, Europhys. Lett. 5, 721 (1988); Phys. Rev. B 39, 8556 (1989).
- [140] D. J. Thouless and S. Kirkpatrick, J. Phys. C. 14, 235 (1981).
- [141] F. Guinea and J. A. Vergés, Phys. Rev. B 35, 979 (1987).
- [142] P. A. Lee and D. S. Fisher, Phys. Rev. Lett. 47, 882 (1981).
- [143] J. Skjånes, E. H. Hauge and G. Schön, Phys. Rev. B 50, 8636 (1994); T. Ando, Phys. Rev. B 44, 8017 (1991).
- [144] H. U. Baranger, D. P. DiVicenzo, R. A. Rodolpho and A. D. Stone, Phys. Rev. B 44, 10637 (1991);
 Song He and S. Das Sarma, Phys. Rev. B 48, 4629 (1993); T. Kawamura and J. P. Leburton, Phys.
 Rev. B 48, 8857 (1993); A. MacKinnon, J. Phys. C 13, L1031 (1980); F. Sols, M. Macucci, U. Ravaioli and K. Hess, J. Appl. Phys. 66, 3892 (1989).
- [145] Rózsa Pál: Lineáris algebra és alkalmazásai (Műszaki Könyvkiadó, Budapest, 1976) 321. oldal. H
a $|{\bf A}|\neq 0,$ akkor

$$\left[\begin{array}{cc} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{array}\right]^{-1} = \left[\begin{array}{cc} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & -\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{X}^{-1} \\ -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{A}^{-1} & \mathbf{X}^{-1} \end{array}\right],$$

ahol $\mathbf{X} = (\mathbf{D} - \mathbf{C}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B})$, avagy, ha $|\mathbf{D}| \neq 0$, akkor

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}^{-1} & -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \\ -\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1} & \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1} \end{bmatrix},$$

ahol $\mathbf{X} = (\mathbf{A} - \mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}\mathbf{C}).$

Összefoglalás

A XX. század utolsó évtizedeiben a mezoszkopikus rendszerek a transzport jelenségek vizsgálatának kedvelt rendszereivé váltak. Az 1990-es években a nanotechnológia fejlődése lehetővé tette mezoszkopikus méretű, ballisztikus félvezető rendszerek és szupravezető tartományok összekapcsolását, ezáltal hibrid rendszerek fáziskoherens vezetési tulajdonságainak illetve gerjesztési spektrumának vizsgálatát. Normál–szupravezető hibrid rendszerekben az NS határfelülteknél Andrejev-reflexió következik be, amelynek során egy elektron (lyuk) fáziskoherensen lyukként (elektronként) verődik vissza. A hibrid rendszerekben az Andrejev-reflexió miatt egy sor új jelenség lép fel, mint például gap alatti vezetés vagy negatív négypont vezetőképesség.

Ebben a dolgozatban az Andrejev-transzmisszió hatását vizsgáltam meg hibrid kétdimenziós elektrongáz rendszerek különböző transzport tulajdonságaira. Számításaim során a Bogoljubov–de Gennes-egyenletet oldottam meg lépcsőfüggvény közelítésben, az Andrejev-közelítés alkalmazása nélkül. A kapott megoldásokat szemiklasszikus közelítésekkel is összevetettem, és többnyire kiváló egyezést találtam.

A bevezetést követően a 2. fejezetben a Bogoljubov–de Gennes-egyenletet és a legegyszerűbb megoldását ismertetem, egy rövid kitérővel a lépcsőfüggvény közelítés alkalmazhatóságáról.

A 3. fejezetben NS hibrid rendszerek pályahossz-eloszlását – a reflexiós vagy transzmissziós amplitúdó teljesítményspektruma – vizsgáltam, és azt találtam, hogy diffraktív ponto(ka)t is tartalmazó rendszerben csúcsok jelennek meg negatív hosszúságoknál is. A csúcsokat az egész tartományban sikerült a szemiklasszikus pályáknak megfeleltetnem. Bizonyos pályák esetében a lyukként megtett pályarészek hossza nagyobb volt, mint az elektronként megtett pályarészeké, ami negatív pályahosszat eredményezett az ilyen pályákra.

A 4. fejezetben Andrejev-biliárdok energiaspektrumát tanulmányoztam. Tetszőleges alakú, ismert szórási mátrixú normál rendszert egy nyakkal szupravezetőhöz csatolva meghatároztam az így létrehozott Andrejevbiliárd szekuláris egyenletét. Ezen egyenlet numerikusan megoldásai adták a biliárd egzakt energiaszintjeit. Az így kapott eredményeket az Andrejev-biliárdok állapotsűrűségének Bohr–Sommerfeld-közelítésével hasonlítottam össze. Az állapotsűrűségben egyenlő energiaközönként szingularitásokat találtam, amelyek a visszatérési valószínűségben felbukkanó szinguláris hosszakkal állnak kapcsolatban. Diagonális esetben kifejezést adtam a visszatérési valószínűség kiszámítására is. A módszereket doboz-, korong- és sarokbiliárdra sikerrel alkalmaztam.

Az 5. fejezetben ferromágnesből és szupravezetőből álló hibrid rendszert tanulmányoztam, a BdGegyenletet egy rekurzív Green-függvény technika segítségével rácson megoldva. Két ellentétesen polarizált ferromágneses cső szupravezetőhöz csatolásakor fellépő nem-lokális áramokat vizsgáltam. A Falci-féle eredeti elrendezésben a csövek távolságával exponenciálisan csökken az áramok nagysága. Az elrendezést egy normál tartománnyal kiegészítve a jelenség amplitúdóját nagyságrendekkel megnöveltem. Az átlagolt vezetőképesség függését a geometriai paraméterektől egyszerű rezisztor modellel magyaráztam meg. A kontaktusoknál alagutpotenciál bevezetésével igazoltam a transzport rezonáns jellegét. A normál tartományban egy mágneses teret bekapcsolva a jelenség amplitúdója tovább növelhető.

Summary

Mesoscopic devices have become the system of choice for studying transport properties over the last decades of the 20th century. During the 90's advances in nanotechnology have made the fabrication of hybrid systems feasible, systems where mesoscopic size ballistic semiconductors and bulk superconductors are phase-coherently attached. In normal–superconductor (NS) hybrid systems Andreev reflection is a new process, which occurs at the NS interface. In this process an electron (or hole) is phase-coherently retroreflected as a hole (or electron). The Andreev reflection raises numerous new phenomena like below-gap-flow or negative four-point conductance.

In this thesis I have studied the influence of Andreev reflection on several transport properties of twodimensional electron gas hybrid systems. I have been solving the Bogoljubov–de Gennes (BdG) equations in step-function approximation without applying Andreev approximation. I have compared my results to semiclassical calculations as well, and the agreement was usually excellent.

After a short introduction in Chapter 2 I present the BdG equations with their simplest solutions. I also take a touch on the step-function approximation.

In Chapter 3, the Phase Length Spectra (PLS), defined as the power spectra of the reflection or transmission amplitude, was investigated in NS hybrid systems. In hybrid systems with diffractive points peaks emerge at negative lengths also. The position of the peaks correspond with the semiclassical path length over the full range of length. In certain paths the total length of the hole segments may exceed those of the electrons, and therefore the total length can be negative.

In Chapter 4, the energy spectra of Andreev billiards was considered. I have calculated the secular equation of an Andreev billiard, a normal system with a known transfer matrix connected to a bulk superconductor via an infinitesimally short neck. By numerically solving this equation I have calculated the energy levels of such a system. The results could have been matched against the Bohr–Sommerfeld approximation of the density of states (DOS) in hybrid systems. In the DOS singularities were found at equal distances. These singularities were understood to be related to a singular length in the classical return probability. In the diagonal case I have also given a formula to compute the return probability. The method could have been successfully applied for box-, disk- and edge-billiards.

In Chapter 5, I looked into hybrid systems made up of ferromagnet and superconductors. I have solved the BdG equations on a tight binding lattice with a recursive Green function technique. When two fully polarised ferromagnetic wires with opposite polarisations make contact with a spin-singlet superconductor, non-local currents may arise. In the original arrangement the magnitude of this current was found to decay exponentially with the distance between the contacts. By modifying the arrangement by adding a normal diffusive spacer between the ferromagnet and the superconductor, the magnitude of the non-local current can be enhanced by several orders of magnitude. The changes in the averaged conductance can be understood with a simple resistor model. The resonant behaviour of the transport has been proved, by introducing a tunnel barrier at the contacts. A perpendicular magnetic field may further enhance the magnitude of the non-local current.