Вопрос по выбору шестого семестра «Количественное описание сверхпроводимости»

Авторы заметок: Хоружий Кирилл
Примак Евгений

От: *16 июня 2022 г.*

Содержание

Результаты

Найдены характерный зависимости для сверхпроводников в модели БКШ:

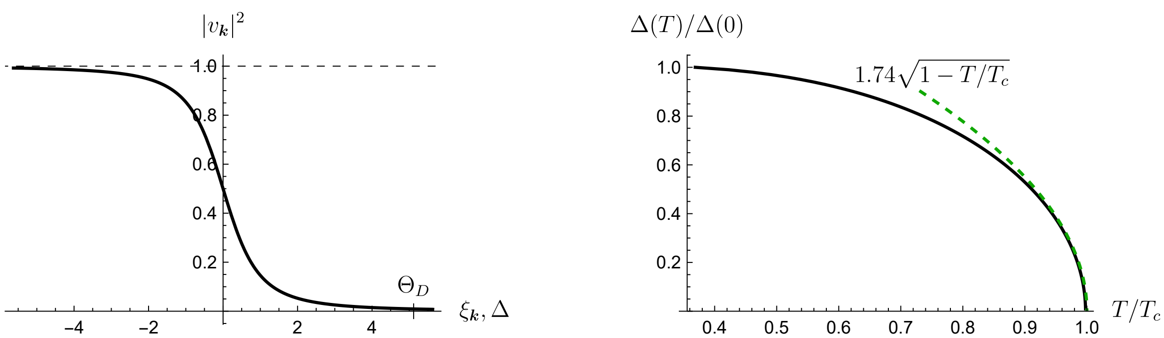

Рис. 1: Зависимость $|v_{\boldsymbol{k}}|^2(\xi_{\boldsymbol{k}})$ при $T=0$ и $N(0)V=0.43$, зависимость $\Delta(T)$

Получены формулы:

$$T_c \approx 1.13\,\Theta_D e^{-\frac{1}{N(0)V}}, \qquad 2\Delta(0) \approx 3.56\,T_c, \qquad \frac{\Delta(T)}{\Delta(0)} \overset{T\to T_c}{\approx} 1.74\sqrt{1-\frac{T}{T_c}}.$$

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

Вариационный метод

Гамильтониан системы почти идеального ферми-газа запишется [1]
$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}} \varepsilon_{\boldsymbol{k}} \left(\hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow} + \hat{c}^\dagger_{\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\downarrow} \right) + \sum_{\boldsymbol{k},\,\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} c^\dagger_{\boldsymbol{k}\uparrow}\hat{c}^\dagger_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}'\uparrow}.$$
Чтобы явно не учитывать постоянство числа частиц в системе [1] 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:
$$\Delta_{\boldsymbol{k}} \overset{\text{def}}{=} -\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} u_{\boldsymbol{k}'} v_{\boldsymbol{k}'} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \sin\left(2\theta_{\boldsymbol{k}'}\right), \qquad E_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\Delta^2_{\boldsymbol{k}} + \xi^2_{\boldsymbol{k}}}. \tag{2}$$
Тогда явно находим
$$\sin(2\theta_k) = 2u_{\boldsymbol{k}} v_{\boldsymbol{k}} = \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}, \qquad \cos(2\theta_{\boldsymbol{k}}) = v^2_{\boldsymbol{k}} - u^2_{\boldsymbol{k}} = -\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}. \tag{3}$$
Тогда уравнение на ширину запрещенной зоны запишется в виде
$$\Delta_{\boldsymbol{k}} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{E_{\boldsymbol{k}'}} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} = -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}'} V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'} \frac{\Delta_{\boldsymbol{k}'}}{\sqrt{\Delta^2_{\boldsymbol{k}'} + \xi^2_{\boldsymbol{k}'}}}. \tag{4}$$

Подстановка Купера

Сначала Купером [2], 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 (4) запишется в виде

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

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

Уравнения (3) 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.

Энергия основного состояния

Энергия задаётся выражением:

$$E=\langle\psi_G|\hat{H}-\mu\hat{N}|\psi_G\rangle=\sum_k\left(\xi_k-\frac{\xi_k^2}{E_k}\right)-\frac{\Delta^2}{V}$$

И отличие энергии в сверхпроводящем и нормальном состояниях при нулевой температуре, то есть $\Delta=0$ даётся выражением

$$\langle E\rangle_S-\langle E\rangle_n=2\sum_{|\boldsymbol{k}|>k_F}\left(\xi_{\boldsymbol{k}}-\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}^2}{E_{\boldsymbol{k}}}\right)-\frac{\Delta^2}{V}=\left(\int\ldots\right)=\underbrace{\left[\frac{\Delta^2}{V}-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2\right]}_{\text{кинетическая}}-\underbrace{\frac{\Delta^2}{V}}_{\text{пот.}}$$

и для внутренней энергии

$$U_s(0)-U_n(0)=-\frac{1}{2}N(0)\Delta^2(0).$$

Каноническое преобразование Боголюбова

В отличии от обычного металла, из-за наличия когерентности

$$\langle\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}\rangle=b_k\neq 0,\qquad\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}=b_{\boldsymbol{k}}+(\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}-b_k).$$

Подставив замену с точностью до флуктуаций второго порядка получим модельный гамильтониан

$$\hat{H}_M=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\xi_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}+\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger b_{\boldsymbol{k}'}+b_{\boldsymbol{k}}^*\hat{c}_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}'\uparrow}-b_{\boldsymbol{k}}^*b_{\boldsymbol{k}'}).$$

Определив щель $\Delta_{\boldsymbol{k}}=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}b_{k'}$ получим

$$\hat{H}_M=\sum_{\boldsymbol{k}\sigma}\xi_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}^\dagger\hat{c}_{\boldsymbol{k}\sigma}+\sum_{\boldsymbol{k}}\Delta_{\boldsymbol{k}}(\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger+\Delta_{\boldsymbol{k}}^*\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}-b_{\boldsymbol{k}}^*b_{\boldsymbol{k}'}).$$

Теперь произведём линейную замену с $|v_k|^2+|u_k|^2=1$ на переменные Н.Н. Боголюбова

$$\begin{cases}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}&=\quad u_{\boldsymbol{k}}^*\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}+v_{\boldsymbol{k}}\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}^\dagger\\ \hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger&=-v_{\boldsymbol{k}}^*\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}+u_{\boldsymbol{k}}\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}^\dagger\end{cases}\qquad\rightsquigarrow\qquad\begin{cases}\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}=u_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}-v_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}^\dagger\\ \hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}=v_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{\boldsymbol{k}\uparrow}^\dagger-u_{\boldsymbol{k}}\hat{c}_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\end{cases}$$

Получим большой гамильтониан [3], в котором подбором параметров $u_{\boldsymbol{k}}$, $v_{\boldsymbol{k}}$ добьёмся обнуления коэффициентов перед недиагональными слагаемыми $\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}$

$$u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{2}\frac{\Delta_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}},\qquad|v_{\boldsymbol{k}}|^2=1-|u_{\boldsymbol{k}}|^2=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\xi_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right).$$

Гамильтониан сведется к виду

$$\hat{H}_M=\sum_{\boldsymbol{k}}(\xi_{\boldsymbol{k}}-E_{\boldsymbol{k}}+\Delta_{\boldsymbol{k}}b_{\boldsymbol{k}}^*)+\sum_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}}(\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}^\dagger\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}+\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}^\dagger\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1})$$

И тогда *ширина щели* задаётся

$$\Delta_{\boldsymbol{k}}=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\langle\hat{c}_{-\boldsymbol{k}'\downarrow}\hat{c}_{\boldsymbol{k}'\downarrow}\rangle=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}u_{\boldsymbol{k}'}^*v_{\boldsymbol{k}'}\langle 1-\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}^\dagger\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}0}-\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}^\dagger\hat{\gamma}_{\boldsymbol{k}1}\rangle.\tag{5}$$

При $T=0$ формула переходит в (2) в виду отсутствия квазичастиц, однако при $T>0$ этот подход становится гораздо удобнее.

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(5)

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

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 $\Delta(T)$:

$$1 = \frac{V}{2} \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\operatorname{th}\left(\frac{E_{\boldsymbol{k}}}{2T}\right)}{E_{\boldsymbol{k}}}, \tag{6}$$

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 (6) 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 (6) 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 $\Delta(0) \approx 1.76 T_c$.

Список литературы

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

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

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