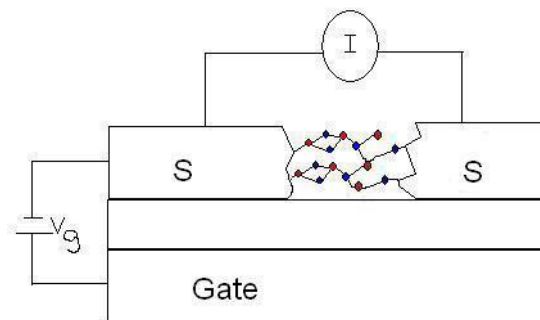


# Superstrømmen gennem henholdsvis en og to molekylære transistorer

and Settings/Computer/Dokumenter/Billeder/opstilling2dots2.jpg



Figur 1: Modellen

Rasmus B. Christensen  
cpr.nr.: 050984-2523

Vejleder: Brian Møller Andersen, Niels Bohr Institutttet, Kbh.s Universitet

18. juni 2008

## Resumé

This bachelor project begins with briefly describing the phenomenon of super conductivity and which symmetry is broken in connection with the phase transition from the normal phase to the super conducting phase. The starting point for calculating the Josephson current is the BCS Hamiltonian, the most important aspects of BCS theory has briefly been described. The main emphasis of this project lies on calculating the Josephson current through a Josephson junction. To begin with the current for a junction formed by a solitary molecular transistor is calculated. This molecular transistor is described by a single localized energy level. The first step in this calculation is to derive how the current can be expressed as a sum of Matsubara Green's functions. Since the Hamiltonian is quadratic it is possible to find the needed Matsubara Green's functions by using the equation of motion technique. Hereby an expression for the current described as a sum of Matsubara Green's functions is reached. In case of a weak coupling in relation to the energy level in the transistor an analytic result for the critical current is derived. The sum in the current phase relation is calculated numerically in Mathematica after having considered if and how fast it converges. The result is compared to the result one gets by considering the same junction, but by using another method of calculation based upon the free energy. Subsequently the possibility of a Coulomb interaction in the transistor is added and to get a quadratic Hamiltonian this is done by a mean field approximation. Even though this Coulomb interaction is not suitable for mean field theory since only two electrons enter into it, the method is still sufficient to observe the so called  $\pi$ -junction. Finally a junction consisting of two molecular transistors again without the possibility of Coulomb interaction is considered and the current phase relation is numerically calculated. Some of the algebraic calculations have been placed in an appendix. Furthermore the plots which have been used as argumentation for convergence of the sum in the current phase relation have also been placed in an appendix together with other plots which have not found their way into the project.

# Indhold

0.1	Introduktion . . . . .	2
0.1.1	Kort om superledning . . . . .	2
0.2	De vigtigste aspekter af BCS teori . . . . .	2
0.3	Restriktioner for strøm fase forholdet . . . . .	3
0.4	Josephson strømmen gennem en molekylær transistor . . . . .	4
0.4.1	Modellen . . . . .	4
0.4.2	Strømmen i den venstre superleder . . . . .	5
0.4.3	Numerisk udførelse af summen . . . . .	10
0.4.4	plots . . . . .	11
0.5	En molekylær transistor med Coulomb vekselvirkning . . . . .	12
0.5.1	Modellen . . . . .	13
0.5.2	Numerisk udregning og konvergens . . . . .	14
0.6	Josephson strømmen gennem to molekylære transistorer . . . . .	15
0.6.1	Modellen . . . . .	15
0.6.2	Strømmen i den venstre superleder . . . . .	16
0.6.3	Numerisk udførelse af summen . . . . .	18
0.7	Konklusion og diskussion . . . . .	19
0.8	Appendiks A . . . . .	21
0.9	Appendiks B . . . . .	22
0.10	Appendiks C: evaluering af Matsubara summer . . . . .	25
0.11	Appendiks D . . . . .	27
0.11.1	Konvergens for en transistor . . . . .	27
0.11.2	Konvergens for en transistor med $U \neq 0$ . . . . .	28
0.11.3	Konvergens for to transistorer . . . . .	29
0.12	Appendiks E plots til to transistorer . . . . .	30
0.13	Appendiks F . . . . .	31

## 0.1 Introduktion

I 1962 forudsagde Brian Josephson, at der mellem to svagt koblede superledere, adskilt af et isolerende lag, også kaldet en Josephson kontakt, ville løbe en strøm, kaldet Josephson strømmen. Dette blev eksperimentelt eftervist af Anderson og Rowell i 1963, og har siden vist sig at have mange anvendelsesmuligheder. En af de mest simple er den såkaldte SQUID. En SQUID består af to parallelt koblede Josephson kontakter, og kan bruges til at måle selv meget små magnetfelter. I dette bachelorprojekt vil vi udregne den strøm, der løber i en Josephson kontakt, når det isolerende lag udgøres af henholdsvis en og to molekylære transistorer.

### 0.1.1 Kort om superledning

Inden vi udregner Josephson strømmen, må vi først have styr på hvad der menes med, at et materiale er superledende. Nogle materialer oplever en faseovergang, når de bliver kølet ned under en kritisk temperatur ( $T_c$ ), der er specifik for det enkelte materiale, og vi siger, at de kommer i den superledende fase. At være i den superledende fase er forbundet med to ting; først, som navnet antyder, er materialet superledende, dvs. at den elektriske modstand er nul. Derudover udviser materialet perfekt diamagnetisme. Dette betyder, at et ydre magnetfelt ikke kan gennemtrænge materialet. Til en faseovergang hører et symmetribrud og en ordensparameter. For en superleder er det Gauge symmetrien, der bliver brudt, og den tilhørende ordensparameter er en kompleks fase  $|\psi|e^{i\phi}$ , hvor  $|\psi|$  er densiteten af superledende elektroner. Bruddet på Gauge symmetrien kommer til udtryk ved, at over  $T_c$  er  $\phi$  fri til at tage en hvilken som helst værdi, men under  $T_c$  er  $\phi$  den samme over hele prøven.

## 0.2 De vigtigste aspekter af BCS teori

Grundlaget for en kvatemekanisk teori for superledning blev lagt af Bardeen, Cooper og Schrieffer i 1957, den såkaldte BCS teori. Grundtilstanden for en Fermi gas af ikke-vekselvirkende elektroner, er et fyldt Fermi hav, der er fyldt op kun ved hjælp af Paulis eksklusionsprincip. Denne tilstand tillader vilkårligt små excitationer, og vi kan lave en exciteret tilstand ved at tage en elektron fra Fermioverfladen og hæve den lige op over Fermioverfladen. BCS teorien viser, at en attraktiv vekselvirkning mellem tidsomvendte tilstande nær Fermioverfladen vil resultere i en ny grundtilstand med en lavere energi, dette er vores BCS grundtilstand. Det centrale ved denne grundtilstand er, at enkeltpartikeltilstandene er fyldt op parvis. Hvis  $|\bar{k} \uparrow\rangle$  er optaget, er  $|\bar{k} \downarrow\rangle$  det også. Sådanne par kaldes Cooper par. Cooper par har et heltalligt spin (0), og har derfor mange egenskaber tilfælles med bosoner. Der kan være forskellige årsager til den attraktive vekselvirkning mellem Cooper par. Den positive vekselvirkning kan f.eks. komme fra, at en nega-

tivt ladet elektron trækker i de positive ladede ioner i gitteret og derfor deformerer det. Denne deformation bliver så følt af den tidsomvendte partner og kan derfor lede til en phonon medieret effektiv positiv tiltrækning mellem de to elektroner. Dette fører os til følgende Hamilton operator:

$$H_{BCS} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{kk'} V_{kk'} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger c_{-k'\downarrow} c_{k'\uparrow} \quad (1)$$

Hvor  $V_{kk'} = -V < 0$  for tilstande med energien  $|\epsilon_k|, |\epsilon_{k'}| < \omega_D$  og nul ellers. Vi antager nu, at paroperatoren  $c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger$  har en endelig forventningsværdi  $\langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle \neq 0$  og fluktuationerne omkring denne værdi er små, så vi kan lave en middelfelts approksimation.

Derved får vi den kvadratiske Hamilton:

$$H_{BCSMF} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger - \sum_k \Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger - \sum_k \Delta_k^* c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \quad (2)$$

hvor  $\Delta_k = -\sum_{kk'} V_{kk'} \langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle$  og  $\sum_{kk'} V_{kk'} \langle c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \rangle \langle c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger \rangle$  er konstant og bliver fjernet ved at flytte nulpunktet for energien

Det viser sig, at vores Hamilton operator i (2) ikke er Gauge invariant, og vi får derfor en kompleks fase.  $e^{-i\phi}$ . Det er denne fase, der er skyld i, at der kommer en superstrøm mellem to supeledere, der er forbundet af noget ikke-supeledende.

$$H_{BCS}^{MF} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger - \sum_k \Delta_k e^{-i\phi} c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger - \sum_k \Delta_k^* e^{i\phi} c_{k\uparrow} c_{-k\downarrow} \quad (3)$$

### 0.3 Restriktioner for strøm fase forholdet

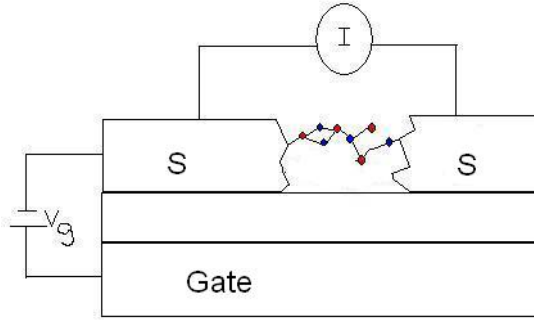
Inden vi giver os til at regne på en Josephson kontakt, er det godt at gøre sig nogle generelle overvejelser, om hvad vores strøm fase forhold må opfylde. Den grundlæggende årsag til Josephson strømmen er forskellen på den komplekse fase for de to supeledere i vores kontakt. Strømmen er derfor en funktion af  $(\theta = \phi_l - \phi_r)$ , og da  $e^{i\theta} = e^{i\theta+2\pi}$ , må det gælde, at:  $I(\theta) = I(\theta + 2\pi)$ . En ændring af retningen af Josephson strømmen må forårsage et fortegnsskift af faseforskellen, og det gælder derfor:  $I(\theta) = -I(\theta)$ . Af disse to krav til  $I(\theta)$  følger også, at  $I(0) = 0$ .

## 0.4 Josephson strømmen gennem en molekylær transistor

### 0.4.1 Modellen

Vi starter med at betragte to superledere, som er forbundet via en enkel molekylær transistor, der er beskrevet ved et enkelt lokaliseret energiniveau . Vi vil her se bort fra Coulomb vekselvirkninger i den molekylære transistor. Endvidere har vi en gate, som kun har til hensigt at kunne variere energien på transistoren ( $\xi$ )

and Settings/Computer/Dokumenter/Billeder/opstilling1dot.jpg



Figur 2: skematisk billede af den opstilling, der er beskrevet af modellen.

Vores model for Hamiltonian operatoren er givet ved:

$$H = H_L + H_R + H_M + H_t \quad (4)$$

Hvor  $H_{L,R}$  er  $BCS_{MF}$  Hamilton operatoren som er beskrevet i forrige afsnit for henholdsvis den venstre og højre superleder.

$$H_\alpha = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\alpha} c_{k\alpha\sigma} c_{k\alpha\sigma}^\dagger - \sum_k \Delta_k c_{k\alpha\uparrow}^\dagger c_{-k\alpha\downarrow}^\dagger - \sum_k \Delta_k^* c_{k\alpha\uparrow} c_{-k\alpha\downarrow} \quad (5)$$

Hvor  $\Delta_\alpha$  er funktionen for det komplekse gab defineret ved:  $\Delta_\alpha = |\Delta_\alpha| e^{i\phi_\alpha}$

Den molekylære transistor beskriver vi som et enkelt lokaliseret energiniveau, hvor der i første omgang ses bort fra Coulomb vekselvirkning. Derved får vi, at  $H_M$  er givet ved:

$$H_M = \xi(d_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow}) \quad (6)$$

Endelig har vi Hamilton operatoren, der beskriver muligheden for tunnelering, og som er givet ved:

$$H_T = H_{T,L}^+ + H_{T,L}^- + H_{T,R}^+ + H_{T,R}^- \quad (7)$$

Hvor  $H_{T,\alpha}^+ = (H_{T,\alpha}^-)^{\dagger}$  og:

$$H_{T,\alpha}^- = \sum_k t_{k\alpha} c_{k\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + t_{k\alpha} c_{k\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} \quad (8)$$

## 0.4.2 Strømmen i den venstre superleder

Vi ønsker at beregne strømmen i den venstre superleder. Strømmen er givet ved ændringen af antal af elektroner i lederen ganget med ladningen af en elektron:  $I_L = e \cdot \dot{N}_L$ , hvor  $N_L = \sum_{k\sigma} c_{kL\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma}$ . For ikke at forvirre mere end højst nødvendig sætter vi  $e = 1$ . Strømmen er nu givet ved:

$$I = i\langle [H, N_L] \rangle \quad (9)$$

$$i\langle [H, N_L] \rangle = i\langle [H_L, N_L] \rangle + i\langle [H_R, N_L] \rangle + i\langle [H_M, N_L] \rangle + i\langle [H_T, N_L] \rangle \quad (10)$$

Den eneste del af Hamilton operatoren, der ikke ombytter med  $N_L$  er  $H_{TL}$  (dette ses let fordi, hvis der ikke er nogen tunnelering, kan der ikke løbe nogen strøm, da den ikke har noget sted at løbe hen). Vi udregner nu  $i[H_T, N_{\alpha}]$ :

$$\begin{aligned} i[H, N_L] &= i[H_{TL}, N_L] \\ &= i \sum_{kk'\sigma\sigma'} t_{kL} c_{kL\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} c_{k'L\sigma'}^{\dagger} c_{k'L\sigma'} + t_{kL}^* d_{\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma} c_{k'L\sigma'}^{\dagger} c_{k'L\sigma'} - c_{k'L\sigma'}^{\dagger} c_{k'L\sigma'} t_{kL} c_{k\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} - c_{k'L\sigma'}^{\dagger} c_{k'L\sigma'} t_{kL}^* d_{\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma} \\ &= i \sum_{k\sigma} t_{kL} (c_{kL\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} [c_{kL\sigma}^{\dagger}, c_{kL\sigma}]) + t_{kL}^* ([c_{kL\sigma} c_{kL\sigma}^{\dagger}] d_{\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma}) \\ &= i \sum_{k\sigma} t_{kL} (c_{kL\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} (c_{kL\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma} - 1 + c_{kL\sigma}^{\dagger}, c_{kL\sigma})) + t_{kL}^* (1 - c_{kL\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma} - c_{kL\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma}) d_{\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma} \\ &= i \sum_{k\sigma} t_{kL}^* d_{\sigma}^{\dagger} c_{kL\sigma} - t_{kL} c_{kL\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} = H_{TL}^+ - H_{TL}^- \end{aligned}$$

Og da  $H_{T,L}^+ = (H_{T,L}^-)^{\dagger}$  har vi:

$$I_L = i(\langle H_{TL}^+ \rangle - \langle H_{TL}^- \rangle) = 2Im\langle H_{TL}^- \rangle \quad (11)$$

Strømmen kan nu skrives som en sum af Matsubara Greens funktioner, hvor vi lader  $\tau$  gå mod nul fra oven:

$$I_L = 4 \sum_k im(\langle t_{kL} c_{kL\uparrow}^\dagger(\tau \rightarrow 0^+) d_\uparrow(0) \rangle) \quad (12)$$

(Der er kommet en ekstra faktor to på grund af de to muligheder vi har for at vælge vores spin)

### Bevægelsesligningsmetoden

Da vores Hamilton operator er kvadratisk, kan vi løse problemet ved hjælp af bevægelsesligningsmetoden.

Vi definerer:

$$G_{AB}(\tau) = -\langle \theta(\tau) A(\tau) B - \theta(-\tau) B A(\tau) \rangle \quad (13)$$

hvor A og B tilhører  $\{c_{k\alpha\sigma}, c_{k\alpha\sigma}^\dagger, d_\sigma, d_\sigma^\dagger\}$  og hvor  $\alpha = (L, R)$  og  $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$   
Vi skal nu beregne  $-\frac{d}{d\tau} G(\tau)$

$$-\frac{d}{d\tau} G(\tau) = \delta(\tau) \delta(A, B^\dagger) + \langle \theta(\tau) [H, A](\tau) B^\dagger - \theta(-\tau) B^\dagger [H, A](\tau) \rangle$$

Vi løser differentiaalligningen ved at Fourier-transformere, og får derved

$$-i\omega_n G(\omega) = \delta(A, B^\dagger) + G_{[H,A],B}(\omega) \quad (14)$$

$$-i\omega_n G(\omega) - G_{[H,A],B}(\omega) = \delta(A, B^\dagger) \quad (15)$$

For at kunne opskrive vores bevægelsesligninger, skal vi først udregne nogle kommentatorrelationer:

$$[H, A] = [H_L, A] + [H_R, A] + [H_M, A] + [H_t, A]$$

$$\begin{aligned} [H_\alpha, A] &= \epsilon_{k\alpha} (\delta(c_{k\alpha\sigma}^\dagger, A) c_{k\alpha\sigma}^\dagger - \delta(c_{k\alpha\sigma}, A) c_{k\alpha\sigma}) \\ &\quad + \Delta_\alpha (\delta(c_{k\alpha\uparrow}, A) c_{-k\alpha\downarrow}^\dagger - \delta(c_{-k\alpha\downarrow}, A) c_{k\alpha\uparrow}^\dagger) \\ &\quad + \Delta_\alpha^* (\delta(c_{-k\alpha\downarrow}^\dagger, A) c_{k\alpha\uparrow} - \delta(c_{k\alpha\uparrow}^\dagger, A) c_{-k\alpha\downarrow}) \end{aligned}$$

$$[H_M, A] = \xi (\delta(d_\sigma^\dagger, A) d_\sigma^\dagger - \delta(d_\sigma, A) d_\sigma)$$



$$\begin{aligned}
[H_T, A] &= t_{k\alpha}^* \delta(c_{k\alpha\sigma}^\dagger, A) d_\sigma^\dagger - t_{k\alpha} \delta(c_{k\alpha\sigma}, A) d_{\alpha\sigma} \\
&+ \sum_k t_{k\alpha} \delta(d_\sigma^\dagger, A) c_{k\alpha\sigma}^\dagger - \sum_k t_{k\alpha}^* \delta(d_\sigma, A) c_{k\alpha\sigma}
\end{aligned}$$

(hvis der står  $\alpha$  eller  $\sigma$  skal der summeres over begge muligheder)

Vi kan nu opskrive vores bevægelsesligninger:

$$\begin{aligned}
(1) G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) : \\
- (i\omega_n + \epsilon_{kL\downarrow}) G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + \Delta_L^* G(c_{-kL\downarrow}, d_\uparrow) - t_{kL}^* G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2) G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) : \\
- (i\omega_n + \xi) G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) - \sum_{k\alpha} t_{k\alpha} G(c_{k\alpha\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) = 1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(3) G(c_{-kL\downarrow}, d_\uparrow) : \\
(-i\omega_n + \epsilon_{-kL\downarrow}) G(c_{-kL\downarrow}, d_\uparrow) + \Delta_L G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + t_{-kL} G(d_\downarrow, d_\uparrow) = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(4) G(d_\downarrow, d_\uparrow) : \\
- (i\omega_n - \xi) G(d_\downarrow, d_\uparrow) + \sum_{k\alpha} t_{k\alpha}^* G(c_{k\alpha\downarrow}, d_\uparrow) = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(5) G(c_{kR\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) : \\
- (i\omega_n + \epsilon_{kR\downarrow}) G(c_{kR\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + \Delta_L^* G(c_{-kR\downarrow}, d_\uparrow) - t_{kR}^* G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(6) G(c_{-kR\downarrow}, d_\uparrow) : \\
(-i\omega_n + \epsilon_{-kR\downarrow}) G(c_{-kR\downarrow}, d_\uparrow) + \Delta_L G(c_{kR\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + t_{-kR} G(d_\downarrow, d_\uparrow) = 0
\end{aligned}$$

For at gøre det mere overskueligt, indfører vi nogle forsimplinger. Vi siger, at de to superledere er ens og vi bruger bredbåndsapproximationen:  $\Gamma = 2\pi d(k) t_k^2$  er konstant. Ved at løse ligningssystemet for  $G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow)$  (dette er gjort i Appendiks A), får vi:

$$G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) = \frac{-t(e^{i\theta} \Delta \Sigma_2^* + (\epsilon_k - i\omega_n)(\Sigma_1^* - (\xi - i\omega_n)))}{D(\omega_n)(\epsilon_k^2 + \omega^2 + \Delta^2)} \quad (16)$$

Hvor  $\Sigma_1^*$  er givet ved:

$$\Sigma_1^* = \sum_k t^2 \frac{2(\epsilon_k + i\omega_n)}{\omega_n^2 + \epsilon^2 + \Delta^2} = \frac{i\omega_n \Gamma}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (17)$$

og  $\Sigma_2^*$  er givet ved:

$$\Sigma_2^* = \sum_k t^2 \frac{\Delta(1 + e^{-i\theta})}{\omega_n^2 + \epsilon^2 + \Delta^2} = \frac{\Gamma \Delta(1 + e^{-i\theta})}{2\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (18)$$

og endelig  $D(\omega_n)$  er givet ved:

$$D(\omega_n) = \omega_n^2 \left(1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}\right)^2 + \xi^2 + \frac{\Delta^2 \Gamma^2 \cos^2(\theta/2)}{\omega_n^2 + \Delta^2} \quad (19)$$

Vi kan nu Fourier-transformere tilbage:

$$G_{c_{kL\uparrow}, d_{\uparrow}}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau / \beta} G_{c_{kL\uparrow}, d_{\uparrow}}(\omega_n) \quad (20)$$

Så vores udtryk for strømmen i den venstre superleder bliver:

$$I_L = -4Im \left( \sum_k t \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau / \beta} G_{c_{kL\uparrow}, d_{\uparrow}}(\omega_n) \right) \quad (21)$$

Da dimensionerne af superlederen er meget store set ud fra et kvantemekanisk synspunkt, kan vi udføre k-summen ved at konvertere den til et integral over  $\epsilon_k$ .

$$\begin{aligned} \sum_k t G_{c_{kL\uparrow}, d_{\uparrow}} &= \frac{-1}{D(\omega_n) 2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon 2\pi d(\epsilon) t^2 \frac{(e^{i\theta} \Delta \Sigma_2^* + (\epsilon - i\omega_n)(\Sigma_1^* - (\xi - i\omega_n)))}{(\epsilon^2 + \omega^2 + \Delta^2)} \\ &= \Gamma \frac{e^{i\theta} \Delta \Sigma_2^* - i\omega_n(\Sigma_1^* - (\xi - i\omega_n))}{D(\omega_n) 2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon \frac{1}{\epsilon^2 + \omega^2 + \Delta^2} \end{aligned}$$

Da integralet er symmetrisk har vi set bort fra alle de ulige led. Integralet kan evalueres ved hjælp af:

$$\lim_{D \rightarrow \infty} \left( \int_{-D}^D \frac{1}{x^2 + a^2} \right) = \lim_{D \rightarrow \infty} \left( \left[ \frac{\tanh(x^2 + a^2)}{a} \right]_{-D}^D \right) = \frac{\pi}{a} \quad (22)$$

Her ved får vi:

$$\frac{-\Gamma}{2D(\omega)} \left( \frac{\Gamma \Delta^2 (e^{i\theta} + 1)}{2(\omega_n^2 + \Delta^2)} - \frac{\omega_n^2 \Gamma}{\omega_n^2 + \Delta^2} + \frac{\omega_n^2 + i\omega_n \xi}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \right) \quad (23)$$

Da vores sum over  $\omega_n$  er symmetrisk, kan vi smide alle ulige led væk, og da vi kun skal bruge imaginærdelen, kan vi også se bort fra samtlige reelle led. Vi får således, at strømmen er givet ved:

$$I_L = Im \left( \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \frac{\Gamma^2 \Delta^2 e^{i\theta}}{(\omega_n^2 + \Delta^2) D(\omega_n)} \right) \quad (24)$$

$$= \sin \theta \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{\Gamma^2 \Delta^2}{(\omega_n^2 + \Delta^2) D(\omega_n)} \quad (25)$$

For en svag kobling mellem superlederne og transistoren i forhold til energiniveauet af transistoren, dvs.  $\Gamma \ll \xi$  kan vi udføre summen analytisk. Dette gør vi ved, at sætte  $\Gamma = 0$  i vores udtryk for  $D(\omega_n)$  og vores udtryk for strømmen bliver således:

$$I_L = Im \left( \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \frac{\Gamma^2 \Delta^2 e^{i\theta}}{(\omega_n^2 + \Delta^2)(\omega_n^2 + \xi^2)} \right)$$

$$I_L = \sin(\theta) \left( \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \frac{\Gamma^2 \Delta^2}{(\omega_n^2 + \Delta^2)(\omega_n^2 + \xi^2)} \right)$$

$$I_L = \sin(\theta) I_c$$

Vi ser, at for  $\Gamma \ll \xi$  er  $I_L$  proportional med  $\sin(\theta)$ .

Vi kan nu finde den kritiske strøm ved at omskrive summen til en sum over fire led med simple poler:

$$F(i\omega) = \frac{\Gamma^2 \Delta^2}{(\omega_n^2 + \Delta^2)(\omega_n^2 + \xi^2)}$$

$$= \Gamma^2 \Delta^2 \frac{1}{\Delta^2 - \xi^2} \left( \frac{1}{\omega_n^2 + \Delta^2} - \frac{1}{\omega_n^2 + \xi^2} \right)$$

$$= \Gamma^2 \Delta^2 \frac{1}{\Delta^2 - \xi^2} \left( \frac{1}{2\Delta} \left( \frac{1}{\Delta - i\omega} + \frac{1}{\Delta + i\omega} \right) - \frac{1}{2\xi} \left( \frac{1}{\xi - i\omega} + \frac{1}{\xi + i\omega} \right) \right)$$

Fra Appendix C har vi nu, at summen nu kan udføres ved hjælp af:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} F_j(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} = Res [F(z)] n_f(z_{pol}) e^{\tau z_{pol}}$$

Hvor  $n_F = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}$  er Fermi distributionsfunktionen.

Da hvert led kun har en simpel pol, kan vi skrive residuerne direkte op:

$$Res(\Delta) = Res(-\Delta) = \frac{1}{2(\Delta^2 - \xi^2)\Delta} \text{ og } Res(\xi) = Res(-\xi) = -\frac{1}{2(\Delta^2 - \xi^2)\xi}.$$

Vi kan nu skrive summen som:

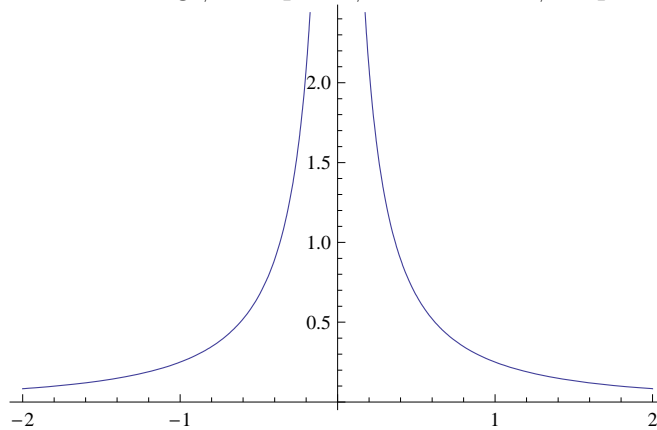
$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \frac{\Gamma^2 \Delta^2 e^{i\theta}}{(\omega_n^2 + \Delta^2)(\omega_n^2 + \xi^2)} \right) \\ &= \text{Res}[\Delta] * \frac{e^{\tau\Delta}}{e^{\beta\Delta} + 1} + \text{Res}[-\Delta] * \frac{e^{-\tau\Delta}}{e^{-\beta\Delta} + 1} + \text{Res}[\xi] * \frac{e^{\tau\xi}}{e^{\beta\xi} + 1} + \text{Res}[-\xi] * \frac{e^{-\tau\xi}}{e^{-\beta\xi} + 1} \\ &= \frac{1}{2(\Delta^2 - \xi^2)\Delta} \left( \frac{e^{\tau\Delta}}{e^{\beta\Delta} + 1} + \frac{e^{-\tau\Delta}}{e^{-\beta\Delta} + 1} \right) + \frac{1}{2(\Delta^2 - \xi^2)\xi} \left( \frac{e^{\tau\xi}}{e^{\beta\xi} + 1} + \frac{e^{-\tau\xi}}{e^{-\beta\xi} + 1} \right) \end{aligned}$$

lader vi nu  $\tau$  gå mod nul og flyttes der lidt rundt på tingene, får vi:

$$I_c(\xi) = \frac{\Gamma^2}{2[1 - (\xi/\Delta)^2]} \left( \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{\xi} - \frac{\tanh(\beta\Delta/2)}{\Delta} \right) \quad (26)$$

Vi bemærker, at udtrykket divergerer for  $\xi = 0$ , som det også ses af figur:(3). Dette kan ikke have nogen fysisk mening, da det ville betyde, at hvis vi tunedede  $\xi$  rigtigt, ville vi få en strøm, der kunne blive vilkårligt stor. Dette ville igen betyde, at der ville blive genereret et magnetfelt, der også ville gå mod uendelig, og det ville føre til, at vores to superledere ville komme ud af den superledende fase. Dette kan enten skyldes den approksimation, vi har lavet eller at der er en fejl i vores model; f.eks. at vi ikke har taget hensyn til Coulomb vekselvirkning i transistoren.

and Settings/Computer/Dokumenter/IC.pdf



Figur 3: Plot af  $I_c$ . Ud af y-aksen har vi  $\frac{I_c}{\Gamma^2}$ , og ud af x-aksen har vi  $\frac{\xi}{\Delta}$ .

### 0.4.3 Numerisk udførelse af summen

Som nævnt ovenfor ønsker vi at finde ud af, om det er vores approksimation, der gør at  $I_c$  divergerer, og dels vil vi godt vide hvordan strømmen opfører sig, når

det ikke gælder, at  $\Gamma \ll \xi$ . Derfor udfører vi summen numerisk ved at sætte (25) ind i Mathematica, og beder den om at beregne summen op til en endelig værdi af  $\omega_n$ . Men før vi gør dette, er der to ting vi skal have styr på. Først og fremmest skal vi være sikre på, at summen konvergerer, og dels skal vi have styr på hvor mange led, det er nødvendigt at tage med for at få et fornuftigt bud på summen.

### Konvergens

Det ses let, at der må findes et endeligt tal  $M$ , så:

$$\frac{\Gamma^2 \Delta^2}{(\omega_n^2 + \Delta^2) D(\omega_n)} < \frac{M}{\omega_n^4} < \frac{M}{n^4} \quad (27)$$

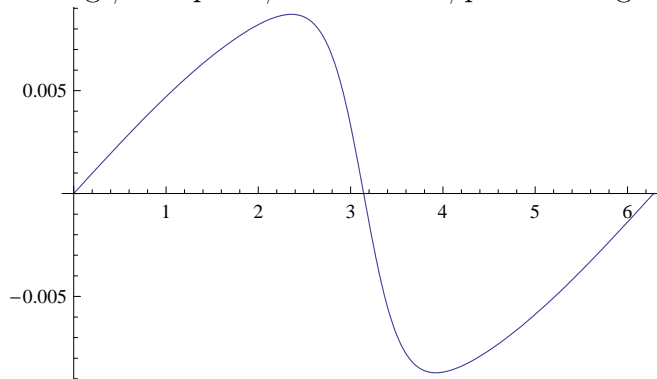
for alle  $\omega_n$   
og derfor har vi, at:

$$\sum_{\omega_n} \frac{\Gamma^2 \Delta^2 e^{i\theta}}{(\omega_n^2 + \Delta^2) D(\omega_n)} < M \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^4}$$

og da  $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^4}$  er klart konvergent, må vores sum også konvergere. For at få en idé om hvor hurtigt den konvergerer, og dermed hvor mange led det er nødvendigt at tage med, har vi i Mathematica plottet vores sum som funktion af hvor mange led vi tager med. (Se Appendiks D) Det kan heraf ses, at summer vi fra  $\omega_n=-500$  til  $\omega_n=500$ , får vi et godt bud på  $I_L(\theta)$

### 0.4.4 plots

and Settings/Computer/Dokumenter/p1dotxi0d1g001.pdf



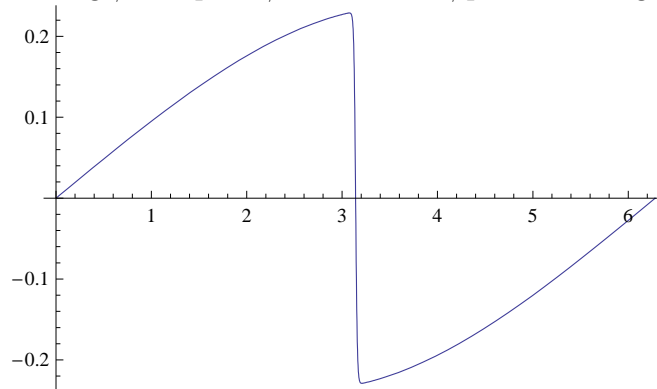
Figur 4: plot af  $I_L(\theta)$  hvor  $\xi = 0$ ,  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$  og  $\beta = 1000$ . Vi har  $I_L$  ud af y-aksen og  $\theta$  ud af x-aksen.

Vi ser, at strømmen er endelig for  $\xi = 0$  og divergensen for vores udregning af den kritiske strøm skyldes således vores approksimation.

Vi har i figur(5) plottet  $I_L(\theta)$  for en kobling, der ikke er meget mindre end  $\xi$ . Det er her meget tydeligt, at det ikke længere gælder  $I_L(\theta) \propto \sin \theta$ .

I Appendiks F er der plottet  $I_L(\theta)$  for forskellige værdier af  $\Gamma$  og  $\xi$ . Vi kan herfra se, at forøger vi  $\Gamma$  for fastholdt  $\xi$ , flytter maximummet af  $I_L(\theta)$  mod  $\theta = \pi$ , og den maksimale strøm forøges som forventet for øget kobling. Hvis vi forøger  $|\xi|$  for fastholdt  $\Gamma$  flytter maximummet af  $I_L(\theta)$  mod  $\theta = \pi/2$  og strømmen formindskes.

and Settings/Computer/Dokumenter/p1dotxi00d1g03.pdf



Figur 5: plot af  $I_L(\theta)$  hvor  $\xi = 0$ ,  $\Gamma = 0.3$ ,  $\Delta = 1$  og  $\beta = 1000$ . Vi har  $I_L$  ud af y-aksen og  $\theta$  ud af x-aksen.

### En alternativ metode til at regne strømmen ud

Strømmen kan også skrives som  $\frac{\partial F}{\partial \Theta}$  Hvor  $F$  er den frie energi, og  $\theta$  er vores fase, og kun de Andreev bundne tilstande bidrager. De Andreev bundne tilstande er bestemt ud fra nulpunkterne af  $D(\omega_n)$ . Præcis hvordan dette hænger sammen, er ikke en del af dette bachelorprojekt. Men for sammenligning har jeg plottet strømmen, (se Appendiks F), udregnet som jeg gjort her i opgaven ved siden af strømmen udregnet ved hjælp af den frie energi. (Den sidstnævnte er udregnet af Brian Møller Andersen i Mathematica). Vi kan se, at der er en meget fin overensstemmelse mellem resultaterne fundet ved hjælp af de to metoder.

## 0.5 En molekylær transistor med Coulomb vekselvirkning

I et virkeligt system kan vi ikke "bare" gange med to for vores to muligheder for spin, som vi gjorde i (12). Da energien af en elektron i transistoren afhænger af, om der allerede er en elektron med modsat spin i transistoren. Vi vil derfor nu betragte et system med Coulomb vekselvirkning i den molekylære transistor.

### 0.5.1 Modellen

Vores Hamilton operator er den samme, som når der ikke er nogen Coulomb vekselvirkning, bortset fra den del der beskriver transistoren, der nu også skal indeholde Coulomb vekselvirkning. Vores nye Hamilton operator for transistoren ( $H_{MU}$ ) bliver nu:

$$H_{MU} = \xi d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \xi d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + U n_{\uparrow} n_{\downarrow} \quad (28)$$

Hvor  $n_{\uparrow/\downarrow}$  er de spin afhængige besættelsesgradsoperatorer. Denne Hamilton operator er ikke kvadratisk, og vores bevægelsesligninger vil derfor ikke lukke. Selvom det ikke giver nogen egentlig fysisk mening, laver vi nu en middelfelt-sapproksimation for at få en kvadratisk Hamilton operator.

$$H_{MU} = \xi d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \xi d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + U \langle n_{\uparrow} \rangle n_{\downarrow} + U n_{\uparrow} \langle n_{\downarrow} \rangle \quad (29)$$

Vi definerer  $\xi_{\uparrow} = \xi + U \langle n_{\downarrow} \rangle$  og  $\xi_{\downarrow} = \xi + U \langle n_{\uparrow} \rangle$  og herved får vi således

$$H_{MU} = \xi_{\uparrow} d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} + \xi_{\downarrow} d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow} \quad (30)$$

Vi kan således bruge vores forrige resultat for en transistor, men hvor vi nu i stedet har en spinafhængig energi for transistoren. Da energiniveauet på transistoren er spinafhængig, kan vi ikke gange med to som vi gjorde i (12), for at få begge muligheder for spin med. Men vi får i stedet:

$$I_L = 2 - \sum_k Im(\langle t_{kL} c_{kL\uparrow}^{\dagger}(\tau \rightarrow 0^+) d_{\uparrow}(0) \rangle + \langle t_{kL} c_{kL\downarrow}^{\dagger}(\tau \rightarrow 0^+) d_{\downarrow}(0) \rangle) \quad (31)$$

Da vi ikke kan kende forskel på op og ned, er det ikke værre end, at vi får den samme løsning to gange, bare med modsat spin retning.

$$I_L = Im \left( \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \frac{\Gamma}{D(\omega \uparrow)} \left( \frac{\Gamma \Delta^2 (e^{i\theta} + 1)}{2(\omega_n^2 + \Delta^2)} - \frac{\omega_n^2 \Gamma}{\omega_n^2 + \Delta^2} + \frac{\omega_n^2 + i\omega_n \xi_{\downarrow}}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \right) \right) \quad (32)$$

$$+ Im \left( \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{i\omega_n 0^+} \frac{-\Gamma}{D(\omega \downarrow)} \left( \frac{\Gamma \Delta^2 (e^{i\theta} + 1)}{2(\omega_n^2 + \Delta^2)} - \frac{\omega_n^2 \Gamma}{\omega_n^2 + \Delta^2} + \frac{\omega_n^2 + i\omega_n \xi_{\uparrow}}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \right) \right) \quad (33)$$

Hvor  $D(\omega_n)$  nu er givet ved:

$$\begin{aligned} D(\omega_n \uparrow) &= |\Sigma_2|^2 + (\Sigma_1 - \xi_{\uparrow} - i\omega_n)(\Sigma_1^* - \xi_{\downarrow} + i\omega_n) \\ D(\omega_n \downarrow) &= |\Sigma_2|^2 + (\Sigma_1 - \xi_{\downarrow} - i\omega_n)(\Sigma_1^* - \xi_{\uparrow} + i\omega_n) \end{aligned}$$

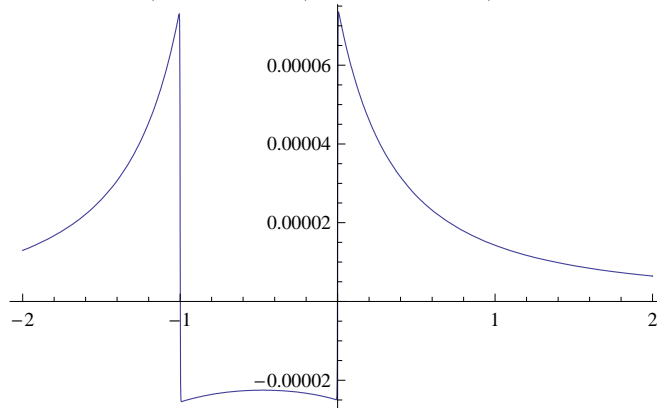
Vi ser nu på den situation, hvor det ene energiniveau er fuldt besat ( $\langle n_{\downarrow} \rangle = 1$ ) og det andet er tomt ( $\langle n_{\uparrow} \rangle = 0$ ).

## 0.5.2 Numerisk udregning og konvergens

Fra Figur (12) kan vi se, at summen konvergerer, men vi skal være påpasselig, da de enkelte led ikke alle sammen har samme fortegn. Hvis vi summer fra  $\omega_{-500}$  til  $\omega_{500}$  skulle vi dog få et fornuftigt bud på Josephson strømmen

Hvis vi udregner strømmen med denne model, får vi at strømmen ændrer retning for  $-U < \xi < 0$ . Dette er den såkaldte  $\pi$  junction (se figur: (6)). Da den kritiske strøm i 26 altid er positiv, må årsagen til at strømmen vender retning være Coulomb interaktionen i transistorer. Endvidere kan vi fra figur:(7) se at øget vekselvirkning i transistoren forøger superstrømmen for  $\xi < -U$ , og formindsker superstrømmen for  $-U < \xi$ .

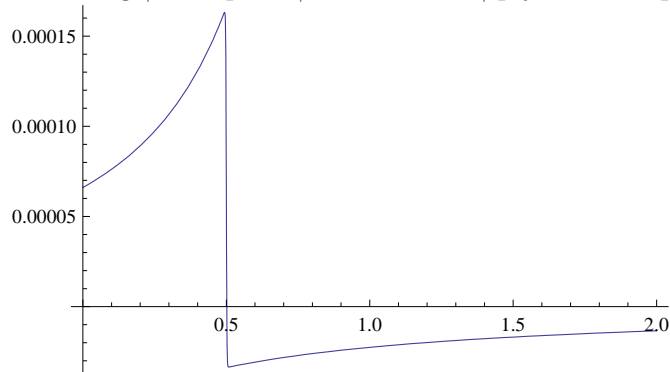
and Settings/Computer/Dokumenter/pijunction.pdf



Figur 6: Plot af Josephson strømmen ( $I_L(\xi)$ ) for  $\theta = \pi/2$ ,  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $U = 1$  og  $\beta = 1000$ . Vi har  $I_L(\xi)$  op af y-aksen og  $\xi$  ud af x-aksen. For  $-U < \xi < 0$  observerer vi fænomenet  $\pi$  junction, hvor strømmen vender retning.



and Settings/Computer/Dokumenter/pijunctionu.pdf



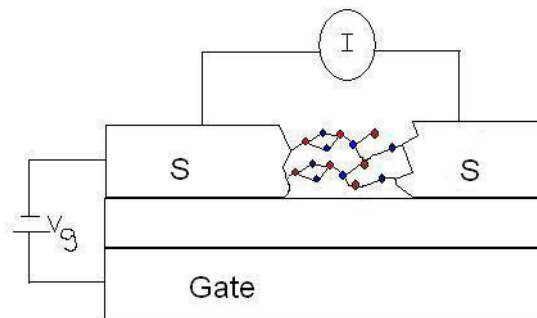
Figur 7: Plot af Josephson strømmen ( $I_L(U)$ ) for  $\theta = \pi/2$ ,  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = -0.5$  og  $\beta = 1000$ . Vi har  $I_L(U)$  op af y-aksen og  $U$  ud af x-aksen. Vi kan se, at øget vekselvirkning i transistoren forøger superstrømmen for  $\xi < -U$ , og formindsker superstrømmen for  $-U < \xi$ .

## 0.6 Josephson strømmen gennem to molekulære transistorer

Vi vil nu beregne Josephson strømmen for et system, hvor vi har tilføjet en ekstra transistor mellem vores to superledere, med mulighed for at elektronerne kan tunnelere fra den ene transistor til den anden.

### 0.6.1 Modellen

and Settings/Computer/Dokumenter/Billeder/opstilling2dots2.jpg



Figur 8: Modellen

Når vi tilføjer en ekstra transistor til vores system, får vi tre nye led i vores model

for Hamilton operatoren. Det første led beskriver den nye transistor og er givet ved:

$$H_{2M} = \xi_2(D_{\uparrow}^{\dagger}D_{\uparrow} + D_{\downarrow}^{\dagger}D_{\downarrow}) \quad (34)$$

Det andet led beskriver tunneleringen mellem den nye transistor og de to superledere, og er givet ved:

$$H_{2T} = H_{2T,L}^+ + H_{2T,L}^- + H_{2T,R}^+ + H_{2T,R}^- \quad (35)$$

Helt som i det første tilfælde gælder det, at:  $H_{2T,\alpha}^+ = (H_{2T,\alpha}^-)^{\dagger}$  og:

$$H_{2T,\alpha}^- = \sum_k T_{k\alpha} c_{k\downarrow}^{\dagger} D_{\downarrow} + T_{k\alpha} c_{k\uparrow}^{\dagger} D_{\uparrow} \quad (36)$$

Endelig er der et helt nyt led, som beskriver tunneleringen mellem de to transistorer:

$$H_B = B(d_{\uparrow}^{\dagger}D_{\uparrow} + d_{\downarrow}^{\dagger}D_{\downarrow}) + B^*(D_{\uparrow}^{\dagger}d_{\uparrow} + D_{\downarrow}^{\dagger}d_{\downarrow}) \quad (37)$$

## 0.6.2 Strømmen i den venstre superleder

Strømmen i den venstre superleder er ligesom for en transistor givet ved  $e\dot{N}$ , og helt analogt med det forrige tilfælde får vi:

$$I_L = \langle i [H, N_L] \rangle = \langle i [H_{TL}, N_L] \rangle + \langle i [H_{2TL}, N_L] \rangle = 2Im\langle H_{TL}^- \rangle + 2Im\langle H_{2TL}^- \rangle \quad (38)$$

Det er helt tilsvarende til hvad vi fik i forrige tilfælde bortset fra, at strømmen nu kan løbe gennem to transistorer. Vi kan således igen skrive strømmen som en sum af Matsubara Greens funktioner, hvor vi lader  $\tau$  gå mod nul fra oven:

$$I_L = 4 \sum_k im(\langle t_{kL} c_{kL\uparrow}^{\dagger}(\tau \rightarrow 0^+) d_{\uparrow}(0) \rangle + \langle T_{kL} c_{kL\uparrow}^{\dagger}(\tau \rightarrow 0^+) D_{\uparrow}(0) \rangle) \quad (39)$$

(Der er kommet en ekstra faktor to på grund af de to muligheder vi har for at vælge vores spin) Hvis vi antager, at de to molekylære transistorer er ens og at de kobler ens ( $t = T$  og  $\xi = \xi_2$ ), får vi:

$$\langle t_{kL} c_{kL\uparrow}^{\dagger}(\tau \rightarrow 0^+) d_{\uparrow}(0) \rangle = \langle T_{kL} c_{kL\uparrow}^{\dagger}(\tau \rightarrow 0^+) D_{\uparrow}(0) \rangle \quad (40)$$

Så derfor må den samlede strøm i den venstre leder være givet ved:

$$I_L = -8Im \left( \sum_k t \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n \tau / \beta} G_{c_{kL\uparrow}^{\dagger}, d_{\uparrow}}(\omega_n) \right) \quad (41)$$

Vores Hamilton operator er stadig kvadratisk, så vi kan igen løse problemet med bevægelsesligninger. Men på grund af de ekstra led i vores Hamilton operator får vi nogle ekstra kommutatorrelationer.

$$\begin{aligned} [H_B^-, A] &= B(\delta(d_{\uparrow}^{\dagger}, A)D_{\uparrow}^{\dagger} + \delta(d_{\downarrow}^{\dagger}, A)D_{\downarrow}^{\dagger}) - \delta(d_{\uparrow}, A)D_{\uparrow} - \delta(d_{\downarrow}, A)D_{\downarrow} \\ [H_B^+, A] &= B(\delta(D_{\uparrow}^{\dagger}, A)d_{\uparrow}^{\dagger} + \delta(D_{\downarrow}^{\dagger}, A)d_{\downarrow}^{\dagger}) - \delta(D_{\uparrow}, A)d_{\uparrow} - \delta(D_{\downarrow}, A)d_{\downarrow} \end{aligned}$$

$$[H_{2M}, A] = \xi_2(\delta(D_\sigma^\dagger, A)D_\sigma^\dagger - \delta(D_\sigma, A)D_\sigma)$$

$$\begin{aligned} [H_T, A] &= T_{k\alpha}^* \delta(c_{k\alpha\sigma}^\dagger, A)D_\sigma^\dagger - T_{k\alpha} \delta(c_{k\alpha\sigma}, A)D_{\alpha\sigma} \\ &+ \sum_k t_{k\alpha} \delta(D_\sigma^\dagger, A)c_{k\alpha\sigma}^\dagger - \sum_k T_{k\alpha}^* \delta(D_\sigma, A)c_{k\alpha\sigma} \end{aligned}$$

(hvis der står  $\alpha$  eller  $\sigma$  skal der summeres over begge muligheder)

Vi er nu klar til at opskrive vores bevægelsesligninger:

$$(1)G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) :$$

$$-(i\omega_n + \epsilon_{kL\downarrow})G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + \Delta_L^* G(c_{-kL\downarrow}, d_\uparrow) - t_{kL}^* G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) + -T_{kL}^* G(D_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) = 0$$

$$(2)G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) :$$

$$-(i\omega_n + \xi)G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) - \sum_{k\alpha} t_{k\alpha} G(c_{k\alpha\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) - BG(D_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) = 1$$

$$(3)G(c_{-kL\downarrow}, d_\uparrow) :$$

$$(-i\omega_n + \epsilon_{-kL\downarrow})G(c_{-kL\downarrow}, d_\uparrow) + \Delta_L G(c_{kL\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + t_{-kL} G(d_\downarrow, d_\uparrow) + T_{-kL} G(D_\downarrow, d_\uparrow) = 0$$

$$(4)G(d_\downarrow, d_\uparrow) :$$

$$-(i\omega_n - \xi)G(d_\downarrow, d_\uparrow) + \sum_{k\alpha} t_{k\alpha}^* G(c_{k\alpha\downarrow}, d_\uparrow) + BG(D_\downarrow, d_\uparrow) = 0$$

$$(5)G(c_{kR\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) :$$

$$-(i\omega_n + \epsilon_{kR\downarrow})G(c_{kR\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + \Delta_L^* G(c_{-kR\downarrow}, d_\uparrow) - t_{kR}^* G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) - T_{kR}^* G(D_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) = 0$$

$$(6)G(c_{-kR\downarrow}, d_\uparrow) :$$

$$(-i\omega_n + \epsilon_{-kR\downarrow})G(c_{-kR\downarrow}, d_\uparrow) + \Delta_L G(c_{kR\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) + t_{-kR} G(d_\downarrow, d_\uparrow) + T_{-kR} G(D_\downarrow, d_\uparrow) = 0$$

$$(7)G(D_\downarrow, d_\uparrow) :$$

$$-(i\omega_n - \xi_2)G(D_\downarrow, d_\uparrow) + \sum_{k\alpha} T_{k\alpha}^* G(c_{k\alpha\downarrow}, d_\uparrow) + BG(d_\downarrow, d_\uparrow) = 0$$

$$(8)G(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) :$$

$$-(i\omega_n + \xi_2)G(D_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) - \sum_{k\alpha} T_{k\alpha} G(c_{k\alpha\uparrow}^\dagger, d_\uparrow) - BG(d_\uparrow^\dagger, d_\uparrow) = 0$$

Vi kan nu finde strømmen ved at løse bevægelsesligningerne og udføre k-summen (dette er gjort i Appendiks B). Herved får vi, at strømmen i den venstre

superleder er givet ved:

$$I_L = -8Im\left(\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau/\beta} \left(-\frac{\Gamma e^{i\theta}\Delta(|B-b|^2 - (B-\xi)B + i\omega_n\Sigma_1)}{4|B-b|^2\Sigma_2\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}\right)\right) \quad (42)$$

$$-\frac{e^{i\theta}\Gamma\Delta 2|\Sigma_2|^2(B^2 - \xi^2 - \omega_n^2 - i\omega_n^2 2\Sigma_1)}{4\Sigma_2|B-b|^2 D_2(\omega_n)\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (43)$$

$$-\frac{e^{i\theta}\Gamma\Delta(B\xi - \xi^2 - \omega_n^2 - i\omega_n\Sigma_1)|b+B-2\Sigma_1|^2}{4\Sigma_2|B-b|^2 D_2(\omega_n)\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}})) \quad (44)$$

Hvor  $\Sigma_1$  er givet ved (17),  $\Sigma_2$  er givet ved (18),  $b$  er givet ved  $b = \xi + \omega_n$  og  $D_2(\omega_n)$  er givet ved:

$$\begin{aligned} D_2(\omega_n) &= 4|\Sigma_2|^2 + |b+B-2\Sigma_1|^2 \\ &= (\xi+B)^2 + \omega_n^2 \left(1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}}\right) \frac{4\Gamma^2\Delta^2 \cos^2(\theta/2)}{\omega_n^2 + \Delta^2} \end{aligned}$$

### 0.6.3 Numerisk udførelse af summen

På grund af den ekstra transistor er vores strøm fase forhold blevet betydeligt mere indviklet, og vi nøjes med at udføre summen numerisk.

#### Konvergens

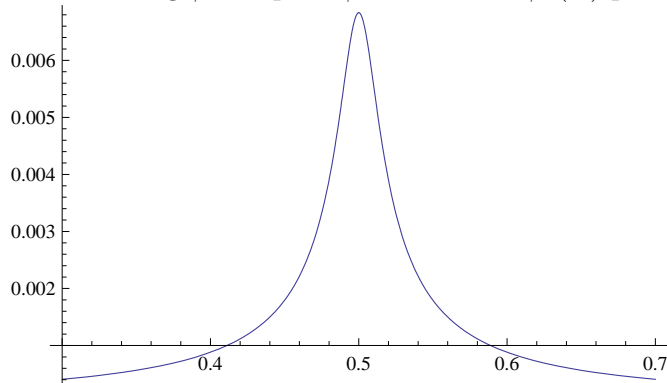
For at overbevise os selv om at summen konvergerer, og for at få en idé om hvor hurtigt den konvergerer, og dermed hvor mange led det er nødvendigt at tage med, har vi, ligesom for en transistor, i Mathematica plottet vores sum som funktion af hvor mange led vi tager med. (Se Appendiks D) Fra Appendiks D kan vi se, at summen konvergerer og vi får et fornuftigt bud på superstrømmen, hvis vi medtager tusinde og et led (fra  $\omega_{-500}$  til  $\omega_{500}$ ).

#### Plot af $I(B)$

Fra figur (17), i Appendiks E, kan det tydeligt ses, at hvis der ikke er nogen mulighed for tunnelling mellem de to transistorer er effekten af at tilføje en ekstra transistor bare at fordoble strømmen. I figur: (9) Har vi plottet  $I_{\pi/2}^1$ , vi kan heraf se at strømmen stiger betydeligt når  $\xi = -B$ , endvidere kan vi fra figur (16) i Appendiks E se, at for fast  $\theta$  og  $\xi = -B$  er strømmen som funktion af koblingen konstant.

---

<sup>1</sup> $I_{\pi/2}$  er ikke  $I_c$  da vi ikke længere har  $I \propto \sin\theta$ , men for  $\xi \neq -B$  kommer det tæt på. For  $\xi = -B$  har vi  $I_{\pi/2} < I_c$



Figur 9: Plot af Josephson strømmen ( $I_L(B)$ ) for  $\theta = \pi/2$ ,  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = -0.5$  og  $\beta = 1000$ . Vi har  $I_L(B)$  op af y-aksen og  $B$  ud af x-aksen. Vi kan se, at strømmen har et maximum for  $B = -\xi$ .

## 0.7 Konklusion og diskussion

Vi har i dette bachelorprojekt udregnet strømmen over en Josephson kontakt. Dette har vi gjort ud fra tre forskellige modeller. I den første model betragtede vi det mest simple tilfælde, hvor kontakten bestod af en molekylær transistor uden nogen form for vekselvirkning. I dette tilfælde var det muligt at udregne et analytisk udtryk for den kritiske strøm i grænsen hvor  $\Gamma \ll \xi$ . Derefter udførte vi summen numerisk i Mathematica og sammenlignede resultatet med en udregning baseret på den frie energi. Dette viste, at der er en meget fin overensstemmelse mellem resultaterne udregnet ved hjælp af de to forskellige metoder. I den anden model tilføjede vi muligheden for Coulomb vekselvirkning i transistoren. For at få en kvadratisk Hamilton operator lavede vi en middelfelts approksimation af Coulomb vekselvirkningen. Dette gjorde vi selv om det ikke giver nogen mening at snakke om et middelfelt, når vi kun har at gøre med to elektroner, og selv om det heller ikke giver meget mening at separere de spin afhængige besættelsesgradsoperatorer, da besættelsen af den ene spintilstand er stærkt afhængig af om den anden er optaget. På trods af dette lykkedes det os at få et fornuftigt resultat, der kunne forklare den såkaldte  $\pi$ -junction. Dette gjorde vi ved at antage, at det ene spinniveau var optaget og det andet tomt. Til sidst så vi på en model hvor vores kontakt bestod af to molekylære transistorer, hvor vi igen så bort fra vekselvirkninger i transistorerne. Vi observerede her, at strømmen steg kraftigt når koblingen  $B$  mellem de to transistorer var lig  $-\xi$ , og at strømmen for det tilfælde ( $B = -\xi$ ) svarede til  $\xi = B = 0$ . Vi har i alle vores numeriske udregninger medtaget tusind led i vores sum. Dette har vi retfærdiggjort ved at plotte summen som funktion af hvor mange led vi har taget med og set, at de ser ud til at konvergere. Dette er dog kun gjort for et enkelt valg af  $\Gamma$ ,  $\Delta$ ,  $U$ ,  $\theta$  og  $\beta$ . Det kan derfor tænkes, at det ville være nødvendigt at tage flere led

med, for at få et fornuftigt bud på Josephson strømmen, for nogle andre valg af de overnævnte parametre. Begrænsningen på de tusind led i vores sum skyldes, at der er brugt en forholdsvis langsom bærbar computer til at udføre summen. Det ville dog ikke være noget problem for en forholdsvis ny stationær computer at tage betydeligt flere led med, og dermed komme udover alle bekymringer om konvergens. Det kunne være interessant, som en oplagt forlængelse af dette projekt, også at medtage Coulomb vekselvirkningen for tilfældet med to transistorer. Hvis man derefter undlod at antage at de to transistorer var ens, kunne man se på det tilfælde, hvor der var en  $\pi$ -junction over den ene, men ikke over den anden. Det ville så være muligt, at få en situation, hvor  $I_L$  ville være nul. Endelig skal det nævnes, at vi i vores model ikke har medtaget det magnetfelt, der bliver genereret af Josephson strømmen. Derfor kan vi konkludere at vores model vil have den bedste overensstemmelse med en fysisk Josephson kontakt når koblingen ( $\Gamma$ ) er lille, og det dermed er en lille strøm, der løber, så vi kan ignorere magnetfeltet. Vores model kunne også udbygges med muligheden for vibrationer i den molekylære transistor, men så ville vores Hamilton operator ikke længere være kvadratisk, og vi ville derfor være nødsaget til at finde en anden måde at regne vores strøm ud på.

## 0.8 Appendiks A

Vi sætter  $a = (\epsilon + i\omega_n)$  og  $b = (\xi + i\omega_n)$

$$-aG_1 + \Delta e^{i\theta} G_3 - tG_2 = 0 \quad (45)$$

$$-bG_2 - \sum_k t(G_1 + G_5) = 1 \quad (46)$$

$$a^* G_3 + \Delta e^{-i\theta} G_1 + tG_4 = 0 \quad (47)$$

$$b^* G_4 + \sum_k t(G_3 + G_6) = 0 \quad (48)$$

$$-aG_5 + \Delta G_6 - tG_2 = 0 \quad (49)$$

$$a^* G_6 + \Delta G_5 + tG_4 = 0 \quad (50)$$

Fra (49) får vi:

$$G_6 = \frac{aG_5 + tG_2}{\Delta} \quad (51)$$

sættes det ind i 50 får vi:

$$\frac{|a|^2 G_5 + ta^* G_2 + \Delta^2 G_5 + t\Delta G_4}{\Delta} = 0 \quad (52)$$

Derfra får vi:

$$G_5 = -t \frac{a^* G_2 + \Delta G_4}{|a|^2 + \Delta^2} \quad (53)$$

og sættes det ind i ? får vi:

$$G_6 = -t \frac{aG_4 + \Delta G_2}{|a|^2 + \Delta^2} \quad (54)$$

Fra (45) får vi:

$$G_3 = \frac{aG_1 + tG_2}{\Delta e^{i\theta}} \quad (55)$$

sættes det ind i (??) får vi:

$$\frac{|a|^2 G_1 + ta^* G_2 + \Delta^2 G_1 + t\Delta e^{i\theta} G_4}{\Delta e^{i\theta}} = 0 \quad (56)$$

Derfra får vi:

$$G_1 = -t \frac{a^* G_2 + \Delta e^{i\theta} G_4}{|a|^2 + \Delta^2} \quad (57)$$

og sættes det ind i ? får vi:

$$G_3 = -t \frac{ae^{i\theta} G_4 - \Delta G_2}{(|a|^2 + \Delta^2)e^{i\theta}} \quad (58)$$

sætter vi vores udtryk for  $G_1$  og  $G_5$  ind i 46 får vi:

$$\Sigma_1 G_2 + \Sigma_2 G_4 = 1 + b G_2 \quad (59)$$

hvor  $\Sigma_1 = \sum_k t^2 \frac{2a^*}{|a|^2 + \Delta^2}$   $\Sigma_2 = \sum_k t^2 \frac{\Delta(1+e^{i\theta})}{|a|^2 + \Delta^2}$  Så:

$$G_4 = \frac{1 + (b - \Sigma_1)G_2}{\Sigma_2} \quad (60)$$

sætter vi vores udtryk for  $G_3$  og  $G_6$  ind i (48) får vi:

$$\Sigma_2^* G_2 - \Sigma_1^* G_4 = -b^* G_4 \quad (61)$$

og herved får vi:

$$G_2 = \frac{\Sigma_1^* - b^*}{\Sigma_2^*} G_4 \quad (62)$$

så  $G_2$  bliver:

$$G_2 = \frac{\Sigma_1^* - b^*}{|\Sigma_2|^2 + |\Sigma_1 - b|^2} \quad (63)$$

vi kan nu løse for  $G_1$ :

$$G_1 = -t \frac{a^*(\Sigma_1^* - b^*)}{(|\Sigma_2|^2 + |\Sigma_1 - b|^2)(|a|^2 + \Delta^2)} + \frac{\Delta e^{i\theta}}{\Sigma_2(|a|^2 + \Delta^2)} - \frac{\Delta e^{i\theta} |\Sigma_1 - b|^2}{\Sigma_2(|\Sigma_2|^2 + |\Sigma_1 - b|^2)(|a|^2 + \Delta^2)} \quad (64)$$

$$G_1 = \frac{a^*(\Sigma_1^* - b^*) + \Delta e^{i\theta} \Sigma^*}{|\Sigma_2|^2 + |\Sigma_1 - b|^2)(|a|^2 + \Delta^2)} \quad (65)$$

## 0.9 Appendiks B

Vi sætter  $a = (\epsilon + i\omega_n)$ ,  $b = (\xi + i\omega_n)$  og  $b_2 = (\xi_2 + i\omega_n)$

$$-aG_1 + \Delta e^{i\theta} G_3 - tG_2 - TG_8 = 0 \quad (66)$$

$$-bG_2 - \sum_k t(G_1 + G_5) - BG_8 = 1 \quad (67)$$

$$a^* G_3 + \Delta e^{-i\theta} G_1 + tG_4 + TG_7 = 0 \quad (68)$$

$$b^* G_4 + \sum_k t(G_3 + G_6) + BG_7 = 0 \quad (69)$$

$$-aG_5 + \Delta G_6 - tG_2 - TG_8 = 0 \quad (70)$$

$$a^* G_6 + \Delta G_5 + tG_4 + TG_7 = 0 \quad (71)$$

$$b_2^* G_7 + \sum_k T(G_3 + G_6) + BG_4 = 0 \quad (72)$$

$$-b_2 G_8 + \sum_k T(G_1 + G_5) - BG_2 = 0 \quad (73)$$



Vi sætter nu  $t = T$  og  $b = b_2$ . Fra 70 får vi:

$$G_6 = \frac{aG_5 + t(G_2 + G_8)}{\Delta} \quad (74)$$

sætter vi ind i 71 får vi:

$$\frac{|a|^2 G_5 + ta^*(G_2 + G_8) + \Delta^2 G_5 + t\Delta(G_4 + G_7)}{\Delta} = 0$$

Derfra får vi:

$$G_5 = -t \frac{a^*(G_2 + G_8) + \Delta(G_4 + G_7)}{|a|^2 + \Delta^2}$$

og sættes det ind i refb9 får vi:

$$G_6 = -t \frac{a(G_4 + G_8) - \Delta(G_2 + G_8)}{|a|^2 + \Delta^2} \quad (75)$$

Fra 66 får vi:

$$G_3 = \frac{aG_1 + t(G_2 + G_8)}{\Delta e^{i\theta}} \quad (76)$$

sættes det ind i refb3 får vi:

$$\frac{|a|^2 G_1 + ta^*(G_2 + G_8) + \Delta^2 G_1 + t\Delta e^{i\theta}(G_4 + G_7)}{\Delta e^{i\theta}} = 0 \quad (77)$$

Derfra får vi:

$$G_1 = -t \frac{a^*(G_2 + G_8) + \Delta e^{i\theta}(G_4 + G_7)}{|a|^2 + \Delta^2} \quad (78)$$

og sættes det ind i 76 får vi:

$$G_3 = -t \frac{ae^{i\theta}(G_4 + G_7) - \Delta(G_2 + G_8)}{(|a|^2 + \Delta^2)e^{i\theta}} \quad (79)$$

Sætter vi vores udtryk for  $G_1$  og  $G_5$  ind i 67 får vi:

$$\Sigma_1(G_2 + G_8) + \Sigma_2(G_4 + G_7) = 1 + bG_2 + BG_8 \quad (80)$$

hvor  $\Sigma_1 = \sum_k t^2 \frac{2a^*}{|a|^2 + \Delta^2}$   $\Sigma_2 = \sum_k t^2 \frac{\Delta(1+e^{i\theta})}{|a|^2 + \Delta^2}$

Sætter vi vores udtryk for  $G_1$  og  $G_5$  ind i refb8 får vi:

$$\Sigma_1(G_2 + G_8) + \Sigma_2(G_4 + G_7) = BG_2 + bG_8 \quad (81)$$

Herfra får vi:

$$G_8 = G_2 + \frac{1}{b - B} \quad (82)$$

sætter vi vores udtryk for  $G_3$  og  $G_6$  ind i 69 får vi:

$$\Sigma_2^*(G_2 + G_8) - \Sigma_1^*(G_4 + G_7) = -b^*G_4 - BG_7 \quad (83)$$

sætter vi vores udtryk for  $G_3$  og  $G_6$  ind i 72 får vi:

$$\Sigma_2^*(G_2 + G_8) - \Sigma_1^*(G_4 + G_7) = -BG_4 - b^*G_7 \quad (84)$$

Derved får vi:

$$G_7 = G_4 \quad (85)$$

Vi kan nu, vha. 80, skrive  $G_4$  som:

$$G_4 = \frac{(B - b) + (\Sigma_1 - B) + (B - b)(b + B - 2\Sigma_1)G_2}{2(B - b)\Sigma_2} \quad (86)$$

Vi kan nu, vha. 84 skrive  $G_2$

$$G_2 = \frac{2|\Sigma_2|^2 - (B - b + \Sigma_1 - B)(b^* + B - 2\Sigma_1^*)}{(B - b)(4|\Sigma_2|^2 + |b + B - 2\Sigma_1|^2)} \quad (87)$$

vi kan nu løse for  $G_1$ :

$$G_1 = \frac{2ta^*((b - \Sigma_1)(b^* + B - \Sigma_1^*) - 2|\Sigma_2|^2)}{(B - b)(4|\Sigma_2|^2 + |b + B - 2\Sigma_1|^2)(|a|^2 + \Delta^2)} \quad (88)$$

$$- \frac{a^*t}{(B - b)(|a|^2 + \Delta^2)} \quad (89)$$

$$- \frac{te^{i\theta}\Delta((B - b) + \Sigma_1 - b)}{2(B - b)(|a|^2 + \Delta^2)\Sigma_2} \quad (90)$$

$$- \frac{te^{i\theta}\Delta(2|\Sigma_2|^2(b + B - 2\Sigma_1) + (b - \Sigma_1)|b + B - 2\Sigma_1|^2)}{2\Sigma_2(B - b)(4|\Sigma_2|^2 + |b + B - 2\Sigma_1|^2)(|a|^2 + \Delta^2)} \quad (91)$$

Vi definerer nu  $D_2(\omega_n)$  som:

$$\begin{aligned} D_2(\omega_n) &= 4|\Sigma_2|^2 + |b + B - 2\Sigma_1|^2 \\ &= (\xi + B)^2 + \omega_n^2 \left( 1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \right) \frac{4\Gamma^2\Delta^2 \cos^2(\theta/2)}{\omega_n^2 + \Delta^2} \end{aligned}$$

Vi udfører nu k-summen et led ad gangen ved at omskrive den til et energiintegral. Det 1. led

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon 2\pi d(\epsilon) t^2 \frac{(\epsilon - i\omega_n)(b^* + B - 2\Sigma_1^* - 2|\Sigma_2|^2)}{(B - b)D(\omega_n)(\epsilon^2 + \omega_n^2 + \Delta^2)} \quad (92)$$

$$= \frac{\Gamma(-i\omega_n(b^* + B - 2\Sigma_1^* - 2|\Sigma_2|^2))}{(B - \xi - i\omega_n)D_2(\omega)\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (93)$$

Dette led er enten reelt eller ulige i omega så det forsvinder, når vi udfører vores  $\omega_n$ -sum. Så det kommer ikke til at indgå i vores udtryk for strømmen.

Det 2. led:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon 2\pi d(\epsilon) t^2 \frac{\epsilon - i\omega_n}{(B-b)(\epsilon^2 + \omega_n^2 + \Delta^2)} \quad (94)$$

$$= \frac{\Gamma i\omega_n}{(B-\xi - i\omega_n)\sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (95)$$

Dette led er enten reelt eller ulige i omega, så det forsvinder når vi udfører vores  $\omega_n$ -sum. Så det kommer ikke til at indgå i vores udtryk for strømmen.

Det 3. led:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon - 2\pi d(\epsilon) t^2 \frac{e^{i\theta} \Delta ((B-b) + \Sigma_1 - b)}{2(B-b)(|a|^2 + \Delta^2)\Sigma_2} \quad (96)$$

$$= - \frac{\Gamma e^{i\theta} \Delta (|B-b|^2 - (B-\xi)B + i\omega_n \Sigma_1)}{4|B-b|^2 \Sigma_2 \sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (97)$$

Her har vi set bort fra de led, der er ulige i omega.

Det 4. led:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon - 2\pi d(\epsilon) t^2 \frac{e^{1\theta} \Delta (2|\Sigma_2|^2 (b+B-2\Sigma_1) + (b-\Sigma_1)|b+B-d\Sigma_1|^2)}{2\Sigma_2 (B-b) D_2(\omega_n)} \quad (98)$$

$$= \frac{-e^{i\theta} \Gamma \Delta (2|\Sigma_2|^2 (B^2 - \xi^2 - \omega_n^2 - i\omega_n^2 2\Sigma_1) + (B\xi - \xi^2 - \omega_n^2 - i\omega_n \Sigma_1) |b+B-2\Sigma_1|^2)}{4\Sigma_2 |B-b|^2 D_2(\omega_n) \sqrt{\omega_n^2 + \Delta^2}} \quad (99)$$

Her har vi igen set bort fra de led, der er ulige i omega, da de ikke vil indgå i vores strøm fase forhold.

## 0.10 Appendiks C: evaluering af Matsubara summer

Vi vil beregne en sum af typen:

$$S^f(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} F_j(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} \quad (100)$$

Hvor  $F_j(z)$  har en kendt simpel pol for  $z = z_{pol}$ . Vi vil nu omskrive summen til et integral over en kompleks variabel og bruge residue teori. Til dette skal vi bruge en funktion, som har poler ved  $z = i\omega_n$ . Det er opfyldt af  $n_F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}$ , der har

poler for  $z = i\omega_n = i(2n + 1)\pi/\beta$  og residuerne ved disse værdier er:  $-1/\beta$  Vi integrerer nu langs kurven  $C_\infty = Re^{i\theta}$  hvor vi lader  $R \rightarrow \infty$ :

$$\int_{C_\infty} dz \frac{2\pi}{n} F_j(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} \quad (101)$$

Fra residue teorien har vi, at dette integral er lig med:

$$\begin{aligned} \sum_{i\omega_n} Res [n_f(z) F_j(i\omega_n)] F_j(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} + Res [F(z)] n_f(z_{pol}) e^{\tau z_{pol}} \\ = \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} F_j(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} + Res [F(z)] n_f(z_{pol}) e^{\tau z_{pol}} \end{aligned}$$

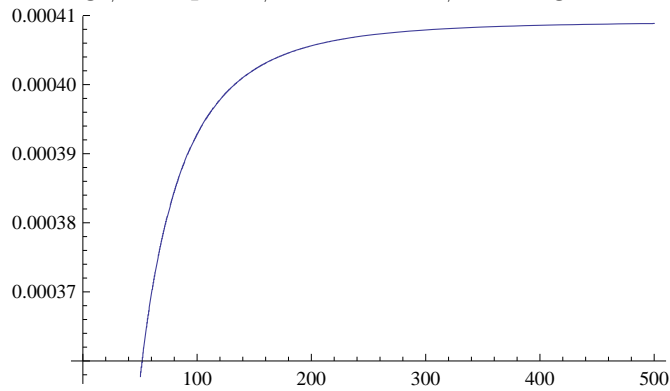
Men integralet må også være lig med nul, da integranten går mod nul eksponentielt for  $z \in C_\infty$ , da  $0 < \tau < \beta$  Så derfor har vi:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_n} F_j(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} = Res [F(z)] n_f(z_{pol}) e^{\tau z_{pol}}$$

## 0.11 Appendiks D

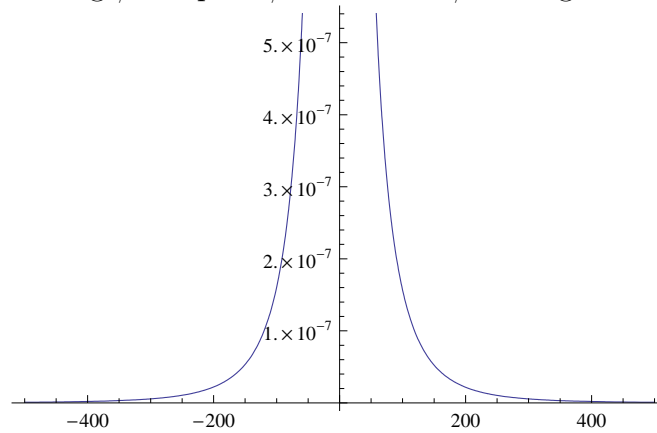
### 0.11.1 Konvergens for en transistor

and Settings/Computer/Dokumenter/konvergens21dot.pdf



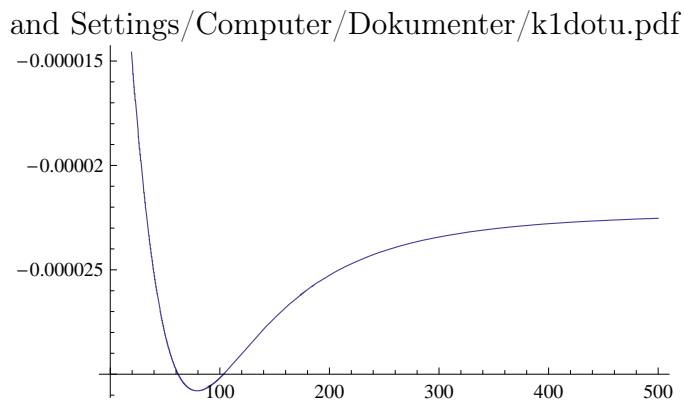
Figur 10: Ud af y-aksen har vi  $I_L$ , for  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = 0.1$ ,  $\theta = 2$  og  $\beta = 1000$ , og ud af x-aksen har vi  $N$  antallet af led i summen

and Settings/Computer/Dokumenter/konvergens1dot.pdf

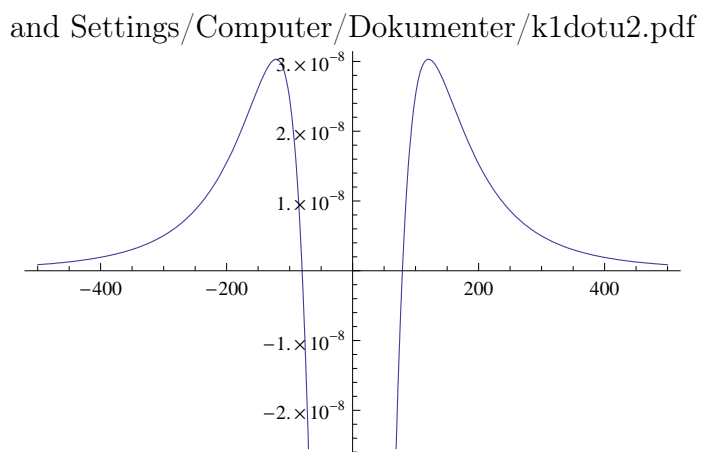


Figur 11: Ud af y-aksen har vi værdien for det  $n$ 'te led i summen, for  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = 0.1$ ,  $\theta = 2$  og  $\beta = 1000$ , og ud af x-aksen har vi  $n$

### 0.11.2 Konvergens for en transistor med $U \neq 0$

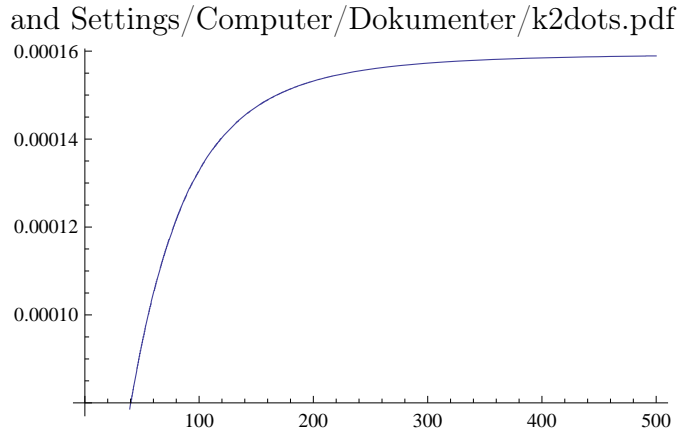


Figur 12: Ud af y-aksen har vi  $I_L$ , for  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = -0.5$ ,  $U = 1$ ,  $\theta = \pi/2$  og  $\beta = 1000$ , og ud af x-aksen har vi  $N$  antallet af led i summen

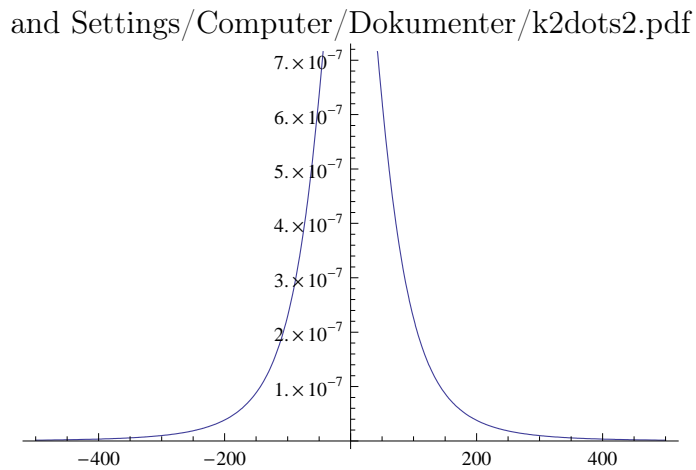


Figur 13: Ud af y-aksen har vi værdien for det  $n$ 'te led i summen, for  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = -0.5$ ,  $U = 1$ ,  $\theta = \pi/2$  og  $\beta = 1000$ , og ud af x-aksen har vi  $n$

### 0.11.3 Konvergens for to transistorer

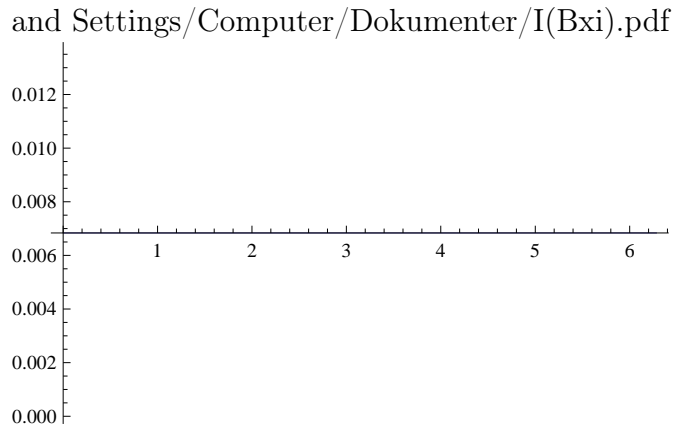


Figur 14: Ud af y-aksen har vi  $I_L$ , for  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = 0.3$ ,  $B = 0.1$ ,  $\theta = 2$  og  $\beta = 1000$ , og ud af x-aksen har vi  $N$  antallet af led i summen

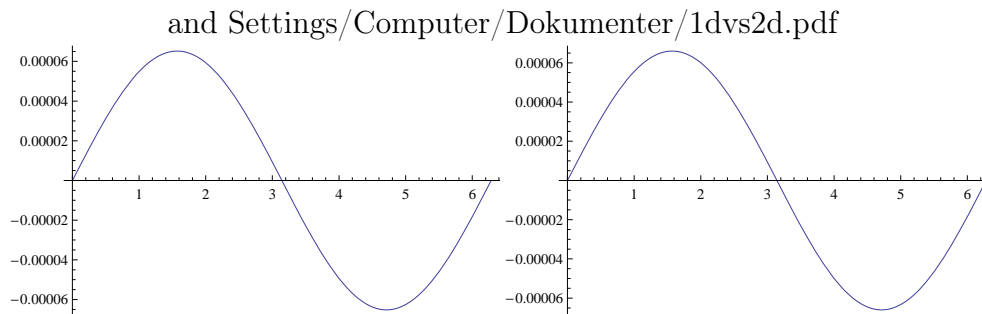


Figur 15: Ud af y-aksen har vi værdien for det  $n$ 'te led i summen, for  $\Gamma = 0.01$ ,  $\Delta = 1$ ,  $\xi = 0.3$ ,  $B = 0.1$ ,  $\theta = 2$  og  $\beta = 1000$ , og ud af x-aksen har vi  $n$ .

## 0.12 Appendiks E plots til to transistorer



Figur 16: Ud af y-aksen har vi  $I(B)$  og ud af x-aksen har vi  $B$ . vi har sat  $\xi = -B$ .



Figur 17: Til venstre superstrømmen for en transistor, til højre den halve superstrøm for to transistorer. Vi kan heraf se, at når  $B = 0$  har vi  $I_{\text{transistor}} = \frac{1}{2}I_2$  transistorer.



## 0.13 Appendiks F

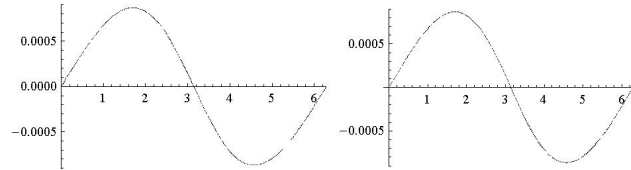
Plots af  $I_L(\theta)$  for forskellige værdier af  $\Gamma$  og  $\xi$ . Vi har valgt  $\Delta = 1$  og  $\beta = 1000$   
Det er strømmen udregnet ved hjælp af den frie energi til venstre.

and Settings/Computer/Dokumenter/prøve/rasbrian.jpg

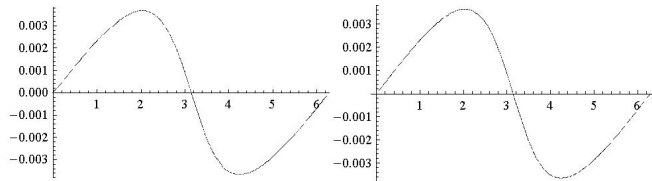
$\Delta = 1.0;$

$kT = 0.001;$

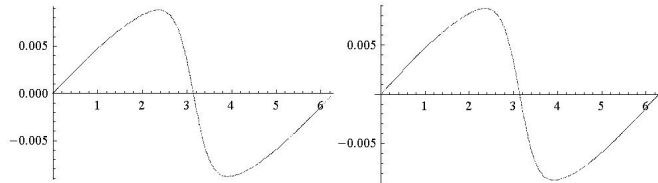
`Plot[supercurrent [ $\varphi$ , 0.002, 0.0], { $\varphi$ , 0, 2 Pi}, PlotRange -> {{0, 2 Pi}, All}]`



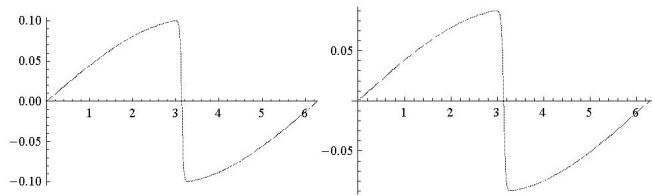
`Plot[supercurrent [ $\varphi$ , 0.005, 0.0], { $\varphi$ , 0, 2 Pi}, PlotRange -> {{0, 2 Pi}, All}]`



`Plot[supercurrent [ $\varphi$ , 0.01, 0.0], { $\varphi$ , 0, 2 Pi}, PlotRange -> {{0, 2 Pi}, All}]`

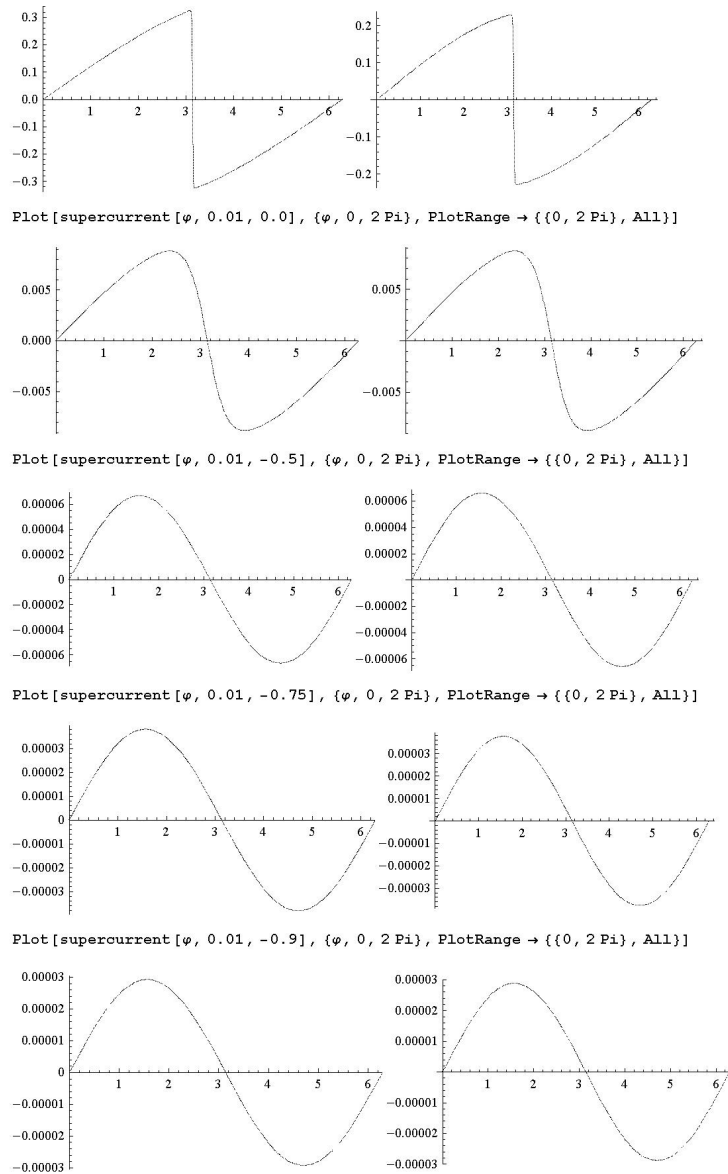


`Plot[supercurrent [ $\varphi$ , 0.1, 0.0], { $\varphi$ , 0, 2 Pi}, PlotRange -> {{0, 2 Pi}, All}]`



`Plot[supercurrent [ $\varphi$ , 0.3, 0.0], { $\varphi$ , 0, 2 Pi}, PlotRange -> {{0, 2 Pi}, All}]`

and Settings/Computer/Dokumenter/prøve/rasbriarside2.jpg



Figur 18: Plots af  $I_L(\theta)$  for forskellige værdier af  $\Gamma$  og  $\xi$ . Vi har valgt  $\Delta = 1$  og  $\beta = 1000$ . Det er strømmen udregnet ved hjælp af den frie energi til venstre.

# Litteratur

- [1] Henrik Bruus og Karsten Flensberg: "Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics - an introduction"  
Oxford University Press, 1. udgave, 2004.
  
- [2] Charles Kittel: "Introduction to Solid State Physics"  
John Wiley & sons, Inc., 8. udgave, 2005.
  
- [3] A.A. Golubov m.fl.: "The current-phase relation in Josephson junctions"  
Reviews of Modern Physics, volume 76, april 2004.
  
- [4] J. Bauer m.fl.: "Spectral properties of locally correlated electrons in a Bardeen-Cooper-Schrieffer superconductor"  
Journal of Physics Condensed Matter nr. 19, 2007.
  
- [5] Per Hedegaard: "FORENEDE ELEKTRONER A/S - om superledning og kvanteteori"  
Nysyn Munksgaard, 1. udgave, 1. oplag, 1991.
  
- [6] Tomáš Novotný, Alessandra Rossini og Karsten Flensberg: "Josephson current through a molecular transistor in a dissipative environment"  
Physical Review B72, 2005.