

الله أكْرَمُ الْعِزَّةِ



دانشگاه صنعتی شهرود

دانشکده: فیزیک

گرایش: حالت جامد

تراپردازی باروسپین در اتصال ابرسانا - مولکول مغناطیسی - ابرسانا

دانشجو: علی آهنگری رستمی

استاد راهنما:

دکتر جهانفر ابویی

استاد مشاور:

دکتر بابک عبداللهی پور

پایان نامه کارشناسی ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

شهریور ۱۳۹۰

بپاس تعبیر عظیم و انسانی شان از کلمه ایثار و از خودکندستگی

بپاس قلب های بزرگشان که فریادرس است و سرگردانی و ترس در پنهانشان به شجاعت می گردید

بپاس عاطفه سرشار و گرامی امید نخش وجودشان که در این سردهترین روزگاران بهترین پیشیان است

و بپاس محبت های بی دینشان که حرکز فروکش نمی کند

این مجموعه را به حانواده عزیزم تقدیم می کنم

# خدا<sup>ایا</sup> سرنوشت خیر بنویس سرنوشت مرا خیر بنویس تقدیری مبارک

تا هتا هرچه را که تو دیر می خواهی زود نخواهم،  
و هو هرچه را تو زود می خواهی دیر نخواهم... هم...

به مصدق «من لم يشكر المخلوق لم يشكر الخالق» بسی شایسته است

که با درود فراوان خدمت خانواده بسیار عزیز، دلسوز و فدایکارم که پیوسته جرعه نوش جام تعلیم و تربیت، فضیلت و انسانیت آنها بوده‌ام و همواره چراغ وجودشان روشنگر راه من در سختی‌ها و مشکلات بوده است، از ایشان تقدیر و تشکر نمایم.

از زحمات بی‌دریغ اساتید فرهیخته و بزرگوارم در دانشگاه صنعتی شاهروド بخصوص اساتید ارجمند جناب آقای دکتر ابوبیی و جناب آقای دکتر عبدالله پور که با راهنمایی‌های دلسوزانه خود در پیشبرد این پژوهه راهگشای اینجانب بودند و با مشاوره‌های خردمندانه یاری‌گر من در این راه بوده و همیشه با روی گشاده پاسخگوی سوالات بنده بودند کمال تشکر و سپاسگزاری را داشته باشم.  
همچنین از تمامی دوستان، هم اتفاقی‌های عزیزم، همکلاسی‌های گرامیم و بچه‌های دانشکده فیزیک که لحظاتی سرشار از صفا و صمیمیت را در کنار خود برایم به یادگار گذاشتند و همیشه اینجانب را مورد لطف و محبت خود قرار داده و به من درس صداقت و مهروزی آموختند بسیار سپاسگزار باشم.

## تعهدنامه

اینجانب علی آهنگری رستمی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه: ترابرد بارواسپین در اتصال ابررسانا - مولکول مغناطیسی - ابررسانا تحت راهنمایی دکتر جهانفر ابویی و مشاوره دکتر بابک عبدالهی پور متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تا کنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تاثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجودات زنده ( یا بافت های آنها ) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.

## تاریخ

امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن ( مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

## چکیده :

پس از کشف ابررسانایی و ارائه نظریه جوزفسون شاهد افزایش روز افرون استفاده از مدارات ابررسانایی در علوم مختلف بوده ایم. از جمله این موارد می توان به علم اسپینترونیک و ظهور وسایل تداخلی کوانتومی در ابررسانایی اشاره نمود. شاخه اسپینترونیک مولکولی یکی از مباحث بسیار جدید و جالب در حوزه اسپینترونیک است که هم از دیدگاه تجربی و هم از دیدگاه نظری مورد توجه است. در این زمینه کنترل و جهت یابی اسپین تک مولکول به منظور انجام عملیات کوانتومی بنیادی و ذخیره اطلاعات کوانتومی بسیار حائز اهمیت است. تاکنون توانسته‌اند با استفاده از ابزارها و تکنیک‌های اپتیکی جهت اسپین تک اتم منگنز را در اتصال نیمرسانا کنترل کنند. لذا ساخت اتصال مولکولی برای آزمایشگرها بسیار مهم بوده، هر چند عملی بسیار پر زحمت و پر تنش است.

از اتصالات مولکولی، همچنین می‌توان برای شناسایی بیشتر یک مولکول استفاده کرد. به عنوان مثال، با اندازه‌گیری جریان عبوری از اتصال مولکول مغناطیسی با یک فلز، می‌توان بیشتر خواص تک مولکول را پیدا کرد. پدیده کوانتومی تونل زنی یکی از خصوصیات بارز مولکول مغناطیسی، مانند  $Fe_8$  و  $Mn_{12}$  است. اخیراً آزمایشات زیادی برای اندازه‌گیری جریان عبوری از اتصال ابررسانا- مولکول مغناطیسی- ابررسانا ( $S - SMM - S$ )، انجام شده است. همچنین مطالعات نظری زیادی روی جریان بار و جریان اسپین و دینامیک مغناطش این اتصال انجام شده است. هدف ما در این کار، بررسی جریان عبوری از این اتصال، با در نظر گرفتن اثر رقص محوری تک مولکول مغناطیسی در جریان بار عبوری از اتصال  $S - SMM - S$ ، است.

رقص محوری شامل نوسان ژیروسکوپی مولکول مغناطیسی در حرکت تقدیمی است که به دلیل وجود برهم‌کنش جریان عبوری از اتصال با مولکول مغناطیسی پدید می‌آید. به این حرکت ژیروسکوپی، رقص محوری جوزفسون (Josephson nutation) گفته می‌شود. در این رساله اثر

رقص محوری جوزفسون بر روی جریان بار عبوری از اتصال ابررسانا- مولکول مغناطیسی- ابررسانا مطالعه شده است. در این اتصال اسپین تک مولکول مغناطیسی به صورت یک بردار کلاسیکی  $\vec{S}$  در نظر گرفته شده است. این بردار تحت تاثیر میدان مغناطیسی اعمالی یک حرکت تقدیمی با فرکانس  $\Omega$  و در اثر اندرکنش متقابل با جریان جوزفسون، رقص محوری با فرکانس  $\omega$  انجام می‌دهد. با استفاده از رهیافت توابع گرین جریان عبوری از این اتصال را در حد تونلی محاسبه کرده‌ایم. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که رقص محوری اسپین باعث مدوله شدن جریان جوزفسون می‌شود. به ازای مقادیر معینی از فرکانس‌های  $\Omega$  و  $\omega$  حالت تشیدی به وجود آمده و دامنه‌ی نوسان جریان جوزفسون واگرا می‌شود. همچنین در مقادیر معینی از فرکانس  $\Omega$  دیده می‌شود که دامنه نوسان صفر بوده و رقص محوری در جریان جوزفسون تاثیری ندارد.

**کلمات کلیدی:** ابررسانایی، مولکول مغناطیسی، پیوندگاه جوزفسون، جریان تونل زنی، توابع گرین، رقص محوری جوزفسون

## لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

علی آهنگری رستمی، بابک عبدالله‌پور، جهانفر ابوبی، "اثر رقص محوری جوزفسون بر جریان  
بار اتصال ابرسانا- تک مولکول مغناطیسی- ابرسانا" هفدهمین گردهمایی فیزیک ماده  
چگال، ۵ و ۶ خرداد ۹۰، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

## فهرست مطالع

۱	فصل اول	اتصال ابرساناهاو جریان جوزفسون
۲	۱-۱- مقدمه	
۲	۱-۲- جفت‌های کوپر، بر هم کنش الکترون- فونون:	
۵	۱-۳- کره فرمی و نظریه BCS	
۹	۱-۴- گاف ابرسانایی	
۱۱	۱-۵- اثرات $dc$ و $ac$ جوزفسون	
۱۲	۱-۶- جریان ابرسانایی در پیوندگاه جوزفسون	
۱۸	۱-۷- جریان جوزفسون بر اساس مدل هامیلتونی تونلی	
۲۶	۱-۸- محاسبه جریان جوزفسون در حضور دو ابرسانا:	
۲	فصل دوم	تک مولکول مغناطیسی
۳۲	۲-۱- مقدمه	تک مولکول مغناطیسی.
۳۳	۲-۲- معرفی تک مولکول مغناطیسی	
۳۴	۲-۳- تونل زنی کوانتمی در تک مولکول مغناطیسی	
۳۵	۲-۴- هامیلتونی سیستمهای اسپینی بزرگرا چگونه بنویسیم؟	
۴۰	۲-۵- انواع تک مولکول مغناطیسی	
۴۲	۲-۶- دلایل و ترجیحات استفاده از تک مولکول مغناطیسی	
۳	فصل سوم	مروری بر کارهای انجام شده
۴۴	۳-۱- مقدمه	
۴۴	۳-۲- جریان جوزفسون در حضور اسپین با حرکت تقدیمی(۲۰۰۳)	
۴۶	۳-۳- جریان جوزفسون در حضور اسپین با حرکت تقدیمی(۲۰۰۹)	
۴۸	۳-۴- ترابرد بار و دینامیک مغناطش در اتصال ابرسانا- تک مولکول- ابرسانا(۲۰۱۰)	
۴	فصل چهارم	جریان بار در اتصال ابرسانا- تک مولکول- ابرسانا
۵۲	۴-۱- مقدمه	
۵۲	۴-۲- مدل ارایه شده	
۵۶	۴-۳- جریان نرمال در حضور اختلاف پتانسیل:	
۷۰	۴-۴- جریان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل در اتصال	
۸۲	۴-۵- نتیجه گیری	
۵	پیوست	

## فهرست اشکال

۳	شكل ۱-۱- نمایش اعوجاج در اثر حرکت الکترون‌های آزاد در شبکه بلور
۴	شكل ۲-۱- طرحواره تابع موج زوجهای کوپر
۵	شكل ۳-۱- توزیع احتمال زوج کوپر در مختصات نسبی دو الکترون
۵	شكل ۴-۱- طرح شماتیک برهمنکنش‌های الکترون- فونون
۶	شكل ۵-۱- کره فرمی در فضای تکانه و منطقه حضور زوجهای کوپر که پر رنگ شده است.
۷	شكل ۶-۱- طرحواره فرضی ذراتی با تکانه‌های مناسب، در فضای تکانه
۱۱	شكل ۷-۱- گاف نواری در صفر مطلق برای دو حالت نرمال وابرسانا
۱۲	شكل ۸-۱- نمایش انواع مختلف اتصال ضعیف: که شامل ابررسانا- نارسانا- ابررسانا(a)
۱۳	شكل ۹-۱- طرحواره ای از تونل زنی جفتهای کوپر در اتصال جوزفسون
۱۴	شكل ۱۰-۱- فروافت پارامتر نظم ابررساناهای در ناحیه عایق
۱۸	شكل ۱۱-۱- نمودار <u>V</u> -امربوط به اتصال شکل
۳۴	شكل ۱-۲- طرح تونل زنی کلاسیکی
۳۵	شكل ۲-۲- نمایش تونل زنی کوانتمومی، ترازها به اندازه $\Delta$ شکافته شده اند
۳۶	شكل ۳-۲- شکافتنگی ترازها برای تک مولکولی با اسین کل
۳۷	شكل ۴-۲- اعمال میدان سبب تونل زنی از ترازهای
۳۸	شكل ۵-۲- نمایش واهلش مغناطیسی و عواملی که منجر به آن می‌شوند
۳۹	شكل ۶-۲- شکل سمت چپ در غیاب میدان اعمالی است
۴۰	شكل ۷-۲- طرحوارهای از $Mn_{12}$
۴۱	شكل ۸-۲- طرح تک مولکول مربوط به $V_{15}$ که شامل ساختار مثلثی است که بین دو ساختار شش گوشه ساندویچ شده است
۴۵	شكل ۱-۳- طرحوارهای از جفت شدگی اسین کلاسیکی بزرگ با ابررساناهای
۴۷	شكل ۲-۳- نمودار چگالی جریان بر حسب فرکانس تقدیمی تک مولکول مغناطیسی
۴۹	شكل ۳-۳- در حالت a در چارچوب مرجع آزمایشگاه اسین کلاسیکی با فرکانس $\Omega$ در حال دوران است
۵۵	شكل ۱-۴- تک مولکول مغناطیسی که تحت تاثیر میدان مغناطیسی در حرکت دورانی و نوسانی توام می‌باشد
۶۹	شكل ۲-۴- تغییرات جریان مستقیم بر حسب تغییرات $2\Delta/eV$ ، مشاهده میشود که جریان در $eV = 24$ چهش ناپیوستهای را از مقدار صفر انجام داده و سپس با شبیه ثابتی افزایش می‌یابد
۷۰	شكل ۳-۴- نمایش تغییرات جملات جریان متناوب بر حسب تغییرات ولتاژ
۸۰	شكل ۴-۴- تغییرات ضریب $M$ بر حسب $\omega/2\Delta$ ، به ازای $0.5 \Omega/2\Delta = 0.5$
۸۱	شكل ۵-۴- تغییرات ضریب $M$ بر حسب $\omega/2\Delta$ ، به ازای $1.5 \Omega/2\Delta = 1.5$
۸۱	شكل ۶-۴- تغییرات ضریب $M$ بر حسب $\omega/2\Delta$ و در به ازای $7 \omega/2\Delta = 7$
۹۷	شكل ۷-۴- انتگرالهای بیضوی کامل نوع اول و دوم

از زمانی که کامرلینگ اونس<sup>۱</sup> به همراه شاگردش هولست<sup>۲</sup> در آزمایشگاه‌شان در لیدن هلند، به صورت کاملاً اتفاقی هنگام بررسی مقاومت  $dc$  جیوه شاهد افت‌سریع مقاومت به سمت صفر در دمای ۴.۲K بودند، یک قرن می‌گذرد[۱].

پس از کشف مایسнер<sup>۳</sup> در سال ۱۹۳۳ مبنی بر اینکه رفتار مغناطیسی ابررساناها مانند دیامغناطیس کامل است و متعاقباً معادلات برادران لاندن<sup>۴</sup> در سال ۱۹۳۵ برای توضیح اثر مایسنرا را یه شد. معادلات برادران لاندن منجر به معرفی عمق نفوذ<sup>۵</sup> لاندن شد[۲]. در سال ۱۹۵۰ گینزبورگ و لانداؤ نظریه پدیده شناختی برای توضیح پدیده ابررسانایی و برطرف کردن نقایص نظریه لاندن بر پایه گذار فاز مرتبه دوم که توسط لانداؤ توسعه یافته بود، ارایه کردند. این نظریه نقش بسیار مهمی در شناخت رفتار ابررساناهای متعارف<sup>۶</sup> و نامتعارف<sup>۷</sup> را در میدانهای مغناطیسی قوی داشته است. نظریه گینزبورگ و لانداؤ کمیتی از جنس عمق نفوذ را با نام طول همدوسي<sup>۸</sup> معرفی کرده است[۹ و ۱۰].

در تمامی نظریات ابررسانایی مسئول ابررسانش را تک الکترونها می‌دانستند تا اینکه لئون کوپردر سال ۱۹۵۶ اعلام نمود که برهم کنشهای ضعیف الکترون-فونون در جامدات منجر به شکل گیری جفت الکترونها شده و این پدیده مسئول ابررسانش در ماده است[۹].

<sup>1</sup>-Kamerlingh Onnes

<sup>2</sup>-Gilles Holst

<sup>3</sup>-Meissner

<sup>4</sup>-F. and H. London

<sup>5</sup>-penetration depth

<sup>6</sup>-Ginzburg&Landau

<sup>7</sup>-conventional

<sup>8</sup>-unconventional

<sup>9</sup>-coherence length

اولین نظریه میکروسکوپیک ابرسانایی در فلزات در سال ۱۹۵۷ توسط باردین و کوپر و شرایفر<sup>۱</sup> ارایه شد که اکنون با نام نظریه *BCS* شناخته می‌شود. نظریه *BCS* در دماهای پایین اعتبار دارد و برای ابرساناهای دمای بالا کاربرد خود را از دست میدهد [۲].

در طی این صد سال یکی از مهمترین نظریات ارایه شده در حیطه ابرسانایی، نظریه ای بوده است که برایان جوزفسون<sup>۲</sup> در ۱۹۶۲ ارایه نموده است و مربوط به جریان در اتصال دو ابرسانا می‌باشد که ناشی از تونل زنی کوانتمی زوجهای کوپراز میان یک لایه نارساناست. بیشترین تحولات در زمینه استفاده از اتصالات ابرسانایی و همچنین طراحی ابزار اندازه گیری ابرسانایی پس از ارایه نظریه جوزفسون صورت گرفته است.

با ارایه نظریه جوزفسون و ورود مکانیک کوانتم به قلمرو ابرسانایی، علاقه افراد به کار در زمینه بررسی پدیده‌های کوانتمی در ابرسانایی و همچنین به کارگیری لایه‌های گوناگون در پیوند گاههای جوزفسون روز به روز افزایش یافته است. از جمله این پیوندگاهها می‌توان به پیوندگاه فرومغناطیس- ابرسانا اشاره نمود.

بررسی پیوندگاها جوزفسون با کشف یا بیان دقیقتر رونمایی از تک مولکول مغناطیسی شکل تازه‌ای به خود گرفت. تک مولکول مغناطیسی که در اوایل دهه ۹۰ سنتز آن توسط شیمیدان‌ها اعلام گردید، در حقیقت از یک دهه قبل سنتز شده بود و در مصارف نظامی و استراتژیک علمی از آن استفاده می‌شد.

تک مولکول مغناطیسی ماده آلی است که توسط لوله‌های کربنی تعداد زیادی از اسپینهای با اندازه وجهت‌گیری متفاوت را به هم متصل می‌نماید و دارای اسپین کل بزرگی است. این ماده از ایزوتوپ‌های مختلف فلزات تشکیل شده است که متدائل ترین آنها اهن *Fe* و منگنز *Mn* می‌باشند. از همان زمان علاقه افراد به کنترل جهتگیری اسپین تک مولکول مغناطیسی و یا حتی یک تک اتم و یا تعداد کمی از اتمها، بر پایه اعمال عملگرهای کوانتمی، روبه افزایش بوده است [۱۰].

<sup>1</sup>-Bardeen, Cooper and Schrieffer

<sup>2</sup>-B. D. Josephson

اخيراً در مورد جايگداری تک مولکول مغناطيسى در پيوندگاههای جوزفسون واندازه گيري جريان بار و اسپين در اين پيوندگاهها، برای بررسی بيشر و دقیقتر خواص تک مولکول مغناطيسى صورت می گيرد. شايد گفت دليل اصلی عدم استفاده از پيوندگاه نرمال در بررسی خواص تک مولکول مغناطيسى، مقاومت محسوس و تقریباً ياد موثر بر اندازه گيري بوده است. کاري توسط جيان خين ژون<sup>۱</sup> و بالتسکی<sup>۲</sup> انجام شد نيز موئيد همین نكته است [۱۶].

پس از آن نيز کارهایی در زمینه بررسی تاثیر میدان مغناطيسی خارجی بر جريان جوزفسون عبوری از اتصال جوزفسون شامل تک مولکول مغناطيسی توسط افراد فوق و همكارانشان انجام گرفته است. اعمال میدان مغناطيسی سبب حرکت تقديمی تک مولکول مغناطيسی شده و جريان جوزفسون عبوری از اتصال را تحت تاثير قرار می دهد. در بيشر کارهای انجام شده در اين زمینه از روش توابع گرين ماتسوبارا و در بعضی موارد (به خصوص در ترايبرد فلزات نرمال) از توابع گرين زمانهای حقيقي استفاده شده است [۱۶و۴].

در اين رساله اتصال جوزفسون متشكل از دو ابرسانای يگانه که از طريق يك تک مولکول مغناطيسی به هم متصل شده‌اند مورد بررسی قرار گرفته است. اين سيسitem تشکيل يك اتصال کوتاه(اتصالی که طول آن کوتاه‌تر از طول همدوسی ابرساناهای است) میدهد. با اعمال میدان مغناطيسی خارجی به اتصال، تک مولکول حرکت تقديمی خواهد داشت. از طرفی اندرکنش شبه ذرات عبوری از اتصال با اسپين تک مولکول(که به صورت اسپين کلاسيکی بزرگ فرض شده است) نيز منجر به رقص محوري جوزفسون<sup>۳</sup> تک مولکول مغناطيسی می شود [۲۰]. بنابراین تک مولکول دو حرکت تقديمی و نوسانی را به طور توام انجام می دهد. برای ساده سازی بيشر، از افت وخیزهای کوانتموی اسپين نيز صرف نظر كرده ايم.

<sup>1</sup>-Xian-Xin Zhu

<sup>2</sup>- A.V. Balatsky

<sup>3</sup> Josephson Nutation

ما جریان بار عبوری از اتصال جوزفسون توصیف شده در بالا را در حضور اختلاف پتانسیل اعمالی و در غیاب آن مطالعه کرده‌ایم. و تاثیر حرکت رقص محوری جوزفسون بر جریان عبوری از اتصال را بررسی کرده‌ایم.

برای محاسبه جریان از مدل هامیلتونی تونلی استفاده می‌کنیم. بدین ترتیب که هامیلتونی کل اتصال را به صورت مجموع هامیلتونی‌های ابرساناها و هامیلتونی تونلزنی می‌نویسیم. هامیلتونی تونلزنی بر حسب مولفه‌های ماتریس عبور توصیف می‌شود. جریان عبوری از اتصال شامل جریان نرمال و جریان جوزفسون است. با استفاده از روش توابع گرین ماتسوبارا، جریان‌های نرمال و جوزفسون را به صورت جملاتی که شامل توابع انتگرال بیضوی نوع اول و دوم هستند به دست می‌آوریم.

جریان نرمال در حضور اختلاف پتانسیل شامل مجموع یک جریان مستقیم و جریان متناوب است. قسمت ثابت جریان مستقل از دینامیک اسپین تک مولکول مغناطیسی است و این جمله در غیاب اختلاف پتانسیل اعمالی برابر صفر است. جمله متناوب جریان وابسته به فرکانس‌های حرکت تقدیمی و نوسانی است و در غیاب اختلاف پتانسیل اعمالی همچنان غیر صفر است. این موضوع به علت دینامیک اسپین تک مولکول مغناطیسی رخ می‌دهد. بنابراین ما نشان می‌دهیم که حرکت رقص محوری اسپین تک مولکول مغناطیسی می‌تواند سبب ایجاد جریان متناوب پمپی در سیستم مورد نظر ما گردد.

جریان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل و در غیاب اختلاف پتانسیل نیز شامل دو جمله است. جمله اول جریان، مستقل از زمان بوده و فقط بر حسب فرکانس تقدیمی به دست می‌آید و مستقل از رقص محوری اسپین تک مولکول مغناطیسی است. اما جمله دوم بر خلاف جمله اول وابسته به زمان بوده و وابستگی زمانی آن در غیاب اختلاف پتانسیل صرفاً بر حسب فرکانس نوسانی مشخص می‌شود.

کار انجام شده در این رساله، شامل ساختار زیر می باشد:

**فصل اول :** که به مرور کلی بر ابرسانایی و تاریخچه آن می پردازد و سپس به معرفی اتصال جوزفسون پرداخته و جریان جوزفسون با استفاده از رهیافت بس ذرهای محاسبه می شود.

**فصل دوم:** به معرفی و تاریخچه تک مولکول مغناطیسی اختصاص یافته است. در مورد سنتز این ماده و اسپین بزرگ آن نیز توضیح داده می شود. خواص مغناطیسی این اسپین های کلاسیکی بزرگ نیز بررسی خواهد شد.

**فصل سوم:** به توضیح درمورد کارهای قبلی که به بررسی جریان جوزفسون در حضور تک مولکول مغناطیسی و ترابرد بار و اسپین در این سیستم ها پرداخته است، اختصاص یافته است. .

**فصل چهارم:** کارهای انجام شده در این تحقیق است و در بخش های مختلف، جریان بار حاصل از دینامیک تک مولکول مغناطیسی را محاسبه نموده ایم. تعاریف و محاسباتی نیز که آوردن آن ها در متن مقدور نبود، در قالب پیوست آمده است.

# فصل اول

## اتصال ابررساناهای و جریان جوزفسون

❖ مقدمه

❖ جفت‌های کوپر، بر هم کنش الکترون- فونون

❖ کره فرمی و نظریه  $BCS$

❖ گاف ابررسانایی

❖ اثرات  $ac$  و  $dc$  جوزفسون

❖ جریان ابررسانایی در پیوندگاه جوزفسون

❖ جریان جوزفسون بر اساس مدل هامیلتونی تونلی

❖ محاسبه جریان جوزفسون در حضور دو ابررسانا

## ۱-۱- مقدمه

یکی از جالبترین پدیده‌های فیزیکی شناخته شده پدیده ابرسانایی است. پدیده‌ای که در طبیعت یافت نمی‌شود. به عبارت دیگر، جهان پیرامون ما از تولید حالت ابرسانایی عاجز است. دلیل اصلی در تولید این حالت چه می‌تواند باشد؟ شاید منطقی‌ترین پاسخ این باشد که ابرسانایی از زمان ظهور تاکنون به عنوان حالتی در نظر گرفته شده که در آن اصطکاک وجود ندارد، اما می‌دانیم که در جهان واقعی ما در غیاب اصطکاک چیزی به شکل ماده وجود نخواهد داشت. حتی مواد زنده تشکیل دهنده جانداران نیز شکل نمی‌گیرند.

ابرسانایی حالت کوانتومی ماده است که در مقیاس ماکروسکوپی رخ می‌دهد. در واقع می‌توان گفت که ابرسانایی پلی است بین دنیای ماکرو و دنیای میکرو! این پل به ما اجازه عبور از دنیای ماکرو به دنیای میکرو و مطالعه فیزیک دنیای میکرو را می‌دهد. و این مطالعه شاید منجر به پاسخ این سؤال شود که: چگونه این پدیده می‌تواند در غیاب هر گونه اصطکاکی رخ دهد؟ سوالی که یک قرن در ذهن بسیاری از دانشمندان و فیزیکدانان نقش بسته است.

پدیده ابرسانایی در سال ۱۹۱۱ توسط فیزیکدان آلمانی کامرلینگ اونس<sup>۱</sup> و دستیارش ژیلز هولست<sup>۲</sup> در لیدن کشف شد. این دو نفر در حین بررسی مقاومت  $dc$  فلز جیوه، به طور تصادفی مشاهده کردند که در دمای پایین تر از  $4.2K$  مقدار مقاومت  $dc$  ناگهان به مقدار صفر سقوط می‌کند [۱].

## ۱-۲- جفت‌های کوپر، بر هم کنش الکترون- فونون:

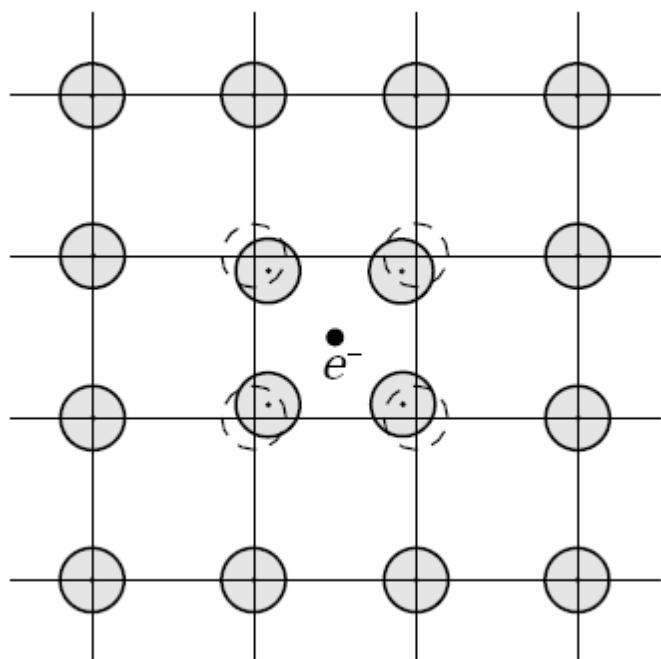
نظریه  $BCS$  ابرسانایی بر پایه جفت‌های کوپر قرار گرفته است. اساس تشکیل جفت‌های کوپر، بر هم کنش الکترون- فونون<sup>۳</sup> در جامدات بلورین است. فونونها کوانتیده‌اند و در جامدات مختلف، با فرکانس‌های

<sup>1</sup>-H. KamerlinghOnnes

<sup>2</sup>-Gilles Holst

<sup>3</sup>-electron-phononinteraction

متفاوت منتشر می شوند. به دلیل تکراری بودن شبکه در جامدات، یک یاخته بسیط<sup>۱</sup> با یاخته بسیط همسایه خود فرقی ندارد و ارتعاشات شبکه می توانند بدون تغییر از سلولی به سلول دیگر منتقل شوند. به همین دلیل کافی است که یک یاخته بسیط را مطالعه کنیم. الکترونی را در نظر می گیریم که در شبکه ای به شکل(۱-۱) در حال حرکت است. به دلیل وجود نیروی جاذبه بین بار منفی الکترون و یون های مثبت شبکه، حضور الکترون منجر به خلق یک اعوجاج<sup>۲</sup> در شبکه بلوری کشسان<sup>۳</sup> می شود [۲].



شکل ۱-۱- نمایش اعوجاج در اثر حرکت الکترون های آزاد در شبکه بلور [۲]

<sup>۱</sup>-unit cell

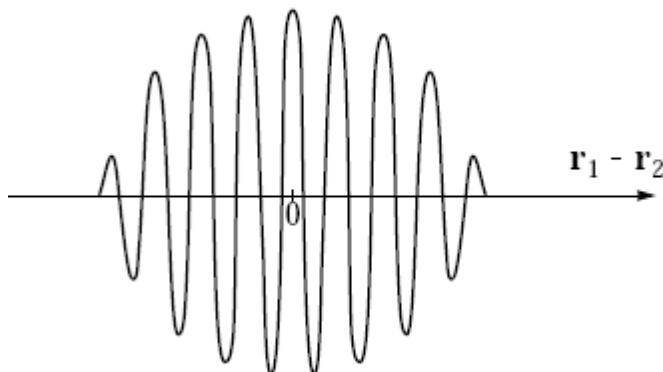
<sup>۲</sup>distortion.

<sup>۳</sup>-elastic

حال اگر این اعوجاج ایجاد شده برای زمانی کوتاه باقی بماند، الکترون عبوری دوم، این اعوجاج را حس می‌کند. این تاثیر بر اعوجاج منجر به بروز برهم کنش جذبی ضعیف غیر مستقیمی بین دو الکترون می‌شود. سئوال اینجاست که الکترون‌هایی که تشکیل جفتهای کوپر را می‌دهند، چگونه عمل می‌کنند؟ در مکانیک کوانتومی به هر ذره یک تابع موج نسبت می‌دهیم، بنابراین زوج کوپر را نیز باید با یک تابع موج مشخص کنیم. اما ابتدا بایستی تابع موج هر الکترون را در نظر بگیریم. اگر  $(r_1)$  تابع موج الکترون اول و  $(r_2)$  تابع موج الکترون دوم باشد، آنگاه  $(r_1 - r_2)$  تابع موج زوج الکترون کوپر خواهد بود [۹].

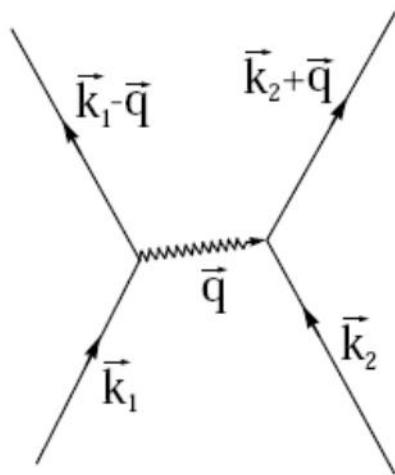
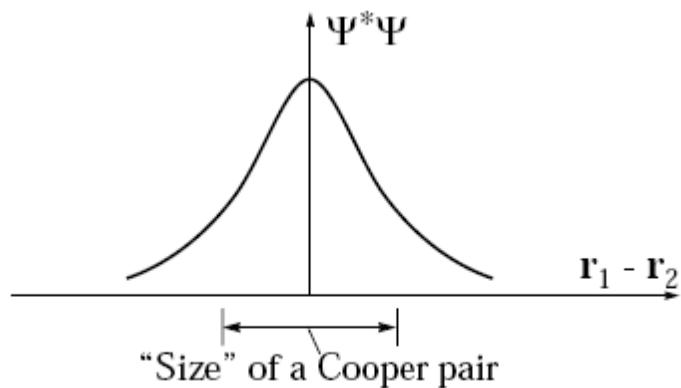
اسپین خالص زوجهای کوپر  $S_1 + S_2 = 0$  است، همانگونه که تکانه خالص آن ۰ است. شکل (۲-۱) طرح شماتیک تابع موج جفت کوپر است. تابع موج  $\Psi$  یک عدد مختلط است که دامنه و فاز دارد.

$$\psi(r) = |\psi(r)| e^{i\theta(r)}$$



شکل ۲-۱- طرحواره تابع موج زوجهای کوپر [۹]

احتمال یافتن زوجهای کوپر در فضای حقیقی با  $\psi^* \psi$  داده می‌شود که  $\psi^* \psi$  همیوغ هرمیتی  $\psi$  است.

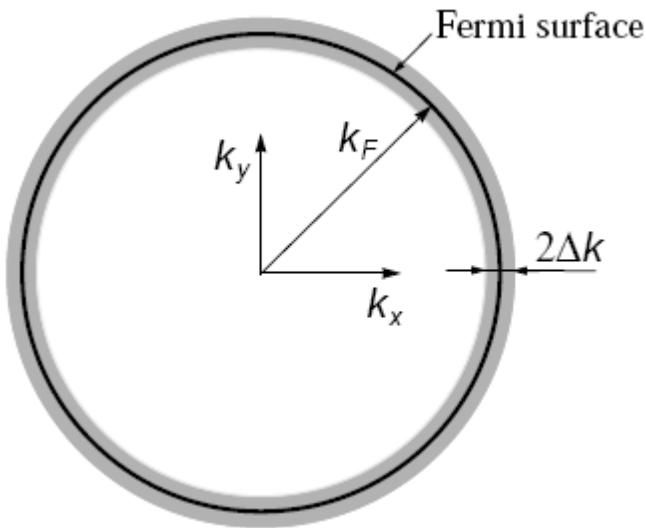


شکل ۱-۴- طرح شماتیک برهمکنش‌های الکترون- فونون

### ۱-۳-۱- کره فرمی و نظریه BCS

شکل (۱-۱) طرح شماتیک برهمکنش دو الکترون از طریق جذب و دفع یک فونون را نشان می‌دهد. می‌توان نشان داد که این اتفاق تنها در اطراف سطح فرمی می‌افتد. سطح فرمی در فضای تکانه برای الکترون‌های آزاد با کره فرمی توصیف می‌شود، کره‌ای که شعاع آن  $k_F$  است. شکل (۱-۵) کره فرمی و

ناحیه مجاز برای برهم کنشهای الکترون - فونون را نشان می‌دهد، که در آن الکترون آزاد از حالت دیگر می‌رود [۲].



شکل ۱-۵- کره فرمی در فضای تکانه و منطقه حضور زوجهای کوپر که پر رنگ شده است [۲].

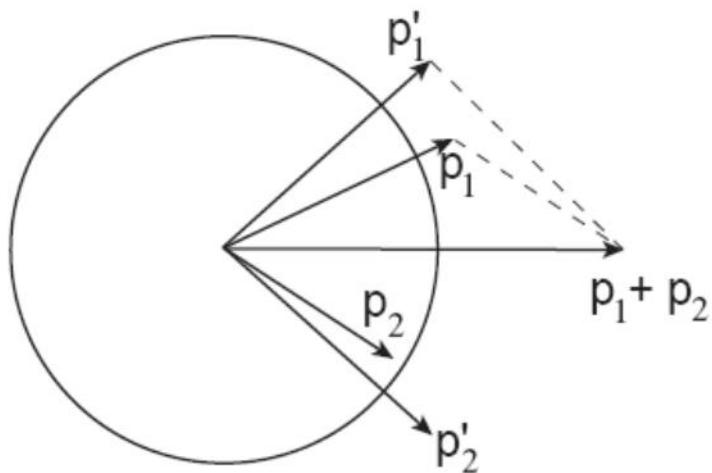
الکترونها<sup>ی</sup> یکدیگر را جذب می‌کنند که تفاوت انرژی آنها با سطح انرژی فرمی، در محدوده انرژی دبای<sup>۱</sup>  $\hbar\omega_D$  باشد. در مدل دبای منطقه بریلیوئن<sup>۲</sup> که با مقادیر مجاز  $\vec{k}$  به هم پیوسته است، با یک کره به شعاع  $k$  در فضای تکانه جایگزین می‌گردد. دمای دبای  $\Theta_D$ ، توسط رابطه  $k_B\Theta_D = \hbar\omega_D$  تعریف می‌شود.  $\omega_D$  فرکانس قطع یا فرکانس فونونی در لبه کره دبای است. بنابر این  $k_B\Theta_D$  یا  $\hbar\omega_D$  بیشترین انرژی فونون در کره دبای است [۱۲].

مطابق شکل (۱-۵) تنها الکترونها<sup>ی</sup> که حالت‌های نزدیک کره فرمی را اشغال کنند قادر به جذب یکدیگرند. ضخامت این لایه کروی برابر  $2\Delta k$  است که با فرکانس دبای تعیین می‌گردد. به زبان ساده: الکترونها هنگامی در شبکه جامد تشکیل جفت کوپر را می‌دهند که در حضور فونون یکدیگر را جذب

<sup>1</sup>-Debye energy

<sup>2</sup>-Brillouin zone

کنند، ماکریمم مقدار انرژی فونون  $\hbar\omega_D$  است که در فضای تکانه لایه‌ای کروی به ضخامت  $2\Delta k$  را در بر می‌گیرد. این جفتهای الکترونی همانطور که در بخش قبل گفته شد، دارای اسپین مخالف و تکانه مخالف هم هستند. پراکندگی دو الکترون را مطابق شکل (۱-۶) در نظر می‌گیریم [۹].



شکل ۱-۶- طرحواره فرضی ذراتی با تکانه‌های منتسب، در فضای تکانه

با استفاده از پایستگی تکانه باید رابطه زیر بین تکانه‌های اولیه و نهایی الکترون‌ها برقرار باشد

$$\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = \vec{p}'_1 + \vec{p}'_2$$

همچنین با توجه به شکل روابط زیر را داریم که در آن  $p_f$  تکانه فرمی است

$$p_1 > p_f , \quad p'_1 > p_f$$

$$p_2 < p_f , \quad p'_2 > p_f$$

با استفاده از روابط بالا داریم:

$$p'_2 > p_f , \quad p'_1 = p_1 + p_2 - p'_2 < p_1 + p_2 - p_f \quad (۷-۱)$$

بنا براین:

$$0 < p'_1 - p_f < p_1 - p_f + p_2 - p_f \quad (8-1)$$

با جمع روابط (7-1) و (8-1) خواهیم داشت:

$$p_f - p_2 < p_1 - p'_2 < p_1 - p_f$$

در نتیجه به رابطه زیر می‌رسیم

$$0 < p_f - p_2 < p_1 - p_f$$

حال با محاسبه احتمال حضور دو الکترون در نزدیکی سطح فرمی و اختلاف فاصله آنها در فضای تکانه خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} dp &\propto dp_2 dp'_1 \\ P &= \int_0^{p_1-p_f} d(p_f - p_2) \int_0^{(p_1-p_f)+(p_2-p_f)} d(p'_1 - p_f) \\ &= \int_0^{p_1-p_f} [(p_1 - p_f) - (p_2 - p_f)] d(p_f - p_2) \\ &= \frac{1}{2} (p_1 - p_f)^2 \end{aligned}$$

با در نظر گرفتن عدم قطعیت در انرژی ذرات  $\delta\epsilon \sim \hbar p$  با انرژی  $\epsilon$  و این نکته که انرژی فرمی برابر

است با:

$$E_f = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2m}$$

رابطه فوق تبدیل به رابطه زیر می‌شود.

$$P \sim \frac{v_f^2 (p_1 - p_f)^2}{\hbar E_f} = \frac{\epsilon^2}{\hbar E_f}$$

رابطه فوق تصدیق کننده این واقعیت است که، عدم قطعیت در انرژی ذرات  $\delta\epsilon \sim \hbar p$  در مقایسه با

انرژی  $\epsilon$  تنها هنگامی کوچک است که نزدیک سطح فرمی باشیم. به عبارت دیگر، حضور جفت‌های کوپر تنها نزدیک سطح فرمی توجیه پذیر است.

## ۱-۴- گاف ابررسانایی

اهمیت گاف نواری در ابررساناهای نیز به اندازه اهمیت آن در نیمه رساناهاست. با این تفاوت که ابررسانایی خصوصیتی از ماده است که در مقیاس انرژی‌های پایین رخ می‌دهد و یکی از این انرژی‌ها انرژی گاف ابررسانایی است. در ابررساناهای با دو نوع گاف انرژی<sup>۱</sup> مواجه ایم:

اول: گاف انرژی جفتیدگی<sup>۲</sup>

دوم: گاف انرژی فاز همدوسی<sup>۳</sup>

پارامتری که الکترونها را در ابررسانایی، برای نزدیک شدن به هم توجیه می‌کند، انرژی بستگی<sup>۴</sup> است. میزان اندازه گیری شده این انرژی بستگی در جفتهای کوپر گاف جفتیدگی است. مقدار این گاف نواری وابسته به دماس است. طبق دو مقدار در نظر گرفته شده برای گاف انرژی، حالت ابررسانایی نیازمند جفتیدگی الکترونها و همچنین دارا بودن فاز همدوسی بلند برد می‌باشد. این دو پدیده معمولاً مستقل از یکدیگرند و در دماهای متفاوتی رخ می‌دهند. دمایی که در آن جفتهای الکترونی تشکیل می‌شوند را با  $T_{pair}$  و دمایی را که در آن همدوسی فاز ابررسانایی رخ می‌دهد را با  $T_c$  نمایش می‌دهند[۲و۱]. معمولاً در ابررساناهای  $T_{pair} \geq T_c$

گاف جفتیدگی مستقیماً با انرژی  $K_B T_{pair}$  متناسب است. بنا براین  $K_B T_c$  متناسب است به این معنی که از طرفی به طور همزمان در ابررساناهای گاف فاز همدوسی نیز با  $K_B T_c$  متناسب است

<sup>1</sup>-energy gap

<sup>2</sup>-Pairing energy gap

<sup>3</sup>-Phase-coherence energy gap

<sup>4</sup>-binding energy

می باشد. انرژی  $2\Delta_p$  میزان قدرت بستگی دو الکترون را در جفت های کوپر نشان

می دهد. و  $2\Delta_c$  نیز انرژی چگالیده شدن<sup>۱</sup> جفت های کوپر را بیان می کند.

وقتی که فلزی به حالت ابررسانایی می رود، یک گاف انرژی کوچک در اطراف تراز فرمی ایجاد می شود

که با مفهوم گاف نواری در نیمه رساناها متفاوت است. گاف در ابررساناهای دو طرف تراز فرمی تشکیل

می گردد، که در شکل (۷-۱) نشان داده شده است. در  $T = 0$  کمینه انرژی لازم برای تولید یک

برانگیختگی در طول گاف برابر با  $(0)2\Delta_p$  است.

در ابررساناهای فاز همدوسی بوسیله همپوشانی توابع موج جفت های کوپر به وجود می آید. این فرآیند

سبب پدید آمدن تابع موج جدیدی برای ابررسانا که پارامتر نظم نامیده می شود، می گردد. در ابررساناهای

متعارف<sup>۲</sup> به دلیل منطبق بودن تقارن پارامتر نظم بر تقارن گاف جفتیدگی، فاز همدوسی و جفتیدگی

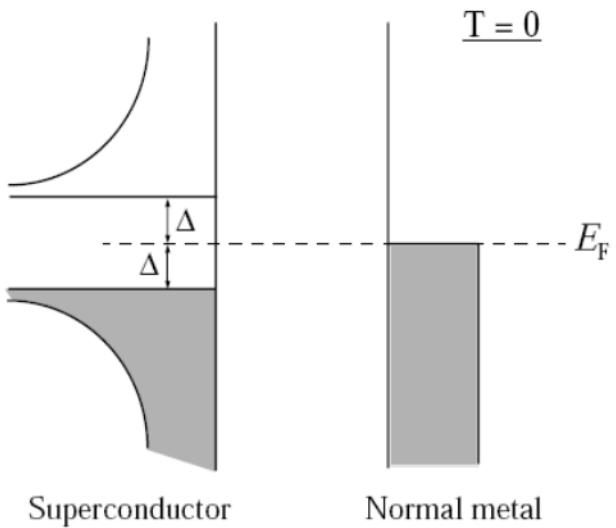
الکترون در دمای یکسانی رخ می دهند  $T_{pair} = T_c$ . بنابراین گاف انرژی جفت شدگی  $\Delta_p$  به اختصار با

$\Delta$  نمایش داده می شود.

---

<sup>1</sup>-condensation energy

<sup>2</sup>-conventional superconductors



شکل ۱-۷-۱- گاف نواری در صفر مطلق برای دو حالت نرمال وابرسانا

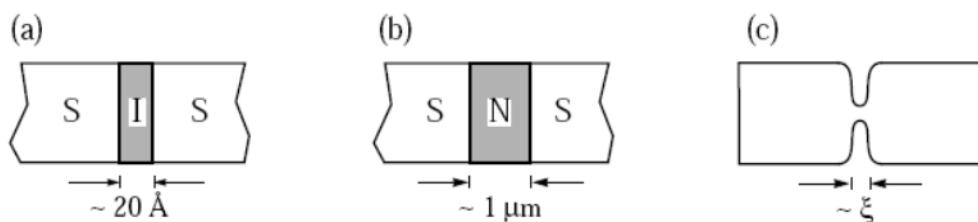
### ۱-۵-۱- اثرات $dc$ و $ac$ جوزفسون

در سال ۱۹۶۲ برايان جوزفسون<sup>۱</sup>، جرياني را که در اثر تونل زني جفت‌هاي کوپر از يك سد نارساناي نازک (از مرتبه چند نانومتر) ميان دو ابرسانا شارش مي‌يابد، محاسبه نمود. او دريافت که جرياني از الکترونهای جفت شده می‌تواند در حالتی که هیچ اختلاف پتانسیلی به پیوندگاه تونلی اعمال نمی‌شود (بایاس صفر)، در اتصال شارش يابد. اين شارش جريان در ولتاژ صفر، نتيجه‌ای از تونل زنی جفت‌هاي کوپر است، که به عنوان اثر  $dc$  جوزفسون شناخته می‌شود. اندک زمانی پس از ارائه اين نظريه توسط جوزفسون، اين اثر به صورت تجربی تاييد شد [۲].

جوزفسون همچنان پيش بياني نمود که اگر ولتاژ غير صفر ثابتی به دو سر اين اتصال اعمال شود، يك جريان ابرسانايی متناوب در اين سد شارش خواهد يافت. جريان نوسانی جفت‌هاي کوپر در حضور اين اختلاف پتانسیل را اثر  $ac$  جوزفسون می‌نامند.

<sup>1</sup>-Brian D Josephson

در واقع اثرات جوزفسون تنها در اتصالات تونلی دیده نمی‌شوند، بلکه در سایر اتصالاتی که اتصال‌های ضعیف<sup>۱</sup> نماید می‌شوند و در شکل (۸-۱) آمده است نیز وجود دارند. اتصالات ضعیف چه اتصالاتی هستند؟ دو ابرسانا را در نظر بگیرید که به یکی از روش‌های مرسوم با هم در تماس قرار می‌گیرند، جریان بحرانی که در این اتصال برقرار می‌شود از مقدار جریان در هر یک از ابرساناها به تنها یی اندازه کوچکتری دارد. به این پیوندگاه اصطلاحاً اتصال ضعیف گویند.



شکل ۸-۱- نمایش انواع مختلف اتصال ضعیف: که شامل ابرسانا- نارسانا- ابرسانا(a)

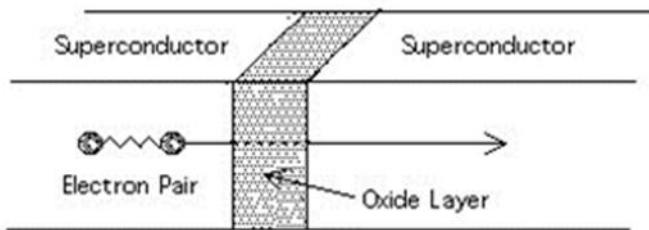
ابرانا- فلزعادی- ابرسانا(b)، میکروساختار ابرسانایی که در ناحیه‌ای به اندازه طول همدوسی منقبض شده است(c)

## ۱-۶- جریان ابرسانایی در پیوندگاه جوزفسون

اتصال ابرسانا- نارسانا- ابرسانا را در تعادل ترمودینامیکی در دمای  $T_c \leq T$  در نظر می‌گیریم.

برای ساده سازی فرض می‌کنیم که ابرساناها در دو طرف اتصال همسانند.

<sup>1</sup>-Weak links



شکل ۹-۱- طرحواره ای از تونل زنی جفت‌های کوپر در اتصال جوزفسون

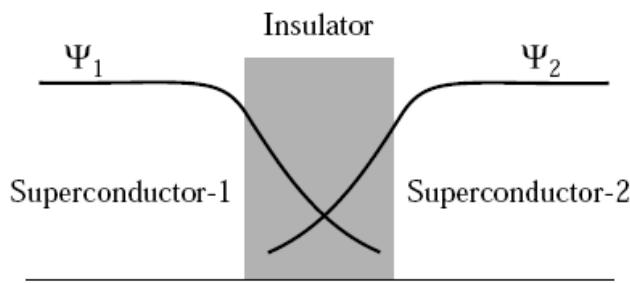
ابررساناهای را متعارف در نظر می‌گیریم (ابررساناهایی که در نظریه  $BCS$  صدق می‌کنند)، بنابراین پارامترهای نظم دو ابررسانا را می‌توانیم به صورت زیر در نظر بگیریم:

عامل برقراری جریان ابررسانایی در اتصال ضعیف نیز اختلال در همدوسی<sup>۱</sup> توابع موج ابررسانایی است

است، که سبب ایجاد اختلاف فاز در دو سمت سد نارسانا می‌شود. در حقیقت جریان ابررسانایی ناشی از اختلاف فاز این دو تابع موج است [۲۴].

در ناحیه نارسانا مانند شکل (۱۰-۱) توابع موج زوج‌های کوپر دچار فروافت می‌شوند.

<sup>1</sup>-coherence



شکل ۱۰-۱- فرو افت پارامتر نظم ابررساناهای در ناحیه عایق

جوزفسون برای به دست آوردن جریان ابررسانایی از مکانیک کوانتوم بھر گرفت و با در نظر گرفتن

تابع موج به شکل زیر اقدام به حل هامیلتونی مساله نمود.

$$\Psi = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \psi_{\alpha} \quad (9-1)$$

در رابطه (۹-۱) توابع  $\psi_{\alpha}$  همان حالت ابررسانا هست، هر یک از این حالت‌های ابررساناهای اول و دوم

به طور جداگانه در معادله شرودینگر صدق می‌کنند.

$$i\hbar \frac{\partial \psi_{\alpha}}{\partial t} = E\psi_{\alpha} \quad (10-1)$$

فرض می‌کنیم که انرژی حالتها در ابررساناهای جفت نشده اول و دوم همسان باشند. وقتی که دو ابررسانا به هم متصل شوند، به جای اینکه حالت‌های ابررساناهای اول و دوم به طور مجزا در معادله شرودینگر صدق کنند، تابع موج  $\Psi$  در معادله شرودینگر وارد می‌شود.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathbf{H}\Psi \quad (11-1)$$

که در رابطه بالا  $\mathbf{H}$  هامیلتونی سیستم در حالت پایه است. رابطه (۱۱-۱) تبدیل به رابطه زیر می شود:

$$i\hbar \left( \sum_{\alpha} \frac{\partial C_{\alpha}(t)}{\partial t} \psi_{\alpha} + \sum_{\alpha} \frac{\partial \psi_{\alpha}}{\partial t} C_{\alpha}(t) \right) = \mathbf{H} \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \psi_{\alpha}$$

رابطه بالا با وارد کردن رابطه (۱۰-۲) تبدیل به رابطه زیر می شود:

$$i\hbar \sum_{\alpha} \frac{\partial C_{\alpha}(t)}{\partial t} \psi_{\alpha} + \sum_{\alpha} E \psi_{\alpha} C_{\alpha}(t) = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \mathbf{H} \psi_{\alpha} \quad (12-1)$$

حال دو طرف رابطه (۱۲-۱) را در  $\psi_{\beta}^*$  ضرب کرده و در فضا از آن انتگرال می گیریم.

$$i\hbar \int d^3r \sum_{\alpha} \frac{\partial C_{\alpha}(t)}{\partial t} \langle \psi_{\beta}^* | \psi_{\alpha} \rangle = \int d^3r \sum_{\alpha} \langle \psi_{\beta}^* | (\mathbf{H} - E\hat{I}) | \psi_{\alpha} \rangle C_{\alpha}(t)$$

رابطه بالا تبدیل به رابطه زیر می شود:

$$i\hbar \sum_{\alpha} \frac{\partial C_{\alpha}(t)}{\partial t} \delta_{\alpha\beta} = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \mathbf{H}_{\beta\alpha} \quad (13-1)$$

در اینجا روابط زیر را در نظر گرفته‌ایم:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{\beta\alpha} &= \int \langle \psi_{\beta}^* | (\mathbf{H} - E\hat{I}) | \psi_{\alpha} \rangle d^3r \\ \delta_{\alpha\beta} &= \int d^3r \langle \psi_{\beta}^* | \psi_{\alpha} \rangle \end{aligned}$$

بنابراین داریم:

$$i\hbar \frac{\partial C_{\beta}(t)}{\partial t} = \sum_{\alpha} C_{\alpha}(t) \mathbf{H}_{\beta\alpha} \quad (14-1)$$

رابطه (۱۴-۱) با در نظر گرفتن عناصر ماتریسی مر بوط به هامیلتونی تبدیل به دستگاه معادلات زیر

می شود:

$$i\hbar \frac{\partial C_1(t)}{\partial t} = E_1 C_1(t) + k C_2(t) \quad (15-1)$$

$$i\hbar \frac{\partial C_2(t)}{\partial t} = E_2 C_2(t) + k C_1(t) \quad (16-1)$$

در توضیح روابط فوق، ذکر این نکته ضروری است که  $|E_1|$  و  $|E_2|$  حالت‌های پایه انرژی‌های مختلف نشده سیستم، زمانی که  $k = 0$ ، می‌باشند. بنابراین طرف راست تساوی در معادلات فوق شامل دو قسمت است: قسمت اول که احتمال اینکه حالت سیستم بدون تغییر بماند را نشان می‌دهد و قسمت دوم احتمال اینکه حالت سیستم در اثر تبادل جفتهای کوپر تغییر کند را به دست می‌دهد. از طرفی این نکته نیز قابل یادآوری است که تفاوت بین  $E_1$  و  $E_2$  برابر با  $e^*V$  می‌باشد که در آن  $e^*$  بار ذرات تونل زننده (جفتهای کوپر) می‌باشد. در غیاب احتمال تبادل ذرات ( $k = 0$ ) نیز  $|E_1| = |E_2|$  برقرار است.

بنابراین:

$$E_1 - E_2 = e^*V$$

بنابراین خواهیم داشت:

$$E_1 = \frac{e^*V}{2}$$

$$E_2 = -\frac{e^*V}{2}$$

اکنون معادلات (۱۵-۱) و (۱۶-۱) تبدیل به معادلات زیر می‌شوند:

$$i\hbar \frac{\partial C_1(t)}{\partial t} = eV C_1(t) + k C_2(t) \quad (17-1)$$

$$i\hbar \frac{\partial C_2(t)}{\partial t} = -eV C_2(t) + k C_1(t) \quad (18-1)$$

در معادلات بالا با در نظر گرفتن ضرایب توابع موج به شکل زیر:

$$C_1 = (n_s)^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_1}$$

$$C_2 = (n_s)^{\frac{1}{2}} e^{i\theta_2}$$

که در آنها ضرایب  $C_1$  و  $C_2$  به گونه ای بهنجار شده‌اند که

$$|C_2|^2 = |C_1|^2 = n_s$$

لازم به ذکر است که فاز ضرایب و چگالی تعداد ذرات، تابعی از زمان هستند. بنابراین روابط (۱۷-۱) و

(۱۸-۱) منجر به روابط زیر می‌شوند:

$$\hbar \frac{\partial n_s}{\partial t} = 2kn_s \sin(\theta_2 - \theta_1) \quad (۱۹-۱)$$

$$\hbar \frac{\partial \theta_1}{\partial t} = -eV - k \cos(\theta_2 - \theta_1) \quad (۲۰-۱)$$

$$\hbar \frac{\partial \theta_2}{\partial t} = eV - k \cos(\theta_2 - \theta_1) \quad (۲۱-۱)$$

جريان ابررسانایی عبوری از سد به صورت  $\left( \frac{\partial n_s}{\partial t} \right) e^*$  است که می‌توان آنرا به شکل زیر نوشت:

$$I_s = I_c \sin \theta \quad (۲۲-۱)$$

در رابطه بالا  $\theta$  اختلاف فاز دو ابررسانا است و  $I_c$  جريان بحرانی شارش يافته است که به آن جريان

بحرانی<sup>۱</sup> جوزفسون گوييم و برابر است با:

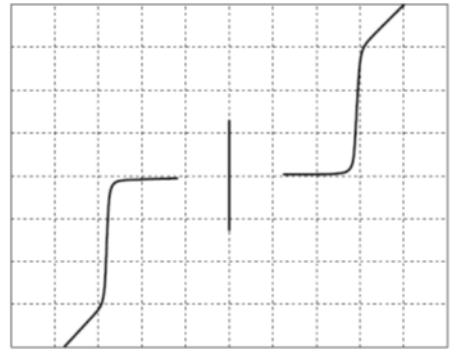
$$I_c = 2 \frac{e^* k n_s}{\hbar}$$

معادله (۲۲-۱) به اثر  $dC$  جوزفسون موسوم است. شکل (۱۱-۱) نمودار جريان ابررسانایي شارش يافته

از سد ميان دو ابررسانا را نشان مي‌دهد.

---

<sup>۱</sup>-critical current



شکل ۱۱-۱ - نمودار  $V$  - امربوط به اتصال جوزفسون

روابط (۲۰-۱) و (۲۱-۱) منجر به رابطه زیر می‌شوند که اثر  $aC$  جوزفسون نامیده می‌شود. اگر اختلاف ولتاژ بین دو ابررسانا وجود داشته باشد، اختلاف فاز با زمان زیاد خواهد شد.

$$\hbar \frac{\partial \theta}{\partial t} = 2eV$$

اثرات  $aC$  و  $dC$  جوزفسون بروز طبیعت کوانتمی در ابررسانا هستند. وسایل زیادی وجود دارند که با به کارگیری اثرات جوزفسون برای مشاهدات و کاربردهای خواص کوانتمی ابررساناهای مورد استفاده قرار می‌گیرند. در این پایان نامه نیز ما با استفاده از تک مولکول مغناطیسی در اتصال جوزفسون به مطالعه جریان عبوری از این اتصال و تغییرات جریان به واسطه حضور تک مولکول مغناطیسی می‌پردازیم [۱۲].

## ۷-۱- جریان جوزفسون بر اساس مدل هامیلتونی تونلی

جریان، حاصل حرکت ذرات باردار است. به عبارت دیگر جریان بار متناسب با آهنگ زمانی تغییر تعداد ذرات می‌باشد. از مکانیک کوانتمی می‌دانیم که تعداد ذرات در حالت براساس عملگرهای خلق<sup>۱</sup> و فنا<sup>۱</sup> به صور تزیر است:

$$N_\alpha = C_\alpha^\dagger C_\alpha$$

بنابراین عملگر تعداد ذرات در ابررسانای سمت چپ عبارت است از:

$$N_L = \sum_{p,\sigma} C_{p\sigma}^\dagger C_{p\sigma}$$

در این عبارت  $p$  و  $\sigma$  به ترتیب نشان دهنده تکانه و اسپین ذرات می‌باشند. واضح است که جریان هنگامی در پیوندگاه برقرار می‌شود که آهنگ زمانی ذرات تونل زننده از سمت چپ به سمت راست با آهنگ زمانی ذراتی که در جهت معکوس تونل می‌زنند متفاوت باشد.

هامیلتونی کل سیستم عبارت است از

$$H_{tot} = H_R + H_L + H_T = H' + H_T$$

در این عبارت  $H_R$  و  $H_L$  به ترتیب هامیلتونی‌های ذرات در ابررساناهای راست و چپ اتصال تونلی هستند و تمامی برهمنکنش‌های بس ذره‌ای را شامل می‌شوند. فرض می‌شود که این دو هامیلتونی کاملاً از یکدیگر مستقل هستند و نه تنها با هم جابجا می‌شوند بلکه تمامی جملات آنها نیز با یکدیگر جابجا می‌شوند. در مورد اتصال‌های تونلی این فرض کاملاً معقول به نظر می‌رسد. تونل زنی ذرات از اتصال توسط جمله  $H_T$  توصیف می‌شود<sup>[۴]</sup>.

$$H_T = \sum_{k,p} [T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} + h.c.] \quad (۲۳-۱)$$

در اینجا  $T_{kp}$  عناصر ماتریس تونل زنی<sup>۱</sup> ذرات از ابررسانای سمت چپ به ابررسانای سمت راست را نشان می‌دهد. فرض می‌کنیم که این دامنه عبور<sup>۲</sup> صرفاً به تکانه ذرات در دو سمت اتصال وابسته بوده و از اسپین آنها مستقل باشد. بنابراین می‌توان نوشت:

$$\dot{N}_L = \frac{dN_L}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, N_L] = i[H_T, N_L]$$

<sup>1</sup>-annihilation

<sup>2</sup>- Tunneling matrix element

<sup>3</sup>- Transmission amplitude

$$\begin{aligned}\dot{N}_L &= i \left[ \sum_{k,p} [T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} + T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma}], \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} \right] \\ \dot{N}_L &= i \left( \sum_{k,p} T_{kp} \sum_{p'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} - \sum_{kp} T_{kp} \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} \right) \\ &\quad + i \left( \sum_{k,p} T_{kp}^* \sum_{p'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} - \sum_{kp} T_{kp}^* \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \right)\end{aligned}$$

با دانستن اینکه برای عملگرهای فرمیونی فرضی  $C_\beta^\dagger = \delta_{\alpha\beta} - C_\beta^\dagger C_\alpha$  داریم :

آنگاه عبارت مربوط به آهنگ تغییرات به شکل زیر در خواهد آمد.

این نکته نیز لازم به ذکر است که در تمامی محاسبات بعدی مقدار  $\hbar$  را برابر واحد فرض می‌کنیم. و

منظور از e اندازه بار الکترون است.

$$\begin{aligned}\dot{N}_L &= i \left[ \sum_{k,p} T_{kp} \sum_{p'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger (\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{pp'} - C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p\sigma}) C_{p'\sigma'} - \sum_{kp} T_{kp} \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k,p} T_{kp}^* \sum_{p'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{k,p} T_{kp}^* \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger (\delta_{\sigma\sigma'} \delta_{pp'} - C_{p\sigma}^\dagger C_{p'\sigma'}) C_{k\sigma} \right]\end{aligned}$$

بادر نظر گرفتن وجود دلتای کرونکر در عبارات بالابه رابطه زیر تبدیل می‌شود :

$$\begin{aligned}\dot{N}_L &= i \left[ \sum_{k,p} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - \sum_{kp} T_{kp} \sum_{p'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p\sigma} C_{p'\sigma'} - \sum_{kp} T_{kp} \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k,p} T_{kp}^* \sum_{p'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} + \sum_{k,p} T_{kp}^* \sum_{p'\sigma'} C_{p'\sigma'}^\dagger C_{p'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{p'\sigma'} C_{k\sigma} \right. \\ &\quad \left. - \sum_{kp} T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \right]\end{aligned}$$

مجموع جملات دوم و سوم عبارت فوق صفر می‌شود و به دلیل مشابهی مجموع جملات چهارم و پنجم

آن نیز، صفر خواهد شد. به عنوان نمونه دلیل صفر شدن جملات دوم و سوم را در زیر می‌آوریم.

$$\begin{aligned} C_{k\sigma}^{\dagger} C_{p'\sigma'}^{\dagger} C_{p\sigma} C_{p'\sigma'} &= -C_{p'\sigma'}^{\dagger} C_{k\sigma}^{\dagger} C_{p\sigma} C_{p'\sigma'} \\ &= C_{p'\sigma'}^{\dagger} C_{k\sigma}^{\dagger} C_{p'\sigma'} C_{p\sigma} = -C_{p'\sigma'}^{\dagger} C_{p'\sigma'} C_{k\sigma}^{\dagger} C_{p\sigma} \end{aligned}$$

بنابراین، آهنگ تغییرات زمانی تعداد ذرات برابر می‌شود با :

$$\dot{N}_L = i \sum_{kp} [T_{kp} C_{k\sigma}^{\dagger} C_{p\sigma} - T_{kp}^* C_{p\sigma}^{\dagger} C_{k\sigma}] \quad (24-1)$$

جريان کل عبوری از اتصال به صورت متوسط این عملگر تعریف می‌شود:

$$I = -e \langle \dot{N}_L \rangle$$

برای محاسبه این متوسط از بسط اختلالی بر حسب  $H_T$  در تصویر برهمکنش<sup>۱</sup> استفاده می‌کنیم [۴].

نتیجه به صورت زیر است

$$I(t) = -ie \int_{-\infty}^t dt' \langle [\dot{N}(t), H_T(t')] \rangle$$

در تصویر برهم کنش، وابستگی زمانی هامیلتونی تونلی و آهنگ تغییر تعداد ذرات با هامیلتونی  $H'$

داده می‌شود:

$$H_T(t') = e^{iH't'} H_T e^{-iH't'}$$

$$\dot{N}_L(t) = e^{iH't} \dot{N}_L e^{-iH't}$$

برای اینکه انرژی را نسبت به پتانسیل‌های شیمیایی متفاوت در دو سمت اتصال بسنجیم، پارامترهای

زیر را تعریف می‌کنیم:

$$\begin{cases} k_R = H_R - \mu_R N_R \\ k_L = H_L - \mu_L N_L \end{cases}$$

که در رابطه فوق  $\mu_R$  و  $\mu_L$  پتانسیل‌های شیمیایی ابررساناهای راست و چپ می‌باشند. برای ابررسانای

سمت راست داریم:

---

<sup>1</sup>- interaction representation

$$H_R = \sum_k \epsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$k_R = \sum_k \epsilon_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma}$$

$$\epsilon_k = \epsilon_k - \mu_k$$

برای ابررسانا سمت چپ، با تعویض  $k$  با  $p$  همین عبارات صادق است [۴ و ۵]. بنابراین داریم:

$$\begin{aligned} H' &= (k_R + \mu_R N_R + K_L + \mu_L N_L) \\ &= (k' + \mu_R N_R + \mu_L N_L) \end{aligned}$$

که در آن  $k' = k_R + k_L$  است. بنابراین:

$$\begin{aligned} H_T(t') &= e^{(k' + \mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} H_T e^{-(k' + \mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} \\ &= e^{k't'} e^{(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} H_T e^{-k't'} e^{-(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} \end{aligned} \quad (25-1)$$

با استفاده از قضیه بیکر- هاسدورف<sup>۱</sup> داریم:

$$\begin{aligned} e^{(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} H_T e^{-(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} &= \\ &= H_T + [(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t', H_T] + \frac{1}{2} [(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t', [(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t', H_T]] + \dots \end{aligned}$$

هر یک از جابجاگرها را جداگانه محاسبه می‌نماییم:

$$\begin{aligned} [N_R, H_T] &= \sum_{kp} T_{kp} \sum_{k'\sigma'} C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - \sum_{kp} T_{kp} \sum_{k'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k'\sigma'} \\ &+ \sum_{kp} T_{kp}^* \sum_{k'\sigma'} C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} - \sum_{kp} T_{kp}^* \sum_{k'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k'\sigma'} \end{aligned}$$

با در نظر گرفتن روابط جابجایی بین عملگرهای فرمیونی و ظهور دلتای کرونکر خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} [N_R, H_T] &= \sum_{kp} T_{kp} \sum_{k'\sigma'} C_{k'\sigma'}^\dagger (\delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} - C_{k\sigma}^\dagger C_{k'\sigma'}) C_{p\sigma} - \sum_{kp} T_{kp} \sum_{k'\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k'\sigma'} \\ &+ \sum_{kp} T_{kp}^* \sum_{k'\sigma'} C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} - \sum_{kp} T_{kp}^* \sum_{k'\sigma'} C_{p\sigma}^\dagger (\delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} - C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k\sigma}) C_{k'\sigma'} \end{aligned}$$

<sup>1</sup>-Baker-Hausdorf theorem

نهایتاً رابطه جابجایی فوق به شکل زیر در می آید:

$$[N_R, H_T] = \sum_{kp\sigma} (T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma})$$

بنابراین داریم:

$$[t' \mu_R N_R, H_T] = t' \mu_R \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \quad (26-1)$$

از طرفی مشخص است که جابجاگر  $[t' \mu_L N_L, H_T]$  فقط در یک رابطه منفی با عبارت بالا تفاوت دارد.

$$[t' \mu_L N_L, H_T] = -t' \mu_L \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \quad (27-1)$$

حال جملات بعدی بسط بیکر-هازدورف را به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} [t' \mu_R N_R, [t' \mu_R N_R, H_T]] &= (t' \mu_R)^2 [N_R, [N_R, H_T]] \\ &= (t' \mu_R)^2 \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \end{aligned} \quad (28-1)$$

همچنین داریم

$$\begin{aligned} [t' \mu_L N_L, [t' \mu_L N_L, H_T]] &= -(t' \mu_L)^2 [N_L, [N_L, H_T]] \\ &= -(t' \mu_L)^2 \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} - T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \end{aligned} \quad (29-1)$$

حال نوبت به مرتب کردن جملات به دست آمده می‌رسد. با جمع جملات (26-1) تا (29-1) می‌توان

جملات بسط را به شکل زیر به دست آورد:

$$e^{(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} H_T e^{-(\mu_R N_R + \mu_L N_L)t'} =$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} \left( 1 + (\mu_R - \mu_L)t' + \frac{((\mu_R - \mu_L)t')^2}{2} + \dots \right) \\
& - \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} \left( 1 + (\mu_L - \mu_R)t' + \frac{((\mu_L - \mu_R)t')^2}{2} + \dots \right) \\
& = \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger C_{p\sigma} e^{(\mu_R - \mu_L)t'} - \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger C_{k\sigma} e^{(\mu_L - \mu_R)t'}
\end{aligned}$$

حال با وارد کردن جملات نمایی شامل انرژی جنبشی و در نظر گرفتن روابط زیر

$$C_{p\sigma}(t) = e^{ik_L t} C_{p\sigma} e^{-ik_L t}, C_{k\sigma}(t) = e^{ik_R t} C_{k\sigma} e^{-ik_R t}$$

و  $\dot{N}_L(t)$  به صورت زیر در می‌آیند:

$$\begin{aligned}
\dot{N}_L(t) &= \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t) e^{i(\mu_R - \mu_L)t} - \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t) e^{i(\mu_L - \mu_R)t} \\
H_T(t) &= \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t) e^{i(\mu_R - \mu_L)t} + \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger(t) C_{k\sigma}(t) e^{i(\mu_L - \mu_R)t}
\end{aligned}$$

بنابراین عبارت جریان به صورت زیر در می‌آید

$$\begin{aligned}
I(t) &= -e \int_{-\infty}^t dt' \langle \left[ \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t) e^{i(\mu_R - \mu_L)t} - \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t) e^{i(\mu_L - \mu_R)t} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t) e^{i(\mu_R - \mu_L)t} + \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger(t) C_{k\sigma}(t) e^{i(\mu_L - \mu_R)t} \right] \rangle
\end{aligned}$$

با در نظر گرفتن عملگر  $A(t)$  به شکل زیر:

$$A(t) = \sum_{kp\sigma} T_{kp} C_{k\sigma}^\dagger(t) C_{p\sigma}(t)$$

$$A^\dagger(t) = \sum_{kp\sigma} T_{kp}^* C_{p\sigma}^\dagger(t) C_{k\sigma}(t)$$

و با توجه به اینکه  $\mu_R - \mu_L = eV$ ، برابر با اختلاف پتانسیل اعمالی است خواهیم داشت:

$$I(t) = -e \int_{-\infty}^t dt' \langle [A(t)e^{i(\mu_R - \mu_L)t} - A^\dagger(t)e^{i(\mu_L - \mu_R)t}, A(t')e^{i(\mu_R - \mu_L)t'} + A^\dagger(t')e^{i(\mu_L - \mu_R)t'}] \rangle \quad (30-1)$$

اگر رابطه بالا را باز نویسی کنیم، بدین صورت که با انتخاب بازه انتگرال گیری از  $-\infty$  تا  $\infty$  وارد

نمودن تابع پله ای  $\theta$  رابطه جریان به شکل زیر می شود:

$$I(t) = -e \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \theta(t-t') \langle [A(t)e^{-ieVt} - A^\dagger(t)e^{ieVt}, A(t')e^{-ieVt'} + A^\dagger(t')e^{ieVt'}] \rangle$$

که رابطه جابجاگر مربوط به جریان به صورت زیر است [۴۵].

$$[A(t), A(t')]e^{-ieVt}e^{-ieVt'} + [A^\dagger(t'), A^\dagger(t)]e^{ieVt}e^{ieVt'} \\ + [A(t), A^\dagger(t')]e^{-ieVt}e^{ieVt'} + [A(t'), A^\dagger(t)]e^{ieVt}e^{-ieVt'}$$

$$[A(t), A(t')]e^{-ieV(t+t')} + h.c. + [A(t), A^\dagger(t')]e^{-ieV(t-t')} + h.c.$$

با استفاده از این رابطه جریان کلی برابر است با:

$$I(t) = -e \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \theta(t-t') \langle [A(t), A(t')]e^{-ieV(t+t')} + h.c. \rangle \\ - e \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \theta(t-t') \langle [A(t), A^\dagger(t')]e^{-ieV(t-t')} + h.c. \rangle \quad (31-1)$$

$$I(t) = I_J(t) + I_S(t)$$

$$I_J(t) = -e \int_{-\infty}^t dt' \{ e^{-ieV(t'+t)} \langle [A(t), A(t')] \rangle \\ - e^{ieV(t+t')} \langle [A^\dagger(t), A^\dagger(t')] \rangle \} \quad (32-1)$$

$$I_S(t) = -e \int_{-\infty}^t dt' \{ e^{ieV(t'-t)} \langle [A(t), A^\dagger(t')] \rangle - e^{ieV(t-t')} \langle [A^\dagger(t), A(t')] \rangle \} \quad (33-1)$$

همانگونه که از رابطه فوق می‌بینیم جریان شامل دو بخش است. بخش نخست جریان ابررسانایی (جوزفسون) است و بخش دوم نیز شامل جریان نرمال است.

جمله  $I_S$  جریان مربوط به تونل زنی تک ذرات را نشان می‌دهد و در غیاب اختلاف پتانسیل اعمالی به اتصال برابر صفر است. جمله دیگر  $I_I$  جریان متناظر با تونل زنی جفت‌های کوپر یا جریان جوزفسون را توصیف می‌کند.

## ۱-۸-۱- محاسبه جریان جوزفسون در حضور دو ابررسانا:

در این قسمت می‌خواهیم با استفاده از روابط فصل دوم، جریان‌جوزفسون عبوری از اتصال‌دو ابررسانا مورد نظر را به دست آوریم. با توجه به رابطه (۳۳-۱) داریم:

$$I_J(t) = -e \int_{-\infty}^t dt' \{ e^{-ieV(t'+t)} \langle [A(t), A(t')] \rangle - e^{ieV(t+t')} \langle [A^\dagger(t), A^\dagger(t')] \rangle \}$$

با تعریف عملگرهای  $A^\dagger$  و  $A$  خواهیم داشت [۴]:

$$A(t) = \sum_{kp\sigma\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger(t) T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) C_{p\sigma'}(t)$$

$$A^\dagger(t') = \sum_{k'p'\rho\rho'} C_{p'\rho'}^\dagger(t') T_{k'p'}^{*\rho'\rho}(t') C_{k'\rho}(t')$$

با تعریف پتانسیل تاخیری به فرم زیر:

$$\Phi_{ret}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [A(t), A(t')] \rangle \quad (34-1)$$

طبق تعریف:

$$\Phi_{ret}(eV) = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi_{ret}(t - t') e^{-ieV(t' - t)} dt$$

بنابر این جریان به شکل زیر خواهد بود:

$$I_J(t) = -ie[e^{-2ieVt}\Phi_{ret}(eV) - e^{2ieVt}\Phi_{adv}(eV)]$$

$$I_J(t) = 2eIm[e^{-2ieVt}\Phi_{ret}(eV)] \quad (35-1)$$

حال به تصویر ماتسوبارا می‌رویم و رابطه جریان را محاسبه می‌نماییم:

$$\begin{aligned} \Phi(i\omega) &= - \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau A(\tau) A(0) \rangle \\ &= - \sum_{kp\sigma} \sum_{k'p'\sigma'} T_{kp} T_{k'p'} \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p\sigma'}(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) C_{p'\rho'}(0) \rangle \end{aligned}$$

با استفاده از قضیه ویک:

$$\begin{aligned} \Phi(i\omega) &= - \sum_{kp\sigma} \sum_{k'p'\sigma'} T_{kp} T_{k'p'} \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p\sigma'}(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{k'\rho}^\dagger(0) C_{p'\rho'}(0) \rangle \\ &\quad - \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p'\rho'}(0) \rangle \\ &\quad - \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p'\rho'}(0) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) \rangle \end{aligned}$$

با توجه به اینکه در سیستم تونل زنی، ابرساناهای مستقل از یکدیگر می‌باشند، الکترونهای ابرساناهای سمت راست و سمت چپ همبسته نیستند و بنابراین تشکیل توابع همبسته نمی‌دهند. از اینرو انتگرال-

های اول و سوم برابر صفر خواهند شد [۴۵ و ۴۶].

باتوضیحات فوق و همچنین تاثیر دلتاهای کرونکر ( $\delta_{k,-k}$ ,  $\delta_{p,-p}$ ,  $\delta_{\sigma,-\sigma}$  و  $\delta_{\rho,-\rho}$ ) و با در نظر

گرفتن جهتگیری اسپین الکترونهای اسپینی، فرم ماتسوبارای پتانسیل به شکل زیر خواهد

شد:

$$\Phi(i\omega) = \sum_{kp\sigma} T_{kp} T_{-k,-p} \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{-k,-\sigma}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{-p,-\rho}(0) C_{p,\rho}(\tau) \rangle$$

$$\Phi(i\omega) = 2 \sum_{kp\sigma} T_{kp} T_{-k,-p} \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\uparrow}^\dagger(\tau) C_{-k,\downarrow}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{-p,\downarrow}(0) C_{p,\uparrow}(\tau) \rangle$$

با توجه به تعریف توابع گرین ابررسانایی در پیوست ، فرم ماتسوبارای پتانسیل به شکل زیر در می آید:

$$\Phi(i\omega) = 2 \sum_{kp\sigma} T_{kp} T_{-k,-p} \int_0^\beta e^{i\omega_n \tau} \mathcal{F}_R^\dagger(k, \tau) \mathcal{F}_L(p, -\tau) dt \quad (36-1)$$

با استفاده از تبدیل فوریه:

$$\Phi(i\omega) = 2 \sum_{kp\sigma} T_{kp} T_{-k,-p} \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \mathcal{F}_R^\dagger(k, iq) \mathcal{F}_L(p, iq - i\omega) \quad (37-1)$$

با در نظر گرفتن روابط فصل دهم ماهان، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \mathcal{F}_R^\dagger(k, iq) \mathcal{F}_L(p, iq - i\omega) &= \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \left( \frac{-\Delta_R}{2E_k} \right) \left( \frac{1}{iq - E_k} - \frac{1}{iq + E_k} \right) \left( \frac{-\Delta_L}{2E_p} \right) \left( \frac{1}{iq - i\omega_n - E_p} - \frac{1}{iq - i\omega_n + E_p} \right) \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \left( \frac{\Delta_L \Delta_R}{4E_k} \right) \left\{ \left( \frac{1}{iq - E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n - E_p} - \frac{1}{iq - E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n + E_p} \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{1}{iq + E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n + E_p} - \frac{1}{iq + E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n + E_p} \right) \right\} \end{aligned}$$

هریک از جملات داخل کروشه را بر حسب اعداد اشغال می نویسیم. از روش انتگرال پربند برای هر

عبارت استفاده می کیم [۴]. جملات چهار گانه برابر است با:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{1}{iq - E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n - E_p} = \frac{n_f(E_k) - n_f(E_p)}{E_k - E_p - i\omega_n}$$

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{1}{iq - E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n + E_p} = \frac{1 - n_f(E_k) - n_f(E_p)}{E_k + E_p - i\omega_n}$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{1}{iq + E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n + E_p} = \frac{n_f(E_k) - n_f(E_p)}{E_k - E_p + i\omega_n}$$

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{1}{iq + E_k} \frac{1}{iq - i\omega_n - E_p} = \frac{1 - n_f(E_k) - n_f(E_p)}{E_k + E_p + i\omega_n}$$

جملات چهار گانه فوق را مرتب می‌نماییم:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \mathcal{F}_R^\dagger(k, iq) \mathcal{F}_L(p, iq - i\omega) &= \\ &= \left( \frac{\Delta_L \Delta_R}{4E_k} \right) [1 - n_f(E_k) - n_f(E_p)] \left( \frac{1}{E_k + E_p + i\omega_n} - \frac{1}{i\omega_n - E_k - E_p} \right) + \\ &\quad + \left( \frac{\Delta_L \Delta_R}{4E_k} \right) [n_f(E_p) - n_f(E_k)] \left( \frac{1}{E_p - E_k + i\omega_n} - \frac{1}{+E_k - E_p - i\omega_n} \right) \end{aligned}$$

پتانسیل ماتسوبارای فوق را باید به پتانسیل تاخیری تبدیل کنیم. ابرساناها را یکسان در نظر می-

گیریم و با توجه به اینکه در دمای صفر مطلق عدد اشغال گرمایی برابر صفر می‌شود، پتانسیل تاخیری به

صورت زیر می‌شود:

$$\Phi_{ret}(eV) = \sum_{kp\sigma} T_{kp} T_{-k,-p} \frac{\Delta^2}{2E_k E_p} \left( \frac{1}{E_k + E_p + eV} - \frac{1}{eV - E_k - E_p} \right) \quad (38-1)$$

در اینجا  $T_{-k,-p} T_{kp}$  حقیقی نیست. بنابر این می‌توان آن را به صورت حاصل‌ضرب یک دامنه به

شكل  $|T|^2$  او جمله‌هایی به فرم  $e^{i\varphi}$  نوشت.

با در نظر گرفتن تبدیلات زیر:

$$\begin{aligned}
\sum_k &= N_R \int d\xi_R = N_R \int \rho(E_k) dE_k \\
\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_p v_p^2 f(E_p) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_p \left(1 - \frac{\xi_p}{E_p}\right) f(E_p) \\
&= \int_0^{+\infty} d\xi_p f(E_p) \\
&= \int_{\Delta_L}^{+\infty} dE_p \rho(E_p) f(E_p) \\
&\quad \text{که در آن } \frac{d\xi_p}{dE_p} \text{ برابر است با:}
\end{aligned}$$

از طرفی:

$$\rho(E_p) = \frac{E_p}{\sqrt{E_p^2 - \Delta^2}}$$

برای اختلاف پتانسیل‌های کوچک فقط الکترون‌هایی که انرژی آنها نزدیک انرژی فرمی است در تونل زنی شرکت می‌کنند. در این بازه کوچک انرژی می‌توان چگالی حالت‌ها را ثابت فرض کرده و همچنین از وابستگی دامنه‌های عبور به انرژی صرفنظر کرد و تنها مقدار آنها در انرژی فرمی را در نظر گرفت. در نهایت پتانسیل تاخیری به شکل زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned}
\Phi_{ret}(eV) &= \frac{1}{2} J_s(eV) e^{i\varphi} \\
J(eV) &= 4e\Delta^2 |T|^2 N_R N_L \int \frac{\rho(E')}{E'} dE' \int \frac{\rho(E)}{E} dE \left( \frac{1}{E_k + E_p + eV} - \frac{1}{eV - E_k - E_p} \right) \\
&= (4e\Delta^2 |T|^2 N_R N_L) K \left( \frac{eV}{2\Delta} \right)
\end{aligned} \tag{۳۹-۱}$$

البته رابطه فوق برای حالت  $2\Delta < |eV|$  صادق خواهد بود. حال با توجه به اینکه جریان را به صورت قسمت موهومی پتانسیل ماتسوبارا از رابطه (۳۵-۱) تعریف کرده‌ایم، بنابر این جریان به صورت کلی زیر در می‌آید.

$$I_J(t) = J(eV) \sin(2eVt + \varphi) \tag{۴۰-۱}$$

همان‌گونه که از رابطه (۱-۴۰) مشاهده می‌کنیم، جریان جوزفسون بر حسب زمان، نوسانی است و با فرکанс  $2eV$  نوسان می‌کند. دامنه نوسان نیز با ( $eV/J$ ) که تابعی از اختلاف پتانسیل است، مشخص می‌گردد. همان‌طور که می‌دانیم این جریان جوزفسون، همان جریان تونلی جفت‌های کوپر است که از ابررسانای سمت چپ به ابررسانای سمت راست برقار می‌گردد. در حضور اختلاف پتانسیل  $V$  که به عنوان سد پتانسیل در این اتصال عمل می‌کند، فرایند تونل زنی جفت‌های کوپر از نظر انرژی پایسته نیست و انرژی  $2eV$  برای اینکار لازم است. این انرژی توسط اعمال تابش الکترومغناطیسی به اتصال می‌تواند فراهم شود.

## فصل دوم

### تک مولکول مغناطیسی

❖ مقدمه

❖ معرفی تک مولکول مغناطیسی

❖ تونل زنی کوانتمی در تک مولکول مغناطیسی

❖ انواع تک مولکول مغناطیسی

❖ دلایل و ترجیحات استفاده از تک مولکول مغناطیسی

## ۱-۲- مقدمه

### مقدمه

در این فصل کوتاه به معرفی تک مولکول مغناطیسی و چگونگی سنتز این ماده آلی پرداخته می شود. انواع تک مولکول مغناطیسی بر حسب اسپین کل آنها دسته بندی شده و سپس خواص مغناطیسی هرگروه از این مواد را به اجمال بررسی می شود و کاربردهایی از تک مولکول نیز ارایه خواهد شد.

## ۲-۱- معرفی تک مولکول مغناطیسی

قبل از آغاز این مبحث، این نکته قابل ذکر است که فقط به معرفی و تشریح خواص تک مولکول مغناطیسی<sup>۱</sup> پرداخته می شود و از چگونگی واستخراج روابط حاکم بر این سیستم ها صرف نظر شده و یا نظری اجمالی بر این روابط خواهیم داشت.

امروزه تک مولکولهای مغناطیسی بیشترین توجهات را به سمت خود معطوف داشته اند. اسپین بزرگ آنها و رفتار کوانتمومی در مقیاسهای ریز دلالت بر حاکم بودن فیزیکی توانا در بین این ساختارهای نامعمول دارد، که برای مقاصد کاربردی آینده به کار می روند. این ساختارها پلی بین دنیای کلاسیکی که در آن هستیم و جهان کوانتمومی است. در این سیستمهای مقیاس ریز بسیاری از اثرات کوانتمومی، مانند تداخل فاز کوانتمومی<sup>۲</sup>، همدوسی<sup>۳</sup> و.... قابل مشاهده اند [۱۵۱۹].

اسپین بزرگ تک مولکول مغناطیسی کاربردهایی در زیست شناسی پزشکی ماند شکل تصویر در MRI یا تبادل یونی تصفیه پروتئین ها ارایه می دهد. اندازه کوچک تک مولکول مغناطیسی واژ حافظه

<sup>1</sup>-single molecule magnet

<sup>2</sup>-quantum phase interference

3-coherence

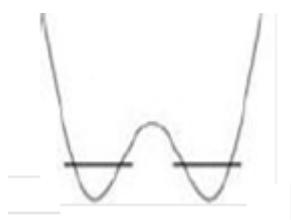
ذاتی آن، راههایی ممکن برای طراحی مدارات مجتمع الکترونیکی در ابعاد خیلی کوچک است. علاوه بر اینها، به سبب خواص متحیر کننده آنها در داشتن سیستم‌های درهم تنیده بسیار ذره ای، وقتی توانایی این موادر در از سرگیری در هم تنیدگی بواسطه طراحی خودبخودی مشاهده می‌کنیم، این نکته به ذهن خطور می‌کند که می‌توان از این ساختارها در محاسبات کوانتمومی بهره برد [۱۱].

علائق نظری مربوط به کار در این زمینه که رفتار کوانتمومی تک مولکول مغناطیسی را در آنسوی جهان کوانتمومی تشریح می‌نماید، عموماً معطوف به کاربرد مدل هایزنبرگ برای تمامی اسپینها در این ساختارها می‌باشد. اگر چه حل این مدل برای این سیستم‌های بسیار پیچیده است لیکن به کارگیری تقریب‌های ساده ساز، به بهبود حل مساله کمک می‌کند.

### ۲-۳- تونل زنی کوانتمومی در تک مولکول مغناطیسی

همانطور که از مبحث قبل می‌دانیم، تک مولکول مغناطیسی نقطه‌ای است که جهان کوانتمومی و جهان کلاسیک یکدیگر را ملاقات می‌کنند.

می‌دانیم که در مورد تونل زنی در سیستم ماکروسکوپیک، به دلیل اینکه بر همکنش بین حالتها نداریم، تونل زنی هم نداریم شکل (۱-۲).



شکل ۱-۲- طرح تونل زنی کلاسیکی

اما در مورد تونل زنی کوانتمویی :

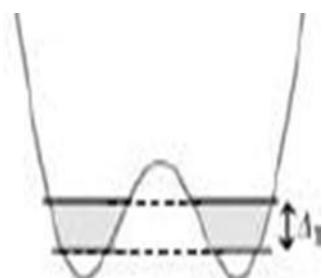
تابع موج در این مورد از یک دیواره دیواردیگرگسترش می‌یابد، تونل زنی رخ می‌دهد و در اثر همپوشانی توابع موج، تبھگنی از بین می‌رود و این پدیده منجر به شکافتگی تونلی می‌شود.

احتمال تونل زنی به موارد زیر بستگی دارد:

۱-شکافتگی ترازاها

۲-بلندی سد پتانسیل

هر چه نسبت ۱ به ۲ بزر گتر باشد احتمال مشاهده تونل زنی بیشتر است شکل (۲-۲).



شکل ۲-۲- نمایش تونل زنی کوانتمویی، ترازاها به اندازه  $\Delta_1$  شکافته شده اند

### ۲-۳-۱- هامیلتونی سیستمهای اسپینی بزرگرا چگونه بنویسیم؟

ابتدا این توضیح ضروری است که تک مولکول مغناطیسی دارای ساختار ناهمسانگرد<sup>۱</sup> می‌باشد بدین ترتیب که راستای یکی از محورهای سه گانه مختصات را (محور Z) به عنوان محور آسان<sup>۲</sup>(راستایی) که

<sup>1</sup>-anisotropic

<sup>2</sup>-easy-axis

مغناطیدگی در آن راستا صورت گیرد). در نظر می گیریم و دو محور دیگر را به عنوان محور سخت<sup>۱</sup> در نظر می گیریم [۱۵].

حال هامیلتونی برای چنین ساختارهای ناهمسانگردی به شرح زیر است:

$$H = H_0 + H'$$

که در آن  $H_0$  هامیلتونی مختل نشده است. و  $H'$  هامیلتونی اختلالی سیستم است که با  $S_z$  جابجا نمی شوند.

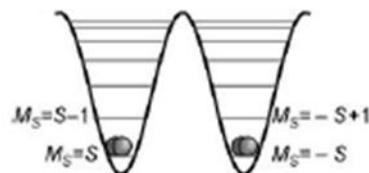
$$H_0 = -D[S_z^2 - \frac{S(S+1)}{3}] + g\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}$$

واضح است که هامیلتونی مختل نشده شامل دو قسمت است:

قسمت اول که ناشی از شکافتگی میدان کریستالی است و با پارامتر  $D$  که ناهمسانگردی محوری ساختار را در نظر می گیرد، نمایش داده می شود.

قسمت دوم نیز ناشی از حضور میدان مغناطیسی خارجی است.

برای قسمت اول وقتی که سیستم دارای اسپین  $S$  باشد، از مکانیک کوانتوم می دانیم که مقادیر  $m_S$  از  $-S$  تا  $S$  تغییر می کند. از طرفی همانطور که از تونل زنی کوانتومی می دانیم این حالات تبھگن به مانند شکل (۳-۲) آمده است، شکافته می شوند.

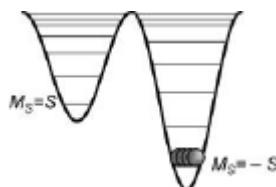


شکل ۳-۲- شکافته ترازها برای تک مولکولی با اسپین کل  $S$  [۱۵]

---

<sup>۱</sup>-hard-axis

اما برای قسمت دوم، میدان مغناطیسی خارجی سبب افزایش انرژی سیستم در جهت‌های خاص (محورهای آسان) شده و باعث می‌شود تا الکترونها از حالت با انرژی بالاتر به حالت با انرژی پایین ترتوونل بزنند (به نوعی سیستم را از حالت تعادل خارج می‌کنند. شکل (۴-۲)).



شکل ۴-۲- اعمال میدان سبب تونل زنی از ترازهای

بالاتر انرژی به ترازهای پایین تر شده و تعادل برهم می‌خورد [۱۵]

پس از اتفاقات ذکر شده در بالا، با پدیده بسیار جالبی روبرو خواهیم شد که همانا بازگشت سیستم به حالت تعادل است، که این پدیده را واهلش مغناطیسی<sup>۱</sup> می‌گوییم. سه راه برای رخداد واهلش مغناطیسی می‌تواند رخ دهد:

<sup>۲</sup>-واهلش گرمایی<sup>۲</sup>

<sup>۳</sup>-تونل زنی کمکی گرمایی<sup>۳</sup> (فونونی)

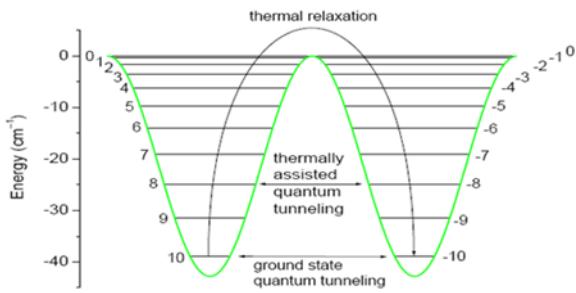
<sup>۴</sup>-تونل زنی کوانتمی حالت پایه

این سه فرآیند در شکل (۵-۲) نمایش داده شده است [۱۸].

<sup>1</sup>-magnetic relaxation

<sup>2</sup>-thermal relaxation

<sup>3</sup>-thermal assisted tunneling



شکل ۲-۵- نمایش واهلش مغناطیسی و عواملی که منجر به آن می شوند.

آنچه از شکل (۲-۵) واضح است، در میدان صفر و در غیاب اختلال، ویژه حالت‌های انرژی سیستم، حالت‌های خاص  $m_s$  هستند، پس تونل زنی ممکن نیست. برای تونل زنی پتانسیل اختلالی لازم است. از نقطه نظر فیزیکی، این اختلال ممکن است به اعوجاج<sup>۱</sup> در راستای صفحه (یعنی صفحه‌ای که شامل محور‌های سخت هستند). منجر شود که ناهمسانگردی اریب<sup>۲</sup> نامیده می شود [۱۹ و ۱۵]. یک رابطه مناسب برای این اختلال رابطه زیر است:

$$H' = E(S_x^2 - S_y^2)$$

حال هامیلتونی کل شکل زیر را می‌گیرد:

$$H = -D[S_z^2 - \frac{S(S+1)}{3}] + g\mu_B \vec{S} \cdot \vec{B} + E(S_x^2 - S_y^2)$$

فرض می کنیم که  $H_0$  بسیار کوچک باشد، وقتی که میدان خارجی  $m$  را محاسبه می کنیم می توانیم از آن صرف نظر کنیم. برای ساده سازی فرض می کنیم که میدان خارجی در جهت محورهای آسان اعمال شود، در انرژی که حالت  $S_z = n + m$  همزمان باشد، آنگاه برای حالت  $n$  با استفاده از شکل (۵-۳) خواهیم داشت.

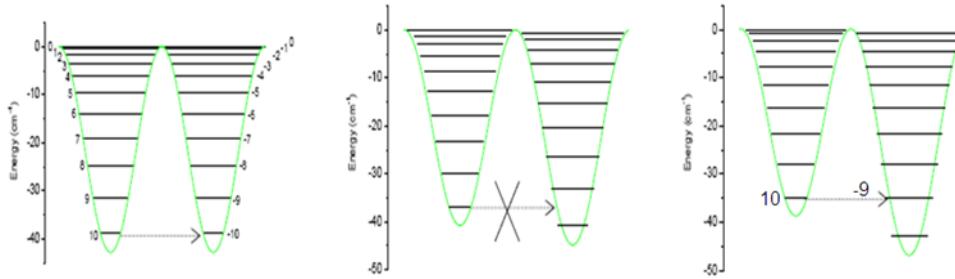
<sup>1</sup>-distortion

<sup>2</sup>-transverse anisotropy

$$B = -\frac{nD}{g\mu_B}$$

وقتی میدان مغناطیسی اعمال می شود، ترازهای انرژی اسپینی میکرو حالتها تغییر می کند.

این منجر می شود به تغییرات در میدان مغناطیسی به اندازه  $\frac{D}{g\mu_B}$  به ازای تغییرات در مغناطش به اندازه واحد. به این معنی که واهلش مغناطیسی متناظر با شیب جزی (پله) در حلقه هیسترزیس است. این تغییرات در مجموعه شکل‌های (۶-۲) بعد آمده است.



شکل ۶-۲- شکل سمت چپ در غیاب میدان اعمالی است

در شکل سمت وسط میدان اعمال شده، اماتونل زنی مجاز نیست

در شکل سمت راست تونل زنی مجاز شکل گرفته است [۱۹]

## ۴-۲- انواع تک مولکول مغناطیسی

تک مولکول های مغناطیسی با توجه به اینکه سیستم اسپینی اند عموماً به دو دسته تقسیم می شوند:

سیستمهای اسپینی با اسپین صحیح

۲- سیستمهای اسپینی با اسپین نیم- صحیح

اولین تک مولکول مغناطیسی با ترکیب شیمیایی زیر در سال ۱۹۸۳ سنتز شده است.



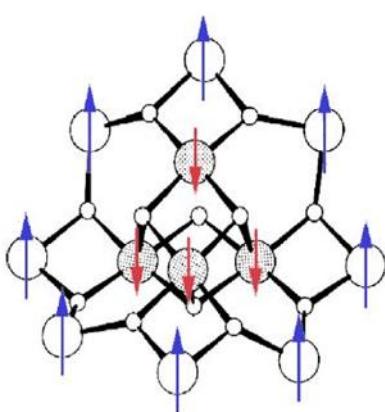
این تک مولکول مغناطیسی را به اختصار  $Mn_{12} - ac$  یا  $Mn_{12}$  نامیده می شود. و اهلش کوانتموی مغناطیسی با گرما برای اولین بار در اندازه گیری هیسترزیس این ساختار دیده شده است [۱۰].

از دیگر ساختارهای با اسپین صحیح تک مولکول مغناطیسی می توان از  $Fe_4$  و  $Fe_8$  نیز می توان نام

برد.

یک سؤال: این ساختارها آنتی فرو هستند یا فرو هستند؟

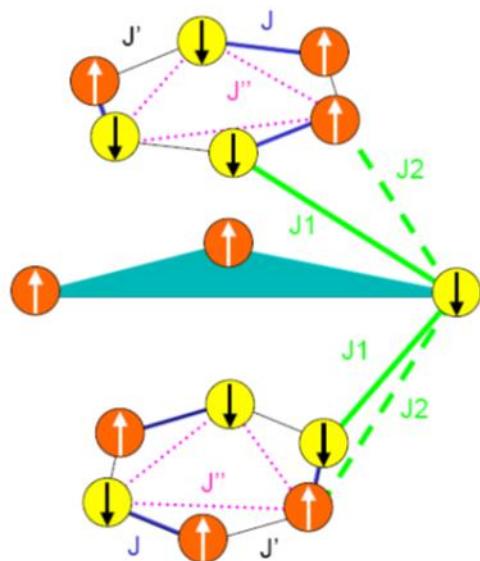
با توجه به شکل ها میتوان به سؤال فوق جواب داد.



شکل ۷-۲- طرحوارهای از  $Mn_{12}$

در شکل(۷-۲) ایزوتوپهای  $Mn$ (III) دارای اسپین رو به بالا با مقدار ۲ می باشند و ایزوتوپهای  $Mn$ (IV) دارای اسپین رو به پایین با مقدار  $3/2$  هستند. بنابراین اسپین کل سیستم برابر  $10$  است که به اصطلاح می گوییم که مرتبه آنتی فرو<sup>۱</sup> بودن آن  $10$  است[۱۹].

تا کنون نتایج نظریات و آزمایشات فقط برای اسپینهای صحیح  $2$  معرفی می شدند، اما خانواده بزرگ دیگری نیز وجوددارند که شامل سیستمهای با اسپین نیم- صحیح  $3$  می باشند. از این جمله می توان به  $V_{15}$  اشاره نمود که در شکل (۸-۲) آمده است.



شکل ۸-۲- طرح تک مولکول مربوط به  $V_{15}$  که شامل ساختار مثلثی است که بین دو ساختار شش گوشه ساندویچ شده است.

<sup>1</sup>-antiferro

<sup>2</sup>-integer-spin

<sup>3</sup>-1/2-spin

## ۲-۵- دلایل و ترجیحات استفاده از تک مولکول مغناطیسی

همانگونه که قبلاً هم اشاره کرده ایم؛ تک مولکول مغناطیسی دریچه‌ای جدید برای مطالعه پدیده‌های فیزیکی در سطح مشترک بین جهان کوانتم و جهان کلاسیکی است. به عبارتی این ساختار تاییدی بر این فرض است که در سیستمهای ماکروسکوپیک میتوان شاهد رفتار کوانتم مکانیکی بود. با توجه به واهش کوانتمی مغناطش که در مورد آن بحث شده است و خاصیت بازگشت به حالت در هم تنیدگی به صورت خود بخودی، میتوان از آنها در طراحی مدارات مجتمع با اهداف خاص نظامی و تحقیقات فضایی و... استفاده نمود. شایان ذکر است که شاید به دلیل همین اهمیت نظامی است که از زمان سنتز اولین تک مولکول مغناطیسی تا رونمایی علمی از آن نزدیک یک دهه وقفه افتاده است. همچنین، این ساختار‌ها قابلیت استفاده در عناصر حافظه‌ای و کامپیوتر‌های آینده را دارند.

به رغم تکنیک‌های موفقیت آمیزآزمایشگاهی، هنوز هم یک تئوری مرتب و بهبود یافته می‌تواند برای توجیه رفتار این ساختار ارایه شود.

## فصل سوم

### مروری بر کارهای انجام شده

#### ❖ مقدمه

- ❖ جریان جوزفسون در حضور اسپین با حرکت تقدیمی (۲۰۰۳)
- ❖ جریان جوزفسون در حضور اسپین با حرکت تقدیمی (۲۰۰۹)
- ❖ ترابرد بار و دینامیک مغناطش در اتصال ابررسانا- تک مولکول- ابررسانا (۲۰۱۰)

### ۱-۳- مقدمه

توجهات به بررسی ساختار و خواص الکتریکی و مغناطیسی تک مولکول مغناطیسی از زمان سنتز این ماده آغاز شد. در بعضی کارها، با قراردادن تک مولکول در پیوندگاه جوزفسون به بررسی و محاسبه جریان جوزفسون پرداخته می شود.

در کارهایی نیز با به کار بردن دوگونه مختلف ابررسانا در پیوندگاه جوزفسون به بررسی رسانش الکتریکی و تغییرات آن به صورت تابعی از فاز ابررسانا پرداخته شد.

آنچه که در این کارها به دیده اهمیت نگریسته می شود، حضور تک مولکول در پیوندگاه جوزفسون است. این ماده به عنوان اسپین کلاسیکی بزرگ در نظر گرفته می شود. با اعمال میدان مغناطیسی در راستایی خاص و تاثیر آن بر اسپین کلاسیکی به صورت حرکت تقدیمی در فضای بین دو ابررسانا، به محاسبه جریان وسایر کمیت های فیزیکی پرداخته می شود.

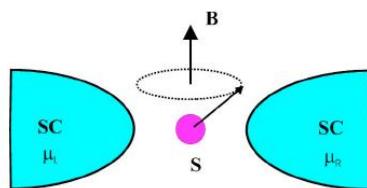
در این فصل به بررسی سه گزارش انجام گرفته در راستای کاری که قصد انجام آن را داریم، به اجمالی می پردازیم. به دلیل تازگی و نوبودن موضوع که قدمت آن به کمتر از یک دهه می رسد و این نکته که بعضی از کارها در راستای کار انجام شده در این گزارش نیستند، به تعداد محدودی از کارها اشاره شده است.

### ۲-۳- جریان جوزفسون در حضور اسپین با حرکت تقدیمی (۲۰۰۳)

ژو-جیان-خی و بلاتسکی در این کار جریان جوزفسون در حضور تک مولکول مغناطیسی در حال دوران، بین دو ابررسانا با پتانسیلهای شیمیایی متفاوت را بررسی کردند [۱۳]. در این کار نشان داده شده است که جریان جوزفسون جاری بین دو ابررسانای حالت اسپین یگانه (حالتی که الکترونهای زوجهای کوپر دارای اسپین مخالف باشند) در حضور تک مولکول در حال دوران، مدوله نمی شود. اما هنگامی که دو

ابررسانا در حالت اسپین سه‌گانه (حالتی که الکترونها زوجهای کوپر دارای اسپین همسان باشند) هستند، جریان جوزفسون مدوله می‌شود.

مدل در نظر گرفته شده به صورت شکل (۱-۳) است: که از دو ابررساناتشكیل شده است که به وسیله تک مولکول مغناطیسی جفت شده‌اند. در حضور میدان مغناطیسی خارجی، تک مولکول مغناطیسی شروع به دوران حول جهت میدان اعمالی می‌نماید.



شکل ۱-۳- طرحواره‌ای از جفت شدگی اسپین کلاسیکی بزرگ با ابررساناهای [۱۳]

از برهم‌کنش اسپین تک مولکول با ابررساناهای صرف نظر کرده و هامیلتونی به شکل زیر در می‌آید.

$$H = H_R + H_L + H_T$$

که در آن  $H_{RL}$  هامیلتونی لبه‌های ابررسانا و  $H_T$  هامیلتونی تونل زنی است. با به کار گرفتن عملگرهای خلق و فنا در سیستم‌های بس ذرهای به محاسبه جریان جوزفسون پرداخته شد. که در دو حالت بررسی شده است:

حالتی که ابررساناهای اتصال در حالت اسپینی یگانه‌اند.

حالتی که ابررساناهای اتصال در حالت اسپینی سه‌گانه‌اند.

به طور خلاصه می‌توان گفت که: جریان جوزفسون در حضور بر هم کنش تبادلی مستقیم بین اسپین جایگزیده (تک مولکول مغناطیسی) و الکترونها رسانش، برای ابررساناهایی که در حالت اسپینی یگانه

اند مدوله نمی‌شود . در صورتی که اگر یکی از ابررساناها در حالت اسپینی سه گانه باشد، جریان جوزفسون مدوله خواهد شد.

### ۳-۳- جریان جوزفسون در حضور اسپین با حرکت تقدیمی(۲۰۰۹)

در این کار ، مطالعه برروی جریان dc جوزفسون بین دو ابررسانا که یک اسپین کلاسیکی بزرگ بین آنها در حال حرکت تقدیمی است، توسط سسیلیا هولمکیوتس و همکارانش صورت گرفت [۱۴].

این حرکت تقدیمی منجر به ظهور پتانسیل تونلی وابسته به زمان می‌شود. این پتانسیل تونلی نه تنها سبب به وجود آمدن احتمالات تونل زنی مختلف برای اسپینهای بالا و پایین می‌شود، بلکه یک ترم اسپین فیلیپ وابسته به زمان را معرفی می‌کند.

در کار ذکر شده، فقط اثرات ترم اسپین- فیلیپ برروی جریان جوزفسون بین دو ابررسانا بررسی می- شود. ابررساناها نیز در حالت یگانه اسپینی می‌باشند.

سیستم را در حالتی پایا در نظر می‌گیریم و جریان به طور ذاتی تحت تاثیر فرکанс تقدیمی تک مولکول مغناطیسی است.

مدل ارایه شده برای این سیستم نیز به شکل زیر است:

$$H = H_R + H_L + H_T$$

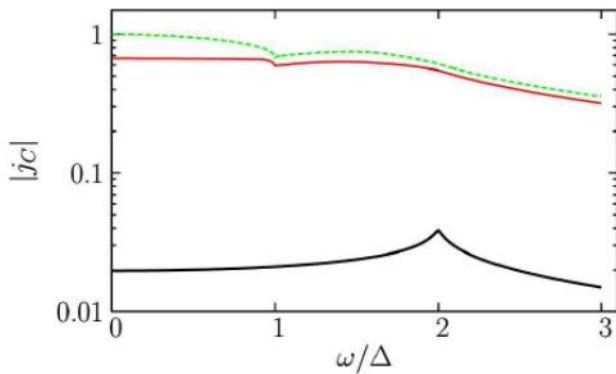
که در آن

$$H_T = \hat{\psi}_L^\dagger \hat{V}_{LR}(t) \hat{\psi}_R + h.c.$$

$$\hat{V}_{LR}(t) = \hat{V}_S \begin{pmatrix} \sigma_x e^{-i\omega t \sigma_z} & 0 \\ 0 & \sigma_x e^{i\omega t \sigma_z} \end{pmatrix}$$

در رابطه فوق  $\hat{V}_S$  دامنه تونل زنی است.  $(\hat{V}_{LR}(t))$  نیز، ماتریس تونل زنی است.

جريان بر حسب فرکанс به صورت شکل زیر است، که در آن چگالی جريان بحرانی بر حسب فرکانس تقدیمی رسم می‌گردد.



شکل ۲-۳-نمودار چگالی جريان بر حسب فرکانس تقدیمی تک مولکول مغناطیسی [۱۴]

در اين گزارش، تغييرات فاز که عامل اصلی ظهرور جريان جوزفسون است، به صورت تابعی از فرکانس حرکت تقدیمی است.

در شکل (۲-۳) جريان بحرانی بر حسب  $\frac{\omega}{\Delta}$  در سه مقدار مختلف برای  $\mathcal{V}_s^2$  رسم شده است. دو نمودار بالایی به ترتیب از بالا بازای  $\mathcal{V}_s^2 = 0.5$  و  $\mathcal{V}_s^2 = 0.1$  رسم شده اند، در  $\omega = \Delta$  دارای پیک هستند. اما نمودار سوم که بازای  $\mathcal{V}_s^2 = 0.01$  رسم شده است. در  $2\Delta = \omega$  دارای پیک است. بدین معنی که در حالی

که احتمال تونل زنی پایین باشد، جریان در  $2\Delta = \omega$  واگرا می‌شود. این واگرایی به دلیل ایجاد تشدید در اتصال جوزفسون رخ می‌دهد.

### ۳-۴- ترابرد بار و دینامیک مغناطش در اتصال ابررسانا- تک مولکول-

#### (ابررسانا ۲۰۱۰)

در این کار نیز که به وسیله سوفیان تبر و گروهش انجام شد، به مطالعه ترابرد  $dc$  و دینامیک مغناطش در یک اتصال جوزفسون در حضور تک مولکول پرداخته شده است [۱۶]. ابررساناهای در این اتصال در حالت اسپینیگانه اند و تک مولکول مغناطیسی نیز، به صورت اسپین کلاسیکی بزرگ در نظر گرفته می‌شود که در فضا با فرکانس  $\Omega$  حرکت تقدیمی می‌کند.

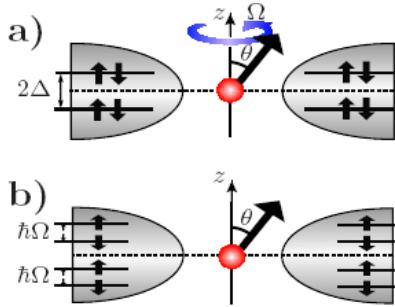
حضور اسپین کلاسیکی بزرگ منجر به تفاوت در دامنه های تراگسیل اسپینهای بالا و پایین می‌شود. همچنین پدیده اسپین فیلیپ وابسته زمانی نیز خواهیم داشت.

در این کار، علاوه بر جریان بار، به بررسی جریان اسپینی نیز پرداخته شده است که در این رساله به آن پرداخته نمی‌شود.

جریان بار و اسپین را در حالت های مختلف در حضور فرکانس تقدیمی محاسبه شده و اختلاف این جریان نسبت به جریان جوزفسون  $dc$  معمولی بررسی گردید.

در این کار نیز مانند کارهای قبلی، عامل دوران تقدیمی در فضا، میدان مغناطیسی خارجی در نظر گرفته شده است.

تأثیر میدان بر تک مولکول مغناطیسی به صورت شکل زیر نمایش داده می‌شود.



شکل ۳-۳- در حالت a در چارچوب مرجع آزمایشگاه اسپین کلاسیکی با فرکانس  $\Omega$  در حال دوران است.

در حالت b در چارچوب مرجع چرخان، ناظر واقع بر تک مولکول شاهد شکافتگی ترازها در ابرساناها

به میزان  $\frac{\Omega}{2}$ ، که ناشی از حضور میدان  $h_z$  است، مشاهده می‌کند [۱۶].

در شکل (۳-۳) فرض بر این است که تاثیر فرکانس تقدیمی بر ترازهای انرژی ابرساناها به صورت شکافتگی در ترازهای انرژی ابرساناها ظاهر می‌گردد. شکافتگی در ترازها سبب می‌شود که هر الکترون در ترازی که به اندازه  $\frac{\Omega\hbar}{2}$  صعود یا نزول کرده است، جای بگیرد. الکترون‌های تونل زننده در اتصال ، یا به صورت تک الکترون اند یا به صورت جفت‌های کوپرمی باشند. بنابراین جریان شامل مجموع جریان نرمال و جریان جوزفسون است. اندرکنش این الکترونها یا جفت‌های کوپر در مواجهه با تک مولکول (که به صورت اسپین کلاسیکی بزرگ در نظر گرفته شده است) با ماتریس عبور زیرتعریف می‌شود.

$$T(t) = T_0 I_2 + T_1 \vec{S}(t) \cdot \vec{\sigma}$$

که در آن  $I_2$  ماتریس یکانی است و  $\vec{S}(t)$  بردار اسپین تک مولکول است و  $\vec{\sigma}$  بردار ماتریس‌های پائولی است. از رابطه فوق مشخص است که ذره ممکن است بدون اندرکنش با اسپین تک مولکول که با دامنه

عبور  $T_0$  مشخص شده است، در اتصال تونل بزند. ویا اینکه ذره در اندرکنش با اسپین تک مولکول که با دامنه  $T_1$  مشخص شده است در اتصال تونل می‌زند.

با استفاده از توابع گرین ابرسانایی و همچنین در نظر گرفتن این نکته که در غیاب اختلاف پتانسیل جریان نرمال برابر صفر است، جریان جوزفسون در این کار به صورت زیر حاصل شده است:

$$I_G^c = 4e((T_0^2 - T_{\parallel}^2)Re\mathcal{D}^R(0) - T_{\perp}^2 Re\mathcal{D}^R(\Omega))sin\varphi$$

$\mathcal{D}$  انتشارگر ابرسانایی است و به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\mathcal{D}(i\omega) = \sum_{k,p} \frac{1}{\beta} \sum_{i \in} \mathcal{F}_R^\dagger(k, i \in) \mathcal{F}_L(p, i \in -i\omega)$$

که  $\mathcal{F}$ تابع گرین ابرسانایی است که در پیوست(الف) تعریف شد.

و همچنین برای قسمت حقیقی انتشارگر، طبق تعریف زیر داریم:

$$Re\mathcal{D}^R(x) = \pi\Delta\nu_N^2 \begin{cases} K(x) & x < 1 \\ \frac{1}{x}K\left(\frac{1}{x}\right) & x > 1 \end{cases}$$

$K$  انتگرال بیضوی نوع اول است و  $x$  نیز برابر با  $\frac{\omega}{2\Delta}$  است.

مانند کار قبلی در این کار نیز واگرایی لگاریتمی در  $\Omega = 2\Delta$  رخ می‌دهد، یعنی در حالتی که گاف ابرسانایی برابر با فرکانس تقدیمی است. و این واگرایی به دلیل خصوصیت تابع انتگرال بیضوی نوع اول است که در مقدار یک، واگرا می‌شود.

## فصل چهارم

جريان بار در اتصال ابررسانا - تک مولکول مغناطیسی - ابررسانا

❖ مقدمه

❖ مدل اریه شده

❖ جريان نرمال در حضور اختلاف پتانسیل در اتصال ابررسانا - تک مولکول - ابررسانا

❖ جريان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل در اتصال ابررسانا - تک مولکول -

ابرسانا

## ۱-۴- مقدمه

با معرفی خواص ابرساناها و همچنین تک مولکول مغناطیسی در فصل های گذشته و آگاهی از روابط حاکم بر اتصال جوزفسون، در این فصل جریان عبوری از اتصال جوزفسون شامل تک مولکول مغناطیسی را محاسبه می نماییم.

ما جریان عبوری از اتصال ابرسانا-تک مولکول مغناطیسی- ابرسانا را به دلیل اهمیت ساختار تک مولکول مغناطیسی و موارد استفاده بسیار آن مورد مطالعه قرار می دهیم. جریان نرمال و همچنین جریان جوزفسون عبوری از اتصال را در حالتی که اختلاف پتانسیل جزیی  $V$  به اتصال اعمال می گردد و نیز در غیاب آن محاسبه می نماییم.

شایان ذکر است که برای ساده سازی، از افت و خیزهای کوانتمی صرف نظر کردہ‌ایم و تک مولکول مغناطیسی را به صورت یک بردار اسپین کلاسیکی بزرگ در نظر گرفته‌ایم. این بردار تحت تاثیر میدان مغناطیسی اعمالی، دو حرکت تقدیمی و نوسانی انجام می دهد که به آن رقص محوری جوزفسون<sup>۱</sup> می گویند.

## ۲-۴- مدل ارایه شده

همانطور که در فصل های قبل بیان شد، هامیلتونی یک اتصال جوزفسون به صورت زیر است:

$$H = H_R + H_L + H_T \quad (1-4)$$

که در آن  $H_R$  و  $H_L$  هامیلتونی ابرساناها راست و چپ می باشند که به صورت زیر نوشته می شوند.

---

<sup>1</sup>-Josephson nutation

$$H_0 = H_R + H_L = \sum_{k,\sigma} E_k C_{k\sigma}^\dagger C_{k\sigma} + \sum_{p,\sigma} E_p C_{p\sigma}^\dagger C_{p\sigma} \\ + \sum_k [\Delta_k C_{k,\uparrow}^\dagger C_{k,\downarrow} + h.c.] + \sum_p [\Delta_p C_{p,\uparrow}^\dagger C_{p,\downarrow} + h.c.] \quad (2-4)$$

در رابطه فوق، جمله اول انرژی شبه ذرات ابررسانا بر حسب عملگرهای خلق و فنای آنهاست. در جمله دوم نیز  $\Delta$  گاف انرژی ابررسانایی است که وابسته به دماس است.  $(C_{k\sigma})^\dagger$  عملگرهای خلق (فنای) ذره ای با اندازه حرکت  $k$  و اسپین  $\sigma$  در ابررسانای سمت راست و  $(C_{p\sigma})^\dagger$  عملگرهای خلق (فنای) ذره ای با اندازه حرکت  $p$  و اسپین  $\sigma$  در ابررسانای سمت چپ می‌باشند [۱۶].

برای اتصال ابررسانا- تک مولکول مغناطیسی- ابررسانا، هامیلتونی تونل زنی به فرم زیر است:

$$H_T = \sum_{k,p,\sigma,\sigma'} [C_{k,\sigma}^\dagger T_{\sigma,\sigma'} C_{p\sigma'} + h.c.] \quad (3-4)$$

که آرایه های ماتریس دامنه عبور می‌باشند و وابستگی زمانی آن به به شکل زیر است:

$$T(t) = T_0 I_2 + T_1 \vec{S}(t) \cdot \vec{\sigma} \quad (4-4)$$

$I_2$  ماتریس یکانی،  $\vec{S}$  بردار اسپین تک مولکول مغناطیسی و  $\vec{\sigma}$  بردار ماتریس‌های پائولی است.

همانگونه که از هامیلتونی تونل زنی واضح است: با توجه به دامنه عبور  $T$  ممکن است ذره ای در ابررسانای سمت راست، با تکانه  $k$  و اسپین  $\sigma$  خلق و در ابررسانای سمت چپ، با تکانه  $p$  و اسپین  $\sigma'$  فنا شود.

جمله اول رابطه (۴-۴) مربوط به تونل زنی مستقیم جفت‌های کوپر بدون برهمکنش بالا اسپین تک مولکول مغناطیسی است. در صورتی که جمله دوم برهمکنش اسپین الکترونهای عبوری با بردار اسپین موضعی تک مولکول مغناطیسی را نشان می‌دهد.

وابستگی زمانی اسپین تک مولکول مغناطیسی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\vec{S}(t) = S(\sin\theta(t)\cos\varphi(t), \sin\theta(t)\sin\varphi(t), \cos\theta(t)) \quad (5-4)$$

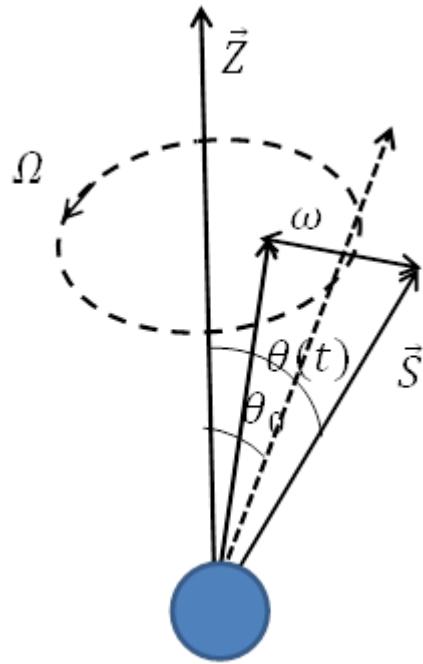
که  $\varphi(t)$  و  $\theta(t)$  به ترتیب زوایای سمتی و قطبی هستند. اینکه وابستگی  $\varphi(t)$  و  $\theta(t)$  به زمان چگونه است، به برهم کنش اسپین با میدان‌های مغناطیسی موجود از طرف محیط و از طرف الکترونهای عبوری از آن بستگی دارد.<sup>[۱۶]</sup>

در مقاله [۱۶] نویسندها اثرات جریان الکترون را بر روی دینامیک تک مولکول مغناطیسی مطالعه کرده‌اند. در این رساله هدف ما بررسی تاثیر دینامیک اسپین روی جریان عبوری است که به عمل متقابل<sup>۱</sup> معروف است.

بدین منظور فرض می‌کنیم که اسپین تک مولکول مغناطیسی همزمان حرکت تقدیمی و حرکت نوسانی داشته باشد. شکل(۱-۴) طرحواره ای از تلفیق این دو حرکت را نشان می‌دهد. با توجه به شکل(۱-۴)، فرض بر اینست که بردار اسپین کلاسیکی در اتصال بین دو ابرسانا، حرکت تقدیمی<sup>۲</sup> و حرکت نوسانی را تواما در فضا انجام می‌دهد.

---

<sup>1</sup>-back action  
<sup>2</sup>-precession



شکل ۱-۴- تک مولکول مغناطیسی که تحت تاثیر میدان مغناطیسی دور حرکت دورانی و نوسانی توام می باشد.

به منظور در نظر گرفتن حرکتهای چرخشی و نوسانی، زاویه  $\theta(t)$  را که بردار اسپین تک مولکول مغناطیسی در هر لحظه با میدان مغناطیسی اعمالی بر سیستم می سازد، به صورت زیر در نظر می گیریم:

$$\theta(t) = \theta_0 + R \cos \omega t$$

$$\theta(t) = \theta_0 \left(1 + \frac{R}{\theta_0} \cos \omega t\right)$$

فرض می کنیم که در رابطه بالا  $\frac{R}{\theta_0} \ll 1$  باشد.

### ۴-۳- جریان نرمال در حضور اختلاف پتانسیل:

برای محاسبه جریان نرمال مجدداً باید عملگرهای  $A(t)$  و  $A^\dagger(t')$  را بر حسب عملگرهای خلق و

فنا بنویسیم

$$A(t) = \sum_{kp\sigma\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger(t) T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) C_{p\sigma'}(t) = \sum_{kp\sigma\sigma'} T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) a_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \quad (6-4)$$

$$\begin{aligned} A^\dagger(t') &= \sum_{k'p'\rho\rho'} C_{p'\rho'}^\dagger(t') \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t') C_{k'\rho}(t') \\ &= \sum_{kp\sigma\sigma'} \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t') a_{k'p'}^{\dagger\rho\rho'}(t') \end{aligned} \quad (7-4)$$

بنابراین رابطه جریان به صورت زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} I_s(t) &= \\ -e \sum_{kp\sigma\sigma'} \sum_{k'p'\rho\rho'} &\int_{-\infty}^{\infty} dt' \Theta(t-t') \{ T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t') \langle [a_{kp}^{\sigma\sigma'}(t), a_{k'p'}^{\dagger\rho\rho'}(t')] \rangle e^{-ieV(t-t')} + h.c \} \\ \text{برای محاسبه جریان، پتانسیل تاخیری زیر را تعریف می‌کنیم:} \end{aligned}$$

$$\mathcal{U}_{kpk'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(t-t') = -i\Theta(t-t') \langle [a_{kp}^{\sigma\sigma'}(t), a_{k'p'}^{\dagger\rho\rho'}(t')] \rangle \quad (8-4)$$

با جایگذاری در رابطه جریان داریم:

$$I_s(t) = ie \sum_{kp\sigma\sigma'} \sum_{k'p'\rho\rho'} \int_{-\infty}^{\infty} dt' T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t') e^{-ieV(t-t')} \mathcal{U}_{kpk'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(t-t') \delta_{kk'} \delta_{pp'} \delta_{\sigma\rho} \delta_{\sigma'\rho'} \quad (9-4)$$

$$I_s(t) = ie \sum_{kp} \sum_{\sigma\sigma'} \int_{-\infty}^{\infty} dt' T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t') e^{-ieV(t-t')} \mathcal{U}_{kp}^{\sigma\sigma'}(t-t') + h.c. \quad (9-4)$$

به دلیل وجود دلتای کرونکر در رابطه صفحه قبل از حاصل ضرب  $T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t')$  که شامل

۱۶ جمله است، تنها جملات شامل  $T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t')$  باقی خواهند ماند.

حال می خواهیم  $T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t')$  را محاسبه کنیم. با توجه به اینکه  $R$  کوچک فرض شده

است می توان از توانهای دوم و بالاتر آن صرف نظر کرد، لذا :

$$\sin\theta(t) = \sin\theta_0 + R\cos\omega t \cos\theta_0$$

$$\cos\theta(t) = \cos\theta_0 - R\cos\omega t \sin\theta_0$$

در این صورت ضرایب  $T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) \left( T_{k'p'}^{\rho'\rho} \right)^*(t')$  به صورت زیر به دست می-

آیند:

$$\begin{aligned} T_{kp}^{11}(t)(T_{kp}^{11})^*(t') &= (T_0 + T_s \cos\theta_0)^2 - (T_0 T_s + T_s^2 \cos\theta_0) R \sin\theta_0 \cos\omega t \\ &\quad - \frac{1}{2} (T_0 T_s + T_s^2 \cos\theta_0) R \sin\theta_0 (e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{kp}^{22}(t)(T_{kp}^{22})^*(t') &= (T_0 - T_s \cos\theta_0)^2 + (T_0 T_s - T_s^2 \cos\theta_0) R \sin\theta_0 \cos\omega t \\ &\quad + \frac{1}{2} (T_0 T_s - T_s^2 \cos\theta_0) R \sin\theta_0 (e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{kp}^{12}(t)(T_{kp}^{21})^*(t') &= T_s^2 [\sin^2\theta_0 + R \cos\theta_0 \sin\theta_0 \cos\omega t] e^{-i2\Omega t} e^{i\Omega(t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos\theta_0 \sin\theta_0 e^{i(\omega-2\Omega)t} e^{-i(\omega-\Omega)(t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos\theta_0 \sin\theta_0 e^{-i(\omega+2\Omega)t} e^{i(\omega+\Omega)(t-t')} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{kp}^{21}(t)(T_{kp}^{12})^*(t') &= T_s^2 [\sin^2\theta_0 + R \cos\theta_0 \sin\theta_0 \cos\omega t] e^{i2\Omega t} e^{-i\Omega(t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos\theta_0 \sin\theta_0 e^{-i(\omega-2\Omega)t} e^{i(\omega-\Omega)(t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos\theta_0 \sin\theta_0 e^{i(\omega+2\Omega)t} e^{-i(\omega+\Omega)(t-t')} \end{aligned}$$

با استفاده از ضرایب فوق و تبدیل فوریه زیر

$$\mathcal{U}(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{U}(t-t') e^{i\varphi(t-t')} dt \quad (10-4)$$

جريان نرمال به شکل زیر در می آيد:

$$\begin{aligned}
I_s(t) = & -ie \sum_{kp} [(T_0 + T_s \cos \theta_0)^2 + (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \mathcal{U}_{kp}^{11}(-eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{11}(-eV - \omega) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{-i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{11}(-eV + \omega) \\
& -ie \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{-i2\Omega t} \mathcal{U}_{kp}^{12}(-eV + \Omega) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{i(\omega - 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{12}(-eV - \omega + \Omega) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{-i(\omega + 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{12}(-eV + \omega + \Omega) \\
& -ie \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{i2\Omega t} \mathcal{U}_{kp}^{21}(-eV - \Omega) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{-i(\omega - 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{21}(-eV + \omega - \Omega) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{i(\omega + 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{21}(-eV - \omega - \Omega) \\
& -ie \sum_{kp} [(T_0 - T_s \cos \theta_0)^2 + (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \mathcal{U}_{kp}^{22}(-eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{22}(-eV - \omega) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{-i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{22}(-eV + \omega) \\
& + h.c.
\end{aligned}$$

نتیجه نهایی برای جریان نرمال عبارت است از:

$$\begin{aligned}
I_S = & 2e \sum_{kp} [(T_0 + T_s \cos \theta_0)^2 + (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im} \mathcal{U}_{kp}^{11}(-eV) \\
& + e \sum_{kp} (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{11}(-eV - \omega)) \\
& + e \sum_{kp} (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{-i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{11}(-eV + \omega)) \\
& + 2e \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im} (e^{-i2\Omega t} \mathcal{U}_{kp}^{12}(-eV + \Omega)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{i(\omega - 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{12}(-eV - \omega + \Omega)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{-i(\omega + 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{12}(-eV + \omega + \Omega)) \\
& + 2e \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im} (e^{i2\Omega t} \mathcal{U}_{kp}^{21}(-eV - \Omega)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{-i(\omega - 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{21}(-eV + \omega - \Omega)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{i(\omega + 2\Omega)t} \mathcal{U}_{kp}^{21}(-eV - \omega - \Omega)) \\
& + 2e \sum_{kp} [(T_0 - T_s \cos \theta_0)^2 + (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im} (\mathcal{U}_{kp}^{22}(-eV)) \\
& + e \sum_{kp} (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{22}(-eV - \omega)) \\
& + e \sum_{kp} \frac{1}{2} (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im} (e^{-i\omega t} \mathcal{U}_{kp}^{22}(-eV + \omega))
\end{aligned} \tag{۱۱-۴}$$

همانطور که به وضوح از این رابطه دیده می‌شود، جریان به شکل‌های مختلفی به فرکانس‌های حرکت‌های تقدیمی و نوسانی وابسته است.

پتانسیل تاخیری را چگونه محاسبه کنیم؟ برای این کار به سراغ پتانسیل ماتسوبارا می‌رویم. از ارتباط بین پتانسیل تاخیری و پتانسیل ماتسوبارا استفاده می‌کنیم و سعی می‌کنیم که جوابی برای پتانسیل

تاخیری بیابیم [۴]. پتانسیل ماتسوبارا متناظر با پتانسیل تاخیری که توسط رابطه  $(4-10)$  معرفی شد، به شکل زیر است:

$$U_{kp k' p'}^{\sigma \sigma' \rho \rho'}(i\omega_n) = - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau a_{kp}^{\sigma \sigma'}(\tau) a_{k' p'}^{\dagger \rho \rho'}(0) \rangle \\ = - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p\sigma'}(\tau) C_{p'\rho'}^\dagger(0) C_{k'\rho}(0) \rangle$$

در روابط فوق  $T$  عملگر پارامتر مرتب است که در پیوست (الف) تعریف شده و موارد استفاده آن ذکر

گردیده است.  $\tau$  زمان موهومی می‌باشد که پتانسیل ماتسوبارا در این زمان تعریف می‌شود و محدوده تعريف می‌شود. با استفاده از قضیه ویک<sup>۱</sup> داریم:

$$U_{kp k' p'}^{\sigma \sigma' \rho \rho'}(i\omega_n) = - \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p\sigma'}(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{p'\rho'}^\dagger(0) C_{k'\rho}(0) \rangle \\ - \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p'\rho'}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{k'\rho}(0) \rangle \\ + \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k'\rho}(0) C_{k\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p'\rho'}^\dagger(0) \rangle$$

به دلیل وجود اتصال تونلی، ابرساناها مستقل از هم هستند و لذا الکترونها در دو ابرسانا همبسته نیستند. بنابراین در رابطه بالا انتگرال اول برابر صفر می‌شوند. و انتگرال دوم نیز به دلیل اینکه در اینجا فقط جریان الکترون‌های مستقل مورد نظر است صفر خواهد شد.

پتانسیل ماتسوبارا به صورت زیر می‌شود:

$$U_{kp k' p'}^{\sigma \sigma' \rho \rho'}(i\omega_n) = \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k'\rho}(0) C_{k\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p'\rho'}^\dagger(0) \rangle \\ = \int_0^\beta dt e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}(0) C_{k\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p\sigma'}^\dagger(0) \rangle \delta_{kk'} \delta_{pp'} \delta_{\sigma\rho} \delta_{\rho'\sigma'}$$

بنابراین صرفاً پتانسیل ماتسوبارا به شکل زیر غیر صفر خواهد بود.

---

<sup>1</sup>-Wick's theorem

$$\begin{aligned}
U_{kp}^{\sigma\sigma'\sigma\sigma'}(i\omega_n) &= U_{kp}^{\sigma\sigma'}(i\omega_n) \\
&= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}(0) C_{k\sigma}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p\sigma'}^\dagger(0) \rangle \\
&= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} G_R^\sigma(k, -\tau) G_L^{\sigma'}(p, \tau)
\end{aligned} \tag{12-4}$$

که در رابطه (12-5) تابع گرین نرمال ماتسوبارا بصورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\langle T_\tau C_{k\sigma}(\tau) C_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle = -G^\sigma(k, \tau)$$

با انجام تبدیل فوريه که در پیوست(الف) آمده است، پتانسیل ماتسوبارا به شکل زیر در می‌آید:

$$U_{kp}^{\sigma\sigma'}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{iq} G_R^\sigma(k, iq - i\omega) G_L^{\sigma'}(p, iq) \tag{13-4}$$

با استفاده از نمایش لهمن<sup>1</sup> پتانسیل ماتسوبارا را به شکل زیر می‌نویسیم [4 و 5].

$$U_{kp}^{\sigma\sigma'}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_L}{2\pi} A_L^{\sigma'}(p, \varepsilon_L) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_R}{2\pi} A_R^\sigma(k, \varepsilon_R) S^{\sigma\sigma'} \tag{14-4}$$

$$S^{\sigma\sigma'} = \frac{n_f^\sigma(\varepsilon_R) - n_f^{\sigma'}(\varepsilon_L)}{i\omega_n + \varepsilon_R - \varepsilon_L} \tag{15-4}$$

در روابط بالا ( $A_L^{\sigma'}(p, \varepsilon_L)$  و  $A_R^\sigma(k, \varepsilon_R)$ ) تابع طیفی<sup>2</sup> الکترونهای سمت چپ و راست هستند. این توابع

شرط بهنجارش زیر را برآورده می‌کنند:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_L}{2\pi} A_L^{\sigma'}(p, \varepsilon_L) = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_R}{2\pi} A_R^\sigma(k, \varepsilon_R) = 1$$

در رابطه (15-4)،  $n_f^\sigma$  عدد اشغال گرمایی الکترون‌های با اسپین  $\sigma$  است که از آمار فرمی- دیراک

پیروی می‌کند. با توجه به اینکه هیچ نوع برهمکنش وابسته به اسپین در ابررسانها موجود نیست، می‌توان

---

<sup>1</sup>Lehmann representation

<sup>2</sup>-spectral function

نتیجه گرفت که اعداد اشغال و همینطور توابع طیفی مستقل از اسپین ذرات هستند. بنابراین پتانسیل ماتسوبارا مستقل از اسپین ذرات خواهد بود.

برای به دست آوردن پتانسیل های تاخیری از پتانسیل های ماتسوبارای متناظر باید به جای  $\omega$

مقدار  $i\eta + \alpha$  را قرار دهیم [۴]. در این صورت پتانسیل تاخیری به صورت زیر به دست می آید:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{kp}^{\sigma\sigma'}(\alpha) &= \mathcal{U}_{kp}(\alpha) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_L}{2\pi} A_L(p, \varepsilon_L) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_R}{2\pi} A_R(k, \varepsilon_R) \frac{n_f(\varepsilon_R) - n_f(\varepsilon_L)}{\alpha + \varepsilon_R - \varepsilon_L + i\eta} \end{aligned} \quad (16-4)$$

برای محاسبه انتگرال از رابطه زیر استفاده می کنیم:

$$\frac{1}{A + iB} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{A}\right) - i\pi\delta(A)$$

$$B \rightarrow 0$$

که در آن  $\mathcal{P}$  مقدار اصلی کوشی می باشد.

$$Im\mathcal{U}_{kp}(\alpha) = -\pi \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_L}{2\pi} A_L(p, \varepsilon_L) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_R}{2\pi} A_R(k, \varepsilon_R) [n_f(\varepsilon_R) - n_f(\varepsilon_L)] \delta(\alpha + \varepsilon_R - \varepsilon_L) \quad (17-4)$$

$$= -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\varepsilon_R}{2\pi} A_L(p, \varepsilon_R + \alpha) A_R(k, \varepsilon_R) [n_f(\varepsilon_R) - n_f(\varepsilon_R + \alpha)] \quad (17-4)$$

توابع طیفی الکترونها به صورت زیر داده می شود [۳و۴] :

$$A_L(p, \varepsilon_L) = 2\pi[u_p^2\delta(\varepsilon_L - E_p) + v_p^2\delta(\varepsilon_L + E_p)] \quad (18-4)$$

$$A_R(k, \varepsilon_R) = 2\pi[u_k^2\delta(\varepsilon_R - E_k) + v_k^2\delta(\varepsilon_R + E_k)] \quad (19-4)$$

که در رابطه های فوق  $v_k^2$  و  $u_k^2$  ضرایب همدوسی<sup>۱</sup> ابررسانا هستند و با روابط زیر تعریف می شوند:

$$u_p^2 = \frac{1}{2}(1 + \frac{\xi_p}{E_p})$$

$$v_p^2 = \frac{1}{2}(1 - \frac{\xi_p}{E_p})$$

---

<sup>۱</sup>Coherence factors

چون احتمال اشغال زوجهای کوپر به اسپین الکترونها بستگی ندارد، پس توابع طیفی الکترونها مستقل از اسپین آنهاست. لذا می‌توان در رابطه جریان اندیس‌های مربوط به اسپین را حذف کرد.

با استفاده از تعاریف مربوط به  $A_{L,R}$  و مقداری عملیات جبری و جایگذاری حاصل ضرب این توابع،

جواب نهایی  $Im\mathcal{U}_{kp}^{\sigma\sigma'}(\alpha)$  به صورت زیر در می‌آید.

$$Im\mathcal{U}_{kp}^{\sigma\sigma'}(\alpha) = -2\pi e[n_f(E_k) - n_f(E_p)][u_k^2 u_p^2 \delta(E_k + \alpha - E_p) - v_k^2 v_p^2 \delta(-E_k + \alpha + E_p)] \\ + [1 - n_f(E_k) - n_f(E_p)][u_p^2 v_k^2 \delta(-E_k + \alpha - E_p) - u_k^2 v_p^2 \delta(E_k + \alpha + E_p)]$$

با توجه به اینکه  $n_f(E)$  در دمای صفر مطلق برابر صفر می‌شود، رابطه نهایی  $Im\mathcal{U}_{kp}^{\sigma\sigma'}(\omega)$  برابر می-

شود با:

$$Im\mathcal{U}_{kp}^{\sigma\sigma'}(\alpha) = -2\pi e[u_p^2 v_k^2 \delta(-E_k + \alpha - E_p) \\ - u_k^2 v_p^2 \delta(E_k + \alpha + E_p)] \quad (20-4)$$

برای اختلاف پتانسیل‌های کوچک فقط الکترون‌هایی که انرژی آنها نزدیک انرژی فرمی است در تونل زنی شرکت می‌کنند. در این بازه کوچک انرژی می‌توان چگالی حالت‌ها را ثابت فرض کرده و همچنین از وابستگی دامنه‌های عبور به انرژی صرفنظر کرد و تنها مقدار آنها در انرژی فرمی را در نظر گرفت. اکنون می‌توان جملات جریان را محاسبه کرده و به عنوان مثال جمله اول را به صورت زیر نوشت:

با جایگذاری  $\alpha = eV$  - خواهیم داشت:

$$I_S^1(t) = \\ -2\pi e N_R N_L \Lambda \int_{\Delta_R}^{+\infty} dE_k \rho(E_k) \int_{\Delta_L}^{+\infty} dE_p \rho(E_p) [\delta(-E_k - eV - E_p) - \delta(E_k - eV + E_p)] \quad (21-4)$$

که در آن:

$$\Lambda = [(T_0^2 + T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t]$$

در به دست آوردن رابطه بالا، از انتگرال زیر استفاده شده است:

$$\sum_k = N_R \int d\xi_R = N_R \int \rho(E_k) dE_k$$

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_p v_p^2 f(E_p) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi_p \left(1 - \frac{\xi_p}{E_p}\right) f(E_p) \\
&= \int_0^{+\infty} d\xi_p f(E_p) \\
&= \int_{\Delta_L}^{+\infty} dE_p \rho(E_p) f(E_p) \\
&\quad \text{که در آن } \frac{d\xi_p}{d E_p} \text{ برابر است با:}
\end{aligned}$$

ابررسانها را یکسان فرض میکنیم، یعنی  $\Delta = \Delta_R = \Delta_L$ . از طرفی:

$$\rho(E_p) = \frac{E_p}{\sqrt{E_p^2 - \Delta^2}}$$

با وارد کردن تابع پلهای و تغییر حدود بالای انتگرال به  $eV - \Delta$  رابطه (۲۱-۴) تبدیل به انتگرال زیر می‌شود.

$$I_S^1(t) = -2\pi e N_R N_L \Lambda \theta(eV - 2\Delta) \int_{\Delta}^{eV - \Delta} dE \frac{E(eV - E)}{\sqrt{E^2 - \Delta^2} \sqrt{(eV - E)^2 - \Delta^2}} \quad (22-4)$$

باتغییر متغیر زیر:

$$2E = eV + x(eV - 2\Delta)$$

انتگرال (۲۲-۴) تبدیل به انتگرال های بیضوی نوع اول و نوع دوم می‌شود:

$$I_S^1(t) = -2\pi e N_R N_L \Lambda \frac{\Theta(eV - 2\Delta)}{(eV + 2\Delta)} \int_{-1}^1 dx \frac{(eV)^2 - x^2(eV - 2\Delta)^2}{[(1 - x^2)(1 - x^2\gamma^2)]}$$

$$\gamma = \frac{eV - 2\Delta}{eV + 2\Delta}$$

در نهایت جمله اول جریان نرمال برابر است با:

$$I_S^1(t) = -2\pi e N_R N_L \Lambda \theta(eV - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV)^2}{eV + 2\Delta} K(\gamma) - (eV + 2\Delta)[K(\gamma) - E(\gamma)] \right\} \quad (23-4)$$

که  $K$  و  $E$  انتگرالهای بیضوی نوع اول و نوع دوم می‌باشند.

با محاسبه سایر جملات، جریان برابر است با:

$$\begin{aligned}
I_s(t) = & -2\pi e N_R N_L [(T_0 - T_s \cos \theta_0)^2 + (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \\
& \times \theta(eV - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV)^2}{eV + 2\Delta} K(\gamma_1) - (eV + 2\Delta)[K(\gamma_1) - E(\gamma_1)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t \\
& \times \theta(eV + \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega)^2}{eV + \omega + 2\Delta} K(\gamma_2) - (eV + \omega + 2\Delta)[K(\gamma_2) - E(\gamma_2)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L (-T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t \\
& \times \theta(eV - \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega)^2}{eV - \omega + 2\Delta} K(\gamma_3) - (eV - \omega + 2\Delta)[K(\gamma_3) - E(\gamma_3)] \right\} \\
& -2\pi e N_R N_L T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \cos(2\Omega t) \\
& \times \theta(eV - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \Omega)^2}{eV - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_4) - (eV - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_4) - E(\gamma_4)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos((\omega - 2\Omega)t) \\
& \times \theta(eV + \omega - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega - \Omega)^2}{eV + \omega - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_5) - (eV + \omega - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_5) - E(\gamma_5)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos((\omega + 2\Omega)t) \\
& \times \theta(eV - \omega - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega - \Omega)^2}{eV - \omega - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_6) - (eV - \omega - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_6) - E(\gamma_6)] \right\} \\
& -2\pi e N_R N_L T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \cos(2\Omega t) \\
& \times \theta(eV + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \Omega)^2}{eV + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_7) - (eV + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_7) - E(\gamma_7)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos((\omega - 2\Omega)t) \\
& \times \theta(eV - \omega + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega + \Omega)^2}{eV - \omega + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_8) - (eV - \omega + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_8) - E(\gamma_8)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos((\omega + 2\Omega)t) \\
& \times \theta(eV + \omega + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega + \Omega)^2}{eV + \omega + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_9) - (eV + \omega + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_9) - E(\gamma_9)] \right\} \\
& -2\pi e N_R N_L [(T_0 - T_s \cos \theta_0)^2 + (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \\
& \times \theta(eV - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV)^2}{eV + 2\Delta} K(\gamma_1) - (eV + 2\Delta)[K(\gamma_1) - E(\gamma_1)] \right\} \\
& -\pi e N_R N_L (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \theta(eV + \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega)^2}{eV + \omega + 2\Delta} K(\gamma_2) - (eV + \omega + 2\Delta)[K(\gamma_2) - E(\gamma_2)] \right\} \\
& - \pi e N_R N_L (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t \\
& \times \theta(eV - \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega)^2}{eV - \omega + 2\Delta} K(\gamma_3) - (eV - \omega + 2\Delta)[K(\gamma_3) - E(\gamma_3)] \right\} \quad (24-4)
\end{aligned}$$

در جملات جریان قسمت موهومی محاسبه شده است و در نظر گرفته می‌شود [۱۷].

مقدار  $\gamma_1$  تا  $\gamma_9$  به صورت زیر تعریف می‌شوند.

$$\gamma_1 = \frac{(eV - 2\Delta)}{(eV + 2\Delta)} \gamma_2 = \frac{(eV + \omega - 2\Delta)}{(eV + \omega + 2\Delta)} \gamma_3 = \frac{(eV - \omega - 2\Delta)}{(eV - \omega + 2\Delta)}$$

$$\gamma_4 = \frac{(eV - \Omega - 2\Delta)}{(eV - \Omega + 2\Delta)} \gamma_5 = \frac{(eV + \omega - \Omega - 2\Delta)}{(eV + \omega - \Omega + 2\Delta)} \gamma_6 = \frac{(eV - \omega - \Omega - 2\Delta)}{(eV - \omega - \Omega + 2\Delta)}$$

$$\gamma_7 = \frac{(eV + \Omega - 2\Delta)}{(eV + \Omega + 2\Delta)} \gamma_8 = \frac{(eV - \omega + \Omega - 2\Delta)}{(eV - \omega + \Omega + 2\Delta)} \gamma_9 = \frac{(eV + \omega + \Omega - 2\Delta)}{(eV + \omega + \Omega + 2\Delta)}$$

حال عبارت جریان را با تعریف روابط زیر ساده تر می‌کنیم.

$$T_{\parallel} = T_s \cos \theta_0$$

$$T_{\perp} = T_s \sin \theta_0$$

$$I_s(t) = -8\pi e N_R N_L [(T_0^2 + T_{\parallel}^2)]$$

$$\times \theta(eV - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV)^2}{eV + 2\Delta} K(\gamma_1) - (eV + 2\Delta)[K(\gamma_1) - E(\gamma_1)] \right\}$$

$$-4\pi e N_R N_L [T_{\perp}^2 \cos(2\Omega t)] \times$$

$$\left( \theta(eV - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \Omega)^2}{eV - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_4) - (eV - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_4) - E(\gamma_4)] \right\} \right. \\ \left. + \theta(eV + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \Omega)^2}{eV + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_7) - (eV + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_7) - E(\gamma_7)] \right\} \right)$$

$$-4\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \cos \omega t \times$$

$$\left( \theta(eV - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV)^2}{eV + 2\Delta} K(\gamma_1) - (eV + 2\Delta)[K(\gamma_1) - E(\gamma_1)] \right\} \right. \\ \left. - 2\theta(eV + \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega)^2}{eV + \omega + 2\Delta} K(\gamma_2) - (eV + \omega + 2\Delta)[K(\gamma_2) - E(\gamma_2)] \right\} \right. \\ \left. - 2\theta(eV - \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega)^2}{eV - \omega + 2\Delta} K(\gamma_3) - (eV - \omega + 2\Delta)[K(\gamma_3) - E(\gamma_3)] \right\} \right)$$

$$-2\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \cos \omega t \cos(2\Omega t) \times$$

$$\left( \theta(eV - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \Omega)^2}{eV - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_4) - (eV - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_4) - E(\gamma_4)] \right\} \right. \\ \left. + \theta(eV + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \Omega)^2}{eV + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_7) - (eV + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_7) - E(\gamma_7)] \right\} \right)$$

$$-\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \cos \omega t \cos(\omega - 2\Omega t) \times$$

$$\left( \theta(eV + \omega - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega - \Omega)^2}{eV + \omega - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_5) - (eV + \omega - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_5) - E(\gamma_5)] \right\} \right. \\ \left. + \theta(eV - \omega + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega + \Omega)^2}{eV - \omega + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_8) - (eV - \omega + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_8) - E(\gamma_8)] \right\} \right)$$

$$-\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \cos \omega t \cos(\omega t + 2\Omega t) \times$$

$$\left( \theta(eV - \omega - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega - \Omega)^2}{eV - \omega - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_6) - (eV - \omega - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_6) - E(\gamma_6)] \right\} \right. \\ \left. + \theta(eV + \omega + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega + \Omega)^2}{eV + \omega + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_9) - (eV + \omega + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_9) - E(\gamma_9)] \right\} \right)$$

جريان نرمال را می‌توان به صورت ساده تر زیر نوشت:

$$I_s(t) = I_0 - 4\pi e N_R N_L T_{\perp}^2 (M_4 + M_7) \cos(2\Omega t) \\ - 4\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_1 - 2M_2 - 2M_3) \cos \omega t \\ - 2\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_4 + M_7) \cos(2\Omega t) \cos \omega t \\ - \pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_5 + M_8) \cos(\omega - 2\Omega) t$$

$$-\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_6 + M_9) \cos(\omega + 2\Delta) t \quad (25-4)$$

در رابطه بالا  $I_0$  برابر است با:

$$I_0 = -8\pi e N_R N_L [(T_0^2 + T_{\parallel}^2)] M_1$$

در رابطه (25-5) با در نظر گرفتن مقادیر زیر برای  $M_i$  ها حاصل شده است، که مقادیر آنها در زیر آمده است.

$$\begin{aligned} M_1 &= \Theta(eV - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV)^2}{eV + 2\Delta} K(\gamma_1) - (eV + 2\Delta)[K(\gamma_1) - E(\gamma_1)] \right\} \\ M_2 &= \Theta(eV + \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega)^2}{eV + \omega + 2\Delta} K(\gamma_2) - (eV + \omega + 2\Delta)[K(\gamma_2) - E(\gamma_2)] \right\} \\ M_3 &= \Theta(eV - \omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega)^2}{eV - \omega + 2\Delta} K(\gamma_3) - (eV - \omega + 2\Delta)[K(\gamma_3) - E(\gamma_3)] \right\} \\ M_4 &= \Theta(eV - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \Omega)^2}{eV - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_4) - (eV - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_4) - E(\gamma_4)] \right\} \\ M_5 &= \Theta(eV + \omega - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega - \Omega)^2}{eV + \omega - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_5) - (eV + \omega - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_5) - E(\gamma_5)] \right\} \\ M_6 &= \Theta(eV - \omega - \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega - \Omega)^2}{eV - \omega - \Omega + 2\Delta} K(\gamma_6) - (eV - \omega - \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_6) - E(\gamma_6)] \right\} \\ M_7 &= \Theta(eV + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \Omega)^2}{eV + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_7) - (eV + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_7) - E(\gamma_7)] \right\} \\ M_8 &= \Theta(eV - \omega + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV - \omega + \Omega)^2}{eV - \omega + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_8) - (eV - \omega + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_8) - E(\gamma_8)] \right\} \\ M_9 &= \Theta(eV + \omega + \Omega - 2\Delta) \left\{ \frac{(eV + \omega + \Omega)^2}{eV + \omega + \Omega + 2\Delta} K(\gamma_9) - (eV + \omega + \Omega + 2\Delta)[K(\gamma_9) - E(\gamma_9)] \right\} \end{aligned}$$

عبارتی که برای جریان نرمال به دست آورده‌ایم نشان می‌دهد که دینامیک اسپین تک مولکول

مغناطیسی باعث ایجاد یک جریان متناوب در سیستم می‌شود. جمله اول  $I_0$  جریان مستقیم است که

دقیقاً همان عبارتی است که در صورت ثابت بودن اسپین تک مولکول مغناطیسی به دست می‌آید. با توجه

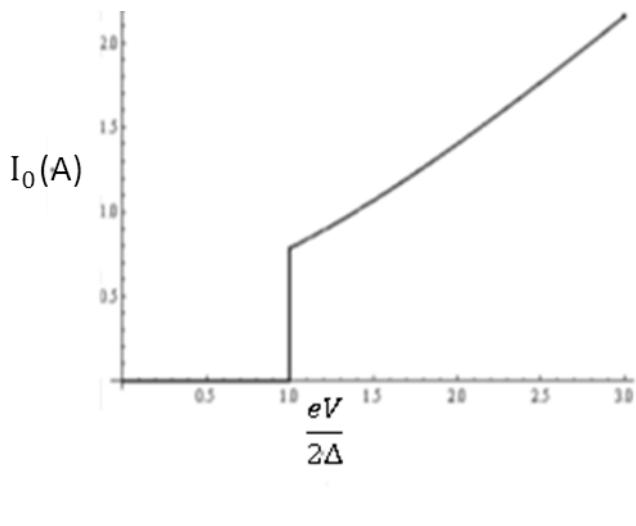
به عبارت  $I_0$  واضح است که به ازای  $eV = 2\Delta$  جریان  $I_0$  صفر است. اما به ازای

به ویژگی تابع پله‌ای جریان برابر با مقدار زیر می‌شود:

$$I_0 = -4\pi e^2 \Delta N_R N_L [(T_0^2 + T_{\parallel}^2)] \quad (26-4)$$

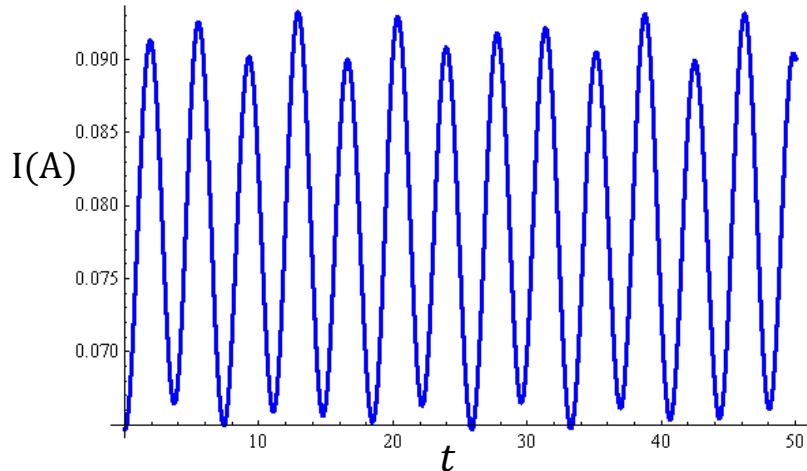
همانگونه که از رابطه (26-۵) مشاهده می‌کنیم مقدار  $I_0$  یک جهش ناپیوسته در  $eV = 2\Delta$  خواهد داشت. و به ازای مقادیر  $eV > 2\Delta$  نیز، جریان با شیب ثابتی بر حسب افزایش ولتاژ تغییر خواهد کرد.

شکل (۲-۴) تغییرات  $I_0$  بر حسب  $\frac{eV}{2\Delta}$  را نشان میدهد.



شکل ۲-۴- تغییرات جریان مستقیم بر حسب تغییرات  $\frac{eV}{2\Delta}$ ، مشاهده می‌شود که جریان در  $eV = 2\Delta$  جهش ناپیوسته‌ای را از مقدار صفر انجام داده و سپس افزایش می‌یابد

میخواهیم جریان مستقیم را با جریان متناوبی که به دلیل دینامیک اسپین به وجود آمده است، مقایسه کنیم. برای ارزیابی رابطه به دست آمده برای جریان(۳-۴)، در شکل (۳-۴) جریان نرمال کل رابر حسب زمان را رسم میکنیم.



شکل ۳-۴-نمایش تغییرات جملات جریان متناوب بر حسب زمان

در شکل فوق از مقادیر زیر استفاده کردیم:

$$\frac{eV}{2\Delta} = 1.001, \quad \frac{\omega}{2\Delta} = 4, \quad \frac{\Omega}{2\Delta} = 1.5$$

$$T_0 = 0.1, \quad T_{\perp} = 0.05, \quad T_{\parallel} = 0.05$$

$$R = 0.078 \text{ rad}$$

از شکل (۳-۴) مشاهده میکنیم که جریان نوسانی است، اما این نوسان دارای دامنه ثابتی نیست. ثابت

نبودن دامنه به دلیل وجود  $R$  (دامنه نوسانات اسپین تک مولکول) در جملات جریان است. هر چه مقدار  $R$

بزرگتر شود، جریان از حالت سینوسی انحراف بیشتری خواهد داشت. با مقایسه شکل های (۲-۴) و (۳-۴)، در

مییابیم که مقادیر جریان متناوب قابل قیاس با جریان مستقیم هستند.

نتیجه جالبی که میتوان به دست آورد وقتی است که جریان نرمال را در غیاب اختلاف پتانسیل به

دست آوریم. مقادیر  $M_i$  به ازای  $eV = 0$  نشان میدهیم. نتیجه به صورت زیر است.

$$\begin{aligned}
I_s(t) = & -4\pi e N_R N_L T_{\perp}^2 M'_7 \cos(2\Omega t) \\
& -8\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R M'_2 \cos \omega t \\
& -2\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R M'_7 \cos(2\Omega t) \cos \omega t \\
& -\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M'_5 + M'_8) \cos(\omega - 2\Omega) t \\
& -\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R M'_9 \cos(\omega + 2\Omega) t
\end{aligned} \tag{۲۷-۴}$$

با توجه به عبارت به دست آمده می‌توان دید که به ازای  $|\omega - \Omega| > 2\Delta$ ، حتماً جریان نرمال در غیاب اختلاف پتانسیل غیر صفر است. یعنی رقص محوری اسپین تک مولکول مغناطیسی می‌تواند یک جریان متناوب در سیستم پمپ کند.

## ۴-۴- جریان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل در اتصال

### ابررسانا- تک مولکول- ابررسانا

رابطه (۳۲-۱) را در نظر می‌گیریم که در آن اختلاف پتانسیل جزیی  $V$  را به سیستم در نظر گرفته شده اعمال می‌کنیم. آنگاه رابطه جریان به فرم زیر خواهد شد:

$$I_J(t) = -e \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \theta(t-t') e^{-ieV(t+t')} \langle [A(t), A(t')] \rangle + h.c.$$

$$I_J(t) = -e \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ieVt} \theta(t-t') e^{ieV(t-t')} \langle [A(t), A(t')] \rangle dt' + h.c.$$

همانند محاسبات قبل، عملگرهای  $A(t)$  و  $A(t')$  را به شکل زیر در نظر می‌گیریم:

$$A(t) = \sum_{kp\sigma\sigma'} C_{k\sigma}^\dagger(t) T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) C_{p\sigma'}(t) = \sum_{kp\sigma\sigma'} T_{kp}^{\sigma\sigma'}(t) a_{kp}^{\sigma\sigma'}(t)$$

$$A(t') = \sum_{k'p'\rho\rho'} C_{k'\rho}^\dagger(t') T_{k'p'}^{\rho\rho'}(t') C_{p'\rho'}(t') = \sum_{k'p'\rho\rho'} T_{k'p'}^{\rho\rho'}(t') a_{k'p'}^{\rho\rho'}(t')$$

پتانسیل تاخیری را به شکل زیر تعریف می‌کنیم:

$$\chi_{kp'k'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(t-t') = -i\theta(t-t') \langle [a_{kp}^{\sigma\sigma'}(t), a_{k'p'}^{\rho\rho'}(t')] \rangle \quad (28-4)$$

در محاسبه پتانسیل ماتسوبارای متناظر با پتانسیل تاخیری بالا نشان خواهیم داد که این پتانسیل را

می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\chi_{kp'k'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(t-t') = \delta_{k,-p}\delta_{k',-p'}\delta_{\sigma,-\rho}\delta_{\sigma',-\rho'}\chi_{kp}^{\sigma\sigma'}(t-t')$$

ضرایب پتانسیل تاخیری در رابطه (25-4) به صورت زیر هستند:

$$\begin{aligned} T_{kp}^{11}(t)T_{kp}^{22}(t') &= (T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) - (T_0 T_s - T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t \\ &\quad + \frac{1}{2} (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{i \omega t} e^{-i \omega (t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{-i \omega t} e^{i \omega (t-t')} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{kp}^{12}(t)T_{kp}^{21}(t') &= T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{-i \Omega (t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{i \omega t} e^{-i (\omega + \Omega) (t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{-i \omega t} e^{i (\omega - \Omega) (t-t')} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{kp}^{21}(t)T_{kp}^{12}(t') &= T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{i \Omega (t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{i \omega t} e^{i (-\omega + \Omega) (t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{-i \omega t} e^{i (\omega + \Omega) (t-t')} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{kp}^{22}(t)T_{kp}^{11}(t') &= (T_0 - T_s \cos \theta(t))(T_0 + T_s \cos \theta(t')) \\ &\quad (T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t \\ &\quad + \frac{1}{2} (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{i \omega t} e^{-i \omega (t-t')} \\ &\quad + \frac{1}{2} (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{-i \omega t} e^{i \omega (t-t')} \end{aligned}$$

با تبدیلات فوریه ای که در پیوست (الف) امده است، رابطه جریان به شکل زیر در می‌آید.

$$\begin{aligned}
I_J(t) = & -ie \sum_{kp} [ (T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t ] e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{11}(eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{11}(-\omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{-i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{11}(+\omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{12}(-\Omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{12}(-\omega - \Omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{-i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{12}(+\omega - \Omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{21}(-\Omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{21}(+\omega - \Omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 e^{-i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{21}(-\omega - \Omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} [(T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{22}(eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{22}(-\omega + eV) \\
& -ie \sum_{kp} \frac{1}{2} (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 e^{-i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{22}(+\omega + eV) + h.c.
\end{aligned}$$

با محاسبه  $h.c.$  و جایگذاری در رابطه جریان ، می‌توانیم رابطه را به شکل زیر بنویسیم.

$$\begin{aligned}
I_J(t) = & 2e \sum_{kp} [(T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im}(e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{11}(eV)) \\
& + e \sum_{kp} (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{11}(-\omega + eV))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + e \sum_{kp} (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(-\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{11} (+\omega + eV)) \\
& + 2e \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im}(e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{12} (-\Omega + eV)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{12} (-\omega - \Omega + eV)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(-\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{12} (+\omega - \Omega + eV)) \\
& + 2e \sum_{kp} T_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im}(e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{21} (-\Omega + eV)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{21} (+\omega - \Omega + eV)) \\
& + e \sum_{kp} T_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(-\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{21} (-\omega - \Omega + eV)) \\
& + 2e \sum_{kp} [(T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \operatorname{Im}(e^{-2ieVt} \chi_{kp}^{22} (eV)) \\
& + e \sum_{kp} (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{22} (-\omega + eV)) \\
& + e \sum_{kp} (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \operatorname{Im}(e^{i(-\omega-2eV)t} \chi_{kp}^{22} (+\omega + eV))
\end{aligned}$$

برای محاسبه پتانسیل تاخیری که در رابطه (۲۸-۵) تعریف کرده‌ایم به سراغ پتانسیل ماتسوبارای

متناظر آن می‌رویم.

$$\begin{aligned}
X_{kpk'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(i\omega) &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau a_{kp}^{\sigma\sigma'}(\tau) a_{k'p'}^{\rho\rho'}(0) \rangle \\
&= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p\sigma'}(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) C_{p'\rho'}(0) \rangle \quad (29-4)
\end{aligned}$$

با استفاده از قضیه ویک:

$$\begin{aligned}
X_{kpk'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(i\omega) &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p\sigma'}(\tau) \rangle \langle T_\tau C_{k'\rho}^\dagger(0) C_{p'\rho'}(0) \rangle \\
&\quad - \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p'\rho'}(0) \rangle
\end{aligned}$$

$$-\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{p'\rho'}(0) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) \rangle$$

در رابطه بالا به دليل اينكه در سیستم توفل زنی ابرساناها مستقل از هم هستند والكترونهاي ابرساناها تشکيل توابع هم بسته نمي دهند، ولذا انتگرال اول وسوم برابر صفر می شوند.

$$\begin{aligned} X_{kp k' p'}^{\sigma\sigma' \rho\rho'}(i\omega) &= -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{p\sigma'}(\tau) C_{p'\rho'}(0) \rangle \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k\sigma}^\dagger(\tau) C_{k'\rho}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{p'\rho'}(0) C_{p\sigma'}(\tau) \rangle \delta_{k,-k'} \delta_{p,-p'} \delta_{\sigma,-\rho} \delta_{\rho',-\sigma'} \end{aligned}$$

$$X_{kp k' p'}^{\sigma\sigma' \rho\rho'}(i\omega) = X_{kp}^{\sigma\sigma'}(i\omega) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \langle T_\tau C_{k,\uparrow}^\dagger(\tau) C_{-k,\downarrow}^\dagger(0) \rangle \langle T_\tau C_{-p,\downarrow}(0) C_{p,\uparrow}(\tau) \rangle \quad (30-4)$$

چون هیچ نوع برهمنکش اسپینی در ابرساناها موجود نیست بنابراین پتانسیل ماتسوبارا مستقل از اسپین خواهد بود. با استفاده از تبدیلات فوریه برای توابع گرین ماتسوبارادرپیوست (الف)، رابطه فوق را می توان به صورت زیر نوشت

$$X_{kp}(i\omega) = \sum_{iq} \mathcal{F}_R^\dagger(k, iq) \mathcal{F}_L(p, iq - i\omega)$$

بنابراین پتانسیل‌های ماتسوبارای متناظر را می توان به صورت زیر نوشت

$$\sum_{kp} X_{kp}(i\omega) = \sum_{kp} \sum_{iq} \mathcal{F}_R^\dagger(k, iq) \mathcal{F}_L(p, iq - i\omega) \quad (31-4)$$

با در نظر گرفتن روابط زیر:

$$\sum_k = N_R \int d\xi_R$$

$$\sum_p = N_L \int d\xi_L$$

خواهیم داشت:

$$\sum_k \mathcal{F}_R^\dagger(k, iq) = N_R \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\Delta_R}{\xi_R^2 + \Delta_R^2 + p_n^2} d\xi_R = \frac{\pi \Delta_R}{\sqrt{\Delta_R^2 + p_n^2}}$$

$$\sum_p \mathcal{F}_L(p, iq - i\omega) = \frac{\pi \Delta_L}{\sqrt{\Delta_L^2 + (p_n - \omega)^2}}$$

بنابراین رابطه (۳۱-۴) تبدیل به رابطه زیر می‌شود:

$$\sum_{kp} X(i\omega) = \pi^2 N_R N_L \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{\Delta_R \Delta_L}{\sqrt{\Delta_R^2 + p_n^2} \sqrt{\Delta_L^2 + (p_n - \omega)^2}} \quad (32-4)$$

با در نظر گرفتن  $\omega \rightarrow i\omega$ , شکل تاخیری تابع ماتسوبارا به صورت زیر است:

$$\sum_{kp} X_{ret}(\omega) = \pi^2 N_R N_L \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{\Delta_R \Delta_L}{\sqrt{\Delta_R^2 + p_n^2} \sqrt{\Delta_L^2 + (p_n - \omega)^2}} \quad (33-4)$$

با فرض اینکه ابررساناهای یکسان می‌باشند، رابطه (۳۲-۴) تبدیل به رابطه زیر می‌شود [۱۵]:

$$Re[\sum_{kp} X_{ret}(x)] = \begin{cases} \pi N_R N_L \Delta K(x) x < 1 \\ \pi N_R N_L \frac{\Delta}{x} K\left(\frac{\Delta}{x}\right) x > 1 \end{cases}$$

در رابطه فوق  $x = \frac{\omega}{2\Delta}$  است، که دلیل ظهور آن، دربخش محاسبه جریان نرمال در همین فصل آمده-

است. جریان جوزفسون به فرم زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} I_J(t) &= (-\pi \Delta^2 N_R N_L) \times \\ &\times \{2e[(T_0^2 - T_s^2 \cos^2 \theta_0) + (-T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \cos \omega t] \sin(2eVt + \varphi) K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) \\ &+ e(T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \sin(\omega - 2eVt + \varphi) K\left(\frac{-\omega + eV}{2\Delta}\right) \\ &+ e(T_0 T_s + T_s^2 \cos \theta_0) R \sin \theta_0 \sin(\omega + 2eVt + \varphi) K\left(\frac{\omega + eV}{2\Delta}\right) \\ &+ 2eT_s^2 [\sin^2 \theta_0 + R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \cos \omega t] \sin(2eVt + \varphi) K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) \\ &+ eT_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \sin(\omega - 2eVt + \varphi) K\left(\frac{-\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \\ &+ eT_s^2 R \cos \theta_0 \sin \theta_0 \sin(\omega + 2eVt + \varphi) K\left(\frac{+\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +2eT_s^2[\sin^2\theta_0 + R\cos\theta_0\sin\theta_0\cos\omega t]\sin(2eVt + \varphi)K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \\
& +eT_s^2R\cos\theta_0\sin\theta_0\sin(\omega + 2eVt + \varphi)K\left(\frac{+\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \\
& +eT_s^2R\cos\theta_0\sin\theta_0\sin(\omega - 2eVt + \varphi)K\left(\frac{-\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \\
& +2e[(T_0^2 - T_s^2\cos^2\theta_0) + (T_0T_s + T_s^2\cos\theta_0)R\sin\theta_0\cos\omega t]\sin(2eVt + \varphi)K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) \\
& +e(-T_0T_s + T_s^2\cos\theta_0)R\sin\theta_0\sin(\omega - 2eVt + \varphi)K\left(\frac{-\omega + eV}{2\Delta}\right) \\
& +e(-T_0T_s + T_s^2\cos\theta_0)R\sin\theta_0\sin(\omega + 2eVt + \varphi)K\left(\frac{+\omega + eV}{2\Delta}\right)\}
\end{aligned}$$

اکنون با درنظرگرفتن تقارن توابع انتگرال بیضوی نوع اول، رابطه جریان به شکل زیر در می‌آید. در مورد توابع انتگرال بیضوی نوع اول در پیوست توضیح خواهیم داد. در اینجا فقط به دو خاصیت این توابع

اشاره می‌کنیم [۸].

$$K(-x) = K(x) \quad (34-4)$$

$$K(0) = \frac{\pi}{2} \quad (35-4)$$

با معرفی پارامترهای زیر، جریان به فرم نهایی خود خواهد رسید.

$$T_{\parallel} = T_s \cos\theta_0$$

$$T_{\perp} = T_s \sin\theta_0$$

$$\begin{aligned}
I_j(t) = & -4e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ (T_0^2 - T_{\parallel}^2)K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2}T_{\perp}^2 \left( K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \right) \right] \sin(n(2eVt + \varphi)) \\
& -4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2} \left( K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \right) \right] \cos\omega t \sin(n(2eVt + \varphi)) \\
& -2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{-\omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{-\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \right] \sin(n(\omega t - 2eVt + \varphi)) \\
& -2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{\omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \right] \sin(\omega t + 2eVt) \\
& + \varphi) \quad (36-4)
\end{aligned}$$

جریان جوزفسون را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$I_J(t) = I_0 - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{-\omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{-\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \right] \sin(\omega t - 2eVt + \varphi) \\ - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{\omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \right] \sin(\omega t + 2eVt) \\ + \varphi) \quad (37-4)$$

که  $I_0$  برابر است با:

$$I_0 = -4e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ (T_0^2 - T_{\parallel}^2) K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2} T_{\perp}^2 \left( K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \right) \right] \sin(2eVt + \varphi) \\ - 4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2} \left( K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \right) \right] \cos\omega t \sin(2eVt + \varphi)$$

جريان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل را محاسبه نموده ایم.

همان گونه که از رابطه مربوط به  $I_0$  مشاهده می کنیم، این جریان در جملات توابع انتگرال بیضوی به فرکانس نوسانی  $\omega$  هیچ وابستگی ندارد و بنابراین رقص محوری هیچ نقشی در جمله ضرایب جریان  $I_0$  ندارد. و این جملات ضرایب جریان بر حسب فرکانس حرکت تقدیمی  $\Omega$  به دست آمده است. با در نظر گرفتن رابطه (36-4) مشاهده می کنیم که فرکانس نوسانی  $\omega$  در این جملات حضور دارد و  $\omega$  در متناوب شدن جریان نقش مهمی را بازی می کند.

برای حالتی که  $|eV| > 2\Delta$  جریان جوزفسون به شکل زیر خواهد شد:

$$I_J(t) = -4e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ (T_0^2 - T_{\parallel}^2) \frac{2\Delta}{eV} K\left(\frac{2\Delta}{eV}\right) \right] \sin(2eVt + \varphi) \\ - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ T_{\perp}^2 \left( \left( \frac{2\Delta}{-\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\Omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{\Omega + eV}\right) \right) \right] \sin(2eVt + \varphi) \\ - 4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \frac{2\Delta}{eV} K\left(\frac{2\Delta}{eV}\right) \right] \cos\omega t \sin(2eVt + \varphi) \\ - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \left( \frac{2\Delta}{-\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\Omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{\Omega + eV}\right) \right] \cos\omega t \sin(2eVt + \varphi) \\ - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \left( \frac{2\Delta}{-\omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{\omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{\omega + eV}\right) \right] \sin(\omega t - 2eVt + \varphi)$$

$$-2e\pi\Delta^2N_RN_LT_{\parallel}T_{\perp}R\left[\left(\frac{2\Delta}{-\omega-\Omega+eV}\right)K\left(\frac{2\Delta}{-\omega-\Omega+eV}\right)+\left(\frac{2\Delta}{+\omega-\Omega+eV}\right)K\left(\frac{2\Delta}{+\omega-\Omega+eV}\right)\right]\sin(\omega t+2eVt+\varphi)$$

حال اگر اختلاف پتانسیل را برابر صفر بگیریم، جریان جوزفسون در غیاب اختلاف پتانسیل حاصل

خواهد شد:

$$\begin{aligned} I_J(t) &= (-\pi\Delta^2N_RN_L) \times \\ &\times \{4e[(T_0^2 - T_s^2\cos^2\theta_0) + T_s^2\cos\theta_0R\sin\theta_0\sin(\omega t + \varphi)]K(0) \\ &+ 4eT_s^2\cos\theta_0R\sin\theta_0\sin(\omega t + \varphi)K\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) \\ &+ 4eT_s^2[\sin^2\theta_0 + R\cos\theta_0\sin\theta_0\sin(\omega t + \varphi)]K\left(\frac{\Omega}{2\Delta}\right) \\ &+ 4eT_s^2R\cos\theta_0\sin\theta_0\sin(\omega t + \varphi)K\left(\frac{\omega + \Omega}{2\Delta}\right) \\ &+ 4eT_s^2R\cos\theta_0\sin\theta_0\sin(\omega t + \varphi)K\left(\frac{+\omega - \Omega}{2\Delta}\right)\} \end{aligned}$$

جریان جوزفسون در غیاب اختلاف پتانسیل به شکل زیر در می‌آید:

$$\begin{aligned} I_J(t) &= (-4e\pi\Delta^2N_RN_L) \\ &\times \{(T_0^2 - T_{\parallel}^2)K(0) + T_{\perp}^2K\left(\frac{\Omega}{2\Delta}\right) + \\ &+ T_{\perp}T_{\parallel}R\sin(\omega t + \varphi)\left[K(0) + K\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega + \Omega}{2\Delta}\right) \right. \\ &\quad \left. + K\left(\frac{+\omega - \Omega}{2\Delta}\right)\right]\} \tag{۳۸-۴} \end{aligned}$$

که جریان را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$I_J(t) = I_0 + I_1(t)$$

با توجه به رابطه بالا جریان جوزفسون در غیاب اختلاف پتانسیل نیز شامل دو قسمت است. قسمت

اول که فقط به فرکانس تقدیمی  $\Omega$  بستگی دارد. و آنرا با  $I_0$  نمایش می‌دهیم:

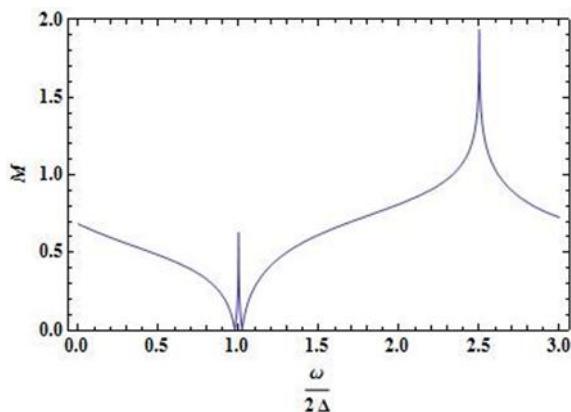
$$I_0 = -4e\pi\Delta^2N_RN_L\left[(T_0^2 - T_{\parallel}^2)K(0) + T_{\perp}^2K\left(\frac{\Omega}{2\Delta}\right)\right]$$

قسمت دوم که به فرکانس‌های تقدیمی و نوسانی به طور همزمان وابسته است و با  $I_1(t)$  نمایش داده شده است.

$$I_1(t) = -4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\perp} T_{\parallel} R \sin(\omega t + \varphi) \left[ K(0) + K\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega + \Omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{+\omega - \Omega}{2\Delta}\right) \right]$$

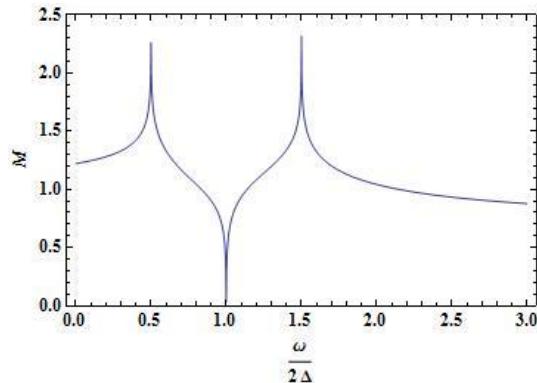
$$M = \left[ K(0) + K\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega + \Omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{+\omega - \Omega}{2\Delta}\right) \right]$$

تغییرات ضریب  $M$  در عبارت جریان  $I_1(t)$  را که وابسته به تغییرات توابع انتگرال بیضوی نوع اول بر حسب مقادیر مختلف فرکانس‌های نوسانی و تقدیمی را در شکل‌های زیر رسم نموده‌ایم.



شکل ۴-۴- تغییرات ضریب  $M$  بر حسب  $\frac{\omega}{2\Delta}$ ، به ازای  $0.5$

در شکل (۴-۴) که تغییرات ضریب  $M$  در حالتی که  $\frac{\Omega}{2\Delta} = 0.5$  فرض شده است رسم گردید. همانگونه که مشاهده می‌شود در مقادیر  $1 = \frac{\omega}{2\Delta}$  و  $2.5 = \frac{\omega}{2\Delta}$  تشدید روی می‌دهد. واگرایی دامنه نوسان در شکل (۴-۵) برای  $0.5 = \frac{\Omega}{2\Delta}$  نیز رخ می‌دهد.

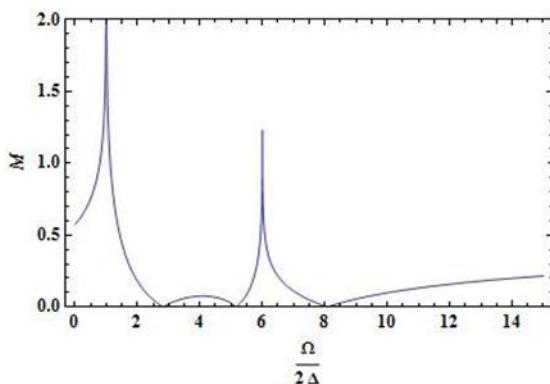


شکل ۴-۵- تغییرات ضریب  $M$  بر حسب  $\frac{\omega}{2\Delta}$ ، به ازای  $\frac{\Omega}{2\Delta} = 1.5$

تا کنون تغییرات ضریب  $M$  را بر حسب  $\frac{\omega}{2\Delta}$  و با فرض مقادیری برای  $\frac{\Omega}{2\Delta}$  رسم کردہایم.

حال تغییرات  $M$  را بر حسب  $\frac{\Omega}{2\Delta}$  و با فرض مقادیری برای  $\frac{\omega}{2\Delta}$  رسم می‌کنیم . و بررسی می‌کنیم که آیا در

این فرکانس‌های نوسانی، رقص محوری جوزفسون تاثیری بر جریان عبوری دارد؟



شکل ۴-۶- تغییرات ضریب  $M$  بر حسب  $\frac{\Omega}{2\Delta}$  و در به ازای  $\frac{\omega}{2\Delta} = 7$

در شکل (۶-۴) که تغییرات ضریب  $M$  بر حسب  $\frac{\omega}{2\Delta}$  رسم شده است مشاهده می‌شود علاوه بر اینکه در  $1 = \frac{\omega}{2\Delta} = 6$  و در  $7.0 = \frac{\omega}{2\Delta}$  ضریب  $M$  دارای واگرایی است، به ازای بعضی مقادیر  $\frac{\omega}{2\Delta}$  نیز، این ضریب  $M$  برابر صفر می‌شود و عملأً رقص محوری اسپین تک مولکول مغناطیسی تاثیری بر جریان عبوری ندارد.

#### ۴-۵- نتیجه گیری:

در این فصل روابط مربوط به جریان با در نظر گرفتن مدل پیشنهادی و رقص محوری اسپین تک مولکول مغناطیسی محاسبه شده است.

جریان عبوری از اتصال را به صورت مجموع دو جمله به دست آورده‌ایم. این دو جمله شامل جریان ابررسانایی و جریان نرمال هستند. برای هر ترم از جریان به صورت جداگانه اعمال اختلاف پتانسیل و یا عدم اعمال اختلاف پتانسیل به اتصال، در نظر گرفته شده و سپس جملات جریان حاصل شده است.

#### جریان نرمال در حضور اختلاف پتانسیل:

هنگامی که اسپین تک مولکول، حرکت رقص محوری جوزفسون را در اتصال ابررسانا- تک مولکول مغناطیسی - ابررسانا انجام میدهد، معادله جریان نرمال به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} I_s(t) &= I_0 - 4\pi e N_R N_L T_{\perp}^2 (M_4 + M_7) \cos(2\Omega t) \\ &- 4\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_1 - 2M_2 - 2M_3) \cos \omega t \\ &- 2\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_4 + M_7) \cos(2\Omega t) \cos \omega t \\ &- \pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_5 + M_8) \cos(\omega - 2\Omega)t \\ &- \pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M_6 + M_9) \cos(\omega + 2\Omega)t \end{aligned}$$

$$I_0 = -8\pi e N_R N_L [(T_0^2 + T_{\parallel}^2)] M_1$$

همانگونه که از رابطه بالا مشاهده می‌شود، جریان نرمال شامل جمله‌ای ثابت و جمله‌های نوسانی بر حسب فرکانس حرکت تقدیمی و فرکانس حرکت نوسانی می‌باشد. مقادیر  $M$  نیز در همین فصل تعریف شده اند. مقادیر  $M$  بر حسب توابع انتگرال بیضوی نوع اول و نوع دوم نوشته می‌شوند.

جریان نرمال را بر حسب اختلاف پتانسیل اعمالی به اتصال رسم کرده‌ایم.

مشاهده کردیم که قسمت ثابت جریان نرمال، تا مقدار  $1 = \frac{eV}{2\Delta}$  دارای مقدار صفر است. اما در  $1 = \frac{eV}{2\Delta}$  دارای جهش ناگهانی می‌شود و برای مقادیر بزرگتر  $\frac{eV}{2\Delta}$  به صورت شبیه دار تغییر می‌کند.

جریان نرمال را بر حسب زمان رسم کرده‌ایم، که تغییرات جریان نرمال به صورت نوسانی می‌باشد. جریان کل نوسانی است اما دامنه نوسان یکسان نیست که این پدیده به علت وجود دامنه نوسان  $R$  است.

جریان نرمال در غیاب اختلاف پتانسیل:

با توجه به گزارشات و کارهای قبلی در زمینه ترابرد بار واسپین در اتصال ابررسانا- تک مولکول مغناطیسی- ابررسانا، مشاهده می‌شود که مقدار جریان نرمال در غیاب اختلاف پتانسیل برابر صفر خواهد شد.

اما در مدل در نظر گرفته شده در این رساله، هنگامیکه تک مولکول حرکت رقص محوری جوزفسون دارد، در غیاب اختلاف پتانسیل، جریان نرمال برابر است با:

$$\begin{aligned} I_s(t) &= -4\pi e N_R N_L T_{\perp}^2 M'_7 \cos(2\Omega t) \\ &\quad - 8\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R M'_2 \cos \omega t \\ &\quad - 2\pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R M'_7 \cos(2\Omega t) \cos \omega t \\ &\quad - \pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R (M'_5 + M'_8) \cos(\omega - 2\Omega)t \\ &\quad - \pi e N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R M'_9 \cos(\omega + 2\Omega)t \end{aligned}$$

مقادیر  $M'$  نیز مقادیر  $M$  به ازای اختلاف پتانسیل صفر می‌باشند.

مشاهده می شود که جریان نرمال برابر صفر نمی شود، بلکه به ازای  $|\omega - \Omega| > 2\Delta$  حتماً جریان نرمال غیر صفر در اتصال برقرار خواهد شد.

می توان گفت که رقص محوری تک مولکول مغناطیسی یک جریان غیر صفر در اتصال پمپ می کند. لازم به توضیح است که سازو کار این پمپ شدن جریان در اتصال وهمچنین اثبات غیر صفر بودن جریان نرمال از نظر آزمایشگاهی، می تواند مورد بحث و بررسی قرار گیرد.

### جریان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل:

جریان جوزفسون در اتصال ابررسانا- تک مولکول مغناطیسی- ابررسانا و در حضور اختلاف پتانسیل به

شکل زیر به دست می آید:

اگر  $\frac{eV}{2\Delta} < 1$  آنگاه جریان جوزفسون برابر است با:

$$I_J(t) = I_0 - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{-\omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{-\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \right] \sin(\omega t - 2eVt + \varphi) \\ - 2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{\omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega - \Omega + eV}{2\Delta}\right) \right] \sin(\omega t + 2eVt \\ + \varphi)$$

۶

$$I_0 = -4e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ (T_0^2 - T_{\parallel}^2) K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2} T_{\perp}^2 \left( K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \right) \right] \sin(2eVt + \varphi) \\ - 4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ K\left(\frac{eV}{2\Delta}\right) + \frac{1}{2} \left( K\left(\frac{-\Omega + eV}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\Omega + eV}{2\Delta}\right) \right) \right] \cos \omega t \sin(2eVt + \varphi)$$

از جملات جریان بر می آید که جریان جوزفسون تابع انتگرال بیضوی نوع اول است. جملات سینوسی جریان جوزفسون علاوه بر اینکه تابعی از اختلاف فازدو ابررسانا هستند، تابعی از اختلاف پتانسیل و فرکانس نوسانی نیز می باشد.

توابع انتگرال بیضوی نوع اول نیز توابعی از فرکانس‌های تقدیمی و نوسانی و مجموع وتفاضل این فرکانس‌ها در حضور اختلاف پتانسیل می‌باشند.

اگر  $\frac{eV}{2\Delta} > 1$  آنگاه جریان جوزفسون به فرم زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned}
 I_J(t) = & -4e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ (T_0^2 - T_{\parallel}^2) \frac{2\Delta}{eV} K\left(\frac{2\Delta}{eV}\right) \right] \sin(2eVt + \varphi) \\
 & -2e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ T_{\perp}^2 \left( \left( \frac{2\Delta}{-\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\Omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{\Omega + eV}\right) \right) \right] \sin(2eVt + \varphi) \\
 & -4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \frac{2\Delta}{eV} K\left(\frac{2\Delta}{eV}\right) \right] \cos\omega t \sin(2eVt + \varphi) \\
 & -2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \left( \left( \frac{2\Delta}{-\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\Omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{\Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{\Omega + eV}\right) \right) \right] \cos\omega t \sin(2eVt + \varphi) \\
 & -2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \left( \frac{2\Delta}{-\omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{\omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{\omega + eV}\right) \right] \sin(\omega t - 2eVt + \varphi) \\
 & -2e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\parallel} T_{\perp} R \left[ \left( \frac{2\Delta}{-\omega - \Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{-\omega - \Omega + eV}\right) + \left( \frac{2\Delta}{+\omega - \Omega + eV} \right) K\left(\frac{2\Delta}{+\omega - \Omega + eV}\right) \right] \sin(\omega t + 2eVt + \varphi)
 \end{aligned}$$

جریان بر حسب معکوس توابع انتگرال بیضوی نوع اول به دست می‌آید.

**جریان جوزفسون در غیاب اختلاف پتانسیل:**

اگر در رابطه مربوط به جریان جوزفسون در حضور اختلاف پتانسیل، مقدار eV را برابر صفر قرار

دهیم، رابطه جریان به شکل زیر می‌شود:

$$I_J(t) = I_0 + I_1(t)$$

که در رابطه جریان جوزفسون:

$$I_0 = -4e\pi\Delta^2 N_R N_L \left[ (T_0^2 - T_{\parallel}^2) K(0) + T_{\perp}^2 K\left(\frac{\Omega}{2\Delta}\right) \right]$$

$$I_1(t) = -4e\pi\Delta^2 N_R N_L T_{\perp} T_{\parallel} R \sin(\omega t + \varphi) \left[ K(0) + K\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega + \Omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{+\omega - \Omega}{2\Delta}\right) \right]$$

با تعریف ضریب  $M$  به شکل زیر :

$$M = \left[ K(0) + K\left(\frac{\omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{\omega+\Omega}{2\Delta}\right) + K\left(\frac{+\omega-\Omega}{2\Delta}\right) \right]$$

همانگونه که مشاهده شده است، ضریب  $M$  بر حسب توابع انتگرال بیضوی نوشته می‌شود. تغییرات ضرایب  $M$  را بر حسب فرکانس‌های حرکت تقدیمی و نوسانی رسم نموده‌ایم.

در این شکلها مشاهده شده است که جریان در نقاط مختلف به علت تشديد واگرا می‌شود. و یا اينکه در بعضی نقاط نيز جریان جوزفسون برابر صفر می‌شود.

## پیوست

### پیوست الف: توابع گرین و توابع گرین ابررسانایی

#### الف - ۱- معرفی توابع گرین:

روش توابع گرین<sup>۱</sup>، روشی بسیار مفید در تئوری معادلات دیفرانسیل جزیی<sup>۲</sup> و حتی در معادلات دیفرانسیل معمولی است. این روش با بیشینه ای بسیار زیاد و کاربردهای فراوان می‌باشد. این روش هم در حوزه فیزیک کلاسیک و هم در حوزه مکانیک کوانتموی بسیار مورد استفاده قرار گرفته است. در این قسمت مختصرأً به معرفی توابع گرین در حل مسائل بس ذره ای می‌پردازیم.

#### الف-۲- توابع گرین ماتسوبارا:

گاهی ممکن است که در محاسبات با توابعی بر حسب زمان مختلط و یا توابعی بر حسب فرکانس‌های مختلط مواجه شویم، که بالطبع محاسبات در چنین حالاتی بسیار مشکل می‌نماید. بدین منظور، برای سهولت در محاسبات، ماتسوبارا<sup>۳</sup> توابع گرین خاصی را معرفی نمود که از این توابع و تبدیلات فوریه آنها در محاسبات بس ذره ای سود می‌جوییم[۴].

---

<sup>1</sup>-Green's function

<sup>2</sup>-partial differential equation

<sup>3</sup>-Matsubara Green's function

$$\mathcal{U}_{AB}(\tau, \tau') = -\langle T_\tau A(\tau)B(\tau') \rangle \quad (\text{الف-}1)$$

$\tau$  در رابطه فوق زمان مختلط است.

در رابطه<sup>(۱)</sup>) منظور از عبارت  $\langle \dots \rangle$  مقدار چشم داشتی گرمایی است [۱۲].

$$\langle a \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} a)$$

تبديل فوريه تابع گرين ماتسوبارا به شكل زير است:

$$\mathcal{U}_{AB}(i\omega) = - \int_0^\beta e^{i\omega(\tau-\tau')} \mathcal{U}_{AB}(\tau, \tau') \quad (\text{الف-}2)$$

$$\mathcal{U}_{AB}(\tau, \tau') = -\frac{1}{\beta} \sum_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(\tau-\tau')} \mathcal{U}_{AB}(i\omega) \quad (\text{الف-}3)$$

از تبديلات فوق در محاسبه جريان در حالتهای مختلف، در بخشهاي آتی استفاده خواهيم کرد.

الف-۳- توابع گرين تاخيري و پيشرتفه:

توابع گرين تاخيري<sup>(۱)</sup> و پيشرتفه<sup>(۲)</sup> نقش بسيار مهمی را در نظریه دمای غير صفر بازي می کنند.

اهمييت اين توابع بيشتر از اين حقيقت ناشي می شود که تمامی پaramترهاي قابل اندازه گيري، مانند

رسانش الکترونيکي در سистемهاي بر همکنشي الکتروني ، در واقع توابع همبسته<sup>(۳)</sup> تاخيري می-

باشنند [۱۴و۱۲].

هدف بسياري از محاسبات تعين توابع تاخيري است. اين کار به دو روش عده صورت می گيرد:

۱. توابع گرين تاخيري را از راه مستقيم و در زمان حقيقي و در دمای غير صفر محاسبه کnim که بسيار دشوار است.

---

<sup>1</sup>-retarded Green's function

<sup>2</sup>-advanced

<sup>3</sup>-correlation function

۲. توابع گرین را در فرکانس مختلط محاسبه نماییم و سپس با تبدیل  $i\omega \rightarrow \omega + i\delta$  که در آن  $\delta$

مقدار بسیار جزیی است، به محاسبه این توابع اقدام کنیم [۱۲].

تابع گرین تاخیری و پیشرفتہ به صورت زیر تعریف می شود:

$$G_{AB}^{ret}(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm} \rangle \quad (\text{الف-۴})$$

$$G_{AB}^{adv}(t, t') = (G_{AB}^{ret})^{\dagger}(t', t)$$

که در آن  $\langle \dots \rangle$  مقدار متوسط گرمایی است و:

$$[A(t), B(t')]_{\pm} = A(t)B(t') \pm B(t')A(t)$$

علامتهای  $+$   $-$  مربوط به عملگرهای فرمیونی (بوزونی) است [۱۲].

الف-۴- ارتباط توابع گرین تاخیری و توابع گرین ماتسوبارا:

همانگونه که در بخش‌های بالا گفتیم، توابع ماتسوبارا به دلیل اینکه در زمان و فرکانس مختلط تعریف

می شوند، صرفاً مفاهیمی ریاضی اند و ازنظر فیزیکی قادر به توجیه پدیده ها نمی‌باشند. از طرفی توابع گرین تاخیری و پیشرفتہ، کاملاً مفاهیم فیزیکی را توجیه می‌کنند.

به دنبال راهی هستیم تا از طریق سهولت توابع گرین ماتسوبارا به توجیه فیزیکی پدیده هادر توابع

گرین تاخیری بررسیم.

برای نیل به این هدف در تبدیل توابع ماتسوبارا به توابع تاخیری از تبدیل  $i\eta \rightarrow \omega + i\eta$  و در تبدیل

به توابع پیشرفتہ از تبدیل  $i\eta \rightarrow \omega - i\omega$  استفاده می‌کنیم.

الف-۵- توابع گرین ابررسانایی:

در این بخش به معرفی توابع گرین ابررسانایی می پردازیم.

همانطور که در فصل دوم اشاره شد ، اساس کار نظریه  $BCS$  بر پایه جفت شدگی الکترونهاست با اسپین و تکانه مخالف در کنار هم است. بدین گونه که یک الکترون در حالت  $(\uparrow, k)$  با الکترون دیگری در حالت  $(\downarrow, -k)$  جفت می شوند (جفت کوپر)، که عامل ابررسانایی آن است. جفت شدگی الکترونها در جفت های کوپر منجر به بروز همبستگی در حرکت آنها می شود. برای بیان همبستگی واثرات آن در تعیین جریان نیازمندیم که یک سری از توابع هم بسته جدید، برای ذرات با اسپین مخالف مانند توابع گرین معرفی کنیم [۴۵].

این توابع برای اولین بار توسط ابریکسوف<sup>۱</sup> در (۱۹۶۳) معرفی شدند [۴] :

$$\mathcal{F}_L^\dagger(p, \tau - \tau') = \langle T C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau) C_{L,-p,\downarrow}^\dagger(\tau') \rangle \quad (\text{الف-۵})$$

$$\mathcal{F}_R(k, \tau - \tau') = \langle T C_{R,-k,\downarrow}(\tau) C_{R,k,\uparrow}(\tau') \rangle \quad (\text{الف-۶})$$

اندیشهای  $R$  و  $L$  معرف سمت چپ و راست هستند.

اما در تونل زنی علاوه بر تونل زنی جفتهای کوپر از سیستم ابررسانا - تک مولکول مغناطیسی - ابررسانا با تونل زنی تک ذره(الکترون) در حالت عادی نیز مواجه ایم. بدین منظور توابع گرین عادی را به صورت زیر تعریف می نماییم:

$$\mathcal{G}_L(p, \tau' - \tau) = -\langle T C_{L,p,\downarrow}(\tau') C_{L,p,\downarrow}^\dagger(\tau) \rangle = -\langle T C_{L,p,\uparrow}(\tau') C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau) \rangle \quad (\text{الف-۷})$$

$$\mathcal{G}_R(k, \tau - \tau') = -\langle T C_{R,k,\downarrow}(\tau) C_{R,k,\downarrow}^\dagger(\tau') \rangle = -\langle T C_{R,k,\uparrow}(\tau) C_{R,k,\uparrow}^\dagger(\tau') \rangle \quad (\text{الف-۸})$$

---

<sup>۱</sup>-A.A.Abrikosov

این نکته قابل ذکر است که در حالت ابرسانایی توابع گرین عادی صفر می‌شوند و در حالت نرمال توابع گرین ابرسانایی صفر می‌شوند.

در ضمن همانگونه که در دمای بالا نظریه  $BCS$  اعتبار ندارد، توابع  $\mathcal{F}^\dagger$  و  $\mathcal{F}$  نیز صفر می‌شوند.

در روابط بالا  $T$  پارامتر زمان مرتب است که به شکل زیر تعریف می‌شود:

برای هر عملگر دلخواه:

$$T[V(t)V(t')] = \Theta(t - t')V(t)V(t') + \Theta(t' - t)V(t')V(t)$$

برای عملگرهای فرمیونی:

$$TC^\dagger(t)C^\dagger(t') = \Theta(t - t')C^\dagger(t)C^\dagger(t') - \Theta(t' - t)C^\dagger(t')C^\dagger(t)$$

که در این روابط  $\Theta(t - t')$  تابع پله‌ای است و به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$\Theta(t - t') = \begin{cases} 1 & t > t' \\ 0 & t < t' \\ \frac{1}{2} & t = t' \end{cases}$$

در این روابط زمانهای حقیقی  $t$  و  $t'$  اند.

بنابراین توابع گرین به شکل زیر در می‌آیند:

$$\mathcal{F}_L^\dagger(p, \tau - \tau') = \Theta(\tau - \tau')\langle C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau)C_{L,-p,\downarrow}^\dagger(\tau') \rangle - \Theta(\tau' - \tau)\langle C_{L,-p,\downarrow}^\dagger(\tau')C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau) \rangle$$

$$\mathcal{F}_R(k, \tau - \tau') = \Theta(\tau - \tau')\langle C_{R,-k,\downarrow}(\tau)C_{R,k,\uparrow}(\tau') \rangle - \Theta(\tau' - \tau)\langle C_{R,k,\uparrow}(\tau')C_{R,-k,\downarrow}(\tau) \rangle$$

## الف-۶- تبدیل فوریه توابع گرین:

در این بخش تبدیلات فوریه توابع گرین ابرسانابی را به شکل زیر تعریف می کنیم:

$$\mathcal{F}(k, \tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{i\varphi_n} e^{-i\varphi_n(\tau - \tau')} \mathcal{F}(k, i\varphi_n) \quad (\text{الف-۹})$$

$$\mathcal{F}(k, i\varphi_n) = \int_0^\beta \mathcal{F}(k, \tau - \tau') e^{i\varphi_n(\tau - \tau')} dt \quad (\text{الف-۱۰})$$

برای توابع عادی(نرمال) نیز:

$$\mathcal{G}(k, \tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{i\varphi_n} e^{-i\varphi_n(\tau - \tau')} \mathcal{G}(k, i\varphi_n) \quad (\text{الف-۱۱})$$

$$\mathcal{G}(k, i\varphi_n) = \int_0^\beta \mathcal{G}(k, \tau - \tau') e^{i\varphi_n(\tau - \tau')} dt \quad (\text{الف-۱۲})$$

روابط بالا نقش بسیار مهمی در تعریف انتشارگر<sup>۱</sup> ذرات در جریان تونل زنی دارند. انتشارگرها معمولاً به

شکل حاصل ضرب توابع گرین تعریف می شوند:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_L^\dagger(p, \tau - \tau') \mathcal{F}_R(k, \tau - \tau') &= \Theta(\tau - \tau') \langle C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau) C_{L,-p,\downarrow}^\dagger(\tau') \rangle \langle C_{R,-k,\downarrow}(\tau) C_{R,k,\uparrow}(\tau') \rangle \\ &\quad + \Theta(\tau' - \tau) \langle C_{L,-p,\downarrow}^\dagger(\tau') C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau) \rangle \langle C_{R,k,\uparrow}(\tau') C_{R,-k,\downarrow}(\tau) \rangle \end{aligned} \quad (\text{الف-۱۳})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_R(k, \tau' - \tau) \mathcal{G}_L(p, \tau - \tau') &= -\Theta(\tau - \tau') \langle C_{R,k,\uparrow}^\dagger(\tau) C_{R,k,\uparrow}(\tau') \rangle \langle C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau) C_{L,p,\uparrow}(\tau') \rangle \\ &\quad - \Theta(\tau - \tau') \langle C_{R,k,\uparrow}^\dagger(\tau) C_{R,k,\uparrow}(\tau) \rangle \langle C_{L,p,\uparrow}^\dagger(\tau') C_{L,p,\uparrow}(\tau) \rangle \end{aligned} \quad (\text{الف-۱۴})$$

---

<sup>1</sup>-propagator

الف-۷- توزیع تابع گرین ماتسوبارا بر حسب عدد اشغال:

پتانسیل در تصویر ماتسوبارا به شکل زیراست:

$$U_{kpk'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(i\omega_n) = \int_0^\beta dt e^{i\omega_n(t-t')} G_R^\sigma(k, t - t') G_L^{\sigma'}(p, t' - t) \quad (\text{الف-۱۵})$$

با آشنایی که از قبیل با تبدیلات فوریه این توابع داریم، پتانسیل ماتسوبارا به شکل زیر در می‌آید:

$$U_{kpk'p'}^{\sigma\sigma'\rho\rho'}(i\omega_n) = \frac{1}{\beta} \sum_{iq} G_R^\sigma(k, iq - i\omega) G_L^{\sigma'}(p, iq) \quad (\text{الف-۱۶})$$

می‌خواهیم بینیم که این توابع بر حسب انرژی ذرات و عدد اشغال<sup>۱</sup> گرمایی چه می‌شوند؟

توابع گرین ابریکوسوف را می‌توان بر حسب انرژی ذرات به صورت زیر نوشت:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} G_R^\sigma(k, iq - i\omega) G_L^{\sigma'}(p, iq) = \frac{n_f^\sigma(\xi_k) - n_f^{\sigma'}(\xi_p)}{i\omega + \xi_k - \xi_p} \quad (\text{الف-۱۷})$$

در رابطه فوق  $n_f$  عدد اشغال گرمایی الکترونی است که از آمار فرمی-دیراک پیروی می‌کند.  $\xi$  نیز

ویژه مقدار انرژی در سیستمهای بر همکنشی برای الکترونها است [۳ و ۴ و ۵].

برای به دست آوردن رابطه فوق از رابطه زیر شروع می‌کنیم:

$$G_L^{\sigma'}(p, iq) = -\frac{1}{iq - \xi_p}$$

روش به دست آوردن این رابطه به تفصیل در کتاب ماهان آمده است. و به همین دلیل از آوردن

جزییات بیشتر صرف نظر کرده ایم.

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} G_R^\sigma(k, iq - i\omega) G_L^{\sigma'}(p, iq) = \sum_{iq} F(iq)$$

جمع فوق را می‌توان به صورت انتگرال پربند زیر نوشت:

---

<sup>۱</sup>-number occupation

$$I = \oint \frac{dz}{2\pi i} n(z) F(z)$$

پربند را به صورت دایره ای به شعاع  $R$  در نظر می گیریم که:  $\infty \rightarrow R$

$n(z)$  تابعی است که می تواند قطبها را در  $iq$  ها تولید کند.

از آنجاکه فرمیونها و بوزونها به صورت آماری در قطبها قرار می گیرند، بنابراین  $n(z)$  تابع توزیع فرمی-دیراک برای فرمیونها و تابع توزیع بوز-اینستین برای بوزونها است.

مقدار انتگرال پربند فوق برابر است با مجموع مقادیر باقیمانده در قطبها:

$$I = \lim_{z \rightarrow z_0} R[F(z)n(z)]$$

که  $z_0$  همان قطبها هستند.

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} G_R^\sigma(k, iq - i\omega) G_L^{\sigma'}(p, iq) = \frac{1}{\beta} \sum_{iq} \frac{1}{iq - i\omega - \xi_k} \frac{1}{iq - \xi_p}$$

ابتدا خود  $n(z)$  نیز در فرکانس‌های  $i(2n + 1)\pi k_B T$  دارای قطب است و باقیمانده آن برابراست با

:

$$R_n = -\frac{1}{\beta} \sum_{iq} F(iq)$$

قطبها و باقیمانده‌های دیگر به ترتیب برابر با مقادیر زیر می‌باشند:

$$z_1 = \xi_p \rightarrow R_1 = \frac{n_f^{\sigma'}(\xi_p)}{\xi_p - i\omega - \xi_k}$$

$$z_2 = \xi_k + i\omega \rightarrow R_2 = \frac{n_f^\sigma(\xi_k)}{\xi_k + i\omega - \xi_p}$$

حال مجموع با قیمانده‌ها برابر انتگرال پربند است:

$$I = R_n + R_1 + R_2$$

از طرفی انتگرال در پربندی به شعاع  $R$  در نظر گرفته ایم. برای  $R \rightarrow 0$  مقدار انتگرال برابر صفر خواهد شد.

$$-\frac{1}{\beta} \sum_{iq} F(iq) + \frac{n_f^{\sigma'}(\xi_p)}{\xi_p - i\omega - \xi_k} + \frac{n_f^{\sigma}(\xi_k)}{\xi_k + i\omega - \xi_p} = 0$$

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} F(iq) = \frac{n_f^{\sigma}(\xi_k) - n_f^{\sigma'}(\xi_p)}{\xi_k + i\omega - \xi_p}$$

در نتیجه:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iq} G_R^{\sigma}(k, iq - i\omega) G_L^{\sigma'}(p, iq) = \frac{n_f^{\sigma}(\xi_k) - n_f^{\sigma'}(\xi_p)}{\xi_k + i\omega - \xi_p}$$

### پیوست ب: انتگرال های بیضوی:

در این بخش به معرفی انتگرال های بیضوی، انواع آنها و نحوه رفتار و تغییرات آنها خواهیم پرداخت.  
اگر  $R(x, y)$  تابعی گویا از  $x$  و  $y$  باشد، به طوریکه  $y^2$  چند جمله ای بر حسب توانهای دوم و یا حتی سوم متغیر  $x$  باشد. آنگاه انتگرال  $\int R(x, y) dx$ ، انتگرال بیضوی کامل نامیده می شود [۸ و ۷].

انتگرال بیضوی به سه نوع انتگرال تقسیم می شود:

#### ۱. انتگرال بیضوی نوع اول که به فرم زیر است:

$$\begin{aligned} K(k) &= \int_0^1 [(1-x^2)(1-k^2x^2)]^{-\frac{1}{2}} dx \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1-k^2 \sin^2 \varphi)^{-\frac{1}{2}} d\varphi \end{aligned}$$

#### ۲. انتگرال بیضوی نوع دوم:

$$E(k) = \int_0^1 (1-x^2)^{\frac{1}{2}} (1-k^2x^2)^{-\frac{1}{2}} dx$$

$$= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - k^2 \sin^2 \varphi) d\varphi$$

۳. انتگرال بیضوی نوع سوم:

$$\begin{aligned} K(k) &= \int_0^1 (1 - nx^2)^{-1} [(1 - x^2)(1 - k^2 x^2)]^{-\frac{1}{2}} dx \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - n \sin^2 \varphi)^{-1} (1 - k^2 \sin^2 \varphi)^{-\frac{1}{2}} d\varphi \end{aligned}$$

در این رساله توابع انتگرال بیضوی نوع اول و دوم از اهمیت بیشتری برخوردارند. بسط این توابع به

شکل زیر است:

$$K(k) = \frac{\pi}{2} \left\{ 1 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 k^2 + \left(\frac{1.3}{2.4}\right)^2 k^4 + \dots \right\} \quad (1-\text{ب})$$

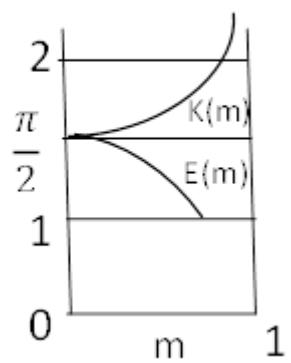
$$E(k) = \frac{\pi}{2} \left\{ 1 - \left(\frac{1}{2}\right)^2 k^2 - \left(\frac{1.3}{2.4}\right)^2 k^4 - \dots \right\} \quad (2-\text{ب})$$

از شکل توابع انتگرال بیضوی نوع اول و نوع دوم در روابط قبل واضح است که:

$$K(-k) = K(k)$$

$$E(-k) = E(k)$$

در انتهای نیز طرحواره‌ای از تغییرات این توابع را نشان خواهیم داد:



شکل ۱-۵- انتگرال‌های بیضوی کامل نوع اول و دوم

## مراجع و منابع

- [1] R.Simon and A.Smith, Superconductors (Plenum New York, 1988).
- [2] Andrei Mourachkine, Room Temperature Superconductivity (Cambridge, 2004).
- [3] Henrik Bruus and Karsten Flensberg, Introduction to Many-Body Quantum Theory In Condensed Matter Physics (2002).
- [4] Gerarld D.Mahan, Many Particle Physics (Plenum, New York 2000).
- [5] Alexander L.Fetter and John Drik Walecka, Quantum Theory of Many- Particle Systems (McGraw-Hill).
- [6] Milton Abramowitz and Irene A.Stegun, Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables (1972).
- [7] I.S.Gradshteyn and I.M.Ryzhik, Table Of Integrals, Series, and Products (Elsevier 2007).
- [8] J.V. Armitage, Elliptic Functions (Cambridge, 2007).
- [9] N.B. Kopnin, Theory of Superconductivity (2004).
- [10] C.Wang and C.Bai, Single Molecule Chemistry and Physics (Springer 2006).
- [11] D.M.P.Mingos and R.Winpenny Single Molecule Magnets Related Phenomena (Springer 2006).
- [12] U. Rosler, Solid State Theory: An Introduction (Springer 2009).
- [13] J-X.Zhu and A.V.Balatsky, Phys.Rev.**B** **67**174505 (2003).
- [14] C.Holmqvist, S.Teber, M.Houzet,D.Feinberg and M.Fogelstrom, J. Phys. Con.Ser.**150**022027(2009).
- [15] D.Gatteschi and R.Sessoli, Angew. Chem.Int.E.D.**42** 268 (2003).
- [16] S.Teber, C.Holmqvist and Fogelstrom, Phys.Rev.B **81**,174503 (2010).
- [17] V. Ambegaokar, and A.Baratoff,Phys.Rev.Lett.**10**, 486 (1962); (E) **11**, 104 (1963).
- [18] J. V. Slageren. Introduction to Molecular Magnetism. Retrieved March 4, (2010).
- [19] Barbara et al., J. Magn. Magn.Mater.**200**, 167(1999).
- [20] J.-X. Zhu, Z. Nussinov, A. Shnirman and A. V. Balatsky, Phys. Rev. Lett. **92** 107001 (2004).

## **Abstract:**

In this thesis the charge and spintransport has been investigated in a Superconductor-Single Molecule Magnet- Superconductor (S-SMM-S) junction. The transport theory is a beneficial approach to study the physical properties of a single molecule. In this work, we have obtained the charge current in a S-SMM-S junction. By considering the SMM as a classical vector, we can eliminate the quantum effects of it. We have considered a Josephson nutation for the spin of SMM. The Josephson nutation is a precession of spin because of its interaction with the transparent electron. In the precession the spin has a rotation around the magnetic field (with frequency  $\Omega$ ) and an oscillation with frequency  $\omega$ . Working in the tunnelling limit and making use of Green's functions we have calculated the current flows in this junction in the presence and absence of a bias voltage. The current flows have been obtained in terms of elliptic integrals. As an interesting result, we found that the oscillations  $\omega$  modulate the current and the modulations disappear when  $\omega$  is zero. Indeed in particular values of  $\omega$  and  $\Omega$ , a resonance occurs in the current and consequently the amplitude of the current will diverge.

**Keywords:** Superconductivity, Single molecule magnet, Josephson junction, Tunnelling current, Green's function, Josephson nutation.



**Shahrood University of Technology**  
**Faculty of Physics**

## **Master of Science Thesis**

### **Charge and spin Transport in Superconductor - Single MoleculeMagnet -Superconductor Junction**

**Ali Ahangari Rostami**

Supervisor:  
**Dr. Jahanfar Abouie**

Advisor:  
**Dr. Babak Abdollahipour**

**September – 2011**

