Основное состояние БКШ

Рассмотрим основное состояние «спаренных» электронов в терминах вторичного квантования:

$$|\psi_G\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}} \left(u_{\boldsymbol{k}} + v_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow} \hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\right) |\psi_0\rangle\,, \tag{1}$$

где ψ_0 – вакуумное состояние.

Количество спаренных частиц может быть найдено через оператор полного числа частиц

$$\hat{N} = \sum_{\boldsymbol{k}} \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\downarrow}.$$

Прямым вычислением, находим

$$\langle N\rangle = \langle\psi_G|\hat{N}|\psi_G\rangle = 2\langle \textstyle\sum_{\boldsymbol{k}} \hat{N}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle = 2\sum_{\boldsymbol{k}} \langle\psi_0|\left(u_{\boldsymbol{k}} + v^*_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\right)\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}(u_k + v_k\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}\downarrow})|\psi_0\rangle = 2\sum_{\boldsymbol{k}} |v_{\boldsymbol{k}}|^2,$$

как и ожидалось.

Вариационный метод

Гамильтониан системы почти идеального ферми-газа запишется [2]

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} \left(\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\downarrow}\right) + \sum_{\boldsymbol{k},\,\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}'\uparrow}.$$

Чтобы явно не учитывать постоянство числа частиц в системе [2] в качестве нового гамильтониана вводится разность $\hat{H} \to \hat{H} - \mu\hat{N}$. Коэффициенты в (1) найдём минимизируя

$$\mathbb{E} \overset{\text{def}}{=} \langle\psi_G|\hat{H} - \mu\hat{N}|\psi_G\rangle, \qquad \delta\mathbb{E} = 0.$$

Введем также обозначение

$$\xi_{\boldsymbol{k}} \overset{\text{def}}{=} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu.$$

Аналогично вычислению $\langle N\rangle$, находим

$$\mathbb{E} = 2\sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}}|v_{\boldsymbol{k}}|^2 + \sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}'\boldsymbol{k}} u_{\boldsymbol{k}'} v^*_{\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}}.$$

Считая $u_{\boldsymbol{k}},\, v_{\boldsymbol{k}} \in \mathbb{R}$, сделаем подстановку

$$u_k = \sin\theta_k, \qquad v_k = \cos\theta_k.$$

Тогда минимизируемая величина запишется в виде

$$E = \sum_{\boldsymbol{k}} \xi_{\boldsymbol{k}}\left(1 + \cos 2\theta_{\boldsymbol{k}}\right) + \frac{1}{4}\sum_{\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \sin(2\theta_k)\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}'}).$$

Считая $\partial_{\theta_{\boldsymbol{k}}}\mathbb{E} = 0$, находим

$$-2\xi_{\boldsymbol{k}}\sin\left(2\theta_{\boldsymbol{k}}\right) + \sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\cos\left(2\theta_{\boldsymbol{k}}\right)\sin(2\theta_{\boldsymbol{k}'}), \qquad \Rightarrow \qquad \operatorname{tg}\theta_{\boldsymbol{k}} = \frac{1}{2\xi_{\boldsymbol{k}}}\sum_{\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\sin\left(2\theta_{\boldsymbol{k}'}\right).$$

Теперь можем ввести две величины:

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} \overset{\text{def}}{=} -\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} v_{\boldsymbol{k}'} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\sin\left(2\theta_{\boldsymbol{k}'}\right), \qquad E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\Delta^2_{\boldsymbol{k}} + \xi^2_{\boldsymbol{k}}}.$$

Тогда явно находим

$$\sin(2\theta_k) = 2u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}, \qquad \cos(2\theta_{\boldsymbol{k}}) = v^2_{\boldsymbol{k}} - u^2_{\boldsymbol{k}} = -\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}. \tag{2}$$

Тогда уравнение на ширину запрещенной зоны запишется в виде

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{E_{\boldsymbol{k}'}} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{\sqrt{\Delta^2_{\boldsymbol{k}'} + \xi^2_{\boldsymbol{k}'}}}. \tag{3}$$

Подстановка Купера

Сначала Купером [4], а затем в рамках модели БКШ было предложено использовать потенциал, вида

$$V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} = \begin{cases} -V, & |\xi_{\boldsymbol{k}}|, |\xi_{\boldsymbol{k}'}| \leqslant \Theta_D \\ 0, & \text{иначе} \end{cases}$$

где Θ_D – температура Дебая, размерности энергии.

Тогда (3) запишется в виде

$$1 = \frac{V}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'}\frac{1}{E_{\boldsymbol{k}'}} = N(0)V\int_0^{\Theta_D}\frac{1}{\sqrt{\Delta^2+\xi^2}}\,d\xi = N(0)V\,\mathrm{arcsh}\left(\frac{\Theta_D}{\Delta}\right), \qquad \Rightarrow \qquad \Delta \approx 2\Theta_D e^{-\frac{1}{N(0)V}},$$

где сделано приближение $D(E) \approx D(E)|_{E=E_F} = N(0)$.

Уравнения (2) позволяют в явном виде найти

$$\left.\begin{matrix} u_{\boldsymbol{k}}^2 \\ v_{\boldsymbol{k}}^2 \end{matrix}\right\} = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right) = \frac{1}{2}\left(1 \pm \frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{\sqrt{\Delta^2+\xi_{\boldsymbol{k}}^2}}\right),$$

явная зависимость $|v_{\boldsymbol{k}}|^2(\xi_{\boldsymbol{k}})$ приведена на рис. 1.

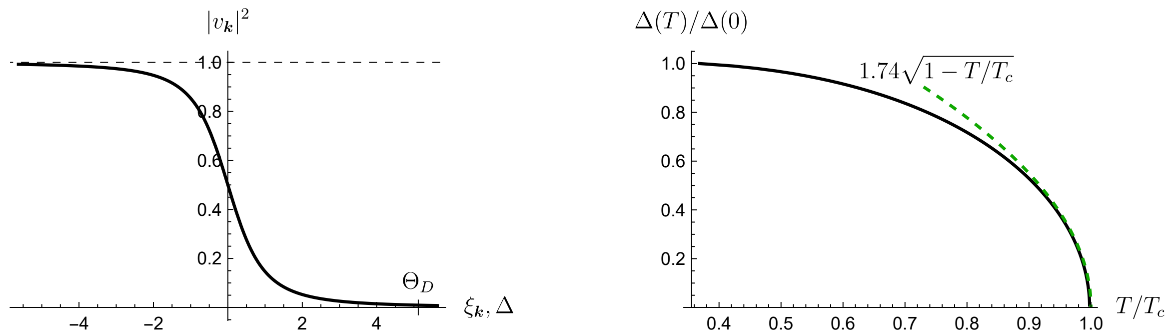

Рис. 1: Зависимость $|v_{\boldsymbol{k}}|^2(\xi_{\boldsymbol{k}})$ при $T = 0$ и $N(0)V = 0.43$, зависимость $\Delta(T)$

Конечная температура

Для $E_{\boldsymbol{k}} \geqslant \Delta$ возбуждений ферми-частиц функция распределения также будет скорее ферми-функцией

$$f(E_{\boldsymbol{k}}) = \frac{1}{e^{E_{\boldsymbol{k}}/T} + 1}.$$

Тогда можем найти количество возбуждений в формуле

$$\langle 1 - \hat{\gamma}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}0}\gamma_{\boldsymbol{k}0} - \gamma^{\dagger}_{\boldsymbol{k}1}\gamma_{\boldsymbol{k}1}\rangle = 1 - 2f(E_{\boldsymbol{k}}),$$

тогда величина запрещенной зоны перепишется в виде

$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} u^*_{\boldsymbol{k}'} v_{\boldsymbol{k}'} \left(1 - 2(E_{\boldsymbol{k}'})\right) = -\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{2E_{\boldsymbol{k}'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{\boldsymbol{k}'}}{2}\right).$$

В приближении БКШ $V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} = -V$ и $\Delta_{\boldsymbol{k}} = \Delta$, откуда приходим к уравнению на $\Delta(T)$:

$$1 = \frac{V}{2}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\operatorname{th}\left(\frac{E_{\boldsymbol{k}}}{2T}\right)}{E_{\boldsymbol{k}}}, \tag{4}$$

где $E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\xi^2_{\boldsymbol{k}} + \Delta^2}$.

Критическую температуру T_c определим так, что $\Delta(T) \to 0$, что $\Delta(T) \to 0$. Тогда $E_{\boldsymbol{k}} \to |\xi_{\boldsymbol{k}}|$, соответсвенно заменяем $E_{\boldsymbol{k}}$ в (4) и переходим к интегрированию:

$$1 = N(0)V \int_0^{\Theta_D/T} \frac{\operatorname{th} x}{x}\, dx = N(0)V \ln\left(\frac{2e^{\gamma}}{\pi}\frac{\Theta_D}{T_c}\right), \qquad \Rightarrow \qquad T_c = \frac{2e^{\gamma}}{\pi}\Theta_D e^{-\frac{1}{N(0)V}} \approx 1.13\,\Theta_D e^{-\frac{1}{N(0)V}}.$$

Сравнивая с выражением для $\Delta(0)$, находим

$$2\Delta(0) \approx 3.56\, T_c.$$

Зависимость $\Delta(T)$

Для конечной температуры (4) перейдёт в уравнение, вида

$$1 = N(0)V \int_0^{\Theta_D} \frac{\operatorname{th}\left(\frac{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}{2T}\right)}{\sqrt{\xi^2+\Delta^2}}\, d\xi,$$

которое мы решили численно для $N(0)V \approx 0.43$, получили зависимость на рис. 1, которая носит универсальный характер при $\Theta_D/T_c \gg 1$. Также на графике отображена асиматотика около T_c:

$$\frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \approx 1.74\sqrt{1 - \frac{T}{T_c}}, \qquad T \to T_c,$$

а щель выражается в виде $\Delta(0) \approx 1.76 T_c$.

Проверка цитирование [1], [2], [3], [4].

Список литературы

[1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Statistical Physics: Volume 5.* Elsevier, 2013.

[2] E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii. *Statistical physics: Volume 9.* Elsevier, 2013.

[3] M. Tinkham. *Introduction to superconductivity.* Courier Corporation, 2004.

[4] L. N. Cooper. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Physical Review*, 104(4):1189, 1956.