

И. А. Квасников

**ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ
И СВЕРХПРОВОДИМОСТИ**



**URSS
МОСКВА**



*Настоящее издание осуществлено при финансовой поддержке
Российского фонда фундаментального исследования
(проект № 09-02-07058)*

Квасников Иридиј Александрович

Введение в теорию электропроводности и сверхпроводимости.

М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2010. — 216 с.

Предлагаемая вниманию читателей книга посвящена одному из достаточно полно разработанных разделов электронной теории — теории электропроводности и сверхпроводимости.

В книге в доступной форме изложены основы теории электронного газа в металлах, его кинетической теории в рамках стационарного приближения (явления переноса) и проблемы сверхпроводимости в ее современном теоретическом обосновании, а также обсужден вопрос о возможности сверхтекущего состояния вырожденных ферми-систем типа ядерной материи.

Для студентов старших курсов и аспирантов, специализирующихся в области теоретической физики, а также научных сотрудников, интересующихся вопросами электронной теории и общими проблемами квантовой статистики.

Издательство «Книжный дом “ЛИБРОКОМ”»
117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 9
Формат 60×90/16. Печ. л. 13,5 Зак № 2595.

Отпечатано в ООО «ЛЕНАНД»
117312, Москва, пр-т Шестидесятилетия Октября, 11А, стр. 11.

ISBN 978-5-397-00314-8

© Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2009

| | |
|---|---------------------|
| НАУЧНАЯ И УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА | |
|  | E-mail URSS@URSS.ru |
| Каталог изданий в Интернете | |
| http://URSS.ru | |
| Тел./факс 7 (499) 135-42-16 | |
| Тел./факс 7 (499) 135-42-46 | |

5642 ID 82418



9 785397 003148

Все права защищены. Никакая часть настоящей книги не может быть воспроизведена или передана в какой бы то ни было форме и какими бы то ни было средствами, будь то электронные или механические, включая фотокопирование и запись на магнитный носитель, а также размещение в Интернете, если на то нет письменного разрешения владельца.

Оглавление

| | |
|-------------------|---|
| Предисловие | 9 |
|-------------------|---|

Часть I

Явления переноса в вырожденном электронном газе ... 11

Глава 1

| | |
|--|----|
| <i>Кинетическое уравнение Паули и кинетическое уравнение Больцмана</i> | 13 |
|--|----|

| | |
|---|----|
| § 1. Квантовомеханическая теория возмущений для чистого и смешанного квантовомеханического состояния | 13 |
|---|----|

| | |
|---|----|
| § 2. Статистические системы. Огрубление шкалы времени и закон сохранения энергии | 17 |
|---|----|

| | |
|---|----|
| § 3. Переход к кинетической шкале времени и построение кинетического уравнения Паули | 21 |
|---|----|

| | |
|---|----|
| § 4. Изолированные системы. Микроканоническое распределение Гиббса. Проблема обращения времени | 23 |
|---|----|

| | |
|--|----|
| § 5. Переход к уравнению Больцмана | 27 |
|--|----|

Глава 2

| | |
|--|----|
| <i>Общие замечания и вопросы моделирования системы</i> | 32 |
|--|----|

| | |
|--|----|
| § 1. Исключение учета положительно заряженного фона кристаллической решетки | 33 |
|--|----|

| | |
|--|----|
| § 2. Самосогласованное поле и плазменные колебания | 33 |
|--|----|

| | |
|---|----|
| § 3. Томас-фермиевская экранировка кулоновского потенциала .. | 35 |
|---|----|

| | |
|---|----|
| § 4. Критерий идеальности реального электронного газа в металлах | 37 |
|---|----|

Глава 3

| | |
|---|----|
| <i>Кинетическая теория продольных термоэлектрических явлений в электронном газе</i> | 44 |
| § 1. Лоренцева форма интеграла столкновений | 44 |
| § 2. Стационарное решение кинетического уравнения Лоренца | 47 |
| § 3. Электро- и теплопроводность вырожденного электронного газа в металлах | 51 |
| § 4. Термоэлектрические явления в металлических проводниках | 54 |

Глава 4

| | |
|--|----|
| <i>Учет электрон-фононного взаимодействия в теории электропроводности металлов.....</i> | 58 |
| § 1. Моделирование гамильтониана взаимодействия электронов с колебаниями решетки | 58 |
| § 2. Расчет транспортного сечения рассеяния и определение температурной зависимости удельного сопротивления в области низких и высоких температур по отношению к температуре Дебая | 63 |
| § 3. Расчет поправок к основному результату | 68 |
| § 4. Обсуждение и критические замечания..... | 70 |
| § 5. Теплопроводность электронного газа в электрон-фононной модели взаимодействия..... | 72 |

Часть II

| | |
|--|----|
| Введение в теорию сверхпроводимости электронного газа | 75 |
|--|----|

Глава 5

| | |
|---|----|
| <i>Экспериментальные и теоретические предпосылки теории сверхпроводимости</i> | 77 |
| § 1. Немного истории | 77 |
| § 2. Вопросы моделирования системы электронного газа в металлах | 82 |

| | |
|---|----|
| § 3. Учет экспериментальных данных: малая величина температуры фазового перехода по сравнению со средней энергией взаимодействия электронов друг с другом и газом фононов | 84 |
| § 4. Учет экспериментальных данных: гипотеза о наличии в спектре возбужденных состояний энергетической щели и низкотемпературное поведение теплоемкости сверхпроводника | 85 |
| § 5. Корреляционный радиус базеподобных комплексов электронов в случае наличия в их спектре возбужденных состояний энергетической щели | 89 |
| § 6. Условия существования квазисвязного состояния электронов по Куперу | 91 |
| § 7. Структура динамического взаимодействия электронов в металле | 97 |

Глава 6

| | |
|---|-----|
| <i>Электронный газ с прямым передаваемым фононами взаимодействием</i> | 102 |
|---|-----|

| | |
|--|-----|
| § 1. Выделение части гамильтониана, ответственной за формирование куперовских состояний | 102 |
| § 2. ($u-v$)-преобразование Боголюбова ферми-операторов рассматриваемой модели | 104 |
| § 3. Определение коэффициентов ($u-v$)-преобразования и оценка свободной энергии системы в соответствии с вариационной теоремой Боголюбова | 109 |

Глава 7

| | |
|--|-----|
| <i>Исследование уравнения для энергетической щели в случае упрощенной модели взаимодействия электронов</i> | 119 |
|--|-----|

| | |
|---|-----|
| § 1. Уравнение для энергетической щели и термодинамический потенциал системы с модельным взаимодействием частиц, допускающим дальнейшее исследование проблемы сверхпроводимости | 119 |
| § 2. Расчет температуры фазового перехода θ_0 и температурное поведение энергетической щели в диапазоне $0 \leq \theta \leq \theta_0$ | 122 |

Глава 8*Термодинамические свойства модельного сверхпроводника* 128**Глава 9***Величина критического магнитного поля
и фазовый переход 2-го рода* 134*§ 1. Термодинамическая теория* 134*§ 2. Связь эффекта с величиной энергетической щели* 136**Глава 10***Качественный учет кулоновского взаимодействия* 140**Глава 11***Вариационное приближение и асимптотическая точность
полученных результатов* 144**Глава 12***Принцип компенсации «опасных диаграмм»* 151**Глава 13***Общая структура возбужденных состояний сверхпроводящего
и нормального электронного газа в металлах* 155**Глава 14***Критерий возможного существования явления сверхтекучести
в вырожденной ферми-системе с куперовской корреляцией
составляющих ее частиц и условие устойчивости
нормального ее состояния* 162*§ 1. Моделирование исходного гамильтониана* 162*§ 2. Разделение $(u-v)$ -преобразованного гамильтониана
на части* 164*§ 3. Постановка вариационной задачи* 167*§ 4. Выделение тривиального решения* 168*§ 5. Критерий возникновения устойчивого сверхтекучего
состояния системы* 169

| | |
|--|------------|
| Приложения | 173 |
| Приложение I | |
| <i>Расчет фермиевских интегралов</i> | 175 |
| Приложение II | |
| <i>Представление вторичного квантования в задачах статистической механики</i> | 178 |
| § 1. <i>N</i> -частичный базис | 178 |
| § 2. Представление базиса в терминах чисел заполнения | 179 |
| § 3. Операторы динамических величин в представлении чисел заполнения | 180 |
| § 4. Введение операторов рождения и уничтожения | 182 |
| § 5. Рабочие формулы для операторов динамических величин в представлении вторичного квантования | 185 |
| Приложение III | |
| <i>Теорема о спариваниях</i> | 190 |
| Приложение IV | |
| <i>Вариационная теорема Боголюбова</i> | 193 |
| Приложение V | |
| <i>Ферромагнетик Гейзенберга в вариационном приближении и пример модели, когда это приближение является асимптотически точным решением статистической проблемы</i> | 197 |
| § 1. Теория молекулярного поля Вейсса как вариационное приближение | 197 |
| § 2. Пример совпадения вариационной оценки с асимптотически точным решением | 202 |
| Приложение VI | |
| <i>Основная формула метода перевала</i> | 205 |
| § 1. Выделение ϵ -окрестности в области точки перевала | 206 |
| § 2. Изменение первоначального контура интегрирования | 207 |
| § 3. Асимптотическая оценка интегралов | 209 |

Предисловие

Предлагаемая вниманию читателей книга посвящена одному из достаточно полно разработанных разделов электронной теории — теории электропроводности и сверхпроводимости.

Предлагаемый материал содержит подробные сведения по тематике раздела, что позволяет читателю не заглядывать постоянно в другие источники в поисках необходимых пояснений.

Сама тематика и содержание книги нарочито подробно отражены в ее оглавлении, поэтому не возникает необходимости повторять и комментировать их в предисловии.

Следует отметить, что, опираясь на материал 4-томного учебного пособия по термодинамике и статистической физике, выпущенного за последние годы издательством URSS, автор собрал разбросанные по отдельным книгам и их главам эпизоды, относящиеся именно к теории электронного газа, кинетической его теории в рамках стационарного приближения и явлению его сверхпроводимости, и включил их в единый опус, посвященный характерным для электронного газа в металлах явлениям. Однако, несмотря на эти фрагментарные самозаимствования, данная книга является вполне автономным сочинением.

Для более подробного ознакомления с отдельными частными выкладками и частными вопросами автор снабдил текст ссылками на упомянутое выше 4-томное пособие, которые имеют основной целью напоминать уже известные положения и не нарушают логику и последовательность общего изложения представляемого материала. Пренебрегая возможными упреками по поводу встречающегося в тексте книги автоцитирования, автор использовал этот прием отнюдь не в целях саморекламы, а исключительно исходя из желания объединить данный выпуск с упомянутым выше изданием не только по манере изложения, по используемым обозначениям и т. д., но и по общей идеологии и общим постановочным вопросам.

Чтобы не снабжать данную небольшую книгу объемным списком литературы, приведем только координаты 4-томного пособия, нарушая традицию, прямо в предисловии.

Упомянутое пособие имеет общее название «Термодинамика и статистическая физика». Отдельные его тома имеют подзаголовки: том 1 — «Термодинамика» (М.: URSS, 2002. 238 с.); том 2 — «Статистическая физика» (М.: URSS, 2002. 429 с.); том 3 — «Теория неравновесных систем» (М.: URSS, 2003. 447 с.); том 4 — «Квантовая статистика» (М.: URSS, 2005. 349 с.).

В целях краткости ссылки в тексте книги будут включать только номер тома, а также номера соответствующих глав и параграфов.

Автор выражает искреннюю благодарность всему коллективу издательства URSS, выполнившему работы по изданию книги на высоком профессиональном уровне, проявившему доброжелательное и терпеливое отношение к автору, и особенно Доминго Марину Рикою, активная поддержка которого и постоянное внимание к автору позволили в кратчайшие сроки реализовать предлагаемое издание.

Часть I

**Явления переноса
в вырожденном
электронном газе**

| | |
|---|----|
| Глава 1 | |
| Кинетическое уравнение Паули и кинетическое уравнение Больцмана | 13 |
| Глава 2 | |
| Общие замечания и вопросы моделирования системы | 32 |
| Глава 3 | |
| Кинетическая теория продольных термоэлектрических явлений в электронном газе | 44 |
| Глава 4 | |
| Учет электрон-фононного взаимодействия в теории электропроводности металлов | 58 |

Глава 1

Кинетическое уравнение Паули и кинетическое уравнение Больцмана

Теоретическое описание стационарных явлений переноса как явлений, происходящих в слабонеравновесных системах, требует использования соответствующего рассматриваемой проблеме кинетического уравнения. Не заимствуя какую-либо готовую и подходящую к нашему случаю схему, мы с целью выявить соответствующие преимущества и ограничения кинетического подхода к описанию стационарных явлений рассмотрим этот вопрос начиная с самых исходных позиций.

§ 1. Квантовомеханическая теория возмущений для чистого и смешанного квантовомеханического состояния

Пусть задан гамильтониан системы $H = H_0 + \delta H$, такой что собственные функции и значения нулевой его части известны,

$$H_0\psi_n(q) = E_n\psi_n(q).$$

Заметим, что система, описываемая гамильтонианом H_0 , по существу является системой типа идеального «газа» из состояний $|n\rangle = \psi_n(q)$, и никаких релаксационных процессов в ней не происходит. В связи с этим предположим, что часть полного гамильтониана δH допускает любые квантовые переходы между состояниями $\{\psi_n(q)\}$ и тем самым обеспечивает статистичность системы H (т. е. выступает как бы в роли той «планковской» пылинки в проблеме равновесного электромагнитного излучения (см. т. 1, гл. 1, стр. 77), которая обеспечивает наступление равновесного термодинамического состояния системы).

Пусть в момент времени t система находилась в состоянии $\psi_n(q)$. К моменту времени $t' > t$ это состояние благодаря действию

оператора δH эволюционирует, и его можно, используя функции $\{\psi_n(q)\}$ в качестве базисных, представить в виде разложения

$$\Psi_n(q, t') = \sum_{n'} \varphi(n, t|n', t') \psi_{n'}(q); \quad \Psi_n(q, t) = \psi_n(q).$$

Вектор состояния $\{\varphi(n, t|n', t')\}$ удовлетворяет уравнению Шрёдингера:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t'} \varphi(n, t|n', t') &= \sum_{n''} \langle n' | H_0 + \delta H | n'' \rangle \varphi(n, t|n'', t') = \\ &= E_{n'} \varphi(n, t|n', t') + \sum_{n''} \langle n' | \delta H | n'' \rangle \varphi(n, t|n'', t'). \end{aligned}$$

Исключая первое слагаемое правой части уравнения с помощью стандартной замены

$$\Phi(n, t|n', t') = \varphi(n, t|n', t') e^{\frac{i}{\hbar} E_{n'} t'},$$

получаем

$$\begin{cases} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t'} \Phi(n, t|n', t') = \sum_{n''} \langle n' | \delta H | n'' \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_{n'} - E_{n''}) t'} \Phi(n, t|n'', t'), \\ \Phi(n, t|n', t')|_{t'=t} = \Delta(n - n'), \end{cases}$$

или сразу в интегральном виде

$$\begin{aligned} \Phi(n, t|n', t') &= \Delta(n - n') + \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t'} \sum_{n''} \langle n' | \delta H | n'' \rangle e^{\frac{i}{\hbar} (E_{n'} - E_{n''}) t''} \Phi(n, t|n'', t''). \end{aligned}$$

Это уравнение позволяет развить временную теорию возмущений по степеням параметра, определяющего величину δH . Относительно этого оператора предположим, упрощая дальнейшие выкладки, что δH или вообще не зависит от времени (как, например, потенциал взаимодействия частиц $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$), либо его зависимость

от времени «крупномасштабна» (или даже квазистатична), так что интервал времени Δt , за которое происходит сколь-нибудь заметное его изменение, значительно больше периодов происходящих в системе квантовомеханических колебаний \hbar/E_n .

Производя последовательно итерации, сразу получаем решение интегрального уравнения до второго (необходимого нам в дальнейшем) порядка по δH включительно:

$$\Phi^{(0)}(n, t|n', t') = \Delta(n - n'),$$

$$\Phi^{(1)}(n, t|n', t') = \langle n' | \delta H | n \rangle \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t'} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n'} - E_n)t''} dt'',$$

$$\begin{aligned} \Phi^{(2)}(n, t|n', t') &= \sum_{n''} \langle n' | \delta H | n'' \rangle \langle n'' | \delta H | n \rangle \left(\frac{1}{i\hbar} \right)^2 \times \\ &\quad \times \int_t^{t'} dt'' \int_t^{t''} dt''' e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n'} - E_n)t''} e^{\frac{i}{\hbar}(E_{n''} - E_n)t''}. \end{aligned}$$

Интегралы по переменным t'' и t''' берутся элементарно. Обратим сразу внимание на временную ограниченность полученного решения уравнения Шредингера: так как первая поправка должна быть таковой по отношению к нулевому приближению, то, взяв интеграл по t'' , имеем

$$|\Phi^{(1)}(n, t|n', t')| = \frac{\sin \left(\frac{E_n - E_{n'}}{2\hbar}(t' - t) \right)}{\frac{E_n - E_{n'}}{2\hbar}(t' - t)} \cdot |\langle n | \delta H | n' \rangle| \cdot \frac{t' - t}{\hbar} \ll 1,$$

откуда следует ограничение на временнóй интервал $t' - t$ сверху,

$$t' - t \ll \frac{\hbar}{|\delta \tilde{H}|},$$

где величина модуля матричного элемента оператора «возмущения» $\{ |\langle n | \delta H | n' \rangle| \} = |\delta \tilde{H}|$ взята в некотором эффективном значении для тех состояний $|n\rangle$ и $|n'\rangle$, которые впоследствии будут

существенными при формировании статистического состояния системы (т. е. микроскопических состояний, входящих в принимаемый при статистическом рассмотрении системы энергетический слой δE (см. т. 2, гл. 1, § 3)).

Отметим физический смысл величины квадрата модуля амплитуды $\Phi(n, t|n', t')$,

$$|\Phi(n, t|n', t')|^2 = |\varphi(n, t|n', t')|^2 = W(n, t|n', t'),$$

которая в соответствии с ее квантовомеханическим пониманием представляет вероятность обнаружить систему в состоянии n' к моменту времени t' , если в момент времени t она находилась в состоянии n .

Поэтому, если система в момент t находилась не в чистом квантовомеханическом состоянии $\psi_n(q)$, а в смешанном состоянии $\{w_{n'}(t); \psi_{n'}(q)\}$, то вероятность обнаружить систему в состоянии n в момент времени $t' > t$ будет равна

$$w_n(t') = \sum_{n'} w_{n'}(t) W(n', t|n, t') = \sum_{n'} w_{n'}(t) \Phi^*(n', t|n, t') \Phi(n', t|n, t').$$

Располагая решением уравнения Шрёдингера, подставим в это выражение следующие комбинации, ограничиваясь вторым порядком по δH включительно:

$$\Phi^{(0)*}(n', t|n, t') \Phi^{(0)}(n', t|n, t') = \Delta(n - n'),$$

$$\begin{aligned} \Phi^{(1)*}(n', t|n, t') \Phi^{(0)}(n', t|n, t') + \Phi^{(0)*}(n', t|n, t') \Phi^{(1)}(n', t|n, t') = \\ = \Delta(n - n') (\Phi^{(1)*}(n, t|n, t') + \Phi^{(1)}(n, t|n, t')) = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi^{(1)*}(n', t|n, t') \Phi^{(1)}(n', t|n, t') = |\langle n | \delta H | n' \rangle|^2 \cdot 4 \sin^2 \frac{E_{n'} - E_n}{2\hbar} (t' - t) = \\ = \sum_{n''} \Delta(n'' - n') |\langle n | \delta H | n'' \rangle|^2 \cdot 4 \sin^2 \frac{E_{n''} - E_n}{2\hbar} (t' - t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi^{(0)*}(n', t|n, t')\Phi^{(2)}(n', t|n, t') + \Phi^{(2)*}(n', t|n, t')\Phi^{(0)}(n', t|n, t') = \\ = -\Delta(n - n') \sum_{n''} |\langle n|\delta H|n''\rangle|^2 \cdot 4 \sin^2 \frac{\frac{E_{n''} - E_n}{2\hbar}(t' - t)}{(E_{n''} - E_n)^2}. \end{aligned}$$

Разобьем комбинацию $(\sin x/x)^2$ на два сомножителя, положим $t' = t + \tau (\tau > 0)$ и введем обозначение

$$I(E_n - E_{n'}, \tau) = \frac{\sin\left(\frac{E_n - E_{n'}}{2\hbar}\tau\right)}{\pi(E_n - E_{n'})} \cdot \frac{\sin\left(\frac{E_n - E_{n'}}{2\hbar}\tau\right)}{\frac{E_n - E_{n'}}{2\hbar}\tau}.$$

Тогда для начальной стадии эволюции смешанного состояния системы (т. е. распределения $w_n(t')$) получаем, переместив слагаемое, содержащее $w_n(t)$, налево, поделив обе части равенства на τ , и убирая при суммировании один штрих, соотношение

$$\frac{w_n(t + \tau) - w_n(t)}{\tau} = \sum_{n'} (w_{n'}(t) - w_n(t)) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|\delta H|n'\rangle|^2 I(E_n - E_{n'}, \tau),$$

ограниченное условием

$$\tau \ll \frac{\hbar}{|\delta \tilde{H}|},$$

и которое, оставаясь целиком квантовомеханическим, уже приобретает черты кинетического уравнения (хотя им еще не является).

§ 2. Статистические системы. Огрубление шкалы времени и закон сохранения энергии

Обратимся теперь к статистическим системам, т. е. системам многих ($N \gg 1$) частиц, удовлетворяющим всем необходимым условиям, обеспечивающим их «статистичность» (см. т. 1, гл. 1 и т. 2, гл. 1, § 2-в). Напомним, что интервал между энергетическими уровнями в такой системе очень мал: если для идеальной системы N частиц он оказывается зависящим от числа частиц как $\Delta E_n \sim \varepsilon N^{-1/3}$,

где ε — средняя энергия, приходящаяся на одну частицу системы (вырождение самих энергетических уровней E_n огромно и имеет факториальную по N зависимость), то с учетом взаимодействия частиц системы друг с другом за счет частичного снятия вырождения интервал между энергетическими уровнями еще более сужается.

Рассматривая в качестве исходной позиции в постановке аппарата статистической механики изолированную систему многих тел, т. е. фиксируя макроскопическое состояние системы макроскопическими же параметрами, энергия \mathcal{E} , объем V и число частиц N , и учитывая аддитивную структуру этих параметров, в частности, $\mathcal{E} = N\varepsilon \sim N^1$, фиксация самой величины \mathcal{E} допустима в пределах так называемого «энергетического слоя» $\delta\mathcal{E}$, удовлетворяющего условию

$$\Delta E_n \leq \delta\mathcal{E} < \varepsilon N^{1-\alpha},$$

где $\alpha > 1$ (согласно выводам, полученным на основании канонического формализма Гиббса, $\alpha = 1/2$, см. более подробно т. 2, гл. 1, § 3 и 4).

Как бы «размазывая» внутри энергетического слоя $\delta\mathcal{E}$ (который может иметь внутри себя множество тесно расположенных уровней E_n) энергетический аргумент \mathcal{E} и желая сохранить тот его смысл и по отношению к зависимости от него интересующей нас величины w_n (т. е. полагая эту функцию в масштабе ΔE_n тоже достаточно размазанной и достаточно плавной функцией энергетического аргумента), необходимо отметить, что эта возможность реализуется не при всех значениях τ . Однако начиная с определенного значения этого интервала величина $I(E_n - E_{n'}, \tau)$ приобретает характер δ -функции, обеспечивающей закон сохранения энергии в квантовых переходах, происходящих в изолированной системе, а, следовательно, и появление осмысленного и «законного» энергетического аргумента как общего параметра системы.

Действительно, первый сомножитель в формуле для $I(E_n - E_{n'}, \tau)$ имеет вид быстро осциллирующей допредельной δ -функции Дирака, которая имеет не скомпенсированный этими плотными осцилляциями горб высотой $\tau/2\pi\hbar$ в области

$$0 \leq |E_{n'} - E_n| < \frac{\pi\hbar}{\tau},$$

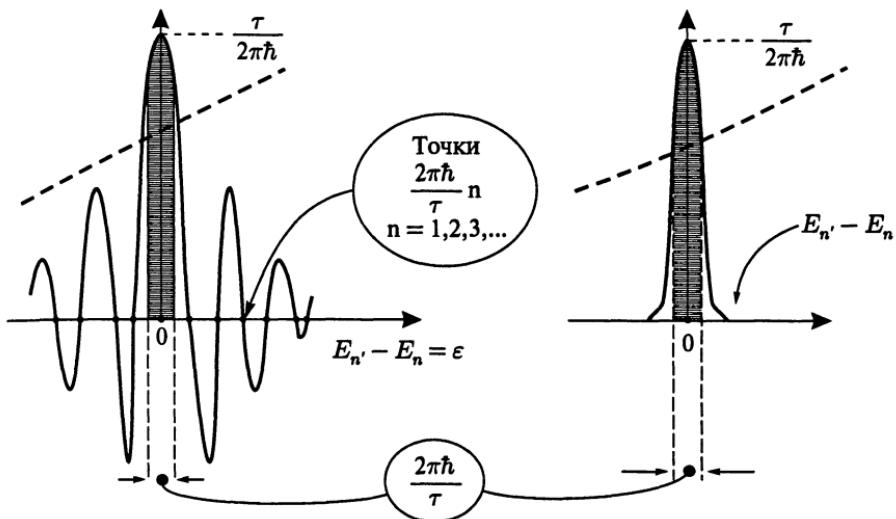


Рис. 1.1. График допредельной функции $\tilde{\delta}(E_{n'} - E_n)$ и эквивалентной ей остро сосредоточенной около нуля своего аргумента функции. Пунктирной линией изображен плавно меняющийся в масштабе ΔE_n множитель, сопровождающий функцию $I(E_{n'} - E_n, \tau)$

который в присутствии плавных в масштабе ΔE_n множителей, зависящих от $E_{n'}$, можно заменить на острососредоточенную около нуля своего аргумента «физическую» δ -функцию (см. рис. 1.1).

Действительно, записывая первый множитель в функции I в виде интеграла,

$$\begin{aligned} \frac{\sin \frac{E_{n'} - E_n}{2\hbar} \tau}{\pi(E_{n'} - E_n)} &= \tilde{\delta}(E_{n'} - E_n, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\tau}{2\hbar}}^{\frac{\tau}{2\hbar}} e^{i(E_{n'} - E_n)x} dx = \\ &= \frac{1}{E_n} \cdot \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{E_n \tau}{2\hbar}}^{\frac{E_n \tau}{2\hbar}} \exp i \left(1 - \frac{E_{n'}}{E_n} \right) y dy, \end{aligned}$$

Учитывая, что в области нуля своего аргумента величина второго множителя, имеющего вид $(\sin x/x)_{x \rightarrow 0}$, стремится к единице,

получаем в пределе $E_n\tau/2\hbar \rightarrow \infty$, что

$$\begin{aligned} I(E_n - E_{n'}, \tau) \Big|_{\tau \gg \hbar/E_n} &= \frac{1}{E_n} \tilde{\delta} \left(1 - \frac{E_{n'}}{E_n}, \tau \right) \Big|_{\tau \gg \hbar/E_n} \longrightarrow \\ &\longrightarrow \frac{1}{E_n} \delta \left(1 - \frac{E_{n'}}{E_n} \right) = \delta(E_n - E_{n'}). \end{aligned}$$

Таким образом, ограничение величины τ снизу, $\tau \gg \hbar/E_n$, обеспечивает появление при рассмотрении изолированной системы макроскопического понимания закона сохранения энергии, величину которой теперь можно использовать в качестве параметра термодинамического состояния системы.

Общее ограничение, которому в нашем рассмотрении должен быть подчинен интервал времени

$$\tau = t' - t,$$

имеет вид

$$\frac{\hbar}{E_n} \ll \tau \ll \frac{\hbar}{|\delta \tilde{H}|}.$$

Выполнение этого условия, с одной стороны, обеспечивает справедливость полученного для функции $w_n(t + \tau)$ выражения, с другой — дает право говорить об определенном значении энергии системы, которое можно использовать в качестве аргумента функции w_n как в момент времени t , так и в момент $t + \tau$. Полученное нами выражение для $w_n(t + \tau)$ в этих условиях приобретает вид

$$\frac{w_n(t + \tau) - w_n(t)}{\tau} = \sum_{n'} (w_{n'}(t) - w_n(t)) \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \delta H | n' \rangle|^2 \delta(E_n - E_{n'}).$$

Конструкция, стоящая в правой части после $(w_{n'} - w_n)$, вместе с δ -функцией представляет известную формулу теории квантовых переходов. Действительно, полагая $n' \neq n$ (слагаемое с $n' = n$ в правой части все равно выпадает) и вспоминая, что величина

$$|\Phi(n', t | n, t + \tau)|^2 = W(n', t | n, t + \tau)$$

определяет вероятность обнаружить систему в состоянии n в момент времени $t + \tau$, если в момент t она находилась в состоянии n' (т. е. вероятность перехода $n' \rightarrow n$ за время τ), получаем для скорости подобных квантовых переходов, ограничиваясь при этом низшим по теории возмущений ее порядком,

$$\begin{aligned} w(n'|n) &= \frac{\partial}{\partial \tau} W(n', t|n, t + \tau) \cong \frac{\partial}{\partial \tau} |\Phi^{(1)}(n', t|n, t + \tau)|^2 = \\ &= |\langle n|\delta H|n'\rangle|^2 \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{2 \sin \left(\frac{E_{n'} - E_n}{2\hbar} \tau \right)}{E_{n'} - E_n} \right)^2 = \\ &= |\langle n|\delta H|n'\rangle|^2 \frac{2 \sin \left(\frac{E_{n'} - E_n}{\hbar} \tau \right)}{\hbar(E_{n'} - E_n)} = w(n|n'). \end{aligned}$$

При выполнении условия $\tau \gg \hbar/E_n$ зависимость этой скорости квантовых переходов от τ пропадает, а конструкция с синусом превращается в δ -функцию, и мы получаем, что

$$w(n|n') = w(n'|n) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n|\delta H|n'\rangle|^2 \delta(E_{n'} - E_n).$$

§ 3. Переход к кинетической шкале времени и построение кинетического уравнения Паули

Обратимся теперь к проблеме построения кинетического уравнения для вероятности $w_n(t)$. Располагая общей картиной поведения вероятности $w_n(t+\tau)$ как функции (см. рис. 1.2), мы выяснили, что внутри интервала $\tau < \hbar/E_n$ величина w_n еще не может сохранять энергию состояния в качестве своего аргумента и поэтому служить характеристикой эволюционного процесса, происходящего во всей системе, еще не в состоянии. Складывающаяся ситуация аналогична той, которая возникла в классической теории при рассмотрении систем типа разреженного газа в связи с выходом эволюционного процесса на кинетический этап (см. т. 3, гл. 5, § 6),

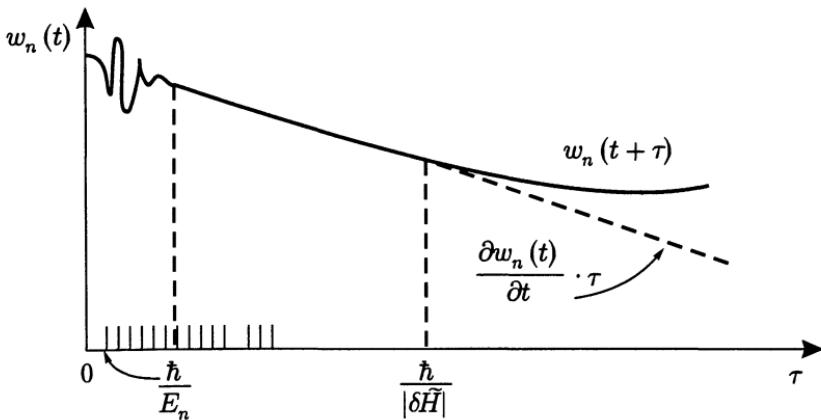


Рис. 1.2. Общий характер зависимости от времени вероятности $w_n(t + \tau)$

когда одиночастичная функция распределения перестает быть атрибутом какой-то одной избранной частицы, а уже управляет временной эволюцией всей системы. Чтобы решить ту же проблему в рассматриваемом нами случае, необходимо перейти к огрубленной (уже не квантовомеханической) шкале времени, в которой любое, даже малое его изменение $\Delta t \gg \hbar/E_n$. Ограничение же на величину τ сверху не позволяет продвинуться во времени за пределы линейной зависимости функции $w_n(t + \tau)$ по τ , т. е. в этой огрубленной шкале мы можем определить только производную функции w_n по «огрубленному» (кинетическому) времени

$$\left. \frac{w_n(t + \tau) - w_n(t)}{\tau} \right|_{\substack{\tau \rightarrow 0 \\ \tau \gg \hbar/E_n}} = \frac{\partial w_n(t)}{\partial t}.$$

Определив таким образом производную функции $w_n(t)$ по времени, мы приходим к кинетическому уравнению относительно вероятности обнаружить систему в состоянии n в момент t ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial w_n(t)}{\partial t} &= \sum_{n'} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \delta H | n' \rangle|^2 \delta(E_n - E_{n'}) (w_{n'}(t) - w_n(t)) = \\ &= \sum_{n'} w(n|n') (w_{n'}(t) - w_n(t)). \end{aligned}$$

Это уравнение было получено Вольфгангом Паули (W. Pauli, 1928). Используя свойство симметрии вероятности перехода в единицу времени $w(n|n') = w(n'|n)$, можно записать это уравнение в виде

$$\frac{\partial w_n}{\partial t} = \sum_{n'} (w_{n'} w(n'|n) - w_n w(n|n')),$$

допускающем его наглядную физическую интерпретацию (используемую подчас как простой способ получения этого уравнения), весьма сходную с интерпретацией классического интеграла столкновений Больцмана (см. т. 3, гл. 5, § 6): слагаемое $w_n \cdot w(n'|n)$ — это убыль за секунду вероятности обнаружить систему в состоянии n за счет переходов во все другие состояния n' , а слагаемое $w_{n'} w(n'|n)$ представляет соответственно обратный процесс. Баланс этих противоположно направленных процессов и определяет общую скорость изменения функции $w_n(t)$. В связи с приведенной интерпретацией кинетическое уравнение Паули называют уравнением кинетического баланса (в англоязычной литературе используется трудно переводимый на русский язык термин Master equation).

§ 4. Изолированные системы. Микроканоническое распределение Гиббса. Проблема обращения времени

Рассматривая изолированную статистическую систему, макроскопическое состояние которой фиксируется набором параметров (\mathcal{E}, V, N) (в этом случае оператор δH не включает взаимодействий с внешними полями, и кинетика системы обусловлена только внутренними факторами), и описывая эволюцию распределения w_n в кинетической шкале времени, т. е. с помощью уравнения Паули, обеспечивающего закон сохранения энергии при изменении состояний системы, мы фактически заранее определяем зависимость функции w_n от энергетического аргумента. Действительно, если первоначально в момент t микроскопическое значение энергии E_n входило в энергетический слой $\delta \mathcal{E}$, определяемый квазикронекеровской функцией (см. более подробно т. 2, гл. 1, § 3)

$$\Delta(\mathcal{E} - E_n) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |E_n - \mathcal{E}| < \delta \mathcal{E}, \\ 0 & \text{в случае } |E_n - \mathcal{E}| > \delta \mathcal{E}, \end{cases}$$

то с течением времени в силу закона сохранения энергии изменяющиеся состояния системы не должны выходить за пределы этого энергетического интервала, т. е. зависимость функции w_n от энергии \mathcal{E} должна иметь вид

$$w_n(\mathcal{E}, t) = \Delta(\mathcal{E} - E_n) \cdot f_n(t).$$

Покажем теперь, что уравнение Паули является уравнением релаксационного типа (обязательное требование, предъявляемое кинетическим уравнениям, описывающим эволюцию статистической системы). Положим, сохраняя в написании только аргумент t ,

$$w_n(t) = w_n e^{-\nu t}.$$

Тогда согласно уравнению Паули получаем для величин w_n систему линейных алгебраических уравнений

$$-\nu w_n = \sum_{n'} w(n|n')(w_{n'} - w_n).$$

Умножая обе части равенства на w_n и суммируя по n , получаем, используя симметрию функций $w(n|n') = w(n'|n)$ и производя взаимную замену индексов суммирования $n \leftrightarrow n'$,

$$-\nu \sum_n w_n^2 = \sum_{nn'} w(n|n')(w_{n'} - w_n)w_n = - \sum_{nn'} w(n|n')(w_{n'} - w_n)w_{n'},$$

откуда, взяв полусумму вариантов записи правой части, получаем

$$\nu = \frac{1}{\sum_n w_n^2} \sum_{nn'} \frac{1}{2} w(n|n')(w_{n'} - w_n)^2 \geq 0.$$

Из этого соотношения вытекают очень важные общие следствия.

а) Так как все слагаемые под знаком двойной суммы неотрицательны, то в случае $\nu = 0$, когда $\partial w_n(t)/\partial t = 0$, т. е. система достигла своего статического состояния $w_n(t) = \text{const}$, все ее слагаемые обращаются в ноль. Это означает, что в рассматриваемом нами случае $w(n|n') \neq 0$ (отсутствие полностью запрещенных переходов между состояниями, энергии которых входят в энергетический

интервал $\delta\mathcal{E}$) все микроскопические состояния внутри энергетического слоя $\Delta(\mathcal{E} - E_n)$ оказываются равновероятными, т. е.

$$w_n(\mathcal{E}) = \frac{\Delta(\mathcal{E} - E_n)}{\Gamma(\mathcal{E})},$$

где нормировочный коэффициент $1/\Gamma(\mathcal{E})$, определяемый из условия

$$\Gamma(\mathcal{E}) = \sum_n \Delta(\mathcal{E} - E_n),$$

представляет собой число микроскопических состояний, с помощью которых реализуется данное макросостояние (\mathcal{E}, V, N) , т. е. статистический вес этого состояния. Таким образом изначально квантовомеханическое рассмотрение эволюционного процесса, происходящего в изолированной системе многих тел, после соответствующего огрубления шкалы времени и перехода к кинетической фазе этого процесса приводит нас к микроканоническому распределению Гиббса (T. W. Gibbs, 1902), являющемуся в исходно-равновесной статистической теории основной аксиомой (аксиомой о равновероятности микроскопических состояний системы, реализующих ее макроскопическое состояние как изолированное и фиксируемое параметрами (\mathcal{E}, V, N) (см. т. 2, гл. 1, § 3–5)), т. е. отправным и полностью достаточным положением, из которого следуют каноническое, большое каноническое распределения Гиббса и весь рабочий аппарат равновесной статистической механики.

Ввиду того, что все величины $\nu \geq 0$, зависимость функции распределения по микроскопическим состояниям

$$w_n(\mathcal{E}, t) = \Delta(\mathcal{E} - E_n) f_n(t)$$

от времени имеет явно выраженный релаксационный характер, направленный к формированию микроканонического распределения,

$$f_n(t) = \frac{1}{\Gamma(\mathcal{E})} + \sum_{\nu > 0} a_\nu e^{-\nu t} \sim \frac{1}{\Gamma(\mathcal{E})} + \text{const} \cdot e^{-\nu_{\min} t}.$$

Второй вариант этой формулы для $f_n(t)$ приведен для случая, когда спектр величин ν дискретен, $\{\nu_1 = \nu_{\min}, \nu_2, \dots\}$, когда реализуется

последовательность релаксационных процессов экспоненциально-го типа, что, конечно, не обязательно, и в других случаях релаксация к равновесному распределению может иметь и не экспоненциальный характер.

б) С принятием кинетического уравнения Паули парадокс Лошмидта (J. Loschmidt, 1876) преодолевается сам собой. Речь идет о несовместимости \mathcal{H} -теоремы Больцмана (L. Boltzmann, 1872) с процедурой обращения времени.

Сама \mathcal{H} -теорема доказывается на основе кинетического уравнения Паули элементарно. Определим \mathcal{H} -функцию традиционным образом как

$$\mathcal{H}(t) = \sum_n w_n(t) \ln w_n(t)$$

и выясним знак скорости изменения этой величины в процессе кинетической эволюции системы. Дифференцируя \mathcal{H} -функцию по времени и учитывая нормированность распределения $w_n(t)$ и подчиненность функции $w_n(t)$ уравнению Паули, имеем, учитывая, что $w(n|n') = w(n'|n) > 0$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} &= \sum_n \frac{\partial w_n}{\partial t} + \sum_n \ln w_n \cdot \frac{\partial w_n}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \sum_n w_n(t) + \sum_{nn'} w(n|n')(w_{n'} - w_n) \ln w_n = \\ &= - \sum_{nn'} w(n|n')(w_{n'} - w_n) \ln w_{n'} = \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{nn'} w(n|n')(w_{n'} - w_n) \ln \frac{w_{n'}}{w_n} \leqslant 0. \end{aligned}$$

Таким образом имеем $\partial \mathcal{H}(t)/\partial t \leqslant 0$, что и составляет содержание \mathcal{H} -теоремы.

С поверхностной точки зрения обращение времени $t \rightarrow -t$ должно привести к результату $\mathcal{H} \geqslant 0$, противоречащему \mathcal{H} — теореме, и к появлению раскачивающихся решений типа $e^{+\nu|t|}$, т. е. к антикинетическому поведению системы, для которой равновесное состояние является неустойчивым. Однако подобный вывод

основан на недоразумении: при переходе к кинетической шкале времени $\tau \gg \hbar/E_n$ знак δ -функции, обеспечивающей появление закона сохранения энергии в классическом его выражении, определяется знаком величины $\tau = t' - t$ (в предыдущем изложении у нас было $\tau > 0$ и этот знак просто не фиксировался),

$$I(\Delta E, \tau) = \frac{\sin \frac{\Delta E}{2\hbar} \tau}{\pi \Delta E} \cdot \frac{\sin \frac{\Delta E}{2\hbar} \tau}{\frac{\Delta E}{2\hbar} \tau} \rightarrow \tilde{\delta}(\Delta E) \cdot \text{sign}(\tau),$$

и поэтому «отраженный» во времени вариант кинетического уравнения Паули будет выглядеть как

$$\frac{\partial w_n(t)}{\partial t} = - \sum_n w(n|n') (w_{n'}(t) - w_n(t)).$$

Тогда все $\nu \leq 0$, и никакой «раскачки» при $t \rightarrow -\infty$ в системе не произойдет. Таким образом, переход к немеханической шкале времени в рамках уравнения Паули исключает парадокс Лошмидта: при обращении времени эволюция системы все равно остается кинетической.

§ 5. Переход к уравнению Больцмана

Покажем теперь, что уравнение Паули содержит в себе в качестве частного случая кинетическое уравнение Больцмана (и его квантовые обобщения). Так как традиционное уравнение Больцмана (см. т. 3, гл. 5, § 6) описывает кинетику классического разреженного газа, релаксационные процессы в котором обеспечиваются парным взаимодействием частиц друг с другом, предположим, что наша система $H + \delta H$ представляет почти классический и почти идеальный газ, характеризуемый гамильтонианом идеальной системы, $H = H_0$, в то время как к оператору δH отнесено все взаимодействие частиц друг с другом,

$$\delta H = H_1 = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

(обобщение на случай несколько-компонентной системы можно будет сделать потом по мере необходимости). Фигурирующий в предыдущем изложении индекс n в данном случае относится к N -частичному состоянию идеального газа, которое можно зафиксировать с помощью набора импульсов $(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N)$, а само состояние ψ_n представить в виде соответствующего произведения плоских волн

$$\frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r} \right\}.$$

Введем в рассмотрение одночастичную функцию распределения (средние числа заполнения), нормированную на полное число частиц N ,

$$F(\vec{p}_1) \equiv n(\vec{p}_1) = \int w_n(\vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N) d\vec{p}_2 \dots d\vec{p}_N.$$

Если ради простоты изложения пренебречь учетом принципа Паули (при необходимости этот учет можно будет восстановить), т. е. опустить операции симметризации и антисимметризации, то функции w_n и $w_{n'}$ в данном случае идеальных систем будут иметь вид

$$w_n = \prod_{i=1}^N \frac{1}{N} n(\vec{p}_i), \quad w_{n'} = \prod_{i=1}^N \frac{1}{N} n(\vec{p}'_i).$$

Учитывая соотношение

$$\frac{1}{V} \int_{(V)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r} \right\} d\vec{r} = \delta(\vec{p} - \vec{p}'),$$

получаем для вероятности перехода $w(n|n')$ (ненулевые слагаемые будут только те, в которых $i' = i$ и $j' = j$) в результате учета только парных соударений

$$\begin{aligned} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n | \delta H | n' \rangle|^2 \delta(E_n - E_{n'}) &= \\ &= \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{p}_i \vec{p}_j | \Phi_{ij} | \vec{p}'_i \vec{p}'_j \rangle|^2 \delta_E(i, j) \prod_{k(k \neq i, j)} \delta(\vec{p}_k - \vec{p}'_k), \end{aligned}$$

где матричный элемент потенциала взаимодействия частиц

$$\Phi_{i,j} = \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$$

рассчитывается с помощью функций плоских волн и где введена сокращенная запись для δ -функции от энергии

$$\delta_E(i, j) = \delta(E_{pi} + E_{pj} - E_{p'i} - E_{p'j}).$$

Учитывая, что стоящее в правой части кинетического уравнения Паули суммирование по n' теперь означает интегрирование по $\vec{p}'_1, \vec{p}'_2, \dots, \vec{p}'_N$, умножим обе части этого уравнения на N и проинтегрируем их по нештрихованным $\vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N$. В правой части выберем все $(N - 1)$ слагаемых, содержащих оставшуюся «в живых» переменную \vec{p}_1 . Так как для $k \neq 1, 2$

$$\iint \frac{n(\vec{p}_k)}{N} \delta(\vec{p}_k - \vec{p}'_k) d\vec{p}_k d\vec{p}'_k = \iint \frac{n(\vec{p}'_k)}{N} \delta(\vec{p}_k - \vec{p}'_k) d\vec{p}_k d\vec{p}'_k = 1,$$

то для отобранных слагаемых с «живым» \vec{p}_1 получаем

$$N(N - 1) \int d\vec{p}_2 \int d\vec{p}'_1 d\vec{p}'_2 \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 | \Phi_{1,2} | \vec{p}'_1 \vec{p}'_2 \rangle|^2 \times \\ \times \delta_E(1, 2) \left(\frac{n(\vec{p}'_1)n(\vec{p}'_2)}{N^2} - \frac{n(\vec{p}_1)n(\vec{p}_2)}{N^2} \right).$$

Под знаком интеграла в этом выражении стоит число переходов $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \rightarrow (\vec{p}'_1, \vec{p}'_2)$, происходящих в системе за секунду в результате рассеяния частиц 1 и 2 на потенциале $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$. Этот процесс строго детерминирован. Подобная задача в механике решается точно, и при заданных параметрах рассеяния — прицельного расстояния a , расположения плоскости, в которой происходит рассеяние (угол φ), дает точный ответ для конечных импульсов частиц в процессе $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \rightarrow (\tilde{\vec{p}}_1, \tilde{\vec{p}}_2)$. Вследствие указанной детерминированности обратный процесс, когда за исходные значения импульсов берутся значения $\tilde{\vec{p}}_1$ и $\tilde{\vec{p}}_2$, при тех же параметрах рассеяния, должен приводить к нештрихованным значениям импульсов частиц $(\tilde{\vec{p}}_1, \tilde{\vec{p}}_2) \rightarrow (\vec{p}_1, \vec{p}_2)$.

Кроме того, в силу законов сохранения импульса и энергии в задаче двух тел вектор относительной скорости частиц 1 и 2, не изменяя своей величины

$$|\vec{u}| = \left| \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{m} \right| = \left| \frac{\tilde{\vec{p}}_1 - \tilde{\vec{p}}_2}{m} \right| = |\vec{u}'| = u,$$

поворачивается на угол рассеяния ψ , а якобиан перехода от переменных \vec{p}_1 и \vec{p}_2 к переменным $\tilde{\vec{p}}_1$ и $\tilde{\vec{p}}_2$ в силу однозначности решения механической задачи и взаимо обратимости $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \longleftrightarrow (\tilde{\vec{p}}_1, \tilde{\vec{p}}_2)$ равен единице

$$\left| \frac{\partial(\tilde{\vec{p}}_1, \tilde{\vec{p}}_2)}{\partial(\vec{p}_1, \vec{p}_2)} \right| = 1.$$

Поэтому интегрирование можно производить как по импульсам «до столкновения», так и по импульсам частиц «после» их столкновения (т. е. формально $d\tilde{\vec{p}}_1 d\tilde{\vec{p}}_2 = d\vec{p}_1 d\vec{p}_2$).

В силу строгой определенности конечных значений импульсов частиц 1 и 2 в результате их рассеяния друг на друге значения \vec{p}'_1 и \vec{p}'_2 , по которым производится интегрирование в написанном выше выражении для фрагмента левой части кинетического уравнения Паули, могут быть не любыми, а лишь «конечными» $\tilde{\vec{p}}_1$ и $\tilde{\vec{p}}_2$, т. е. стоящий под знаком этих интегралов квадрат модуля перехода $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \rightarrow (\vec{p}'_1, \vec{p}'_2)$ должен в результате решения задачи двух тел содержать δ -функции $\delta(\vec{p}'_1 - \tilde{\vec{p}}_1)$ и $\delta(\vec{p}'_2 - \tilde{\vec{p}}_2)$ (в результативной части обсуждаемого вклада в кинетическое уравнение тем самым пропадает разница между штрихованными и «оволнованными» значениями импульсов частиц 1 и 2), и он сворачивается в выражение, представляющее число переходов $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \rightarrow (\tilde{\vec{p}}_1, \tilde{\vec{p}}_2)$ за секунду и поэтому содержит элемент объема $u \cdot a da d\varphi = u d\omega$ (записываемого часто в виде $\sigma(u, \psi, \varphi) \sin \psi d\psi d\varphi$, где σ — соответствующее сечение процесса рассеяния), а символическое суммирование по n' предусматривает сумму по всем возможным конечным состояниям, т. е. интеграл по всем допустимым параметрам столкновений.

Остальные слагаемые, не содержащие импульса \vec{p}_1 , вследствие соотношения

$$d\vec{p}_i d\vec{p}_j = d\tilde{\vec{p}}_i d\tilde{\vec{p}}_j$$

и взаимной симметрии процессов $(\vec{p}_i \vec{p}_j) \longleftrightarrow \tilde{\vec{p}}_i \tilde{\vec{p}}_j$ обращаются в нуль,

$$\int d\vec{p}_2 d\vec{p}_3 \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{p}_2 \vec{p}_3 | \Phi_{2,3} | \vec{p}'_2 \vec{p}'_3 \rangle|^2 \delta_E(2, 3) \times \\ \times \left(\frac{n(\vec{p}'_2)n(\vec{p}'_3)}{N^2} - \frac{n(\vec{p}_2)n(\vec{p}_3)}{N^2} \right) = 0.$$

и мы получаем, переходя к более традиционным обозначениям (т.е. заменяя \vec{p}_1 на \vec{p} , \vec{p}_2 на \vec{p}_1 и $\tilde{\vec{p}}_1$ на \vec{p}' , $\tilde{\vec{p}}_2$ на \vec{p}'_1) для одночастичной функции распределения

$$f(\vec{p}) = nF(\vec{p}) = \frac{1}{v}n(\vec{p}),$$

где $v = V/N = 1/n = \text{const}$, классическое кинетическое уравнение Больцмана для случая пространственно однородной изолированной системы (см. т. 3, гл. 5, § 6)

$$\frac{\partial f(\vec{p}, t)}{\partial t} = \frac{1}{v} \int (f(\vec{p}', t)f(\vec{p}'_1, t) - f(\vec{p}, t)f(\vec{p}_1, t)) u \, d\omega \, d\vec{p}_1.$$

В случае, когда возникает необходимость рассматривать кинетику вырожденных квантовых газов, интеграл столкновений несколько усложняется за счет проведения операций симметризации (в бозе-случае) или антисимметризации (в ферми-случае) функций состояний, с помощью которых рассчитывается матричный элемент $\langle n | \delta H | n' \rangle$. При использовании представления вторичного квантования, где свойства симметрии учтены заблаговременно, соответствующий интеграл столкновений получился бы автоматически. Так, в случае вырожденной ферми-системы, используемой в качестве модели электронного газа в металлах, принцип Паули накладывает достаточно жесткие ограничения на начальные и конечные значения импульсов: расчет квадрата матричного элемента $\langle \vec{p}_1 \vec{p}_2 | \Phi_{1,2} | \vec{p}'_1 \vec{p}'_2 \rangle$ для процесса $(\vec{p}_1, \vec{p}_2) \rightarrow (\vec{p}'_1, \vec{p}'_2)$ даст множитель $n(\vec{p}_1)n(\vec{p}_2)$ для начальных состояний (они заняты этими взаимодействующими частицами) и $(1 - n(\vec{p}'_1))(1 - n(\vec{p}'_2))$ для конечных (переход на незанятые места) и наоборот при обратных переходах $(\vec{p}'_1, \vec{p}'_2) \rightarrow (\vec{p}_1, \vec{p}_2)$. Ограничивааясь здесь только сделанными замечаниями, мы по мере необходимости вернемся к проблеме вырожденных систем в дальнейшем.

Глава 2

Общие замечания и вопросы моделирования системы

Несколько слов об истории вопроса. Понятие «электронный газ» было введено Друде (P. Drude, 1900), что способствовало объяснению некоторых характерных особенностей металлических проводников. Заметим, что сам электрон как частица, несущая заряд, был открыт за три года до этого Томсоном (W. Thomson, он же лорд Кельвин). Лоренц (H. Lorentz) в 1904–1905 годах поднял теорию электронного газа в металлах еще в доквантовом варианте до уровня кинетической теории. Для вырожденного электронного газа соответствующие расчеты были выполнены несколько позже Зоммерфельдом (A. Sommerfeld, 1928) — через три года после формулировки по отношению к электронам принципа запрета (W. Pauli, 1925). Большую роль в развитии квантовой электронной теории в металлах сыграли фундаментальные работы Феликса Блоха (F. Bloch, 1928–1930), который показал, что движение частицы в периодическом поле кристаллической решетки описывается не плоскими волнами, а так называемыми блоховскими функциями (не располагая точными аналитическими выражениями, эти функции в конкретных расчетах все равно приходится аппроксимировать соответствующим образом подправленными плоскими волнами), состояния частиц, описываемые этими функциями, периодическим полем решетки не рассеиваются, поэтому механизм возникновения сопротивления и связанных с ним других явлений переноса обусловлен в низкотемпературной области не непосредственным рассеянием электронов на ионах кристаллической решетки, а с рассеянием их на нарушениях ее строгой периодической структуры (неизбежные посторонние примеси, дефекты решетки — дислокации и, наконец, тепловые колебания самой решетки).

§ 1. Исключение учета положительно заряженного фона кристаллической решетки

В наших исследованиях, ориентированных на рассмотрение явлений переноса, происходящих реально в земных условиях, мы будем полагать электронный газ существенно вырожденным: при реальных его плотностях $n = N/V \sim 10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$ граничная энергия Ферми $\epsilon_F = \hbar^2/2m(3\pi^2N/V)^{2/3}$ оказывается порядка $10^5 \text{ K} \sim 10 \text{ eV}$, что на три десятичных порядка превышает комнатную температуру $\theta \sim 300 \text{ K}$, не говоря уже о «низких» температурах $\sim 1 - 10 \text{ K}$. Мы будем также полагать систему нерелятивистской: максимальная скорость электронов, соответствующая границе Ферми, имеет порядок 10^3 км/сек , что в тысячу раз меньше скорости света $c \approx 3 \cdot 10^5 \text{ км/сек}$, и в связи с этим будем полагать, что взаимодействие электронов осуществляется в соответствии с законом Кулона $\Phi(R) = e^2/R$, т. е. будем пренебречь ток-токовым взаимодействием движущихся заряженных частиц.

Рассматриваемая система в целом электрически нейтральна, т. е. она как минимум двухкомпонентна и состоит из положительно заряженной решетки малоподвижных ионов и отрицательно заряженного «свободного» электронного газа. Так как масса отдельных ионов в 10^4 раз и более превышает массу электрона, то они в силу своей инертности играют относительно небольшую роль в кинетике всей системы, и в ряде задач их присутствие можно заменить равномерно «размазанным» фоном типа желе (плотность заряда которого по модулю совпадает со средней плотностью объемного заряда электронного газа) или ограничиться учетом малых гармонических колебаний пространственной решетки, соответствующих температурному состоянию ионного остова твердого тела. По отношению же к самому электронному газу можно использовать идею Лоренца о кинетике легкой компоненты, существенно упрощающую проблему решения больцмановского кинетического уравнения в стационарном случае.

§ 2. Самосогласованное поле и плазменные колебания

Системы многих частиц с кулоновским взаимодействием их друг с другом обладают рядом специфических особенностей, связанных

с проявлением свойств возникающего в них вследствие кулоновского дальнодействия общего самосогласованного поля. Это в первую очередь коллективные колебания плотности неакустического характера, называемые плазменными, и свойство электростатистической экранировки помещенных в систему зарядов. Так как эти коллективные эффекты напрямую не связаны с проблемами электропроводности, ограничимся только кратким их описанием (см. более подробно т. 3, гл. 5, § 5; т. 2, гл. 3, § 1, а также т. 4, гл. 4).

Пренебрегая движениями ионной решетки и используя для нее модель равномерно размазанного желе, ограничимся чисто гидродинамическим рассмотрением явлений, связанных с изменением состояний общего самосогласованного поля и характерных для электронной плазмы в бесстолкновительном для нее приближении. Положим, что отклонения локальных значений массовой плотности электронного газа $\rho(t, \vec{r}) = mn(t, \vec{r})$ от невозмущенного ее значения $\rho_0 = mN/V$, компенсирующего электростатистический фон положительно заряженной ионной решетки, относительно мало, что локальная скорость движения плазмы $\vec{u}(t, \vec{r})$ имеет тот же порядок малости, и пренебрежем градиентом давления ∇P в выражении для плотности силы, действующей на 1 см^3 «бесстолкновительной» электронной плазмы $\vec{F}(t, \vec{r})$. Интересуясь только продольными эффектами, заметим, что отклонение плотности электронного газа от равновесного значения создает «возвращающее» электростатическое поле $\vec{E}(t, \vec{r})$, силовое воздействие которого на 1 см^3 системы равно $\vec{F}_{\text{эл}}(t, \vec{r}) = en(t, \vec{r})\vec{E}(t, \vec{r})$.

Тогда уравнение непрерывности, уравнение движения Эйлера и уравнение Пуассона для электростатического поля

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{u} &= 0, \\ \rho \dot{\vec{u}} &= F_{\text{эл}} - \nabla P, \\ \operatorname{div} \vec{E} &= 4\pi \frac{e}{m} (x\rho - \rho_0)\end{aligned}$$

после проведения их линеаризации

$$\begin{aligned}\rho(t, \vec{r}) &= \rho_0 + \rho_1(t, \vec{r}), \quad \rho_1(t, \vec{r}) \ll \rho_0; \\ u(t, \vec{r}) &= u_1(t, \vec{r}), \quad u_0 = 0; \quad \vec{E}(t, \vec{r}) = \vec{E}_1(t, \vec{r})\end{aligned}$$

приобретают вид системы уравнений

$$\begin{cases} \dot{\rho}_1(t, \vec{r}) + \rho_0 \operatorname{div} \vec{u}_1(t, \vec{r}) = 0, \\ \rho_0 \dot{\vec{u}}_1(t, \vec{r}) = \rho_0 \frac{e}{m} \vec{E}_1(t, \vec{r}), \\ \operatorname{div} \vec{E}_1(t, \vec{r}) = 4\pi \frac{e}{m} \rho_1(t, \vec{r}). \end{cases}$$

Дифференцируя первое уравнение по времени, исключая из него с помощью второго уравнения величину $\dot{\vec{u}}_1$, а с помощью третьего — величину $\operatorname{div} \vec{E}_1$, получаем линейное дифференциальное уравнение второго порядка относительно малых отклонений плотности

$$\ddot{\rho}_1(t, \vec{r}) + 4\pi \rho_0 \frac{e^2}{m^2} \rho_1(t, \vec{r}) = 0.$$

Полагая его решение в виде продольной волны

$$\rho_1(t, \vec{r}) = \rho_{k\omega} e^{\{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}\}},$$

получаем дисперсионное уравнение для частоты плазменных колебаний

$$\omega^2(k) = \omega_0^2 = \frac{4\pi e^2 n}{m}$$

— ленгмюровских (I. Langmuir, 1929) стоячих волн плотности, в котором зависимость от квадрата волнового числа k потеряна вследствие простейшей аппроксимации величины $\vec{F}(t, \vec{r})$.

Заметим, наконец, что для электронной плазмы при значениях $n \sim 10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$, $m \cong 0,9 \cdot 10^{-27} \text{ г}$, $e \cong 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ CGSE}$ энергия возбуждения коллективного колебания плотности оказывается достаточно высокой $\hbar\omega_0 \sim 10 \text{ eV} \sim 10^5 \text{ K}$ ($1 \text{ eV} \cong 1,16 \cdot 10^4 \text{ K}$) по сравнению с энергией одночастичных возбуждений электронного газа, образующих температурное размытие ($\theta \sim 300 \text{ K}$) сферы Ферми.

§ 3. Томас-фермиевская экранировка кулоновского потенциала

Вторым эффектом, связанным с наличием в системе обзанного дальнодействующему кулоновскому взаимодействию самосогласованного поля, является способность электронной плазмы эффек-

тивно экранировать поле находящихся в ней электрических зарядов. В статическом случае помещенный в начало координат $\vec{R} = 0$ заряд q поляризует среду, окружая себя частицами противоположного знака. Плотность их числа n начинает зависеть от расстояния R до возмущающего систему заряда q , в результате чего вокруг него в совокупности с его собственным полем q/R образуется ослабленное этой поляризацией эффективное поле $U(R) = -e\tilde{\varphi}(R)$ ($e_{\text{эл}} = -e$). Ограничивааясь самой грубой оценкой этого эффекта, положим, что химический потенциал электронного газа можно аппроксимировать химическим потенциалом вырожденной идеальной ферми-системы (см. т. 2, гл. 3, § 1), т. е.

$$\mu(R) = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n(R))^{2/3} = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3} \cdot \left(\frac{n(R)}{n} \right)^{2/3} = \epsilon_F \left(\frac{n(R)}{n} \right)^{2/3}.$$

Используя условие термодинамического равновесия системы во внешнем потенциальном поле (см. т. 1, гл. 1, § 6-б), имеем

$$\mu(R) + U(R) = \mu|_{R=\infty} = \epsilon_F,$$

что сразу определяет связь локальной плотности $n(R)$ с величиной эффективного потенциала $\tilde{\varphi}(R)$,

$$n(R) = n \left(1 - \frac{e\tilde{\varphi}(R)}{\epsilon_F} \right)^{3/2}.$$

Воспользовавшись уравнением Пуассона в электростатическом приближении, получаем второе соотношение, связывающее величины $n(R)$ и $\tilde{\varphi}(R)$:

$$\nabla^2 \tilde{\varphi}(R) = -4\pi q \delta(R) + 4\pi e(n(R) - n),$$

которое после исключения из него величины $n(R)$ и последующей его линеаризации в случае $e\tilde{\varphi}(R)/\epsilon_F \ll 1$ приобретает вид известного линейного дифференциального уравнения

$$(\nabla^2 - \kappa_{\text{TF}}^2) \tilde{\varphi}(R) = -4\pi q \delta(R), \quad \kappa_{\text{TF}}^2 = \frac{6\pi e^2 n}{\epsilon_F}.$$

Решение этого уравнения имеет вид кулоновского потенциала, создаваемого зарядом q , с томас-фермиевской экспоненциальной экранировкой (L. Thomas, 1926; E. Fermi, 1927)

$$\tilde{\varphi}(R) = \frac{q}{R} e^{-\kappa_{TF} R}.$$

Подставляя в формулу для радиуса экранировки электронной плазмы кулоновского взаимодействия $r_{TF} = 1/\kappa_{TF}$ величины n , e^2 и ϵ_F , характерные для вырожденного электронного газа, получаем, что эта величина имеет порядок боровского радиуса, т. е. менее одного ангстрема, $r_{TF} \sim 1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$.

§ 4. Критерий идеальности реального электронного газа в металлах

Обратимся теперь непосредственно к переносчику электрического заряда, электронному газу, полагая его вырожденной фермийской системой. Реальный электронный газ в металлах — это система с достаточно сильным кулоновским взаимодействием частиц друг с другом. При реальных его плотностях $n = N/V \sim 10^{22} - 10^{23} \text{ см}^{-3}$ средняя энергия взаимодействия частиц

$$\epsilon_{\text{кул}} = \frac{e^2}{a} = e^2 n^{1/3}$$

оказывается порядка 10 eV, и поэтому ожидаемый традиционный критерий идеальности системы

$$\frac{\epsilon_{\text{кул}}}{\epsilon_{\text{кин}}} = \frac{e^2/a}{(3/5)\epsilon_F} \cong 0,349 \frac{e^2}{\hbar^2} n^{-1/3} \ll 1$$

для существующих в земных условиях проводников не выполняется ввиду недостаточно высокой в них плотности числа электронов n . Энергия Ферми имеет тот же порядок $\epsilon_F \sim 10 \text{ eV}$, поэтому для большинства металлов отношение $\epsilon_{\text{кул}}/\epsilon_{\text{кин}}$ оказывается порядка 1,2, т. е. больше единицы. Чтобы этот критерий идеальности системы соответствовал хотя бы величине 0,1, плотность вырожденного ферми-газа должна иметь величину в 10^3 раз превышающую плотность электронного газа в реально существующих металлах.

В связи с этим, во-первых, возникает сомнение в правомерности использования в предыдущих оценках соотношений, заимствованных из теории идеальных ферми-систем, и, во-вторых, возникает естественная потребность осознать, почему, несмотря на откровенную неидеальность реального электронного газа, его термодинамические и кинетические особенности вполне удовлетворительно описываются на основе использования для него модели идеального ферми-газа.

Оказывается, как мы покажем ниже, что для электронов с импульсами, близкими к границе Ферми, вследствие действия принципа запрета Паули, затухание, обусловленное взаимодействием электронов друг с другом, оказывается исчезающе малым во всей области состояний, соответствующей температурному размытию среды Ферми. Это дает нам право сохранить общую схему кинетической теории, модифицируя в ней распределение электронов по скоростям в соответствии с распределением Ферми (E. Fermi, 1926) для идеального газа, и представлять в стационарном случае одночастичную функцию распределения в виде

$$F(\vec{r}, \vec{v}) = \frac{2m^3}{(2\pi\hbar)^3} n(\varepsilon), \quad n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/\theta} + 1},$$

где $\varepsilon = mv^2/2$, а условие $\int F(\vec{r}, \vec{v}) d\vec{v} = n$ определяет локальное значение химического потенциала $\mu = \mu(\theta, n)$.

При рассмотрении явлений переноса, характерных для нормальных (т. е. несверхпроводящих) проводников, роль возбужденных состояний свободных (т. е. не связанных с ионами решетки) электронов, являющихся носителями заряда, является определяющей. Специфика вырожденного ферми-газа связана со специфическим строением этих возбуждений: основное состояние системы, представляющее в импульсном пространстве заполненную сферу Ферми, нарушается переходом частицы из сферы Ферми или с ее поверхности в состояние с импульсом \vec{p} , большим граничного импульса Ферми, $|\vec{p}| > p_F$. Такое возбужденное состояние традиционно интерпретируется как рождение частицы вне сферы Ферми и вакантного места, именуемого дыркой, внутри нее. Если частицы

системы взаимодействуют друг с другом, то подобное возбужденное состояние не будет стационарным и начнет затухать.

Используя квантовомеханическую концепцию квазистационарных уровней, зависимость от времени волновой функции электрона в квазистационарном состоянии над сферой Ферми можно представить в виде

$$\psi_p(t) = \psi_p(0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \epsilon_p t - \frac{1}{\hbar} \Gamma_p t \right\} = \psi_p(0) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\epsilon_p - i\Gamma_p) t \right\},$$

имеющем теоретическое оправдание и смысл квазистационарного состояния только в случае, когда затухание Γ_p значительно меньше энергии возбужденного состояния

$$\epsilon_p = \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m},$$

т. е. $\Gamma_p/\epsilon_p \ll 1$. Отсюда следует, что квантовомеханическая вероятность $W_p(t) = |\psi_p(t)|^2$ обнаружить систему в подобном квазистационарном возбужденном состоянии

$$W_p(t) = W_p(0) \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \Gamma_p t \right\}$$

удовлетворяет простейшему релаксационному уравнению

$$\frac{\partial W_p(t)}{\partial t} = -w_p W_p(t),$$

в котором величина $w_p = 2\Gamma_p/\hbar$ имеет смысл вероятности перехода частицы с импульсом \vec{p} ($|\vec{p}| > p_F$) в какое-либо другое не запрещенное принципом Паули состояние за секунду. Величину этой вероятности можно оценить, используя известную (кстати, полученную нами в предыдущем разделе) формулу временной теории возмущений.

Рассмотрим электрон с импульсом \vec{p} , находящийся непосредственно над сферой Ферми, $|\vec{p}| > p_F$. Сфера заполнена электронными состояниями, поэтому взаимодействие этого электрона с каким-либо находящимся внутри сферы Ферми электроном с импульсом \vec{k} ($|\vec{k}| < p_F$) должно привести к его выходу из сферы Ферми,

т. е. он приобретет импульс $\vec{k} + \vec{q}$, по модулю больший фермиевского, $|\vec{k} + \vec{q}| > p_F$. Импульс исходного электрона при этом остается вне сферы Ферми, $|\vec{p} - \vec{q}| > p_F$. Квантовомеханическая вероятность такого перехода в борновском приближении равна

$$w(\vec{p}, \vec{k} | \vec{p} - \vec{q}, \vec{k} + \vec{q}) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \vec{p}, \vec{k} | \Phi | \vec{p} - \vec{q}, \vec{k} + \vec{q} \rangle|^2 \delta(E_p + E_k - E_{p-q} - E_{k+q}).$$

Указанные выше дополнительные ограничения на величины \vec{k} и \vec{q} можно учесть с помощью комбинации из фермиевских ступенек $n_k(1 - n_{k+q})(1 - n_{p-q})$. Тогда, просуммировав по всем допустимым значениям \vec{k} и \vec{q} , получим интересующую нас вероятность w_p

$$w_p = \sum_{\vec{k}\vec{q}} w(\vec{p}, \vec{k} | \vec{p} - \vec{q}, \vec{k} + \vec{q}) n_k(1 - n_{k+q})(1 - n_{p-q}).$$

Заметим, что матричный элемент потенциала взаимодействия электронов $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, рассчитанный с помощью нормированных в объеме V волновых функций плоских волн

$$\psi_p(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r} \right\},$$

сведется к фурье-образу этого потенциала. Действительно,

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}, \vec{k} | \Phi | \vec{p} - \vec{q}, \vec{k} + \vec{q} \rangle &= \iint_{(V)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \frac{1}{V^2} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\vec{p}\vec{r}_1 + \vec{k}\vec{r}_2) \right\} \times \\ &\quad \times \Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{p}\vec{r}_1 - \vec{q}\vec{r}_1 + \vec{k}\vec{r}_2 + \vec{q}\vec{r}_2) \right\} = \\ &= \frac{1}{V^2} \iint_{(V)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \right\} = \\ &= \frac{1}{V} \int_{(V)} d\vec{R} \Phi(R) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \vec{q}\vec{R} \right\} = \frac{1}{V} \nu(q). \end{aligned}$$

Если заменить $\nu(q)$ на некоторую эффективную величину $\tilde{\nu}$ и вынести ее за знак суммы по \vec{q} , то подсчет вероятности w_p

можно осуществить точно, однако для наших целей достаточно ограничиться только ее простой оценкой. Заметим, что вследствие действия принципа Паули электрон с импульсом \vec{p} не может «опуститься» по своей энергии ниже уровня ϵ_F , т. е. его конечный импульс остается всегда в шаровом слое, окружающем сферу Ферми и имеющем объем в импульсном пространстве $4\pi p_F^2(p - p_F)$. Поэтому число возможных конечных состояний для него при переходах $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \vec{q}$ не может превышать величину

$$\Delta\Gamma_p = V \cdot 4\pi p_F^2 \frac{p - p_F}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Это — верхняя граница числа слагаемых в сумме по изменению импульса взаимодействующих частиц \vec{q} . Так как первоначальная энергия возбужденного над сферой Ферми электрона, отсчитываемая от уровня ϵ_F , имеет величину

$$\epsilon_p = \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \cong \frac{p_F}{m}(p - p_F),$$

то он может возбудить только такой электрон с импульсом \vec{k} из-под сферы Ферми, состояния которого расположены вблизи ее поверхности в шаровом слое толщины $(p - p_F)$. Таким образом, максимальное число слагаемых по импульсу возбуждаемой частицы \vec{k} тоже равно величине $\Delta\Gamma_p = \Delta\Gamma_k$, пропорциональной $(p - p_F)$. Выделяя размерность энергосохраняющей δ -функции,

$$\delta(E_p + E_k - E_{p-q} - E_{k+q}) = \frac{1}{\epsilon_F} \delta\left(\frac{E_p + E_k - E_{p-q} - E_{k+q}}{\epsilon_F}\right),$$

получаем для искомой величины w_p оценку (намеренно завышенную)

$$w_p = \frac{1}{2} \frac{m\tilde{\nu}^2 p_F^2}{\pi^3 \hbar^7} (p - p_F)^2 = \frac{1}{2} \frac{m^3 \tilde{\nu}^2}{\pi^3 \hbar^7} \epsilon_p^2$$

(точный расчет интегралов по \vec{q} и \vec{k} вместо множителя $1/2$ дает $1/8$).

Мы получили таким образом, что затухание одночастичного возбуждения, связанное с взаимодействием электрона с другими

электронами, вблизи границы Ферми исчезает вообще,

$$\Gamma_p = \frac{\hbar w_p}{2} \sim (p - p_F)^2.$$

Этот эффект не имеет классического аналога и целиком обязан действию принципа Паули в квантовых системах частиц с полуцелым спином.

Произведем численную оценку этого затухания. Пусть значение импульса \vec{p} выбрано на границе температурного размытия сферы Ферми (т. е. «наихудшим» образом), когда

$$\varepsilon_p \cong \theta \quad \text{и} \quad (p - p_F) \sim \frac{\theta m}{p_F}.$$

Положим

$$\tilde{\nu} \sim \int \Phi(R) d\vec{R} \sim \tilde{\Phi} \tilde{r}^3,$$

где $\tilde{\Phi}$ — средняя энергия кулоновского взаимодействия электронов e^2/a , а \tilde{r} — эффективный радиус этого взаимодействия, имеющий порядок томас-фермиевского r_{TF} . Тогда для относительной величины затухания, определяющей меру идеальности системы, получаем оценку

$$\frac{\Gamma_p}{\varepsilon_p} \sim \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\theta} \frac{m^3 \tilde{\Phi}^2 \tilde{r}^6}{8\pi^3 \hbar^6} \theta^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{\Phi}}{\varepsilon_F} \right)^2 \cdot \left(\frac{m \tilde{r}^2 \varepsilon_F}{2\pi \hbar^2} \right)^3 \cdot \frac{\theta}{\varepsilon_F}.$$

Учитывая, что для реальных металлов средняя потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электронов имеет порядок средней кинетической их энергии, т. е. $\tilde{\Phi}/\varepsilon_F \sim 1$, что при значениях

$$m \sim 10^{-27} \text{ г}, \quad \hbar \sim 10^{-27} \text{ эрг. сек}, \quad \varepsilon_F \sim 10^{-11} \text{ эрг} \quad \text{и} \quad \tilde{r} \sim 10^{-8} \text{ см}$$

выражение, стоящее в скобках второго множителя оказывается тоже порядка единицы, получаем для оценки относительного затухания Γ_p/ε_p одночастичных возбужденных состояний реального электронного газа в металлах достаточно убедительный критерий его идеальности,

$$\left(\frac{\Gamma_p}{\varepsilon_p} \right)_{\max} \sim \frac{\theta}{\varepsilon_F} \sim 10^{-3} - 10^{-4} \ll 1.$$

Так как во всех расчетах с фермиевскими интегралами (см. т. 2, гл. 2, § 2-в) существенна только та область значений \vec{p} , которой соответствует температурное размытие сферы Ферми, в которой, как мы показали, электронный газ только и является «идеальным», то полученная оценка со значительным запасом «малости» служит надежным оправданием использования модели идеального ферми-газа для электронного газа в металлах (при необходимости под- правленной введением эффективной массы для частиц системы).

Глава 3

Кинетическая теория продольных термоэлектрических явлений в электронном газе

Теоретические исследования явлений переноса в статистических системах исходят из кинетического подхода к рассмотрению этих процессов. Сами кинетические уравнения, являясь исходными в этих исследованиях (если это не феноменологическая их схема) очень сложны. Они, как правило, оказываются и интегральными, и нелинейными относительно одночастичных функций распределения, и их исследование встречает серьезные математические трудности (на которые еще дополнительно накладываются проблемы учета потенциала взаимодействия частиц друг с другом и т. д.).

§ 1. Лоренцева форма интеграла столкновений

Рассмотрим в связи с этим одну простую кинетическую схему, исследование которой удается провести без привлечения громоздких математических методов. Речь идет о модификации интеграла столкновений, произведенной Хендриком Лоренцем (1905) в связи с развитым им кинетическим подходом в электронной теории металлов. Ради физической наглядности используем классическую схему кинетической теории, которую по мере возникшей надобности достаточно просто модифицировать применительно к электронной системе в металле. Практически это сводится к тому, что вместо вероятности $w(n|n')$ мы будем использовать интеграл столкновений Больцмана, физический смысл которого достаточно нагляден. Учитывая, что система электронный газ в металле является как минимум двухкомпонентной, введем соответствующие интегралы столкновений

$$I_{ij} = \int (f_i(\vec{p}') f_j(\vec{p}'_1) - f_i(\vec{p}) f_j(\vec{p}_1)) u_{ij} \sigma_{ij}(u_{ij}, \psi) d\Omega d\vec{p}_1,$$

где $u_{ij} = |\vec{v}_i - \vec{v}_j|$, $d\Omega = \sin \psi d\psi d\varphi$ а индексы i и j принимают значения 1 и 2, причем индекс 1 относится к характеристикам электрона, индекс 2 — к соответственным характеристикам иона. Тогда систему кинетических уравнений для электронной f_1 и ионной f_2 одночастичных функций распределения можно представить в виде

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f_1(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U_1}{\partial \vec{r}} \frac{\partial f_1}{\partial \vec{p}} = n_1 I_{11} + n_2 I_{12}, \\ \frac{\partial f_2(t, \vec{r}, \vec{p})}{\partial t} + \frac{\vec{p}}{m} \frac{\partial f_2}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U_2}{\partial \vec{r}} \frac{\partial f_2}{\partial \vec{p}} = n_1 I_{12} + n_2 I_{22}, \end{array} \right.$$

где n_1 и n_2 — плотности чисел частиц каждой из компонент.

Если учесть физические особенности электрон-ионной системы, то эту кинетическую схему можно значительно упростить. Прежде всего, считая в соответствии с проведенным выше исследованием вырожденный электронный газ идеальным газом Ферми, положим $I_{11} = 0$. Заметим, что взаимодействия оставшихся в интегральных членах уравнений частиц 1 и 2 освобождены от запретов принципа Паули (остаются только ограничения на начальные и конечные состояния самих электронов, участвующих в процессах их рассеяния $\vec{p} \rightarrow \vec{p}'$ на ионах и других частицах решетки).

Далее, в электронном газе в металлах в стационарных случаях объемный электрический заряд равен нулю, поэтому в случае решетки из однозарядных ионов $n_2 = n_1 = n$.

Отметим, наконец, что электронный газ — это наиболее убедительный пример легкой компоненты, так как отношение масс электрона и иона имеет порядок

$$\frac{m_1}{m_2} \sim 10^{-4} \ll 1.$$

Вследствие этого и вырожденности электронной компоненты ширины квазиравновесных распределений по импульсам $f_1(\vec{p})$ и $f_2(\vec{p})$ существенно отличаются друг от друга,

$$\left(\overline{(\Delta v_x)_1^2} \right)^{1/2} \gg \left(\overline{(\Delta v_x)_2^2} \right)^{1/2} \quad \text{и} \quad \frac{\sqrt{\epsilon_F/m_1}}{\sqrt{\theta/m_2}} \sim 10^5 \quad (\text{см. рис. 3.1}).$$

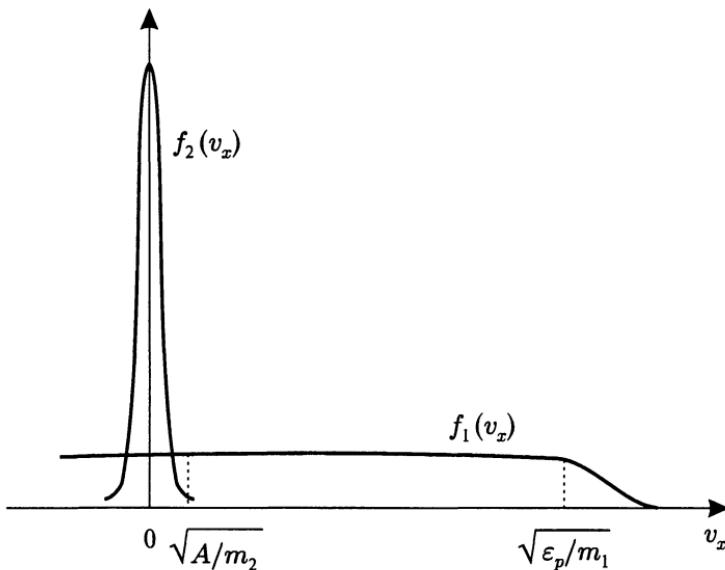


Рис. 3.1. Характер распределений по компоненте скорости v_x для системы тяжелых частиц и электронного вырожденного газа в случае $m_1 \ll m_2$ и $\epsilon_F \gg \theta$

В связи с этим можно положить, что модуль относительной скорости u_{12} практически не отличается от модуля скорости рассеивающейся легкой частицы

$$u_{12} = |\vec{v}_{\text{эл}} - \vec{v}_{\text{ион}}| \cong |\vec{v}_{\text{эл}}| = v,$$

величину которого v теперь можно вынести за знак интеграла по исходному импульсу \vec{p}_1 тяжелой частицы.

В сложившейся ситуации естественно пренебречь эффектами отдачи при рассеянии легкой частицы на в 10^4 раз более ее тяжелой (учет отдачи возможен, но достаточно громоздок). Тогда импульс тяжелой частицы до и после ее столкновения с легкой частицей не изменяется, т. е. $\vec{p}'_1 = \vec{p}_1$, ввиду чего $f_1(\vec{p}'_1) = f_2(\vec{p}_1)$, и эта функция под знаком интеграла I_{12} выносится за скобку.

Наконец, так как движение тяжелых частиц оказывается по сравнению с быстрой реакцией легких электронов достаточно медленным, то можно полагать, что распределение их по импульсам $f_2(\vec{p}_1)$ мало отличается от равновесного (или локально равновесного) распределения $w_2(\vec{p}_1)$. Полагая $f_2(\vec{p}_1) = w_2(\vec{p}_1)$, мы, во-первых, исключ-

чаем из рассмотрения кинетику тяжелой компоненты (отпадает второе уравнение в исходной системе уравнений относительно функций f_1 и f_2) и, во-вторых, интеграл по импульсу \vec{p}_1 сворачивается в нормировочный

$$\int w_2(\vec{p}_1) d\vec{p}_1 = 1,$$

так что функция распределения по импульсам тяжелых частиц вообще исчезает из рассмотрения, а в интегrale столкновений I_{12} сохранится только интегрирование по углам $d\Omega = \sin \psi d\psi d\varphi$.

Обозначая $nf_1(t, \vec{r}, \vec{v}) = F(t, \vec{r}, \vec{v})$ (нормировка функции F на полное число частиц N), получаем в итоге линейное кинетическое уравнение для одночастичной функции распределения электронов

$$\frac{\partial F(t, \vec{r}, \vec{v})}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial F}{\partial \vec{r}} - \frac{\partial U}{\partial \vec{r}} \frac{\partial F}{\partial (m\vec{v})} = nv \int (F' - F)\sigma d\Omega.$$

Ввиду того, что стоящая в интегrale столкновений неизвестная функция $F' = F(t, \vec{r}, \vec{v}')$ содержит в качестве одного из своих аргументов скорость электрона \vec{v}' после его столкновения с тяжелой частицей, которая определяется в результате решения соответствующей задачи рассеяния, полученное уравнение, несмотря на достигнутую его линейность и откровенно частный характер, все же остается достаточно сложным.

§ 2. Стационарное решение кинетического уравнения Лоренца

Покажем теперь, что в достаточном для теоретического исследования явлений переноса стационарном приближении, когда

$$\frac{\partial F}{\partial t} = 0 \quad \text{и} \quad F = F(\vec{r}, \vec{v}),$$

интеграл столкновений I_{12} допускает дальнейшие аппроксимации, позволяющие получить то решение для функции распределения $F(\vec{r}, \vec{v})$, с помощью которого производится оценка характеризующих электронный газ коэффициентов переноса.

Ограничиваюсь, как всегда в этой теории, линейным приближением по градиентным величинам и напряженностям внешних полей, будем полагать, что функция $F(\vec{r}, \vec{v})$ мало отличается от равновесного локального распределения $F_0(\vec{r}, \vec{v})$, т. е. будем полагать

$$F(\vec{r}, \vec{v}) = F_0(\vec{r}, \vec{v}) + F_1(\vec{r}, \vec{v}), \quad F_1(\vec{r}, \vec{v}) \ll F_0(\vec{r}, \vec{v}),$$

причем для вырожденного электронного газа

$$\begin{aligned} F_0(\vec{r}, \vec{v}) &= \frac{2m}{(2\pi\hbar)^3} n(\varepsilon), \quad n(\varepsilon) = (e^{\varepsilon - \mu/\theta} + 1)^{-1}, \\ \varepsilon &= \frac{mv^2}{2}, \quad \theta = \theta(\vec{r}), \quad \mu = \mu(\vec{r}). \end{aligned}$$

Выберем в качестве оси z направление градиента функции $F(\vec{r}, \vec{v})$, т. е. положим

$$\frac{\partial F}{\partial \vec{r}} = \left(0, 0, \frac{\partial F}{\partial z} \right).$$

В сферических координатах с полярной осью вдоль оси z функция F вследствие изотропности пространства от угла φ не зависит, т. е. $F = F(z, v, \vartheta)$, где ϑ — угол между осью z и вектором \vec{v} , а $v = |\vec{v}|$. Зависимость же от угла ϑ может быть представлена в виде разложения по полиномам Лежандра, первые из которых имеют вид

$$P_0(\cos \vartheta) = 1, \quad P_1(\cos \vartheta) = \cos \vartheta, \quad \dots.$$

Ограничиваюсь, как всегда, учетом только первой поправки, полагаем

$$F(z, v, \vartheta) \cong F_0(z, v)(1 + \Phi(z, v) \cos \vartheta) = F_0 + F_1.$$

Тогда правая часть кинетического уравнения после вынесения за знак интеграла не зависящих от углов величин F_0 и Φ приобретает вид

$$nI_{12} = nvF_0(z, v)\Phi(z, v) \int (\cos \vartheta' - \cos \vartheta)\sigma(v, \psi) d\Omega.$$

Чтобы выполнить интегрирование по углам, введем другую систему координат с полярной осью вдоль вектора \vec{v} (см. рис. 3.2). На едини-

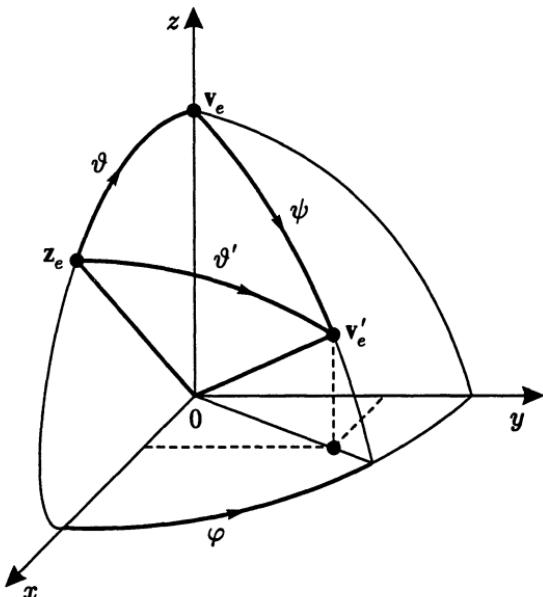


Рис. 3.2. Пространственное расположение единичных векторов \vec{z}_e , \vec{v}_e и \vec{v}'_e

ничной сфере будем иметь тогда

$$\vec{v}_e = \frac{\vec{v}}{v} = (0, 0, 1);$$

$$\vec{v}'_e = \frac{\vec{v}'}{v} = (\sin \psi \cos \varphi, \sin \psi \sin \varphi, \cos \psi);$$

$$\vec{z}_e = (\sin \vartheta, 0, \cos \vartheta).$$

Отсюда сразу следует известная формула тригонометрии на сфере

$$(\vec{z}_e \vec{v}'_e) = \cos \vartheta' = \sin \vartheta \sin \psi \cos \varphi + \cos \vartheta \cos \psi.$$

Интегрирование по углу φ дает

$$\int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi, \quad \int_0^{2\pi} \cos \varphi d\varphi = 0,$$

и интеграл столкновений приобретает вид

$$\begin{aligned} nI_{12} &= nvF_0(z, v)\Phi(z, v)2\pi \int_0^\pi (\cos\psi \cos\vartheta - \cos\vartheta)\sigma(v, \psi) \sin\psi \, d\psi = \\ &= -vF_0(z, v)\Phi(z, v) \cos\vartheta \cdot n\Sigma(v) = -vF_1(z, v) \cdot n\Sigma(v), \end{aligned}$$

где величина $\Sigma(v)$, называемая транспортным сечением, определяется интегральным выражением, включающим дифференциальное сечение процессов рассеяния электронов на тяжелых частицах $\sigma(v, \psi)$,

$$\Sigma(v) = 2\pi \int_0^\pi \sigma(v, \psi)(1 - \cos\psi) \sin\psi \, d\psi > 0.$$

В левой части кинетического уравнения в стационарном приближении $\partial F/\partial t = 0$ в оставшихся градиентных членах достаточно использовать нулевое (т. е. локально равновесное) приближение для функции $F(z, v)$. Замечая, что

$$-\frac{\partial U}{\partial z} = e_{\text{эл}}E_z = -eE, \quad \frac{\partial \epsilon}{\partial v_z} = mv_z,$$

получаем для нее

$$v_z \frac{\partial F_0}{\partial z} - \frac{\partial U}{\partial z} \frac{\partial F_0}{\partial(mv_z)} = v_z \left(\frac{\partial F_0}{\partial z} - eE \frac{\partial F_0}{\partial \epsilon} \right).$$

Учитывая, что функция F_0 зависит от z через зависимость от z локальных значений химического потенциала μ и температуры θ , имеем

$$\frac{\partial F_0}{\partial z} = \frac{\partial F_0}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + \frac{\partial F_0}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial z}.$$

Кроме того в силу конструкции функции F_0 , включающей ферми-распределение $n(\epsilon)$,

$$\frac{\partial F_0}{\partial \mu} = -\frac{\partial F_0}{\partial \epsilon}, \quad \frac{\partial F_0}{\partial \theta} = -\frac{\epsilon - \mu}{\theta} \frac{\partial F_0}{\partial \epsilon},$$

в связи с чем стационарное уравнение приобретает вид

$$v_z \left(-\frac{\partial \mu}{\partial z} - \frac{\epsilon - \mu}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} - eE \right) \frac{\partial F_0}{\partial \epsilon} = nI_{12} = -vF_1 \cdot n\Sigma.$$

Вводя вместо Σ величину

$$\Lambda(v) = \frac{1}{n\Sigma(v)},$$

имеющую прямую аналогию со средней длиной свободного пробега легких частиц в классической теории $\lambda = 1/n\sigma$ (см. т. 3, § 9 задач к гл. 5), получаем решение стационарного уравнения в «первом» по $\Lambda(v)$ приближении (т. е. с поправкой к равновесной функции распределения, связанной с учетом процессов рассеяния легких электронов на тяжелых частицах решетки)

$$F(z, v, \vartheta) = F(z, \epsilon, v_z) =$$

$$= F_0(z, \epsilon) + \Lambda(v) \frac{v_z}{v} \left(\frac{\partial \mu}{\partial z} + \frac{\epsilon - \mu}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + eE \right) \frac{\partial F_0(z, \epsilon)}{\partial \epsilon}$$

$$(мы учли, что \cos \vartheta = \frac{v_z}{v} \text{ и } \epsilon = \frac{mv^2}{2}).$$

§ 3. Электро- и теплопроводность вырожденного электронного газа в металлах

С помощью полученного решения, характеристики явлений переноса, обязанные электронному газу, рассчитываются стандартным образом. Так как при интегрировании по пространству \vec{v} входящий под знак интеграла множитель v_z^2 вследствие зависимости остальных подынтегральных выражений от $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$ можно заменить на $v^2/3$, то используя при этом сферические координаты,

$$d\vec{v} \rightarrow v^2 dv \sin \vartheta d\vartheta d\varphi \rightarrow 4\pi v^2 dv,$$

и переходя от интегрирования по модулю скорости v к интегралу по величине

$$\epsilon = \frac{mv^2}{2},$$

получим для средних величин потоков числа частиц j_n и энергии j_ϵ

$$\begin{aligned} j_n &= \int v_z F(z, \varepsilon, v_z) d\vec{v} = \\ &= \frac{16\pi m}{3(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \Lambda(\varepsilon) \left(\frac{\partial \mu}{\partial z} + \frac{\varepsilon - \mu}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + eE \right) \varepsilon \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon, \\ j_\epsilon &= \int v_z \frac{mv^2}{2} F(z, \varepsilon, v_z) d\vec{v} = \\ &= \frac{16\pi m}{3(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \Lambda(\varepsilon) \left(\frac{\partial \mu}{\partial z} + \frac{\varepsilon - \mu}{\theta} \frac{\partial \theta}{\partial z} + eE \right) \varepsilon^2 \frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon. \end{aligned}$$

Так как величина $-\partial n(\varepsilon)/\partial \varepsilon$ в случае вырожденной системы $\theta/\varepsilon_F \ll 1$ как производная от слегка размытой единичной ступенчатой функции представляет остро сосредоточенную около значения $\varepsilon = \mu$ величину, при $\theta \rightarrow 0$ переходящую в δ -функцию $\delta(\varepsilon - \varepsilon_F)$, то в тех случаях, когда в области значений $\varepsilon \sim \varepsilon_F$ величина $\Lambda(\varepsilon)$ оказывается конечной, ее можно вынести за знак интеграла по ε , тем самым превратив ее в общий параметр $\Lambda(\varepsilon_F) = \Lambda_F$, характеризующий потоки j_n и j_ϵ , а оставшиеся выражения — в стандартные фермиевские интегралы. Эти интегралы подсчитаны (см. прил. I) и имеют вид разложений по четным степеням параметра θ/ε_F (см. т. 2, гл. 2, § 2),

$$\begin{aligned} I_\nu &= \int_0^\infty \varepsilon^\nu n(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{1}{\nu + 1} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{\nu+1} d\varepsilon = \\ &= \frac{\mu^{\nu+1}}{\nu + 1} \left(1 + (\nu + 1)\nu \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 + \dots \right). \end{aligned}$$

Используя минимально необходимую аппроксимацию этих интегралов, имеем в нашем случае

$$\int_0^\infty \varepsilon \left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = I_0 = \mu;$$

$$\int_0^\infty \varepsilon^2 \left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = 2I_1 = \mu^2 \left(1 + \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 + \dots \right);$$

$$\int_0^\infty \varepsilon^3 \left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = 3I_2 = \mu^3 \left(1 + \pi^2 \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 + \dots \right),$$

где

$$\mu = \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right).$$

Определяя проводимость электронного газа σ (или удельного сопротивления $\rho = 1/\sigma$) в изотермическом случае $\theta(z) = \theta = \text{const}$ (вследствие условия $n = \text{const}$ также $\mu(n, \theta) = \text{const}$) в соответствии с законом Ома для плотности электрического тока $I = -ej_n = \sigma E$, и опуская температурную поправку, получаем основной результат (температуруную поправку к нему см. т. 2, § 9 задач к гл. 5)

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{16\pi m e^2 \Lambda_F \varepsilon_F}{3(2\pi\hbar)^3}.$$

В случае же $\partial\theta/\partial z \neq 0$ (а, следовательно, и $\partial\mu/\partial z \neq 0$) имеем, подставляя значения фермиевских интегралов в выражения для потоков j_n и j_ε , сразу же вынося величину Λ_F за знак интеграла и приводя подобные члены

$$j_n \cong -\frac{16\pi m \Lambda_F}{3(2\pi\hbar)^3} \cdot \mu \left(\frac{\partial \mu}{\partial z} + eE + \frac{1}{3}\pi^2 \frac{\theta}{\mu} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right),$$

$$j_\varepsilon \cong -\frac{16\pi m \Lambda_F}{3(2\pi\hbar)^3} \cdot \mu^2 \left(\frac{\partial \mu}{\partial \theta} + eE + \frac{2}{3}\pi^2 \frac{\theta}{\mu} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right).$$

Определяя коэффициент теплопроводности «заторможенного» электронного газа κ , т. е. при условии отсутствия электрического тока $I = 0$, когда

$$\frac{\partial \mu}{\partial z} + eE = -\frac{\pi^2}{3} \frac{\theta}{\mu} \frac{\partial \theta}{\partial z},$$

получаем в соответствии с законом Фурье $j_\epsilon = -\kappa \partial\theta/\partial z$,

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \cdot \frac{16\pi m \Lambda_F \epsilon_F}{3(2\pi\hbar)^3} \cdot \theta.$$

Сравнивая полученный результат со сходной по виду формулой для электропроводности σ , получаем, исключая величину Λ , известный закон Видемана—Франца (G. Wiedemann, R. Franz, 1853)

$$\frac{e^2 \kappa}{\theta \sigma} = \frac{\pi^2}{3} \cong 3,29.$$

Приведенная безразмерная комбинация коэффициентов переноса κ и σ называется часто числом Лоренца, теоретическая величина которого $\pi^2/3$ вполне удовлетворительно соответствует экспериментальным его значениям для многих металлов в случаях, когда рассеяние электронов действительно происходит на тяжелых центрах: на атомах примеси, на дислокациях (в широком диапазоне температур) и на ионах кристаллической решетки при температурах, превышающих дебаевскую, $\theta > \theta_D$, когда в тепловое движение решетки вовлечены все ионы, и рассеяние электронов происходит практически на каждом из них независимо. В области же более низких температур (по сравнению с θ_D) ситуация становится совершенно иной: электроны рассеиваются не на отдельных ионах, а на длинноволновых колебаниях кристаллической решетки. Расчет этого явления в рамках совместного кинетического подхода к электронному газу и колебаниям решетки был выполнен Феликсом Блохом (1930), и за прошедшие годы этот весьма сложный расчет практически не был ни улучшен, ни модернизирован (если не считать учета других механизмов взаимодействия электронов с ионной решеткой).

§ 4. Термоэлектрические явления в металлических проводниках

Прежде чем перейти к рассмотрению этого интересного явления (которое мы проведем несколько позже на качественном уровне и без привлечения особо строгих методов и сложных математиче-



Рис. 3.3. Простейшая схема установки для наблюдения термоэлектрических явлений

ских выкладок), остановимся дополнительно, чтобы не создавалось ложного впечатления, что лоренцевское приближение приспособлено только к расчету величин σ и κ , на продольных термоэлектрических явлениях, характерных для проводящей электронной системы, определяющие характеристики которых фактически уже получены нами при расчете величины j_n . Условная принципиальная схема электрической цепи, в которой реализуются эти эффекты, с необходимыми пояснениями приведена на рис. 3.3.

В приближении $\Lambda = \Lambda_F = \text{const}$ условие отсутствия электрического тока в проводниках (ключ K разомкнут) означает наличие в каждом из них напряженности электростатического поля

$$eE = -\frac{\pi^2}{3} \frac{\theta}{\mu} \frac{\partial \theta}{\partial z} - \frac{\partial \mu}{\partial z}$$

(в используемом часто приближении $\tau = \Lambda/v = \text{const}$ значения фермиевских интегралов вследствие $v = \sqrt{2\varepsilon/m}$ соответственно изменяются, и перед первым слагаемым в этой формуле вместо множителя $\pi^2/3$ будет стоять $\pi^2/2$). В приближении $\theta/\varepsilon_F \ll 1$ и $n = \text{const}$ имеем

$$\frac{\partial \mu}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right) \right) \cong -\frac{\pi^2}{6} \frac{\theta}{\varepsilon_F} \frac{\partial \theta}{\partial z},$$

и мы получаем для напряженности тормозящего поток электронов поля величину

$$E = -\frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \frac{\theta}{\varepsilon_F} \frac{\partial \theta}{\partial z}.$$

ЭДС ΔU в цепи, состоящей из двух проводников a и b с длинами l_a и l_b , спаи которых поддерживаются при температурах θ_1 и θ_2 , и вольтметра, определяется величиной интеграла от E по контуру $l_a + l_b$

$$\Delta U = \oint E dz = \int_{(l_a+l_b)} \left(-\frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \frac{\theta}{\varepsilon_F} \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) dz = \frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \int_{\theta_1}^{\theta_2} \left(\frac{\theta}{(\varepsilon_F)_a} - \frac{\theta}{(\varepsilon_F)_b} \right) d\theta.$$

Ограничивааясь, как всегда, линейным приближением

$$\theta_2 - \theta_1 = \Delta\theta \ll \theta_1 = \theta,$$

получаем для термоЭДС в соответствии с законом Зеебеки $\Delta U = Z \Delta\theta$ (T. Seebeck, 1821)

$$\Delta U = \frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{1}{(\varepsilon_F)_a} - \frac{1}{(\varepsilon_F)_b} \right) \theta \Delta\theta = Z \Delta\theta.$$

Если плотности электронного газа n_a и n_b в проводниках a и b близки друг к другу, так что $\Delta n = n_b - n_a \ll n_a \cong n$, то вследствие зависимости от n энергии Ферми $\varepsilon_F = \hbar^2/2m(3\pi^2n)^{2/3}$ для константы Зеебеки получается более простое выражение

$$Z \cong \frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{2}{3} \frac{\Delta n}{n} \frac{\theta}{\varepsilon_F}.$$

Если ключ K замкнут (см. рис. 3.3) и разность температур $\Delta\theta = 0$, то проходящий по цепи ток I провоцирует на спаях металлов a и b выделение тепла, величина которого за секунду определяется линейным законом Пельтье (J. Peltier, 1834)

$$\dot{Q} = \Pi I = \Pi \dot{q}.$$

Выделяемое при прохождении через спаи одного кулона электрического заряда тепло Π в соответствии с так называемым вторым соотношением Томсона (см. т. 3, гл. 4, § 3) связано с коэф-

фициентом Зеебеки Z простым соотношением $\Pi = -\theta Z$, поэтому сразу получаем

$$\Pi = \frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{1}{(\varepsilon_F)_b} - \frac{1}{(\varepsilon_F)_a} \right) \theta^2 \cong -\frac{1}{e} \frac{2}{3} \frac{\Delta n}{n} \frac{\theta^2}{\varepsilon_F}.$$

Наконец, последний из продольных термоэлектрических эффектов заключается в том, что на участке между термостатами θ_1 и θ_2 в случае $\Delta\theta \neq 0$ проходящий по проводам ток I переносит энергию, пропорциональную величине тока и градиенту температуры, которая определяется законом Томсона (W. Thomson, 1856)

$$\Delta Q_T = \tau I \Delta\theta,$$

где τ — количество тепла, переносимое током от термостата $\theta + \Delta\theta$ к термостату θ при прохождении в этом направлении по проводнику единицы заряда (одного кулона). Согласно так называемому первому соотношению Томсона (см. т. 3, гл. 4, § 3) тепло Томсона τ связано с коэффициентами Пельтье и Зеебеки простым соотношением, используя которое получаем (с учетом сразу двух проводников с противоположно направленными токами)

$$\tau_b - \tau_a = \theta \frac{\partial \Pi}{\partial \theta} \theta = -\theta \frac{\partial Z}{\partial \theta} = \frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{1}{(\varepsilon_F)_b} - \frac{1}{(\varepsilon_F)_a} \right) \theta \cong \frac{1}{e} \frac{\pi^2}{6} \cdot \frac{2}{3} \frac{\Delta n}{n} \frac{\theta}{\varepsilon_F}.$$

Глава 4

Учет электрон-фононного взаимодействия в теории электропроводности металлов

Приступая к рассмотрению влияния на электронный газ неизменно существующих в системе (при $\theta \neq 0$) колебаний кристаллической решетки мы ограничимся качественным подходом, не превышающим того уровня, который принят при построении теории теплоемкости твердого тела в дебаевском (P. Debye, 1912) ее варианте (см. т. 2, гл. 2, § 4).

§ 1. Моделирование гамильтониана взаимодействия электронов с колебаниями решетки

Ограничиваюсь самым простым вариантом рассмотрения, будем полагать кристаллическую решетку одноатомной, геометрически правильной, а колебания узлов в ней малыми, гармоническими и независимыми друг от друга. Тогда в такой идеальной системе гармонических колебаний распространяющуюся в кристалле отдельную продольную волну отклонений узлов решетки от их положений равновесия можно представить в виде

$$\xi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = A e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}},$$

где \vec{k} — волновой вектор, связанный с импульсом этой волны, имеющей фононом, соотношением $\vec{q} = \hbar \vec{k}$, причем частота ω и связанная с ней энергия такой акустической волны (т. е. фонона) линейна по модулю импульса, $\epsilon_q = \hbar\omega(q) = cq$, где квадрат скорости распространения волны $c^2 = \kappa/(nM)$ пропорционален константе упругости κ по отношению к сжатию-растяжению в приближении

линейного закона Гука и обратно пропорционален массовой плотности узлов решетки nM , где n — плотность числа ее узлов, M — масса атома в каждом из узлов решетки.

Используя общие представления, определим зависимость амплитуды A от перечисленных выше величин. Средняя кинетическая энергия частиц, участвующих в формировании волны отклонения узлов $\xi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$ от их положений равновесия (по принципу $m v^2/2 \mapsto M |\dot{\xi}_{\vec{k}}|^2/2$ на частицу, число которых в трехмерном объеме $d\vec{r}$ равно $n d\vec{r}$), оценивается как

$$T_\omega = \int_V \frac{1}{2} M |\dot{\xi}_{\vec{k}}|^2 n d\vec{r} = \frac{1}{2} A^2 M n \omega^2 V.$$

Средняя их потенциальная энергия, связанная с деформацией упругих связей (по принципу $m \omega^2 x^2/2 \mapsto M \omega^2 |\xi_{\vec{k}}|^2/2$), имеет ту же величину,

$$U_\omega = \int_V \frac{1}{2} M \omega^2 |\xi_{\vec{k}}|^2 n d\vec{r} = \frac{1}{2} A^2 M n \omega^2 V.$$

Сопоставляя полную энергию фона $\varepsilon_\omega = T_\omega + U_\omega$ с величиной $\hbar\omega$,

$$\hbar\omega = \text{const} \cdot A^2 M n \omega^2 V,$$

получаем, опуская константу, искомую зависимость

$$A = \sqrt{\frac{\hbar}{M n \omega V}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\hbar}{M n c k}}.$$

Тогда, используя необходимую нам в дальнейшем квантово-полевую символику, для появившейся в системе или исчезнувшей волны отклонений можно написать

$$\xi_{\vec{k}} = \gamma \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\hbar}{M n c k}} (b_{\vec{k}}^+ e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} + b_{\vec{k}}^- e^{i\omega t - i\vec{k}\vec{r}}),$$

где символом $b_{\vec{k}}^+$ обозначен оператор рождения («появления») волны отклонений, а $b_{\vec{k}}^-$ — оператор ее уничтожения («поглощения»)

соответственно (см. более подробно т. 4, гл. 1, § 3, а также прил. II), величина константы пока несущественна.

Так как волна плотности узлов решетки $n(\vec{r}, t)$ при наличии однофононного ее возбуждения, связанная с изменением расстояния между узлами

$$\Delta\xi_{\vec{k}} = \xi_{\vec{k}}(x + a) - \xi_{\vec{k}}(x) = a \frac{\partial\xi_{\vec{k}}}{\partial x},$$

представляет собой по этой причине волну градиента величины $\xi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$, то, используя выражение для $\xi_{\vec{k}}$ и дисперсионную зависимость $\omega = ck$, получаем для отдельной волны плотности узлов

$$\begin{aligned} n_{\vec{k}} &= \gamma' \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{\hbar k}{Mnc}} (b_{\vec{k}}^+ e^{-i\omega t + i\vec{k}\vec{r}} + k.c.) = \\ &= \gamma' \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{q}{Mnc}} (b_{\vec{q}}^+ e^{-i\omega t + \frac{i}{\hbar}\vec{q}\vec{r}} + k.c.). \end{aligned}$$

Уточнять константу γ' на данном этапе не имеет смысла, так как она все равно будет поглощена той величиной, которая будет характеризовать интенсивность электрон-фононного взаимодействия.

Будем полагать, что время релаксации τ электронного газа по отношению к смещению узлов решетки значительно меньше периода ее длинноволновых ($\lambda \gg (V/N)^{1/3} = n^{-1/3}$) колебаний,

$$\tau \ll T = \frac{\lambda}{c} = \frac{2\pi}{ck},$$

т. е. плотность числа ионов практически совпадает с плотностью электронного газа

$$n_i(\vec{r}, t) = n_e(\vec{r}, t)$$

и при возникновении движения ионов решетки связанных с их смещениями объемных зарядов не образуется: они спровоцировали бы процесс типа высокочастотных $\hbar\omega_0 \sim 10 \text{ eV} \sim 10^5 \text{ K}$ плазменных колебаний, и кинетика системы пошли бы совсем по другому сценарию (отметим, что энергия возбуждения фона на три и более десятичных порядков меньше энергии $\hbar\omega_0$). В таком «адиабатическом» приближении, справедливом во всяком случае для длинноволновых фононов (и это в основном и требуется), волна плотности

узлов решетки будет сопровождаться волной плотности электронного газа. Так как саму плотность числа электронов можно представить как

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad \int_{(V)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N,$$

то волна этой плотности запишется как ее фурье-гармоника

$$\rho_{\vec{\kappa}} = \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{\kappa}\vec{r}} d\vec{r} = \sum_{1 \ll i \ll N} e^{-i\vec{\kappa}\vec{r}_i}, \quad \text{причем} \quad \rho(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{\kappa}} \rho_{\vec{\kappa}} e^{i\vec{\kappa}\vec{r}}.$$

Обозначим среднюю энергию взаимодействия электрона с решеткой $\Phi(n)$, с которой он находится в состоянии динамического равновесия в каждой локальной области системы. Тогда энергию взаимодействия всего электронного газа с ионной решеткой можно записать в виде

$$H_1 = \int_{(V)} \rho(\vec{r}) \Phi(n(\vec{r})) d\vec{r}.$$

Если в системе возбудился один фонон (появилось одно малое колебание решетки) с импульсом \vec{q} (и длиной волны $\lambda = 2\pi\hbar/q \gg \gg a = (V/N)^{1/3}$)

$$n(\vec{r}) = n + n_{\vec{q}}(\vec{r}), \quad |n_{\vec{q}}(\vec{r})| \ll n,$$

то изменение энергии системы, связанное с таким ее возбуждением, будет равно

$$H_{\vec{q}} = \int_{(V)} \rho(\vec{r}) \Phi(n + n_{\vec{q}}(\vec{r})) d\vec{r} - N \Phi(n) \cong \Phi'(n) \int_{(V)} \rho(\vec{r}) n_{\vec{q}}(\vec{r}) d\vec{r}.$$

Используя разложение плотности $\rho(\vec{r})$ по гармоникам $\rho_{\vec{q}'}$ ($\vec{q}' = \hbar\vec{\kappa}$) и выражение для $n_{\vec{q}}(\vec{r})$, беря интеграл по $d\vec{r}$,

$$\frac{1}{V} \int_{(V)} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\vec{q} + \vec{q}') \vec{r} \right\} d\vec{r} = \Delta(\vec{q} + \vec{q}'),$$

получаем

$$\begin{aligned} H_{\vec{q}} &= \gamma' \Phi'(n) \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{q}{nMc}} \sum_{q'} \Delta(\vec{q} + \vec{q}') (\rho_{q'} b_q^+ + k.c.) = \\ &= \gamma \frac{1}{\sqrt{V}} \sqrt{\frac{q}{nMc}} (\rho_{-q} b_q^+ + k.c.), \end{aligned}$$

где γ — некоторая общая константа, в которую входит e^2 и т. д. Учитывая, что $\rho_{-q} = \rho_q^+$ (см. прил. II), и суммируя по всем колебаниям решетки (по всем $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$), получаем

$$H_1 = \sum_q H_{\vec{q}} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} \gamma \sqrt{\frac{q}{nMc}} (\rho_q^+ b_q^+ + b_q \rho_q).$$

Используя для оператора фурье-компоненты плотности числа электронов ρ_q представление вторичного квантования через ферми-операторы рождения и уничтожения (см. прил. II), можно представить оператор электрон-фононного взаимодействия в виде

$$H_1 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{qp} \gamma \sqrt{\frac{q}{nMc}} (a_{p-q}^+ a_p b_q^+ + b_q a_{p+q}^+ a_p).$$

Эта форма оператора H_1 , обычно называемая гамильтонианом Фрёлиха (H. Fröhlich, 1950) (хотя он полностью соответствует идеям матричного подхода Феликса Блоха, 1928–1930), в операторном отношении аналогична той, которая используется в электродинамике (взаимодействие электронов с фотонами) и квантовой теории поля, поэтому она воспринимается как что-то вполне само собой разумеющееся.

Полученное выражение для амплитуды электрон-фононного взаимодействия

$$\Phi(q) = \gamma \sqrt{\frac{q}{nMc}},$$

несмотря на ее откровенную модельность, оправдывает себя в теории проводимости и теплопроводности нормального (т. е. не сверхпроводящего) электронного газа, а зависимость от массы иона M

объясняет известный из экспериментов изотопический эффект. Конечно, предложенная модель H_1 , являясь физической, достаточно грубо, она не учитывает всех деталей и различных механизмов электрон-фононного взаимодействия, для которых величина $\Phi(q)$ может быть иной. В дальнейшем для нас будет важно поведение величины $\Phi^2(q)$ при малых значениях импульса q (в модели Фрёлиха $\Phi^2(q) \sim q$).

§ 2. Расчет транспортного сечения рассеяния и определение температурной зависимости удельного сопротивления в области низких и высоких температур по отношению к температуре Дебая

Располагая явным видом гамильтониана электрон-фононного взаимодействия H_1 , уже можно на квантовом уровне рассчитать эффективную длину свободного пробега $\Lambda(p) = (n\Sigma(p))^{-1}$, входящую под знак интеграла по импульсу \vec{p} в выражениях для проводимости σ электронного газа и его теплопроводности κ . Для этого вместо классического сечения рассеяния $\sigma(v, \psi)$ электрона на ионе нам нужно использовать оценку вероятности рассеяния электрона с импульсом \vec{p} на колебаниях кристаллической решетки, т. е. вероятность его переходов $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \vec{q}$ с испусканием или поглощением фонана с импульсом \vec{q} . Проще всего это сделать, воспользовавшись стандартной квантовомеханической формулой временной теории возмущений для вероятности квантовых переходов $w(n|n')$ (см. уравнение Паули § 1, п. 3), которая определяется квадратом модуля матричного элемента, соответствующего этим переходам, от оператора H_1 .

Следуя Блоху, будем полагать, что электроны и ионная решетка находятся (в нулевом приближении, которое используется при подсчете указанных матричных элементов) в общем состоянии статистического равновесия. Тогда средние от произведений бозе-операторов рождения и уничтожения фононов и соответствующих комбинаций ферми-операторов рождения и уничтожения электронных состояний будут выражаться с помощью теоремы о спариваниях (см. прил. III) через средние числа заполнения ν_q — бозе-распределение с равным нулю химическим потенциалом и n_p — ферми-

распределение для идеального газа,

$$\begin{aligned}\langle b_q^+ b_{q'} \rangle_0 &= \overline{b_q^+ b_{q'}} = \Delta(\vec{q} - \vec{q}') \nu_q; \\ \langle b_q b_q^+ \rangle_0 &= \overline{b_q b_q^+} = \Delta(\vec{q} - \vec{q}')(1 + \nu_q), \\ \langle a_p^+ a_{p'} \rangle_0 &= \overline{a_p^+ a_{p'}} = \Delta(\vec{p} - \vec{p}') n_p; \\ \langle a_{p'} a_p^+ \rangle_0 &= \overline{a_{p'} a_p^+} = \Delta(\vec{p} - \vec{p}')(1 - n_p).\end{aligned}$$

Тогда вероятность квантовомеханического перехода электрона из исходного состояния с импульсом \vec{p} с испусканием фонона с импульсом \vec{q} (т. е. с возбуждением волны плотности ионной решетки) $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - \vec{q}$, и с поглощением фонона $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \vec{q}$ за секунду будет равна

$$\begin{aligned}w(\vec{p}|\vec{p} - \vec{q}) + w(\vec{p}|\vec{p} + \vec{q}) &= \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \frac{1}{V} \frac{q}{Mnc} \times \\ &\times (n_p(1 - n_{p-q})(1 + \nu_q)\delta(E_p - E_{p-q} - cq) + \\ &+ n_p(1 - n_{p+q})\nu_q\delta(E_p - E_{p+q} + cq)).\end{aligned}$$

Заметим, что с точностью до членов порядка q^2

$$\begin{aligned}\delta(E_p - E_{p\mp q} \mp cq) &= \\ &= \delta\left(\frac{q^2}{2m} \mp \frac{\vec{p}\vec{q}}{m} \pm cq\right) \cong \delta\left(\frac{\vec{p}\vec{q}}{m} - cq\right) = \frac{m}{pq} \delta\left(\cos\vartheta - \frac{mc}{p}\right),\end{aligned}$$

а так как в рассматриваемом случае вырожденного Ферми-газа $p \sim p_F$, а величина $mc/p_F \sim 10^{-3}-10^{-4}$, то угол ϑ между векторами \vec{p} и \vec{q} оказывается практически прямым (см. рис. 4.1).

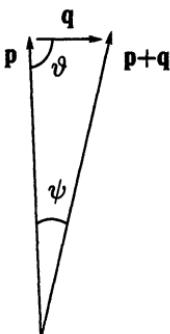
Угол же рассеяния ψ между векторами \vec{p} и $\vec{p}' = \vec{p} \pm \vec{q}$ в случае $|\vec{p}| \sim |\vec{p}'| \sim p_F$ и $q \ll p_F$ мал и достаточно просто выражается через модуль вектора q ,

$$q = 2p \sin \frac{\psi}{2}.$$

Таким образом, чтобы подсчитать транспортное сечение

$$\Sigma(p) = \int \sigma(p, \psi)(1 - \cos \psi) \sin \psi \, d\psi \, d\varphi,$$

необходимо подставить вместо $\sigma(p, \psi)$ квантовомеханическое сечение рассеяния, т. е. величину $w(\vec{p} \mid \vec{p} \mp \vec{q})$, деленную на плотность



потока рассеивающихся частиц p/m , и выразить в нем величину q через угол ψ . Однако удобнее сделать в некотором смысле наоборот: интегрировать не по углам ψ и φ , а по пространству \vec{q} (тоже два интеграла ввиду наличия Δ -функции).

Рис. 4.1. Схема соотношений и взаимного расположения векторов \vec{p} , $\vec{p} + \vec{q}$ и \vec{q} в случае $p \sim p_F$ и $q \ll p_F$

Чтобы не переписывать длинных выражений, напомним, что нам надо располагать оценкой величины $\Lambda(p)$ не всюду, а только на границе Ферми: в силу конструкции интеграла, определяющего проводимость электронного газа σ , именно в этой точке при $\theta \ll \varepsilon_F$ величина $\Lambda(p)$ выносится за его знак. Поэтому, учитывая, что в силу закона сохранения энер-

гии $E_{p \mp q} = E_p \mp cq$, имеем в случае $E_p - \mu \cong 0$ (при этом $n_p = 1$, так как исходное значение импульса электрона $p \leq p_F$)

$$n_p(1 - n_{p-q})(1 + \nu_q) = \frac{1}{e^{(E_p-\mu)/\theta} + 1} \cdot \frac{e^{(E_p-\mu)/\theta} e^{-cq/\theta}}{e^{(E_p-\mu)/\theta} e^{-cq/\theta} + 1} \cdot \frac{e^{cq/\theta}}{e^{cq/\theta} - 1} \cong \\ \cong \frac{1}{(1 + e^{-cq/\theta})(e^{cq/\theta} - 1)},$$

$$n_p(1 - n_{p+q})\nu_q = \frac{1}{e^{(E_p-\mu)/\theta} + 1} \cdot \frac{e^{(E_p-\mu)/\theta} e^{cq/\theta}}{e^{(E_p-\mu)/\theta} e^{cq/\theta} + 1} \cdot \frac{1}{e^{cq/\theta} - 1} \cong \\ \cong \frac{1}{(1 + e^{-cq/\theta})(e^{cq/\theta} - 1)}$$

(в принятом приближении оба процесса рассеяния электрона с испусканием и поглощением фонана вблизи границы Ферми вносят одинак-

ковый вклад в общую вероятность его рассеяния). Учитывая, что

$$1 - \cos \psi = 2 \sin^2 \frac{\psi}{2} \cong \frac{q^2}{2p^2},$$

и переходя при интегрировании по \vec{q} к сферическим координатам

$$\sum_q \dots \rightarrow \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int \dots q^2 dq \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varphi,$$

получим для интересующей нас величины сечения $\Sigma(p)$ на границе Ферми

$$\begin{aligned} \Sigma(p_F) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{m}{p_F} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \gamma^2 \frac{q}{nMc} \cdot 2 \frac{1}{1 + e^{-cq/\theta}} \cdot \frac{1}{e^{cq/\theta} - 1} \cdot \frac{q^2}{2p_F^2} \times \\ &\quad \times \frac{m}{p_F q} \int_0^\pi \delta \left(\cos \vartheta - \frac{mc}{p_F} \right) \sin \vartheta \, d\vartheta \cdot 2\pi q^2 dq. \end{aligned}$$

Интеграл по углу ϑ ввиду малости величины $mc/p_F \ll 1$ равен единице

$$\int_{-1}^1 \delta \left(x - \frac{mc}{p_F} \right) dx = 1.$$

Оставшемуся же интегралу по q можно придать характер интерполяционной формулы, положив, как и в теории Дебая теплоемкости твердого тела (см. т. 2, гл. 2, § 4), верхний предел равным $q_{\max} = \hbar\omega_{\max}/c = \theta_D/c$, где θ_D — дебаевская температура. Тогда получим, объединяя все константы в одну Σ_0 и выделяя безразмерный температурный параметр θ/θ_D ,

$$\Sigma(p_F) = \frac{\Sigma_0}{q_{\max}^5} \int_0^{q_{\max}} \frac{q^4 dq}{(1 + e^{-cq/\theta})(e^{cq/\theta} - 1)} = \Sigma_0 \left(\frac{\theta}{\theta_D} \right)^5 \int_0^{\theta_D/\theta} \frac{x^4 dx}{(1 + e^{-x})(e^x - 1)}.$$

Необходимо заметить, что если бы мы при оценке величины транспортного сечения $\Sigma(p)$ (которое стоит в знаменателе интегрального

выражения для электронной проводимости σ) по инерции сначала усреднили бы ее по электронным состояниям (т. е. проинтегрировали бы по \vec{p}), как это обычно делается, а уж потом выносили бы за знак интеграла, то вместо выписанного выше интеграла получили бы традиционную формулу Блоха (F. Bloch, 1930) (в литературе ее чаще называют формулой Грюнайзена (E. Grüneisen, 1933), который сопоставил формулу Блоха с экспериментальными данными), в которой под интегралом вместо множителя $(1 + e^{-x})^{-1}$ стоит

$$\left(\frac{x}{2}\right) \cdot (1 - e^{-x})^{-1}.$$

Исследуя температурную зависимость сечения $\Sigma(p_F)$, выявляем ее характерное поведение в случаях $\theta \ll \theta_D$ и $\theta \gg \theta_D$,

$$\frac{\Sigma(p_F)}{\Sigma_0} = \begin{cases} \int_0^\infty \frac{x^4}{2 \sinh x} \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 = \frac{2^5 - 1}{2^5} \Gamma(5) \zeta(5) \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 \cong \\ \cong 24,18 \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 & \text{в случае } \theta \ll \theta_D, \\ \int_0^{\theta_D/\theta} \frac{1}{2} x^3 dx \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 = \frac{1}{8} \frac{\theta}{\theta_D} & \text{в случае } \theta \gg \theta_D \end{cases}$$

(мы учли, что $\Gamma(5) = 4!$ и воспользовались табличным значением дзета-функции Римана $\zeta(5) = 1,0369\dots$), которое целиком переносится на удельное сопротивление,

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{\sigma_0} \cdot \frac{\Sigma(p_F)}{\Sigma_0} = \frac{1}{\sigma_0} \begin{cases} 24,18 \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 & \text{в случае } \theta \ll \theta_D, \\ \frac{1}{8} \frac{\theta}{\theta_D} & \text{в случае } \theta \gg \theta_D, \end{cases}$$

где σ_0 включает в себя константу Σ_0 ,

$$\Sigma_0 = \frac{16\pi m e^2 \epsilon_F}{3(2\pi\hbar)^3} \Lambda_0 = \frac{16\pi m e^2 \epsilon_F}{3(2\pi\hbar)^3} \frac{1}{n \Sigma_0}.$$

§ 3. Расчет поправок к основному результату

Полученная температурная зависимость удельного сопротивления при соответствующем выборе величины θ_D в общих чертах достаточно хорошо оправдывается на эксперименте. Параметры $(\theta_D)_R$ в градусах Кельвина, подобранные из соображений максимального совпадения эксперимента с теорией, приведены в табл. 4.1 для ряда обычных металлов. Там же для сравнения приведены имеющие тот же порядок значения дебаевской температуры $(\theta_D)_C$, которые наилучшим образом согласуют температурную зависимость теплоемкости твердого тела с теоретическим ее описанием по теории Дебая (см. т. 2, гл. 2, § 4).

Таблица 4.1

| Металл | Pb | Au | Na | Ag | Li | Cu | Al | Ni |
|----------------|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| $(\theta_D)_R$ | 86 | 175 | 202 | 223 | 330 | 333 | 335 | 472 |
| $(\theta_D)_C$ | 95 | 165 | 160 | 215 | 354 | 343 | 398 | 465 |

Формальные уточнения приведенных результатов для $\Sigma(p_F)$, полученных при самой грубой аппроксимации определяющих эту величину интегралов по $\epsilon = p^2/2m$ и q , достаточно несложны.

Так как рассматриваемый электронный газ вырожден, то при температурах $\theta \ll \epsilon_F$ (при этом ввиду того, что $\epsilon_F \sim 10^5 - 10^6$ К, эта температура может значительно превышать дебаевскую $\theta_D \ll \epsilon_F$) с учетом температурной зависимости химического потенциала

$$\mu = \mu_0 \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 + \dots \right), \quad \mu_0 = \epsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3},$$

имеем оценку для фермиевского интеграла с точностью до первой температурной поправки

$$\begin{aligned} \int_0^\infty F(\epsilon) \left(-\frac{\partial n(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon &= F(\mu) + \mu^2 \frac{\partial^2 F(\mu)}{\partial \mu^2} \cdot \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\theta}{\mu} \right)^2 + \dots = \\ &= F(\mu_0) - \mu_0 \frac{\partial F(\mu_0)}{\partial \mu_0} \cdot \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 + \mu_0^2 \frac{\partial^2 F(\mu_0)}{\partial \mu_0^2} \cdot \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\theta}{\mu_0} \right)^2 + \dots . \end{aligned}$$

Полагая $F(\varepsilon) = \varepsilon \Lambda(\varepsilon)$, получаем для электропроводности

$$\sigma = \frac{16\pi m e^2}{3(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \varepsilon \Lambda(\varepsilon) \left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon = \frac{16\pi m e^2 \varepsilon_F}{3(2\pi\hbar)^3} \Lambda(\varepsilon_F) \times \\ \times \left\{ 1 - \left(\frac{\pi^2}{12} - \frac{\pi^2}{4} \frac{\varepsilon_F}{\Lambda(\varepsilon_F)} \frac{\partial \Lambda(\varepsilon_F)}{\partial \varepsilon_F} - \frac{\pi^2}{6} \frac{\varepsilon_F^2}{\Lambda(\varepsilon_F)} \frac{\partial^2 \Lambda(\varepsilon_F)}{\partial \varepsilon_F^2} \right) \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 + \dots \right\}.$$

Так как

$$\Sigma(p_F) \sim \frac{1}{p_F^4} \sim \frac{1}{\varepsilon_F^2} \quad \text{и} \quad \Lambda(\varepsilon_F) = \frac{1}{n\Sigma(p_F)} \sim \varepsilon_F^2,$$

то подсчитывая производные по ε_F и приводя подобные члены, получаем

$$\sigma \cong \frac{16\pi m e^2 \varepsilon_F}{3(2\pi\hbar)^3} \Lambda(p_F) \left(1 + \frac{3}{4} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 \right) = \sigma_0 \frac{\Sigma_0}{\Sigma(p_F)} \left(1 + \frac{3}{4} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 \right), \\ \rho = \frac{1}{\sigma} \cong \rho_0 \frac{\Sigma(p_F)}{\Sigma_0} \left(1 - \frac{3}{4} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F} \right)^2 \right).$$

Уточняя величину $\Sigma(p_F)/\Sigma_0$ в области $\theta \ll \theta_D$, мы должны вычесть из полученного ранее результата интеграл по нефизической области значений x . Учитывая, что в этой области $x \gg 1$, имеем

$$\int_{\theta_D/\theta}^{\infty} \frac{x^4 dx}{(1 + e^{-x})(e^x - 1)} \cong \int_{\theta_D/\theta}^{\infty} e^{-x} x^4 dx = \\ = \left(\frac{\theta_D}{\theta} \right)^4 e^{-\theta_D/\theta} \left(1 + 4 \frac{\theta}{\theta_D} + 12 \left(\frac{\theta}{\theta_D} \right)^2 + \dots \right) \cong \left(\frac{\theta_D}{\theta} \right)^4 e^{-\theta_D/\theta},$$

поэтому с учетом экспоненциально малой при $\theta \ll \theta_D$ добавки получаем

$$\frac{\Sigma(p_F)}{\Sigma_0} \cong \left(\frac{\theta}{\theta_D} \right)^5 \left(24,18 - \left(\frac{\theta_D}{\theta} \right)^4 e^{-\theta_D/\theta} \right).$$

В случае высоких температур $\theta \gg \theta_D$ (по $\theta \ll \varepsilon_F$) область значений переменной x ограничена малым интервалом

$$0 \leq x \leq \frac{\theta_D}{\theta} \ll 1,$$

поэтому «квазиклассическая» поправка к линейной по температуре зависимости удельного сопротивления определяется величиной

$$\begin{aligned} \frac{\Sigma(p_F)}{\Sigma_0} &= \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 \int_0^{\theta_D/\theta} \frac{x^4 dx}{2 \sinh x} \cong \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 \int_0^{\theta_D/\theta} \frac{1}{2} \frac{x^3 dx}{1 + \frac{1}{6}x^2} \cong \\ &\cong \left(\frac{\theta}{\theta_D}\right)^5 \int_0^{\theta_D/\theta} \left(\frac{x^3}{2} - \frac{x^5}{12}\right) dx = \frac{1}{8} \frac{\theta}{\theta_D} \left(1 - \frac{1}{9} \left(\frac{\theta_D}{\theta}\right)^2\right), \end{aligned}$$

и мы получаем

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \cong \rho_0 \frac{1}{8} \frac{\theta}{\theta_D} \left(1 - \frac{1}{9} \left(\frac{\theta_D}{\theta}\right)^2\right).$$

§ 4. Обсуждение и критические замечания

Сделаем несколько замечаний по поводу полученных результатов. Основное достижение теории Блоха состоит в объяснении на базе кинетической теории и квантового подхода температурной зависимости удельного сопротивления металлов, спадающего при $\theta \rightarrow 0$ по степенному закону. Зависимость $\rho \sim \theta^5$ при $\theta \ll \theta_D$, казалось, можно было предугадать из общих соображений: среднее число возбужденных фононов в равновесном случае пропорционально третьей степени температуры, $n_\phi \sim \theta^3$, а так как в длинноволновой области $q \ll p_F$, то рассеяние электронов на этих фононах происходит на малые углы, и величина $(1 - \cos \psi)$, входящая в транспортное сечение Σ , дает под интегралом дополнительный фактор q^2 , который при переходе к интегрированию по безразмеренной переменной дает θ^2 , доводя общую зависимость до θ^5 . Однако, привлекательность этой интерпретации обманчива, так как из приведенного рассуждения полностью выпала структура амплитуды электрон-фононного взаимодействия $\Phi(q)$, которая, как было

показано выше, существенно влияет на зависимость сечения Σ от температуры θ . Согласно исходящей из физических соображений фрелиховской модели для H_1 величина $\Phi^2(q) \sim q$, и в этом случае теория Блоха дает $\rho \sim \theta^5$, но этот закон на практике соблюдается скорее как исключение. Если положить $\rho \sim \theta^k$, то окажется, что для большинства металлов величина k лежит в интервале значений $3,5 < k < 5$, и все предпринятое выше восходящее к Ф. Блоху рассмотрение, начиная с оказавшейся фактически нереализуемой структуры фрелиховского гамильтонiana электрон-фононного взаимодействия H_1 , приобретает откровенно модельный характер.

В области температур $\theta > \theta_D$ влияние модели для амплитуды $\Phi(q)$ на образование температурной зависимости сечения Σ фактически сходит на нет, так как появляющаяся линейная зависимость $\Sigma \sim \theta$ связана с релей-джинсовской аппроксимацией средних чисел заполнения для фононов $\nu_q \cong \theta/(cq)$. В этой температурной области линейный закон для удельного сопротивления с небольшими отклонениями от него в обе стороны выполняется для большинства металлов.

В области промежуточных температур изложенная теория является интерполяционной, и ей свойственны как успехи в обобщенном описании явлений проводимости, так и недостатки, свойственные теориям подобного типа. Вся критика теории Дебая теплоемкости твердых тел переносится целиком на рассмотренную выше теорию проводимости с добавлением упреков «местного» характера. Приведенное в таблице сопоставление подгоночного в теории электропроводности параметра — «дебаевской» температуры $(\theta_D)_R$ со столь же подгоночной дебаевской температурой $(\theta_D)_C$ в теории теплоемкости твердого тела, с одной стороны, откровенно радует тем, что эти величины оказываются одного порядка, с другой — огорчает тем, что они не совпадают друг с другом в точности (этого, конечно, нельзя было и ожидать от такой откровенно качественной теории, каковой является теория Блоха).

В области очень низких температур сопротивление ρ , связанное с рассеянием электронов на колебаниях решетки, спадает до нуля, но так как идеальных кристаллических структур без посторонних примесей и дефектов не бывает, то ранее незаметные эффекты, связанные с рассеянием электронов на этих неоднород-

ностях, начинают играть основную роль. Именно они определяют так называемое остаточное сопротивление металла. Так как процессы рассеяния на примесных центрах и дислокациях и рассеяния на длинноволновых фононах практически независимы, то общее сечение $\Sigma = \Sigma_{\text{фон}} + \Sigma_{\text{прим}}$, и удельное сопротивление $\rho \sim \Sigma$ приобретает аддитивное строение, $\rho = \rho_{\text{реш}} + \rho_{\text{прим}}$ (эта особенность удельного сопротивления была подмечена еще Маттиссеном (A. Matthiessen, 1862)). Первая часть, $\rho_{\text{реш}}$, была рассчитана нами по Блоху, а вторая, $\rho_{\text{прим}}$, — несколько ранее в приближении не зависящей от температуры величины $\Sigma(p_F)$. В отличие от $\rho_{\text{реш}}$ эта часть, пропорциональная плотности независимых друг от друга примесных центров, слабо зависит от температуры, при повышении которой наблюдается незначительный ее рост, связанный с усилением теплового движения рассеивающих электроны центров.

Наконец, в области очень низких температур (от долей до единиц и десятка градусов Кельвина) многие металлы скачком теряют свое сопротивление. Этот фазовый переход в сверхпроводящее состояние связан с перестройкой основного состояния электронного газа, взаимодействующего с кристаллической ионной решеткой металла, и структуры его возбужденных состояний, связанной с возникновением между электронами сильных квантовых корреляций. Поэтому использование в качестве «нулевого» приближения модели идеального ферми-газа (как это делалось в теории Блоха) становится неприемлемым, и теоретическое исследование этого явления (к которому мы приступим в следующей, основной части данного руководства) лежит уже в области квантовой статистической механики существенно неидеальных систем.

§ 5. Теплопроводность электронного газа в электрон-фононной модели взаимодействия

Заканчивая обсуждение, остановимся вкратце на характере температурной зависимости коэффициента теплопроводности электронного газа κ , обусловленной взаимодействием электронов с колебаниями решетки. Если в температурных областях $\theta < \tilde{\theta}$, где преобладает остаточное сопротивление $\rho_{\text{реш}} \ll \rho_{\text{прим}}$ и $\theta > \theta_D$ рассеяние

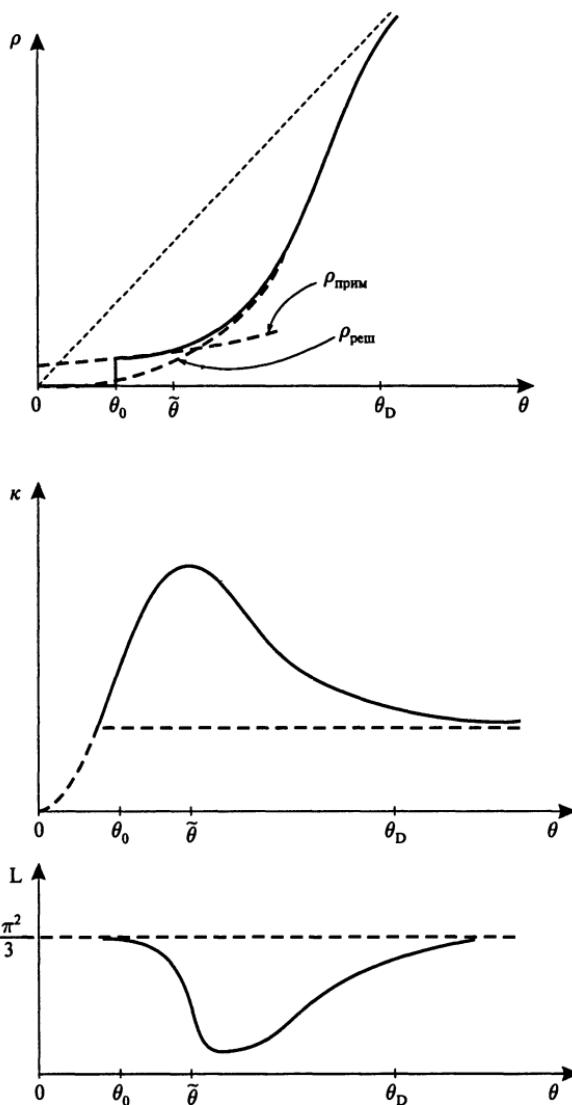


Рис. 4.2. Характер температурной зависимости удельного сопротивления ρ , коэффициента теплопроводности κ и числа Лоренца $L = e^2 \kappa \rho / \theta$; $0 < \theta < \theta_0$ — область сверхпроводимости, $\theta_0 < \theta < \bar{\theta}$ — область остаточного сопротивления, $\bar{\theta} < \theta < \theta_D$ — область преобладания электрон-фононного взаимодействия, $\theta > \theta_D$ — область рассеяния на некоррелированно движущихся ионах решетки

электронов происходит на примесных центрах и на отдельных ионах, движение которых практически не коррелировано, выполняется закон Видемана—Франца, т. е. коэффициент теплопроводности определяется в соответствии с температурной зависимостью удельного сопротивления,

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{\theta}{e^2 \rho} \sim \begin{cases} \theta & \text{в области } \theta < \tilde{\theta}, \\ \text{const} & \text{в области } \theta > \theta_D, \end{cases} \quad \text{где } \rho \cong \text{const},$$

то в промежуточной области $\tilde{\theta} < \theta < \theta_D$, в которой основным механизмом рассеяния электронов являются процессы их рассеяния с испусканием и поглощением фононов, дело обстоит несколько иначе. Так как условие отсутствия электрического тока $I = 0$ (т. е. $E \neq 0$), при котором определяется величина коэффициента κ , исключает движение электронного газа как целого, то рассеяние электронов будет происходить не на малые углы ψ , а практически изотропно, и член с $\cos \psi$ в транспортном сечении окажется уже несущественным $\Sigma(p_F) \rightarrow \tilde{\Sigma}(p_F) = \int \sigma(p, \psi) \sin \psi \, d\psi \, d\varphi$, а это сразу приведет к понижению степени q под знаком интеграла на две единицы, и мы будем иметь

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{\Sigma}(p_F)}{\tilde{\Sigma}_0} &= \left(\frac{\theta}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/\theta} \frac{x^2 \, dx}{2 \sinh x} = \\ &= \begin{cases} \frac{2^3 - 1}{2^3} \Gamma(3) \zeta(3) \left(\frac{\theta}{\theta_D} \right)^3 \cong 2,103 \left(\frac{\theta}{\theta_D} \right)^3 & \text{в случае } \theta \ll \theta_D, \\ \frac{1}{4} \frac{\theta}{\theta_D} & \text{в случае } \theta \gg \theta_D, \end{cases} \end{aligned}$$

откуда для коэффициента теплопроводности получаем

$$\kappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{16\pi m e_F}{3(2\pi\hbar)^3} \frac{\theta}{n \tilde{\Sigma}(p_F)} \sim \begin{cases} \frac{1}{\theta^2} & \text{в случае } \theta < \theta_D, \\ \text{const} & \text{в случае } \theta > \theta_D. \end{cases}$$

Общий характер зависимости от температуры величин ρ , κ и числа Л. Лоренца $L = e^2 \kappa \rho / \theta$ представлен на рис. 4.2.

Часть II

Введение в теорию сверхпроводимости электронного газа

Приступая к рассмотрению этого большого и достаточно сложного раздела квантовой статистики, отметим, что само создание микроскопической теории сверхпроводимости в 1957–1958 гг. оказалось, пожалуй, последним в XX веке крупным достижением статистической физики, вскрывшем механизм явления, которое почти полвека после его экспериментального открытия не находило адекватного и убедительного объяснения. Представляя собой исключительно квантовый эффект, явление сверхпроводимости не имеет убедительных и привычных «классических» аналогий, и если в предыдущем разделе еще оставалась возможность для наглядного (в обычательском смысле) истолкования тех или иных эффектов, то в случае сверхпроводимости подобные «классические» интерпретации, часто используемые в популярной литературе, представляются надуманными или откровенно популистскими.

| | |
|--|-----|
| Глава 5 | |
| Экспериментальные и теоретические предпосылки теории сверхпроводимости | 77 |
| Глава 6 | |
| Электронный газ с прямым передаваемым фононами взаимодействием | 102 |
| Глава 7 | |
| Исследование уравнения для энергетической щели в случае упрощенной модели взаимодействия электронов | 119 |
| Глава 8 | |
| Термодинамические свойства модельного сверхпроводника | 128 |
| Глава 9 | |
| Величина критического магнитного поля и фазовый переход 2-го рода | 134 |
| Глава 10 | |
| Качественный учет кулоновского взаимодействия | 140 |
| Глава 11 | |
| Вариационное приближение и асимптотическая точность полученных результатов | 144 |
| Глава 12 | |
| Принцип компенсации «опасных диаграмм» | 151 |
| Глава 13 | |
| Общая структура возбужденных состояний сверхпроводящего и нормального электронного газа в металлах | 155 |
| Глава 14 | |
| Критерий возможного существования явления сверхтекучести в вырожденной ферми-системе с куперовской корреляцией составляющих ее частиц и условие устойчивости нормального ее состояния | 162 |

Глава 5

Экспериментальные и теоретические предпосылки теории сверхпроводимости

Теория сверхпроводимости разрабатывалась не на пустом месте, напротив, она опиралась на достаточно достоверные экспериментальные данные и основывалась на целом ряде предварительных полуфеноменологических теоретических соображений. Теперь уже вряд ли стоит останавливаться на них слишком подробно, они достаточно полно освещены в известных монографических обзорах по теории сверхпроводимости, например, в капитальном обзоре «Физика низких температур» (ИЛ, 1959) — перевод 14–15 томов *Handbuch der Physik*, главы 8 и 9 содержат более 400 ссылок на оригинальные исследования по вопросам сверхпроводимости, в обзирах авторов теории Дж. Шриффера «Теория сверхпроводимости» («Наука», 1970) 194 ссылки, Дж. Бардина и Дж. Шриффера «Новое в теории сверхпроводимости» (Физматгиз, 1962) 274 ссылки, в монографии Н. Н. Боголюбова, В. В. Толмачева и Д. Б. Ширкова «Новый метод в теории сверхпроводимости» (Изд. АН СССР, 1958) — 25 ссылок и т. д. Более того, совершенно бессмысленно в учебном лекционном курсе использовать ссылки на авторитетные источники, чтобы, оглушая слушателей всемирно известными именами, бездоказательно использовать взятый оттуда готовый материал, превращая тем самым лекции в лучшем случае в научный обзор. В живой студенческой аудитории все должно объясняться и демонстрироваться в «изначальной» манере подробно и достаточно автономно.

§ 1. Немного истории

Немного об истории обсуждаемых вопросов. Она вполне поучительна. Начало XX века ознаменовалось возросшим интересом физиков к особенностям поведения термодинамических систем

в области низких температур, не укладывающимся в схему классической Больцмано-гиппсовской статистической теории. В 1910 г. Х. Камерлинг-Оннес получил жидкий гелий и с помощью метода откачки его паров, располагая достаточно мощными насосами, приступил к исследованию его свойств при температуре ниже 4° по Кельвину. Эти исследования в конце концов увенчались его первым крупным успехом — открытием в области температур $T_{\lambda} = 2,17$ К особенности λ -типа в температурном поведении теплоемкости жидкого гелия, ниже которой теплоемкость вела себя пропорционально T^3 . Параллельно с исследованием свойств жидкого гелия Камерлинг-Оннес, измеряя сопротивление твердой ртути, обнаружил при температуре $T_0 = 4,15$ К ее переход в сверхпроводящее состояние. Это был второй его крупный успех.

Следует заметить, что в это время квантовой механики как осознанной науки еще не было, а предварительная теория Бора делала первые шаги по пути объяснения спектра излучения атомов водорода. Так что выявленные Камерлинг-Оннесом особенности теплоемкости жидкого гелия как ее поведения $C \sim T^3$ (напомним, что фононной теории теплоемкости твердых тел Дебая и представлений по этому поводу Борна и Кармена еще не существовало), так и ее λ -особенность при $T_{\lambda} = 2,17$ К (как оказалось впоследствии, эта особенность, экспериментально проверенная М. Бекингемом уже в 1958 г. с точностью до $|T - T_{\lambda}| \sim 10^{-6}$ К, имеет логарифмический характер), и открытые им явление сверхпроводимости только спустя несколько десятков лет были осознаны как макроскопические проявления существенно квантовых особенностей исследуемых многотельных статистических систем. Отметим также, что связанные единой криогенной техникой, исследования свойств жидкого гелия и особенностей сверхпроводников изначально шли параллельно друг другу, что и создавало почву для какого-то единобразного их истолкования.

Далее, в 1928 г. В. Кеезом, продолжая исследования явления сверхпроводимости, к 1932 г. обнаружил, что в точке $T = T_0$ происходит конечный скачок теплоемкости (термодинамической теории фазового перехода 2-го рода по Эренфесту в те годы еще не было), а при $T < T_0$ ее температурное поведение определяется в основном фактором $e^{-\Delta/T}$ (квантовая механика уже была, но квантовая статистика еще не сформировалась, и по характеру температур-

ной зависимости теплоемкости определить характер низлежащих возбужденных состояний системы с их характерной зависимостью от импульса физики еще не умели, это относится как к случаю $C \sim T^3$, так и к зависимости $C \sim e^{-\Delta/T}$).

В 1933 г. В. Мейснер и Р. Оксенфельд обнаружили аномальный диамагнетизм сверхпроводников, связанный с вытеснением из них поля магнитной индукции, и в 1934 г. Ф. Лондон предложил феноменологическую теорию для описания макроскопических свойств сверхпроводящих металлов.

Существенный сдвиг в развитии теоретических представлений в области физики низких температур произошел в 1938 г. Фриц и Хайнц Лондоны вывели соотношения, определяющие термодинамические свойства идеального бозе-газа, включая область с конечной долей конденсированного в импульсном пространстве состояния (эти формулы теперь фигурируют во всех учебниках по статистической физике), и фазовый переход (в терминологии Эренфеста 3-го рода с изломом теплоемкости в точке исчезновения бозе-конденсата) в неконденсированное квазиклассическое состояние. Это выпадение конечной доли частиц системы из ее теплового движения послужило основой для создания Л. Тиссой в том же году двухжидкостной модели реального жидкого гелия, которая получила достаточно серьезное развитие как в теоретическом плане, так и в качестве интерпретационного материала, особенно в связи с открытием П. Л. Капицей в 1938 г. явления сверхтекучести жидкого гелия-4 через узкие капилляры, щели и поверхность пленку. Феноменологическая теория Тиссы, представляющая жидкый гелий в виде вложенных друг в друга двух жидкостей, сверхтекучей, не несущей энтропии, и нормальной, была к 1941 г. завершена Л. Д. Ландау (полная гидродинамическая теория, включая особенности так называемого второго звука и т. д.) и использована при развитии (уже к 1950 г.) Л. В. Гинзбургом и Л. Д. Ландау макроскопической теории сверхпроводимости Ф. Лондона. Это укрепляющееся взаимопроникновение идей двух ветвей физики низких температур, естественно, вызвало попытки интерпретировать сверхпроводимость электронного газа как явление его сверхтекучести.

Существенным результатом работы Ландау 1941 г. явился сформулированный им на основе чисто кинематических построений критерий сверхтекучести, получивший его имя. Предложенная им

тогда же структура возбужденных состояний жидкого гелия удовлетворяла этому критерию и состояла из ветви акустических колебаний — фононов, обеспечивающих температурное поведение теплоемкости $C \sim T^3$, и отделенных от нулевого основного состояния аналога волн крутильных колебаний в теории теплоемкости многоатомного кристаллического твердого тела (М. Борн и Т. Карман, 1912 г.), которые по этой причине были названы ротонами.

Эти представления продержались недолго. В своем докладе осенью 1946 г. Н. Н. Боголюбов в рамках микроскопической теории слабо-неидеального бозе-газа показал, что в связи с наличием в этой системе макроскопической доли бозе-конденсата происходит качественная перестройка не только ее основного состояния, но и структуры ее возбужденных состояний: при малых значениях импульса — это фононы, $E(p) \cong pc$, с ростом импульса p в зависимости энергии возбужденного состояния $E(p)$ обнаруживается провал (возбуждения, соответствующие горбатой области $E(p)$ перед ним, теперь часто называют максонами), и после этого провала кривая $E = E(p)$ выходит на энергию $p^2/2m$. В связи с этим полученным исключительно теоретическим методом результатом Ландау в 1947 г. соответственно изменил предложенную им ранее структуру возбужденных состояний жидкого гелия, объединив ротоны с фононами в одну дисперсионную кривую, сохранив при этом уже ставшую популярной терминологию. Так в литературе появилась «ротонная яма» (хотя в ней ничего не крутится, так как вся кривая $E = E(p)$ представляет собой зависимость энергии продольных колебаний плотности, и с ростом импульса «по дороге» ничего в них закрутиться не может). Эксперименты по рассеянию нейтронов на жидким гелием в области $T \sim 1$ К (Д. Хеншоу, А. Вудс, 1961, и далее 1964, 1971, 1973 и т. д.) обнаружили эту ротонную яму и подтвердили общую структуру боголюбовского результата.

Эти эксперименты по рассеянию нейтронов поставили на свои места многие проблемы. Во-первых, критическая скорость Ландау по отношению к фонон-ротонному спектру оказалась порядка 200 м/сек (это не удивительно, так как по отношению к спектру колебаний плотности критическая скорость Ландау соответствует скорости распространения ударной волны), а скорость сверхтекущего перетекания гелия согласно экспериментам П. Л. Капицы составляет величину всего лишь порядка 10 см/сек, т. е. в 2000 раз меньше,

так что хотя бы только поэтому такое само собой разумеющееся и легкое объяснение явления сверхтекучести с привлечением критерия Ландау оказалось несостоительным. Однако, как это часто бывает в теоретической физике, хорошие идеи не пропадают зря — критерий Ландау оказался существенным при оценке величины критического тока в сверхпроводниках (это случилось уже на следующем этапе развития физики низких температур). Несмотря на это бытующие до сих пор попытки интерпретации сверхпроводимости электронного газа (зависимость энергии возбужденных состояний от импульса которого имеет совершенно иной характер по сравнению с фонон-ротонным спектром жидкого гелия) как явления сверхтекучести, якобы осознанной и истолкованной на базе критерия Ландау, превратились в неосуществимое пожелание.

Во-вторых, эксперименты по рассеянию нейтронов на жидком гелии, многократно уточняемые вплоть до конца XX века, не обнаружили возбужденных состояний, лежащих ниже акустической ветви (т. е. никакого «второго» звука). Разделение вырожденной бозе-системы на вложенные друг в друга сверхтекущую и нормальную жидкости как интерпретационный прием, несмотря на его несовместимость с общими квантовомеханическими представлениями, было начиная с 1938 г. весьма популярно и порой эффективно при наглядной интерпретации необычных с обычайской точки зрения явлений. Однако, предсказание существования второго звука, автоматически следовавшего из двухжидкостной гидродинамики, оказалось преждевременным и неподтвержденным экспериментально, и вся двухжидкостная идеология тем самым существенно приблизилась к уровню теоретического вымысла.

После насыщенных продуктивными идеями и экспериментальными достижениями 1938–47 гг. в области физики низких температур наступил 10-летний период поисков путей теоретического осмысления механизма возникновения сверхпроводящего состояния электронного газа в металлах. Объяснение явления сверхтекучести тогда казалось, в основном, решенной проблемой, поэтому этот период был наполнен попытками теоретически обосновать возможность существования в системах ферми-частиц (каковыми являются несущие электрический заряд электрона) устойчивых бозе-подобных комплексов, способных к конденсации, и тогда сверхпроводимость могла бы интерпретироваться как сверхтекучесть подобных образований.

В 1957 г. Дж. Бардин, Л. Купер и Дж. Шриффер (в дальнейшем БКШ) на основе модели с парным нелокальным электрон-электронным взаимодействием, имеющим характер притяжания, достаточного для образования бозе-подобных электронных пар, и Н. Н. Боголюбов (1958 г.) на основе учета электрон-фононного и кулоновского взаимодействий создали микроскопическую теорию сверхпроводимости в основном, закрыв тем самым почти полувековой «долг» теоретической физики перед экспериментаторами, работающими в области физики низких температур.

Работа БКШ по праву заслужила Нобелевскую премию. В работах Н. Н. Боголюбова нашли свою убедительную реализацию упомянутые выше физические аналогии сверхпроводящего состояния со структурой вырожденного неидеального бозе-газа, выявленной им еще в 1946–47 гг., которые естественным образом выразились в общности математического метода их выявления.

В основу предлагаемого варианта изложения этой теории положена исходящая из идей Боголюбова работа автора данных лекций 1958 г. Автор усматривает достоинство этого метода в том, что он является изначально статистическим (а не квантовомеханическим для систем при температуре $\theta = 0$), имеет формальную аналогию с проблемой упорядочения и дальнего порядка в статистических системах и кроме того допускает достаточно убедительное и математически не громоздкое доказательство асимптотической точности получаемых с его помощью результатов. В данных лекциях автор уделят внимание только основным эффектам, характерным для объемного металла, оставляя системы из пленок, слоистых структур и прочих макродисперсных образований, проявляющих в комплексе порой хитроумные свойства, исследователям, обладающим комбинационной и инженерной фантазией.

§ 2. Вопросы моделирования системы электронного газа в металлах

После общего исторического введения остановимся на тех экспериментальных и общефизических данных, которые послужили наводящими соображениями при построении теории сверхпроводимости. Это касается в первую очередь рационального моделиро-

вания системы на микроскопическом уровне. Этот исходный момент, от которого зависит успех всего теоретического рассмотрения, очень ответственен: гамильтониан системы должен быть смоделирован так, чтобы, с одной стороны, он отражал реальные динамические особенности взаимодействующих частиц системы, а с другой — чтобы математическая обработка этой модельной системы в рамках гиббсовской статистической теории выявляла бы интересующий нас эффект. В этой процедуре формирования модели, которая по идеи заранее должна содержать подлежащий объяснению эффект, конечно же есть определенная доля лукавства, присущая почти всем микроскопическим (т. е. теоретическим) исследованиям и объяснениям макроскопически наблюдаемых явлений.

Как и в предыдущем разделе (см. § 2 и § 4) отвлечемся от конкретных деталей ионной решетки и будем исходить из модели «желе», сделав рассмотрение более универсальным и как бы усредненным по всей группе сверхпроводящих металлов.

Однако этот ионный фон не является чем-то замороженным. В интересующем нас диапазоне температур $0 < \theta < \theta_0 \sim 10\text{ K}$, который лежит значительно ниже дебаевской температуры, имеющей порядок сотен градусов Кельвина, температурное состояние ионной решетки обеспечивается газом длинноволновых фононов (т. е. с частотами, составляющими лишь малую долю дебаевской максимальной частоты, соответствующей «длине» волны порядка межатомного расстояния $a = \sqrt[3]{V/N}$). Именно эти возбуждения ответственны за характерное температурное поведение теплоемкости решетки $C_{\text{реш}} \sim \theta^3$, которая при $\theta \sim 10\text{ K}$ оказывается пренебрежимо малой по сравнению с теплоемкостью нормального электронного газа $C_{\text{эл}} \sim \theta$.

При температурах порядка 10 К электронный газ существенно вырожден ($\epsilon_F = p_F^2/2m \sim 10^5 - 10^6\text{ K}$), и возбужденные его состояния, имеющие частично-дырочный характер, по энергии концентрируются в непосредственной близости к уровню Ферми. Как было показано в предыдущем разделе (см. § 2) затухание Γ_p , возникающее вследствие взаимодействия электрона, покинувшего заполненную сферу Ферми, с другими электронами по отношению к его энергии

$$\epsilon_p = \frac{p^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \cong \frac{p_F}{m}(p - p_F),$$

оказывается исчезающе малым во всей области температурного размытия сферы Ферми, $\Gamma_p/\epsilon_p \leq \theta/\epsilon_F$, что в нашем случае соответствует величине $10^{-4} - 10^{-5} \ll 1$, и что полностью оправдывает использование в качестве модели электронного газа его представление идеальным ферми-газом с характерной для него температурной зависимостью удельной теплоемкости $C_{\text{эл}} \cong \pi^2 \theta / 2\epsilon_F$, целиком обвязанной именно частично-дырочному характеру возбуждений над его основным состоянием.

Учет взаимодействия электронов друг с другом и с колебаниями решетки, производимый методами теории возмущений, уточнил, но не изменил основного характера поведения электронного газа: структура его основного и возбужденных состояний в принципе оставалась той же, что и для идеального газа. После открытия явления сверхпроводимости такие системы стали именовать нормальными. Влияние же рассеяния электронов на тепловых колебаниях кристаллической решетки, рассчитанное еще Феликсом Блохом (см. § 4 предыдущего раздела), определило температурную зависимость удельного сопротивления металла при температурах $\theta < \theta_D$, как $\rho \sim \theta^5$, которое, не доходя до нуля, блокируется слабо зависящим от температуры остаточным сопротивлением, связанным с рассеянием электронов на примесях и дислокациях (см. рис. в § 4).

Таким образом, учет неидеальности электронного газа в металлах методами регулярной квантовомеханической теории возмущений в виде разложения по степеням константы связи $g = e^2$, несмотря на достаточно реалистическое объяснение особенностей электронного газа в состоянии нормальной его фазы, эффекта сверхпроводимости, т. е. мгновенного исчезновения целиком всего сопротивления при понижении температуры до уровня θ_0 , выявить не смог.

§ 3. Учет экспериментальных данных: малая величина температуры фазового перехода по сравнению со средней энергией взаимодействия электронов друг с другом и газом фононов

Перейдем теперь к обсуждению характерных для явления сверхпроводимости экспериментальных данных, известных задолго до появления теории сверхпроводимости и послуживших наводящими

соображениями при ее формировании. Первое соображение касается величины температуры θ_0 фазового перехода в сверхпроводящее состояние. Оказалось, что учет электрон-электронного и электрон-фононного взаимодействий в энергетическом выражении определяет величины порядка 10 eV (в этом несложно убедиться, прикинув к примеру величину средней энергии кулоновского взаимодействия электронов e^2/a , где $e \cong 4,8 \cdot 10^{-10} \text{ CGSE}$ и $a = \sqrt[3]{V/N} \sim 10^{-8} \text{ см}$, что дает $e^2/a \cong 2 \cdot 10_{\text{эрг}}^{-11} \cong 10 \text{ eV}$, так как $1 \text{ eV} \cong 1,6 \cdot 10_{\text{эрг}}^{-12} \cong 11\,600 \text{ K}$), в то время как температура фазового перехода имеет порядок $\theta_0 \sim 10 \text{ K} \cong 10^{-3} \text{ eV}$, т. е. более чем в тысячу раз меньше. Вследствие этого становится понятным, почему разложение по степеням $g = e^2$ (т. е. формальная теория возмущений, рассчитанная на описание нормальных ферми-систем) не смогло уловить эффект сверхпроводимости, так как зависимость ее ключевого параметра θ_0 от константы взаимодействия g оказалась более слабой, чем первая или какая-либо еще ее степень. Тем самым в задачу микроскопической теории включается уже математическая проблема определения этой слабой и, главное, не аналитической (т. е. не представляемой в виде регулярного ряда по степеням g) зависимости.

§ 4. Учет экспериментальных данных: гипотеза о наличии в спектре возбужденных состояний энергетической щели и низкотемпературное поведение теплоемкости сверхпроводника

Далее, произведенные Кеезом измерения теплоемкости сверхпроводников при $\theta < \theta_0$ выявили характерную ее температурную зависимость, включающую фактор $e^{-\Delta/\theta}$, что с несомненной определенностью указывает на то, что энергия низлежащих возбужденных состояний системы, ответственных за ее температурное состояние, отделена от энергии основного состояния энергетической щелью порядка Δ (напомним, кстати, что в обладающем свойством сверхтекучести неидеальном бозе-газе подобной энергетической щели нет, и низлежащие возбужденные состояния системы, имеющие характер фононов, обеспечивают кубическую зависимость теплоемкости от температуры $C \sim \theta^3$).

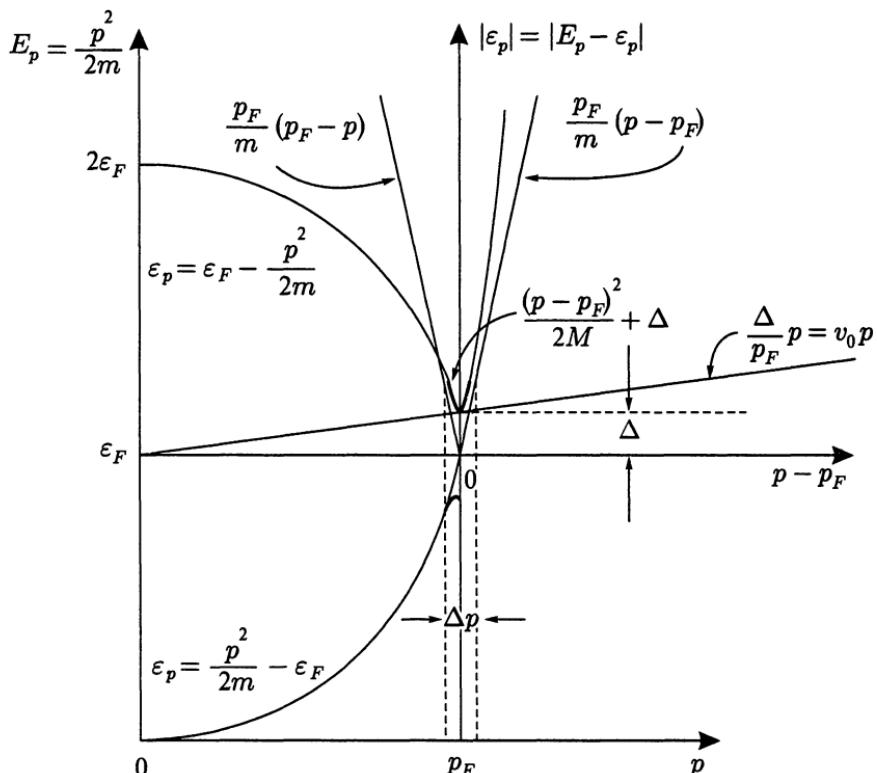


Рис. 5.1. Характер зависимости от импульса энергии ϵ_p возбужденных состояний над сферой Ферми в случае появления над ней энергетической щели Δ ; $v_0 = \Delta/p_F$ — критическая скорость незатухающего движения системы в соответствии с критерием Ландау. Масштабы в области $p \sim p_F$ ради наглядности намеренно укрупнены, клин, образованный прямыми $\pm p_F(p - p_F)/m$, касательными к $E_p = p^2/2m$ в точке $p = p_F$, на самом деле очень острый, величины $\Delta p/p_F$ и Δ/ϵ_F имеют порядок 10^{-4} , что отразить графически не представляется возможным (на рисунке же эти величины имеют порядок 0,15). Толстой линией изображен участок кривой, аппроксимируемый параболой $(p - p_F)^2/2M + \Delta$

Наличие такой энергетической щели означает существенную перестройку структуры возбужденных состояний системы (см. рис. 5.1), вследствие которой электроны с импульсами $p < p_F$ могут покинуть сферу Ферми, только преодолев энергетический барьер 2Δ , изменяя тем самым характер теплового движения именно в низ-

котемпературной области $\theta \ll \Delta$ (при этом порядок величины Δ начинает ассоциироваться с θ_0). Рассмотрим в связи с этим простую статистическую задачу, исходящую из предположения существования энергетической щели Δ и спектра возбуждений, изображенного на рис. 5.1.

Произведем аккуратно оценки фигурирующих на этом рисунке величин. Определим величину «размытия» сферы Ферми вследствие появления энергетической щели из условия

$$\frac{p_F}{m}(p - p_F) \Big|_{p-p_F=\Delta p/2} = \Delta \rightarrow \frac{\Delta p}{p_F} = \frac{\Delta}{\varepsilon_F} \sim 10^{-4}.$$

Аппроксимируем величину ε_p в интервале этого размытия

$$-\Delta \frac{p}{2} < p - p_F < \frac{\Delta p}{2}$$

параболой

$$\Delta + \frac{(p - p_F)^2}{2M},$$

полагая, что в точке

$$p - p_F = \frac{\Delta p}{2}$$

она касается прямой $(p - p_F)p_F/m$. Приравнивая их производные в этой точке, получаем

$$\frac{p - p_F}{M} \Big|_{p-p_F=\Delta p/2} = \frac{p_F}{m} \rightarrow \frac{M}{m} = \frac{1}{2} \frac{\Delta p}{p_F} \frac{\Delta}{2\varepsilon_F} \sim 10^{-4},$$

т. е. вследствие $M \sim m \cdot 10^{-4}$ эта парабола оказывается очень крутой.

Для средних чисел заполнения в области температур

$$\theta \ll \theta_0 \sim \Delta \ll \varepsilon_F$$

имеем

$$n_p = \frac{1}{\exp \left\{ \frac{\Delta}{\theta} + \frac{(p - p_F)^2}{2M\theta} \right\} + 1} \Big|_{\theta \ll \Delta} \cong e^{-\Delta/\theta} \cdot \exp \left\{ -\frac{(p - p_F)^2}{2M\theta} \right\},$$

откуда следует, что несмотря на существенную вырожденность электронного газа ($\theta/\epsilon_F \ll \theta_0/\epsilon_F \sim 10^{-4}$) в области температур $\theta \ll \Delta$ теряется тип статистики, а при $\theta = 0$, $n_p = 0$, т. е. возбужденных состояний с импульсами, лежащими в интервале Δp , нет совсем. Общее число возбужденных состояний определяется интегралом

$$N^* = \sum_{p=(\vec{p},\sigma)} n_p = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\Delta/\theta} \int_0^\infty \exp \left\{ -\frac{(p-p_F)^2}{2M\theta} \right\} 4\pi p^2 dp,$$

который вследствие $M \sim 10^{-4} m$ и, следовательно, сосредоточенности гауссовского распределения около значения $p = p_F$, превращается в одномерный интеграл Пуассона по переменной $P = (p - p_F)$, и мы получаем

$$N^* \cong \frac{8\pi V}{(2\pi\hbar)^3} p_F^2 \sqrt{2\pi M\theta} e^{-\Delta/\theta}.$$

Для внутренней энергии системы, полагая $\beta = 1/\theta$, имеем, выполняя несложное дифференцирование,

$$\mathcal{E} = \sum_p \left(\Delta + \frac{(p-p_F)^2}{2M} \right) n_p = -\frac{\partial N^*}{\partial \beta} = N^* \left(\Delta + \frac{1}{2}\theta \right) \cong N^* \Delta,$$

откуда следует выражение для теплоемкости системы

$$C_{VN} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} = N^* \left(\left(\frac{\Delta}{\theta} \right)^2 + \frac{\Delta}{\theta} + \frac{3}{4} \right) \cong \left(\frac{\Delta}{\theta} \right)^2 N^*.$$

Определяя удельную теплоемкость в расчете на одну частицу системы, получаем

$$\begin{aligned} c_{VN} &= \frac{8\pi V p_F^2}{N(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2\pi M\theta} e^{-\Delta/\theta} \left(\left(\frac{\Delta}{\theta} \right)^2 + \frac{\Delta}{\theta} + \frac{3}{4} \right) \cong \\ &\cong \frac{8\pi v p_F^2}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{2\pi M\theta} e^{-\Delta/\theta} \end{aligned}$$

в полном соответствии с экспериментальными данными и с результатом, следующим из микроскопической теории, которая будет рассмотрена нами в дальнейшем (см. далее § 4).

Заметим, что в проведенной предварительной оценке мы положили величину Δ независящей от температуры, что можно будет оправдать только в случае $\theta \ll \theta_0$.

Принимая по подсказке экспериментально обнаруживаемого температурного поведения теплоемкости гипотезу существования энергетической щели, мы автоматически решаем вопрос о сверхпроводимости электронного газа. В соответствии с критерием Ландау критическая скорость бездиссиационного движения системы, пропорциональная критической величине сверхпроводящего тока, определяется прямой

$$\left(\frac{\Delta}{p_F} \right) p = v_0 p,$$

касательной к «внутренней» параболе $\Delta + (p - p_F)^2/2M$, т. е.

$$v_0 \cong \frac{\Delta}{p_F} = \frac{1}{2} \frac{\Delta}{\epsilon_F} v_F = \frac{1}{2} \frac{\Delta p}{p_F} v_F = \frac{M}{m} v_F.$$

В случае $\theta = 0$, полагая $\Delta/\epsilon_F \sim \theta_0/\epsilon_F \sim 10^{-4}$, имеем $v_0 \sim 10^{-4} v_F$, где для реальных плотностей электронного газа $v_F = p_F/m \sim 2 \cdot 10^8$ см/сек и $v_0 \sim 200$ м/сек. С повышением температуры величина $\Delta(\theta)$ уменьшается до нуля при $\theta = \theta_0$, что соответственно сказывается на величине v_0 .

§ 5. Корреляционный радиус бозеподобных комплексов электронов в случае наличия в их спектре возбужденных состояний энергетической щели

Следуя навязчивой идеи сопоставить сверхпроводящее состояние электронного газа со сверхтекучестью гелия-II, мы должны предположить, что возбужденные системы электронов при $\theta = \theta_0$ становятся бозе-подобными. Так как ферми-частицы в бозевские превратить никак нельзя, то остается единственная возможность предположить, что в сверхпроводящей фазе вблизи ферми-поверхности формируются в качестве возбужденных состояний комплексы из четного числа ферми-частиц (по крайней мере из двух электронов) с общим нулевым (или целым) значением спина и скомпенсированным значением общего импульса (напомним еще раз, что

вблизи поверхности Ферми импульсы электронов имеют порядок $p_F = \hbar(3\pi^2 N/V)^{1/3}$, что соответствует их скорости $v_F = p_F/m = = \sqrt{2\varepsilon_F/m} \sim 2 \cdot 10^8$ см/сек). В этом предположении нет ничего сверхестественного, так например, бозе-частицы, составляющие жидкий гелий, совсем не элементарны, а представляют собой ядра He^4 , окруженные динамически связанными с ними парами электронов в ϑ -состоянии с общим нулевым спином, и весь этот комплекс, состоящий из шести ферми-частиц, фигурирует в теории бозе-газа как одна бозе-частица, состояние которой характеризуется общим значением импульса.

Предположение о существовании энергетической щели $\Delta \sim 10$ К позволяет оценить из самых общих соображений корреляционный размер этих бозе-подобных образований. Действительно, так как размытие по импульсу основного состояния ферми-системы составляет величину

$$\Delta p \cong \left(\frac{\Delta}{\varepsilon_F}\right) p_F,$$

то в соответствии с соотношением неопределенностей

$$R_{\text{kopp}} \sim \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta p} = \frac{\varepsilon_F}{\Delta} \left(\frac{V}{3\pi^2 N} \right)^{1/3} \cong \frac{1}{3} \frac{\varepsilon_F}{\Delta} a \cong 3 \cdot 10^4 \text{ \AA} = 3 \cdot 10^{-4} \text{ см},$$

что в 10^3 раз превышает период кристаллической решетки, и среднее расстояние между электронами $a = (V/N)^{1/3}$, т. е. эти бозе-подобные комплексы пространственно не изолированы друг от друга (т. е. не создают подобия отдельных частиц), а образуют единый конгломерат, так как внутри сферы радиуса R_{kopp} находится очень много перекрывающих друг друга подобных же квантовых образований. Напомним для сравнения, что томас-фермиевский радиус экранировки, представляющий корреляционный радиус кулоновского взаимодействия электронов в ионном «желе», имеет порядок только одного ангстрема (см. § 2 предыдущего раздела),

$$R_{TF} = \frac{1}{\kappa_{TF}} = \left(\frac{\varepsilon_F}{6\pi e^2 n} \right)^{1/2} \sim 10^{-8} \text{ см.}$$

§ 6. Условия существования квазисвязанного состояния электронов по Куперу

Самая простая из возможных бозе-подобных конструкций из ферми-частиц — это пара электронов с противоположными спинами и противоположно или почти противоположно направленными импульсами. Грубая оценка возможности возникновения связанного состояния таких фермионов была сделана Л. Купером в 1956 г., и эта работа послужила определяющим стимулом в формулировке теории БКШ.

Кстати отметим, что возбуждения нормального (несверхпроводящего) ферми-газа тоже как бы двухчастичны: вышедший из заполненной сферы Ферми электрон оставляет на своем прежнем месте в импульсном пространстве незанятое состояние, именуемое дыркой, которая на фоне заполненной ферми-сферы ведет себя как частица с противоположным спином и электрическим зарядом. Эти возбуждения, характерные для нормальных ферми-систем, не образуют коррелированных состояний и, кроме того, не несут электрического заряда. В интересующем нас случае предполагаемое возможным возбужденное состояние имеет совершенно иную структуру — это квазисвязанное (т. е. сильно коррелированное) состояние пары частиц (или пары дырок) над (или непосредственно под) сферой Ферми с противоположными спинами и импульсами, имитирующие «конденсатную» частицу эквивалентной бозе-системы. Ниже будет представлена несложная квантово-механическая оценка этой возможности в максимально упрощенном и достаточно грубою варианте, так как для наших целей она будет иметь характер лишь общих наводящих соображений, частично реализованных в последующих разработках теории.

В качестве исходного момента этого рассмотрения используем уравнение Шрёдингера $(H_0 + \Phi)\psi = E\psi$ для системы двух взаимодействующих друг с другом электронов с импульсами над сферой Ферми, энергия каждого из которых, отсчитываемая от уровня ϵ_F , равна $\epsilon_p = E_p - \epsilon_F \cong p_F(p - p_F)/m > 0$, и оценим в приближении слабого их взаимодействия, описываемого потенциалом $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, возможное значение энергии этого двухчастичного комплекса E , полагая пробную волновую функцию соответствующей «конденсатному» бозе-подобному состоянию $(\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow)$, образованному

в нулевом приближении из плоских волн $\varphi_p(\vec{r}) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{r}\right\}/\sqrt{V}$, т. е.

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \psi_p \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right\}.$$

Отметим, что спиновое состояние пары (\uparrow, \downarrow) фиксировано и исключает квантовую корреляцию ферми-частиц, связанную с учетом принципа Паули. Все остальные ферми-частицы системы не взаимодействуют с рассматриваемыми двумя возбужденными электронами, образуют заполненную сферу Ферми и тем обеспечивают им энергию, в нулевом приближении равную ϵ_p на каждую частицу.

Подставляя эту пробную функцию в уравнение Шредингера, умножая его почленно слева на $\psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, интегрируя по \vec{r}_1 и \vec{r}_2 , используя при этом переменные $\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и \vec{p} и учитывая, что

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V^2} \iint_{(V)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right\} \cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right\} = \\ &= \frac{1}{V} \int_{(V)} d\vec{r}_2 \frac{1}{V} \int d\vec{R} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}')\vec{R}\right\} = \\ &= \frac{1}{V} \int d\vec{R} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}')\vec{R}\right\} = \Delta(\vec{p} - \vec{p}') \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V^2} \iint_{(V)} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right\} \Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \times \\ & \times \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\right\} = \frac{1}{V} \int d\vec{R} \Phi(R) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\vec{p} - \vec{p}')\vec{R}\right\} = \\ &= \frac{1}{V} \nu(|\vec{p} - \vec{p}'|), \end{aligned}$$

где мы обозначили как всегда $\nu(|\vec{p} - \vec{p}'|)$ фурье-образ потенциала взаимодействия частиц $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, получаем, сократив почленно на амплитуду ψ_p , исходное уравнение Шредингера в импульсном

представлении

$$(E - 2\epsilon_p)\psi_p = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} \nu(|\vec{p} - \vec{p}'|) \psi_{p'}.$$

Как и исходное, это уравнение в общем виде, конечно, не решается. Чтобы преодолеть математические трудности дальнейшего исследования и получить оценку ожидаемого эффекта, Купер пошел на крайнюю меру: он предложил отказаться от исходного, имеющего локальный характер динамического взаимодействия частиц, описываемого потенциалом $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$, и аппроксимировать его фурье-образ $\nu(|\vec{p} - \vec{p}'|)$ мультиплекативной конструкцией

$$\nu(|\vec{p} - \vec{p}'|) \rightarrow -J\theta(\vec{p})\theta(\vec{p}'),$$

сосредоточенной и имеющей постоянную величину $-J$ в энергетическом слое ширины ω около уровня ϵ_F ,

$$\theta(\vec{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\epsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\epsilon_p| > \omega. \end{cases}$$

Несмотря на то, что использование моделей вертикальных потенциальных стенок не согласуется с общими квантовомеханическими представлениями, а также на связанную с принятием гипотезы о мультиплекативности фурье-образа потенциала взаимодействия частиц и потерю его локального характера, эта модель взаимодействия электронов стала основной в теории сверхпроводимости БКШ, позволившей с определенными потерями в деталях довести исследование проблемы до окончательных (включая численные) результатов.

В нашем случае после принятия предложенной выше модели взаимодействия уравнение Шрёдингера приобретает вид

$$(E - 2\epsilon_p)\psi_p = -J\theta(p) \sum_{\vec{p}'} \theta(\vec{p}') \psi_{p'},$$

позволяющий сразу же выписать его решение

$$\psi_p = -J\theta(\vec{p}) \frac{C}{E - 2\epsilon_p}, \quad \text{где} \quad C = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} \theta(\vec{p}') \psi_{p'}.$$

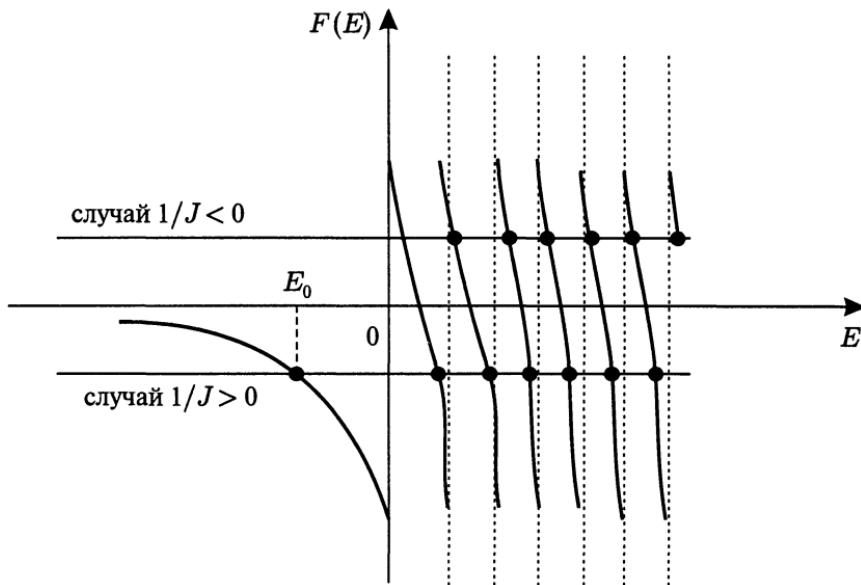


Рис. 5.2. Графическое исследование решений уравнения $F(E) = -1/J$. Проекции точек пересечения графиков $F(E)$ и $-1/J$ на полуось определяют собственные значения двухчастичных возбуждений вырожденного электронного газа типа $(\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow)$ над сферой Ферми. В случае $1/J > 0$ (случай притяжения) кроме квазинепрерывного спектра $E_p = 2\epsilon_p + O(J/V) > 0$ существует решение $E_0 < 0$, соответствующее связанному состоянию электронной пары

Подставляя решение для ψ_p в формулу для константы C , получаем, исключая тривиальное решение уравнения Шрёдингера (т. е. случай $C = 0$), уравнение для собственных значений E (мы учли, что $\theta^2(\vec{p}) = \theta(\vec{p})$)

$$-\frac{1}{J} = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \theta(\vec{p}) \frac{1}{E - 2\epsilon_p} = F(E).$$

Графическое исследование возможных решений этого уравнения (см. рис. 5.2) показывает, что отделившееся от непрерывного спектра квазичастичных возбуждений решение $E_0 < 0$, лежащее ниже уровня энергии заполненной сферы Ферми и соответствующее связанному состоянию электронной пары, возможно только

в случае $J > 0$, т. е. в случае наличия динамического притяжения электронов друг к другу.

Чтобы рассчитать это собственное значение E_0 , перейдем в последнем уравнении к интегрированию по импульсу \vec{p} . Взяв интеграл по углам и перейдя от интегрирования по модулю импульса к интегрированию по энергии $\epsilon = \epsilon_p$, ограниченной сверху величиной ω , получаем

$$-\frac{1}{J} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\omega \left(\frac{4\pi p^2 dp}{d\epsilon} \right) \frac{d\epsilon}{E_0 - 2\epsilon}.$$

Полагая, что интегрирование по ϵ производится в пределах относительно узкого слоя вблизи ферми-уровня ϵ_F , положим

$$\rho = J \frac{4\pi p^2}{\partial \epsilon_p / \partial p} \cong J \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} \frac{p_F^2}{(\partial \epsilon_p / \partial p)_{p=p_F}} = \text{const} > 0.$$

Тогда получающееся уравнение интегрируется по $x = 2\epsilon$ сразу,

$$\frac{1}{\rho} = \frac{1}{2} \int_0^{2\omega} \frac{dx}{x + |E_0|} = \frac{1}{2} \ln(x + |E_0|) \Big|_{x=0}^{x=2\omega} = \frac{1}{2} \ln \frac{|E_0| + 2\omega}{|E_0|},$$

откуда в предельном случае слабого притяжения электронов друг к другу, когда параметр этого взаимодействия $\rho \ll 1$, получаем

$$|E_0| = \frac{2\omega}{e^{2/\rho} - 1} \cong 2\omega e^{-2/\rho}.$$

Заметим теперь, что если воспользоваться аргументацией Ландау при выводе его критерия сверхтекучести и ввести новую систему отсчета импульсов всех частиц, $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - m\vec{v}$, то энергия интересующего нас связанного состояния уже в «движущемся» состоянии всей системы в обычной покоящейся системе отсчета будет равна

$$E_v = E_0 - (\vec{p}\vec{v}).$$

Если положить $\vec{v} = (v, 0, 0)$ и учесть, что в уравнении для энергии E интегрирование по импульсу осуществляется только в небольшой

окрестности около сферы Ферми, т. е. $|\vec{p}| \cong p_F$, то в случае движущейся системы в этом уравнении вместо величины $|E_0|$ будет стоять

$$|E_v| = |E_0| - p_F v,$$

и для критической скорости v_0 пары уже движущихся электронов, ниже которой сохраняется связанное их состояние, получим в соответствии с условием $|E_v| = 0$ соотношение

$$v_0 = \frac{|E_0|}{p_F} = \frac{1}{2} \frac{|E_0|}{\epsilon_F} v_F,$$

которое согласуется с полученным ранее на основе гипотезы о существовании энергетической щели выражением, если только положить в нем $|E_0| = \Delta$. Однако было бы наивно думать, что проведенное выше рассмотрение решает вопрос о величине критического тока и закрывает проблему сверхпроводимости. Прежде всего, эта проблема должна решаться не на элементарном квантовомеханическом уровне задачи двух тел с целым рядом облегчающих дополнительных предположений, а на уровне многочастичной квантовостатистической теории. И потом, что является главным, необходимо для понимания явления сверхпроводимости щелевого характера спектра возбужденных состояний в данном расчете, исходящему по своему построению из конструкции пробной функции $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, в принципе возникнуть не может. Ценность же проведенного предварительного исследования состоит в оценке энергии связи куперовской пары с характерной ее неаналитической зависимостью от характеризующей притяжение частиц константы связи J , при сколь угодно малой ее величине включающей фактор

$$e^{-\text{const}/J} \ll a_n J^n,$$

не поддающийся расчету по теории возмущений, оперирующей разложениями по степеням этого параметра.

Таким образом, следующим этапом предварительного рассмотрения проблемы сверхпроводимости становится проблема выявления того корреляционного механизма, имеющего характер притяжения, который необходим для образования устойчивых бозе-подобных конструкций типа пар $(\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow)$.

§ 7. Структура динамического взаимодействия электронов в металле

Из динамических факторов рассматриваемой нами модели электронного газа в металле мы имеем только два реально существующих механизма взаимодействия. Это — кулоновское взаимодействие электронов друг с другом,

$$H_c = \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p,$$

где $\nu(q) = 4\pi e^2 \hbar^2 / q^2$, и взаимодействие электронов с колебаниями ионной решетки (имеющее в принципе также электростатическую природу), которое в длинноволновом для фононов диапазоне достаточно убедительно аппроксимируется гамильтонианом Фрёлиха (см. § 4 гл. 1)

$$\begin{aligned} H_f &= \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_q f(q) (\rho_q b_q^+ + \rho_q^+ b_q) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2V}} \sum_{pq} f(q) (a_{p+q}^+ a_p b_q^+ + a_{p-q}^+ a_p b_q), \end{aligned}$$

где $f(q) = \gamma \sqrt{2\omega(q)/(mMc^2)}$, и $\omega(q) = cq$ — энергия фона. Так как нам необходимо выявить динамическую структуру взаимодействия только в области размытия сферы Ферми, характеризуемой величиной

$$\Delta p \sim 10^{-4} p_F = 10^{-4} \hbar \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \cong 3 \cdot 10^{-4} \frac{\hbar}{a},$$

а максимальная длина волны фона, соответствующая его импульсу q_{\min} не превышающего область размытия $\Delta p \sim q_{\min}$, имеет порядок $\lambda_{\max} = \hbar/q_{\min} \sim 0,3 \cdot 10^4 a \gg a$, то длинноволновая аппроксимация взаимодействия электронов с колебаниями кристаллической решетки, собственно только и учитываемая в фрелиховском гамильтониане вполне оправдана для нашего дальнейшего рассмотрения.

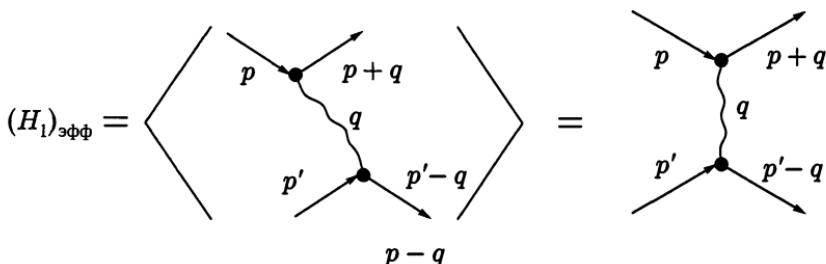


Рис. 5.3. Схема введения индуцированных колебаниями кристаллической решетки прямого эффективного взаимодействия электронов

На основе учета электрон-фононного взаимодействия Н. Н. Боголюбов в 1958 г. построил теорию, оправдавшую существование энергетической щели, обеспечивающей явление сверхпроводимости, и ее температурное поведение вплоть до ее исчезновения в точке фазового перехода электронного газа в нормальное состояние. Так как индуцируемое фононами взаимодействие электронов, являющееся следствием испускания фона на одним из них и его поглощения другим, появляется во втором порядке теории возмущений по константе γ , входящей в амплитуду $f(q)$, то характер этого взаимодействия после усреднения по фононному полю оказывается типа притяжения, что и обеспечивает достаточную корреляцию электронных пар $(\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow)$ для их устойчивого состояния при температурах $\theta < \theta_0$.

Однако, сохранив всю идеологию, можно несколько сэкономить в формальном изложении теории, и в существенной для нас области размытия сферы Ферми $\Delta p \ll p_F$ исключить фононное поле на предварительном этапе исследования, т. е. ввести передаваемое длинноволновыми колебаниями решетки эффективное заранее усредненное по состояниям сильно «разреженного» низкотемпературного газа фононов прямое взаимодействие электронов по схеме, изображенной на рис. 5.3, исключив тем самым эффекты «запаздывания» передачи импульса q от электрона к электрону и сводя это индуцированное фононами взаимодействие к мгновенному.

Чтобы реализовать эту схему, представим уравнение Шрёдингера в виде его формального решения

$$(E - H_0)\psi = H_f\psi \longrightarrow \psi = \frac{1}{E - H_0}H_f\psi$$

и подставим это решение в правую часть исходного уравнения,

$$(E - H_0)\psi = H_f \frac{1}{E - H_0} H_f \psi = \tilde{H}_1 \psi,$$

образовав тем самым необходимый нам второй порядок по взаимодействию H_f уже в «нулевом» приближении. Воспользовавшись формальной теорией возмущений, выделим этот второй порядок в чистом виде,

$$\tilde{H}_1 = H_f \frac{P}{E_0 - H_0} H_f + \dots \cong H_f \frac{P}{E_0 - H_0} H_f,$$

где E_0 — энергия основного состояния идеальной системы H_0 (т. е. заполненной сферы Ферми), и усредним это выражение по фононным состояниям, учитывая, что в рассматриваемой нами области температур $\theta \cong 0$ плотность этих состояний $n_q \cdot 4\pi q^2/(2\pi\hbar)^3$ чрезвычайно мала, и поэтому можно принять аппроксимацию

$$\langle b_{q'} b_q^+ \rangle = \overline{b_{q'} b_q} = \Delta(q - q') + \overline{b_q^+ b_{q'}} = \Delta(q - q')(1 + n_q) \cong \Delta(q - q').$$

Тогда будем иметь (условие $\vec{q} \neq 0$ возникает в результате учета операции P , запрещающей появление нуля в знаменателе)

$$\begin{aligned} \langle \tilde{H}_1 \rangle &= \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} f^2(q) \frac{a_{p'-q}^+ a_{p'} \overline{b_q a_{p+q}^+ a_p b_q^+}}{-(E_{p+q} - E_p + \omega(q))} = \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} f^2(q) \frac{a_{p'-q}^+ a_{p'} a_{p+q}^+ a_p}{-(E_{p+q} - E_p + \omega(q))}. \end{aligned}$$

Располагая ферми-операторы в привычном для оператора H_1 «нормальном» порядке и относя возникшие в результате перестановок этих операторов слагаемые, включающие комбинацию $a_p^+ a_p$ к нулевому гамильтониану (как бы перенормировка исходной величины E_p), получаем для эффективного взаимодействия электронов в кристалле

$$(\tilde{H}_1)_{\text{эфф}} = \frac{1}{2V} \sum_{p, p', q \neq 0} \left[-\frac{f^2(q)}{E_{p+q} - E_p + \omega(q)} \right] a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p.$$

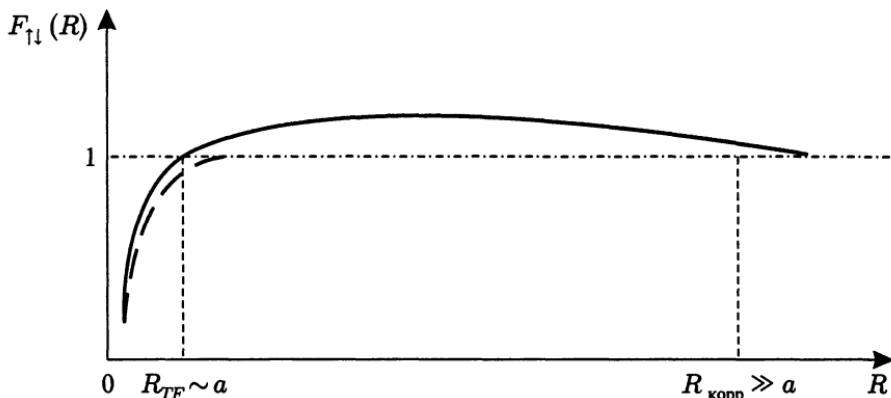


Рис. 5.4. Характер зависимости парной корреляционной функции электронов $F_{\uparrow\downarrow}(R)$ от расстояния между ними с учетом электрон-фононного и кулоновского взаимодействий

Так как по самому смыслу проведенной операции по выделению второго порядка по H_f величины $E_{p+q} > \epsilon_F$, $E_p < \epsilon_F$, т. е. для всех значений $q \neq 0$ знаменатель $E_{p+q} - E_p + \omega(q) > 0$, то выражение в квадратных скобках всегда меньше нуля, что определяет характер индуцированного фононами взаимодействия электронов как притяжение. Таким образом, корреляция электронов определяется помимо принципа Паули двумя динамическими механизмами: это, с одной стороны, кулоновское отталкивание, имеющее эффективный радиус порядка $R_{TF} = 1/\kappa_{TF} \sim a$, измеряемый несколькими ангстремами, и индуцированное колебаниями решетки притяжение, радиус действия которого соизмерим с длиной волнами тех колебаний ионной решетки, которые это притяжение создают, т. е. в соответствии с приведенными ранее оценками радиус этого взаимодействия по крайней мере в 10^3 раз больше межатомного расстояния $a = \sqrt[3]{V/N}$. В целом же взаимодействие электронов друг с другом в интересующей нас области вместе с кулоновским имеет вид, схематически представленный на рис. 5.4.

Если попытаться истолковать полученный специфически квантовый эффект с помощью классических представлений и наглядных картинок (т. е. по существу, с помощью обиходных макроскопических понятий — стойкое заблуждение, исходящее в известной мере от самих основателей квантовой теории), то выявленное выше

индуцированное фононами пространственно протяженное «притяжение» электронов (в обычном понимании это взаимодействие нелокально и интерпретируется с помощью эффективного потенциала $\tilde{\Phi}(R)$ весьма условно) может не только послужить основой для образования куперовских пар, но и в силу именно своего дальнодействия подавить влияние кулоновского отталкивания, эффективно действующего на расстояниях $R < R_{TF}$, и рассеяния на создающих остаточное сопротивление примесях и дислокациях, также имеющих радиус действия порядка периода решетки $a = \sqrt[3]{V/N}$ (авторы теории БКШ не учитывая этих обстоятельств полагали, что для подавления кулоновского отталкивания достаточно того, чтобы в среднем $\langle U_{\text{кул}} + U_{\text{эл-фон}} \rangle < 0$; этот чисто условный и откровенно качественный критерий, обеспечивающий $J > 0$, необходимо будет уточнить в дальнейшем).

В результате проведенного в этом параграфе предварительного рассмотрения проблемы сверхпроводимости мы можем в качестве исходной микроскопической модели системы использовать оператор Гамильтона $\mathcal{H} = H - \mu N$ вида

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{p}, s} \epsilon_p a_{ps}^+ a_{ps} + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}, s; \vec{p}', s'; \vec{q} \neq 0} \nu(\vec{p} + \vec{q}, \vec{p}, \vec{q}) a_{p+qs}^+ a_{p'-qs}^+ a_{p's'} a_{ps},$$

Глава 6

Электронный газ с прямым передаваемым фононами взаимодействием

§ 1. Выделение части гамильтониана, ответственной за формирование куперовских состояний

Предварительное рассмотрение проблемы сверхпроводимости, проведенное в предыдущем параграфе, со всей определенностью указывает на то, что это явление находит свое естественное объяснение в случае, когда в системе электронного газа возбужденные состояния отделены от основного энергетической щелью. Это в свою очередь непосредственно связано с существенной перестройкой как основного, так и возбужденных состояний системы: в очень узком интервале импульсов около границы Ферми, величина которого согласована с размером энергетической щели, оказывается существенным механизм образования коррелированных состояний бозе-подобных электронных пар ($\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow$) (в остальной области значений импульса ферми-газ остается по-прежнему идеальным), и возбуждения электронного газа в связи с тем, что энергетические состояния этих пар в области Δp лежат ниже их энергетического уровня, перестают быть квазичастичными (т. е. бесщелевыми $(p - p_F)p_F/m$).

Таким образом, возникающая перед теоретическим рассмотрением первоочередная проблема заключается в обосновании на основе динамического принципа и гиббсовской статистики (в квантовом ее варианте) этой перестройки микроскопических состояний, приводящей к возникновению щелевого энергетического спектра в системе электронов с индуцированным фононами взаимодействием. Поэтому в качестве первого шага начинаяющегося исследования целесообразно выделить в полном гамильтониане системы именно ту часть \mathcal{H}' , которая может способствовать возникновению указанных

выше коррелированных квазисвязанных пар электронов с противоположно и почти противоположно направленными импульсами,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}' &= \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p (a_{\vec{p}\uparrow}^+ a_{\vec{p}\uparrow} + a_{\vec{p}\downarrow}^+ a_{\vec{p}\downarrow}) - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') a_{-\vec{p}\downarrow}^+ a_{\vec{p}\uparrow}^+ a_{\vec{p}'\uparrow} a_{-\vec{p}'\downarrow}, \\ \mathcal{H}'' &= \mathcal{H} - \mathcal{H}' = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}', \vec{q} \neq 0} J(\vec{p}, \vec{p}', \vec{q}) a_{-\vec{p}+\vec{q}\downarrow}^+ a_{\vec{p}\uparrow}^+ a_{\vec{p}'\uparrow} a_{-\vec{p}'+\vec{q}\downarrow} - \\ &\quad - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') (a_{-\vec{p}\uparrow}^+ a_{\vec{p}\uparrow}^+ a_{\vec{p}'\uparrow} a_{-\vec{p}'\uparrow} + a_{-\vec{p}\downarrow}^+ a_{\vec{p}\downarrow}^+ a_{\vec{p}'\downarrow} a_{-\vec{p}'\downarrow}) - \\ &\quad - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}', \vec{q} \neq 0} J(\vec{p}, \vec{p}', \vec{q}) (a_{-\vec{p}+\vec{q}\uparrow}^+ a_{\vec{p}\uparrow}^+ a_{\vec{p}'\uparrow} a_{-\vec{p}'+\vec{q}\uparrow} + \\ &\quad + a_{-\vec{p}+\vec{q}\downarrow}^+ a_{\vec{p}\downarrow}^+ a_{\vec{p}'\downarrow} a_{-\vec{p}'+\vec{q}\downarrow}),\end{aligned}$$

где $J(\vec{p}, \vec{p}', \vec{q}) = -\nu(|-\vec{p}+\vec{q}|, |\vec{p}'|, |\vec{p}'-\vec{p}+\vec{q}|)$. В соответствии с проведенным в § 1 предварительным рассмотрением будем полагать, что эффективное взаимодействие электронов с противоположно направленными импульсами и спинами имеет характер притяжения, т. е. $J(\vec{p}, \vec{p}') = -\nu(|-\vec{p}|, |\vec{p}'|, |\vec{p}'-\vec{p}|) > 0$. Действительно, если учесть только фрёлиховское электрон-фононное взаимодействие и структуру $f^2(q) \sim \omega(q) = cq$, то ввиду $p_F/mc \sim 10^4$, а также $\vec{p} + \vec{p}' \cong 2p_F$ и $|\vec{p} - \vec{p}'| \ll p_F$ имеем

$$J(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{2\gamma^2}{nMc^2} \frac{c|\vec{p} - \vec{p}'|}{E_p - E_{p'} + c|\vec{p} - \vec{p}'|} \cong \frac{\gamma^2 m}{nMcp_F} > 0.$$

Конечно же, этот гамильтониан \mathcal{H} является уже модельным: в нем не учтены те части, которые при обработке их по стандартной схеме теории возмущений приводят к блоховскому результату для проводимости электронного газа (см. § 4 первой части) или к поправкам на кулоновское взаимодействие в бесщелевом состоянии системы (т. е. для нормального электронного газа в металлах).

Жертвуя учетом этих особенностей неидеального электронного газа и интересуясь более тонкими эффектами, ожидаемыми в узкой области импульсов $\Delta p = (\Delta/\varepsilon_F)p_F \sim 10^{-4}p_F$, в которой нормальная компонента ассоциируется с идеальным ферми-газом

(самое большое с поправкой на эффективную массу) с энергией возбуждений над сферой Ферми $\epsilon_p = |\vec{p} - \vec{p}_F|p_F/m$, мы сохранили в гамильтониане \mathcal{H} те члены, которые при обработке их по теории возмущений со стандартным (т. е. бесщелевым) видом нулевого гамильтониана дают нулевые вклады (или вклады, имеющие нулевой статистический порядок по числу $N^0 = 1$), так как ожидаемые от их учета сдвиги в энергии основного состояния к свободной энергии системы должны быть слабее любой степени константы связи, входящей в функцию v , и предварительно иметь неаналитическую структуру типа $\exp\{-1/\rho\}$. Заметим, наконец, что именно часть гамильтониана \mathcal{H}' являлась основой теории БКШ, в которой величина условного взаимодействия $J(\vec{p}, \vec{p}')$ полагалась некоторой константе, сосредоточенной вблизи ферми-уровня (этот модель взаимодействия уже фигурировала у нас при рассмотрении эффекта Купера).

§ 2. ($u-v$)-преобразование Боголюбова ферми-операторов рассматриваемой модели

С целью реального выявления корреляции электронных состояний (\vec{p}, \uparrow) и $(-\vec{p}, \downarrow)$, возникающей вследствие установленного выше модельного взаимодействия частиц в области вблизи ферми-сферы, Н. Н. Боголюбов использовал прием, с успехом оправдавший себя в его работе 1946 года, посвященной выявлению особенностей слабо-неидеального вырожденного бозе-газа. Эта процедура, заключающаяся во введении новых ферми-операторов α_p и β_p и перепутывающая на кинематическом уровне исходные плосковолновые состояния (\vec{p}, \uparrow) и $(-\vec{p}, \downarrow)$, в ферми-случае вследствие наличия спинового индекса выглядит несколько сложнее,

$$\begin{aligned} a_{\vec{p}\uparrow} &= u_p \alpha_p + v_p \beta_p^+; & a_{\vec{p}\uparrow}^+ &= u_p \alpha_p^+ + v_p \beta_p; \\ a_{-\vec{p}\downarrow} &= u_p \beta_p - v_p \alpha_p^+; & a_{-\vec{p}\downarrow}^+ &= u_p \beta_p^+ - v_p \alpha_p. \end{aligned}$$

Связь коэффициентов этого $(u-v)$ -преобразования, являющаяся условием его каноничности

$$u_p^2 + v_p^2 = 1,$$

обеспечивает выполнение всех стандартных для ферми-операторов перестановочных соотношений,

$$[a_{\vec{p}\uparrow}^+, a_{\vec{p}'\uparrow}]_+ = [a_{\vec{p}\downarrow}^+, a_{\vec{p}'\downarrow}]_+ = \Delta(\vec{p} - \vec{p}'), \quad [a_{\vec{p}\uparrow}^{(+)}, a_{-\vec{p}\downarrow}]_+ = 0,$$

а обратное преобразование

$$\alpha_p = u_p a_{\vec{p}\uparrow} - v_p a_{-\vec{p}\downarrow}^+, \quad \beta_p = u_p a_{-\vec{p}\downarrow} + v_p a_{\vec{p}\uparrow}^+$$

показывает, что новые амплитуды перепутывают именно состояния $(\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow)$ исходной модели.

Это преобразование фактически означает выбор нового основного состояния системы, на фоне которого учет уже преобразованной части \mathcal{H}'_1 , гамильтониана \mathcal{H}' не будет приводить к появлению тривиальных вкладов. Новые операторы α_p и β_p действуют уже в другом пространстве функций, используемом при введении представления вторичного квантования (см. прил. II), каждый базисный вектор которого представляет суперпозицию прежних состояний $(\vec{p}, s; -\vec{p}, -s)$, построенных в соответствии с процедурой их введения на основе представления о плоских волнах $\varphi_{\vec{p},s}(\vec{r})$. Коэффициенты u_p и v_p считаются действительными (они будут определены несколько позже), вместо них можно ввести один параметр (одну функцию) преобразования, положив

$$u_p = \cos \varphi_p \quad \text{и} \quad v_p = \sin \varphi_p \quad (u_p^2 + v_p^2 = 1),$$

и тогда $(u - v)$ -преобразование представится как бы в виде поворота орт гильбертова пространства на некоторый «угол» φ_p .

Случай, когда один из коэффициентов преобразования равен нулю, например,

$$\begin{aligned} u_p &= 1, \quad v_p = 0 \quad \text{в случае} \quad E_p > \varepsilon_F, \\ u_p &= 0, \quad v_p = 1 \quad \text{в случае} \quad E_p < \varepsilon_F, \end{aligned}$$

соответствует тривиальному преобразованию типа переобозначения операторов, когда α_p^+ и β_p^+ представляют операторы рождения ферми-частиц в состояниях (\vec{p}, \uparrow) и $(-\vec{p}, \downarrow)$ вне сферы Ферми ($p > p_F$), и рождения дырок $(-\vec{p}, \downarrow)$ и (\vec{p}, \uparrow) внутри заполненной сферы Ферми ($p < p_F$).

Преобразовывая отдельные части оператора \mathcal{H} к новым ферми-операторам, имеем,

$$\begin{aligned}\mathcal{H}'_0 &= \sum_{\vec{p}, s} \varepsilon_p a_{\vec{p}s}^+ a_{\vec{p}s} = \\ &= \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p \left[(u_p^2 - v_p^2) (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + 2u_p v_p (\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) + 2v_p^2 \right],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\mathcal{H}'_1 &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') a_{-\vec{p}\downarrow}^+ a_{\vec{p}'\uparrow}^+ a_{\vec{p}'\uparrow} a_{-\vec{p}'\downarrow} = \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') [u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^2 \alpha_p \beta_p + \\ &\quad + u_p v_p (\beta_p^+ \beta_p + \alpha_p^+ \alpha_p) - u_p v_p] \times \\ &\quad \times [u_{p'}^2 \alpha_{p'} \beta_{p'} - v_{p'}^2 \beta_{p'}^+ \alpha_{p'}^+ + u_{p'} v_{p'} (\alpha_{p'}^+ \alpha_{p'} + \beta_{p'}^+ \beta_{p'}) - u_{p'} v_{p'}].\end{aligned}$$

Введем оператор

$$\Lambda_p^+ = u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^2 \alpha_p \beta_p + u_p v_p (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p)$$

и обозначим

$$C(p) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}' \neq \vec{p}} J(\vec{p}, \vec{p}') u_{p'} v_{p'}.$$

Тогда, учитывая, что $J(\vec{p}, \vec{p}') = J(\vec{p}', \vec{p})$, получаем

$$\begin{aligned}\mathcal{H}'_1 &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') u_p v_p u_{p'} v_{p'} + \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') u_p v_p \times \\ &\quad \times \left[(u_{p'}^2 - v_{p'}^2) (\alpha_{p'} \beta_{p'} + \beta_{p'}^+ \alpha_{p'}^+) + 2u_{p'} v_{p'} (\alpha_{p'}^+ \alpha_{p'} + \beta_{p'}^+ \beta_{p'}) \right] - \\ &\quad - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'} = \\ &= - \sum_{\vec{p}} u_p v_p C(p) + \sum_{\vec{p}} C(p) \left[2u_p v_p (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) - \right.\end{aligned}$$

$$-\left(u_p^2 - v_p^2\right)\left(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p\right)\right] - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'}.$$

Если ввести обозначения

$$\begin{aligned} U &= \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p 2v_p^2 - \sum_{\vec{p}} C(p) u_p v_p, \\ A(p) &= \varepsilon_p (u_p^2 - v_p^2) + 2u_p v_p C(p), \\ B(p) &= \varepsilon_p 2u_p v_p - (u_p^2 - v_p^2) C(p), \end{aligned}$$

то гамильтониан исследуемой системы $\mathcal{H} = \mathcal{H}' + \mathcal{H}''$ запишется в виде

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= U + \sum_{\vec{p}} \left[A(p)(\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + B(p)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) \right] - \\ &\quad - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'}, \\ \mathcal{H}'' &= \mathcal{H} - \mathcal{H}' = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{1}{2} (\Lambda_p'^+ \Lambda_{p'}' + \Lambda_p''+ \Lambda_{p'}'') - \\ &\quad - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}', \vec{q} \neq 0} J(\vec{p}, \vec{p}', \vec{q}) \left[\Lambda_{pq}^+ \Lambda_{p'q} + \frac{1}{2} (\Lambda_{pq}'^+ \Lambda_{p'q}' + \Lambda_{pq}''+ \Lambda_{p'q}'') \right], \end{aligned}$$

где операторы $\Lambda_p'^+$ и $\Lambda_p''+$ представляют комплексы $(-\vec{p}, \uparrow; \vec{p}, \uparrow)$ и $(-\vec{p}, \downarrow; \vec{p}, \downarrow)$, а «сдвинутые» на величину \vec{q} операторы Λ_{pq}^+ , $\Lambda_{pq}'^+$ и $\Lambda_{pq}''^+$ — комплексы $(-\vec{p} + \vec{q}, \downarrow; \vec{p}, \uparrow)$, $(-\vec{p} + \vec{q}, \uparrow; \vec{p}, \uparrow)$ и $(-\vec{p} + \vec{q}, \downarrow; \vec{p}, \downarrow)$ соответственно имеют вид

$$\begin{aligned} \Lambda_p'^+ &= u_p^2 \alpha_p^+ \alpha_p^+ + u_p v_p (\alpha_{-p}^+ \beta_p + \beta_{-p} \alpha_p^+) + v_p^2 \beta_{-p} \beta_p, \\ \Lambda_p''+ &= u_p^2 \beta_p^+ \beta_{-p}^+ - u_p v_p (\beta_p^+ \alpha_{-p} + \alpha_p \beta_{-p}^+) + v_p^2 \alpha_p \alpha_{-p}, \\ \Lambda_{pq}^+ &= u_{p-q} u_p \beta_{p-q}^+ \alpha_p^+ - v_{p-q} v_p \alpha_{p-q} \beta_p + u_{p-q} v_p \beta_{p-q}^+ \beta_p - \\ &\quad - v_{p-q} u_p \alpha_{p-q} \alpha_p^+, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Lambda_{pq}'^+ &= u_{p-q} u_p \alpha_{-p+q}^+ \alpha_p^+ + v_{p-q} v_p \beta_{-p+q} \beta_p + u_{p-q} v_p \alpha_{-p+q}^+ \beta_p + \\ &\quad + v_{p-q} u_p \beta_{-p+q} \alpha_p^+, \end{aligned}$$

$$\Lambda_{pq}^{''+} = u_{p-q}u_p\beta_{p-q}^+\beta_{-p}^+ + v_{p-q}v_p\alpha_{p-q}\alpha_{-p} - u_{p-q}v_p\beta_{p-q}^+\alpha_{-p} - \\ - v_{p-q}u_p\alpha_{p-q}\beta_{-p}^+,$$

и в отличие от введенного ранее оператора Λ_p не содержат в силу условия $\vec{p} \neq \vec{p}'$ и $\vec{q} \neq 0$ диагональных конструкций типа $\alpha_p^+\alpha_p$ и $\beta_p^+\beta_p$. Это означает, что при вычислении средних значений по состояниям «поворнутой» идеальной системы, гамильтониан которой \widetilde{H}_0 содержит диагональные комбинации новых операторов $\alpha_p^+\alpha_p$ и $\beta_p^+\beta_p$, средние от произведений операторов Λ_p с $\vec{p} \neq \vec{p}'$ распадаются на произведения средних,

$$\langle \Lambda_p^+ \Lambda_{p'} \rangle_0 = \langle \Lambda_p^+ \rangle_0 \cdot \langle \Lambda_{p'} \rangle_0,$$

а средние от остальных операторов Λ в результате такого усреднения выпадают из рассмотрения.

Наша дальнейшая цель состоит теперь в выработке наиболее целесообразной процедуры расчета коэффициентов $(u - v)$ -преобразования. Из известных эквивалентных методик мы остановимся на той, достоинства которой отмечены в конце п. 1, § 1 этой 2-й части и которая связана с использованием статистической вариационной теоремы Боголюбова (см. прил. IV), оценивающей свободную энергию системы $\mathcal{F} = -\theta \ln Z$ сверху,

$$\mathcal{F} = -\theta \ln \text{Sp } e^{-(H_0 + H_1)/\theta} \leq \Psi = -\theta \ln \text{Sp } e^{-H_0/\theta} + \frac{\text{Sp } \{H_1 e^{-H_0/\theta}\}}{\text{Sp } e^{-H_0/\theta}}.$$

Чтобы получаемая оценка была бы не только символической, но и эффективной, необходимо прежде всего так выбрать операторную структуру H_0 , чтобы расчеты величин $\text{Sp } e^{-H_0/\theta}$ и средних значений $\langle (H - H_0) \rangle_0 = \langle H_1 \rangle_0$ не превращались бы в невыполнимую с математической точки зрения проблему, а осуществлялись бы точно. Далее, так как в разделении полного гамильтониана H исследуемой системы на части H_0 и H_1 может участвовать некоторое число разумно вводимых параметров (в нашем случае — это, конечно, коэффициенты $(u - v)$ -преобразования), то наилучшая оценка свободной энергии получится тогда, когда эти параметры будут определяться из условия минимума верхней ее границы, причем, условие $\Psi(\theta, V, N; \lambda) = \min$ определит те значения параметров

$\lambda = \lambda(\theta, V, N)$, которые с термодинамической точки зрения являются наилучшими.

§ 3. Определение коэффициентов $(u-v)$ -преобразования и оценка свободной энергии системы в соответствии с вариационной теоремой Боголюбова

В соответствии со сделанным выше программным указанием выберем в качестве оператора \mathcal{H}_0 ту часть полного гамильтониана \mathcal{H} , которая допускает точное решение, т. е. квадратичную форму по новым операторам $(\alpha - \beta)$, входящим в гамильтониан \mathcal{H} ,

$$\mathcal{H}'_0 = U' + \sum_{\vec{p}} \left[A(p)(\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + B(p)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) \right]$$

(форму неоператорной части U' , включающей введенное ранее U , уточним несколько позже). Отметим сразу, что импульсы \vec{p} в квадратичной форме оператора \mathcal{H}_0 не перепутаны, что значительно облегчает проблему его почленной диагонализации. Используем для этой цели аналог проведенного нами $(u-v)$ -преобразования — дополнительное $(\lambda - \mu)$ -преобразование от операторов α_p и β_p к новым ферми-операторам a_p и b_p ,

$$\begin{aligned} \alpha_p &= \lambda_p a_p - \mu_p b_p^+; & \alpha_p^+ &= \lambda_p a_p^+ - \mu_p b_p; & \lambda_p^2 + \mu_p^2 &= 1. \\ \beta_p &= \lambda_p b_p + \mu_p a_p^+; & \beta_p^+ &= \lambda_p b_p^+ + \mu_p a_p \end{aligned}$$

Тогда, выписав входящие в \mathcal{H}_0 операторные комбинации,

$$\left. \begin{aligned} \alpha_p^+ \alpha_p &= \lambda_p^2 a_p^+ a_p - \mu_p^2 b_p^+ b_p - \lambda_p \mu_p (a_p^+ b_p^+ + b_p a_p) + \mu_p^2 \\ \beta_p^+ \beta_p &= \lambda_p^2 b_p^+ b_p - \mu_p^2 a_p^+ a_p + \lambda_p \mu_p (b_p^+ a_p^+ + a_p b_p) + \mu_p^2 \\ \alpha_p^+ \beta_p^+ &= \lambda_p^2 a_p^+ b_p^+ + \lambda_p \mu_p (b_p^+ b_p + a_p^+ a_p) - \mu_p^2 b_p a_p - \lambda_p \mu_p \\ \beta_p \alpha_p &= \lambda_p^2 b_p a_p + \lambda_p \mu_p (b_p^+ b_p + a_p^+ a_p) - \mu_p^2 a_p^+ b_p^+ - \lambda_p \mu_p \end{aligned} \right\} \times \begin{aligned} A(p) \\ B(p) \end{aligned} \Bigg\} +$$

и потребовав, чтобы коэффициенты при недиагональной комбинации $(a_p^+ b_p^+ + b_p a_p)$ в операторе \mathcal{H}_0 для всех \vec{p} равнялись бы нулю,

получаем

$$\mathcal{H}_0 = U' + \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p),$$

где новый эффективный спектр возбужденных состояний

$$\varepsilon(p) = A(p)(\lambda_p^2 - \mu_p^2) + B(p) \cdot 2\lambda_p \mu_p$$

и энергия основного состояния

$$U' = U + \sum_{\vec{p}} [A(p)2\mu_p^2 - B(p) \cdot 2\lambda_p \mu_p]$$

определяются написанными выше выражениями при выполнении условия

$$0 = A(p) \cdot 2\lambda_p \mu_p - B(p)(\lambda_p^2 - \mu_p^2),$$

являющегося уравнением для определения коэффициентов λ_p и μ_p . Действительно, опуская в написании общий индекс \vec{p} , имеем

$$\begin{cases} 2\lambda\mu = \frac{B}{A}(\lambda^2 - \mu^2) \\ \lambda^2 + \mu^2 = 1 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} (\lambda + \mu)^2 = 1 + \frac{B}{A}(\lambda^2 - \mu^2), \\ (\lambda - \mu)^2 = 1 - \frac{B}{A}(\lambda^2 - \mu^2), \end{cases}$$

откуда, после перемножения левых и правых частей, следует

$$(\lambda^2 - \mu^2)^2 = 1 - \frac{B^2}{A^2}(\lambda^2 - \mu^2)^2,$$

и мы получаем

$$\begin{aligned} \lambda^2 - \mu^2 &= \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}}; & 2\lambda\mu &= \frac{B}{\sqrt{A^2 + B^2}}; \\ \lambda^2 &= 1 - \mu^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{A}{\sqrt{A^2 + B^2}} \right). \end{aligned}$$

Подставляя эти выражения в формулы для $\varepsilon(p)$ и U' , имеем

$$\varepsilon(p) = \frac{A^2(p)}{\sqrt{A^2(p) + B^2(p)}} + \frac{B^2(p)}{\sqrt{A^2(p) + B^2(p)}} = \sqrt{A^2(p) + B^2(p)},$$

$$\begin{aligned} U' &= U + \sum_{\vec{p}} \left(A(\vec{p}) \left(1 - \frac{A(\vec{p})}{\sqrt{A^2(\vec{p}) + B^2(\vec{p})}} \right) - \frac{B^2(\vec{p})}{\sqrt{A^2(\vec{p}) + B^2(\vec{p})}} \right) = \\ &= U + \sum_{\vec{p}} \left(A(\vec{p}) - \sqrt{A^2(\vec{p}) + B^2(\vec{p})} \right), \end{aligned}$$

или окончательно, учитывая введенные ранее выражения для $A(\vec{p})$, $B(\vec{p})$ и U и выполняя примитивные арифметические действия:

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{p}) &= \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(\vec{p})}, \\ U' &= \sum_{\vec{p}} (\varepsilon_p + u_p v_p C(\vec{p}) - \varepsilon(\vec{p})), \end{aligned}$$

где по-прежнему

$$C(\vec{p}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') u_{p'} v_{p'}.$$

Несмотря на то, что коэффициенты u_p и v_p пока еще не определены, полученный результат достаточно перспективен. Если $C(p_F) = 0$ (т. е. $v_p = 0$, $u_p = 1$ или наоборот), то

$$\varepsilon(\vec{p}) = \varepsilon_p = \frac{p^2 - p_F^2}{2m}, \quad U' = 0,$$

и реализуется случай нормальной ферми-системы со спектром возбужденных состояний, изображенным тонкими линиями на рис. 5.1. Если же взаимодействие $J(\vec{p}, \vec{p}')$ обеспечивает перепутывание электронных состояний (\vec{p}, s) и $(-\vec{p}, -s)$ в области, примыкающей к сфере Ферми, то $C(p_F) \neq 0$, и в спектре $\varepsilon(\vec{p})$ появляется энергетическая щель $\varepsilon(p_F) = |C(p_F)| = \Delta$ (толстые линии в области Δp на том же рисунке), обеспечивающая неразрушающееся токовое состояние электронного газа, т. е. его сверхпроводимость: так как электрон из заполненной сферы Ферми с импульсом $|\vec{p}| = p_F - \delta \cong p_F$ (самый невыгодный случай), двигаясь со значительной (но меньшей критической) $v_0 = C(p_F)/p_F \sim 10^{-4} p_F/m$ скоростью \vec{v} и не преодолевая энергетического барьера $2C(p_F)$

(т. е. не переходя во внешность сферы Ферми), приобретает положительную энергию

$$2C(p_F) > \varepsilon(\vec{p}_F + m\vec{v}) \cong \varepsilon(p_F) + \left(m\vec{v} \cdot \frac{\partial \varepsilon(p_F)}{\partial \vec{p}_F} \right) \cong C(p_F) \pm vp_F > 0,$$

то энергия таких «возбужденных» состояний двигающихся электронов, не переходящих во внешность двигающейся сферы Ферми, будет тоже положительной, т. е. токовое состояние системы будет устойчивым.

Перейдем теперь к расчету средних значений

$$\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}'_0 \rangle = \frac{\text{Sp} \{ (\mathcal{H} - \mathcal{H}'_0) e^{-\mathcal{H}'_0/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}'_0/\theta}}.$$

Рассмотрим сначала среднее $\langle \Lambda_p'^+ \Lambda_{p'}'^+ \rangle$. Единственные входящие в эту часть комбинации, которые при условии $\vec{p} \neq \vec{p}'$ будут давать ненулевые вклады — это средние типа $\langle a_{-p}^+ a_p^+ a_{p'}^+ a_{-p'} \rangle$, расчет которых с помощью теоремы о спариваниях дает

$$\langle \overline{a_{-p}^+ a_p^+} \overline{a_{p'}^+ a_{-p'}} \rangle = -n_p^2 \Delta(\vec{p} + \vec{p}'),$$

и поэтому среднее от этой части оператора $\mathcal{H} - \mathcal{H}'_0$ будет содержать только одно суммирование по импульсу \vec{p} ,

$$\left\langle -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p'^+ \Lambda_{p'}' \right\rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} J(\vec{p}, -\vec{p}) \langle \Lambda_p'^+ \Lambda_{-p} \rangle \sim N^0 = 1,$$

и его можно опустить, так как это среднее не будет иметь необходимого статистического порядка N^1 . В точности то же самое относится и к слагаемому

$$\left\langle -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p''^+ \Lambda_{p'}'' \right\rangle \sim N^0 = 1,$$

а средние от комбинаций операторов Λ_{pq} , Λ'_{pq} и Λ''_{pq} в силу условия $q \neq 0$ вообще будут равняться нулю.

Таким образом, в среднем $\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}'_0 \rangle$ остается только одно слагаемое

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{H} - \mathcal{H}'_0 \rangle &= \langle \mathcal{H}' - \mathcal{H}'_0 \rangle = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \langle \Lambda_p^+ \Lambda_{p'}^- \rangle = \\ &= -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \langle \Lambda_p^+ \rangle \langle \Lambda_{p'}^- \rangle,\end{aligned}$$

которое в силу конструкции \mathcal{H}'_0 , не перепутывающей операторы с разными значениями импульсов, допускает, как мы уже отмечали ранее, расчет средних от каждой комбинации операторов рождения и уничтожения с единым значением p отдельно от других, характеризуемых другим значением импульса $\vec{p}' \neq \vec{p}$.

Выразим оператор Λ_p^+ в терминах новых операторов a_p и b_p и сохраним в нем только диагональные конструкции $a_p^+ a_p$ и $b_p^+ b_p$ (остальные в результате усреднения дадут нули). Имеем,

$$\begin{aligned}(\Lambda_p^+)_\text{diag} &= (u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^+ \alpha_p^+ \beta_p^+ + u_p v_p (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p))_\text{diag} = \\ &= u_p^2 (-\lambda_p \mu_p (b_p^+ b_p + a_p^+ a_p) + \lambda_p \mu_p) - \\ &\quad - v_p^2 (-\lambda_p \mu_p (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) + \lambda_p \mu_p) + \\ &\quad + u_p v_p ((\lambda_p^2 - \mu_p^2) (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p) + 2\mu_p^2) = \\ &= 2u_p v_p \mu_p^2 + (u_p^2 - v_p^2) \lambda_p \mu_p + \\ &\quad + (u_p v_p (\lambda_p^2 - \mu_p^2) - (u_p^2 - v_p^2) \lambda_p \mu_p) (a_p^+ a_p + b_p^+ b_p).\end{aligned}$$

Расчет средних значений от фермиевских чисел заполнения $a_p^+ a_p = N_p = 0; 1$ и $b_p^+ b_p = M_p = 0; 1$ приведет к появлению соответствующих ферми-распределений и логарифмов от них, что в дальнейшем потребует дополнительных преобразований получающихся результатов. Чтобы этого не случилось, преобразуем двоичную систему $(0; 1)$, введя изинговские символы $\sigma_p = \pm 1$ и $\tau_p = \pm 1$, положив

$$2a_p^+ a_p - 1 = \sigma_p, \quad 2b_p^+ b_p - 1 = \tau_p, \quad a_p^+ a_p + b_p^+ b_p = 1 - \frac{\sigma_p + \tau_p}{2}.$$

Тогда нулевой гамильтониан приобретет вид

$$\mathcal{H}'_0 = U'' - \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) \frac{1}{2} (\sigma_p + \tau_p),$$

где

$$U'' = U' + \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) = \sum_{\vec{p}} (\varepsilon(p) + u_p v_p C(p)).$$

Учитывая, что

$$\begin{aligned}\lambda_p^2 - \mu_p^2 &= \frac{A(p)}{\varepsilon(p)} = \frac{1}{\varepsilon(p)} \left[(u_p^2 - v_p^2) \varepsilon_p + 2u_p v_p C(p) \right], \\ 2\lambda_p \mu_p &= \frac{B(p)}{\varepsilon(p)} = \frac{1}{\varepsilon(p)} \left[2u_p v_p \varepsilon_p - (u_p^2 - v_p^2) C(p) \right],\end{aligned}$$

получаем для $(\Lambda_p^+)_\text{диаг}$ в $(\sigma - \tau)$ -операторах довольно компактное выражение

$$\begin{aligned}(\Lambda_p^+)_\text{диаг} &= u_p v_p - \frac{1}{2} \left[2u_p v_p (\lambda_p^2 - \mu_p^2) - (u_p^2 - v_p^2) 2\lambda_p \mu_p \right] \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} = \\ &= u_p v_p - \frac{1}{2\varepsilon(p)} C(p) (u_p^2 + v_p^2) \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} = u_p v_p - \frac{C(p)}{2\varepsilon(p)} \frac{\sigma_p + \tau_p}{2}.\end{aligned}$$

Так как в гамильтониан $\mathcal{H}'_1 = \mathcal{H}' - \mathcal{H}'_0$ входит произведение $\Lambda_p^+ \Lambda_{p'}^-$, то дальнейшее рассмотрение удивительным образом напоминает соответствующее исследование изинговской системы (см. т. 2, гл. 3, § 2, п. д)).

Имеем для «нулевого» термодинамического потенциала

$$\begin{aligned}\Omega_0 &= -\theta \ln \text{Sp} e^{-\mathcal{H}'_0/\theta} = U'' - \theta \ln \sum_{\{\sigma_p, \tau_p\}} \exp \left\{ \frac{1}{2\theta} \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) (\sigma_p + \tau_p) \right\} = \\ &= \sum_{\vec{p}} (\varepsilon_p + u_p v_p C(p)) - 2\theta \sum_{\vec{p}} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta},\end{aligned}$$

а так как

$$\langle \sigma_p \rangle = \langle \tau_p \rangle = \frac{\sum_{\sigma_p=\pm 1} \sigma_p e^{(\varepsilon(p)/2\theta)\sigma_p}}{\sum_{\sigma_p=\mp 1} e^{(\varepsilon(p)/2\theta)\sigma_p}} = \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} = \left\langle \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right\rangle,$$

то

$$\langle \Lambda_p^{(+)} \rangle = u_p v_p - \frac{C(p)}{2\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta},$$

и мы получаем в соответствии с вариационной теоремой Боголюбова

$$\begin{aligned} \Omega \leq \Psi &= \Omega_0 - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \langle \Lambda_p^+ \rangle \langle \Lambda_{p'}^- \rangle = \\ &= \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p - 2\theta \sum_{\vec{p}} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} + \sum_{\vec{p}} \frac{C^2(p)}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} - \\ &\quad - \frac{1}{4V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{C(p)}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \cdot \frac{C(p')}{\varepsilon(p')} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p')}{2\theta}. \end{aligned}$$

Интересно отметить, что в это выражение для Ψ коэффициенты $(u-v)$ -преобразования входят только в комбинации, определяющей величину энергетической щели $C(p)$. Именно она и будет той варьируемой величиной, которая определяет минимальное значение оценки термодинамического потенциала Ω сверху. Для будущего заметим также, что расходимость суммы $\Sigma \varepsilon(p)$ фиктивна, так как

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p - 2\theta \sum_{\vec{p}} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} &= \\ &= \sum_{\vec{p}} \left(\varepsilon_p - \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)} \right) - 2\theta \sum_{\vec{p}} \ln \left(1 + e^{(-\varepsilon(p)/\theta)} \right). \end{aligned}$$

Если учесть, что

$$\frac{\partial \varepsilon(p)}{\partial C(p)} = \frac{\partial \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}}{\partial C(p)} = \frac{C(p)}{\varepsilon(p)},$$

то уравнение минимизации функционала $\Psi(\theta, V, N; C(p))$,

$$\frac{\delta \Psi(C(p))}{\delta C(p)} = 0,$$

определяющее наилучшую с термодинамической точки зрения величину энергетической щели $C(p)$

$$0 = -2\theta \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \cdot \frac{C(p)}{2\theta \varepsilon(p)} + C(p) \frac{\partial}{\partial C(p)} \left[\frac{C(p)}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \right] + \frac{C(p)}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} - \\ - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{C(p')}{\varepsilon(p')} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p')}{2\theta} \cdot \frac{\partial}{\partial C(p)} \left[\frac{C(p)}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \right]$$

приводит к трансцендентному уравнению для величины $C(p)$,

$$C(p) = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{C(p')}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + C^2(p')}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + C^2(p')}}{2\theta} \quad (*)$$

(в правой части в сумме по \vec{p}' нет слагаемого с $\vec{p}' = \vec{p}$, что можно учесть, формально положив $J(\vec{p}, \vec{p}') = 0$). Вторая вариация Ψ по величине $C(p)$ при выполнении условия термодинамического равновесия системы по отношению к величине энергетической щели $\delta\Psi/\delta C(p) = 0$, реализуемого решением уравнения (*), как это и должно было быть, оказывается положительной,

$$\left(\frac{\delta^2 \Psi}{\delta C(p)^2} \right)^{(*)} = \frac{\varepsilon_p^2}{\varepsilon^3(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} + \frac{C^2(p)}{2\theta \varepsilon^2(p)} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}} = \\ = \frac{C^2(p)}{2\varepsilon^3(p)} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}} \left\{ \frac{\varepsilon_p^2}{C^2(p)} \operatorname{sh} \frac{\varepsilon(p)}{\theta} + \frac{\varepsilon(p)}{\theta} \right\} > 0,$$

т. е. решение уравнения (*) определяет минимальное по отношению к величине энергетической щели значение термодинамического потенциала, соответствующее устойчивому термодинамическому состоянию системы (см. рис. 6.1).

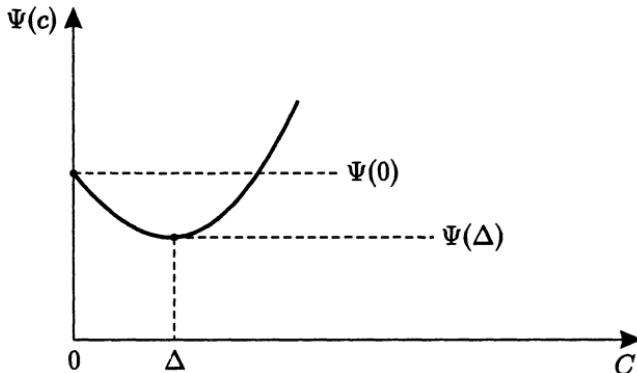


Рис. 6.1. Характер зависимости величины Ψ от «щелевого» параметра C

Заметим еще, что в точке $p = p_F$, когда $\varepsilon_{p_F} = 0$, в случае, $\theta \ll C(p_F)$

$$\left(\frac{\delta^2 \Psi}{\delta C(p)^2} \right)_{p=p_F}^{(*)} = \frac{1}{2\theta} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{C(p_F)}{2\theta}} \cong \frac{2}{\theta} e^{-C(p_F)/\theta},$$

и величина Ψ , соответствующая тривиальному решению уравнения $(*)$ $C(p_F) = 0$, лежит выше значения Ψ , определяемого решением $C(p_F) \neq 0$ (если оно, конечно, существует), т. е. состояние системы с отличной от нуля энергетической щелью оказывается более устойчивым, чем нормальное состояние электронного газа.

Если подставить решение уравнения $(*)$ в выражение для Ψ , то оно заметно упростится и приобретет вид

$$\begin{aligned} \Omega \cong \Psi = & \sum_{\vec{p}} \left(\varepsilon_{\vec{p}} - \sqrt{\varepsilon_{\vec{p}}^2 + C^2(\vec{p})} \right) - 2\theta \sum_{\vec{p}} \ln \left(1 + e^{-\sqrt{\varepsilon_{\vec{p}}^2 + C^2(\vec{p})}/\theta} \right) + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \frac{C^2(\vec{p})}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{p}}^2 + C^2(\vec{p})}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_{\vec{p}}^2 + C^2(\vec{p})}}{2\theta} \end{aligned}$$

(в этом «подставленном» варианте записи термодинамического потенциала производная $\partial\Psi/\partial C(\vec{p})$ уже не равна нулю). Заметим также, что тривиальное решение уравнения $(*)$ $C(\vec{p}) = 0$ оставляет

в этой записи только второе слагаемое, которое в силу $\varepsilon(p) = \varepsilon_p$ соответствует значению $\Omega = \Omega_0$, т. е. «нормальному» состоянию электронного газа, описываемому моделью идеального ферми-газа. Интересно отметить, что величина производной полученного выражения для Ψ по $C^2(p)$ меньше нуля,

$$\begin{aligned} \frac{\delta\Psi}{\delta C^2(p)} &= \frac{\partial}{\partial C^2(p)} \left\{ -2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} + \frac{C^2(p)}{2\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \right\} = \\ &= -\frac{C^2(p)}{8\varepsilon^3(p)} \cdot \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon(p)}{2\theta}} \left(\operatorname{sh} \frac{\varepsilon(p)}{\theta} - \frac{\varepsilon(p)}{\theta} \right) < 0, \end{aligned}$$

т. е. величина Ψ при наличии конечного значения $C^2(p) \neq 0$ всегда меньше величины, соответствующей тривиальному решению $C^2(p) = 0$. Если положить $\theta = 0$ (тогда $\Omega_0 = 0$) и разложить $\Psi(C(p))$ в формальный ряд по степеням $C \neq 0$, то получим

$$\Delta\Psi = \Psi(C \neq 0) - \Psi(C = 0) = -\frac{1}{8} \sum_{\vec{p}} \frac{C^4(p)}{\varepsilon_p^3} + \dots < 0,$$

что согласуется с предыдущим неравенством и еще раз указывает на то, что при $\theta = 0$ в случае существования нетривиального решения уравнения (*) реализуется именно то состояние электронного газа, которое характеризуется наличием энергетической щели $C(p)$ в спектре его возбужденных состояний.

Глава 7

Исследование уравнения для энергетической щели в случае упрощенной модели взаимодействия электронов

§ 1. Уравнение для энергетической щели и термодинамический потенциал системы с модельным взаимодействием частиц, допускающим дальнейшее исследование проблемы сверхпроводимости

Выяснив в принципе, какими свойствами будет обладать система, описываемая термодинамическим потенциалом Ψ , в случае существования нетривиального решения уравнения (*) для энергетической щели $C(p)$, заметим сразу, что это уравнение при самых общих предположениях об устройстве функции $J(\vec{p}, \vec{p}')$ не решается. Эта математическая трудность, поджидавшая нас с момента исследования эффекта Купера (см. § 1 этой части), является вновь, и чтобы преодолеть ее и получить необходимую нам оценку величины $C(p)$, воспользуемся, как в § 1, мультиплективной аппроксимацией функции $J(\vec{p}, \vec{p}')$, $J(\vec{p}, \vec{p}') = J\theta(\vec{p}) \cdot (\vec{p}')$, сосредоточенной и имеющей постоянную величину в энергетическом слое ширины ω около ферми-уровня ε_F ,

$$\theta(\vec{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega. \end{cases}$$

Эта модель, предложенная авторами теории БКШ, является в нашем исследовании последним этапом моделирования эффективного взаимодействия $\nu(\vec{p} + \vec{q}, \vec{p}, \vec{q})$. Несмотря на то, что она учитывает все физические предположения, сформулированные нами в § 1, в формальном отношении, будучи разрывной, она, конечно, очень

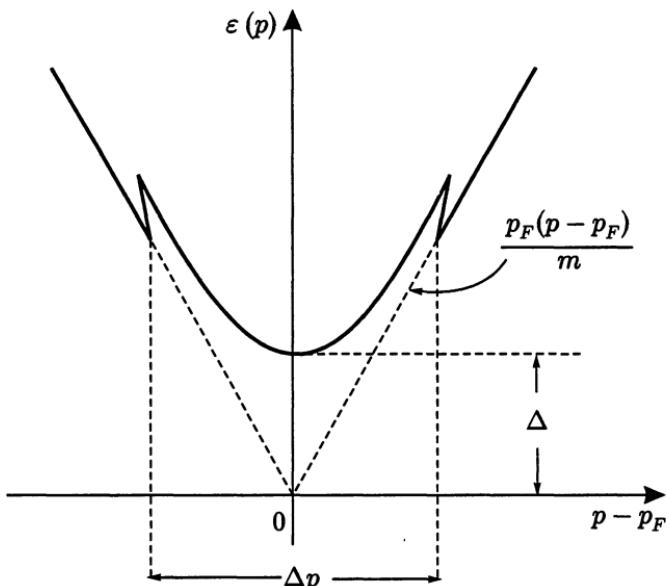


Рис. 7.1. Поведение спектра возбужденных состояний электронов $\epsilon(p)$ вблизи граници Ферми согласно БКШ-аппроксимации их взаимодействия; в окрестности $p = p_F$ имеем $\epsilon(p) = \Delta + \frac{(p - p_F)^2}{2M}$, где эффективная масса

$$M = m \frac{\Delta}{2\epsilon_F} = m \frac{\Delta p}{p_F} \ll m$$

груба, приводит к нарушению гладкости функции $\epsilon(p)$, определяющей зависимость энергии электронных возбуждений от импульса (см. рис. 7.1) и так далее, но зато позволяет достаточно просто преодолеть все математические трудности и довести предпринятое нами исследование проблемы сверхпроводимости до логического конца. (Заметим, что термодинамические характеристики вырожденного электронного газа с феноменологически заданным щелевым спектром возбужденных состояний легко рассчитываются стандартными методами (см. § 1, п. 4)).

Подставляя БКШ-аппроксимацию для $J(\vec{p}, \vec{p}')$ в уравнение (*), получаем

$$C(p) = \frac{J}{2V} \theta(p) \sum_{\vec{p}'} \theta(\vec{p}') \frac{C(p')}{\sqrt{\epsilon_{p'}^2 + C^2(p')}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\epsilon_{p'}^2 + C^2(p')}}{2\theta},$$

откуда следует, что

$$C(p) = \begin{cases} \Delta(\theta) & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega, \end{cases}$$

и уравнение для нетривиального решения $\Delta(\theta)$ приобретает вид

$$1 = \frac{J}{2V} \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}.$$

Переходя как и в § 1 от суммирования по импульсу \vec{p} к интегрированию по величине $\varepsilon_p = \xi = (p^2/2m) - \varepsilon_F$ и обозначая

$$\rho = \left(J \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi p^2}{\partial \varepsilon_p / \partial p} \right)_{p=p_F} = \text{const} > 0,$$

приходим к окончательному виду упрощенного уравнения для зависящей от температуры энергетической щели $\Delta = \Delta(\theta)$

$$1 = \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\theta} d\xi, \quad (*)'$$

где ω — энергетическая граница учтенной во взаимодействии $\nu(\vec{p}, \vec{p}', \vec{q})$ длинноволновой, т. е. только фононной части передающих взаимодействие от электрона к электрону колебаний решетки (т. е. $\omega < \omega_D$).

Термодинамический потенциал Ψ в этой аппроксимации приобретает вид

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_{\vec{p}} \left\{ \varepsilon_p - \sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} - 2\theta \ln \left(1 + \exp \frac{-\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{\theta} \right) \right\} + \frac{V}{J} \Delta^2 = \\ &= \rho \frac{V}{J} 2 \int_0^\omega \left\{ \xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - 2\theta \ln \left(1 + \exp \frac{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{\theta} \right) \right\} d\xi + \frac{V}{J} \Delta^2. \end{aligned}$$

Интересно отметить, что в этом варианте теории

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \frac{J}{2V} \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_{\vec{p}}^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_{\vec{p}}^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right) = 0$$

и термодинамический потенциал Ψ обладает экстремальным свойством по отношению к величине Δ^2 .

§ 2. Расчет температуры фазового перехода θ_0 и температурное поведение энергетической щели в диапазоне $0 \leq \theta \leq \theta_0$

Приступая к рассмотрению уравнения (*'), заметим, что оно тоже в полном объеме точно не решается, поэтому мы рассмотрим последовательно ряд частных случаев, когда его исследование не требует особых затрат.

1. Случай $\theta = 0$. Если в уравнении

$$1 = \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}} d\xi$$

сделать замену переменной интегрирования $\xi = \Delta_0 x$, то

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^{\omega/\Delta_0} \frac{dx}{\sqrt{x^2 + 1}} = \operatorname{arcsh} \frac{\omega}{\Delta_0},$$

и мы получаем в пределе слабой связи

$$\Delta_0 = 2\omega \frac{1}{e^{1/\rho} - e^{-1/\rho}} \cong 2\omega e^{-1/\rho},$$

т. е. именно тот результат, который в соответствии с предварительным обсуждением нами и ожидался (см. § 1).

2. Случай $\theta \ll \Delta_0$. Полагая

$$\operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\theta} = 1 - 2 \exp \left\{ \frac{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{\theta} \right\} + \dots,$$

получаем согласно $(*)'$ приближенное уравнение

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^\omega \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} - \delta = \operatorname{arcsh} \frac{\omega}{\Delta} - \delta,$$

где, заменяя в поправочном члене величину $\Delta = \Delta(\theta)$ на $\Delta_0 = \Delta(0)$ и учитывая, что в области $\xi \cong 0$

$$\frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}}{\theta} = \frac{\Delta_0}{\theta} + \frac{1}{2} \frac{\xi^2}{\Delta_0 \theta} + \dots,$$

имеем, используя методику расчета асимптотики с помощью метода перевала (см., например, т. 2, гл. 1, задачу 3) в пределе $\Delta_0/\theta \gg 1$

$$\begin{aligned} \delta &= 2 \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \exp \left\{ \frac{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{\theta} \right\} d\xi \cong \\ &\cong e^{-\Delta_0/\theta} \int_{-\omega}^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\xi}{\Delta_0 \theta} \right\} d\xi \cong \frac{\sqrt{2\pi \Delta_0 \theta}}{\Delta_0} e^{-\Delta_0/\theta}, \end{aligned}$$

откуда следует низкотемпературное поведение энергетической щели Δ

$$\Delta = 2\omega \frac{1}{e^{1/\rho+\delta} - e^{-1/\rho-\delta}} \cong 2\omega e^{-1/\rho} e^{-\delta} \cong \Delta_0 - \sqrt{2\pi \Delta_0 \theta} e^{-\Delta_0/\theta}.$$

3. Случай $\Delta(\theta_0) = 0$. Уравнение для критической температуры θ_0 согласно $(*)'$ имеет вид

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^\omega \frac{1}{\xi} \operatorname{th} \frac{\xi}{2\theta_0} d\xi = \int_0^{\omega/2\theta_0} \frac{\operatorname{th} x}{x} dx.$$

Так как аналитическими методами этот интеграл не берется, произведем в соответствии с рис. 7.2 его грубую оценку сверху.

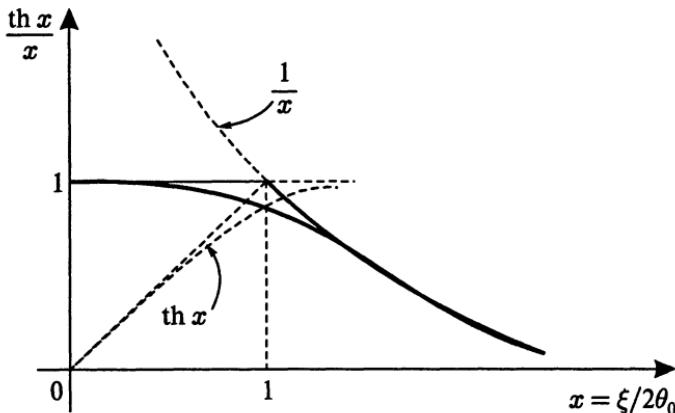


Рис. 7.2. График подынтегральной функции $\text{th } x/x$, определяющей величину θ_0 (толстая линия) и ее аппроксимация в интервалах $0 < x < 1$ и $1 < x < \infty$ (тонкие линии)

Имеем, разбивая интеграл на два участка,

$$\frac{1}{\rho} \lesssim \int_0^1 dx + \int_1^{\omega/2\theta_0} \frac{1}{x} dx = 1 + \ln \frac{\omega}{2\theta_0} = \ln \frac{e\omega}{2\theta_0},$$

откуда, подставляя значение $e \cong 2,718$, получаем

$$\theta_0 \lesssim \frac{e}{2} \omega e^{-1/\rho} \cong 1,26 \omega e^{-1/\rho}.$$

Численный расчет интеграла определяет температуру фазового перехода в нормальное состояние (температуру исчезновения энергетической щели и явления сверхпроводимости) как

$$\theta_0 \cong 1,13 \omega e^{-1/\rho} \cong 0,565 \Delta_0,$$

что на 10 % с небольшим меньше полученной нами грубой оценки.

4. Случай

$$\frac{\delta\theta}{\theta_0} = \frac{(\theta_0 - \theta)}{\theta_0} \ll 1.$$

В этом случае $\Delta/\theta_0 \ll 1$, и поэтому, разлагая подынтегральное выражение в уравнении (*')

$$\frac{1}{\rho} = \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2(\theta_0 + \delta\theta)} d\xi$$

по величинам $\delta\theta$ и Δ^2 и переходя к интегрированию по безразмерной переменной $x = \xi/2\theta_0$, получаем в первом порядке

$$\frac{\delta\theta}{\theta_0} \int_0^{\omega/2\theta_0} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 x} dx = \frac{\Delta^2}{8\theta_0^2} \int_0^{\omega/2\theta_0} \left(\operatorname{th} x - \frac{1}{x^2 \operatorname{ch}^2 x} dx \right),$$

или

$$\frac{\delta\theta}{\theta_0} A = \frac{\Delta^2}{8\theta_0^2} B.$$

Интегралы A и B сходятся, и их верхние пределы

$$\frac{\omega}{2\theta_0} \sim e^{1/\rho} \gg 1$$

можно заменить на $+\infty$. Тогда, осуществляя численный расчет интеграла B (самая грубая его оценка, проведенная в духе рис. 7.2, дает величину $B \lesssim 2/3$), получаем

$$\Delta^2 = \frac{A}{B} \cdot 8\theta_0 \delta\theta \cong 9,39 \theta_0 \delta\theta,$$

откуда

$$\Delta \cong 3,064 \theta_0 \sqrt{\frac{\theta_0 - \theta}{\theta_0}}, \quad \text{или} \quad \frac{\Delta}{\Delta_0} \cong 1,73 \sqrt{\frac{\theta_0 - \theta}{\theta_0}}.$$

Общий вид температурной зависимости величины Δ , представленный на рис. 7.3, откровенно напоминает температурную зависимость параметра дальнего порядка (спонтанной намагниченности) в системах, допускающих приближение молекулярного поля, в которых точка $\theta = \theta_0$ также является температурой фазового перехода 2-го рода (см. прил. V).

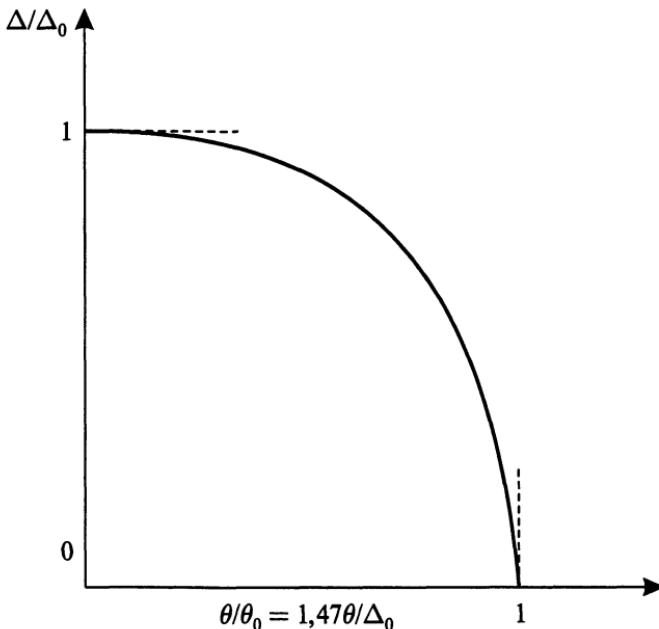


Рис. 7.3. Общий вид температурной зависимости энергетической щели Δ в спектре элементарных возбуждений электронного газа в металлах

Возникшая с момента введения изинговских чисел $\sigma = \pm 1$ и $\tau = \pm 1$ аналогия с теорией молекулярного поля (как фактора дальнего порядка по Брэггу—Вильямсу), подтверждаемой для систем изинго-гейзенберговского типа вариационной оценкой (см. прил. V), достаточно навязчива: те же гиперболические тангенсы и косинусы в выражении для потенциала Ψ , а уравнение для энергетической щели вообще выглядит как интегральное обобщение уравнения Вейсса для спонтанной намагниченности (отсюда и схожесть в температурном поведении величин энергетической щели $\Delta(\theta)$ и удельной спонтанной намагниченности $\sigma(\theta)$), не говоря уже об идентичности характера фазового перехода с конечным скачком теплоемкости (см. далее § 4).

Эта аналогия усиливается еще более в процессе доказательства асимптотической точности полученных в изложенной теории результатов (см. § 7), которое, по существу, является калькой доказательства асимптотической точности вариационного приближения

в теории гейзенберговского ферромагнетизма при использовании модели слабого взаимодействия спинов системы со стремящимся к бесконечности радиусом действия. Отметим попутно, что вариационная оценка термодинамического потенциала — это, конечно, приближение, и только гипотеза о бесконечно дальнодействующем характере взаимодействия частиц (или узлов решетки) убирает логарифмическую особенность в температурном поведении теплоемкости в области непосредственной близости к точке фазового перехода, реально существующую в трехмерных системах ферромагнитного типа, сохраняя лишь ее конечный скачок ΔC и сводя тем самым фазовый переход λ -типа к фазовому переходу второго рода.

Однако, ферромагнетик Гейзенberга (дискретная система), электронный газ в металле (двухкомпонентная электрон-фононная система) и вырожденный неидеальный одноатомный бозе-газ — это с физической точки зрения совершенно разные системы как в динамическом (разные по характеру типы взаимодействия), так и в кинематическом отношениях (бозе-система — со своей конденсацией, ферми-газ — с принципом Паули, а система чисел ± 1 вообще не имеет отношения к квантовой теории). Автор всегда достаточно настороженно относился к утверждениям чрезмерных достоинств теории подобия, относя ее к феноменологической категории, так как эти возникающие порой формальные аналогии и совпадения нас удивляют, но ничего не доказывают, а являются лишь эмоциональным впечатлением.

В то же время нельзя не заметить, что эти аналогии в лучшем случае могут быть использованы в качестве наводящих соображений, как это именно и произошло в изложенной в этом параграфе теории.

Глава 8

Термодинамические свойства модельного сверхпроводника

Дифференцируя полученное в предыдущем параграфе выражение для термодинамического потенциала Ψ по температуре и учитывая, что

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta^2} = 0,$$

получаем для энтропии системы

$$S = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta} = \sum_{\vec{p}} \frac{\partial}{\partial \theta} 2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} = \\ = \sum_{\vec{p}} \left\{ 2 \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} - 2 \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right\},$$

откуда для теплоемкости при постоянном объеме следует

$$C = \theta \frac{\partial S}{\partial \theta} = 2\theta \sum_{\vec{p}} \left\{ -\frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \cdot \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \right\} \frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}.$$

Так как

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} = -\frac{1}{2\theta^2} \sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} + \frac{1}{2\theta} \cdot \frac{1}{2\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \cdot \frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta},$$

то получаем окончательно

$$\begin{aligned} C &= \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \left\{ \frac{\epsilon_p^2 + \Delta^2}{2\theta^2} - \frac{1}{4\theta} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \right\} = \\ &= \frac{\rho V}{J} 2 \int_0^\omega \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \left\{ \frac{\xi^2 + \Delta^2}{2\theta^2} - \frac{1}{4\theta} \frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \right\} d\xi. \end{aligned}$$

Используя полученные в § 1 частные результаты для величины Δ^2 в области низких температур $\theta \ll \Delta_0$ и в области, прилегающей к температуре исчезновения энергетической щели $\Delta(\theta_0) = 0$, когда $(\theta_0 - \theta)/\theta_0 \ll 1$, исследуем поведение теплоемкости в этих же крайних случаях.

Случай $\theta \ll \Delta$. Учитывая, что в области, прилегающей к поверхности Ферми $|p - p_F| < \Delta p$, можно положить

$$\begin{aligned} \sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2} &= \Delta \left(1 + \frac{\epsilon_p^2}{\Delta^2} \right)^{1/2} \cong \Delta + \frac{1}{2} \frac{p_F^2 (p - p_F)^2}{\Delta m^2} = \\ &= \Delta + \frac{(p - p_F)^2}{2M} = \Delta + \frac{P^2}{2M}, \end{aligned}$$

где «эффективная» масса, характеризующая крутизну параболы, исходящей из точки $p = p_F$ (см. рис. 7.1),

$$M = m \frac{\Delta}{2\epsilon_F} = m \frac{\Delta p}{p_F} \cong 10^{-4} m,$$

имеем разумную аппроксимацию первого множителя подынтегрального выражения в формуле для теплоемкости C

$$\frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\sqrt{\epsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}} \cong 4e^{-\Delta/\theta} \cdot e^{-P^2/2M\theta}.$$

Так как второе слагаемое в фигурных скобках в этом же интеграле содержит величину

$$\frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \cong \frac{1}{\pi} \Delta_0 \left(\frac{2\pi \Delta_0}{\theta} \right)^{3/2} e^{-\Delta_0/\theta},$$

т. е. еще одну экспоненту $e^{-\Delta/\theta} \ll 1$, то его при проведении основной оценки можно опустить. Это же относится и к учету температурной зависимости самой щели

$$\Delta = \Delta_0 - \sqrt{2\pi \Delta_0 \theta} \cdot e^{-\Delta_0/\theta} \cong \Delta_0.$$

Далее, усреднение величины $\varepsilon_p^2 + \Delta^2$ по квазимаксвелловскому распределению по величине P дает

$$\overline{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} = \Delta^2 + 2\Delta \frac{\overline{P^2}}{2M} = \Delta^2 \left(1 + \frac{\theta}{\Delta} \right) \cong \Delta^2 \cong \Delta_0^2,$$

и мы получаем для теплоемкости системы в области $\theta \ll \Delta_0$

$$\begin{aligned} C &= \sum_{\vec{p}} 4 \frac{\Delta_0^2}{2\theta^2} e^{-\Delta_0/\theta} e^{-P^2/2M\theta} \left(1 + O\left(\frac{\theta}{\Delta_0}\right) + e^{-\Delta_0/\theta} P\left(\frac{\theta}{\Delta_0}\right) \right) \cong \\ &\cong \frac{4\pi p_F^2 V}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 4 \cdot \frac{\Delta_0^2}{2\theta^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-P^2/2M\theta} dP e^{-\Delta_0/\theta} = 3N \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\theta}{\epsilon_F} \left(\frac{\Delta_0}{\theta} \right)^{5/2} e^{-\Delta_0/\theta}, \end{aligned}$$

где мы учли, что $V = \frac{N\hbar^3 3\pi^2}{p_F^3}$, и в силу $\frac{M}{m} \cong 10^{-4}$ расширили область интегрирования по величине P ,

$$-\Delta p < P = (p - p_F) < +\Delta p$$

на весь интервал от $-\infty$ до $+\infty$. Этот характерный результат для систем, в которых энергии возбужденных состояний отделены от энергии основного состояния энергетической щелью, и содержащий экспоненту $e^{-\Delta/\theta} \ll 1$, полностью совпадает с решением задачи, приведенным в § 1, п. 4.

Случай $\theta = \theta_0$, $\Delta(\theta_0) = 0$. Полагая

$$\frac{\rho V}{J} = N \frac{3}{4} \frac{1}{\varepsilon_F};$$

$$\frac{1}{4\theta_0} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta_0} = -\frac{9,39\theta_0}{4\theta_0} = -2,3475,$$

имеем

$$C(\theta_0) = N \frac{3}{4} \frac{1}{\varepsilon_F} 2 \int_0^\omega \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{2\theta_0}} + \left(\frac{\xi^2}{2\theta_0^2} + 2,3475 \right) d\xi =$$

$$= N \frac{3\theta_0}{\varepsilon_F} \int_0^{\omega/2\theta_0} \frac{2x^2 + 2,3475}{\operatorname{ch}^2 x} dx.$$

Замечая, что

$$\frac{\omega}{2\theta_0} = \frac{\omega}{2 \cdot 0,565\Delta_0} \cong \frac{1}{2} e^{1/\rho} \gg 1,$$

мы можем в интеграле по величине $x = \frac{\xi}{2\theta_0}$ заменить верхний предел на $+\infty$. Учтем численные значения определенных интегралов

$$A_1 = \int_0^\infty \frac{1}{\operatorname{ch}^2 x} dx = \operatorname{th} x \Big|_{x=0}^{x=+\infty} = 1;$$

$$A_2 = \int_0^\infty \frac{x^2}{\operatorname{ch}^2 x} dx = \frac{\pi^2}{2} |B_2| = \frac{\pi^2}{12} = 0,8225.$$

Оценка величины интеграла A_2 сверху достаточно проста: так как $\operatorname{ch} x > \frac{1}{2} e^x$, то

$$A_2 < \int_0^\infty x^2 4e^{-2x} dx = 1.$$

Тогда, отнеся величину теплоемкости сверхпроводника слева от точки θ_0 к теплоемкости идеального ферми-газа при температуре справа от θ_0 , $C_{\text{ид}} = N \frac{\pi^2}{2} \frac{\theta_0}{\epsilon_F}$, получаем

$$\begin{aligned}\frac{C(\theta_0)}{C_{\text{ид}}(\theta_0)} &= \frac{6}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{2x^2 + 2,3475}{\text{ch}^2 x} dx = \\ &= \frac{6 \cdot 2,3475}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{1}{\text{ch}^2 x} (1 + 0,85x^2) dx = \\ &= 1,428(A_1 + 0,85A_2) = 1,428 \cdot 1,699 = 2,426 \cong 2,43\end{aligned}$$

(грубая оценка табличного интеграла A_2 дает $\frac{C(\theta_0)}{C_{\text{ид}}(\theta_0)} \cong 2,64$, т. е. ошибку в 8,7%).

Таким образом, при достижении температуры θ_0 в системе происходит фазовый переход 2-го рода по эренфестовской классификации из сверхпроводящего в нормальное состояние электронного газа с конечным скачком теплоемкости $\Delta C/C_{\text{ид}} = 1,43$. График температурной зависимости величины $\frac{C(\theta_0)}{C_{\text{ид}}(\theta_0)}$ представлен на рис. 8.1.

| | Teor. | Tl | Zn | V | Ta | Al | Sn | Nb | Hg | Pb |
|---------------------------------------|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $C(\theta_0)/C_{\text{ид}}(\theta_0)$ | 2,43 | 2,15 | 2,25 | 2,57 | 2,58 | 2,60 | 2,60 | 3,07 | 3,18 | 3,65 |

Исследуя упрощенную изотропную модель сверхпроводника, мы получили некоторое усредненное значение энергетической щели $\Delta(\theta)$, определяющей уже потом как бы в общих чертах характерные особенности всех сверхпроводящих систем (то же самое можно, к примеру, сказать и об универсальной в упомянутом выше смысле теории теплоемкости твердых тел по Дебаю). На эксперименте же как в низкотемпературной области, так и в момент перехода из сверхпроводящего в нормальное состояние проявляется минимальное значение энергетической щели, так что теоретические

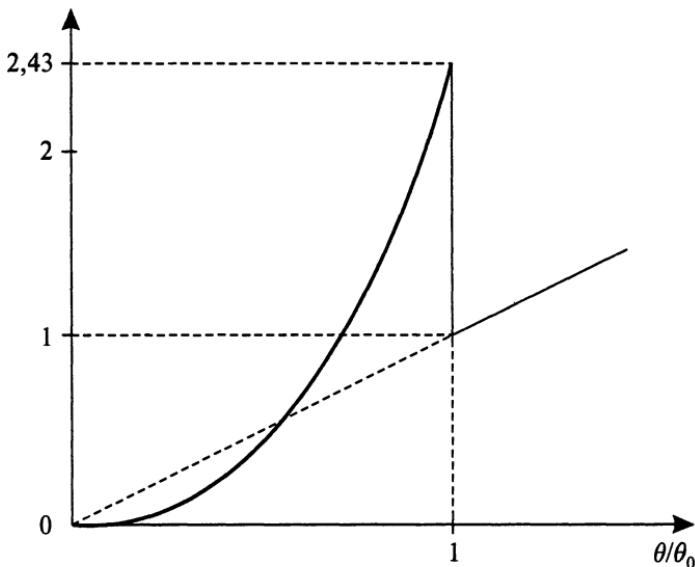


Рис. 8.1. Температурное поведение теплоемкости модельного сверхпроводника, отнесенной к теплоемкости идеального ферми-газа в точке фазового перехода $\theta = \theta_0$

результаты для теплоемкости и других величин, пропорциональных Δ или θ , оказываются несколько завышенными. Но все же, если сопоставить полученную нами на основе использования весьма грубой модели электронного газа в металле безразмерную оценку скачка теплоемкости $\Delta C/C_{\text{ид}}(\theta_0)$ с экспериментальными данными, то обнаруживается весьма приятное соответствие этих величин (см. табл. на стр. 132), что с несомненностью свидетельствует о том, что грубая и откровенно формальная модель БКШ правильно отражает именно тот основной динамический механизм, который приводит к образованию устойчивого сверхпроводящего состояния системы.

Глава 9

Величина критического магнитного поля и фазовый переход 2-го рода

§ 1. Термодинамическая теория

Термодинамическая теория фазового перехода металла из нормального в сверхпроводящее состояние исходит из феноменологического учета эффекта Мейсснера и аппроксимации экспериментальных данных о температурной зависимости критического магнитного поля

$$H_{kp}(\theta) \cong H_0 \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^2 \right),$$

справедливой в основном в области $\theta \lesssim \theta_0$ (см. рис. 9.1).

Эта теория проста, поэтому целесообразнее ее напомнить, чем отсылать к учебной литературе.

Согласно эффекту Мейсснера, поле магнитной индукции B при температурах $\theta < \theta_0$ полностью вытесняется из цилиндрического образца условно бесконечной длины. В связи с этим для величины намагничения M имеем

$$M = \frac{B - H}{4\pi} = \begin{cases} -\frac{H}{4\pi} & \text{в области существования } s\text{-фазы,} \\ 0 & \text{в области существования } n\text{-фазы.} \end{cases}$$

Поэтому изменение потенциала Ψ единицы объема металла, связанное с включением магнитного поля H будет иметь вид

$$\frac{1}{V} (\Psi(\theta, H) - \Psi(\theta, 0)) = - \int_0^H M dH = \begin{cases} \frac{H^2}{8\pi} & \text{в случае } s\text{-фазы,} \\ 0 & \text{в случае } n\text{-фазы.} \end{cases}$$

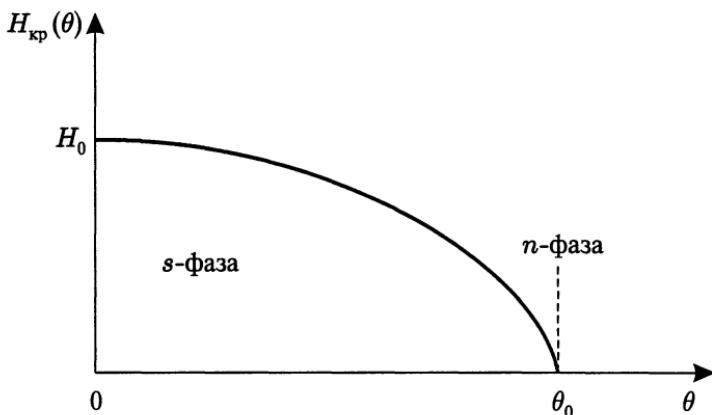


Рис. 9.1. Качественный вид графика зависимости величины критического магнитного поля от температуры, разделяющего области сверхпроводящего (s) и нормального (n) состояний металла

Таким образом, для разности потенциалов единицы объема металла разных фаз при значениях $\theta \lesssim \theta_0$ получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} (\Psi_n(\theta, H) - \Psi_s(\theta, H)) &= \\ &= \frac{1}{V} (\Psi_n(\theta, 0) - \Psi_s(\theta, 0)) - \frac{H^2}{8\pi} = \frac{H_{kp}^2(\theta)}{8\pi} - \frac{H^2}{8\pi}, \end{aligned}$$

откуда, вспоминая, что энтропия

$$S = -\frac{\partial \Psi}{\partial \theta},$$

имеем

$$S_s - S_n = \frac{H_{kp}(\theta)}{4\pi} \cdot \frac{\partial H_{kp}(\theta)}{\partial \theta},$$

т. е. для всех значений температуры $\theta < \theta_0$ фазовый переход из нормального в сверхпроводящее состояние является фазовым переходом 1-го рода с отличной от нуля скрытой теплотой перехода $q = \theta \Delta S$. Эта величина равна нулю только в случае $\theta = \theta_0$, так как $H_{kp}(\theta_0) = 0$, и мы получаем, что в случае $H = 0$ при понижении температуры до величины $\theta = \theta_0$ происходит фазовый переход 2-го

рода из нормального состояния системы в сверхпроводящее с конечным скачком теплоемкости

$$C_s - C_n = \Delta C = \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \Delta S \Big|_{\theta=\theta_0} = \frac{\theta_0}{4\pi} \left(\frac{\partial H_{kp}(\theta)}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta_0}^2,$$

где величина $H_{kp}(\theta)$ связана со скачком термодинамического потенциала $\Delta\Psi = \Psi_n - \Psi_s$ системы соотношением

$$\frac{H_{kp}^2(\theta)}{8\pi} = \frac{1}{V} (\Psi_n - \Psi_s) \Big|_{H=0} = -\frac{1}{V} \Delta\Psi.$$

§ 2. Связь эффекта с величиной энергетической щели

Представим полученную в § 3 величину

$$\Delta\Psi = \Psi(\theta, V, N|\Delta^2) - \Psi(\theta, V, N|0)$$

в виде разложения в ряд по степеням Δ^2 . Чтобы в коэффициентах этого разложения величины θ и Δ^2 (напомним, что во всех наших формулах $\Delta^2 = \Delta^2(\theta)$) были бы согласованы друг с другом по температуре, будем разлагать в ряд не $\Psi(\Delta^2)$ в окрестности $\Delta^2 = 0$, а величину $\Psi(\Delta^2 - \Delta^2)$ в окрестности $\Delta^2 \neq 0$. Тогда

$$\begin{aligned} \Delta\Psi &= \Psi(\Delta^2) - \Psi(\Delta^2 - \Delta^2) = \\ &= \Psi(\Delta^2) - \left(\Psi(\Delta^2) - \frac{\partial\Psi(\Delta^2)}{\partial\Delta^2} \Delta^2 + \frac{\partial^2\Psi(\Delta^2)}{(\partial\Delta^2)^2} \frac{\Delta^4}{2} + \dots \right) = \\ &= \frac{\partial\Psi(\Delta^2)}{\partial\Delta^2} \Delta^2 - \frac{\partial^2\Psi(\Delta^2)}{(\partial\Delta^2)^2} \frac{\Delta^4}{2} + \dots . \end{aligned}$$

Далее имеем

$$\frac{\partial\Psi(\Delta^2)}{\partial\Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \frac{J}{2V} \sum_{\vec{p}} \frac{\operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \right) = 0,$$

и вклад, пропорциональный Δ^2 в выражении для $\Delta\Psi$, в силу уравнения для энергетической щели $\Delta(\theta)$ пропадает

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi}{(\partial \Delta^2)^2} &= -\frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \frac{\partial}{\partial \Delta^2} \cdot \frac{\operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta}}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\vec{p}} \left\{ \left(\frac{1}{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} \right)^{3/2} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} - \frac{1}{2\theta} \frac{1}{\varepsilon_p^2 + \Delta^2} \left(\operatorname{ch}^2 \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right)^{-1} \right\}, \end{aligned}$$

и мы получаем, сохраняя только низший, четвертый порядок по Δ в выражении для $\Delta\Psi$, что

$$\begin{aligned} \Delta\Psi &= -\frac{\partial^2 \Psi(\Delta^2)}{(\partial \Delta^2)^2} \frac{\Delta^4}{2} + \dots = -\left(\frac{\partial^2 \Psi(\Delta^2)}{(\partial \Delta^2)^2} \right)_{\Delta^2=0} \times \frac{\Delta^4}{2} + \dots \cong \\ &\cong -\sum_{\vec{p}} \left\{ \frac{1}{\varepsilon_p^3} \operatorname{th} \frac{\varepsilon_p}{2\theta} - \frac{1}{2\theta \varepsilon_p^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\varepsilon_p}{2\theta}} \right\} \frac{\Delta^4}{2}. \end{aligned}$$

Переходя к интегрированию по величине $\xi = \varepsilon_p$, учитывая, что

$$\frac{\rho V}{J} = \frac{V m p_F}{2\pi^2 \hbar},$$

и вводя безразмерную переменную интегрирования

$$x = \frac{\xi}{2\theta},$$

получаем

$$\begin{aligned} -\frac{1}{V} \Delta\Psi &= \frac{\rho}{J} 2 \int_0^\omega \left\{ \frac{1}{\xi^3} \cdot \operatorname{th} \frac{\xi}{2\theta} - \frac{1}{2\theta \xi^2} \cdot \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{\xi}{2\theta}} \right\} d\xi \cdot \frac{\Delta^4}{8} = \\ &= \frac{m p_F}{\pi^2 \hbar^3} \cdot \frac{1}{4\theta^2} \int_0^{\omega/2\theta} \left(\frac{1}{x^3} \operatorname{th} x - \frac{1}{x^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 x} \right) dx \cdot \frac{\Delta^4}{8}. \end{aligned}$$

Интеграл по переменной x нам знаком (см. § 3, п. 2). Он равен $B \cong 0,85$. Учитывая, что

$$mp_F = \frac{p_F^3}{2\varepsilon_F} = \frac{\hbar^3 3\pi^2 n}{2\varepsilon_F}, \quad \text{где} \quad n = \frac{N}{V},$$

получаем

$$-\frac{1}{V}\Delta\Psi = \frac{3 \cdot 0,85}{64} n \frac{\Delta^4}{\theta^2 \varepsilon_F} = \frac{H_{kp}^2(\theta)}{8\pi},$$

откуда для критического магнитного поля будем иметь

$$H_{kp}(\theta) = \sqrt{8\pi \frac{1,275}{32}} \cdot \sqrt{n} \frac{\Delta^2}{\theta \sqrt{\varepsilon_F}}.$$

Число, стоящее под знаком квадратного корня, удивительным образом оказывается равным 1,00087, что дает нам право заменить весь численный коэффициент на единицу.

Так как в нашем исследовании интерес представляет область $\theta \lesssim \theta_0$, в которой $\Delta^2 = 9,39\theta_0^2(1 - \theta/\theta_0)$, то мы получаем

$$H_{kp}(\theta) = \sqrt{\frac{n}{\varepsilon_F}} 9,39 \theta_0 \left(1 - \frac{\theta}{\theta_0}\right),$$

откуда следует, что

$$\left(\frac{\partial H_{kp}(\theta)}{\partial \theta} \right)_{\theta=\theta_0} \cong 88,2 \frac{n}{\varepsilon_F}.$$

Учитывая, что для 1 см³ нормальной фазы $C_{ид}(\theta_0) = n \frac{\pi^2}{2} \cdot \frac{\theta_0}{\varepsilon_F}$, будем иметь для безразмерной величины скачка теплоемкости, согласно термодинамической теории,

$$\left. \frac{\Delta C}{C_{ид}} \right|_{\theta=\theta_0} \cong \frac{88,2}{2\pi^3} \cong 1,424$$

вместо полученной ранее величины 1,426, что можно отнести за счет погрешностей численного расчета.

Наконец, если представить полученную нами формулу для $H_{\text{кр}}(\theta)$ в области $\theta_0 - \theta \ll \theta_0$ в виде выражения, используемого в феноменологической теории

$$H_{\text{кр}}(\theta) \cong \sqrt{\frac{n}{\varepsilon_F}} 9,39 \frac{\theta_0}{2} \left(1 - \left(\frac{\theta}{\theta_0} \right)^2 \right),$$

и совершенно неоправданно экстраполировать его на весь интервал $0 < \theta < \theta_0$, то получим, что величина H_0 , стоящая в экспериментальной аппроксимации $H_{\text{кр}}(\theta)$, будет равна

$$H_0 = \sqrt{\frac{n}{\varepsilon_F}} 4,695 \theta_0 = \sqrt{\frac{n}{\varepsilon_F}} 2,652 \Delta_0.$$

Глава 10

Качественный учет кулоновского взаимодействия

Ввиду того что полный расчет влияния кулоновского отталкивания на существование устойчивых коррелированных пар $(\vec{p}, \uparrow; -\vec{p}, \downarrow)$ в энергетическом слое, примыкающем к поверхности Ферми, представляет достаточно сложную задачу, рассмотрим эту проблему на уровне уже использованной нами в § 3 аппроксимации взаимодействия электронов $J(\vec{p}, \vec{p}')$, которая позволила нам с минимальными затратами преодолеть все математические трудности решения уравнения (*) для энергетической щели $C(p)$. Чтобы еще более упростить задачу, рассмотрим случай $\theta = 0$, когда это уравнение приобретает наиболее простой вид

$$C(p) = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{C(p')}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + C^2(p')}}.$$

Учтем, что индуцированное колебаниями решетки притяжение электронов существенно в области $-\omega < \varepsilon_p < \omega$ вблизи границы Ферми, где $\omega < \omega_D$, и характеризуется корреляционным радиусом $R_{\text{корр}} \sim 3 \cdot 10^4 \text{ \AA}$, а кулоновское отталкивание, экранируемое ионным фоном решетки на расстоянии $R_{TF} \sim 1 \text{ \AA}$ в более широкой области $-\omega_1 < \varepsilon_p < \omega_1$, где согласно оценке, приведенной в § 1 этой части, ω_1 превышает величину ω в $10^3 - 10^4$ раз. Чтобы решить в этой ситуации уравнение для $C(p)$, используем, как и в § 3, ступенчатую аппроксимацию функции $J(\vec{p}, \vec{p}')$: введем две θ -функции

$$\theta(\vec{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega, \end{cases}$$

$$\theta_1(\vec{p}) = \begin{cases} 1 & \text{в случае } |\varepsilon_p| < \omega_1, \\ 0 & \text{в случае } |\varepsilon_p| > \omega_1, \end{cases}$$

две константы, характеризующие притяжение $J > 0$ и отталкивание $(-J_1) < 0$, и положим

$$J(\vec{p}, \vec{p}') = (J - J_1) \theta(\vec{p}) \theta(\vec{p}') - J_1 \theta(\vec{p}) \theta_1(\vec{p}') - J_1 \theta_1(\vec{p}) \theta(\vec{p}') - J_1 \theta_1(\vec{p}) \theta_1(\vec{p}'),$$

т. е. электроны взаимодействуют с ослабленной кулоновским отталкиванием интенсивностью $J - J_1$, если оба их импульса находятся в зоне электрон-фононного взаимодействия $|\varepsilon_p| < \omega$, а во всех иных случаях отталкиваются с интенсивностью, характеризуемой величиной $-J_1 < 0$. Тогда, обозначив величину энергетической щели $C(p) = \Delta$ для тех значений импульса \vec{p} , которые попадают в энергетический диапазон $|\varepsilon_p| < \omega$, и положив $C(p) = \Delta_1$, если импульс \vec{p} соответствует «внешней» энергетической зоне $\omega < |\varepsilon_p| < \omega_1$, получим в соответствии с этим разделением два уравнения,

$$\begin{cases} \Delta = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} (J - J_1) \theta(\vec{p}') \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} J_1 \theta_1(\vec{p}') \frac{\Delta_1}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta_1^2}}; \\ \Delta_1 = -\frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} J_1 \theta(\vec{p}') \frac{\Delta}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta^2}} - \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}'} J_1 \theta_1(\vec{p}') \frac{\Delta_1}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + \Delta_1^2}}, \end{cases}$$

или, переходя к интегрированию по величине $\xi = \varepsilon_{p'}$, полагая $\rho = J m p_F / (2\pi^2 \hbar^3)$ и $\rho_1 = J_1 m p_F / (2\pi^2 \hbar^3)$

$$\begin{cases} \Delta = (\rho - \rho_1) \int_0^\omega \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \cdot \Delta - \rho_1 \int_\omega^{\omega_1} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_1^2}} \Delta_1, \\ \Delta_1 = -\rho_1 \int_0^\omega \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \cdot \Delta - \rho_1 \int_\omega^{\omega_1} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta_1^2}} \Delta_1. \end{cases}$$

Так как

$$\int_a^b \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} = \operatorname{arcsh} \frac{b}{\Delta} - \operatorname{arcsh} \frac{a}{\Delta} = \ln \frac{b + \sqrt{b^2 + \Delta^2}}{a + \sqrt{a^2 + \Delta^2}},$$

то, учитывая, что согласно § 3, $\sqrt{\omega^2 + \Delta^2} \cong \omega$ можно записать полученную систему нелинейных уравнений в виде

$$\begin{cases} \Delta = (\rho - \rho_1) \ln \frac{2\omega}{\Delta} \cdot \Delta - \rho_1 \ln \frac{\omega_1}{\omega} \cdot \Delta_1, \\ \Delta_1 = -\rho_1 \ln \frac{2\omega}{\Delta} \cdot \Delta - \rho_1 \ln \frac{\omega_1}{\omega} \cdot \Delta_1. \end{cases}$$

Исключая величину Δ_1 из первого уравнения с помощью второго, приходим к уравнению, определяющему величину энергетической щели Δ в интересующем нас диапазоне значений импульса Δp

$$1 = \left(\rho - \frac{\rho_1}{1 + \rho_1 \ln \omega_1 / \omega} \right) \ln \frac{2\omega}{\Delta} = \tilde{\rho} \ln \frac{2\omega}{\Delta},$$

по форме полностью совпадающему с полученным нами ранее (но с эффективным значением $\tilde{\rho}$) и имеющему решение только в случае $\tilde{\rho} > 0$. Это неравенство является критерием существования при наличии кулоновского отталкивания щелевого решения

$$\Delta = 2\omega e^{-1/\tilde{\rho}},$$

т. е. сверхпроводящего состояния коррелированных электронных пар.

Интересно отметить, что действующее в более широкой области импульсов кулоновское отталкивание электронов перенормируется вследствие того, что в знаменателе второго, неотрицательного слагаемого в выражении для $\tilde{\rho}$ стоит большая величина $\ln \omega_1 / \omega$, поэтому взаимодействие $J(\vec{p}, \vec{p}')$ может даже иметь характер отталкивания во всей области импульсов, т. е. $J - J_1 < 0$, и тем не менее условие $\tilde{\rho} > 0$ может быть соблюдено, т. е. сверхпроводящее состояние может существовать также и в случае преобладания кулоновского взаимодействия над индуцированным колебаниями решетки притяжением.

По той же причине это «дальнодействующее» (в масштабе постоянной решетки $a \sim 1\text{--}10 \text{ \AA}$) притяжение электронов, приводящее к образованию «длинноволновых» куперовских пар, подавляет эффект их рассеяния на примесях и дислокациях, в нормальной фазе приводящего к остаточному сопротивлению, в полной аналогии (с точностью до замены длины де-бройлевской волны $\lambda = \tilde{c}/\omega$, характеризующей состояние коррелированных электронных пар, на длину волны электромагнитного излучения $\lambda = c/\omega$) с классическим диапазоном геометрической оптики, когда длинноволновые (порядка $10^3\text{--}10^4 \text{ \AA}$) электромагнитные колебания, взаимодействуя с зеркалами и линзами, не разрушаются молекулярными неровностями полированных поверхностей и внутренними дефектами этих приборов.

Глава 11

Вариационное приближение и асимптотическая точность полученных результатов

Полученное нами в § 2, п. 3) решение для термодинамического потенциала Ψ системы, характеризуемой гамильтонианом \mathcal{H}' , и для уравнения (*), определяющего величину энергетической щели в спектре возбуждений сверхпроводящей системы, является, конечно, лишь вариационным приближением. Вариационные методы в отличие от теории возмущений не являются регулярными, и установить или хотя бы оценить достоверность получаемых с их помощью результатов порой оказывается достаточно сложно. Зато в отличие от теории возмущений вариационная процедура может выявить в исследуемой системе фазовый переход (т. е. обнаружить в температурном поведении оцениваемого термодинамического потенциала аналитические особенности типа разрывов его производных и т. п.). Однако, в силу своей природы вариационная процедура как бы сглаживает эти особенности, искажая при этом реальный характер обнаруженного с ее помощью фазового перехода. Так, например, этот метод, использованный при рассмотрении гейзенберговской (или изинговской) системы (см. прил. V) приводит к результатам, соответствующим приближению молекулярного поля, и поэтому определяет фазовый переход в точке Кюри только 2-го рода, сгладив в термодинамическом потенциале более сильную, чем $(\theta - \theta_0)^2$ особенность типа $(\theta - \theta_0)^2 \ln(|1 - \theta/\theta_0|)$, определяющую реально существующий в подобных системах фазовый переход λ -типа.

Чтобы преодолеть бытовое в обиходе пренебрежительное отношение к вариационной технике оценок, заметим, что приближение молекулярного поля Вейсса, предполагающее обычно взаимодействие только ближайших друг к другу соседних узлов решетки, при расширении числа динамических связей узлов, усиливающем тенденцию к упорядочению составляющих ее магнитных моментов,

с физической точки зрения становится все более оправданным и даже более, — асимптотически точным в пределе бесконечного радиуса взаимодействия узлов решетки (см. прил. V). Если вспомнить, что в конце § 3 мы достаточно подробно обсудили выявившуюся явно формальную аналогию полученных в теории сверхпроводимости решений с результатами исследования дискретных систем изинговского типа, то развитие этой аналогии наводит на мысль, что полученное вариационным методом решение проблемы сверхпроводимости если и не является точным, то в какой-то мере приближается к нему.

Ситуация кардинально меняется, как только мы переходим к использованию БКШ-модели взаимодействия пар $J(\vec{p}, \vec{p}') = J \theta(\vec{p}) \theta(\vec{p}')$: вариационная оценка совпадает с асимптотически точным решением проблемы (в полной аналогии с упомянутой выше задачей об изинговской системе с бесконечнодальнодействием, см. прил. V). Продемонстрируем это с помощью непосредственного расчета.

Итак, рассмотрим систему, характеризуемую гамильтонианом

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}'_0 + \mathcal{H}'_1 = U + \sum_{\vec{p}} [A(p)(\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + B(p)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)] - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'}^-,$$

где

$$\Lambda_p^+ = u_p^2 \beta_p^+ \alpha_p^+ - v_p^2 \alpha_p \beta_p + u_p v_p (\beta_p^+ \beta_p + \alpha_p^+ \alpha_p).$$

Приведя с помощью дополнительного линейного $(\lambda - \mu)$ -преобразования оператор \mathcal{H}'_0 к диагональному виду по новым операторам $a_p^+ a_p$ и $b_p^+ b_p$, мы представили его в § 2 в виде

$$\mathcal{H}'_0 = \sum_{\vec{p}} (\varepsilon_p + u_p v_p C(p)) \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) \frac{\sigma_p + \tau_p}{2},$$

где по-прежнему

$$C(p) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') u_{p'} v_{p'}, \quad \varepsilon(p) = \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}.$$

Если мы запишем необходимую нам статистическую сумму в виде бесконечного разложения в терминах термодинамической теории возмущений см. т. 4, гл. 1, § 2, п. 7

$$\begin{aligned} \frac{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}'/\theta}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}'_0/\theta}} &= \\ = 1 + \sum_{n>1} \int_0^{1/\theta} dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \dots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \frac{\text{Sp} \{ e^{-\mathcal{H}'_0/\theta} \mathcal{H}'_1(t_1) \dots \mathcal{H}'_1(t_n) \}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}'_0/\theta}}, \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{H}'_1(t) = e^{\mathcal{H}'_0 t} \mathcal{H}'_1 e^{-\mathcal{H}'_0 t} = -\frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p^+(t) \Lambda_{p'}^-(t),$$

и учтем, что при данной операторной конструкции гамильтониана \mathcal{H}'_0 при расчете средних значений мы можем воспользоваться теоремой о спариваниях (см. прил. III), то легко заметить, что ненулевые вклады, образованные системой спариваний в каждом из $\mathcal{H}'_1(t)$, будут давать только диагональные по операторам a и b части операторов Λ , а каждое ненулевое спаривание этих операторов из недиагональных частей операторов $\Lambda(t)$ с подобными же операторами из $\Lambda(t')$ понижает статистический вес всего вклада данного порядка по объему системы V (или по числу частиц $N = V/v$) на единицу и этот вклад вследствие проведения предельной статистической процедуры выпадает из рассмотрения. Таким образом, в операторах Λ_p достаточно удержать лишь диагональные по операторам a и b конструкции, в связи с чем оператор \mathcal{H}'_1 приобретает вид (уже в терминах $(\sigma-\tau)$ -символов)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}'_1 = & - \sum_{\vec{p}} u_p v_p C(p) + \sum_{\vec{p}} \frac{C^2(p)}{\varepsilon(p)} \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} - \\ & - \frac{1}{4V} \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{C(p)}{\varepsilon(p)} \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \cdot \frac{C(p')}{\varepsilon(p')} \frac{\sigma_{p'} + \tau_{p'}}{2} + \\ & + \frac{1}{4V} \sum_{\vec{p}} J(\vec{p}, \vec{p}) \frac{C^2(p)}{\varepsilon^2(p)} \left(\frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right)^2. \end{aligned}$$

Последнее слагаемое, которое компенсирует снятое нами условие $p \neq p'$ в двойной сумме, можно сразу опустить, так как оно имеет статистический порядок

$$\sim V^0 = 1,$$

т. е. на единицу меньше статистического порядка остальных слагаемых в операторе \mathcal{H}'_1 .

Переходя к рассмотрению системы с упрощенной моделью взаимодействия пар

$$J(\vec{p}, \vec{p}') = J\theta(\vec{p}) \theta(\vec{p}'),$$

когда $C(p) = \Delta = \text{const}$, получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' = & \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p - \sum_{\vec{p}} \varepsilon(p) \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} + \sum_{\vec{p}} \frac{\Delta^2}{\varepsilon(p)} \cdot \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} - \\ & - \frac{J}{4V} \left(\sum_{\vec{p}} \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} \cdot \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right)^2, \end{aligned}$$

где суммирование по \vec{p} определяется условием $|\varepsilon_p| < \omega$. Статистическая сумма системы, характеризуемой таким гамильтонианом, рассчитывается в пределе $V \rightarrow \infty$, $n = N/V = \text{const}$ асимптотически точно.

Понизим появляющуюся в экспоненте $e^{-\mathcal{H}'/\theta}$ статистической суммы вторую степень оператора $(\sigma_p + \tau_p)/2$ (недиагональная часть гамильтониана, пропорциональная константе взаимодействия J) с помощью очевидного соотношения

$$\begin{aligned} & \exp \left\{ \frac{JV}{2\theta} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} \cdot \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right)^2 \right\} = \\ & = \sqrt{\frac{JV}{2\theta}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ -\frac{JV}{2\theta} \frac{x^2}{2} + \frac{JV}{2\theta} x \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right\} dx, \end{aligned}$$

введем обозначение для возникшего в экспоненте коэффициента при операторе $(\sigma_p + \tau_p)/2$

$$\frac{1}{\theta} \left(\varepsilon(p) - \frac{\Delta^2}{\varepsilon(p)} + \frac{J}{2} \cdot \frac{\Delta^2}{\varepsilon(p)} x \right) = a(p, x)$$

и учтем, что

$$\begin{aligned} & \sum_{\{\sigma_p, \tau_p\}} \exp \left\{ \sum_{\vec{p}} a(p, x) \frac{\sigma_p + \tau_p}{2} \right\} = \\ &= \prod_{\vec{p}} \sum_{\sigma_p=\pm 1} \exp \left\{ \frac{a(p, x) \sigma_p}{2} \right\} \sum_{\tau_p=\pm 1} \exp \left\{ \frac{a(p, x) \tau_p}{2} \right\} = \\ &= \prod_{\vec{p}} \left(2 \operatorname{ch} \frac{a(p, x)}{2} \right)^2 = \exp \left\{ 2 \sum_{\vec{p}} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{a(p, x)}{2} \right\}. \end{aligned}$$

Тогда для статистической суммы получаем

$$\begin{aligned} \zeta &= \operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}'/\theta} = \sum_{\{\sigma_p, \tau_p\}} \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}'(\sigma_p + \tau_p)}{\theta} \right\} = \\ &= \sqrt{\frac{JV}{2\theta}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \sum_{\vec{p}} \varepsilon_p - \frac{JV}{2\theta} \frac{x^2}{2} + \right. \\ &\quad \left. + V \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} 2 \ln 2 \operatorname{ch} \frac{a(p, x)}{2} \right\}, \end{aligned}$$

и для получения окончательного ответа нам остается только взять интеграл по переменной x .

Так как гарантированной величиной статистической суммы ζ (или термодинамического потенциала $\Psi = -\theta \ln \zeta$) является лишь ее главная асимптотика по формально устремляемому к бесконечности аддитивному параметру, в качестве которого у нас фигурирует объем системы V (плотность числа частиц $n = N/V = \text{const}$), то это асимптотическое значение интеграла по переменной x можно определить с помощью метода перевала (см. прил. VI), основную формулу которого в нашем частном случае можно представить в виде

$$I(V) \Big|_{V \rightarrow \infty} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{Vw(x)} dx \Big|_{V \rightarrow \infty} =^{\text{as}} e^{Vw(x_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{V|w''(x_0)|}} \left[1 + 0 \left(\frac{1}{V} \right) \right],$$

где точка перевала x_0 определяется из условия $w'(x_0) = 0$.

Записывая величину ζ в виде

$$\zeta = \sqrt{\frac{JV}{2\theta}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-1/\theta \sum_p \varepsilon_p} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \times \\ \times \exp \left\{ V \left[\frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} 2 \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\varepsilon(p)}{\theta} - \frac{\Delta^2}{\theta \varepsilon(p)} + \frac{J\Delta}{2\theta \varepsilon(p)} x \right) - \frac{J}{2\theta} x^2 \right] \right\},$$

и приравнивая к нулю производную по x от выражения в квадратных скобках, получаем уравнение для точки x_0 , определяющей асимптотику исследуемого интеграла,

$$x_0 = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} \frac{\Delta}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \left(\frac{\varepsilon(p)}{2\theta} - \frac{\Delta^2}{2\theta \varepsilon(p)} + \frac{J\Delta}{4\theta \varepsilon(p)} x_0 \right).$$

Если исключить величину x_0 из экспоненты $\exp \{Vw(x_0)\}$, положив $x_0 = 2\Delta/J$, то после сокращения на величину $\Delta \neq 0$ уравнение для x_0 примет вид

$$1 = \frac{J}{2V} \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\varepsilon(p)} \operatorname{th} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta},$$

а величина статистической суммы окажется равной

$$\zeta = \overset{\text{as}}{\sqrt{\frac{J}{2\theta n|w''(x_0)|}}} \exp \left\{ -\frac{1}{\theta} \left[\sum_{\vec{p}} \left(\varepsilon_p - 2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\varepsilon(p)}{2\theta} \right) + \frac{V}{J} \Delta^2 \right] \right\},$$

откуда для термодинамического потенциала Ψ получаем знакомое нам по § 3 выражение

$$\Psi = -\theta \ln \zeta = \overset{\text{as}}{\sum_{\vec{p}}} \left(\varepsilon_p - 2\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right) + \frac{V}{J} \Delta^2,$$

удовлетворяющее условию минимума по Δ^2

$$\frac{\partial \Psi}{\partial \Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \frac{J}{2V} \sum_{\vec{p}} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \frac{\sqrt{\varepsilon_p^2 + \Delta^2}}{2\theta} \right) = 0$$

не в силу вариационного принципа, а вследствие расположения точки перевала $x_0 = 2\Delta/J$, автоматически обеспечивающей минимальное значение термодинамического потенциала по отношению к величине энергетической щели Δ .

Таким образом, полученные нами результаты для системы с упрощенным взаимодействием электронных пар $J(\vec{p}, \vec{p}') = J\theta(\vec{p})\theta(\vec{p}')$ являются асимптотически точными во всей температурной области существования сверхпроводящего состояния, включая точку $\theta = \theta_0$ его исчезновения, которая оказалась точкой фазового перехода 2-го рода с конечным скачком теплоемкости, как это и имеет место в действительности для реально существующих сверхпроводников.

Глава 12

Принцип компенсации «опасных диаграмм»

Рассмотрим вкратце идею альтернативного, не вариационного подхода к решению проблемы сверхпроводимости, предложенного Н. Н. Боголюбовым в 1957 г. Ограничимся случаем $\theta = 0$ и рассмотрим систему, характеризуемую уже как бы «поворнутым» с помощью $(u-v)$ -преобразования гамильтонианом \mathcal{H}' (см. обозначения и обсуждение в § 2, п. 2)

$$\begin{aligned}\mathcal{H}' = U + \sum_{\vec{p}} & \left\{ A(p) \cdot (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) + B(p) \cdot (\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p) \right\} - \\ & - \frac{1}{V} \sum_{\vec{p} \neq \vec{p}'} J(\vec{p}, \vec{p}') \Lambda_p^+ \Lambda_{p'}' .\end{aligned}$$

Если использовать его диагональную часть

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{H}}_0 = \sum_{\vec{p}} & A(p)(\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p) = \\ = \sum_{\vec{p}} & (\varepsilon_p(u_p^2 - v_p^2) + 2u_p v_p C(p)) \cdot (\alpha_p^+ \alpha_p + \beta_p^+ \beta_p)\end{aligned}$$

в качестве нулевого приближения стационарной теории возмущений, то уже во втором порядке от учета членов, содержащих операторы $(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)$ возникнут «опасные» энергетические знаменатели

$$\left\langle H_1 \frac{1}{E_0 - \tilde{\mathcal{H}}_0} H_1 \right\rangle \sim \frac{1}{2[\varepsilon_p(u_p^2 - v_p^2) + 2u_p v_p C(p)]},$$

которые в случае $J(\vec{p}, \vec{p}') = 0$, т. е. в случае отсутствия щелевого решения

$$C(p) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{p}} J(\vec{p}, \vec{p}') u_{p'} v_{p'} = 0,$$

при условии, что числитель этого выражения не компенсирует стремления к нулю его знаменателя, приводят к расходящимся при $p \rightarrow p_F$ неинтегрируемым подинтегральным выражениям.

Чтобы подобных «опасных» знаменателей не возникало, положим коэффициент

$$B(p) = \varepsilon_p u_p v_p - (u_p^2 - v_p^2) C(p)$$

при упомянутой операторной конструкции равным нулю. Это сразу приводит к системе уравнений для коэффициентов ($u-v$)-преобразования

$$u_p^2 - v_p^2 = \frac{2u_p v_p \varepsilon_p}{C(p)}, \quad u_p^2 + v_p^2 = 1,$$

которую мы в терминах $(\lambda-\mu)$ уже решали (см. § 2, п. 2). Таким образом, получаем

$$2u_p v_p = \frac{C(p)}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}}, \quad u_p^2 - v_p^2 = 2u_p^2 - 1 = \frac{\varepsilon_p}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}}.$$

Подставляя полученное выражение для $2u_p v_p$ в формулу для $C(p)$, получаем сразу уравнение (*) для энергетической щели в случае $\theta=0$

$$C(p) = \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}} J(\vec{p}, \vec{p}') \frac{C(p')}{\sqrt{\varepsilon_{p'}^2 + C^2(p')}}.$$

Располагая решением для коэффициентов u_p и v_p , получаем уже знакомые нам выражения для энергии основного состояния

$$E_0 = \langle 0 | \mathcal{H}' | 0 \rangle = U = \sum_{\vec{p}} \left[\varepsilon_p - \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)} \right] + \frac{1}{2} \sum_{\vec{p}} \frac{C^2(p)}{\sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}},$$

и для энергии квазичастичных возбуждений с характерной для сверхпроводящего состояния энергетической щелью

$$\varepsilon_p = \langle 0 | \alpha_p \mathcal{H}' \alpha_p^+ | 0 \rangle - \langle 0 | \mathcal{H}' | 0 \rangle = A(p) = \sqrt{\varepsilon_p^2 + C^2(p)}.$$

Аналогичной компенсационной процедурой можно воспользоваться и при анализе системы с электрон-фононным взаимодействием (то

есть до перехода к эффективному четверному гамильтониану) уже во втором порядке теории возмущений, основанной на использовании в качестве нулевого гамильтониана \tilde{H}_0 диагональной формой по отношению к слегка «поворнутым» с помощью $(u-v)$ -преобразования операторам α_p и β_p и фононным операторам b_q . Характерно, что компенсируя возникающие от части гамильтониана

$$B(p)(\alpha_p^+ \beta_p^+ + \beta_p \alpha_p)$$

опасные знаменатели вкладом от второго порядка по константе электрон-фононного взаимодействия, мы внесем в рассмотрение именно тот знаменатель

$$(E_{p+q} - E_p + \omega(q))^{-1},$$

который появился у нас в § 1, п. 7 в процессе исключения электрон-фононного взаимодействия и введения эффективного четверного взаимодействия

$$\nu(\vec{p} + \vec{q}, \vec{p}, \vec{q}) = -\frac{f^2(q)}{E_{p+q} - E_p + \omega(q)} = -\frac{2\gamma^2}{nMc^2} \cdot \frac{\omega(q)}{E_{p+q} - E_p + \omega(q)},$$

где $\omega(q) = cq$. Заметим в связи с этим, что эффективное притяжение, соединяющее в пары электроны (\vec{p}, \uparrow) и $(-\vec{p}, \downarrow)$, определяется предельным при $q \rightarrow 0$ выражением (см. § 2, п. 1)

$$J(\vec{p}, \vec{p}') = -\nu(|-\vec{p}|, |\vec{p}'|, |\vec{p}' - \vec{p}|) > 0,$$

которое в чистом фрелиховском варианте электрон-фононного взаимодействия, когда $f^2(q) \sim cq$, в пределе $q \rightarrow 0$, т. е. $|\vec{p}' - \vec{p}| \rightarrow 0$, не расходится

$$J(\vec{p}, \vec{p}') = \frac{2\gamma^2}{nMc^2} \cdot \frac{c|\vec{p} - \vec{p}'|}{E_p - E_{p'} + c|\vec{p} - \vec{p}'|} \cong \frac{\gamma^2 m}{nMcp_F}$$

(мы учли здесь, что $E_p - E_{p'} \cong \frac{p_F(p - p')}{m}$ и $\frac{p_F}{mc} \sim 10^4 \gg 1$).

Однако, как мы отметили в ч. 1, § 4, п. 4, установленный Ф. Блохом закон для низкотемпературного поведения удельного сопротивления нормального электронного газа $\rho \sim \theta^5$, обусловленного целиком фрелиховским электрон-фононным взаимодействием, на практике не выполняется, $\rho_{\text{эксп}} \sim \theta^\alpha$, где $\alpha < 5$, т. е. структура реальной

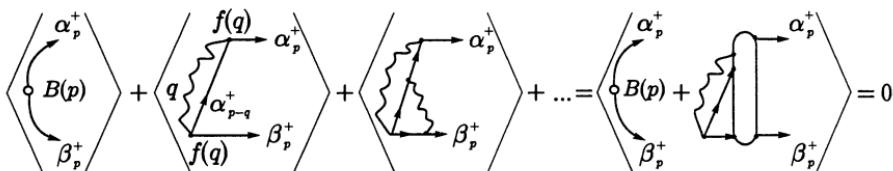


Рис. 12.1. Схематическое изображение компенсационной процедуры в системе с электрон-фононным взаимодействием (подробно размечена диаграмма, компенсирующая $B(p)$ во втором порядке по $f(q)$)

зависимости величины $f^2(q)$ от импульса ниже первой степени по q , и компенсации «опасного» знаменателя величиной $f^2(q)$ не происходит.

Несмотря на то, что компенсационная процедура выглядит проще использованной нами в § 2 и как бы быстрее приводит к тем же результатам для щели $C(p)$, энергий основного и возбужденных состояний системы, необходимо отметить, что она — бестемпературная, так как целиком основывается на квантово-механической теории возмущений, и наконец, компенсация в существующем варианте ее осуществления проведена только в низшем ее порядке, хотя совершенно ясно, что компенсация «вредного» действия оператора $B(p)(\alpha_p^+\beta_p^++\beta_p\alpha_p)$ как и вариационная процедура, не является регулярным методом, кроме того, она должна включать и более высокие порядки по электрон-фононному взаимодействию (см. рис. 12.1).

Мы не будем здесь приводить всю эту в целом понятную, но технически громоздкую процедуру, ограничиваясь сделанными выше замечаниями и памятуя, что в конечном счете при доведении расчетов до конца нам по необходимости все равно приходится использовать модельные представления о характере процессов взаимодействия в рассматриваемой системе.

Глава 13

Общая структура возбужденных состояний сверхпроводящего и нормального электронного газа в металлах

В заключение этой части лекций обсудим в общих чертах вопрос о зависимости энергий возбужденных состояний электронного газа в металлах от переносимых ими импульсов. Чтобы не загромождать наше рассмотрение математическими подробностями, используем полученные выше результаты для системы с модельным взаимодействием пар частиц $J(\vec{p}, \vec{p}') = J \theta(\vec{p}) \theta(\vec{p}')$ и будем полагать температуру равной нулю.

Зависимость энергетической щели в этой модели весьма грубо аппроксимируется ступенчатой функцией

$$C(p) = \Delta\theta(\vec{p}) = \begin{cases} \Delta & \text{в случае } |\epsilon_p| = \left| \frac{p_F p}{m} \right| < \omega, \quad \text{или} \quad |p| < \frac{\Delta p}{2}; \\ 0 & \text{в случае } |\epsilon_p| > \omega, \quad \text{или} \quad |p| > \frac{\Delta p}{2}, \end{cases}$$

где, как мы указали ранее, $\Delta p/p_F = \omega/2\epsilon_F \sim 10^{-4}$. В связи с этой оценкой заметим кстати, что так как $2\epsilon_F \sim 10^5 - 10^6$ К, то предельная величина $\omega \sim 10^{-4} 2\epsilon_F \sim 10 - 10^2$ К, что составляет только длинноволновую часть фононного спектра (дебаевская частота $\omega_2 \sim 10^2 - 10^3$ К) и оправдывает тем самым фрелиховскую модель электрон-фононного взаимодействия (см. ч. 1, § 4). Отдавая себе отчет в том, что подобного ступенчатого поведения динамических величин в физическом мире не бывает и на самом деле величина щели $C(p)$ должна достаточно плавно сходить на нет при $p \rightarrow \Delta p/2$, мы будем использовать эту модель, помня, что именно она помогла нам преодолеть все трудности по решению уравнения (*) и расчету характеристик сверхпроводящей системы.

Спектр индивидуальных возбуждений для нормальной ферми-системы вблизи границы Ферми определяется выражением

$$\epsilon_q = \frac{(p_F + q)^2}{2m} - \frac{p_F^2}{2m} \cong \frac{(p_F q)}{2m}$$

в случае $q > \Delta p/2$ (или $|\epsilon_q| > \omega$), а в сверхпроводящем состоянии — использованной нами в § 3, п. 2 параболической аппроксимацией

$$\epsilon(q) = \sqrt{\epsilon_q^2 + \Delta^2} \cong \Delta + \frac{q^2}{2M} = \Delta + \frac{p_F}{2m\Delta p} q^2$$

в случае $q < \Delta p/2$. Нестыковка этих формул (см. рис. 7.1) в точке $q = \Delta p/2$ обязана грубой ступенчатой аппроксимации величины $C(p) = \Delta\theta(\vec{p})$, о которой мы говорили выше.

Помимо индивидуальных в рассматриваемой системе существуют коллективные возбуждения, из которых мы остановимся только на продольных колебаниях плотности. Для нормального состояния электронного газа, когда возбуждения вырожденной системы имеют частично-дырочный характер, особенность фурье-образа кулоновского взаимодействия составляющих его частиц

$$\nu(q) = \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{q^2}$$

«поднимает» энергию возбужденных колебаний плотности с нуля при $q = 0$ до уровня лентгмюровской частоты (см. ч. 1, § 2, п. 2)

$$\omega_0 = \hbar\omega_L = \hbar\sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}} \sim 10 \text{ eV.}$$

Величина этой энергии в масштабе $\Delta \sim 10 \text{ K} \sim 10^{-3} \text{ eV}$ оказывается весьма значительной, так как $\Delta/\omega_0 \sim 10^{-4}$.

В диапазоне $q < \Delta p/2$ кулоновское взаимодействие, как мы показали в § 6, подавлено, и плазменные колебания возникнуть уже не могут. Вместо них колебания плотности сверхпроводящего электронного газа приобретают характер акустических, энергетический спектр возбуждений которых $\tilde{\omega}(q) = \tilde{c}q$ может реализоваться, не затухая, только вне области непрерывного спектра щелевых возбуждений индивидуального типа, т. е. в области, лежащей ниже энергетической щели $\tilde{\omega}(q) < \Delta$.

Чтобы убедиться в этом, оставаясь в рамках модельных представлений о структуре функции $J(\vec{p}, \vec{p}')$, воспользуемся приемом, основанном на использовании связи скорости распространения длинноволновых (т. е. в приближении сплошной среды) колебаний плотности в линеаризованном (т. е. для случая малых колебаний вблизи состояния равновесия) гидродинамическом подходе к этому вопросу, именно

$$\tilde{c}^2 = \frac{\partial P}{\partial \rho},$$

где P — термодинамическое давление, а $\rho = mN/V$ — массовая плотность (согласно III началу термодинамики в случае $\theta = 0$ изотермический и адиабатический модули упругости совпадают).

Итак, будем исходить из полученного нами в § 3 выражения для свободной энергии Ψ электронного сверхпроводящего газа в случае $\theta = 0$,

$$\Psi = \frac{\rho V}{J} \cdot 2 \int_0^\omega (\xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}) d\xi + \frac{V}{J} \Delta^2,$$

и рассчитаем первую и вторую производные этой величины по объему V . Имеем

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi}{\partial V} &= \frac{\rho}{J} \cdot 2 \int_0^\omega (\xi - \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}) d\xi + \frac{\Delta^2}{J} + \frac{V}{J} \left(1 - \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) \frac{\partial \Delta^2}{\partial V}; \\ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} &= \frac{1}{J} \left(1 - \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) \frac{\partial \Delta^2}{\partial V} + \\ &+ \frac{1}{J} \left(1 - \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} + V \frac{\partial^2 \Delta^2}{\partial V^2} \right) + \\ &+ \frac{V}{J} \rho \frac{1}{2} \int_0^\omega \left(\frac{1}{\xi^2 + \Delta^2} \right)^{3/2} d\xi \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right)^2. \end{aligned}$$

В силу условия минимума потенциала Ψ по отношению к величине Δ^2 (уравнение (*) в случае $\theta = 0$),

$$\frac{\partial \Psi(\Delta^2)}{\partial \Delta^2} = \frac{V}{J} \left(1 - \rho \int_0^\omega \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi \right) = 0,$$

в выражении для $\partial^2 \Psi / \partial V^2$ остается только последнее слагаемое. Стоящий в нем интеграл легко рассчитывается,

$$\frac{1}{\Delta^2} \int_0^{\omega/\Delta} \left(\frac{1}{x^2 + 1} \right)^{3/2} dx = \frac{1}{\Delta^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\Delta^2}{\omega^2}}} \simeq \frac{1}{\Delta^2} \left(1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{\Delta^2}{\omega^2} \right) \simeq \frac{1}{\Delta^2}$$

(мы учли здесь, что $\frac{\Delta}{\omega} \sim 10^{-4}$), и мы получаем

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} = \frac{V}{J} \cdot \frac{\rho}{2\Delta^2} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right)^2.$$

Выполнив этот предварительный расчет, обратимся к нашему исследованию. Имеем для квадрата скорости распространения акустических колебаний в среде

$$\tilde{c}^2 = \frac{\partial P}{\partial mn} = - \frac{V^2}{mN} \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{V^2}{mN} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} = \frac{V^2}{mN} \frac{V}{J} \frac{\rho}{2\Delta^2} \left(\frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right)^2,$$

где мы учли, что давление в системе связано со свободной энергией соотношением $P = -\partial \Psi / \partial V$.

Чтобы рассчитать производную $\partial \Delta^2 / \partial V$, учтем, что согласно § 3, п. 2 и зависимости параметра ω от плотности $n = N/V$,

$$\Delta^2 = 4\omega^2 e^{-2/\rho}, \quad \omega \sim \left(\frac{N}{V} \right)^{1/3},$$

$$\frac{\partial \omega^2}{\partial V} = -\frac{2}{3} \cdot \frac{\omega^2}{V}, \quad \left| \frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right| = \frac{2}{3} \cdot \frac{\Delta^2}{V};$$

(мы учли, что дебаевская частота $\omega_D = \left(\frac{N 6\pi^2 c^3 \hbar^3}{V} \right)^{1/3}$, а величина ω составляет ее часть, $\omega < \omega_D$). Поэтому имеем

$$\tilde{c} = \sqrt{\frac{\rho}{V} \frac{1}{2nm}} \cdot \frac{V}{\Delta} \left| \frac{\partial \Delta^2}{\partial V} \right| = \sqrt{\frac{\rho}{V} \frac{1}{2nm}} \cdot \frac{2}{3} \Delta.$$

Вспоминая, что

$$\frac{\rho}{\tau} = \frac{mp_F}{2\pi^2 \hbar^3}, \quad \frac{N}{V} = n = \frac{p_F^3}{\hbar^3 3\pi^2},$$

получаем окончательно для скорости распространения продольной акустической волны

$$\tilde{c} = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \frac{\Delta}{p_F} = \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot v_0 \cong 0,577 v_0,$$

где v_0 — критическая скорость (см. § 1, п. 4) движения электронной системы, находящейся в сверхпроводящем состоянии.

Общая схема дисперсионных зависимостей энергий возбужденных состояний упомянутых выше типов от импульса q представлена на рис. 13.1.

Изображенная на этом рисунке схема имеет один существенный недостаток: энергия возбужденных состояний электронного газа

$$\epsilon(q) = \sqrt{\epsilon_q^2 + C^2(q)}$$

в точке $q = \Delta p/2$ разрывна, что не соответствует здравому смыслу и общему виду этой зависимости, приведенному на рис. 13.1. Этот дефект связан не столько с принятием мультиплекативной модели взаимодействия

$$J(\vec{p}, \vec{p}') = J \theta(\vec{p}) \theta(\vec{p}'),$$

благодаря чему стало возможным осуществить качественное исследование уравнения (*) для энергетической щели $C(p)$, сколько с предположением, что сосредоточенная в области $|\vec{q}| < \Delta p/2$ вблизи границы Ферми величина $\theta(\vec{p})$, заранее определяющая зависимость величины $C(p)$ от импульса, имеет разрывную столообразную форму.

В микроскопической теории (если она исходит из физических принципов, а не откровенно модельная), а тем более в квантовой

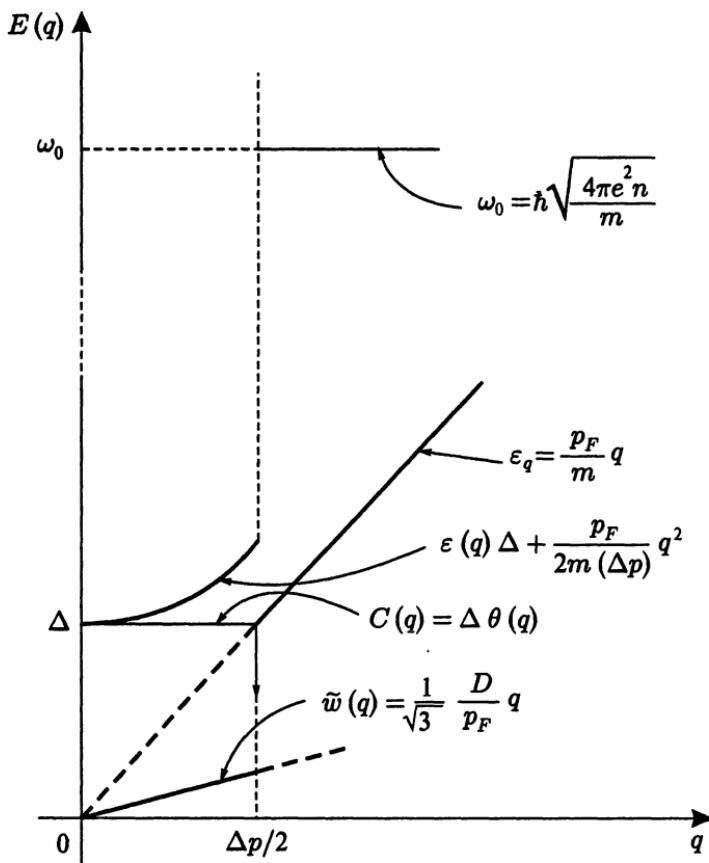


Рис. 13.1. Схема зависимостей от импульса $q = p - p_F$ энергий одночастичных возбуждений и коллективных продольных колебаний, характерных для электронного газа в металле в случае сверхпроводящего ($\Delta \neq 0, q < \Delta p/2$) и нормального ($\Delta = 0, q > \Delta p/2$) его состояний для упрощенной модели взаимодействия $J(\vec{p}, \vec{p}') = J\theta(\vec{p})\theta(\vec{p}')$ (ввиду того, что $\omega_0/\Delta \sim 10^4$, величина плазменной системы ω_0 помещена на схеме условно)

механике в принципе не бывает вертикальных скачков динамических величин, поэтому для сосредоточенной около $p = p_F$ функции $\theta(\vec{p})$ разумнее было бы предложить сглаженную конструкцию типа

$$\theta(q) = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{q^2}{(\Delta p/2)^2} \right\}, \quad \text{или} \quad \theta(q) = \frac{\cos^2 \pi q}{\Delta p},$$

которая обеспечивала бы непрерывную зависимость $\varepsilon(p)$ от импульса в области границы Ферми. Подобное «усовершенствование» значительно усложнило бы математическую обработку искалеченного уравнения (*) и расчет Ψ , но в качественном смысле оно вряд ли изменило бы те основные результаты, которые были получены с использованием простейшей модели $\theta(q)$, не говоря уже о том, что при этом сохранился бы неприятный осадок феноменологической подгонки под «реальность» зависимости величины $C(p)$ от импульса, которая на самом деле должна определяться в результате решения основного неиспорченного уравнения (*) для энергетической щели.

Глава 14

Критерий возможного существования явления сверхтекучести в вырожденной ферми-системе с куперовской корреляцией составляющих ее частиц и условие устойчивости нормального ее состояния

В последнем, десятом параграфе этой части, используя опыт, приобретенный в процессе рассмотрения явления сверхпроводимости электронного газа в металлах, исследуем вопрос о возможности сверхтекучего состояния в вырожденных ферми-системах достаточно общего вида. К таким системам можно отнести не только электронный газ, но и системы типа сверхплотных нуклонных образований, именуемых ядерной материией. Если не считать ядра тяжелых элементов, замыкающих периодическую систему Менделеева, в которых число нуклонов более двухсот и которые с целым рядом серьезных оговорок можно полагать изолированными «кусочками» равновесной ядерной материи, то в земных условиях иных систем подобного типа просто нет. Однако, эволюция звездных систем предусматривает существование сверхплотных нуклонных образований, глубоко вырожденных, находящихся в состояниях, близких к квазиравновесному и поэтому допускающих использование для их описания методов квантовой статистики.

§ 1. Моделирование исходного гамильтониана

Оставаясь вследствие недостаточной осведомленности о деталих этих объектов в рамках модельных представлений, рассмотрим систему, в гамильтониане которой выделена часть, соответствующая учету взаимодействия частиц с противоположно направленными

импульсами (т. е. та основная часть \mathcal{H}' , которая в предыдущем исследовании электронного газа определяла эффект сверхпроводимости)

$$\begin{aligned}\mathcal{H} = & \sum_{\vec{p}\sigma} (E(p) - \mu) a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \\ & + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{p}\vec{p}'\sigma_1\sigma_2\sigma'_1\sigma'_2} \nu(|\vec{p}, \vec{p}'| \sigma_1 \sigma_2 \sigma'_1 \sigma'_2) a_{p\sigma_1}^+ a_{-p\sigma_2}^+ a_{-p'\sigma'_2} a_{p'\sigma'_1},\end{aligned}$$

причем будем полагать, что существует эффективное значение энергии частицы $E(p)$, обязанное сильному взаимодействию ее с другими частицами системы, так что эффекты «регулярного» их взаимодействия рассчитываемые, например, с помощью традиционной теории возмущений по константе этого взаимодействия, уже учтены в структуре функции $E(p)$. Для нормальных состояний такой системы учет взаимодействия частиц с противоположно направленными импульсами не эффективен, так как в предельном статистическом случае $V \rightarrow \infty$, $v = V/N = \text{const}$ все матричные элементы от такого взаимодействия, рассчитываемые с помощью собственных функций нулевого гамильтонiana обращаются в ноль, и свойства системы определяются первым слагаемым гамильтонiana \mathcal{H} , представляющим идеальный ферми-газ со спектром энергий $E(p)$. Для «сверхтекучего» же состояния это взаимодействие, как мы убедились на примере электронного газа, оказывается принципиально существенным.

Используя предложенную модель ядерной материи, для которой нормальное ее состояние ассоциируется с состоянием вырожденного идеального ферми-газа, выясним при каких условиях для нее существует возможность сверхтекучего состояния при нулевой и конечных значениях ее температуры.

Не конкретизируя вид функции $E(p)$, а также взаимодействия ν , и оставаясь в рамках формального исследования, обозначим парное значение импульсов $(\vec{p}, -\vec{p})$ одним символом \vec{q} , введя дополнительный индекс $\tau = \pm 1$, так чтобы $(\vec{q}, +1) = \vec{p}$ и $(\vec{q}, -1) = -\vec{p}$, объединив его со спиновым индексом $\sigma = \pm 1$ в общий дискретный индекс $s = (\sigma, \tau)$, принимающий четыре значения

$$s = (++), (+-), (- -), (-+).$$

Тогда, опуская ради упрощения записей векторное обозначение величины \vec{q} и не ставя запятых между величинами q и s (эти запятые в написании интерферируют с индексами 1 и 2 и создают путаницу), представим гамильтониан рассматриваемой системы в виде

$$\mathcal{H} = \sum_{qs} \epsilon(q) a_{qs}^+ a_{qs} + \frac{1}{2V} \sum_{qq' s_1 s_2 s'_1 s'_2} I(qq'|s_1 s_2 s'_2 s'_1) a_{qs_1}^+ a_{qs_2}^+ a_{q's'_2} a_{q's'_1},$$

где, как всегда, $\epsilon(q) = E(q) - \mu$, т. е. энергия частиц отсчитывается от уровня химического потенциала (в рассматриваемом случае — фактически от уровня энергии Ферми), а условие фермиености операторов рождения и уничтожения налагает общие условия на, в общем случае, нелокальное взаимодействие частиц,

$$\begin{aligned} I(q q'|s_1 s_2 s'_2 s'_1) &= I^*(q' q|s'_1 s'_2 s_2 s_1) = \\ &= -I(q q'|s_1 s_2 s'_1 s'_2) = -I(q q'|s_2 s_1 s'_2 s'_1). \end{aligned}$$

§ 2. Разделение $(u-v)$ -преобразованного гамильтониана на части

Следуя программе, реализованной при рассмотрении электронного газа, произведем каноническое $(u-v)$ -преобразование исходных операторов рождения и уничтожения

$$a_{qs} = \sum_{s'} \{ u(qss') \alpha_{qs'} + v(qss') \alpha_{qs'}^+ \},$$

коэффициенты которого удовлетворяют дополнительным условиям

$$\mathfrak{L}(qss') = \sum_{s''} \{ u^*(qss'') u(qs's'') + v^*(qss'') v(qs's'') \} = \delta_{ss'},$$

$$\mathfrak{M}(qss') = \sum_{s''} \{ u(qss'') v(qs's'') + v(qss'') u(qs's'') \} = \mathfrak{M}^*(qss') = 0,$$

обеспечивающим фермиеность новых операторов рождения и уничтожения α_{qs}^+ и α_{qs} . Тогда, выполнив элементарную подстановку, можно представить гамильтониан системы в виде

$$\mathcal{H} = U + \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' + \mathcal{H}'',$$

где после введения величины $C(gs_1s_2)$, равной

$$\begin{aligned} C(gs_1s_2) &= -C(gs_2s_1) = \\ &= \frac{1}{2V} \sum_{q's'_1s'_2} I(qq'|s_1 s_2 s'_2 s'_1) \sum_{s'''} u(q's'_2 s''') v(q's'_1 s'''), \end{aligned}$$

и оператора $\Lambda_q(s_1s_2)$, квадратичного по новым операторам рождения и уничтожения,

$$\begin{aligned} \Lambda_q^+(s_1s_2) &= \sum_{s'_1s'_2} \left[u^*(qs_1s'_1) u^*(qs_2s'_2) \alpha_{qs'_1}^+ \alpha_{qs'_2}^+ + \right. \\ &\quad + v^*(qs_1s'_1) v^*(qs_2s'_2) \alpha_{qs'_1} \alpha_{qs'_2} + \\ &\quad \left. + (u^*(qs_1s'_1) v^*(qs_2s'_2) - v^*(qs_1s'_1) u^*(qs_2s'_2)) \alpha_{qs'_1}^+ \alpha_{qs'_2} \right], \end{aligned}$$

отдельные части гамильтонiana \mathcal{H} можно представить во вполне обозримом виде, именно, безоператорной части

$$U = \sum_{qss'} \varepsilon(q) v^*(qss') v(qss') + \sum_{qs_1s_2} C(gs_1s_2) \sum_{s''} v^*(gs_1s'') u^*(gs_2s''),$$

диагональной квадратичной по операторам α формы

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_{qs's''} \left\{ \varepsilon(q) \sum_s [u^*(qss') u(qss'') - v(qss') v^*(qss'')] + \right. \\ &\quad + \sum_{s_1s_2} (C(gs_1s_2) [u^*(qs_1s') v^*(qs_2s'') - \right. \\ &\quad \left. \left. - v^*(qs_1s') u^*(qs_2s'') + \text{c.c.}]]) \right\} \cdot \alpha_{qs'}^+ \alpha_{qs''}, \end{aligned}$$

недиагональной квадратичной формы

$$\begin{aligned} \mathcal{H}' &= \sum_{qs's''} \sum_{s_1s_2} [C(gs_1s_2) u^*(qs_1s') u^*(qs_2s'') - \\ &\quad - C^*(qs_1s_2) v(qs_1s') v(qs_2s'')] \alpha_{qs'}^+ \alpha_{qs''}^+ + \text{c.c.} \end{aligned}$$

и четверной по операторам α конструкции

$$\mathcal{H}'' = \frac{1}{2V} \sum_{qq' s_1 s_2 s'_2 s'_1} I(qq'|s_1 s_2 s'_2 s'_1) \Lambda_q^+(s_1 s_2) \Lambda_{q'}(s'_1 s'_2).$$

Имея в виду предельный статистический переход $V \rightarrow \infty$, в этой четверной части гамильтониана можно полагать $q \neq q'$, так как учет слагаемого с $q' = q$ даст поправку к результатам, полученным с участием оператора \mathcal{H}_0 в относительном выражении порядка $1/V$.

Определим основное состояние системы, характеризуемой оператором \mathcal{H}_0 , как заполненную сферу Ферми $\psi_0 = |F\rangle$, обладающую свойствами $\alpha_{qs}|F\rangle = 0$, $(\psi_0^*, \psi_0) = \langle F|F\rangle = 1$, и возбужденные состояния над или под ней как «появление» частицы или дырки (вакантного места в заполненной сфере Ферми) $\psi_{qs} = \alpha_{qs}^+|F\rangle$, $(\psi_{qs}^* \psi_{qs}) = \langle F|\alpha_{qs}\alpha_{qs}^+|F\rangle = 1$. Тогда отдельные части гамильтониана \mathcal{H} приобретают соответственный смысл

$$U = (\psi_0^*, \mathcal{H}\psi_0) = \langle F|\mathcal{H}|F\rangle,$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{qs} (\psi_{qs}^*, \mathcal{H}\psi_{qs}) = \sum_{qs} \langle F|\alpha_{qs}\mathcal{H}\alpha_{qs}^+|F\rangle \alpha_{qs}^+ \alpha_{qs} = \sum_{qs} E(qs) \alpha_{qs}^+ \alpha_{qs},$$

где

$$\begin{aligned} E(qs) &= \epsilon(q) \sum_{s'} [u^*(qs's) u(qs's) - v(qs's) v^*(qs's)] + \\ &+ \sum_{s's''} [C(qs's'') (u^*(qs's) v^*(qs''s) - v^*(qs's) u^*(qs''s)) + \text{c.c.}], \end{aligned}$$

а диагональная часть оператора $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 = U + \mathcal{H}' + \mathcal{H}''$, только и необходимая нам в дальнейших вычислениях, приобретает вид

$$\begin{aligned} (\mathcal{H}_1)_{\text{диаг}} &= U + \frac{1}{2V} \sum_{q \neq q'} I(qq'|s_1 s_2 s'_2 s'_1) \times \\ &\times \sum_{s'} \{u^*(qs_1 s') v^*(qs_2 s') - v^*(qs_1 s') u^*(qs_2 s')\} \alpha_{qs'}^+ \alpha_{qs'} \times \\ &\times \sum_{s''} \{u(q's'_1 s'') v(q's'_2 s'') - v(q's'_1 s'') u(q's'_2 s'')\} \alpha_{q's''}^+ \alpha_{q's''}. \end{aligned}$$

§ 3. Постановка вариационной задачи

При проведении оценки термодинамического потенциала

$$\Omega = -\theta \ln \operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}/\theta}$$

с помощью вариационной теоремы Боголюбова

$$\Omega \leqslant \Psi = -\theta \ln \operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}_0/\theta} + \frac{\operatorname{Sp} \{(U + \mathcal{H}' + \mathcal{H}'') e^{-\mathcal{H}_0/\theta}\}}{\operatorname{Sp} e^{-\mathcal{H}_0/\theta}}$$

перейдем при взятии шпуром с весом $e^{-\mathcal{H}_0/\theta}$, как и при аналогичном расчете в случае электронного газа, от чисел заполнения $N_{qs} = \alpha_{qs}^+ \alpha_{qs}^- = 0; 1$ к изинговским символам $\sigma_{qs} = 1 - 2N_{qs} = \pm 1$. Тогда получим

$$\begin{aligned} \Psi &= -\theta \sum_{qs} \ln 2 \operatorname{ch} \frac{E(qs)}{2\theta} + \frac{1}{2} \sum_{qss'} \varepsilon(q) + \sum_{qs} \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{E(qs)}{2\theta} \cdot \frac{1}{V} \times \\ &\quad \times \sum_{q's_1s_2s'_2s'_1} \left\{ I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1) u^*(qs_1s) v^*(qs_2s) \times \right. \\ &\quad \times \left. \sum_{s''} v(q's_1s'') u(q's_2s'') + \text{c.c.} \right\} - \\ &\quad - \frac{1}{2V} \sum_{q \neq q' s_1 s_2 s'_2 s'_1 s' s''} I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1) u^*(qs_1s') v^*(qs_2s') \times \\ &\quad \times v(q's_1s'') u(q's_2s'') \operatorname{th} \frac{E(qs')}{2\theta} \operatorname{th} \frac{E(q's'')}{2\theta}. \end{aligned}$$

Входящие в это выражение значения коэффициентов $(u-v)$ -преобразования определяются согласно вариационному принципу из условия минимума величины $\Psi(u, v)$ при соблюдении дополнительных условий, обеспечивающих каноничность преобразования исходных операторов a^+ и a в операторы α^+ и α ,

$$\mathfrak{L}(qss') = \delta_{ss'}, \quad \mathfrak{M}(qss') = \mathfrak{M}^*(qss') = 0.$$

Переводя решение этой вариационной проблемы на уровень задачи на безусловный экстремум, введем множители Эйлера $\lambda_{qss'}$ и $\mu_{qss'}$

и определим расширенный функционал

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}(u, v | \lambda, \mu) &= \Psi(u, v) + \sum_{qss'} \left\{ \lambda_{qss'} \mathfrak{L}_{qss'} + (\mu_{qss'} \mathfrak{M}_{qss'} + \text{c.c.}) \right\} = \\ &= \sum_{qss'} \lambda_{qss'} \sum_{s''} \left\{ u^*(qss'') u(qs's'') + v^*(qss'') v(qs's'') \right\} + \\ &\quad + \sum_{qss'} \left[\mu_{qss'} \sum_{s''} \left\{ u(qss'') v(qs's'') + v(qss'') u(qs's'') \right\} + \text{c.c.} \right].\end{aligned}$$

Варьируя этот функционал по величинам u , u^* , v , v^* , λ , μ и μ^* со всеми их индексами, полагая их вариации друг от друга независимыми и приравнивая к нулю первую его вариацию по всем этим величинам, $\delta\tilde{\Psi}(u, v | \lambda, \mu) = 0$, можно получить систему необходимых уравнений для определения наилучших значений $(u-v)$ -коэффициентов, обеспечивающих минимальную величину термодинамического потенциала системы. Эти уравнения в общем виде очень громоздки. Более того, даже самые смелые аппроксимации модельного взаимодействия $I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1)$, о котором фактически мы мало что знаем, но которые могли бы значительно упростить эти уравнения, не гарантируют получения их в виде, доступном для исследования их окончательных решений (в этом мы уже убедились, решая ту же проблему при рассмотрении сверхпроводящего состояния электронного газа в металлах).

§ 4. Выделение тривиального решения

Заметим теперь, что все наше рассмотрение, начиная с введения $(u-v)$ -преобразования вплоть до невыписанных уравнений, определяющих коэффициенты этого преобразования, допускают тривиальное решение, соответствующее в нашей модели нормальному состоянию вырожденной идеальной ферми-системы и имеющее смысл сохранения исходных операторов a^+ и a для значений импульсов вне сферы Ферми (решение $u = 1$, $v = 0$) и переобозначения операторов появления и заполнения вакантных мест внутри сферы Ферми в операторы рождения и уничтожения дырок (решение $u = 0$, $v = 1$ для импульсов, меньших фермиевского p_F). Если

ввести ступенчатую функцию

$$n_q = \begin{cases} 1 & \text{в случае } q < p_F, \\ 0 & \text{в случае } q > p_F, \end{cases}$$

то это тривиальное решение можно представить в виде

$$u(qss') = (1 - n_q) \delta_{ss'}, \quad v(qss') = n_q \delta_{ss'}.$$

Подстановка этого решения в выражение для $E(qs)$ и упомянутые выше выписанные подробно формулы дает

$$E(qs) = \varepsilon(q)[(1 - n_q) - n_q] = (1 - 2n_q)\varepsilon(q) = |\varepsilon(q)|,$$

или в более привычном виде, принятом в теории вырожденного идеального ферми-газа

$$\begin{aligned} |\varepsilon(p)| = |E(p) - \mu| &\cong \frac{\partial E(p)}{\partial p} \Big|_{p=p_F} \times |p - p_F| = \frac{pc^2}{\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}} |p - p_F| \cong \\ &\cong \begin{cases} \frac{p_F}{m} |p - p_F| & \text{в случае } p_F \ll mc, \\ c|p - p_F| & \text{в случае } p_F \gg mc, \end{cases} \end{aligned}$$

а также

$$\mu(qss') = 0,$$

$$\lambda(qss') = \varepsilon(q) \frac{1 - 2n_q}{2} \cdot \operatorname{th} \frac{E(qs)}{2\theta} \delta_{ss'} = \frac{1}{2} \cdot |\varepsilon(q)| \cdot \operatorname{th} \frac{|\varepsilon(q)|}{2\theta} \delta_{ss'}.$$

§ 5. Критерий возникновения устойчивого сверхтекучего состояния системы

Отказавшись ввиду чрезмерной сложности и громоздкости от исследования свойств и условий устойчивости нетривиального (сверхтекучего или сверхпроводящего) состояния ферми-системы, в предложенной не конкретизированной общей постановке (в частном варианте это исследование было проведено в предыдущих параграфах для электронного газа в металлах), сосредоточим наше

внимание на решении в смысловом отношении обратной задачи. Именно, уже располагая тривиальным решением, поставим вопрос об устойчивости соответствующего ему нормального состояния такой ферми-системы, для которой не исключена возможность за счет учета взаимодействия типа $I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1)$ возникновения и существования нетривиального сверхтекущего состояния. Чтобы решить этот вопрос, необходимо рассчитать вторую вариацию потенциала $\tilde{\Psi}(u, v|\lambda, \mu)$, соответствующую тривиальному решению для коэффициентов u и v . Используя полученное на основе вариационного принципа выражение для $\Psi(u, v)$, после несложных выкладок с учетом структуры тривиального решения получаем

$$\begin{aligned} 2(\delta^2\tilde{\Psi})_{\text{норм}} = & \sum_{qss'} 2|\varepsilon(q)| \operatorname{th} \frac{|\varepsilon(q)|}{2\theta} (n_q \delta u^*(qs's) + (1 - n_q) \delta v^*(qss')) \times \\ & \times (n_q \delta u(qs's) + (1 - n_q) \delta v(qss')) + \\ & + \frac{1}{V} \sum_{qq's_1s_2s'_2s'_1} I(qq'|s_1s_2s'_2s_1) \operatorname{th} \frac{|\varepsilon(q)|}{2\theta} \operatorname{th} \frac{|\varepsilon(q')|}{2\theta} \times \\ & \times (n_q \delta u^*(qs_1s_2) + (1 - n_q) \delta v^*(qs_2s_1)) \times \\ & \times (n_{q'} \delta u(q's'_1s'_2) + (1 - n_{q'}) \delta v(q's'_2s'_1)) - \sum_{qs} \frac{\varepsilon^2(q)}{4\theta} \left(\operatorname{ch} \frac{|\varepsilon(q)|}{2\theta} \right)^{-2} \times \\ & \times \{(1 - n_q)(\delta u(qss) + \delta v^*(qss)) + n_q(\delta v(qss) + \delta v^*(qss))\}^2. \end{aligned}$$

Последнее слагаемое, однако, равно нулю в силу условий каноничности $(u-v)$ -преобразования. Действительно, из условия нормировки тривиального решения имеем в случае $s' = s$

$$\sum_{s''} \{(1 - n_q)(\delta u(qss'') + \delta u^*(qss'')) + n_q(\delta v(qss'') + \delta v^*(qss''))\} = 0,$$

откуда, учитывая, что $(1 - n_q)n_q = 0$, получаем

$$(1 - n_q)(\delta u(qss) + \delta u^*(qss))^2 + n_q(\delta v(qss) + \delta v^*(qss))^2 = 0.$$

Чтобы представить оставшуюся часть второй вариации потенциала Ψ в более компактном виде, введем пропорциональную вариациям

коэффициентов u^* и v^* в областях $q < p_F$ и $q > p_F$ величину

$$\psi^*(qs_1s_2) = \{n_q\delta u^*(qs_1s_2) + (1 - n_q)\delta v^*(qs_1s_2)\} \operatorname{th} \frac{|\varepsilon(q)|}{2\theta} = \\ = \operatorname{th} \frac{|\varepsilon(q)|}{2\theta} \begin{cases} \delta u^*(qs_1s_2) & \text{в случае } q < p_F, \\ \delta v^*(qs_1s_2) & \text{в случае } q > p_F \end{cases}$$

и ей сопряженную $\psi(qs_1s_2)$. Тогда выражение второй вариации потенциала $\tilde{\Psi}$ для тривиального решения приобретает вид квадратичной формы

$$2(\delta^2\tilde{\Psi})_{\text{норм}} = \sum_{qs_1s_2} \left\{ 2|E(q) - \mu| \operatorname{cth} \left(\frac{|E(q) - \mu|}{2\theta} \right) \psi(qs_1s_2) + \right. \\ \left. + \frac{1}{V} \sum_{q's'_2s_1} I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1) \psi(q's'_1s'_2) \right\} \psi^*(qs_1s_2).$$

Нормальное состояние ферми-системы будет устойчивым в случае, если $\delta^2\tilde{\Psi} > 0$, т. е. в случае, когда возникшая квадратичная форма будет положительно определена, а это может реализоваться тогда (и только тогда), когда все собственные значения $E_{qs_1s_2}$ уравнения

$$|E(q) - \mu| \operatorname{cth} \left(\frac{|E(q) - \mu|}{2\theta} \right) \psi(qs_1s_2) + \\ + \frac{1}{2V} \sum_{q's'_2s'_1} I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1) \psi(q's'_1s'_2) = E_{qs_1s_2} \psi(qs_1s_2)$$

окажутся положительными. Действительно, в этом случае образовавшаяся по отношению к величинам ψ^* и ψ квадратичная форма становится диагональной

$$(\delta^2\tilde{\Psi})_{\text{норм}} = \sum_{qs_1s_2} E_{qs_1s_2} \psi^*(qs_1s_2) \psi(qs_1s_2),$$

и она будет положительно определена только тогда, когда все значения $E_{qs_1s_2} > 0$. Если же в спектре собственных значений $E_{qs_1s_2}$ имеется хотя бы одно значение меньшее нуля, то устойчивой ока-

зываются уже другая, не нормальная, а та, которая соответствует нетривиальному решению уравнений для $(u-v)$ -коэффициентов.

Заметим попутно, что варьируя условие $\mathfrak{M}(qs_1s_2) = 0$ по коэффициентам u и v с учетом их тривиального решения,

$$\delta u(qs_1s_2)(1 - n_q) + n_q \delta v(qs_1s_2) + \delta v(qs_1s_2)(1 - n_q) + n_q \delta u(qs_1s_2) = 0,$$

получим, что при рассмотрении проблемы собственных значений «уравнения» для $\psi(qs_1s_2)$ необходимо учитывать, что «пробная функция» $\psi(qs_1s_2)$ удовлетворяет условию антисимметрии $\psi(qs_1s_2) = -\psi(qs_2s_1)$. Таким образом, полученное из условия устойчивости нормального состояния ферми-системы уравнение для «собственных значений» величин $\psi(qs_1s_2)$, представляющих собой линейные комбинации вариаций коэффициентов $(u-v)$ -преобразования, приобретает явное внешнее сходство с уравнением Шредингера $(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1)\psi = E\psi$ (причем, с температурной зависимостью первого в нем слагаемого, исчезающей при $\theta = 0$), хотя им ни в коей мере не является.

В случае $\theta = 0$ это «квазишредингеровское» уравнение переходит в соотношение, полученное Н. Н. Боголюбовым в 1958 году как критерий существования сверхтекучего состояния ядерного вещества. Полагая, что этот критерий выполняется при $\theta = 0$, получим уравнение для критической температуры θ_0 , при которой сверхтекучая фаза исчезает

$$\begin{aligned} & |E(q) - \mu| \operatorname{cth} \left(\frac{|E(q) - \mu|}{2\theta} \right) \psi(qs_1s_2) + \\ & + \frac{1}{2V} \sum_{q's'_2s'_1} I(qq'|s_1s_2s'_2s'_1) \psi(q's'_1s'_2) = 0. \end{aligned}$$

Собственные значения уравнения для $\psi(qs_1s_2)$ образуют зависящий от температуры спектр значений $E_{qs_1s_2}(\theta)$. Нормальная фаза ферми-системы устойчива, если минимальное из этих значений положительно, $E_{\min}(\theta) > 0$. Если это значение равно нулю, то написанное для этого случая уравнение, т. е. $E_{\min}(\theta_0) = 0$, определяет ту температуру, при которой исчезает устойчивость нормальной фазы и при $\theta < \theta_0$ возникает то устойчивое состояние системы, которое ассоциируется со сверхтекучим состоянием ферми-системы типа ядерной материи или сверхпроводящего электронного газа в металлах.

Приложения

| | |
|---|-----|
| Приложение I | |
| Расчет фермиевских интегралов | 177 |
| Приложение II | |
| Представление вторичного квантования в задачах статистической механики | 180 |
| Приложение III | |
| Теорема о спариваниях | 192 |
| Приложение IV | |
| Вариационная теорема Боголюбова | 195 |
| Приложение V | |
| Ферромагнетик Гейзенберга в вариационном приближении и пример модели, когда это приближение является асимптотически точным решением статистической проблемы | 199 |
| Приложение VI | |
| Основная формула метода перевала | 207 |

Приложение I

Расчет фермиевских интегралов

Рассмотрим интеграл по переменной $\varepsilon = p^2/2m$

$$I_\nu = \int_0^\infty \varepsilon^\nu n(\varepsilon) d(\varepsilon) = \frac{1}{\nu + 1} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial (\varepsilon)} \right) \varepsilon^{\nu+1} d\varepsilon,$$

где

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon - \mu/\theta} + 1}.$$

В области низких температур, когда $\theta/\mu \ll 1$, величина $(-\partial n(\varepsilon)/\partial \varepsilon)$ как производная от слегка размытой в области $\varepsilon \cong \mu$ единичной ферми-ступеньки представляет собой остро сосредоточенную около значения $\varepsilon = \mu$ функцию (см. рис. П1.1). Поэтому учет присутствующей под интегралом функции $\varepsilon^{\nu+1}$ (или какой-либо другой регулярной функции) существенен только в узкой области температурного размытия сферы Ферми.

Введем новую переменную интегрирования

$$x = \frac{(\varepsilon - \mu)}{\theta}.$$

Это преобразование является не только переходом к интегрированию по безразмерной переменной, но и масштабным преобразованием типа растяжки. Имеем

$$\frac{\partial n(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = g(x) dx, \quad g(x) = \frac{e^x}{(e^x + 1)^2} = \left(\frac{1}{2 \operatorname{ch} x/2} \right)^2 = g(-x).$$

И тогда, произведя разложение величины

$$\varepsilon^{\nu+1} = \mu^{\nu+1} \left(1 + \frac{\theta}{\mu} x \right)^{\nu+1},$$

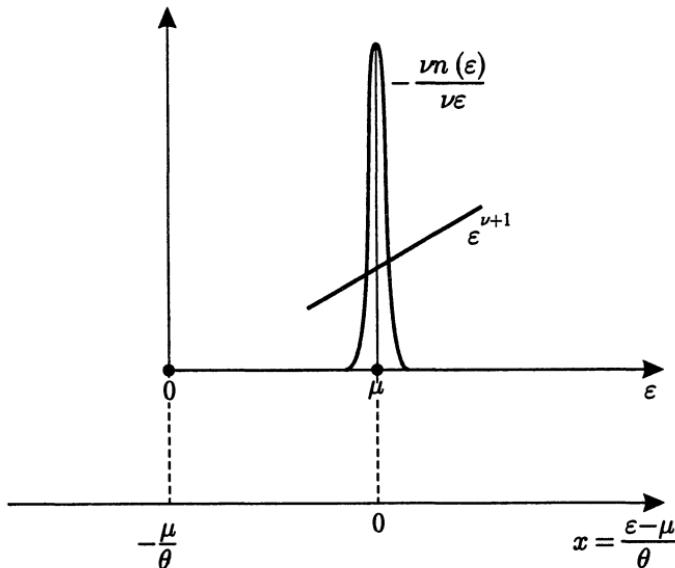


Рис. П1.1. Характерный вид сочетания графиков функций $(-\partial n(\varepsilon)/\partial \varepsilon)$ и $\varepsilon^{\nu+1}$, которое формируют в случае $\theta/\mu \ll 1$ подынтегральное выражение величины I_ν

стоящей под знаком интеграла по переменной x , по степеням θ/μ , получим

$$\begin{aligned} I_\nu &= \frac{\mu^{\nu+1}}{\nu+1} \int_{-\mu/\theta}^{\infty} \left(1 + \frac{\theta}{\mu} x\right)^{\nu+1} g(x) dx = \\ &= \frac{\mu^{\nu+1}}{\nu+1} \int_{-\mu/\theta}^{\infty} \left(1 + (\nu+1) \frac{\theta}{\mu} x + \frac{\nu(\nu+1)}{2} \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 x^2 \dots\right) g(x) dx. \end{aligned}$$

Удерживая только степенное разложение величины I_ν по θ/μ , расширим область интегрирования по переменной x на нефизическую область ее значений

$$-\infty < x \leq -\frac{\mu}{\theta},$$

в которой

$$g(x) \cong e^{-x},$$

т. е. добавим к рассматриваемому интегралу по I_ν величину

$$\begin{aligned} \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^n \int_{-\infty}^{-\mu/\theta} e^{-x} x^n dx &= \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^n (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \int_{-\infty}^{-\mu/\theta} e^{-dx} dx \Big|_{\alpha=1} = \\ &= \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^n (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} e^{-\alpha \mu/\theta} \Big|_{\alpha=1} = \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^n P_n \left(\frac{\mu}{\theta}\right) e^{-\mu/\theta} \ll \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^n, \end{aligned}$$

экспоненциально малую в каждом порядке по n по сравнению с членами, пропорциональными целым степеням параметра θ/μ . Тогда, учитывая численные значения интегралов

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) dx = 1; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)x dx = 0; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)x^2 dx = \frac{\pi^2}{3}; \quad \dots$$

(интегралы, содержащие x^2 и т. д. легко берутся с помощью теоремы о вычетах), получаем асимптотическое разложение искомой величины I_ν по четным степеням безразмерной температуры

$$I_\nu = \int_0^\infty \varepsilon^\nu n(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\mu^{\nu+1}}{\nu+1} \left(1 + \nu(\nu+1) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{\theta}{\mu}\right)^2 + \dots \right),$$

следствием которого являются известные формулы для химического потенциала, удельной внутренней энергии и теплоемкости вырожденного идеального ферми-газа

$$\begin{aligned} \mu &= \varepsilon_F \left(1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F}\right)^2 + \dots \right), \\ \varepsilon &= \frac{3}{5} \varepsilon_F \left(1 + \frac{5}{12} \pi^2 \left(\frac{\theta}{\varepsilon_F}\right)^2 + \dots \right), \\ c_\nu &= \frac{\pi^2}{2} \frac{\theta}{\varepsilon_F} (1 + \dots), \end{aligned}$$

где граничная энергия Ферми

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}.$$

Приложение II

Представление вторичного квантования в задачах статистической механики

Остановимся кратко на смысловых моментах озаглавленного вопроса и на необходимой в проводимых исследованиях рецептуре введения этого представления, отсылая за подробным его изложением к руководству (т. 4, гл. 1, § 3, стр. 41–81).

§ 1. N -частичный базис

Введение представления вторичного квантования в задачах квантовой статистики исходит из построения N -частичного базиса с определенными свойствами симметрии (бозевскими или фермиевскими в зависимости от предполагаемых в дальнейшем исследований), т. е. в постановочной части рассматриваемых проблем еще до конкретной фиксации динамической структуры исследуемой системы (до фиксации конкретного вида гамильтонiana, т. е. до микроскопического задания системы N одинаковых частиц). Таким образом, кинематические особенности многотельной системы оказываются фиксированными заранее в достаточно универсальном варианте, и уже далее при теоретическом рассмотрении каких-либо макроскопических проявлений тех свойств системы, которые непосредственно связаны с наличием динамического взаимодействия частиц системы друг с другом или иными полями, эта «квантовая кинематика» учитывается автоматически.

Так как в статистической механике основные результаты — это средние значения, выражющиеся с помощью операций «взятия шпура» и поэтому не зависящие от представлений, в которых эти шпуры рассчитываются, то в выборе базиса возникает известный произвол, который следует использовать рациональным образом.

Практически этот базис для системы N одинаковых частиц, помещенных в объем V , строится из соответствующим образом симметризованных или антисимметризованных произведений одночастичных функций свободного движения частиц — плоских волн для бозе-частиц, без спина или плоских волн со спиновой функцией для ферми-частиц со спином $1/2$,

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left\{ \frac{i \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\},$$

или

$$\varphi_{\vec{p}\sigma}(\vec{r}, s) = \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) u_s(\sigma) = \Delta(s - \sigma) \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left\{ \frac{i \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\}.$$

Такой выбор базисных функций с математической точки зрения является весьма продуктивным, так как все интегральные свертки с такими функциями приобретают вид интегралов Фурье и их модификаций, которые рассчитываются достаточно элементарно. С другой стороны использование таких базисных функций, являющихся собственными функциями нулевого гамильтониана \mathcal{H}_0 , характеризующего систему невзаимодействующих друг с другом частиц, подготавливает развитие статистической теории возмущений, в которой поправочные к нулевому приближению (к результатам, характеризующим соответствующий идеальный газ), члены представляют собой взятые с гиббсовским весом

$$\rho_0 = \frac{e^{-\mathcal{H}_0/\theta}}{\text{Sp } e^{-\mathcal{H}_0/\theta}}$$

средние значения, рассчитываемые с помощью шпуров по состояниям идеальной системы от соответствующего числа итераций оператора $H_1 = H - H_0$, описывающего в общем гамильтониане системы H взаимодействие ее частиц.

§ 2. Представление базиса в терминах чисел заполнения

Введем вместо трехмерного индекса \vec{p}_i и четырехмерного $\vec{p}_i\sigma_i$ единый символ f_i , а \vec{r}_i и соответственно $\vec{r}_i s_i$ обозначим буквой x_i ($i = 1, 2, \dots, N$). Соответственным образом симметризованные

произведения одночастичных функций $\varphi_{\vec{p}_i}(x_i)$, образующие нормированные N -частичные базисные функции

$$\varphi_{\{f_1, \dots, f_N\}}(x_1, \dots, x_N) = \varphi_{\{f_i\}}(x_1, \dots, x_N),$$

преобразуем от импульсного представления к представлению чисел заполнения. Учитывая все допустимые значения величины f , каждому из них сопоставим целое число $N_f = 0, 1, 2, \dots$, указывающее, сколько раз данное значение f встречается в совокупности индексов $\{f_i\} = f_1, \dots, f_N$. Таким образом каждому индексу базисных функций $\{f_i\}$ (состоящему только из N элементов), сопоставляется набор чисел заполнения $\{N_f\}$ (вообще говоря, бесконечный), сумма ненулевых значений которых подчинена условию N -частичности

$$\sum_f N_f = N.$$

§ 3. Операторы динамических величин в представлении чисел заполнения

Чтобы записать операторы динамических величин в представлении чисел заполнения, расklassифицируем их по характеру динамической аддитивности: оператор аддитивного (или одночастичного) типа имеет вид однократной суммы по индексам частиц,

$$\mathfrak{A} = \mathfrak{A}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i \leq N} A(i),$$

бинарного (или двухчастичного) типа — двойной суммы по индексам частиц,

$$\mathfrak{B} = \mathfrak{B}(1, \dots, N) = \sum_{1 \leq i < j \leq N} B(i, j)$$

и т. д. Обозначая нормированные в N_f -представлении базисные функции в виде дираковских *дра* и *кет*-векторов (т. е. вынося многобуквенный индекс $\{N_f\}$ на основную строку)

$$\Psi_{\{N_f\}}(x_1, \dots, x_N) = | \dots N_{f''} \dots \rangle$$

и рассчитывая с помощью этих функций матричные элементы оператора \mathfrak{A} в представлении чисел заполнения, несложно получить их форму в виде

$$\begin{aligned} \langle \dots N_{f''} \dots | \mathfrak{A} | \dots N'_{f''} \dots \rangle &= \\ &= N \sum_{ff'} (f|A|f') \langle \dots N_{f''} \dots | (f'|\alpha|f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle, \end{aligned}$$

где введено f -представление отдельного слагаемого оператора \mathfrak{A}

$$(f|A|f') = \int \varphi_f^*(x'_1) A(1) \varphi_{f'}(x'_1) dx'_1,$$

а каждый матричный элемент оператора α в f -представлении (т. е. в импульсном представлении) представляет собой оператор в пространстве чисел заполнения, изменяющий на единицу штрихованные числа заполнения с индексами f и f' : $N'_f = N_f - 1$, $N'_{f'} = N_{f'} + 1$ (N -частичность наборов $\{N_{f''}\}$ и $\{N'_{f''}\}$ строго сохраняется), в отношении других значений f'' оставаясь диагональным. Эти операторы целиком составлены из обынтегрированных по всем координатам x_i , включая x'_1 , произведений плосковолновых функций $\varphi_f(x)$ и поэтому не зависят от свойств оператора A , являясь универсальными для всех операторов аддитивного типа \mathfrak{A} . Этот операторный матричный элемент $(f'|\alpha|f)$ в представлении чисел заполнения после проведения указанных интегрирований с учетом ортонормированности одночастичных функций $\varphi_f(x)$ (вследствие чего при интегрировании появляются соответствующие кронекеровские Δ -функции) приобретает вид в случае $f' = f$

$$N \langle \dots N_{f''} \dots | (f|\alpha|f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle = N_f \prod_{f''} \Delta(N_{f''} - N'_{f''})$$

и в случае $f' \neq f$

$$\begin{aligned} N \langle \dots N_{f''} \dots | (f'|\alpha|f) | \dots N'_{f''} \dots \rangle &= \\ &= \sqrt{N_f N_{f'}} \Delta(N_f - 1 - N'_f) \Delta(N_{f'} - N'_{f'} + 1) \prod_{f'' \neq f, f'} \Delta(N_{f''} - N'_{f''}). \end{aligned}$$

Если выполнить аналогичные действия по отношению к оператору типа \mathfrak{B} , то получим аналогичный результат.

$$\langle \dots N_{f''} \dots | \mathfrak{B} | \dots N'_{f''} \dots \rangle = \frac{N(N-1)}{2} \times \\ \times \sum_{f_1 f_2 f'_1 f'_2} (f_1, f_2 | B(1,2) | f'_1, f'_2) \langle \dots N_{f''} \dots | (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) | \dots N'_{f''} \dots \rangle,$$

где

$$(f_1, f_2 | B(1,2) | f'_1, f'_2) = \\ = \int \varphi_{f_1}^*(x'_1) \varphi_{f_2}^*(x'_2) B(1,2) \varphi_{f'_1}(x'_1) \varphi_{f'_2}(x'_2) dx'_1 dx'_2,$$

причем оказывается (редкий случай, когда «двухчастичная» структура представляется в виде комбинации «одночастичных»), что матричный элемент оператора β в f -представлении целиком выражается через несложную комбинацию операторов аддитивного типа α ,

$$N(N-1) \cdot (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) = \\ = N^2 (f'_1 | \alpha | f_1) \cdot (f'_2 | \alpha | f_2) - N \Delta(f'_1 - f_2) \cdot (f'_2 | \alpha | f_1),$$

в связи с чем вся дальнейшая процедура может быть ограничена исследованием свойств только оператора α .

§ 4. Введение операторов рождения и уничтожения

Собственно процедура введения представления вторичного квантования состоит в том, что в матричном элементе оператора $(f' | \alpha | f)$ выделяются операторные части, уменьшающие и увеличивающие числа заполнения $N_{f'}$ и N_f на единицу, не изменяя при этом всех остальных чисел с индексами $f'' \neq f$ и $f'' \neq f'$. В базовом случае (базисные функции составлены из симметризованных произведений функций $\varphi_f(x)$) значения чисел заполнения ничем не ограничены $N_f = 0, 1, 2, 3, \dots$ Определяя матричное представление оператора b_f , представляющего часть оператора $(f' | \alpha | f)$, в виде

$$\langle \dots N'_f \dots | b_f | \dots N_f \dots \rangle = \sqrt{N_f} \Delta(N'_f - N_f + 1) \prod_{f'' \neq f} \Delta(N'_{f''} - N_{f''}),$$

выпишем единственный ненулевой его матричный элемент, имеющий индекс f , опустив для простоты выписывания сохраняющиеся числа $N_{f'}$ с индексами $f' \neq f$. Тогда имеем

$$\langle N_f - 1 | b_f | N_f \rangle = \sqrt{N_f},$$

или в более «операторной» форме

$$b_f |N_f\rangle = \sqrt{N_f} |N_f - 1\rangle.$$

Для эрмитово-сопряженной конструкции $\langle \dots N_f \dots | b_f^+ | \dots N'_f \dots \rangle$ соответственно получается

$$\langle N'_f + 1 | b_f^+ | N'_f \rangle = \sqrt{N'_f + 1},$$

или, опуская штрих,

$$b_f^+ |N_f\rangle = \sqrt{N_f + 1} |N_f + 1\rangle.$$

Эти операторы, изменяющие соответствующие их индексу числа заполнения N_f на единицу, получили названия: b_f — оператор уничтожения и b_f^+ — оператор рождения (хотя при этом никакие частицы с конечной массой в системе не исчезают и не появляются) частиц в состоянии f (т. е. описываемые плоской волной с импульсом \vec{p}). Из приведенных выше формул следуют соотношения

$$b_f^+ b_f |N_f\rangle = N_f |N_f\rangle, \quad b_f b_f^+ |N_f\rangle = (N_f + 1) |N_f\rangle,$$

записываемые традиционно как диагональные комбинации операторов рождения и уничтожения

$$b_f^+ b_f = N_f, \quad b_f b_f^+ = N_f + 1,$$

и характерные для бозе-систем их коммутационные соотношения

$$[b_f, b_{f'}^+] = b_f b_{f'}^+ - b_{f'}^+ b_f = \Delta(f - f'), \quad [b_f, b_{f'}] = [b_{f'}^+, b_f^+] = 0.$$

Соединяя выделенные части оператора $(f'|\alpha|f)$, представленные с помощью операторов b_f и b_f^+ , получаем для него так называемое представление вторичного квантования

$$N(f'|\alpha|f) = b_f^+ b_{f'}.$$

Двухчастичный оператор β в этом же представлении определяется сразу по формуле, устанавливающей его связь с оператором α ,

$$N(N-1) \cdot (f'_1, f'_2 | \beta | f_1, f_2) = b_{f_1}^+ b_{f_2}^+ b_{f'_2} b_{f'_1}.$$

В ферми-случае антисимметризованный по произведениям функций $\varphi_f(x)$ N -частичный базис (представляющий собой $\text{Det} ||\varphi_{f_i}(x_j)||$) при переходе к представлению чисел заполнения ограничивает их значения двумя возможностями $N_f = 0$ или $N_f = 1$ (принцип Паули). Поэтому оператор уничтожения a_f , действуя на число заполнения $N_f = 1$, уменьшает его значение до $N_f = 0$, а его действия на $N_f = 0$ приводят к нулевому результату. Соответственно оператор рождения a_f^+ , действуя на число $N_f = 0$, превращает его в $N_f = 1$, а действуя на $N_f = 1$ дает ноль, так как состояния с $N_f = 2$ запрещены.

Это приводит к отличным от бозе-случая соотношениям

$$\begin{aligned} a_f |N_f\rangle &= N_f |N_f - 1\rangle, & a_f^+ |N_f\rangle &= (1 - N_f) |N_f + 1\rangle; \\ a_f^+ a_f &= N_f, & a_f a_f^+ &= 1 - N_f, \end{aligned}$$

а по отношению к самим операторам a_f и a_f^+ — к соотношениям антисимметрии

$$\begin{aligned} [a_f^+, a_{f'}]_+ &= a_f^+ a_{f'} + a_{f'} a_f^+ = \Delta(f - f'), \\ [a_f a_{f'}]_+ &= [a_{f'}^+ a_f^+]_+ = 0, \quad a_f a_{f'} = a_{f'}^+ a_f^+ = 0. \end{aligned}$$

При этом формулы для операторных матричных элементов $(f'|\alpha|f)$ и $(f'_1 f'_2 | \rho_0 | f_1 f_2)$ внешне остаются прежними при условии сохранения указанной последовательности индексов,

$$\begin{aligned} N(f'|\alpha|f) &= a_f^+ a_{f'}, \\ N(N-1)(f'_1, f'_2 | \rho_0 | f_1, f_2) &= a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f'_2} a_{f'_1}, \end{aligned}$$

поэтому в приложениях операторы рождения и уничтожения в бозе- и ферми-случаях обозначаются буквами a^+ и a , оговаривая при этом характер их коммутационных соотношений.

В результате имеем представления вторичного квантования для операторов типа \mathfrak{A} и \mathfrak{B} ,

$$\begin{aligned}\mathfrak{A} &= \sum_{1 \leq i \leq N} A(i) \longmapsto \mathfrak{A} = \sum_{f f'} (f | A | f') a_f^+ a_{f'}, \\ \mathfrak{B} &= \sum_{1 \leq i < j \leq N} B(i, j) \longmapsto \mathfrak{B} = \sum_{f_1 f_2 f'_1 f'_2} (f_1, f_2 | B | f'_1, f'_2) a_{f_1}^+ a_{f_2}^+ a_{f'_2} a_{f'_1}.\end{aligned}$$

§ 5. Рабочие формулы для операторов динамических величин в представлении вторичного квантования

Приведем, наконец, основные рабочие формулы для наиболее часто используемых в приложениях операторов динамических величин в «импульсном» варианте представления вторичного квантования.

a) *Операторы аддитивного динамического типа \mathfrak{A} .*

Используя плосковолновые функции

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} \exp \left\{ \frac{i \vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\}$$

для расчета матричных элементов $(f | A | f')$ и соотношение

$$\frac{1}{V} \int_V \exp \left\{ \frac{i(\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} d\vec{r} = \Delta(\vec{p} - \vec{p}'),$$

имеем для оператора полного числа частиц в системе

$$N = \sum_{1 \leq i \leq N} 1, \quad A(1) = 1 \longmapsto N = \sum_p a_p^+ a_p,$$

где суммирование производится в бозе-случае по $p = \vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$, а в ферми-случае — по $p = (\vec{p}, \sigma)$, $\sigma \pm 1$.

Для оператора полного импульса системы N частиц имеем

$$\vec{P} = \sum_{1 \leq i \leq N} \vec{p}_i, \quad A(1) = \vec{p}_1 = \frac{\hbar}{\tau} \nabla_i \longmapsto \vec{P} = \sum_p \vec{p} a_p^+ a_p.$$

Для нулевого гамильтониана H_0 (гамильтониана идеальной системы) имеем

$$H_0 = \sum_{1 \leq i \leq N} \frac{p_i^2}{2m},$$

$$A(1) = \frac{p_1^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \mapsto H_0 = \sum_p \frac{p^2}{2m} a_p^+ a_p.$$

Для потенциальной энергии взаимодействия частиц с внешним потенциальным полем $U(\vec{r})$ имеем, вводя фурье-образ функции $U(\vec{r})$,

$$u(q) = \int_V U(\vec{r}) \exp \left\{ -\frac{i \vec{q} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} d\vec{r}, \quad U = \sum_{1 \leq i \leq N} U(\vec{r}_i),$$

$$A(1) = U(\vec{r}_1) \mapsto U = \frac{1}{V} \sum_{pq} u(q) a_p^+ a_{p+q} = \frac{1}{V} \sum_{pq} u^*(q) a_{p+q}^+ a_p,$$

где здесь и далее в подобных случаях при наличии у частиц системы спина

$$p = (\vec{p}, \sigma), \quad p + q = (\vec{p} + \vec{q}, \sigma), \quad q = (\vec{q}).$$

б) Операторы двухчастичного или бинарного типа \mathfrak{B} .

Таким оператором является оператор взаимодействия частиц друг с другом, простейшая модель для которого, соответствующая парному центральному взаимодействию частиц, имеет вид

$$H_1 = \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|).$$

Полагая, что потенциал парного взаимодействия

$$\Phi(\vec{R}) = \Phi(R)$$

имеет математически осмысленное фурье-представление,

$$\nu(q) = \int \Phi(R) \exp \left\{ \frac{i \vec{p} \cdot \vec{R}}{\hbar} \right\} d\vec{R},$$

представим потенциал $\Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ в импульсном представлении

$$\begin{aligned} (\vec{p}_1, \vec{p}_2 | \Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) | \vec{p}'_1, \vec{p}'_2) &= \frac{1}{V^2} \int \exp \left\{ -\frac{i\vec{p}_1 \vec{r}_1}{\hbar} - \frac{i\vec{p}_2 \vec{r}_2}{\hbar} \right\} \times \\ &\times \Phi(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \exp \left\{ \frac{i\vec{p}'_1 \vec{r}_1}{\hbar} + \frac{i\vec{p}'_2 \vec{r}_2}{\hbar} \right\} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 = \\ &= \Delta(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}'_1 - \vec{p}'_2) \frac{1}{V} \nu(|\vec{p}'_1 - \vec{p}_1|). \end{aligned}$$

Снимая одно из четырех суммирований в формуле для представления оператора \mathfrak{B} во вторично-квантованном виде и полагая $\vec{p}'_1 - \vec{p}_1 = \vec{q}$, получаем

$$H_1 = \frac{1}{2V} \sum_q \sum_{pp'} \nu(q) a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_{p'} a_p,$$

где

$$\begin{aligned} q &= (\vec{q}), \quad p + q = (\vec{p} + \vec{q}, \sigma), \\ p' - q &= (\vec{p}' - \vec{q}, \sigma'), \quad p' = (\vec{p}', \sigma), \quad p = (\vec{p}, \sigma). \end{aligned}$$

в) *Оператор фурье-компоненты плотности числа частиц.*

Определяя плотность числа частиц системы в координатном представлении как

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{1 \leq i \leq N} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad \int_{(V)} \rho(\vec{r}) d\vec{r} = N,$$

получаем для ее фурье-компоненты аддитивную динамическую структуру, т. е. оператор типа \mathfrak{A} . Поэтому имеем

$$\begin{aligned} \rho_q &= \int_{(V)} \rho(\vec{r}) \exp \left\{ \frac{i \vec{q} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} d\vec{r} = \sum_{1 \leq i \leq N} \exp \left\{ \frac{i \vec{q} \cdot \vec{r}_i}{\hbar} \right\}, \\ A(1) &= \exp \left\{ \frac{i \vec{q} \cdot \vec{r}}{\hbar} \right\} \mapsto \rho_q = \sum_p a_{p+q}^+ a_p. \end{aligned}$$

Отметим некоторые очевидные свойства оператора ρ_q . Согласно его определению (в любом представлении), $\rho_q^+ = \rho_{-q}$. Операторы ρ_q ,

вне зависимости от того, составлены они из бозе- или из ферми-операторов, коммутируют друг с другом

$$[\rho_q, \rho_{q'}]_- = 0,$$

в то время как коммутатор с отдельным оператором a_p отличен от нуля,

$$[a_p, \rho_q]_- = a_{p-q}.$$

В терминах ρ_q можно записать оператор U ,

$$U = \frac{1}{V} \sum_q u^*(q) \rho_q,$$

и получить удобную формулу для оператора H_1 ,

$$\begin{aligned} H_1 &= \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \rho_q^+ \rho_q - \frac{1}{2V} \sum_q \nu(a) \sum_p a_p^+ a_p = \\ &= \frac{1}{2V} \sum_q \nu(q) \rho_q^+ \rho_q - \frac{N}{2V} \sum_q \nu(q). \end{aligned}$$

г) Оператор электрон-фононного взаимодействия.

Полагая, что тепловое движение в ионной кристаллической решетке металла реализуется как гармонические ее колебания или, что то же самое, как совокупность волн плотности акустического характера (называемые поэтому фононами), будем считать, что эти волны не провоцируют появления объемных электрических зарядов (порождающих высокоэнергетические плазменные колебания), т. е. этим колебаниям решетки во всяком случае в длинноволновом их диапазоне сопутствуют синхронные с ними колебания плотности электронного газа, так что плотность объемного заряда

$$\rho_{\text{эл}}(\vec{r}, t) = (n_{\text{реш}}(\vec{r}, t) - n_{\text{эл}}(\vec{r}, t)) e = 0.$$

Тогда в таком «адиабатическом» по отношению к электронному газу приближении (и приближении малых импульсов фононов) гамильтониан электрон-фононного взаимодействия должен включать

операторы одновременного рождения (и соответственно уничтожения) фонана с импульсом \vec{q} (оператор рождения бозе-типа b_q^+) и компенсирующий объемный заряд оператор волны плотности электронного газа ρ_q^+ . Гамильтониан такой упрощенной, но вполне физической модели взаимодействия тогда будет иметь вид

$$\begin{aligned} H_{\text{эл-фон}} &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_q \Phi(q) (\rho_q^+ b_q^+ + b_q \rho_q) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{pq} \Phi(q) (a_{p-q}^+ a_p b_q^+ + b_q a_{p+q}^+ a_p), \end{aligned}$$

где (см. основной текст)

$$\Phi(q) = \gamma \sqrt{\frac{q}{nMc}}$$

(M — масса иона, n — плотность N/V , c — скорость распространения акустических колебаний, связанная с энергией фонана $\hbar\omega(q) = cq$). Полный гамильтониан электрон-фононной системы должен включать гамильтонианы свободных электронов (идеальный ферми-газ) и идеального газа фононов (бозе-газ),

$$H_0 = \sum_p E(p) a_p^+ a_p + \sum_q \hbar \omega(q) b_q^+ b_q.$$

Приложение III

Теорема о спариваниях

Рассматривая идеальную систему, характеризуемую гамильтонианом H_0 , в качестве нулевого приближения и развивая затем теорию возмущений по степеням параметра, определяющего величину вкладов от оставшейся части полного гамильтониана $H_1 = H - H_0$, естественно использовать при расчетах средних значений по распределению Гиббса для идеальной системы (эти средние имеют вид шпурров с весом $e^{-H_0/\theta}$) базис, составленный из собственных функций нулевого гамильтониана, а также представление вторичного квантования для усредняемых операторов, построенное на основе того же плосковолнового базиса. Эти расчеты можно выполнить непосредственно, но значительно проще и целесообразнее воспользоваться теоремой, означенной в заглавии.

Среднее значение произведения четного числа операторов рождения и уничтожения, рассчитываемое с помощью большого канонического распределения Гиббса для идеального газа, характеризуемого гамильтонианом

$$\mathcal{H}_0 = H_0 - \mu N = \sum_p (E_p - \mu) a_p^+ a_p = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p,$$

где, в частности, в нерелятивистском случае $E_p = p^2/2m$ (для фотонного газа и фононов $\mu = 0$ и $E_p = \hbar\omega(p) = pc$), равно сумме всех возможных полных спариваний операторов рождения и уничтожения.

Эти спаривания определяются как

$$a_p^\top a_{p'} = \langle a_p^+ a_{p'} \rangle_0 = \frac{\text{Sp} \{ a_p^+ a_{p'} e^{-\mathcal{H}_0/\theta} \}}{\text{Sp} e^{-\mathcal{H}_0/\theta}} = \Delta(p - p') n_p,$$

$$a_{p'}^\top a_p^+ = 1 \pm a_p^\top a_{p'} = \Delta(p - p')(1 \pm n_p),$$

$$a_p^\top a_{p'} = \langle a_p a_{p'} \rangle_0 = 0, \quad a_{p'}^\top a_p^+ = \langle a_p^+ a_{p'} \rangle_0 = 0,$$

где средние числа заполнения в бозе- (верхний знак) и ферми- случаях (нижний знак) определяются выражением

$$n_p = \frac{1}{e^{\varepsilon_p/\theta} \mp 1}.$$

Правило знаков перед каждой полной системой спариваний произведений операторов a^+ и a , актуальное только при рассмотрении ферми-систем, определяется четностью числа перестановок антисимметризирующих операторов, необходимых для того, чтобы спариваемые операторы a_p^+ и $a_{p'}$ (или $a_{p'}$ и a_p^+) стояли рядом, или проще — четностью числа точек пересечения линий спариваний в полной их системе.

Доказательство этой теоремы можно осуществить методом математической индукции, рассчитав предварительно прямым способом с помощью большого канонического распределения среднее от произведения двух пар операторов рождения и уничтожения,

$$\begin{aligned} \langle a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_1} a_{p'_2} \rangle_0 &= n_{p_1} n_{p_2} (\Delta(p_1 - p'_1) \Delta(p_2 - p'_2) \pm \\ &\quad \pm \Delta(p_1 - p'_2) \Delta(p_2 - p'_1)) = \boxed{a_{p_1}^+ a_{p_2}^+ a_{p'_1} a_{p'_2}}, \end{aligned}$$

или на основе специально для этого придуманного приема. Не приводя здесь этих скучных выкладок (см., напр., т. 4, гл. 1, § 3-н), примем эту теорему на веру.

Чтобы убедиться в достоинствах этой техники расчетов средних по распределению Гиббса, приведем два простых примера.

Так как

$$\langle N_p^2 \rangle_0 = \langle a_p^+ a_p a_p^+ a_p \rangle_0 = \boxed{a_p^+ a_p a_p^+ a_p} + \boxed{a_p^+ a_p a_p^+ a_p} = n_p^2 + n_p(1 \pm n_p),$$

то для дисперсии чисел заполнения сразу получаем

$$\langle (\Delta N_p)^2 \rangle_0 = \langle N_p^2 \rangle_0 - \langle N_p \rangle_0^2 = n_p(1 \pm n_p).$$

Расчет первой поправки к внутренней энергии неидеального ферми-газа также прост,

$$\Delta E_1 = \langle H_1 \rangle_0 = \frac{1}{2V} \sum_{qpp'} \nu(q) \langle \boxed{a_{p+q}^+ a_{p'-q}^+ a_p a_p} \rangle_0 =$$

$$= \frac{N^2}{2V} \nu(0) - \frac{1}{2V} \sum_{qp} \nu(q) n_{p+q} n_p,$$

где

$$N = \sum_p n_p = \sum_{p'} n_{p'}.$$

Если символы спариваний представить графически сплошными линиями, несущими от оператора a_p^+ к a_p значение импульса p , а взаимодействие $\nu(q)/2V$ — пунктирными линиями, несущими импульс q , то образуется диаграммная техника, наглядно изображающая вклады по теории возмущений от соответствующих полных систем спариваний в каждом из порядков по H_1 , которые можно тут же представить в виде соответствующих интегральных выражений, уже освобожденных от процедуры взятия средних по статистическому распределению.

Теорема о спариваниях, доказанная Клодом Блохом и Доминисисом (C. Bloch, S. de-Dominicis, 1958), верна только для тех случаев, когда средние числа заполнения n_p имеют указанную традиционную форму бозе- и ферми-распределений для идеальных систем, т. е. всегда для ферми-случая, но для бозе-случая — только для всех $p \neq 0$, так как средние от числа $N_0 = a_0^+ a_0$ и его степеней вследствие бозе-конденсации при $\theta < \theta_0$ подобной формы не имеют.

Приложение IV

Вариационная теорема Боголюбова

Вариационный принцип Н. Н. Боголюбова (первая его публикация с конкретным использованием содержится в заметке 1956 г. автора данной книги) предназначен для эффективной оценки верхней границы свободной энергии равновесной статистической системы. Оригинальное доказательство этого анзатца приведено в пособии автора по термодинамике и статистической физике (см. т. 2, гл. 3, § 2-д). Чтобы более четко подчеркнуть, что основное неравенство этой оценки является следствием свойства выпуклости экспоненты и экспоненциальной же структуры гиббсовского распределения, приведем здесь несколько иной по форме его вывод, разбив доказательство на три пункта.

1. Пусть $F = F^+$ — самосопряженный оператор, в принципе имеющий собственные значения f_n , соответствующие собственным функциям $|n\rangle$, $F|n\rangle = f_n|n\rangle$. Обозначая угловыми скобками процедуру взятия среднего с помощью нормированного на единицу распределения W (не обязательно гиббсовского), докажем свойство выпуклости среднего от экспонциального оператора $\langle e^F \rangle \geq e^{\langle F \rangle}$, или $\ln \langle e^F \rangle \geq \langle F \rangle$. Рассмотрим величину

$$f(\lambda) = \langle e^{\lambda F} \rangle e^{-\lambda \langle F \rangle} = \langle e^{\lambda(F - \langle F \rangle)} \rangle,$$

где параметр λ определен в интервале значений $0 \leq \lambda \leq 1$, и ее производную

$$\frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle (F - \langle F \rangle) e^{\lambda(F - \langle F \rangle)} \rangle.$$

При значении $\lambda = 0$ имеем согласно определению функции $f(\lambda)$

$$f(0) = 1, \quad \left. \frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=0} = \langle F \rangle - \langle F \rangle = 0.$$

Вследствие свойства выпуклости экспоненты имеем при $\lambda \geq 0$ и любых значениях x

$$xe^{\lambda x} \geq x,$$

что сразу определяет оценку средней величины производной $\partial f / \partial \lambda$,

$$\begin{aligned} \langle (F - \langle F \rangle) e^{\lambda(F - \langle F \rangle)} \rangle &= \sum_n (f_n - \langle F \rangle) e^{\lambda(f_n - \langle F \rangle)} \langle n|W|n \rangle \geq \\ &\geq \sum_n (f_n - \langle F \rangle) \langle n|W|n \rangle = \langle F \rangle - \langle F \rangle = 0. \end{aligned}$$

Таким образом, мы получили, что при $\lambda \geq 0$ производная $\frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda} \geq 0$, т. е. функция $f(\lambda)$ является возрастающей функцией параметра λ . Полагая $\lambda = 1$, имеем $f(1) \geq f(0) = 1$, откуда следует неравенство

$$\langle e^F \rangle \geq e^{\langle F \rangle}.$$

2. Обратимся теперь к структуре распределения W . Полагая его гиббсовским, выделим из определяющего это распределение экспоненциального оператора $e^{-H/\theta}$, где $H = H_0 + H_1$ — гамильтониан рассматриваемой системы, экспоненциальную часть, содержащую только оператор H_0 . Вводя снова параметр λ , положим

$$e^{-\frac{H_0+H_1}{\theta}\lambda} = e^{-\frac{H_0}{\theta}\lambda} V(\lambda).$$

Продифференцировав обе части этого равенства по λ , получаем

$$\begin{aligned} \left(-\frac{H_0}{\theta} - \frac{H_1}{\theta} \right) e^{-\frac{H_0+H_1}{\theta}\lambda} &= \\ = \left(-\frac{H_0}{\theta} - \frac{H_1}{\theta} \right) e^{-\frac{H_0}{\theta}\lambda} V(t) &= -\frac{H_0}{\theta} e^{-\frac{H_0}{\theta}\lambda} V(t) + e^{-\frac{H_0}{\theta}\lambda} \frac{\partial V(\lambda)}{\partial \lambda}, \end{aligned}$$

откуда следует дифференциальное уравнение для оператора $V(\lambda)$ с «начальным» условием при $\lambda = 0$,

$$\begin{cases} \frac{\partial V(\lambda)}{\partial \lambda} = e^{+\frac{H_0}{\theta}\lambda} \left(-\frac{H_1}{\theta} \right) e^{-\frac{H_0}{\theta}\lambda} V(\lambda), \\ V(0) = 1, \end{cases}$$

решение которого имеет вид

$$V(\lambda) = \exp \left\{ - \int_0^\lambda e^{\frac{H_0}{\theta} \tau} \frac{H_1}{\theta} e^{-\frac{H_0}{\theta} \tau} d\tau \right\}.$$

Полагая $\lambda = 1$, получаем искомое соотношение

$$e^{-H_0+H_1/\theta} = e^{-H_0/\theta} \exp \left\{ - \int_0^1 e^{\frac{H_0}{\theta} \tau} \frac{H_1}{\theta} e^{-\frac{H_0}{\theta} \tau} d\tau \right\}.$$

3. Задавая из предыдущего пункта операторную структуру экспоненциального оператора, положим

$$F = - \int_0^1 e^{\frac{H_0}{\theta} \tau} \frac{H_1}{\theta} e^{-\frac{H_0}{\theta} \tau} d\tau.$$

Тогда, усредняя по распределению Гиббса с нулевым гамильтонианом

$$W = \frac{e^{-H_0/\theta}}{\text{Sp} \{ e^{H_0/\theta} \}}$$

и совершая циклическую перестановку операторов под знаком шпера, получаем, взяв интеграл по τ ,

$$\langle F \rangle = \frac{- \text{Sp} \left\{ \int_0^1 d\tau e^{-\frac{H_0}{\theta}(1-\tau)} \frac{H_1}{\theta} e^{-\frac{H_0}{\theta}\tau} \right\}}{\text{Sp} e^{-H_0/\theta}} = \frac{- \text{Sp} \left\{ \frac{H_1}{\theta} e^{-H_0/\theta} \right\}}{\text{Sp} e^{-H_0/\theta}}.$$

Для среднего от экспоненциального оператора, согласно п. 2, получаем

$$\langle e^F \rangle = \frac{\text{Sp} \left\{ e^{-H_0/\theta} \exp \left[- \int_0^1 d\tau e^{\frac{H_0}{\theta} \tau} \frac{H_1}{\theta} e^{-\frac{H_0}{\theta} \tau} \right] \right\}}{\text{Sp} e^{-H_0/\theta}} = \frac{- \text{Sp} e^{-\frac{H_0+H_1}{\theta}}}{\text{Sp} e^{-H_0/\theta}}.$$

Подставляя эти средние в полученное в п. 1 неравенство $\langle e^F \rangle \geq e^{\langle F \rangle}$, получаем оценку для статистической суммы

$$Z = \text{Sp } e^{-\frac{H_0+H_1}{\theta}} \geq \text{Sp } e^{-H_0/\theta} \exp \left\{ \frac{-\text{Sp} \frac{H_1}{\theta} e^{-H_0/\theta}}{\text{Sp } e^{-H_0/\theta}} \right\},$$

которую можно представить в виде оценки верхней границы свободной энергии системы в виде основной формулы вариационного принципа Н. Н. Боголюбова

$$F = -\theta \ln \text{Sp } e^{-(H_0+H_1)/\theta} \leq \Psi = -\theta \ln \text{Sp } e^{-H_0/\theta} + \frac{\text{Sp } H_1 e^{-H_0/\theta}}{\text{Sp } e^{-H_0/\theta}}.$$

Сделаем несколько замечаний по поводу доказанного выше соотношения.

- Разделение гамильтониана системы на две части $H = H_0 + H_1$ с формальной точки зрения произвольно, однако, выбор операторной структуры гамильтониана H_0 весьма ответственен: чтобы вариационная теорема работала эффективно, необходимо, чтобы $\text{Sp } e^{-H_0/\theta}$ рассчитывался бы до конца, то же относится и к расчету средней величины $\langle H_1 \rangle$.
 - В операторы H_0 и $H_1 = H - H_0$ могут входить различного типа параметры. Их выбор неоднозначен, и успех вариационной процедуры существенно зависит от того, насколько согласован этот выбор с характером рассматриваемой системы и ее физическими особенностями.
 - После взятия штурвов и расчета Ψ эти параметры выбираются наилучшим образом с целью максимально понизить верхнюю границу свободной энергии Ψ . При этом не исключено, что условия минимизации величины Ψ по этим параметрам могут привести к появлению негладких решений, соответствующих фазовым переходам 1-го и 2-го родов, что выгодно отличает вариационную процедуру от ограниченной несколькими порядками по H_1 термодинамической теории возмущений, каждая из поправок по которой представляет гладкую по отношению к термодинамическим параметрам величину.
- В следующем приложении будет рассмотрен простейший пример использования изложенного выше вариационного принципа.

Приложение V

Ферромагнетик Гейзенберга в вариационном приближении и пример модели, когда это приближение является асимптотически точным решением статистической проблемы

Заявленный выше сюжет предложен не с целью реанимировать первую публикацию, посвященную применению вариационного принципа в задачах статистической физики, выполненную автором в 1956 году, а с целью продемонстрировать на простом в математическом отношении примере полную формальную идентичность описания фазового перехода в модельном ферромагнетике, допускающем точное решение, асимптотически совпадающее с результатом вариационной оценки, с фазовым переходом электронного газа в металле в сверхпроводящее состояние при условии соответствующего выбора модели взаимодействия его частиц. Речь идет здесь не об утверждении некоего «закона подобия» (скептическое отношение к нему имеет достаточные основания), этих совершенно различных по своей природе фазовых переходах, а именно о формальной аналогии возникающих математических проблем, преодоление которых, значительно различающихся по сложности, но сходных по идеи, приводит к сходным же конечным результатам.

§ 1. Теория молекулярного поля Вейсса как вариационное приближение

Рассмотрим систему, определяемую гамильтонианом Гейзенберга (W. Heisenberg, P. Dirac, 1928)

$$\mathcal{H} = -\rho_0 H \sum_i \sigma_i^z - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(i-j) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j,$$

где напряженность внешнего магнитного поля $\vec{H} = (0, 0, H)$, $\beta = \frac{e\hbar}{2mc}$ — магнетон Бора, $J(i - j) = J(\vec{r}_i - \vec{r}_j)$ — обменное взаимодействие электронных оболочек атомов, находящихся в узлах кристаллической решетки \vec{r}_i и \vec{r}_j (в случае ферромагнитной решетки $J(i - j) > 0$), $\vec{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ — матрицы Паули, индексы i и j пробегают по всем N узлам пространственно закрепленной и несовершающей самостоятельного теплового движения кристаллической решетки. Отнесемся к этой дважды дискретной системе (по координатному пространству с фиксированным расположением правильной кристаллической решетки $\{\vec{r}_i\}$ и по значениям величин $\{\sigma_i^z = \pm 1\}$, определяющих в совокупности микроскопическое состояние системы) как к формальной модели ферромагнитного изолятора, не обсуждая правомерность ее сопоставления с реальным ферромагнетиком.

Заметим кстати, что этой модели исторически предшествовала модель Изинга (E. Ising, 1925), в которой вместо матриц Паули фигурировали числа $\sigma_i^z = \pm 1$ (т. е. как бы в гейзенберговской модели исключались σ^x - и σ^y -компоненты). Эта феноменологическая модель ферромагнетика совершенно свободна от каких-либо квантовых представлений, и по-видимому вследствие этого так популярна среди математиков. Точный расчет статистической суммы для такой системы не составил труда только в одномерном случае (см., напр., т. 2, гл. 3, зад. 26), при этом никакого фазового перехода эта система с учетом взаимодействия только ближайших соседних узлов не обнаруживает. Однако в двухмерном случае точное решение статистической задачи, полученное в результате весьма сложного расчета Онсагером (L. Onsager, 1944) для частного случая $H = 0$, показало, что система испытывает фазовый переход λ -типа при переходе из ферромагнитного состояния, упорядоченного по величинам σ_i , так что $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$, в парамагнитное неупорядоченное состояние $\langle \sigma_i \rangle = 0$, причем в точке фазового перехода при температуре $\theta \rightarrow \theta_0$ теплоемкость имеет логарифмическую особенность

$$C \sim \left| \ln \frac{|\theta - \theta_0|}{\theta_0} \right|.$$

Точный расчет трехмерной системы, по-видимому, вообще невозможен.

Представленная ниже вариационная оценка нечувствительна к выбору гейзенберговской или изинговской модельной системы и к ее размерности. Как и любой приближенный метод статистической суммы, вариационная процедура в принципе не может дать математически точного описания особенности негладкого поведения свободной энергии системы, она приводит к фазовому переходу 2-го рода с конечным скачком теплоемкости при температуре $\theta = \theta_0$.

Выбирая простейшую конструкцию гамильтониана \mathcal{H}_0 , удовлетворяющую сформулированным в конце прил. IV условиям, в виде операторной структуры идеальной системы

$$\mathcal{H}_0 = -\beta \tilde{H} \sum_i \sigma_i^z,$$

где величина \tilde{H} играет роль вариационного параметра, и учитывая

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H} - \mathcal{H}_0 = -\beta(H - \tilde{H}) \sum_i \sigma_i^z - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} J(i-j) \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j,$$

имеем

$$\text{Sp } e^{-\mathcal{H}_0/\theta} = \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i^z=\pm 1} \exp \left\{ \frac{\beta \tilde{H}}{\theta} \sigma_i^z \right\} = \left(2 \operatorname{ch} \frac{\beta \tilde{H}}{\theta} \right)^N$$

и далее

$$\langle \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \rangle = \langle \vec{\sigma}_i \rangle \langle \vec{\sigma}_j \rangle = \langle \sigma_i^z \rangle \langle \sigma_j^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle^2,$$

где

$$\langle \sigma^z \rangle \equiv \sigma = \frac{\sum_{\sigma^z=\pm 1} \sigma^z \exp \left\{ \frac{\beta \tilde{H}}{\theta} \sigma^z \right\}}{\sum_{\sigma^z=\pm 1} \exp \left\{ \frac{\beta \tilde{H}}{\theta} \sigma^z \right\}} = \operatorname{th} \frac{\beta \tilde{H}}{\theta}.$$

Учитывая, что обменное взаимодействие очень быстро спадает до нуля с увеличением расстояния между узлами решетки и эффективно в основном только для соседей, составляющих первую коор-

динационную сферу, обозначим

$$\sum_{i \neq j} J(i-j) = N \sum_{j \neq 0} J(j) = N c \tilde{J} = N \theta_0,$$

где c — число ближайших соседей (для простой кубической решетки $c = 6$, для гранецентрированной и гексагональной $c = 12$ и пр.), а \tilde{J} — эффективная величина обменного интеграла. Тогда получаем

$$\langle \mathcal{H} \rangle = -N\beta H\sigma - \frac{1}{2}Nc\tilde{J}\sigma^2 = N \left(-\beta H\sigma - \frac{1}{2}\theta_0\sigma^2 \right),$$

$$\langle \mathcal{H}_1 \rangle = N \left(-\beta(H - \tilde{H})\sigma - \frac{1}{2}\theta_0\sigma^2 \right),$$

где $\sigma = \operatorname{th}(\beta\tilde{H}/\theta)$, и оценка удельной свободной энергии приобретает вид

$$\frac{1}{N}\Psi = -\theta \ln 2 \operatorname{ch} \frac{\beta\tilde{H}}{\theta} - \beta(H - \tilde{H})\sigma - \frac{1}{2}\theta_0\sigma^2.$$

Минимизируя эту величину по параметру \tilde{H}

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{H}} \frac{1}{N}\Psi = -\theta \operatorname{th} \frac{\beta\tilde{H}}{\theta} \cdot \frac{\beta}{\theta} + \beta\sigma - \beta(H - \tilde{H}) \frac{\partial\sigma}{\partial \tilde{H}} - \theta_0\sigma \frac{\partial\sigma}{\partial \tilde{H}} = 0,$$

получаем для него трансцендентное уравнение

$$\beta\tilde{H} = \beta H + \theta_0 \operatorname{th} \frac{\beta\tilde{H}}{\theta},$$

или

$$\operatorname{th} \frac{\beta\tilde{H}}{\theta} = \operatorname{th} \left(\frac{\beta H + \theta_0 \operatorname{th}(\beta\tilde{H}/\theta)}{\theta} \right),$$

в котором без труда узнается уравнение молекулярного поля Вейсса

$$\sigma = \operatorname{th} \left(\frac{\beta H + \theta_0\sigma}{\theta} \right).$$

Величина σ определяет параметр дальнего порядка по Бреггу—Вильямсу (G. Bragg, E. Williams, 1913–1934) и непосредственно свя-

зана с намагничением системы

$$M = -\frac{\partial \Psi}{\partial H} = N\beta\sigma = M_0\sigma,$$

где $M_0 = N\beta$ — максимально возможное значение магнитного момента системы.

В случае отсутствия внешнего поля H в системе приближении к температуре θ_0 происходит фазовый переход 2-го рода, связанный с исчезновением дальнего порядка. Имеем в этом случае

$$\sigma = \operatorname{th} \frac{\theta_0}{\theta}\sigma, \quad E = \langle \mathcal{H}_0 \rangle = -N \frac{1}{2} \theta_0 \sigma^2.$$

Решая уравнение для σ в доступных для аналитического исследования областях, получаем

$$\sigma = \begin{cases} 1 - 2e^{-2\theta/\theta_0} + \dots & \text{в случае } \theta \ll \theta_0, \\ \frac{\theta}{\theta_0} \sqrt{3 \left(1 - \frac{\theta}{\theta_0} \right)} \cong \sqrt{3 \frac{\theta_0 - \theta}{\theta_0}} & \text{в случае } \theta \lesssim \theta_0, \\ 0 & \text{в случае } \theta > \theta_0, \end{cases}$$

откуда для удельной теплоемкости следует (см. рис. П5.1)

$$C = \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial \theta} = -\theta_0 \sigma \frac{\partial \sigma}{\partial \theta} =$$

$$= \begin{cases} \left(2 \frac{\theta_0}{\theta} \right)^2 e^{-2\theta/\theta_0} + \dots & \text{в случае } \theta \ll \theta_0, \\ \frac{3}{2} \left(1 + \frac{8(\theta - \theta_0)}{5\theta} \right) + \dots & \text{в случае } \theta \lesssim \theta_0, \\ 0 & \text{в случае } \theta > \theta_0, \end{cases}$$

что и определяет характер эренфестовского фазового перехода.

С одной стороны, представленные результаты свидетельствуют об эффективности использования вариационного принципа — в однопараметрическом варианте оценки свободной энергии он основал физический смысл и выводы феноменологической теории

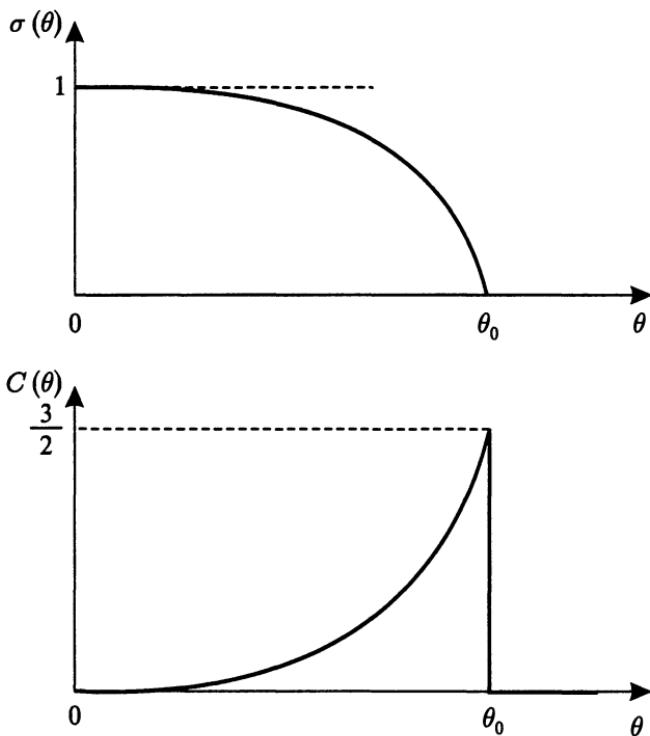


Рис. П5.1. Характер температурной зависимости удельной спонтанной намагниченности и удельной теплоемкости вейссовского ферромагнетика в случае $H = 0$

молекулярного поля, с другой — характер обнаруженного фазового перехода не соответствует реальной ситуации: фазовый переход в такой системе, как гейзенберговский или изинговский ферромагнетик, должен быть не 2-го рода, а λ -типа. К сожалению, никакие приближенные методы исследования этих и подобных им систем не в состоянии установить точный характер особенности термодинамического потенциала в λ -точке.

§ 2. Пример совпадения вариационной оценки с асимптотически точным решением

Однако имеется случай, когда полученное вариационным способом решение является асимптотически точным.

Пусть характерная температура фиксирована, $\theta_0 = cJ = \text{const}$, а величина c начиная с числа ближайших соседей увеличивается. Чем больше c , тем с физической точки зрения все более становится обоснованным приближение самосогласованного поля.

Рассмотрим предельную возможность такого увеличения — случай «бесконечнодальнодействия», когда

$$\theta_0 = NJ = N \cdot \frac{\tilde{J}}{N} = \tilde{J}.$$

Пренебрегая x - и y -компонентами матриц Паули (так как все равно $\langle \sigma^x \rangle = \langle \sigma^y \rangle = 0$) имеем, опуская ненужный индекс z и добавляя к двойной сумме слагаемые с $i = j$,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\beta H \sum_i \sigma_i - \frac{1}{2} \frac{\tilde{J}}{N} \left(\sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_i \sigma_i^2 \right) = \\ &= -\beta H \sum_i \sigma_i - \frac{1}{2} \frac{\tilde{J}}{N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \frac{1}{2} \tilde{J}. \end{aligned}$$

Введем величину

$$S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i,$$

имеющую нулевой статистический порядок по числу N . Тогда, записывая статистическую сумму в виде

$$Z = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_2} \exp \left\{ \frac{\tilde{J}}{2\theta} + N \frac{\beta H}{\theta} S + N \frac{\tilde{J}}{\theta} \cdot \frac{1}{2} S^2 \right\},$$

замечаем, что она не распадается на произведение независимых сумм по каждому из σ_i . Однако, умев брать пуассоновский интеграл, можно написать

$$\exp \left\{ \frac{N\tilde{J}}{\theta} \left(\frac{S}{\sqrt{2}} \right)^2 \right\} = \sqrt{\frac{N\tilde{J}}{2\theta\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left\{ N \frac{\tilde{J}}{\theta} Sx - N \frac{\tilde{J}}{\theta} \frac{x^2}{2} \right\} dx,$$

т. е. ценой введения дополнительной интегральной процедуры исключить оператор S^2 из экспоненты статистической суммы. Тогда основная проблема статистической теории — суммирование по микроскопическим состояниям системы, решается элементарно

$$\sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} e^{aN S} = \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{a\sigma_i} = (2 \operatorname{ch} a)^N,$$

где

$$a = \frac{\tilde{J}}{\theta}x + \frac{\beta H}{\theta},$$

и мы получаем выражение для статистической суммы

$$\begin{aligned} Z &= \sqrt{\frac{N \tilde{J}}{2\theta\pi}} e^{-\tilde{J}/2\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp \left\{ -N \frac{\tilde{J}}{\theta} \frac{x^2}{2} + N \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\tilde{J}}{\theta} x + \frac{\beta H}{\theta} \right) \right\} = \\ &= \sqrt{\frac{N \tilde{J}}{2\theta\pi}} e^{-\tilde{J}/2\theta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{N w(x)}, \end{aligned}$$

полностью приготовленное для взятия оставшегося интеграла по переменной x методом перевала (см. прил. VI а также т. 2, гл. 1, зад. 3). Определяя точку перевала $x = x_0$ из условия $w'(x) = 0$, обнаруживаем, что она совпадает с той величиной удельной спонтанной намагниченности σ , которая фигурирует в вариационной оценке свободной энергии системы (и в теории молекулярного поля Вейсса)

$$\begin{aligned} w'(x_0) &= -\frac{\tilde{J}}{\theta}x_0 + \operatorname{th} \left(\frac{\tilde{J}}{\theta}x_0 + \frac{\beta H}{\theta} \right) = 0 \mapsto \\ &\mapsto \sigma = \operatorname{th} \frac{\beta H + \tilde{J}\sigma}{\theta}, \quad \tilde{J} = \theta_0. \end{aligned}$$

Окончательно имеем

$$f = -\theta \ln Z^{1/N} = -\theta w(\sigma) = -\theta \ln 2 \operatorname{ch} \left(\frac{\tilde{J}}{\theta}\sigma + \frac{\beta H}{\theta} \right) + \frac{1}{2}\tilde{J}\sigma^2,$$

$$\epsilon = f - \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} = -\beta H\sigma - \frac{1}{2}\tilde{J}\sigma^2, \quad \text{и т. д.}$$

Приложение VI

Основная формула метода перевала

Речь идет об асимптотической оценке интеграла вида

$$I(N) = \int_C e^{Nw(z)} f(z) dz$$

при $N \rightarrow \infty$, где $w(z)$ и $f(z)$ — аналитические функции комплексной переменной

$$z = x + iy,$$

регулярные в области, через которую проходит путь интегрирования от точки z_1 до точки z_2 по контуру C , а сам интеграл конечен при любых фиксированных значениях N .

Подобная интегральная конструкция достаточно актуальна в расчетах, проводимых в рамках равновесной статистической теории, так как гиббсовское распределение включает экспоненту $e^{-H/\theta}$, где гамильтониан многотельной системы пропорционален общему числу частиц N в ней, а статистическая сумма и средние значения определяются интегральной операцией $\text{Sp} \{F e^{-H/\theta}\}$, причем, являясь асимптотической теорией, гиббсовская статистика в соответствии с принципом термодинамической аддитивности (см. т. 1, гл. 1, § 1) гарантирует при проведении предельной статистической процедуры $N \rightarrow \infty$, $N/V = \text{const}$ только основную асимптотику по N .

В идейном отношении метод оценки интегралов вида $I(N)$ сформировался главным образом благодаря работам Лапласа (P. Laplace, 1820) и Дебая (P. Debye, 1909). Мы ограничимся несколько упрощенным, но вполне наглядным вариантом изложения этого метода, по возможности не опуская деталей вывода и оговаривая все ограничения, так как это важно для понимания математического смысла упомянутой выше предельной статистической процедуры.

§ 1. Выделение ε -окрестности в области точки перевала

Рассмотрим область на комплексной плоскости вблизи точки $z = z_0$, в которой производная $w'(z_0) = 0$, и выделим в разложении функции $w(z)$ по степеням $(z - z_0)$ первый неисчезающий в предположении $w''(z_0) \neq 0$ член,

$$w(z) = w(z_0) + \frac{1}{2}w''(z_0)(z - z_0)^2 + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!}w^{(n)}(z_0)(z - z_0)^n.$$

Пусть R — радиус сходимости этого ряда. Ввиду регулярности функции $w(z)$ значения ее модуля на окружности C_R , образованной точками $z_0 + Re^{i\varphi}$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, ограничены $|w(z_0 + Re^{i\varphi})| \leq M$. Отсюда с использованием теоремы Коши

$$w(z_0) = \frac{1}{2\pi i} \int_{C_R} \frac{w(\zeta) d\zeta}{\zeta - z_0}$$

следует ограничение на коэффициенты разложения функции $w(z)$

$$\left| \frac{1}{n!}w^{(n)}(z_0) \right| = \left| \frac{1}{2\pi i} \int_{C_R} \frac{w(\zeta) d\zeta}{(\zeta - z_0)^{n+1}} \right| \leq \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{M}{R^{n+1}} 2\pi R = \frac{M}{R^n},$$

и поэтому для всей «остаточной» суммы от $n = 3$ до бесконечности

$$\tilde{w}_3(z - z_0) = w(z) - w(z_0) - \frac{1}{2}w''(z_0)(z - z_0)^2,$$

полагая $z - z_0 = te^{i\varphi}$, где $t < R$, и суммируя убывающую при $t/R < 1$ геометрическую прогрессию, имеем оценку

$$|\tilde{w}_3(z - z_0)| = \left| \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n!}w^{(n)}(z_0)(z - z_0)^n \right| \leq M \sum_{n=3}^{\infty} \frac{|z - z_0|^n}{R^n} = \frac{Mt^3}{R^2(R - t)}.$$

Ограничим область изменения модуля $|z - z_0|$ ε -окрестностью, такой, что $0 \leq t < \varepsilon \leq R$ (см. рис. П6.1). Тогда

$$|\tilde{w}_3(z - z_0)| \leq \frac{M\varepsilon^3}{R^2(R - \varepsilon)} \cong \frac{M\varepsilon^3}{R^3}.$$

Используя произвол в выборе величины ε (единственное ограничение на нее — это $\varepsilon \ll R$), установим зависимость ее от числа N

$$\varepsilon(N) = \varepsilon_0 N^{-\frac{1}{2} + \delta}, \quad 0 < \delta < 1/6,$$

так чтобы при $N \rightarrow \infty$

$$|N\tilde{w}_3(z - z_0)| \sim N^{1-\frac{3}{2}+3\delta} = N^{-\frac{1}{2}+3\delta} \rightarrow 0,$$

в то время как квадратичный член

$$\left| N \frac{1}{2} w''(z_0)(z - z_0)^2 \right| \sim N^{2\delta}$$

оставался бы главной поправкой, зависящей от переменной интегрирования, к константе $Nw(z_0)$. Поэтому в установленной ε -окрестности точки $z = z_0$ для экспоненты, стоящей под знаком интеграла $I(N)$, получаем, разлагая $\exp\{N\tilde{w}_3(z - z_0)\}$ в ряд по показателю,

$$\begin{aligned} e^{Nw(z)} &= e^{Nw(z_0)} \exp \left\{ N \frac{1}{2} w''(z_0)(z - z_0)^2 \right\} \times \\ &\times \left(1 + N\tilde{w}_3(z - z_0) + \frac{1}{2} N^2 (\tilde{w}_3(z - z_0))^2 + \dots \right). \end{aligned}$$

§ 2. Изменение первоначального контура интегрирования

Деформируем первоначальный контур интегрирования C так, чтобы он проходил через точку z_0 (см. рис. П6.1). Так как по условию функция $w = u + iv$ является аналитической, то для поверхностей $u(x, y)$ и $v(x, y)$ точка z_0 является седловой. Действительно, согласно условиям Коши—Римана

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x},$$

и поэтому всюду, включая точку z_0

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad \text{и} \quad \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = -\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}.$$

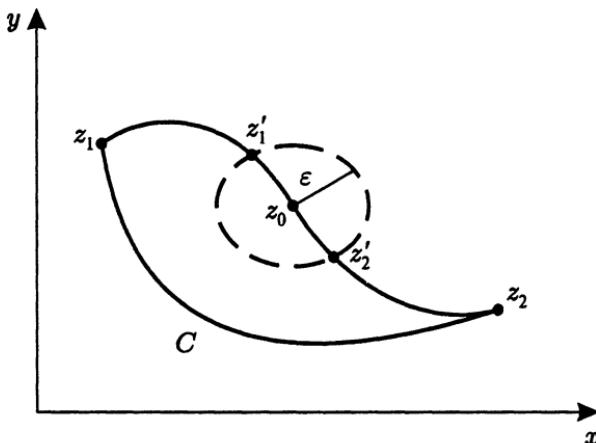


Рис. П6.1. Выделение ε -окрестности около точки z_0 , определяемой условием $w'(z_0) = 0$, через которую проведен новый контур интегрирования

Положим

$$\frac{1}{2}w''(z_0) = \left| \frac{1}{2}w''(z_0) \right| e^{i\alpha} = ae^{i\alpha}.$$

Тогда, учитывая, что $z - z_0 = te^{i\varphi}$, имеем вдоль нового пути интегрирования, проходящего через z_0 , в ε -окрестности этой точки, в которой частью $\tilde{w}_3(z - z_0)$ можно при $N \rightarrow \infty$ пренебречь,

$$w(z) - w(z_0) \cong \frac{1}{2}w''(z_0)(z - z_0)^2 = at^2 e^{i(\alpha+2\varphi)}.$$

Выберем теперь наклон этого пути так, чтобы $\varphi = -(\pi + \alpha)/2$. Тогда $w(z) - w(z_0) = -at^2$. Этот путь соответствует движению вдоль одной из прямых

$$v(x, y) = v(x_0, y_0)$$

(при выборе $\varphi = (\pi - \alpha)/2$ мы имели бы $w(z) - w(z_0) = at^2$), а так как линии уровней $v(x, y) = \text{const}$ ортогональны к линиям уровней $u(x, y) = \text{const}$, то вдоль выбранного пути, функция $u(x, y)$ изменяется наиболее быстро. Такое направление φ называется критическим в точке z_0 или направлением наибыстрейшего спуска

(второе критическое направление соответствует случаю наибыстрышего подъема, $w(z) - w(z_0) = at^2$).

§ 3. Асимптотическая оценка интегралов

Используя произвол в выборе всего нового пути интегрирования, установим его так, чтобы оценки интегралов по отдельным участкам этого пути производились бы без особого труда. Именно путь от исходной точки z_1 до границы ε -окрестности $z'_1 = z_0 - \varepsilon_1 e^{i\varphi}$ и величину $\varepsilon_1 \leq \varepsilon$ выберем так, чтобы функция $u(x, y)$ вдоль него все время не убывала; в интервале от z'_1 до $z'_2 = z_0 - \varepsilon_2 e^{i\varphi}$ будем двигаться вдоль линии уровня $v(x, y) = v(x_0, y_0)$ и через «перевал» в точке z_0 , где функция $u(x, y)$ достигает своего максимума, по долине поверхности $u(x, y)$; путь от точки z'_2 до конечной z_2 и величину $\varepsilon_2 \leq \varepsilon$ выберем так, чтобы функция $u(x, y)$ вдоль него не возрастила. Задавая таким образом путь интегрирования, мы можем в принципе использовать параметрическое задание $x = x(t)$, $y = y(t)$ и выбрать этот параметр t так, чтобы в точке перевала он обращался бы в ноль, а в ее ε -окрестности по абсолютной величине совпадал бы с установленной ранее величиной t . Тогда характер изменения функций $u(z)$ и $v(z)$ вдоль этого пути будет иметь вид, представленный на рис. П6.2.

Положим

$$J = I e^{-Nw(z_0)} = \int_{z_1}^{z_2} e^{N(w(z) - w(z_0))} f(z) dz$$

и оценим сначала вклады в него от участков пути интегрирования от точки z_1 до z'_1 и от z'_2 до конечной точки z_2 .

Имеем

$$\begin{aligned} |J_1| &= \left| \int_{t_1}^{-\varepsilon_1} e^{N(w(z) - w(z_0))} f(t) \frac{dz}{dt} dt \right| \leq \\ &\leq \int_{t_1}^{-\varepsilon_1} e^{N(u(t) - u(0))} \left| f(t) \frac{dz}{dt} \right| dt \leq K_1 e^{-Na\varepsilon_1^2}; \end{aligned}$$

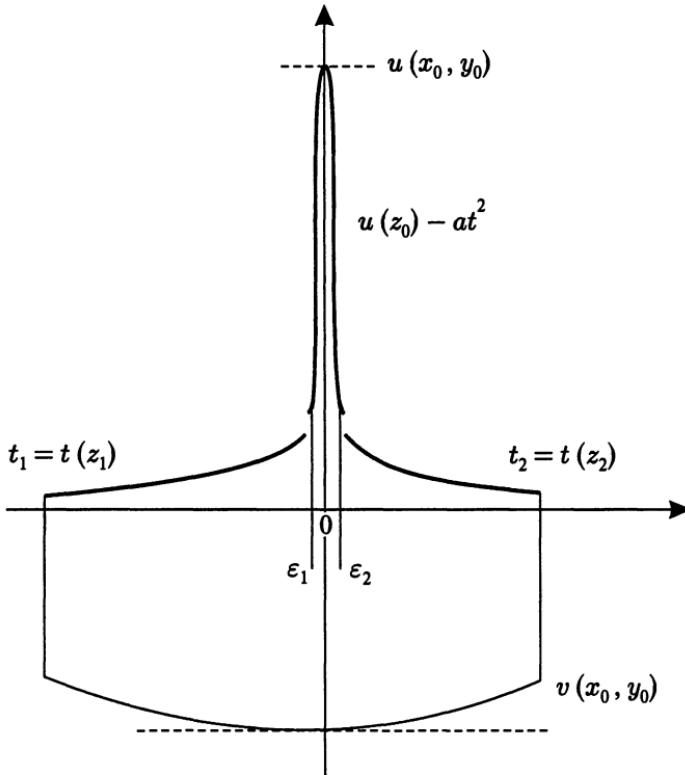


Рис. П6.2. Схематический вид функций $u(t)$ и $v(t)$ при параметрическом задании пути интегрирования

аналогично

$$|J_3| = \left| \int_{\epsilon_2}^{t_2} e^{N(w(z)-w(z_0))} f(t) \frac{dz}{dt} dt \right| \leq K_2 e^{-Nae^2},$$

где K_1 и K_2 — конечные величины, не зависящие от N (напомним, что интеграл I , а следовательно и отдельные части интеграла J сходятся по условию). Выберем теперь

$$\epsilon_1 = \epsilon_0 N^{-1/2+\delta}.$$

Тогда, во-первых, полагая $\delta > 0$ мы вправе пренебречь вкладом от первого участка интегрирования, а, во-вторых, выбирая $0 < \delta < 1/6$,

можем отождествить $\varepsilon_1 = \varepsilon$. Аналогично можно поступить и с величиной интеграла J_3 , и с ε_2 , положив $\varepsilon_2 = \varepsilon$.

Таким образом, от всего интеграла J остается только «центральная» его часть

$$\begin{aligned} J_2 &= \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} e^{-Nat^2} \left(1 + N \frac{1}{3!} w^{(3)}(z_0) t^3 e^{i3\varphi} + N \frac{1}{4!} w^{(4)}(z_0) t^4 e^{i4\varphi} + \dots + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(N \frac{1}{3!} w^{(3)}(z_0) \right)^2 t^6 e^{i6\varphi} + \dots \right) \cdot f(z_0 + te^{i\varphi}) e^{i\varphi} dt. \end{aligned}$$

Чтобы превратить этот интеграл в пуассоновский, добавим к нему интегралы по областям $-\infty < t < -\varepsilon$ и $\varepsilon < t < \infty$. Оценки этих интегралов ошибок содержат экспоненциальный фактор $e^{-Na\varepsilon^2}$, т. е. ту же экспоненту, которая позволила нам пренебречь интегралами J_1 и J_3 , так как при $\varepsilon = \varepsilon_0 N^{-1/2+\delta}$ этот фактор $e^{-Na\varepsilon^2} = e^{-a\varepsilon_0^2 N^{2\delta}}$ при $N \rightarrow \infty$ определяет в производимую оценку экспоненциально малый вклад по сравнению с величинами, пропорциональными любой конечной степени $1/N$ (иными словами, асимптотическое разложение этих вкладов в общий интеграл J по степеням $1/N$, целым или дробным, содержит в качестве коэффициентов одни нули). Пренебрегая этими экспоненциальными малыми членами, имеем

$$\begin{aligned} J &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Nat^2} \left(1 + \frac{1}{6} N w^{(3)} e^{i3\varphi} t^3 + \frac{1}{24} N w^{(4)} e^{i4\varphi} t^4 + \dots + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{6} N w^{(3)} e^{i3\varphi} \right)^2 t^6 + \dots \right) \left(f + f' e^{i\varphi} t + \frac{1}{2} f'' e^{i2\varphi} t^2 + \dots \right) e^{i\varphi} dt \end{aligned}$$

(значения функции f , ее производных и производных функции w взяты в точке $t = 0$ или $z = z_0$), откуда, производя перемножение, беря стандартные пуассоновские интегралы по переменной t ,

$$P_{2n} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Nat^2} t^{2n} dt = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1)}{2^n} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{(Na)^{n+1/2}},$$

$$P_{2n+1} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-Nat^2} t^{2n+1} dt = 0,$$

и учитывая произведенный нами ранее выбор угла φ ,

$$\frac{e^{i2\varphi}}{a} = \frac{2e^{-i\pi}}{e^{-i\alpha}|w''(z_0)|} = -\frac{2}{w''(z_0)},$$

получаем

$$J = \frac{1}{\sqrt{N}} f \sqrt{\frac{-2\pi}{w''}} \times \\ \times \left\{ 1 - \left(\frac{f''}{fw''} - \frac{f'}{f} \frac{w^{(3)}}{(w'')^2} - \frac{1}{4} \frac{w^{(4)}}{(w'')^2} + \frac{5}{12} \frac{(w^{(3)})^2}{(w'')^3} \right) \frac{1}{2N} + \dots \right\}.$$

Удерживая в фигурных скобках только единицу, получаем для основной асимптотики исходного интеграла (основной формулы метода перевала) при $N \rightarrow \infty$

$$I(N) \Big|_{N \rightarrow \infty} = \int_C e^{Nw(z)} f(z) dz \Big|_{N \rightarrow \infty} = \\ = e^{Nw(z_0)} f(z_0) \sqrt{\frac{-2\pi}{Nw''(z_0)}} \left(1 + O\left(\frac{1}{N}\right) \right),$$

где точка перевала z_0 определяется из условия $w'(z_0) = 0$.



И. А. Квасников

Заслуженный
преподаватель МГУ

Лауреат
Ломоносовской
премии
МГУ

ВВЕДЕНИЕ В ТЕОРИЮ

ЭЛЕКТРО и ПРОВОДНОСТИ СВЕРХ ПРОВОДИМОСТИ

Явления переноса в вырожденном
электронном газе

Введение в теорию сверхпроводимости
электронного газа

