

# СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

В.А. Кашурников, А.В. Красавин

## Конспект лекций

### Осенний семестр

#### 1 неделя. Введение. Фазовые переходы в системе многих частиц

Изучение систем, состоящих из большого числа взаимодействующих частиц, является одной из важнейших проблем современной физики.

Наиболее интересно термодинамическое поведение веществ при возникновении определенного типа упорядочения (например, выстраивание магнитных моментов). Это упорядочение происходит при некоторой температуре, причем переход совершается в чрезвычайно узкой области температур и носит название фазового перехода (перехода вещества из одной фазы в другую).

Фазовые переходы, связанные с упорядочением, происходят в различных физических системах: бинарных сплавах, ферромагнетиках и антиферромагнетиках, в дипольных моментах в сегнетоэлектриках, электронах в сверхпроводниках, в гелии в сверхтекучем состоянии и т.д.

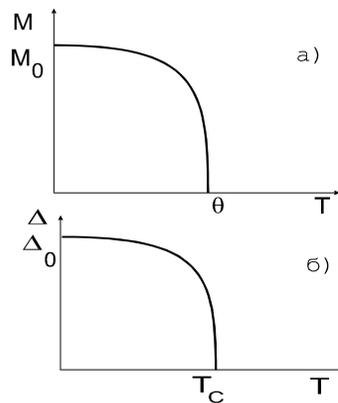
Особый интерес в поведении макроскопических (термодинамических) систем представляют именно точки фазового перехода (например, по температуре  $T$ ), так как в них свойства системы меняются скачком. Поскольку из требования термодинамической устойчивости возникает требование непрерывности термодинамических потенциалов (например, из требования положительности теплоемкости  $C$  ( $C = dE/dT$ )) вытекает непрерывность энергии  $E$  и свободной энергии  $F$ , то в точке фазового перехода изменение термодинамического потенциала должно быть мало. Это значит, что возможно: 1) либо появление бесконечно малого количества новой фазы с конечным отличием ее свойств от свойств старой; 2) либо возникновение одновременно по всему объему “бесконечно малого” изменения свойств, соответствующего новой фазе.

Первый случай – расслоение на фазы – это фазовый переход *первого рода* (так как он обычно сопровождается скачком некоторых первых производных от соответствующего термодинамического потенциала, например энтропии  $S$ ). Поскольку возникновение новой фазы приводит к появлению поверхностной энергии, зародыши малого объема энергетически невыгодны, а достаточно большие могут возникнуть только благодаря флуктуациям. Поэтому при фазовых переходах первого рода возможны переохлаждение и перегрев при отсутствии таких зародышей. Примерами такого типа переходов являются расслоение на фазы (пар – жидкость, жидкость – твердое тело, пар – твердое тело), в частности, кипение и плавление, и сверхпроводящий переход в магнитном поле.

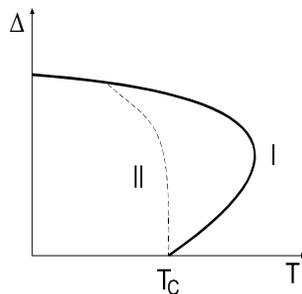
Во втором случае появление новых свойств не связано с поверхностной энергией и потому исключает перегрев или переохлаждение. Такие фазовые переходы представляют особый интерес, они называются фазовыми переходами *второго рода*, поскольку в точке фазового перехода некоторые вторые производные термодинамического потенциала обычно имеют особенность (например, теплоемкость  $C_v$ ). Поскольку “скачкообразное”

изменение свойств макроскопического объема невозможно, вблизи точки перехода должны *флуктуационно* возникать все большие области новой фазы, чтобы сразу после перехода новое состояние могло охватить весь объем. Это означает, что при приближении к точке перехода второго рода радиус корреляции флуктуаций стремится к бесконечности. Такие фазовые переходы обычно сопровождаются изменением симметрии состояния. Примеры такого типа переходов: структурные перестройки в кристаллах при определенной температуре; переходы порядок – беспорядок в сплавах; переходы ферромагнетик – парамагнетик или антиферромагнетик – парамагнетик в спиновых системах и ферромагнитных металлах и сплавах; сегнетоэлектричество, появление сверхпроводимости и сверхтекучести, “смешанное” вихревое состояние в “жестких” сверхпроводниках второго рода и т.д.

Для каждого фазового перехода существует понятие параметра порядка, чье ненулевое среднее значение в упорядоченной фазе и нарушает симметрию. Так, у ферромагнетика параметром порядка является средняя намагниченность. Граничную температуру, при которой спонтанно нарушается симметрия и в которой параметр порядка обращается в нуль, называют критической температурой  $T_c$  (или температурой Кюри  $\theta$ , как у ферромагнетиков).



Различие типа фазовых переходов отражается на характере обращения в нуль параметра порядка в точке фазового перехода. Если параметр порядка плавно обращается в нуль при  $T = T_c$  (но с бесконечной производной из-за флуктуаций), то это – фазовый переход второго рода. Если же зависимость параметра порядка вблизи области фазового перехода неоднозначна, то в системе обязательно наблюдается расслоение на фазы, и это – переход первого рода.



Появление общих закономерностей у достаточно разнородных объектов указывает на общность статистических свойств. Это хорошо иллюстрируется с точки зрения термодинамики сравнением внутренней энергии  $E$  и энтропии  $S$ .

Известно, что  $S$  – степень беспорядка. Чем хаотичнее состояние системы, тем больше  $S$ . С другой стороны, энергия  $E$  стремится к минимуму при упорядочивании системы.

Устойчивость системы определяется минимумом свободной энергии  $F: F = E - TS$ . При высоких температурах основной член  $-TS < 0$ , поэтому для минимума  $F$  необходима большая энтропия  $S$ , т.е. беспорядок. Но при  $T \rightarrow 0$  свободная энергия стремится к  $E$  (и к минимальному значению), а энтропия – к нулю, т.е. система упорядочивается. Следовательно, существует температура, при которой эти два фактора – энергии упорядочения и разупорядочения – сравниваются. Это и есть температура перехода.

В основе теории фазовых переходов лежит идея о поле упорядочения, возникающем за счет взаимодействия частиц. Теория наиболее проста, если это поле предполагается равным среднему полю. Именно такая теория среднего поля излагается в первой части данного курса лекций.

### **Магнитный момент атома в твердом теле. Классификация твердых тел по магнитным свойствам.**

Причиной магнитных свойств веществ является магнитный момент  $\mu$ , относящийся либо к электрону, либо к узлу решетки, где локализован электрон (в этом случае говорят о локализованных магнитных моментах), который обычно возникает при движении по замкнутым траекториям электрона  $e$  (например, при его локализации на какой-либо атомной орбитали) с угловой скоростью  $\omega$  радиуса  $a$ . Тогда его можно оценить из следующих соображений:  $\mu \approx \frac{aJ}{2c} \approx \frac{a^2 e \omega}{2c} \approx \frac{p a e}{2 c m_e}$ ,  $J = ev$  – наведенный ток;  $c$  – скорость света;  $av \sim v$  – линейная скорость;  $p = m_e v$  – импульс. Далее, согласно квантово-механическому принципу:  $pa \sim \hbar$ , откуда имеем:  $\mu \approx \mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc}$ , где  $\mu_0$  – магнетрон Бора.

Будем полагать далее, что каждый электрон в узле имеет магнитный момент  $\mu_0$ . Поместим образец во внешнее магнитное поле  $\vec{H}$ . Введем намагниченность системы:  $\vec{M} = \sum_i \vec{\mu}_i$ . Если внешнее магнитное поле слабое, то наведенный магнитный момент оказывается пропорциональным ему:  $\vec{M} = \vec{H}\chi$ . Коэффициент пропорциональности  $\chi$  называют магнитной восприимчивостью системы. Для магнитной индукции  $\vec{B}$  (истинного внутреннего магнитного поля) можно написать:

$$\vec{B} = \vec{H} + 4\pi\vec{M} = \vec{H}(1 + 4\pi\chi) = \vec{H}\mu; \quad \mu \equiv 1 + 4\pi\chi.$$

Здесь  $\mu$  – магнитная проницаемость.

Принята следующая классификация веществ по их магнитным свойствам:

- 1) парамагнетики:  $\mu > 1 \Rightarrow$  магнитное поле внутри усиливается;
- 2) диамагнетики:  $\mu < 1, \chi < 0 \Rightarrow$  ослабление магнитного поля;
- 3) ферромагнетики: в отсутствие внешнего магнитного поля  $\vec{B} \neq 0$ ; и  $\mu = \infty; \chi = \infty$ ;
- 4) идеальный диамагнетизм: полная экранировка внешнего поля:  $\vec{H} \neq 0, \vec{B} = 0 \Rightarrow \mu = 0, \chi = -\frac{1}{4\pi}$ . Идеальным диамагнетиком является сверхпроводник;
- 5) немагнитные вещества:  $\mu = 1, \chi = 0$ .

Рассмотрим кристалл во внешнем магнитном поле с узлами, имеющими магнитные моменты. Пусть температура  $T \neq 0$ , и магнитные моменты взаимодействуют только с внешним полем. При включенном внешнем поле энергия взаимодействия  $V = -\vec{\mu}\vec{H}$ , и поле стремится развернуть моменты в свою сторону (а температура – наоборот, разупорядочить). Тогда:  $V = -\vec{\mu}\vec{H} = -\mu_0 H S_z / S$ , где  $S$  – спин.

Энергия взаимодействия отдельного момента с внешним полем имеет только два значения:

$$E_n = -\mu_0 H \quad (\text{вдоль поля}), \quad \mu = +\mu_0 \uparrow;$$

$$E_n = \mu_0 H \quad (\text{против поля}), \quad \mu = -\mu_0 \downarrow.$$

Рассмотрим полную среднюю намагниченность системы:

$$\langle \vec{M} \rangle = \sum_i \langle \mu_i \rangle = \langle \mu \rangle N,$$

при этом угловые скобки означают квантово-механическое усреднение по ансамблю Гиббса. Тогда по определению имеем:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\text{Tr}(\mu e^{-\hat{H}/kT})}{\text{Tr}(e^{-\hat{H}/kT})} = \frac{\sum_n \langle n | \mu e^{-\hat{H}/kT} | n \rangle}{\sum_n \langle n | e^{-\hat{H}/kT} | n \rangle} = \frac{\sum_n \mu_n e^{-E_n/T}}{\sum_n e^{-E_n/T}}.$$

Учитывая, что магнитные моменты не взаимодействуют, можно независимо рассчитать выражение для каждого момента, имея ввиду только его два состояния:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\mu_0 e^{\mu_0 H/T} - \mu_0 e^{-\mu_0 H/T}}{\mu_0 e^{\mu_0 H/T} + \mu_0 e^{-\mu_0 H/T}}.$$

Отсюда имеем:

$$\langle \mu \rangle = \mu_0 \tanh\left(\frac{\mu_0 H}{T}\right).$$

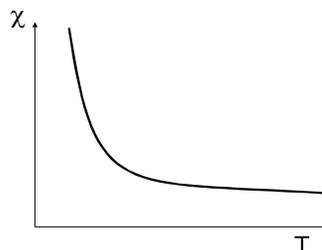
Если внешнее поле устремить к нулю, то

$$\chi = \frac{N\mu_0^2}{T} > 0.$$

При этом если положить внешнее поле точно нулю, то при любой температуре

$$H = 0, \quad \langle \mu \rangle \equiv 0, \quad \langle M \rangle = 0,$$

таким образом, система локализованных не взаимодействующих магнитных моментов проявляет типичные парамагнитные свойства. Более того, она никогда не испытывает фазового перехода – для этого необходимо взаимодействие. Температурная зависимость восприимчивости ( $\sim 1/T$ ), называется законом Кюри.



Пусть магнитные моменты взаимодействуют друг с другом, суммарный гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} \lambda_{ij} \vec{\mu}_i \vec{\mu}_j - \vec{H} \sum_i \vec{\mu}_i.$$

На выделенный магнитный момент будет действовать внешнее поле  $\vec{H}$  и поле взаимодействия от всех остальных моментов

$$H_i = \sum_j \lambda_{ij} \mu_j + H.$$

Усредненное (квантово-механически) суммарное поле будет тогда равно

$$\langle H_i \rangle = \sum_j \lambda_{ij} \langle \mu_j \rangle + H.$$

В среднем на выделенный спин действует результирующее эффективное поле

$$H_{eff} = \langle H_i \rangle = \lambda \langle \mu \rangle N + H.$$

Приближение молекулярного поля Вейсса состоит в предположении, что истинное суммарное поле в  $i$ -м узле совпадает со средним полем  $H_{eff}$  и не зависит от ориентации  $i$ -го спина. Легко видеть, что это действительно приближение, так как при направленном вверх  $i$ -м спине вероятность для соседей быть направленными вверх больше средней, т.е. в приближении Вейсса мы пренебрегаем флуктуациями. Это лучше всего выполняется при большем числе ближайших соседей  $Z$ . Более того, при  $Z \rightarrow \infty$  приближение Вейсса дает *точный* результат.

Таким образом, учитывая, что каждый момент находится в эффективном среднем поле  $H_{eff}$ , можно получить самосогласованное уравнение Вейсса

$$\langle \mu \rangle = \mu_0 \tanh \left( \frac{\mu_0 [H + \langle \mu \rangle N \lambda]}{T} \right).$$

Взаимодействие между магнитными моментами носит чисто квантовый характер – это так называемое обменное взаимодействие.

Для ансамбля одинаковых квантовых частиц должен выполняться принцип тождественности – они должны быть неразличимы в силу принципа неопределенности. Если имеются всего две частицы, то состояния системы, получающиеся друг из друга просто перестановкой обеих частиц, должны быть физически полностью эквивалентны. Это значит, что в результате такой перестановки волновая функция системы может измениться только на несущественный фазовый множитель. Поэтому есть всего две возможности: волновая функция либо симметрична (это статистика Бозе), либо антисимметрична (это статистика Ферми).

Рассмотрим теперь две выделенные частицы, имеющие квантовую статистику и в первом приближении не взаимодействующие (кулоновское и другие взаимодействия учтены

неким средним полем). Полную волновую функцию системы можно выразить через одночастичные функции  $\Psi_a(1)$  и  $\Psi_b(2)$  следующим образом:

$$\Psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_a(1)\Psi_b(2) \pm \Psi_a(2)\Psi_b(1) \}.$$

Соответственно бозонам отвечает знак “+”, а фермионам “-”, реализующие симметричную и антисимметричную ситуации. Рассмотрим теперь систему электронов, локализованных в поле кристаллической решетки. Учет также спиновую компоненту волновой функции, так что полная волновая функция (которая должна быть антисимметрична) имеет вид:

$$\Phi(r_1, r_2, \sigma_1, \sigma_2) = \Psi(r_1, r_2)\chi(\sigma_1, \sigma_2).$$

При этом антисимметричной ситуации “-” должна соответствовать симметричная спиновая компонента, а симметричной ситуации “+” должна соответствовать антисимметричная спиновая компонента.

Учет теперь в первом порядке по теории возмущений кулоновское взаимодействие электронов  $U = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ . Поправка к энергии системы за счет взаимодействия имеет вид:

$$E = \int \Psi(1,2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi^*(1,2) d^3r_1 d^3r_2.$$

Имеем:

$$E_{\uparrow\uparrow} = E_0 - J_{12}, \quad E_{\downarrow\downarrow} = E_0 + J_{12},$$

где  $E_0$  – энергия, не зависящая от ориентации спинов частиц:

$$E = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \{ |\Psi_a(r_1)|^2 |\Psi_b(r_2)|^2 + |\Psi_a(r_2)|^2 |\Psi_b(r_1)|^2 \} d^3r_1 d^3r_2,$$

$J_{12}$  – обменный интеграл:

$$J_{12} = \frac{1}{2} \int \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \{ \Psi_a(r_1)\Psi_b(r_2)\Psi_a^*(r_2)\Psi_b^*(r_1) \} d^3r_1 d^3r_2.$$

В случае  $J_{12} > 0$  спинам выгодно выстроится параллельно, если  $J_{12} < 0$ , то антипараллельно. В первом случае упорядочение приводит к ферромагнетизму, во втором - к антиферромагнетизму. Масштаб  $J_{12}$  определяется кулоновским взаимодействием, т.е.  $J_{12} \sim \frac{e^2}{a} \sim 10$  эВ, где  $a$  – межатомное расстояние. Еще на порядок величину  $J_{12}$  может уменьшить множитель  $e^{-2a/a_B}$ , где  $a_B$  – боровский радиус, из-за перекрытия экспоненциальных “хвостов” волновых функций. Таким образом,  $J_{12} \sim 1$  эВ.

## 2 неделя. Модель Изинга

Рассмотрим модель Изинга

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j - H \sum_i \mu_i.$$

и используем приближение среднего поля. Учтем, что на выделенный магнитный момент будет действовать внешнее поле  $H$  и поле взаимодействия от всех остальных моментов:

$$H_i = \sum_j V_{ij} \mu_j + H.$$

После усреднения суммарное поле будет тогда равно

$$\langle H_i \rangle = \sum_j V_{ij} \langle \mu_j \rangle + H.$$

В силу трансляционной инвариантности ( $\langle \mu_j \rangle$  не зависит от  $j$ ) в среднем на выделенный спин действует результирующее эффективное поле:

$$H_{eff} = \langle H_i \rangle = R \sum_j V_{ij} + H,$$

где  $R = \langle \mu_j \rangle$ . Заметим, что величина

$$V(0) = \sum_j V_{ij} = \sum_j V(|r_i - r_j|)$$

является нулевой фурье-компонентой взаимодействия  $V(q)$ :

$$V(\vec{q}) = \sum_j V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|) e^{i\vec{q}(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}.$$

Таким образом, имеем:

$$H_{eff} = \langle H_i \rangle = RV(0) + H.$$

В случае взаимодействия лишь ближайших соседей вводят обозначение  $V(0) = ZJ$ , где  $Z$  – число ближайших соседей;  $J$  – обменный интеграл. Используя приближение среднего поля, заменим истинное поле эффективным. Тогда средний магнитный момент

$$\langle \mu_i \rangle = \frac{\text{Tr}(\mu_i e^{\beta \mu_i \langle H_i \rangle})}{\text{Tr}(e^{\beta \mu_i \langle H_i \rangle})} = \frac{e^{\beta \mu_i \langle H_i \rangle} - e^{-\beta \mu_i \langle H_i \rangle}}{e^{\beta \mu_i \langle H_i \rangle} + e^{-\beta \mu_i \langle H_i \rangle}},$$

( $\beta = 1/T$ ), откуда немедленно получаем самосогласованное уравнение Вейсса:

$$R = th[\beta(H + V(0)R)].$$

Роль температуры Кюри  $\Theta$  играет величина  $V(0)$ . При  $V(0) > 0$  и при  $\beta V(0) > 1$  уравнение описывает ферромагнитное состояние.

Еще раз исследуем вопрос, в каком предельном случае можно считать приближение молекулярного поля Вейсса точным. Ответ очевиден: число частиц, вносящих вклад в поле, действующее на отдельный спин, должно быть велико. Тогда направление рассматриваемого спина не может сильно влиять на направление спина, дающего вклад в поле, действующее на первый спин, так как этот второй спин удерживается на месте  $(Z - 1)$  остальными спинами, где  $Z$  – число спинов в сфере взаимодействия. Таким образом, параметр малости в приближении среднего поля:  $1/Z \ll 1$ .

Рассмотрим приближение среднего поля для модели Изинга. Гамильтониан Изинга с взаимодействием имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\mu_0^2 \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \mu_0 \sum_i S_i H, \quad S_i = \pm 1,$$

$J_{ij} > 0$ . Необходимо записать его в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов. Учитывая разложение, сохраняющее требуемую точность среднего поля, в виде

$$S_k S_l \approx \langle S_k \rangle S_l + S_k \langle S_l \rangle - \langle S_k \rangle \langle S_l \rangle,$$

получаем:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\mu_0 N H_0 R - \mu_0 \sum_i S_i (H + H_0),$$

где  $H_0 = \mu_0 \sum_j J_{ij} R = Z\mu_0 J R$  – среднее поле;  $R = \langle S_i \rangle$  – параметр порядка, средний магнитный момент. Рассчитаем статистическую сумму  $Q$  в приближении среднего поля:

$$Q = \prod_i e^{-\beta\mu_0 H_0 R/2} \sum_{S_i=\pm 1} e^{-\beta\mu_0 S_i (H+H_0)} = e^{-N\beta\mu_0 H_0 R/2} [2\text{ch}(\beta\mu_0 (H + H_0))]^N.$$

Найдем свободную энергию в модели Изинга в приближении среднего поля:

$$F = -T \ln Q = \frac{N\mu_0 H_0 R}{2} - TN \ln (2\text{ch}(\beta\mu_0 (H + H_0))).$$

Из условия минимума свободной энергии  $\frac{\partial F}{\partial R} = 0$  получаем уравнение Вейсса на параметр порядка  $R$ .

Исследуем поведение параметра порядка  $R$  при  $T \rightarrow 0$  и  $T \rightarrow \Theta$  в модели Изинга в приближении среднего поля.

Используем уравнение Вейсса. Учитывая, что

$$\text{th}x = x - \frac{x^3}{3} + \frac{2x^5}{45}, \quad x \rightarrow 0;$$

$$thx = 1 - 2e^{-x}, \quad x \rightarrow \infty,$$

находим:

$$R = 1 - 2e^{-\frac{2\Theta}{T}}, \quad T \rightarrow 0;$$

$$R^2 = 3y - \frac{12y^2}{5}, \quad y = \frac{\Theta - T}{\Theta} \ll 1, \quad T \rightarrow \Theta, \quad \Theta = \mu_0^2 ZJ.$$

Для исследования переходов ферромагнетик – парамагнетик в модели Изинга полезно рассмотреть свободную энергию системы и изучить ситуацию с точки зрения энергетической выгоды фазовых состояний. По определению свободная энергия  $F = E - TS$ , где  $E$  – внутренняя энергия системы;  $S$  – энтропия. Энергию можно выразить через термодинамическое среднее от гамильтониана:

$$E = \langle \hat{H} \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{ij} V_{ij} \langle \mu_i \mu_j \rangle - H \sum_i \langle \mu_i \rangle.$$

В приближении среднего поля переменные  $\mu_i$  независимы, поэтому  $\langle \mu_i \mu_j \rangle = \langle \mu_i \rangle \langle \mu_j \rangle$ . Учитывая, что  $\langle \mu_i \rangle = R$ , получаем:

$$E = -\frac{R^2 \Theta N}{2} - RHN,$$

где учтено, что  $V(0)N = \sum_{ij} V(r_{ij})$ ,  $V(0) = \Theta$ , а также использована трансляционная инвариантность. Для вычисления энтропии учтем, что параметр порядка является термодинамической величиной, поэтому энтропию можно вычислить, подсчитывая число конфигураций при заданном значении  $R$ . Это несложно сделать (что было показано Брэггом и Вильямсом), так как все такие конфигурации имеют в приближении Вейсса одну и ту же энергию. Очевидно, что  $R = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N}$ , где  $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ ,  $N_{\uparrow}$  – число спинов, направленных по полю,  $N_{\downarrow}$  – против поля. Энтропию можно выразить через логарифм статистического веса:  $S = \ln W$ , при этом статистический вес  $W$  при заданном  $R$  равен

$$W = \frac{N!}{N_{\uparrow}! N_{\downarrow}!}.$$

Используя при больших значениях  $N$  асимптотическую формулу Стирлинга и учитывая, что

$$\frac{N_{\uparrow}}{N} = \frac{1+R}{2}; \quad \frac{N_{\downarrow}}{N} = \frac{1-R}{2},$$

находим окончательно:

$$S = -\frac{N}{2} \left\{ (1+R) \ln \left( \frac{1+R}{2} \right) + (1-R) \ln \left( \frac{1-R}{2} \right) \right\}.$$

Как и следовало ожидать, при полном упорядочении, когда все магнитные моменты направлены по полю ( $R = 1$ ), энтропия  $S = 0$ . Напротив, при полном разупорядочении ( $R = 0$ ) энтропия расходится ( $S = N \ln 2 \rightarrow \infty$ ).

Свободная энергия ферромагнетика записывается в результате следующим образом:

$$\frac{F}{N} = -\frac{R^2\Theta}{2} - RH + \frac{T}{2} \left\{ (1+R) \ln \left( \frac{1+R}{2} \right) + (1-R) \ln \left( \frac{1-R}{2} \right) \right\}.$$

Исследуем полученное выражение в пределе малого внешнего поля.

В точке равновесия свободная энергия должна быть минимальна:

$$\frac{\partial F}{\partial R} = 0 = N \left\{ -(R\Theta + H) + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+R}{1-R} \right) \right\},$$

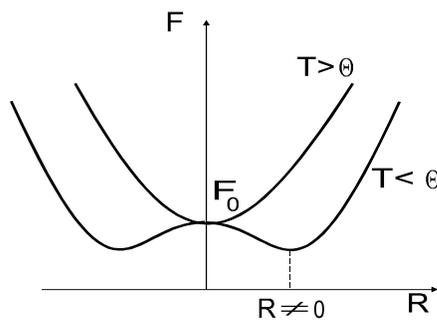
откуда немедленно следует уравнение Вейсса для параметра порядка. Вторая производная свободной энергии:

$$\frac{1}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} = -\Theta + \frac{T}{1-R^2}.$$

Свободная энергия имеет всего один минимум (при  $R = 0$ ). В случае  $T < \Theta$  возникает еще один экстремум (минимум) при  $R \neq 0$ , при этом значение параметра порядка является нетривиальным решением уравнения Вейсса. Вблизи точки перехода воспользуемся разложением уравнения Вейсса:

$$R^2 = 3 \left( \frac{\Theta}{T} - 1 \right); \quad \frac{1}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} = 2(\Theta - T) > 0,$$

т.е. свободная энергия имеет минимум. Точка этого минимума лежит ниже точки экстремума при  $R = 0$ , что говорит о выгодности ферромагнитного состояния  $R \neq 0$  при  $T < \Theta$ .



Ферромагнетизм выгоден и при низких температурах. В пределе  $T \rightarrow 0$  параметр порядка  $R = 1 - 2e^{-2\Theta/T}$ . Отсюда

$$\frac{1}{N} \frac{\partial^2 F}{\partial R^2} = T \left( -\frac{\Theta}{T} + \frac{1}{4} e^{2\Theta/T} \right) > 0.$$

Таким образом, точка фазового перехода характеризуется появлением глобального минимума свободной энергии с нетривиальным значением параметра порядка, символизирующего ферромагнитное упорядочение.

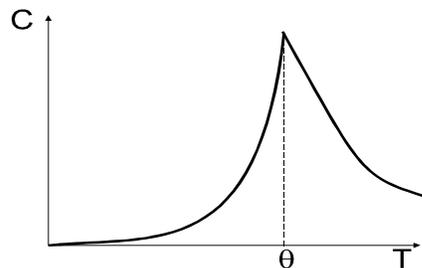
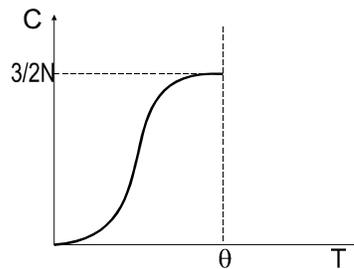
Рассмотрим важную экспериментально измеряемую физическую величину – теплоемкость – количество энергии, которую запасает система при повышении температуры на 1 К (например, за счет переориентации спинов и возбуждения колебательных степеней свободы). Рассчитаем ее в приближении среднего поля в модели Изинга. Из выражения для энергии получаем:

$$C = \frac{\partial E}{\partial T} = -\frac{N\Theta}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial T^2}.$$

Отсюда, воспользовавшись известными предельными соотношениями для параметра порядка, имеем:

$$C = \begin{cases} \frac{3}{2}N, & T \rightarrow \Theta; \\ 4\left(\frac{\Theta}{T}\right)^2 N e^{-\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0. \end{cases}$$

Таким образом, при низких температурах теплоемкость экспоненциально стремится к нулю, так как в системе имеется конечная щель ( $2\Theta$ ) между основным и возбужденными состояниями. В точке перехода она конечна. Численный множитель  $3/2$  не случаен – он связан с числом степеней свободы в трехмерной ситуации. Следует заметить, что на эксперименте наблюдается особенность вблизи точки перехода, что говорит о неприменимости приближения среднего поля в этой области.



Получим закон Кюри-Вейсса для восприимчивости исходя из уравнения Вейсса. По определению:

$$\chi = \left. \frac{dM}{dH} \right|_{H \rightarrow 0}, \quad M = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} = R\mu_0,$$

при этом  $\chi$  – полная производная от магнитного момента (коэффициент при первой поправке разложения по полю), в то время как магнитный момент – это термодинамическая производная по полю от свободной энергии. Используя уравнение Вейсса, получим замкнутое уравнение на  $\chi$ , откуда

$$\chi = \frac{\mu_0^2(1 - R^2)}{T - \Theta(1 - R^2)}.$$

Рассмотрим предельные случаи:

$$\chi = \begin{cases} \frac{4\mu_0^2}{T} e^{-2\frac{\Theta}{T}}, & T \rightarrow 0; \\ \frac{\mu_0^2}{2(T - \Theta)}, & T \rightarrow \Theta - 0; \\ \frac{\mu_0^2}{\Theta - T}, & T \rightarrow \Theta + 0. \end{cases}$$

Вблизи области фазового перехода наблюдается типичный закон Кюри – Вейсса  $\chi \sim 1/|T - \Theta|$ .

При низких температурах так же, как и в температурной зависимости теплоемкости, наблюдается экспоненциальная зависимость восприимчивости, связанная с конечной щелью в спектре возбуждений модели Изинга.

Результаты расчета теплоемкости системы в приближении среднего поля вблизи точки перехода резко отличаются от эксперимента: расходимость ( $\lambda$ -точка), наблюдаемая в эксперименте, резко контрастирует с результатом среднего поля, согласно которому теплоемкость  $C$  в точке перехода конечна (и равна в модели Изинга  $3/2kN$ ). Учет флуктуации магнитных моментов, играющие существенную роль именно вблизи точки перехода, и рассчитаем их вклад в теплоемкость системы. По определению при нулевом внешнем поле

$$C = \frac{dE}{dT}, \quad E = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \langle \mu_i \mu_j \rangle.$$

Учитывая, что

$$V_{ij} = \frac{1}{N} \sum_q V(\vec{q}) e^{i\vec{q}(\vec{R}_i - \vec{R}_j)},$$

получаем:

$$E = -\frac{1}{2} \sum_q V(\vec{q}) g(q) = -\frac{1}{2} \sum_q \frac{V(\vec{q})}{1 - \beta V(\vec{q})}.$$

Рассчитаем удельную (на 1 спин) теплоемкость вблизи фазового перехода, учитывая вклад только длинноволновых поправок ( $V(q) = V(0) - \alpha q^2$ ):

$$C = \frac{1}{2} N \sum_{\vec{q}} \frac{\beta^2 V^2(\vec{q})}{(1 - \beta V(\vec{q}))^2} \approx \frac{\Omega_0 V^2(0)}{4(\pi\alpha)^2} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(q^2 + \kappa^2)^2}, \quad \kappa^2 = \frac{T - \Theta}{\alpha}.$$

Теплоемкость расходится вблизи области фазового перехода по закону

$$C \sim \frac{1}{\sqrt{T - \Theta}}, \quad T > \Theta.$$

При  $T < \Theta$  теплоемкость расходится по закону

$$C \sim \frac{1}{\sqrt{\Theta - T}}.$$

Таким образом, наблюдаемую на эксперименте  $\lambda$ -расходимость около точки фазового перехода можно объяснить вкладом флуктуаций в теплоемкость.

### 3 неделя. Точные решения в одномерной и двумерной моделях Изинга

В низкоразмерной ситуации в приближении ближайших соседей удастся *точно* (без приближения среднего поля) рассчитать статистические свойства модели Изинга и исследовать проблему фазового перехода в ней.

Рассмотрим цепочку из  $N$  спинов, замкнутую в кольцо, так что  $\mu_{N+1} = \mu_1$ , т.е. периодические условия. Если учитывать взаимодействие только ближайших соседей, то гамильтониан системы можно представить однократной суммой:

$$\hat{H} = - \sum_i (V \mu_i \mu_{i+1} + H \mu_i),$$

где  $V$  – взаимодействие между  $i$ -м и  $(i + 1)$ -м спинами (взаимодействие между спинами предполагается одинаковым и не зависящим от номера узла, т.е. полная трансляционная инвариантность). Слагаемых в сумме ровно  $N$ .

Любую термодинамическую величину можно выразить через статистическую сумму или ее термодинамические производные. Например, средний магнитный момент можно представить как производную логарифма статсуммы по магнитному полю:

$$\langle \mu \rangle = \frac{1}{N} \frac{\text{Tr} \mu_i e^{-\beta \hat{H}}}{Q} = \frac{1}{\beta N} \frac{\partial}{\partial H} \ln Q.$$

Таким образом, задача сводится к вычислению статистической суммы  $Q$ . Представим ее следующим образом, имея ввиду полный перебор возможных мгновенных реализаций расположений спинов в цепочке:

$$Q = \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_N=\pm 1} e^{(\beta V \mu_1 \mu_2 + \beta \mu_1 H + \beta V \mu_2 \mu_3 + \beta \mu_2 H + \dots + \beta V \mu_N \mu_1 + \beta \mu_N H)}.$$

По виду гамильтониана ясно, что удобно перебирать состояния системы не по отдельным узлам, а по парам  $i$  и  $i + 1$ . Для удобства введем матрицу  $2 \times 2$ :

$$P(\mu_j \mu_{j+1}) = \exp[\beta \mu_j \mu_{j+1} + \beta H \mu_j],$$

или покомпонентно:

$$P(\mu_j \mu_{j+1}) = \begin{pmatrix} e^{\beta V + \beta H} & e^{-\beta V - \beta H} \\ e^{-\beta V + \beta H} & e^{\beta V - \beta H} \end{pmatrix}.$$

Матрица описывает все возможные состояния пары узлов  $j, j + 1$ . Условно можно также записать:

$$P(\mu_j \mu_{j+1}) = \begin{pmatrix} \uparrow\uparrow & \downarrow\uparrow \\ \uparrow\downarrow & \downarrow\downarrow \end{pmatrix},$$

где явно показаны расположения спинов в  $j$ -м и  $(j + 1)$ -м состояниях.

Тогда статистическая сумма будет иметь вид суммы большого числа произведений матриц:

$$Q = \sum_{\mu_1=\pm 1} \sum_{\mu_2=\pm 1} \dots \sum_{\mu_N=\pm 1} P(\mu_1\mu_2)P(\mu_2\mu_3) \dots P(\mu_N\mu_1).$$

При этом если учесть, что

$$\sum_{\mu_2} P(\mu_1\mu_2)P(\mu_2\mu_3) = P^2(\mu_1\mu_3),$$

и применить это свойство ко всем матрицам, то

$$Q = \sum_{\mu_1} P^N(\mu_1\mu_1),$$

т.е. статистическая сумма равна сумме диагональных элементов произведения матриц  $P$ .

То, что на главных диагоналях при перемножении матриц  $P$  собираются все возможные реализации расположений спинов, т.е. статистическая сумма, видно уже при однократном умножении:

$$\begin{pmatrix} \uparrow\uparrow & \downarrow\uparrow \\ \uparrow\downarrow & \downarrow\downarrow \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \uparrow\uparrow & \downarrow\uparrow \\ \uparrow\downarrow & \downarrow\downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow + \downarrow\uparrow\uparrow\downarrow & \uparrow\uparrow\downarrow\uparrow + \downarrow\uparrow\downarrow\downarrow \\ \uparrow\downarrow\uparrow\uparrow + \downarrow\downarrow\uparrow\downarrow & \uparrow\downarrow\downarrow\uparrow + \downarrow\downarrow\downarrow\downarrow \end{pmatrix}.$$

Видно, что на главных диагоналях уже перебраны все возможные реализации двух узлов.

Известно, что след матрицы не меняется при ее преобразовании к другому представлению. Если матрицу  $P$  представить в диагональном виде, то

$$Q = \sum_{\mu_1} P^N(\mu_1\mu_1) = \sum_{k=1}^2 \lambda_k^N,$$

где  $\lambda_k$  – собственные значения матрицы  $P$ . Диагонализуем матрицу  $P$ . Для этого решим секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} e^{\beta V + \beta H} - \lambda & e^{-\beta V - \beta H} \\ e^{-\beta V + \beta H} & e^{\beta V - \beta H} - \lambda \end{vmatrix} = 0.$$

Отсюда

$$\lambda_{1,2} = e^{\beta V} \operatorname{ch} \beta H \pm \sqrt{e^{2\beta V} \operatorname{sh}^2 \beta H + e^{-2\beta V}}.$$

Заметим, что  $\lambda_1 > \lambda_2$ . Поэтому статистическая сумма в пределе больших  $N$  выражается только через одно собственное число  $\lambda_1$ :

$$Q = \lambda_1^N \left( 1 + \left( \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) = \lambda_1^N |_{N \rightarrow \infty}, \quad \ln Q = N \ln \lambda_1.$$

Выражение для средней намагниченности:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\text{sh} \beta H}{\sqrt{\text{sh}^2 \beta H + e^{-4\beta V}}}$$

Проанализируем полученное *точное* выражение. В отсутствие взаимодействия ( $V = 0$ ) из получаем обычное выражение для намагниченности системы невзаимодействующих спинов:  $\langle \mu \rangle = \text{th} \beta H$ . С другой стороны, в пределе слабого поля  $H \rightarrow 0$  имеем:

$$\text{sh} \beta H \sim \beta H \rightarrow 0; \quad \langle \mu \rangle = 0.$$

Намагниченность не имеет особенностей ни по взаимодействию, ни по полю, исчезает при выключении поля, т.е. проявляет явные парамагнитные свойства. Фазового перехода нет.

Таким образом, в одномерной цепочке в приближении ближайших соседей флуктуации настолько сильны, что препятствуют установлению спонтанной намагниченности, и фазовый переход парамагнетик – ферромагнетик отсутствует.

В 1944 г. Онзагером было предложено точное решение задачи о фазовом переходе в модели Изинга на двумерной квадратной решетке. Основной вывод – существует переход в ферромагнитное состояние, причем Онзагеру удалось точно рассчитать статистическую сумму. Для подробного ознакомления с этим известным результатом мы отсылаем читателей к книгам [16,17]. Мы коснемся здесь конспективно лишь основных этапов расчета и обсудим полученные Онзагером *точные* результаты.

Рассмотрим двумерную квадратную решетку с периодическими граничными условиями и  $N$  узлами, каждый из которых имеет единичный спин  $\mu = \pm 1$ . Удобно ввести нумерацию узлов по их координатам:  $x = ka$ ,  $y = la$ , где  $a$  – период решетки;  $k, l$  – целые числа  $1 < k, l < L$ ,  $L^2 = N$ . В этом случае гамильтониан Изинга в приближении ближайших соседей и в отсутствии внешнего поля на такой решетке имеет вид:

$$H = -V \sum_{k,l=1}^L (\mu_{kl} \mu_{kl+1} + \mu_{kl} \mu_{k+1,l}).$$

Статистическая сумма такой системы:

$$Q = \sum_{\{n\}} \exp \left\{ \theta \sum_{k,l=1}^L (\mu_{kl} \mu_{kl+1} + \mu_{kl} \mu_{k+1,l}) \right\},$$

где  $\theta = \beta V$ , а  $\{n\}$  означает суммирование по всем возможным состояниям системы. Воспользуемся тем фактом, что  $\mu_{kl}^2 = 1$ . Тогда несложно получить следующее тождество:

$$\exp \{ \theta \mu_{kl} \mu_{k'l'} \} = \text{ch} \theta + \mu_{kl} \mu_{k'l'} \text{sh} \theta = \text{ch} \theta (1 + \mu_{kl} \mu_{k'l'} \text{th} \theta).$$

Представим статистическую сумму следующим образом:

$$Q = (1 - x^2)^{-N} S;$$

$$S = \sum_{\{n\}} \prod_{k,l=1}^L (1 + x\mu_{kl}\mu_{k+1,l})(1 + x\mu_{kl}\mu_{k+1,l});$$

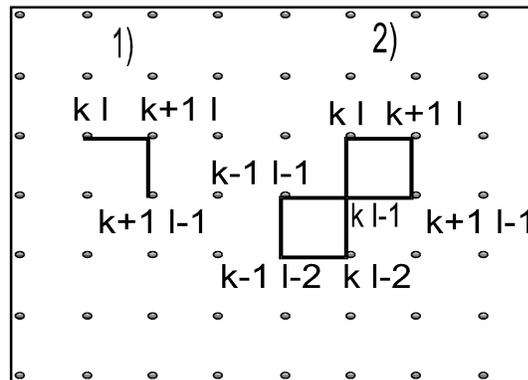
$$x = \text{th}\theta.$$

Таким образом, искомая статистическая сумма является суммой большого числа полиномов по степеням  $x$  и  $\mu_{kl}$ . Поскольку каждый узел связан с четырьмя соседями, то каждое  $\mu_{kl}$  может встретиться в полиноме в степенях от нулевой до четвертой. После суммирования по всем  $\mu_{kl} = \pm 1$  члены, содержащие нечетные степени, обратятся в нуль, так что ненулевой вклад дадут только члены, содержащие  $\mu_{kl}$  в степенях 0, 2 и 4. Более того, поскольку  $\mu_{kl}^0 = \mu_{kl}^2 = \mu_{kl}^4 = 1$ , то каждый член полинома, содержащий все переменные  $\mu_{kl}$  в четных степенях, даст вклад в сумму, пропорциональный полному числу конфигураций  $2^N$ .

Каждому члену полинома можно однозначно поставить в соответствие совокупность линий (графиков), соединяющих некоторые пары соседних узлов решетки. Например, изображенным на рис. графикам соответствуют члены полинома:

$$x^2 \mu_{kl} \mu_{k+1,l}^2 \mu_{k+1,l-1},$$

$$x^8 \mu_{kl}^2 \mu_{k+1,l}^2 \mu_{k+1,l-1}^2 \mu_{k,l-1}^4 \mu_{k,l-2}^2 \mu_{k-1,l-1}^2 \mu_{k-1,l-2}^2.$$



Каждой линии графика сопоставляется множитель  $x$ , а каждому ее концу – множитель  $\mu_{kl}$ . Так как отличный от нуля вклад в статистическую сумму дают лишь члены полинома, содержащие четные степени  $\mu_{kl}$ , то в каждом узле графика должны оканчиваться либо две, либо четыре связи. Другими словами, суммирование ведется только по замкнутым графикам, причем допускается самопересечение.

Окончательно, сумма  $Q$  может быть представлена в следующем виде:

$$Q = 2^N \sum_{\{r\}} x^r g_r,$$

где  $g_r$  – число замкнутых графиков, составленных из четного числа  $r$  связей.

Онзагер разработал способ перебора графиков из суммы с помощью специальной их классификации по длине связей  $r$  и использовал подход “блуждающей” шаг за шагом по

решетке точки с вероятностью перехода, определяемой специальной матрицей перехода. Окончательное *точное* выражение для статистической суммы имеет вид:

$$Q = 2^N (1 - x^2)^{-N} \prod_{p,q=1}^L \left[ (1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left( c_{\mathbb{Z}} \frac{2\pi p}{L} + c_{\mathbb{Z}} \frac{2\pi q}{L} \right) \right]^{1/2}.$$

Рассчитаем свободную энергию двумерной модели Изинга. Находим:

$$F = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \frac{1}{2} T \sum_{p,q=0}^L \left[ (1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) \left( c_{\mathbb{Z}} \frac{2\pi p}{L} + c_{\mathbb{Z}} \frac{2\pi q}{L} \right) \right].$$

Перейдем от суммирования к интегрированию в пределе  $L, N \rightarrow \infty$  :

$$F = -NT \ln 2 + NT \ln(1 - x^2) - \frac{NT}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[ (1 + x^2)^2 - 2x(1 - x^2) (c_{\mathbb{Z}} \omega_1 + c_{\mathbb{Z}} \omega_2) \right] d\omega_1 d\omega_2$$

Исследуем свободную энергию вблизи критической температуры и рассчитаем критическую температуру.

Функция  $F(T)$  имеет особую точку при том значении  $x$  ( $x = \text{th}(V/T)$ ), при котором аргумент логарифма под знаком интеграла может обратиться в нуль. Как функция  $\omega_1$  и  $\omega_2$  этот аргумент минимален при  $\cos \omega_1 = \cos \omega_2 = 1$ . Выражение имеет минимум, в котором оно обращается в нуль, при  $x = x_c = \sqrt{2} - 1$ , при этом соответствующая температура  $T_c$  и является точкой фазового перехода. Можно показать, что свободная энергия понижается при  $T < T_c$ , непрерывна при  $T = T_c$ , а теплоемкость испытывает логарифмическую особенность в точке перехода, т.е. это – типичный термодинамический переход второго рода. Таким образом, в двумерной модели Изинга наблюдается фазовый переход парамагнетик-ферромагнетик при конечной температуре.

Сравним критическую температуру, полученную Онзагером, с результатом теории среднего поля. Исходя из уравнения  $\text{th} V/T_c = \sqrt{2} - 1$ , находим  $T_c = 2V / \ln(\sqrt{2} + 1) \approx 2J$ . Результат теории среднего поля:  $T_c = ZV = 4V$ . Таким образом, точное решение меньше приближенного “среднеполевого” на величину  $\sim 1/Z$ . Интересно отметить, что с этой точки зрения в одномерном случае результат теории среднего поля дает также “завышенный результат” ( $T_c = 2V$ ) по сравнению с *точным* ( $T_c = 0$ ).

Используя выражение для свободной энергии, покажем, что вблизи критической температуры зависимость свободной энергии непрерывна, а теплоемкость расходится логарифмически.

Необходимо выражение для свободной энергии разложить по степеням  $T - T_c$  и рассматривать только последний интегральный член в свободной энергии, имеющий особенности. После разложения аргумента логарифма вблизи его минимума по степеням  $\omega_{1,2}$  и  $T - T_c$  имеем:

$$F \sim \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln[At^2 + B(\omega_1^2 + \omega_2^2)] d\omega_1 d\omega_2, \quad t = T - T_c,$$

где  $A, B$  – постоянные. Расчитывая это выражение при  $t \rightarrow 0$  находим:

$$F \sim -|T - T_c|^2 \ln|T - T_c|,$$

$$C \sim \ln|T - T_c|.$$

#### 4 неделя. Модель Гейзенберга для ферромагнетиков

Модель Изинга удобна для расчета и позволяет в первом приближении описать как конденсированную фазу при низких температурах, так и флуктуационную область вблизи области фазового перехода. Однако малое число степеней свободы магнитного момента на узле не позволяет адекватно отразить все многообразие свойств системы магнитных моментов. Для реальных систем наиболее предпочтительна модель Гейзенберга. Только с ее помощью удастся описать специфические спиновые возбуждения в ферро- и антиферромагнетиках – магноны.

Рассмотрим трехмерную классическую модель Гейзенберга без взаимодействия:

$$\vec{H} = -\mu_0 \sum_i \vec{S}_i \vec{H}, \quad |\vec{S}_i| = S.$$

Определим статистическую сумму  $Q$ . Степени свободы системы определяются углом  $\theta_i$  между полем  $H$  и спином  $S_i$ , поэтому:

$$Q = \prod_i \int d\Omega_i \exp(\beta\mu_0 S H \cos \theta_i) = [4\pi(\text{sh}\{\beta\mu_0 HS\}/\beta\mu_0 HS)]^N.$$

Найдем намагниченность невзаимодействующей модели Гейзенберга, исходя из термодинамической формулы  $M = -\partial F/\partial H$  и сравним с результатом, получаемым из определения:  $M_z = \frac{N}{4\pi} \int d\Omega \mu_0 S \cos \theta \exp(-\beta\mu_0 \vec{S}_i \vec{H})$ .

Получаем:

$$M = -\partial F/\partial H = -\frac{\partial}{\partial \beta H} \ln Q = N\mu_0 F_L(\beta\mu_0 HS), \quad F_L(x) = \text{cth}(x) - 1/x,$$

$F_L(x)$  – функция Ланжевена. Второй результат из определения совпадает с этим выражением.

Исследуем поведение намагниченности в случаях  $T \rightarrow 0$  и  $T \rightarrow \infty$ .

Функция Ланжевена имеет асимптоты:

$$F_L(x) \approx 1 - 1/x + 2\exp(-2x), \quad x \rightarrow \infty;$$

$$F_L(x) \approx x/3 - x^3/45 + 2x^5/945, \quad x \rightarrow 0.$$

Отсюда находим:

$$M = N\mu_0 S, \quad T=0; \quad M = N\mu_0^2 S^2 H / 3T, \quad T \rightarrow \infty.$$

Для магнитной восприимчивости системы получаем:

$$\chi = (1/N) dM/dH|_{H \rightarrow 0} = \mu_0^2 S^2 / 3T,$$

для теплоемкости:

$$C = -T \partial^2 F / \partial T^2 = T \partial^2 (T \ln Q) / \partial T^2 = \frac{(\mu_0 HS)^2}{T^2} F_L'(\beta \mu_0 HS),$$

$$F_L'(x) = dF_L/dx,$$

$$C = 1 - 4(\beta \mu_0 HS)^2 \exp(-2\beta \mu_0 HS), \quad T \rightarrow 0,$$

$$C \approx (\beta \mu_0 HS)^2 / 3, \quad T \rightarrow \infty.$$

Видно, что при низких температурах теплоемкость не стремится к нулю. Найдем энтропию системы. Это нефизическое поведение модели связано с вырождением основного состояния по углу в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля.

Прежде чем исследовать далее квантовую модель, полезно рассмотреть классическую модель Гейзенберга с взаимодействием в виде

$$\overline{H} = -\mu_0^2 / 2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_0 \vec{H} \sum_i \vec{S}_i.$$

Рассчитаем ее в приближении среднего поля для ферромагнитной ситуации ( $J > 0$ ) и получим термодинамические величины: статистическую сумму, свободную энергию, параметр порядка, теплоемкость, намагниченность, восприимчивость.

Получим гамильтониан классической ферромагнитной модели Гейзенберга в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов.

Учитывая сохраняющее требуемую точность среднего поля разложение взаимодействующего члена в виде

$$S_k S_{k'} \approx \langle S_k \rangle S_{k'} + S_k \langle S_{k'} \rangle - \langle S_k \rangle \langle S_{k'} \rangle,$$

получаем:

$$\overline{H} = -\mu_0 \sum_i \vec{S}_i (\vec{H} + \vec{H}_0) + \frac{1}{2} \mu_0 \vec{H}_0 \vec{R} S N, \quad \vec{H}_0 = \mu_0 \sum_j J_{ij} \vec{R} S$$

$H_0$  – среднее поле, в приближении ближайших соседей  $\vec{H}_0 = ZJ\vec{R}$ ,  $\vec{R} = \mu_0 \langle \vec{S}_i \rangle$  – параметр порядка.

Вычислим статистическую сумму  $Q$  в приближении среднего поля для классической ферромагнитной модели Гейзенберга:

$$Q = \prod_i \exp\{-\beta R H_0 / 2\} \int d\Omega_i \exp\{\beta \mu_0 S (H + H_0) \cos \theta_i\} = \exp\{-\beta N R H_0 / 2\} [4\pi \text{sh}\{\beta \mu_0 (H + H_0) S\} / \beta \mu_0 (H + H_0) S]^N.$$

Для свободной энергии системы получаем:

$$F = -T \ln Q = \frac{1}{2} N H_0 R - NT \ln [4\pi (\text{sh} \{ \beta \mu_0 (H + H_0) S \} / \beta \mu_0 (H + H_0) S)].$$

Уравнение для равновесного значения  $R$ , т.е. уравнение на параметр порядка в приближении среднего поля в классической модели Гейзенберга:

$$\partial F / \partial R = 0 \Rightarrow R = \mu_0 S F_L \{ \beta \mu_0 S (H + H_0) \}, \quad F_L(x) = \text{cth}(x) - 1/x.$$

Определим критическую температуру перехода в ферромагнитное состояние исходя из самосогласованного уравнения для параметра порядка. Пользуясь асимптотами функции Ланжевена, при  $R \rightarrow 0$  имеем  $\theta = ZJ(\mu_0 S)^2/3$ .

Разлагаем свободную энергию по параметру порядка:

$$F/N = -T \ln(4\pi) - \frac{1}{2} ZJy(1+y)R^2 + \frac{1}{20\theta} Z^2 J^2 (1+3y)R^4 + \frac{1}{105\theta^2} Z^3 J^3 R^6, \quad y = \frac{\theta - T}{\theta} \ll 1.$$

Варьируя  $F$  по  $R$ , находим температурную зависимость  $R$ :

$$R^2 = \frac{5\theta}{ZJ} y \left(1 - \frac{4}{7} y\right).$$

Подставляя ее в свободную энергию, окончательно находим:

$$F(R)/N - F(R=0)/N = -\frac{5\theta}{4} \left(\frac{\theta - T}{\theta}\right)^2 + \frac{5\theta}{84} \left(\frac{\theta - T}{\theta}\right)^3.$$

Исследуем поведение теплоемкости при  $T \rightarrow \theta$ . Получаем:

$$C/N = -[T/N] \partial^2 F / \partial T^2 = 5/2 - 20(\theta - T)/7\theta.$$

Выражение для продольной намагниченности:

$$M = -\partial F / \partial H = NR.$$

Выразим продольную магнитную восприимчивость через производную от функции Ланжевена:

$$\chi = dR / dH|_{H=0} = \frac{(\mu_0 S)^2 F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}{T - (\mu_0 S)^2 ZJ F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}.$$

Магнитная восприимчивость при  $T > \theta$ :

$$\chi(R = H_0 = 0) = \frac{\mu_0^2 S^2}{3(T - \theta)};$$

при  $T \rightarrow \theta - 0$ :

$$\chi = (\mu_0^2 S^2) / 6(\theta - T);$$

при  $T \rightarrow 0$ :

$$\chi \approx T / (ZJ\mu_0^2 S^2).$$

Поведение параметра порядка:

$$R = \begin{cases} \mu_0 S(1 - T/3\theta), & T \rightarrow 0; \\ R^2 = 5\theta/ZJ[y - 4y^2/7 + 4y^3/49], y = (\theta - T)/\theta, & T \rightarrow \theta - 0. \end{cases}$$

Приближение среднего поля хорошо описывает фазовый переход и закон Кюри-Вейсса для восприимчивости. Однако, в отличие от модели Изинга, восприимчивость линейно спадает при низких температурах, что связано с отсутствием щели в спектре за счет большого числа степеней свободы у классического спина и вырождения по углу вращения вокруг оси  $z$ ). Более того, теплоемкость не стремится к нулю при  $T \rightarrow 0$ , что является нарушением теоремы Нернста и связано с упомянутым вырождением основного состояния (теорема Нернста справедлива для невырожденного основного состояния системы). С другой стороны при низких температурах все степени свободы у спина “вымерзают”, кроме двух изинговских: по полю и против, так что хорошим приближением для Гейзенберговского ферромагнетика является в этом случае модель Изинга. Поэтому при  $T \rightarrow 0$  нельзя классическим подходом адекватно описать поведение системы и необходимо корректно использовать квантовое описание.

Рассмотрим гамильтониан Гейзенберга:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{H} \sum_i \vec{S}_i.$$

Здесь  $J_{ij}$  – обменный интеграл;  $S_l$  – оператор спина на  $l$ -м узле.

Рассмотрим модель Гейзенберга при нулевой температуре. Пусть обменный интеграл  $J > 0$ , т.е. исследуем ферромагнитную ситуацию. Положим для упрощения внешнее поле равным нулю. Обозначим  $|S_l^z\rangle$  волновую функцию спина на узле  $l$  с проекцией  $S^z$  на ось  $z$ . Теперь значение проекции спина  $S^z$  на узле (в отличие от модели Изинга) может принимать целый ряд значений. В основном состоянии все спины направлены в одну сторону (например, по оси  $z$ ) с максимальным значением проекции:  $S_l^z |S_l^z\rangle = S |S_l^z\rangle$ .

↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑ ↑

Введем соответствующую полную волновую функцию основного состояния:

$$|0\rangle = |S^z_1\rangle |S^z_2\rangle \dots |S^z_l\rangle \dots S^z_N.$$

Отметим, что оператор  $z$ -й проекции спина коммутирует с гамильтонианом:  $HS_l^z - S_l^z H = 0$ , т.е. полная проекция на ось  $z$  сохраняется.

Перепишем гамильтониан в следующем виде:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \{ S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \}.$$

Рассчитаем действие операторов  $S^+$  и  $S^-$  на  $|0\rangle$ . Для этого получим для какого-либо узла:

$$S^z S^+ |S'\rangle = [S'(S^x + iS^y) + S^x + iS^y] |S'\rangle = (S'+1)S^+ |S'\rangle,$$

Отсюда

$$\overline{H}|0\rangle = -\frac{1}{2} \sum_{i,i'} J_{ii'} S^2 |0\rangle; \quad E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{i,i'} J_{ii'} S^2.$$

Рассмотрим теперь низшие возбужденные (над основным) состояния ферромагнетика. Пусть температура  $T \neq 0$  и  $T \ll \theta$ . В этом случае  $z$ -проекция спина на узле уже не обязательно равна максимальному значению  $S$ . Операторы  $S^+$  и  $S^-$  теперь могут “перемещать” спины (вернее, уменьшать и увеличивать на единицу) с узла на узел, не выходя за предельное значение. Для такого “движения” (спиновой волны) можно ввести элементарные возбуждения магнитного момента – магноны. Эти возбуждения можно считать невзаимодействующими при их малой плотности вблизи нулевой температуры. Удобно новые квазичастицы (магноны) ввести как разницу между возбужденным и невозбужденным состоянием узла, т.е. их плотность  $n_l = S - S_l^z$ , при этом  $n_l \ll 1$ . Соответственно, и волновую функцию можно отсчитывать от основного состояния, т.е. рассматривать только число возбуждений на узлах:

$$|\psi\rangle = |n_1\rangle |n_2\rangle \dots |n_l\rangle \dots |n_N\rangle.$$

Введем операторы рождения и уничтожения на узлах:  $a_l^+ = AS_l^-$ ,  $a_l^- = AS_l^+$ , где  $A$  – нормировочная постоянная, требующая определения.

Рассмотрим коммутатор:

$$aa^+ - a^+a = \frac{1}{A^2} (S^+ S^- - S^- S^+) = \frac{2i}{A^2} (S^y S^x - S^x S^y) = \frac{2S^z}{A^2}.$$

Если положить  $A = \sqrt{2S^z}$ , то получаем соотношение коммутации, соответствующее операторам статистики Бозе, если учесть также, что проекция на ось  $z$  – хорошее квантовое число, то при условии  $n_l \ll 1$  она равна максимальному значению  $S$ , т.е.  $S^z \approx S$ . Немедленно следует также полезное соотношение между оператором числа возбуждений  $n_l$  и проекцией спина на ось  $z$ :

$$S_l^z = S - a_l^+ a_l = S - n_l.$$

Новые операторы действуют на узельные функции обычным образом в соответствии со статистикой Бозе:

$$a_l^- |n_l\rangle = \sqrt{n_l} |n_l - 1\rangle, \quad a_l^+ |n_l\rangle = \sqrt{n_l + 1} |n_l + 1\rangle, \quad a_l^+ a_l |n_l\rangle = n_l |n_l\rangle.$$

Подставим новые операторы в гамильтониан:

$$\bar{H} = -\frac{1}{2} \sum_{l \neq l'} J_{ll'} \{ (S - a_l^+ a_l) (S - a_{l'}^+ a_{l'}) + S(a_l a_{l'}^+ + a_{l'}^+ a_l) \}.$$

Раскрывая скобки и учитывая соотношения коммутации и малость числа возбуждений), а также то, что  $J_{ll'} = J(|\vec{r}_l - \vec{r}_{l'}|) = J_{l'l}$ , получаем:

$$\bar{H} = E_0 + S \sum_{l \neq l'} J_{ll'} \{ a_l^+ a_l - a_{l'}^+ a_{l'} \}.$$

Далее используем преобразование Фурье операторов:

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q \exp(i \vec{q} \vec{R}_l) ,$$

$$a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^+ \exp(-i \vec{q} \vec{R}_l) .$$

После некоторых переобозначений находим:

$$\bar{H} = E_0 + \sum_q \hbar \omega_q a_q^+ a_q, \quad \hbar \omega_q = \sum_l S J(|\vec{R}_l|) \{ 1 - \exp(i \vec{q} \vec{R}_l) \} .$$

Таким образом, гамильтониан является суммой основного состояния и гамильтониана газа невзаимодействующих бозонных возбуждений – магнов:

$$\bar{H} = E_0 + \sum_q \hbar \omega_q n_q .$$

Рассчитаем энергию магнов  $\hbar \omega_q$ . Рассмотрим взаимодействие только ближайших соседей и исследуем простейший случай трехмерной кубической решетки. В кубическом кристалле ближайших соседей всего шесть:  $J(\pm a_x) = J(\pm a_y) = J(\pm a_z) = J$ , где  $a$  – период решетки. Тогда имеем:

$$\begin{aligned} \hbar \omega_q &= \sum_l S J(|\vec{R}_l|) \{ 1 - \exp(i \vec{q} \vec{R}_l) \} = \\ &= 2 S J \{ 3 - \cos q_x a - \cos q_y a - \cos q_z a \}. \end{aligned}$$

Рассмотрим длинноволновый предел  $|q|a \ll 1$ . В этом случае закон дисперсии имеет вид  $\hbar \omega_q = S J a^2 q^2$ , совпадающий по форме с законом дисперсии для свободной частицы.

Таким образом, можно говорить об эффективной массе магнона

$$\hbar \omega_q = \hbar^2 q^2 / 2m^* \Rightarrow \frac{1}{m^*} = \frac{2 S J a^2}{\hbar^2} .$$

Оценим масштаб эффективной массы. Полагая  $S \sim 3$ ,  $a \sim 3 \times 10^{-8}$  см,  $J \sim k\theta$ ,  $\theta \sim 300$  К, получаем  $m^* \approx 5m_e$ , т.е. магнаны – достаточно тяжелые локализованные квазичастицы.

Так как магны подчиняются статистике Бозе, то их функция распределения есть обычное распределение Бозе – Эйнштейна:

$$n_q(T) = \langle n_q \rangle = \langle a_q^+ a_q \rangle = \frac{1}{\exp([\hbar\omega_q - \mu]/T) - 1}$$

Так как число бозонов не фиксировано, то химический потенциал  $\mu = \frac{\partial E}{\partial n_q} = 0$ . Таким образом, окончательно функция распределения магнов

$$n_q(T) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_q/T) - 1}$$

Если температура равна нулю, возбуждений нет, и  $\langle M \rangle = SN$ . При увеличении температуры необходимо учесть возбуждения:

$$\langle M \rangle = SN - \sum_l \langle a_l^+ a_l \rangle.$$

$$\begin{aligned} \sum_l \langle a_l^+ a_l \rangle &= \sum_q \langle a_q^+ a_q \rangle = \sum_q n_q(T) = \\ &= \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 q}{\exp(\beta\omega_q) - 1}, \quad \hbar \equiv 1. \end{aligned}$$

Учитывая, что основной вклад в интеграле набирается при малых  $q$ , а также что  $J \sim \theta$ , имеем:

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= SN[1 - (T/\theta)^{3/2} \eta], \\ \eta &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{x^2 dx}{\exp[x^2] - 1} = \frac{3\zeta(5/2)}{16\pi^{3/2}} \sim 1, \end{aligned}$$

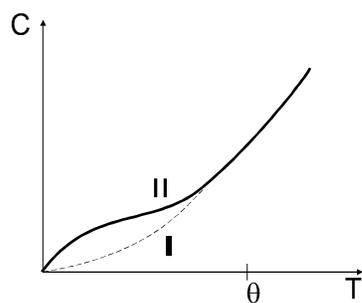
где  $\zeta(x)$  – дзета-функция Римана. Температурный спад магнитного момента степенной, в отличие от экспоненциального, который предсказывает приближение среднего поля в модели Изинга.

Описание возбужденного состояния ферромагнетика с помощью магнов справедливо при условии их малого числа в среднем на узле, что приводит к условию  $T \ll \theta$ . Таким образом только в низкотемпературном пределе корректно введение квазичастиц – магнов.

Исследуем поведение теплоемкости  $C(T)$ . Рассмотрим температурную зависимость энергии:

$$\begin{aligned} E &= \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int \frac{\omega_q d^3 q}{\exp[\beta\omega_q] - 1} = N \frac{T^{5/2}}{2\pi^2 \theta^{5/2} a^2} \int \frac{x^4 dx}{\exp[x^2] - 1} = \\ &= N \frac{15T^{5/2}}{32\pi^{3/2} \theta^{5/2} a^2} \zeta(7/2) \sim T^{5/2}. \end{aligned}$$

Отсюда  $C \sim T^{3/2}$ , т.е. вклад магнонов приводит к степенной зависимости теплоемкости от температуры. Так как эта зависимость резко отличается от экспоненциального спада, предсказываемого средним полем при малых температурах, то этот вклад можно наблюдать на эксперименте.



## 5 неделя. Антиферромагнетизм и ферримагнетизм

Если обменный интеграл  $J < 0$ , то спинам выгодно выстроиться так, чтобы соседние спины были направлены в противоположные стороны. Тогда имеет место антиферромагнитное упорядочение:

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots$$

Возникают две подрешетки, в каждой из которых спины сонаправлены, а сами они ориентированы в противоположные стороны. В результате средний суммарный магнитный момент равен нулю, однако упорядочение, тем не менее, имеет место, и существует точка перехода, в которой антиферромагнитное упорядочение исчезает (ее обычно называют температурой Нееля  $T_N$ , а основное состояние антиферромагнетика – неелевским состоянием).

Рассмотрим для простоты модель Изинга. Взаимодействие предполагаем только с ближайшими соседями, так что подрешетки в результате взаимодействуют только друг с другом (отметим, что это мгновенные состояния системы, поэтому конкретные расположения спинов (конкретные узлы, принадлежащие данной подрешетке) могут меняться; не меняется только тот факт, что ближайшим соседом каждого спина в одной подрешетке является спин из другой подрешетки).

Средним полем для спинов  $\mu_+$  является поле, созданное спинами  $\mu_-$  (и наоборот). Используя приближение Вейсса, введем два эффективных поля  $H_+$  и  $H_-$ :

$$H_+ = J \langle \mu_- \rangle Z + H, H_- = J \langle \mu_+ \rangle Z + H.$$

Отсюда находим, что ситуация описывается системой уравнений:

$$\langle \mu_+ \rangle = \text{th} \left\{ \frac{H + \langle \mu_- \rangle ZJ}{T} \right\}, \quad \langle \mu_- \rangle = \text{th} \left\{ \frac{H + \langle \mu_+ \rangle ZJ}{T} \right\}.$$

При внешнем поле  $H = 0$  существует решение  $\langle \mu_+ \rangle = \langle \mu_- \rangle = \langle \mu \rangle$ , где  $\langle \mu \rangle$  удовлетворяет такому же уравнению для параметра порядка, как и в ферромагнетике:

$$\langle \mu \rangle = \text{th} \left\{ \frac{\langle \mu \rangle Z |J|}{T} \right\}.$$

При этом температура Нееля  $|J|Z$  совпадает по виду с температурой Кюри-Вейсса  $\theta$ . Таким образом, температурная зависимость средних магнитных моментов на подрешетках такая же, как и в случае ферромагнетика. Суммарный магнитный момент антиферромагнетика равен нулю:

$$M = \langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle = 0.$$

Другая ситуация с намагниченностью. Рассчитаем ее при больших температурах. Пусть  $T > \theta$ ,  $H \neq 0$ . Тогда система уравнений примет вид:

$$\langle \mu_+ \rangle = \frac{H + \langle \mu_- \rangle ZJ}{T}, \quad \langle \mu_- \rangle = \frac{H + \langle \mu_+ \rangle ZJ}{T}.$$

Отсюда в слабых полях:

$$\begin{aligned}\chi &= dM / dH_{H \rightarrow 0} = \langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle, \\ \langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle &= (\langle \mu_+ \rangle + \langle \mu_- \rangle) \frac{JZ}{T} + \frac{2H}{T}, \\ \chi &= \frac{2}{T+|J|Z} = \frac{2}{T+\theta}.\end{aligned}$$

В точке фазового перехода в отличие от ферромагнетика расходимости восприимчивости нет (хотя есть излом производной), т.е. фазовый переход тем не менее должен чувствоваться при измерении температурной зависимости восприимчивости), что связано с взаимной компенсацией спинов в подрешетках.

Рассмотрим антиферромагнитный гамильтониан Изинга с взаимодействием в следующем виде:

$$\overline{H} = 1/2 \mu_0^2 \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \mu_0 \sum_i S_i H, \quad S_i = \pm 1, \quad J_{ij} > 0.$$

Разбивая на две подрешетки, получаем с учетом ближайших соседей

$$\overline{H} = \sum_{\pm} \left[ -\frac{1}{2} \mu_0 \sum_{i\pm} R^{\pm} H_0^{\mp} - \mu_0 \sum_{i\pm} S_{i\pm} (H - H_0^{\mp}) \right],$$

где  $H_0^{\pm} = ZJR^{\pm} \mu_0$  – среднее поле;  $R^{\pm} = \langle S_{i\pm} \rangle$  – параметр порядка, средний магнитный момент на подрешетках.

Свободная энергия в антиферромагнитной модели Изинга в приближении среднего поля:

$$F = \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left[ -\beta \mu_0 H_0^{\pm} R^{\mp} / 2 - T \ln \left[ 2 \operatorname{ch} \{ \beta \mu_0 (H - H_0^{\mp}) \} \right] \right].$$

Из условия минимума полученной свободной энергии получим уравнения на параметры порядка:

$$R^+ = -\operatorname{th}[\beta \mu_0 (H_0^- - H)], \quad R^- = -\operatorname{th}[\beta \mu_0 (H_0^+ - H)]$$

$$R^{\pm} = -\beta \mu_0^2 Z J R^{\mp} \Rightarrow \begin{vmatrix} -\beta \mu_0^2 Z J & -1 \\ 1 & \beta \mu_0^2 Z J \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow T_c = \theta = \mu_0^2 Z J.$$

Получим общее выражение для теплоемкости через параметр порядка  $R$ :

$$C = \frac{\mu_0 N}{2} \sum_{\pm} H_0^{\pm} \partial R^m / \partial T =_{H=0} -\frac{\mu_0^2 N Z J}{2} \partial R^2 / \partial T.$$

Общее выражение для магнитной восприимчивости:

$$\chi = \mu_0^2 \frac{(1-R^2)}{T+(1-R^2)\theta}$$

По сравнению с результатами по ферромагнитной модели есть различие в знаке в знаменателе, так что  $\chi$  не расходится в точке перехода.

Магнитная восприимчивость в предельных случаях:

$$\chi = \begin{cases} \frac{4\mu_0^2}{T} \exp(-2\frac{\theta}{T}), & T \rightarrow 0; \\ \frac{\mu_0^2}{2\theta}(1-y), y = \frac{\theta-T}{\theta}, & T \rightarrow \theta - 0; \\ \frac{\mu_0^2}{\theta+T}, & T \rightarrow \theta + 0. \end{cases}$$

В магнитном поле параметры порядка не совпадают:

$$R^\pm(H) = \pm R(T) + [TH/\mu_0^2]\chi(T).$$

Заметим, что в реальных веществах спины на подрешетках могут отличаться (например, в случае разных сортов атомов), так что  $\langle \mu_+ \rangle \neq \langle \mu_- \rangle$ . Тогда суммарный средний спин системы не равен нулю. Такие вещества называют *ферримагнетиками*.

Представим гамильтониан ферримагнетика в следующем виде:

$$\begin{aligned} \overline{H} &= \frac{1}{2} J \mu_+ \mu_- \sum_{ij} S_i S_j - \mu_+ \sum_{i+} S_{i+} H - \mu_- \sum_{i-} S_{i-} H, \\ S_i &= \pm 1, \mu_+ \neq \mu_-. \end{aligned}$$

Запишем гамильтониан в приближении среднего поля:

$$\overline{H} = \sum_{\pm} \left[ -\frac{1}{2} \mu_{\pm} \sum_{i\pm} R^{\pm} H_0^{\mp} - \mu_{\pm} \sum_{i\pm} S_{i\pm} (H - H_0^{\mp}) \right], \quad H_0^{\pm} = ZJR^{\pm} \mu_{\pm}.$$

Найдем статистическую сумму и свободную энергию ферримагнетика в приближении среднего поля:

$$\begin{aligned} Q &= \prod_{\pm} \left[ \exp\{\beta N \mu_{\pm} H_0^{\mp} R^{\pm} / 4\} \{2 \operatorname{ch}\{\beta \mu_{\pm} (H - H_0^{\mp})\}\}^{N/2} \right] \\ F &= \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left[ -\mu_{\pm} H_0^{\mp} R^{\pm} / 2 - T \ln[2 \operatorname{ch}\{\beta \mu_{\pm} (H - H_0^{\mp})\}] \right]. \end{aligned}$$

Уравнения для равновесных значений параметра порядка:

$$R^+ = -\operatorname{th}[\beta \mu_+ (H_0^- - H)], \quad R^- = -\operatorname{th}[\beta \mu_- (H_0^+ - H)].$$

Определим критическую температуру ферромагнетика – температуру Нееля при нулевом поле:

$$T_c = \mu_+ \mu_- ZJ.$$

Найдем общее выражение для теплоемкости через параметр порядка в нулевом внешнем поле:

$$C = -\frac{1}{2} \mu_+ \mu_- ZJ \frac{\partial R^2}{\partial T}, \quad R = R^+|_{H=0} = -R^-|_{H=0} = \text{th}\left[\frac{T_c}{T} R\right].$$

Получим общее выражение для магнитной восприимчивости ферромагнетика через параметр порядка:

$$\chi = \frac{1 - R^2}{4} \left[ \frac{(\mu_+ - \mu_-)^2}{T - T_c(1 - R^2)} + \frac{(\mu_+ + \mu_-)^2}{T + T_c(1 - R^2)} \right].$$

Исследуем поведение восприимчивости ферромагнетика вблизи критической температуры:

$$\chi = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{T(\mu_+^2 + \mu_-^2) - 2\mu_+ \mu_- T_c}{T^2 - T_c^2}, & T > T_c; \\ \frac{1}{8T_c} \left[ \frac{P_{\mu^+\mu^-}(2)}{(1 - T/T_c)} + P_{\mu^+\mu^-}(4) - \frac{2}{5}(1 - T/T_c)P_{\mu^+\mu^-}(22) \right]; & T \rightarrow T_c - 0, \end{cases}$$

$$P_{\mu^+\mu^-}(\eta) = \mu_+^2 + \mu_-^2 - \eta \mu_+ \mu_-.$$

В модели Гейзенберга взаимная ориентация спинов и внешнего поля необязательно совпадает. Появляется понятие оси легкого намагничивания – преимущественного кристаллографического направления, по которому располагаются векторы спонтанной намагниченности при нулевой температуре и в пределе слабого поля  $H \rightarrow 0$ . Оно в общем случае не совпадает с направлением поля.

Получим гамильтониан антиферромагнитной модели Гейзенберга

$$\overline{H} = \mu_0^2/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \mu_0 \vec{H} \sum_i \vec{S}_i$$

в приближении среднего поля, пренебрегая квадратичными флуктуациями магнитных моментов:

$$\overline{H} = \sum_{\pm} \left[ -\mu_0 \sum_{i\pm} \vec{S}_{i\pm} (\vec{H} - \vec{H}_0^{\pm}) - \frac{N}{4} \vec{H}_0^{\pm} \vec{R}^{\mp} \right],$$

где  $\vec{H}_0^{\pm} = ZJ\vec{R}^{\pm}$  – среднее поле в приближении ближайших соседей.

Рассчитаем свободную энергию системы в продольном магнитном поле:

$$F = \frac{N}{2} \sum_{\pm} \left\{ -\frac{1}{2} H_0^{\pm} R^m - T \ln \left[ 4\pi \left( \frac{\text{sh} \{ \beta \mu_0 (H - H_0^m) S \}}{[\beta \mu_0 (H - H_0^m) S]} \right) \right] \right\}.$$

Получим уравнения для параметров порядка варьированием свободной энергии:

$$R^+ = \mu_0 S F_L [\beta \mu_0 (H - H_0^-)], \quad R^- = \mu_0 S F_L [\beta \mu_0 (H - H_0^+)],$$

где  $F_L$  – функция Ланжевена.

Рассчитаем критическую температуру в нулевом поле.

$$R^+ = -R^- = \mu_0 S F_L [\beta \mu_0 S Z J R^+], \quad \Rightarrow \quad \theta = Z J (\mu_0^2 S)^2 / 3.$$

Получим общее выражение для теплоемкости через параметр порядка:

$$C = \frac{N}{2} \sum_{\pm} H_0^{\pm} \partial R^m / \partial T =_{H=0} - \frac{N Z J}{2} \partial R^2 / \partial T.$$

Получим выражение для продольной магнитной восприимчивости:

$$\chi = \frac{(\mu_0 S)^2 F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}{T + (\mu_0 S)^2 Z J F_L'(\beta \mu_0 H_0 S)}$$

Если сравнить с ответом для ферромагнитной модели, то легко видеть, что есть различие в знаке в знаменателе, приводящее к отсутствию расходимости в точке перехода.

$$\chi = \begin{cases} \frac{\mu_0^2 S^2}{9 \theta^2} T, & T \rightarrow 0; \\ \frac{\mu_0^2 S^2}{6 \theta} (1 - y), \quad y = \frac{\theta - T}{\theta}, & T \rightarrow \theta - 0; \\ \frac{\mu_0^2 S^2}{3(\theta + T)}, & T \rightarrow \theta + 0. \end{cases}$$

Найдем зависимость параметров порядка при малых  $H$  с точностью до членов, пропорциональных  $H$ . Получаем:

$$R^{\pm}(H) = \pm R(T) + [TH / \mu_0^2] \chi(T).$$

Рассмотрим антиферромагнитный гамильтониан Гейзенберга ( $J < 0$ ) в нулевом внешнем поле:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad J_{ij} < 0.$$

Очевидно, что основное состояние этой модели не отличается от антиферромагнитного (неелевского) упорядочения, как для антиферромагнитной модели Изинга.

Возбужденные состояния, аналогично гейзенберговскому ферромагнетику, можно описать введением понятия спиновых волн – возбуждений (“антиферромагнитных магнонов”).

Распишем гамильтониан покомпонентно:

$$\overline{H} = -1/2 \sum_{i \neq j} J_{ij} \{ S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z \}.$$

Так же, как и для классической модели, введем две подрешетки:

$$a_l = \frac{S_l^+}{\sqrt{2S}}; \quad a_l^+ = \frac{S_l^-}{\sqrt{2S}} \Rightarrow "+"; \quad a_l = \frac{S_l^-}{\sqrt{2S}}; \quad a_l^+ = \frac{S_l^+}{\sqrt{2S}} \Rightarrow "-".$$

Введем индекс  $\sigma_l$ , равный +1, если узел  $l$  относится к подрешетке “+”, и –1, если к подрешетке “–”. Тогда получаем обобщающие соотношения:

$$S_l^x = \sqrt{\frac{S}{2}}(a_l + a_l^+); \quad S_l^y = -i\sqrt{\frac{S}{2}}\sigma_l(a_l - a_l^+); \quad S_l^z = \sigma_l(S - a_l^+ a_l).$$

После алгебраических преобразований и учета соотношений коммутации имеем:

$$\begin{aligned} \overline{H} = & -1/2 \sum_{l \neq l'} J_{ll'} S^2 \sigma_l \sigma_{l'} + S/2 \sum_{l \neq l'} \{ 2a_l^+ a_l \sigma_l \sigma_{l'} - \frac{1}{2}(a_l a_{l'} + a_l^+ a_{l'}^+ + 2a_l^+ a_{l'}) + \\ & + \frac{\sigma_l \sigma_{l'}}{2}(a_l a_{l'} + a_l^+ a_{l'}^+ - 2a_l^+ a_{l'}) \}. \end{aligned}$$

Первое слагаемое при условии, что  $\sigma_l \sigma_{l'} = -1$  (так как узлы  $l$  и  $l'$  принадлежат разным подрешеткам), равно энергии основного состояния антиферромагнетика:

$$E_0 = 1/2 \sum_{l \neq l'} J_{ll'} S^2.$$

Оставшееся слагаемое (обозначим его  $\delta H$ ) связано с возбуждениями. Рассчитаем его, введя фурье-преобразование операторов:

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q \exp(i \vec{q} \vec{R}_l), \quad a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q a_q^+ \exp(-i \vec{q} \vec{R}_l).$$

Подставив их в гамильтониан, после некоторых преобразований, имеем:

$$\begin{aligned} \delta H = & 1/2 \sum_q \{ A_q (a_q^+ a_q + a_{-q}^+ a_{-q}) + B_q (a_q a_{-q} + a_q^+ a_{-q}^+) \}; \\ A_q = & S \sum_h J(\vec{R}_h) \left\{ \sigma_h - \frac{1 + \sigma_h}{2} \cos \vec{q} \vec{R}_h \right\}; \\ B_q = & S/2 \sum_h J(\vec{R}_h) (\sigma_h - 1) \cos \vec{q} \vec{R}_h. \end{aligned}$$

Здесь  $J > 0$ . В общем случае необходимо диагонализировать гамильтониан, введя какие-либо канонические преобразования для операторов, например:

$$\begin{aligned} a_q &= C_q \operatorname{ch} \theta_q + C_{-q}^+ \operatorname{sh} \theta_q; a_q^+ = C_q^+ \operatorname{ch} \theta_q + C_{-q} \operatorname{sh} \theta_q; \\ a_{-q} &= C_{-q} \operatorname{ch} \theta_q + C_q^+ \operatorname{sh} \theta_q; a_{-q}^+ = C_{-q}^+ \operatorname{ch} \theta_q + C_q \operatorname{sh} \theta_q. \end{aligned}$$

Канонические преобразования не меняют статистики. После довольно громоздких преобразований находим:

$$\delta H = \sum_q \left\{ \hbar \omega_q C_q^+ C_q + \frac{1}{2} Z_q (C_q C_{-q} + C_q^+ C_{-q}^+) + \frac{1}{2} P_q \right\};$$

где

$$\begin{aligned} \hbar \omega_q &= (\operatorname{ch}^2 \theta_q + \operatorname{sh}^2 \theta_q) A_q + 2 B_q \operatorname{ch} \theta_q \operatorname{sh} \theta_q; \\ Z_q &= (\operatorname{ch}^2 \theta_q + \operatorname{sh}^2 \theta_q) B_q + 2 A_q \operatorname{ch} \theta_q \operatorname{sh} \theta_q; \\ P_q &= \operatorname{sh}^2 \theta_q A_q + B_q \operatorname{ch} \theta_q \operatorname{sh} \theta_q. \end{aligned}$$

Для диагонализации необходимо положить параметр  $Z_q = 0$ . Из этого уравнения находим, что на параметр  $\theta_q$  накладываются условия:  $\operatorname{th}(2\theta_q) = -B_q/A_q$ . Выразив из этого условия параметр  $\theta_q$ , получаем окончательно:

$$\delta H = \sum_q \left\{ \sqrt{A_q^2 - B_q^2} (C_q^+ C_q + \frac{1}{2}) - \frac{A_q}{2} \right\}.$$

Последнее слагаемое – аддитивная константа, ее можно внести в энергию основного состояния. Окончательно для энергии антиферромагнетика получаем:

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \sum_q \left\{ \hbar \omega_q (n_q + \frac{1}{2}) \right\}; \\ \hbar \omega_q &= \sqrt{A_q^2 - B_q^2}. \end{aligned}$$

Исследуем спектр антиферромагнитных магнонов и рассмотрим, какой вклад вносят эти возбуждения в теплоемкость антиферромагнетика.

Если учесть взаимодействие  $Z = 6$  ближайших соседей в трехмерной кубической решетке, то получим

$$A_q = -ZSJ, \quad B_q = -S(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a),$$

так что в пределе  $|q|a \ll 1$  имеем:

$$\hbar \omega_q = S \sqrt{Z^2 - Z^2 \langle \cos qa \rangle^2} \approx \xrightarrow{q \rightarrow 0} \frac{SZJqa}{\sqrt{3}}.$$

Таким образом, в антиферромагнетике спектр возбуждений линеен по импульсу в отличие от квадратичного спектра магнонов в случае ферромагнетика. Такой спектр аналогичен частицам без массы (например, квантам колебаний решетки (фононам) в твердом теле, фотонам). Исходя из спектра, можно получить вклад антиферромагнитных магнонов в теплоемкость и магнитный момент. Полагая  $SZJ/\sqrt{3} \sim \theta$ , т.е. температуре перехода, оценим энергию:

$$E = \frac{Na^3}{(2\pi)^3} \int \frac{\omega_q d^3 q}{\exp[\beta\omega_q] - 1} = N \frac{T^4}{2\pi^2 \theta^3} \int_0^\infty \frac{x^3 dx}{\exp[x] - 1} = N \frac{\pi^2 T^4}{30 \theta^3} \sim T^4.$$

Отсюда теплоемкость  $C \sim T^3$ , т.е. имеется существенное отличие от закона  $C \sim T^{3/2}$ , как в ферромагнетике. Это различие можно наблюдать на эксперименте.

## 6 неделя. Фазовые переходы первого рода. Конденсация. Кристаллизация

Основное отличие жидкой фазы вещества от газообразной – ее практически идеальная несжимаемость, т.е. газ заполняет весь предоставленный ему объем, а жидкость – только часть в соответствии с ее плотностью. Для идеального газа его сжимаемость под внешним давлением  $P$  и температурой  $T$  описывается известным уравнением состояния:

$$P V = R T,$$

$R = Nk$ ,  $k$  – постоянная Больцмана. Отсюда давление:

$$P = k T N / V = k T \rho.$$

При давлении  $P = 0$  плотность также равна нулю, и все молекулы разлетаются, равномерно заполняя объем. Однако для описания фазового перехода из газообразного состояния в конденсированную фазу (жидкость) необходимо учесть взаимодействие частиц, которое может удерживать частицы друг около друга, препятствуя их разлету на большое расстояние. Тогда в уравнении состояния необходимо ввести понятие внутреннего давления, связанного с этим взаимодействием, и учесть существование конечного объема, меньше которого система не может занимать.

Введем парное взаимодействие частиц  $V(|r_i - r_j|)$ ; на малых расстояниях взаимодействие отталкивающее, моделирующее твердые шары, занимающие конечный объем. Роль твердых шаров состоит в том, что они приводят к насыщенной жидкости, объем которой не может быть меньше объема плотной упаковки твердых ядер. На больших расстояниях имеет место область притяжения, что не дает разойтись частицам на большое расстояние. Причиной конденсации как раз и является та часть потенциала, которая соответствует притяжению.

Теория конденсации Ван-дер-Ваальса играет ту же роль в общей теории конденсации, что и теория молекулярного поля Вейсса в общей теории ферромагнетизма.

Рассмотрим среднее полное взаимодействие  $N$  частиц в каноническом ансамбле:

$$\langle V \rangle = \frac{\int V \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}{\int \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N},$$

где

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad V_{ij} = V(|r_i - r_j|).$$

Так как все члены этой суммы идентичны, учитывая, что их число равно  $N(N - 1)/2$ , несложно получить:

$$\langle V \rangle = \frac{N(N-1)}{2} \frac{\int V_{12} \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N}{Z},$$

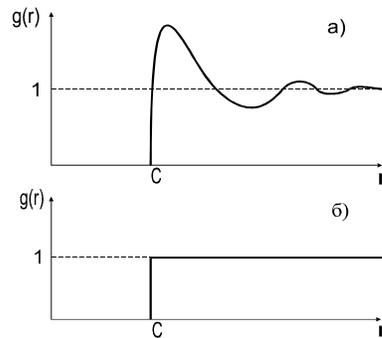
$$Z = \int \exp[-\beta V] d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N.$$

Введем вероятность обнаружить частиц 1 и 2 соответственно в элементарных объемах  $dr_1$  и  $dr_2$ :

$$\rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\int \exp[-\beta V] d\vec{r}_3 d\vec{r}_4 \dots d\vec{r}_N}{Z}.$$

Величина  $\rho^{(2)}$  имеет порядок  $1/\Omega^2$ , где  $\Omega$  – объем. Из-за трансляционной симметрии  $\rho^{(2)}$  зависит только от разности  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$ . Введем парную корреляционную функцию

$$\rho^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\Omega^2} g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2).$$



Величина  $g$  зависит от взаимодействия. В общем случае вид  $g$  показан на рис. Выразим взаимодействие через корреляционную функцию:

$$\langle V \rangle = \frac{N(N-1)}{2\Omega^2} \iint d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 g(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) =$$

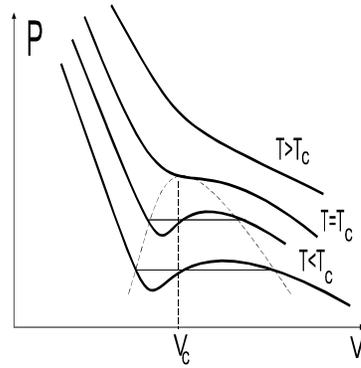
$$= \frac{\rho N}{2} \int d\vec{r} g(\vec{r}) V(\vec{r}) \Bigg|_{\substack{N \rightarrow \infty, \rho = N/\Omega \\ \vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2}}.$$

Для центральных сил коррелятор  $g$  зависит только от модуля  $r$ . Окончательно:

$$\langle V \rangle / N = -a\rho = -a/v, \quad v = \Omega / N = 1/\rho,$$

$$a = -\frac{1}{2} \int d\vec{r} g(r) V(r) > 0.$$

Константа  $a > 0$ .



Предыдущее уравнение – фактически гипотеза о молекулярном поле, действующем на частицу в точке  $r$  от других частиц. Если положить плотность не зависящей от координаты, то средний потенциал будет иметь вид

$$\rho \int d\vec{r}' V(\vec{r} - \vec{r}') \approx -2a / v.$$

“Среднеполевое” выражение полностью идентично (с учетом множителя 2) соотношению Ван-дер-Ваальса, из которого вытекает существование “внутреннего” давления, которое стремится сжать газ:

$$P_{\text{int}} = \partial \langle V \rangle / \partial \Omega = a / v^2.$$

Полное давление равно сумме внутреннего и внешнего:

$$P + P_{\text{int}} = P + a / v^2.$$

Суммарное давление уравнивается тепловым давлением  $kT/v$ , которое стремится расширить газ. В теории Ван-дер-Ваальса в тепловом давлении необходимо учесть существование минимального объема шаров. Если обозначить объем одного шара  $b$ , то эффективный объем, приходящийся на один шар:

$$v_{\text{eff}} = \Omega / N = v - b.$$

Окончательно,

$$P + \frac{a}{v^2} = \frac{kT}{v - b}.$$

Уравнение описывает фазовый переход первого рода “газ – жидкость” и имеет “петлю” на изотермах при температурах, меньших критической температуры конденсации. Реально петля неустойчива, и в обведенной пунктирной области имеет место равновесие жидкой и газообразной фаз с постоянным давлением, т.е. реализуется отмеченная на рис. линия  $P = P_{\text{inst}}$ .

Точка перехода  $T_c$  имеет место, когда на изотермах точка перегиба совпадает с экстремумом зависимости  $P(V)$ , и эта трикритическая точка, за которой при больших температурах остается только газообразная фаза, определяется следующими соотношениями

$$\partial P / \partial v = 0, \quad \partial^2 P / \partial v^2 = 0.$$

Критическая температура и соответствующий ей минимальный единичный объем, занимаемый жидкой фазой, равны:

$$T_c = \frac{8}{27} \frac{a}{k b}, \quad v_c = 3 b.$$

Разобьем весь объем на ячейки (узлы), образующие правильную кристаллическую решетку, заполняющую все пространство. Пусть число ячеек равно  $N_0$ . Частицы передвигаются по этому пространству, занимая и покидая узлы в каждый момент времени. Сопоставим направленному вверх спину занятой частицей узел, а направленному вниз – пустой узел и введем величину  $\varepsilon_i$ , равную 1, если узел  $i$  занят, и равную нулю, если он пуст:

$$\varepsilon_i = \frac{1 + \mu_i}{2} = \begin{cases} +1, & \mu_i = +1; \\ 0, & \mu_i = 0. \end{cases}$$

Тогда гамильтониан Изинга со спинами  $\mu_i$  можно выразить через  $\varepsilon_i$ :

$$\begin{aligned} \bar{H} = & -1/2 \sum_{ij} V_{ij} \mu_i \mu_j - \sum_i \mu_i H = -1/2 \sum_{ij} 4V_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j + \sum_{ij} V_{ij} (\varepsilon_i + \varepsilon_j) + \\ & + 1/2 \sum_{ij} V_{ij} - H \sum_i (2\varepsilon_i - 1). \end{aligned}$$

Переобозначим параметр взаимодействия и введем его нулевую фурье-компоненту

$$V(0) = \sum_{ij} V_{ij} = V(q=0) = \sum_i V_{ij} \exp(i r_i q) |_{q=0}, \quad u_{ij} = 4V_{ij}.$$

Получаем:

$$\bar{H} = -1/2 \sum_{ij} u_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j - \sum_i 2\varepsilon_i \{H - V(0)\} + C, \quad C = -N_0 V(0)/2 + N_0 H.$$

Заметим, что это выражение с точностью до несущественной константы является также обычным гамильтонианом Изинга, но только по большому каноническому ансамблю с химическим потенциалом  $\mu = 2(H - V(0))$ :

$$\bar{H} = -1/2 \sum_{ij} u_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j - \mu N, \quad N = \sum_i \varepsilon_i.$$

Таким образом, статистическая сумма для системы спинов переходит в большую статистическую сумму для решеточного газа. Теперь можно продолжить аналогию

далее и получить уравнение состояния. Намагниченность  $R$  в модели Изинга связана с плотностью решеточного газа:

$$\rho = \frac{\langle N \rangle}{N_0} = \frac{1}{N_0} \sum_i \varepsilon_i = \frac{1}{N_0} \sum_i \left\{ \frac{1}{2} + \frac{\varepsilon_i}{2} \right\} = \frac{1+R}{2}.$$

Самосогласованное уравнение для плотности решеточного газа в терминах перенормированного потенциала  $u$  и химического потенциала:

$$2\rho - 1 = \text{th} \left[ \frac{\beta}{2} (\rho u(0) + \mu) \right],$$

или

$$-\beta\mu = \beta\rho u(0) + \ln \frac{1-\rho}{\rho}.$$

Окончательно уравнение состояния в модели решеточного газа:

$$P = -\frac{\rho^2}{2} u(0) - kT \ln(1-\rho).$$

Уравнение имеет качественно одинаковые изотермы с уравнением Ван-дер-Ваальса:

$$P = -\frac{\rho^2}{2} u(0) + kT \frac{\rho}{1-\rho}; \quad a = u(0)/2, b = 1.$$

Заметим, что асимптоты последних членов (тепловое давление) при  $\rho \rightarrow 0$  (предел идеального газа) одинаковы и при  $\rho \rightarrow 1$  (случай бесконечного давления) близки.

Определим критические характеристики решеточной модели. Учитывая, что критическая точка из модели Изинга определяется как  $R = 0$ , имеем:

$$\rho = \frac{1+R}{2}, \quad R=0 \Rightarrow \rho_c = 1/2 \Rightarrow \rho = 1/v \Rightarrow v_c = 2$$

По аналогии с моделью Изинга найдем флуктуации в решеточной модели. Воспользуемся соотношением для флуктуаций магнитных моментов вблизи точки фазового перехода:

$$\langle \mu_q |^2 \rangle = \frac{1-R^2}{1-\beta V(\vec{q})(1-R^2)}.$$

Перепишем его в терминах решеточной модели. Получаем:

$$\langle \varepsilon_q |^2 \rangle = \frac{1}{4} \langle \mu_q |^2 \rangle = \frac{\rho(1-\rho)}{1-\beta u(\vec{q})\rho(1-\rho)}.$$

Роль твердых ядер отражается на появлении в знаменателе множителя  $(1 - \rho)$ . В жидкой фазе, когда  $\rho \approx 1$ , этот множитель подавляет флуктуации, приводя к устойчивой жидкости.

Переход “жидкость – твердое тело” – это переход из полной симметрии жидкой фазы в периодическую симметрию твердого тела. Пусть частицы взаимодействуют с парным взаимодействием  $v(|r_i - r_j|)$ . Предположим, что число ближайших соседей велико, так что можно использовать приближение среднего поля. Характерной чертой, отличающей твердое состояние от жидкого является периодичность плотности  $\rho(r)$ . Тогда потенциал, действующий на частицу в точке  $r$  от поля других частиц, также будет периодической функцией:

$$V(r) = \int d\vec{r}' \rho(r') v(\vec{r} - \vec{r}').$$

Далее,

$$V(r) = \int d\vec{r}' \rho(r') g(\vec{r} - \vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') = - \int d\vec{r}' \rho(r') \bar{v}(\vec{r} - \vec{r}'),$$

где  $\bar{v}(r)$  – перенормированное с учетом знака парное взаимодействие. В твердом теле плотность периодична с периодом решетки  $a$ . Ее в этом случае можно разложить в ряд Фурье по векторам обратной решетки:

$$\rho(\vec{r} + a) = \sum_q \rho_q \exp[i\vec{q}(\vec{r} + a)] = \sum_q \rho_q \exp[i\vec{q}\vec{r}] = \rho(\vec{r}).$$

Отсюда и следует, что

$$\rho(\vec{r}) = \sum_G \rho_G \exp[i\vec{G}\vec{r}].$$

Для простоты рассмотрим одномерную ситуацию. Тогда вектор обратной решетки  $G = (2\pi/2a)n$ , где через  $2a$  обозначен период решетки. Отсюда

$$\rho(x) = \sum_n \rho_n \exp\left[i \frac{\pi n}{a} x\right],$$

$$\rho_n = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a dx \exp\left[-i \frac{\pi n}{a} x\right] \rho(x).$$

Фазовый переход будет характеризоваться существованием ненулевых фурье-компонент плотности  $\rho_n \neq 0$  при  $n \neq 0$ , так как если  $\rho_n = 0$ ,  $n \neq 0$ , то остается только нулевая компонента  $\rho_0 = \text{const}$ , т.е. жидкая фаза.

Самосогласованное уравнение для  $\rho(r)$  получим из распределения Больцмана частиц в поле с потенциалом  $V(r)$ :

$$\rho(x) = \frac{\exp[-\beta V(x)]}{\int \exp[-\beta V(x)] dx},$$

где интегрирование идет по элементарной ячейке  $(-a, a)$ . Имеем для фурье-компоненты:

$$\rho_n = \frac{\int_{-a}^a dx \cos\left(\frac{\pi}{a} nx\right) \exp\left\{\beta \sum_m \rho_m \bar{v}_m \cos\left(\frac{\pi}{a} nx\right)\right\}}{\int_{-a}^a dx \exp\left\{\beta \sum_m \rho_m \bar{v}_m \cos\left(\frac{\pi}{a} nx\right)\right\}}.$$

Полагаем, что вблизи температуры перехода, когда кристалл еще не стал регулярной решеткой, основной вклад дают компоненты  $\rho_0$  и  $\rho_1$ . Наличие перехода можно тестировать по отличию от нуля компоненты  $\rho_1$ , которая в этом случае удовлетворяет уравнению

$$\rho_1 = \frac{\int_{-a}^a dx \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right) \exp\left\{2\beta\rho_1 \bar{v}_1 \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right)\right\}}{\int_{-a}^a dx \exp\left\{2\beta\rho_1 \bar{v}_1 \cos\left(\frac{\pi}{a} x\right)\right\}}$$

Это уравнение совпадает с уравнением Вейсса для намагниченности  $R$  в молекулярном поле  $\bar{v}_1 R$  в двумерном случае в пределе непрерывного классического спина  $S$ .

Рассчитаем критическую температуру. Если устремить  $\rho_n$  к нулю, то

$$\rho_n = \beta \rho_n \bar{v}_n, \quad T_c = \bar{v}_n.$$

Таким образом, если бы объем системы не уменьшался при отвердевании, мы имели бы дело с обычным фазовым переходом второго рода. А так как кристаллизация обязательно сопровождается уменьшением объема, то фазовый переход “жидкость – кристалл” – это фазовый переход *первого* рода.

## 7 неделя. Зонная теория ферромагнетизма. Фазовые переходы металл-изолятор

Электрон в твердом теле ведет себя как квазичастица: в отсутствие примесей он не рассеивается, имеет определенный квазиимпульс (не являющийся собственным числом оператора импульса), закон дисперсии, отличный от закона дисперсии свободной частицы и, соответственно, не имеет определенной координаты (“размазан” по кристаллу).

Рассмотрим идеальный (в отсутствие дефектов и примесей) кристалл в приближении сильной связи. Пусть сначала атомы решетки находятся на большом расстоянии друг от друга. Электроны полностью локализованы каждый на своем узле. Затем начинаем сближать узлы, и на расстоянии порядка боровского радиуса электроны начинают чувствовать соседние атомы и слабо туннелируют от одного атома ( $i$ ) к другому ( $j$ ) (обычно это ближайший сосед) с вероятностью  $t(|r_i - r_j|) = t_{ij}$ , однако волновая функция таких слабо делокализованных частиц имеет все еще хорошо выраженный максимум на координатах узлов. Тогда хорошим квантовым числом в приближении сильной связи электрона с узлом является номер узла  $l$ . Если ввести узельные операторы рождения  $a_{l\sigma}^+$  и уничтожения  $a_{l\sigma}$  электрона (на узле  $l$  со спином  $\sigma$ ), то гамильтониан системы через них запишется следующим образом:

$$\bar{H} = \sum_{i\sigma} \varepsilon_0 a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} + \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} .$$

Первый член описывает “затравочную” (нулевую) энергию электронов, локализованных на узлах с узельной энергией  $\varepsilon_0$ . Второй член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает перескоки на соседние узлы с амплитудой  $t_{ij}$ . Перейдем к фурье-представлению:

$$a_{l\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p a_{p\sigma} \exp(i p R_l), \quad a_{l\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p a_{p\sigma}^+ \exp(-i p R_l).$$

После некоторых переобозначений представим гамильтониан в диагональном виде:

$$\bar{H} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma}; \quad \varepsilon_p = \varepsilon_0 + \sum_{R_l} t(|R_l|) \exp(-i p R_l).$$

Исследуем закон дисперсии электрона  $\varepsilon_p$  с учетом взаимодействия только ближайших соседей и определим амплитуду перескока через  $-t$  (знак перескока выбираем из удобства отсчета низа зоны проводимости от центра зоны Бриллюэна) в трехмерном кубическом кристалле. Тогда имеем:

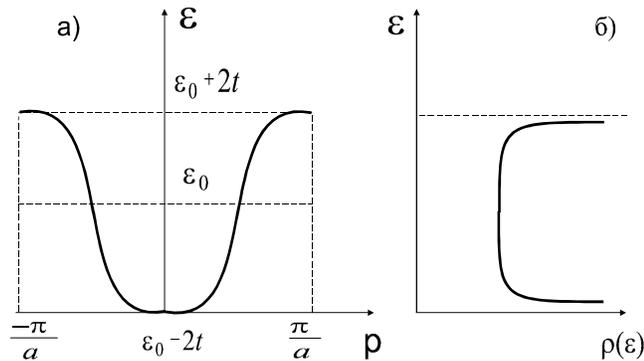
$$\varepsilon_q = \varepsilon_0 - 2t(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a).$$

Рассмотрим теперь для простоты одномерный случай:

$$\varepsilon_q = \varepsilon_0 - 2t \cos qa .$$

Этот закон дисперсии описывает полосу энергии, равную  $2Zt$  ( $Z$  – число ближайших соседей) – зону проводимости. Ее ширина пропорциональна вероятности перескока. При

увеличении концентрации электронов зона может последовательно заполняться в соответствии с принципом Паули.



Оценим эффективную массу электрона. В пределе малого импульса (вблизи дна зоны проводимости) закон дисперсии квадратичен:  $\epsilon_p - \epsilon_0 = ta^2p^2$ , поэтому, исходя из определения эффективной массы  $\frac{1}{m^*} = \partial^2\epsilon/\partial p^2$ , получаем  $m^* = \hbar^2/2ta^2$ . Эффективная масса, вообще говоря, не равна массе свободного электрона.

Групповая скорость электрона вводится как  $v = \partial\epsilon/\partial p$ . Оценки ее дают  $\sim 10^7 \div 10^8$  см/с.

Функция распределения по импульсам электронов (распределение Ферми-Дирака)

$$f_{p\sigma}(T) = \langle n_{p\sigma} \rangle = \langle a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} \rangle = \frac{1}{\exp[(\epsilon_p - \mu)/T] + 1}.$$

Число электронов в системе сохраняется, поэтому химический потенциал  $\mu \neq 0$ . При нулевой температуре распределение – фермиевская ступенька:  $f_{p\sigma} = 1$ ,  $\epsilon_p < \mu = E_F$ ;  $f_{p\sigma} = 0$ ,  $\epsilon_p > \mu = E_F$ , где  $E_F$  – граничная энергия Ферми (совпадающая в этом случае с химическим потенциалом  $\mu$ ) отделяет занятые состояния от пустых. Ее несложно получить из нормировочного соотношения  $n = N/V$ ,  $N = \sum_{p\sigma} f_{p\sigma}$  при нулевой температуре вблизи дна зоны в приближении эффективной массы и связать с плотностью электронов  $n$ :  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3}$ . Оценки величины энергии Ферми приводят к  $E_F \sim 1 \div 10$  эВ. Отсюда видно, что при обычных температурах вплоть до комнатной электронный газ с хорошей точностью вырожден, и его распределение – фермиевская ступенька при  $T \ll E_F$ .

Важная физическая величина – плотность электронных состояний  $\rho(\epsilon)$ , определяемая при переходе из суммирования по импульсам к интегрированию по энергии:  $\sum_{p\sigma} f_{p\sigma} = \int \rho(\epsilon) d\epsilon f(\epsilon)$ . Она полезна, когда подынтегральное выражение зависит только от энергии. Ее можно определить так же, как число электронных состояний, приходящихся на интервал энергий  $\epsilon \div \epsilon + d\epsilon$ . Несложно получить соотношение для плотности состояний (в единичном объеме) для свободного электронного газа (просуммированной по спинам):

$$\rho(\epsilon) = \sum_{p\sigma} \delta(\epsilon - \epsilon_p) = \frac{m^*{}^{3/2} \sqrt{2\epsilon}}{\pi^2 \hbar^3}.$$

Отметим еще полезное соотношение между плотностью состояний и энергией Ферми (также для свободного электронного газа):

$$\rho(\varepsilon) = \frac{3n}{2E_f}$$

Для приближения сильной связи и закона дисперсии в одномерном случае получим точное выражение для плотности состояний

$$\rho(\varepsilon) = \sum_{p\sigma} \delta(\varepsilon - \varepsilon_p) = \frac{N}{2\pi a \hbar} \frac{\theta(|\varepsilon_0 - \varepsilon| < 2t)}{\sqrt{4t^2 - (\varepsilon_0 - \varepsilon)^2}},$$

т.е. плотность состояний имеет корневые особенности у границ зон.

Рассмотрим газ свободных электронов в слабом магнитном поле. Рассчитаем восприимчивость системы, учитывая, что собственный магнитный момент электрона взаимодействует с полем (энергия взаимодействия  $V = -\vec{\mu}\vec{H}$ ). Тогда суммарная энергия электрона будет зависеть от ориентации его спина относительно внешнего поля  $H$ :  $\varepsilon_{p\uparrow} = \varepsilon_p - \mu_0 H$ ;  $\varepsilon_{p\downarrow} = \varepsilon_p + \mu_0 H$ , где  $\varepsilon_p$  – энергия в отсутствие поля. По определению,

$$M = (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})\mu_0;$$

$$n_{\sigma} = \sum_p f(\varepsilon_p - \sigma\mu_0 H) = 1/2 \int \rho(\varepsilon) d\varepsilon f(\varepsilon - \sigma\mu_0 H), \quad \sigma = \pm 1.$$

Далее:

$$M = \mu_0^2 H \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) (-\partial f / \partial \varepsilon).$$

Учитывая, что при низких температурах производная от функции распределения с хорошей точностью есть дельта-функция с особенностью при энергии Ферми

$$-\partial f / \partial \varepsilon = \delta(\varepsilon - E_f),$$

находим:

$$M = \mu_0^2 H \rho(E_f);$$

$$\chi = \mu_0^2 \rho(E_f).$$

Видно, что при нулевом поле магнитный момент исчезает. Таким образом, электронный газ проявляет парамагнитные свойства. Кроме того, его намагнитченность не зависит от температуры в отличие от случая локализованных моментов (при  $T \ll E_F$ ).

Оценим восприимчивость Паули. Исходя из выражений для плотности состояний, находим для удельной восприимчивости:

$$\chi / n = \mu_0^2 \rho(E_f) / n = 3\mu_0^2 / 2E_f.$$

Если сравнить ее с результатом теории Вейсса для локализованных моментов ( $\chi = \mu_0^2 / T$ ), то величина существенно меньше (так как  $T \ll E_F$ ). Итак, можно заключить, что движение электронов (и магнитных моментов) существенно ослабляет намагнитченность.

Рассмотрим фазовые переходы, происходящие в переходных металлах и сплавах. Эти вещества испытывают переход в диэлектрическое состояние под действием различных причин: примесей, кулоновского взаимодействия и т.д. Ключевым в понимании перехода из металлического проводящего состояния в диэлектрическое состояние является то, что переход происходит из-за локализации электронов в результате перестройки их спектра в силу различных причин.

Для вывода модели Хаббард исходил из стандартного гамильтониана ферми-газа с кулоновским взаимодействием:

$$\bar{H} = \sum_{p\sigma} \varepsilon_p a_{p,\sigma}^+ a_{p\sigma} + \\ + 1/2 \sum_{p_1 p_2 p_1' p_2'} V_{p_1 p_2 p_1' p_2'} a_{p_1,\sigma}^+ a_{p_2,\sigma}^+ a_{p_2',\sigma'} a_{p_1',\sigma'}$$

Хорошим квантовым числом является номер узла. Перейдем от импульсного представления к узельным операторам:

$$a_{p\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i a_{i\sigma} \exp\{i p \vec{r}_i\}.$$

Здесь под  $\exp(i p \vec{r}_i)$  понимаются необязательно плоские волны, а волновые функции Ваннье в кристалле, совпадающие с узельными функциями точно на узле и имеющие асимптотами плоские волны вдали от атома. Они ортонормированы и образуют полную систему, как и плоские волны. Тогда кинетическая часть гамильтониана имеет вид:

$$\bar{H}_{kin} = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma}, \\ t_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{p\sigma} \varepsilon_p \exp(i p [\vec{r}_i - \vec{r}_j]) \sim \exp(-|\vec{r}_i - \vec{r}_j|/a_B).$$

Амплитуда перескока быстро затухает в узкозонном веществе с сильно локализованными носителями, и обычно достаточно учесть перескоки только на ближайшие соседи.

Подставив преобразование операторов к узельному виду в потенциальную часть гамильтониана, получим, что в узельном представлении она имеет следующий вид:

$$\bar{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ijkl} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma'} a_{l\sigma}^+ a_{k\sigma}, \\ V_{ijkl} = \frac{1}{N^2} \sum_{p_1 p_2 p_1' p_2'} V_{p_1 p_2 p_1' p_2'} \exp[-i\{p_1 \vec{r}_i - p_2 \vec{r}_j + p_2' \vec{r}_l - p_1' \vec{r}_k\}].$$

Полагая, что главный вклад дает взаимодействие на одних и тех же узлах, а на больших расстояниях  $V$  много меньше, получаем окончательно гамильтониан Хаббарда:

$$\bar{H} = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma}.$$

Здесь первый член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает перескоки на соседние узлы. Второй член описывает кулоновское отталкивание на узле и учитывает, что одновременно на узле могут находиться частицы только с противоположным спином. Гамильтониан записывают в более удобной форме с использованием приближения ближайших соседей:

$$\overline{H} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}.$$

Таким образом, в модели всего два параметра: матричный элемент перескока на соседний узел  $t$  и кулоновское отталкивание на узле  $U$ . Более того, если отсчитывать все энергии в единицах  $t$ , то остается единственный параметр  $t/U$ .

Знак перескока (минус) выбирается из удобства отсчета получающихся зон симметрично от центра зоны Бриллюэна. Такая вольность в выборе знака связана со следующим свойством гамильтониана: замена  $t \rightarrow -t$  не меняет спектр модели Хаббарда, если перескок происходит только между ближайшими соседями.

Можно доказать также, что гамильтониан коммутирует с оператором полного числа частиц и полной проекции спина на ось  $z$ .

Пусть число узлов равно  $N_a$ . При половинном заполнении, т.е. когда  $N = N_a$ , и большом кулоновском взаимодействии  $U/t \gg 1$  все электроны практически “заперты” на своих узлах, образуя антиферромагнитное упорядочение:

$$\dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \dots$$

В этом случае гамильтониан Хаббарда эквивалентен гейзенберговскому антиферромагнитному гамильтониану.

Рассмотрим предел сильного кулоновского взаимодействия  $U/t \gg 1$ . Тогда в гамильтониане Хаббарда можно пренебречь перескоковым членом. Гамильтониан диагонален, и энергия равна

$$E = \sum_i \{E_0(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}\} = N_1 E_0 + N_2 (2E_0 + U),$$

где  $N_1$  – число узлов с одним электроном;  $N_2$  – с двумя.  $E_0$  – энергия, необходимая, чтобы связать электрон в изолированном атоме.  $U + E_0$  – энергия, необходимая для присоединения второго электрона с противоположно направленным спином. Зонная картина такой системы состоит из двух зон с энергиями  $E_0$  и  $U + E_0$ . В основном состоянии  $N$  имеющихся электронов обладают энергией  $E_0$ , и на каждом атоме размещено по одному электрону. В этом предельном случае имеет место строгая локализация электронов.

Если мы начинаем “включать” перескок  $t$ , то эти локализованные состояния начинают расщепляться в зоны шириной порядка  $2Zt$ , где  $Z$  – число ближайших соседей (это так называемые нижняя и верхняя Хаббардовские зоны).

Пока зоны не слились, вещество остается диэлектриком. При критической величине расщепления (критическом значении параметра  $t/U \sim Z$ ), определяемого постоянной решетки и кулоновским узельным взаимодействием, щель исчезает. В таком случае имеет

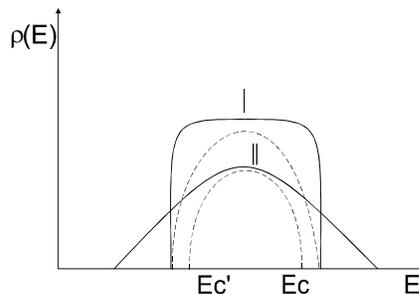
место переход от локализованного описания к зонной модели, т.е. от диэлектрика к металлу.

Амплитуда перескока чувствительна к постоянной решетки  $a$ , так как в приближении ближайших соседей  $t \sim \exp(-a/a_B)$ , поэтому переход может происходить, например, при изменении внешнего приложенного давления, или из-за структурной перестройки с изменением постоянной решетки, или из-за температурного расширения.

Следует отметить, что в *одномерной* ситуации получено *точное* решение модели Хаббарда (Либ, Ву, 1964). Основной вывод – отсутствие перехода металл – диэлектрик при любом параметре  $U/t > 0$ .

Локализовать носители можно не только перестройкой спектра за счет кулоновского взаимодействия и изменения постоянной решетки, но и с помощью введения примесей. Покажем это на примере модели Андерсона.

Если кристалл идеален, то проводимость и подвижность электрона будут бесконечными, т.е. носители могут диффундировать по решетке без рассеяния до бесконечности. Нарушения идеальной решетки (т.е. фононы, точечные дефекты и примеси) ограничивают *среднюю длину свободного пробега* электрона, так как он начинает отражаться и рассеиваться от дефектов решетки и сбивать фазу своей волновой функции. Иначе говоря, в результате возмущения фазовая когерентность волновой функции ограничена *конечной длиной когерентности*. По мере возрастания степени разупорядочения длина свободного пробега и длина когерентности уменьшаются. Несмотря на это, состояние остается все еще нелокализованным. Но дальнейший рост неупорядоченности может привести к локализованным состояниям, т.е. к состояниям, ограниченными конечными областями. Их протяженность может быть описана количественно определенной *длиной локализации*.



Обсудим это в рамках модели Андерсона. Рассмотрим трехмерную точечную решетку, заполненную узлами с энергией  $E_n$ . При наличии перескоков с амплитудой  $t_{nm}$  и равенстве узельных энергий возникает энергетическая зона с шириной  $B \sim 2Zt$ . Для рассмотрения разупорядочения введем статистический разброс энергий  $E_n$  по области шириной  $W$ , которая является степенью разупорядочения системы (пропорциональной концентрации примесей), т.е.  $E_n$  распределены случайным образом равномерно по интервалу  $(-W/2, W/2)$ . Тогда гамильтониан Андерсона в узельном представлении имеет вид:

$$\overline{H} = \sum_n E_n a_n^+ a_n + \sum_{i \neq j} t_{nm} a_n^+ a_m .$$

Здесь для простоты рассматриваются бесспиновые частицы, и учитывается взаимодействие только с ближайшими соседями. Рассмотрим вероятность  $P$  возвращения электрона в некоторый узел  $i$  через бесконечное время, если сначала он находился на этом узле. Если электрон был исходно локализован, то его диффузия по кристаллу ограничена конечным объемом,  $P \neq 0$ . При полной делокализации электрон не вернется, и  $P = 0$ . Андерсон смог показать, что параметром, величина которого определяет переход между этими двумя альтернативами, является отношение степени разупорядочения к ширине зоны:  $W/B$ .

Качественно полученный результат можно объяснить следующим образом. Известно, что отдельный дефект кристаллической решетки приводит к отщеплению (и локализации) состояния от края зоны проводимости. С ростом числа дефектов число локализованных состояний вне зоны объединяется в зону (примесная зона), которая может перекрываться с зоной делокализованных состояний (зоной проводимости). В случае андерсоновского разупорядочения наблюдаются аналогичные явления, т.е. при увеличении степени разупорядочения состояния у краев энергетической зоны первыми становятся локализованными и одновременно сдвигаются в энергетическую щель. Зона приобретает хвосты с локализованными состояниями у верхнего и нижнего краев. С ростом неупорядоченности точки разделения локализованных и делокализованных состояний приближаются друг к другу и встречаются в центре зоны. В этом случае зону заполняют только локализованные состояния.

## 8 неделя. Бозе-эйнштейновская конденсация

Рассмотрим газ частиц с симметричной волновой функцией, описываемых во вторичном квантовании операторами рождения  $a^+$  и уничтожения  $a$  и подчиняющихся следующим коммутационным соотношениям:

$$a_k a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k = \delta_{kk'}, \quad a_k^+ a_{k'}^+ - a_{k'}^+ a_k^+ = 0, \quad a_k a_{k'} - a_{k'} a_k = 0.$$

Таким образом, в отличие от фермионов, волновая функция симметрична по перестановкам координат (и импульсов) частиц. На волновую функцию в представлении чисел заполнения операторы действуют, соответственно,

$$a_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle, \quad a_k^+ |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle, \quad a_k^+ a_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle.$$

Числа заполнения квантовых состояний при симметричных волновых функциях ничем не ограничены и могут иметь произвольные значения. Функцию распределения бозе-частиц несложно получить, рассмотрев термодинамический потенциал системы  $\Omega = -T \ln Q$ , где статистическая сумма  $Q$  в большом каноническом ансамбле для системы невзаимодействующих частиц имеет вид:

$$Q = \sum_N \exp\{\mu N / T\} \left[ \sum_n \exp\{-E_{nN} / T\} \right] = \sum_{n_k} (\exp[\beta(\mu - \varepsilon_k)])^{n_k},$$

Для сходимости геометрической прогрессии необходимо, чтобы  $\exp\{\beta(\mu - \varepsilon_k)\} < 1$ . Это условие должно выполняться для всех состояний  $\varepsilon_k$ , в том числе и для  $\varepsilon_k = 0$ . Отсюда химпотенциал должен быть отрицателен:  $\mu < 0$ . Суммируем геометрическую прогрессию и находим:

$$\Omega_k = T \ln(1 - \exp[\frac{\mu - \varepsilon_k}{T}]).$$

Теперь можно найти средние числа заполнения  $\langle n_k \rangle = -\partial \Omega_k / \partial \mu$ :

$$n_k(T) = \langle n_k \rangle = \langle a_k^+ a_k \rangle = \frac{1}{\exp[\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}] - 1}.$$

Энергия одной частицы  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Полное число частиц  $N$  в газе:

$$N = \sum_k \frac{1}{\exp[\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}] - 1} = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\frac{\varepsilon - \mu}{T}] - 1}.$$

Уравнение нормировки определяет неявно химический потенциал как функцию температуры и плотности  $n = N/V$ . Энергия бозе-газа

$$E = \sum_k \varepsilon_k \frac{1}{\exp[\frac{\varepsilon_k - \mu}{T}] - 1} = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon \sqrt{\varepsilon}}{\exp[\frac{\varepsilon - \mu}{T}] - 1}.$$

Рассмотрим случай низких температур. Согласно нормировочному уравнению, при понижении температуры химический потенциал возрастает и достигает значения  $\mu = 0$  при температуре  $T_0$ , удовлетворяющей соотношению:

$$N / V = \frac{(mT_0)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{z}}{\exp[z]-1} = \frac{(mT_0)^{3/2}}{2\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \zeta(3/2).$$

Здесь учтено, что  $\int_0^\infty \frac{x^{z-1} dz}{e^z-1} = \Gamma(z)\zeta(z)$ ,  $\zeta(z)$  – дзета-функция Римана,  $\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612$ ,  $\Gamma(z)$  – гамма-функция,  $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ . Из этого уравнения получаем

$$T_0 = \frac{2\pi}{[\zeta(3/2)]^{2/3}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = 3.31 \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}.$$

При более низких температурах  $T < T_0$  уравнение нормировки не имеет решений  $\mu < 0$ . Это связано с тем, что в этом случае нельзя переходить формально от суммирования к интегрированию. Необходимо более аккуратно учитывать член с  $\varepsilon_k = 0$ , так как он умножается на  $\sqrt{\varepsilon}$  и выпадает из суммы. Однако именно он важен при низких температурах, так как именно в это состояние конденсируются все частицы. Число частиц при  $\varepsilon > 0$ :

$$N_{\varepsilon>0} = \frac{V(mT)^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty dz \frac{\sqrt{z}}{\exp[z]-1} = N \left\{ \frac{T}{T_0} \right\}^{3/2}$$

Остальные частицы, сконденсированные при  $\varepsilon = 0$ , определяются из нормировки:

$$N_{\varepsilon=0} = N_0 = N[1 - (T/T_0)^{3/2}].$$

Таким образом, при температуре  $T = T_0$  начинается конденсация бозе-частиц в низшее энергетическое состояние  $\varepsilon = 0$ , и число сконденсированных частиц  $N_0$  определяется степенной зависимостью.

Определим термодинамические величины бозе-газа в условиях наличия конденсата. Они определяются только частицами с  $\varepsilon > 0$ . Полагая везде  $\mu = 0$ , находим энергию, теплоемкость, энтропию и свободную энергию:

$$\begin{aligned} E &= \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \int_0^\infty d\varepsilon \frac{\varepsilon\sqrt{\varepsilon}}{\exp[\varepsilon/T]-1} = \frac{3V(mT)^{3/2}T}{4\sqrt{2\pi^2\hbar^3}} \zeta(5/2) = \\ &= 0.770NT[T/T_0]^{3/2}, \\ C &= \partial E/\partial T = 5E/2T \sim T^{3/2}, \\ S &= \int [C/T] dT = 5E/3T, \\ F &= E - TS = -\frac{2}{3}E. \end{aligned}$$

В точке  $T = T_0$  все величины непрерывны. Однако производная теплоемкости испытывает в этой точке конечный скачок, т.е. теплоемкость имеет при  $T = T_0$  излом и равна  $1.92N$ . Таким образом, явление бозе-конденсации – типичный фазовый переход второго рода.

В квантовой бозе-системе элементарные возбуждения должны иметь целочисленный спин, так как момент импульса всякой квантово-механической системы может меняться только на целое число. Поэтому в квантовой бозе-жидкости элементарными возбуждениями с малыми импульсами  $p$  являются обычные гидродинамические волны, т.е. фононы (квазичастицы с нулевым спином). Таким образом, закон дисперсии возбуждений должен быть линеен:

$$\varepsilon_p = u p,$$

где размерный коэффициент  $u$  имеет смысл скорости звука. Число этих возбуждений стремится к нулю при  $T \rightarrow 0$ , и при низких температурах, когда их число мало и они практически не взаимодействуют, их можно считать идеальным бозе-газом с нулевым химпотенциалом (число возбуждений не фиксировано), и функция распределения возбуждений имеет вид

$$n(p) = \frac{1}{\exp\left[\frac{\varepsilon_p}{T}\right] - 1}.$$

Получим закон возбуждений над основным состоянием взаимодействующего бозе-газа. Рассмотрим слабо неидеальный бозе-газ с одинаковым взаимодействием  $U$  между парами частиц, описываемый гамильтонианом:

$$\overline{H} = \sum_p \varepsilon_p a_p^+ a_p + \frac{U}{2V} \sum_{\substack{p_1 p_2 p_3 p_4 \\ p_1 + p_2 = p_3 + p_4}} a_{p_4}^+ a_{p_3}^+ a_{p_2} a_{p_1},$$

где  $\varepsilon_p = p^2/2m$ , а взаимодействие связано с амплитудой рассеяния  $a$  (имеющей величину порядка межчастичного расстояния) между двумя одинаковыми частицами соотношением

$$U = 4\pi a/m.$$

Боголюбов (1947 г.) показал, что для описания основного и низших возбужденных состояний удастся диагонализировать гамильтониан и получить энергетический спектр. Упростим взаимодействующую часть гамильтониана, учитывая, что в основном состоянии частицы находятся в конденсате, и ввиду слабости взаимодействия основное состояние взаимодействующего газа будет слабо отличаться от основного состояния идеального газа, поэтому число частиц над конденсатом будет много меньше числа конденсатных частиц  $N_0$ :

$$N - N_0 \ll N_0.$$

Так как матричные элементы бозевских операторов равны  $\sqrt{N} \sim \sqrt{N_0} \gg 1$ , то в гамильтониане можно оставить только взаимодействие конденсатных частиц между собой и с возбуждениями, пренебрегая взаимодействием надконденсатных частиц между собой:

$$H_{\text{int}} = \frac{U}{2V} \{ a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 + \sum_{p \neq 0} (2a_p^+ a_0^+ a_p a_0 + 2a_{-p}^+ a_0^+ a_{-p} a_0 + a_p^+ a_{-p}^+ a_0 a_0 + a_0^+ a_0^+ a_p a_{-p}) \}.$$

Так как  $\sqrt{N_0} \gg 1$ , операторы  $a_0^+$  и  $a_0$  являются простыми числами, равными  $\sqrt{N_0}$ . Отсюда взаимодействующая часть гамильтониана переписывается в виде

$$H_{\text{int}} = \frac{U}{2V} \left[ N_0^2 + N_0 \sum_{p \neq 0} (2a_p^+ a_p + 2a_{-p}^+ a_{-p} + a_p^+ a_{-p}^+ + a_p a_{-p}) \right].$$

Учтем выражение для полного числа частиц:

$$N = N_0 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} (a_p^+ a_p + a_{-p}^+ a_{-p}).$$

Выразим все числа  $N_0$  через  $N$ , ограничиваясь членами, содержащими не менее первой степени  $N$ :

$$\begin{aligned} \bar{H} &= \frac{UN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \left[ \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{UN}{V} \right) (a_p^+ a_p + a_{-p}^+ a_{-p}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{UN}{V} (a_p^+ a_{-p}^+ + a_p a_{-p}) \right]. \end{aligned}$$

Диагонализуем гамильтониан. Для этого введем линейные преобразования операторов:

$$a_p = \frac{1}{\sqrt{1-A_p^2}} (\alpha_p + A_p \alpha_{-p}^+), \quad a_p^+ = \frac{1}{\sqrt{1-A_p^2}} (\alpha_p^+ + A_p \alpha_{-p}).$$

Несложно убедиться, что операторы  $\alpha$  также удовлетворяют бозевским соотношениям коммутации. Подставив их в гамильтониан и обозначив

$$S = UN/V, \quad S_p = p^2/2m + S, \quad \Delta_p = 1 + A_p^2, \quad W_p = 1 - A_p^2,$$

получим

$$\begin{aligned} \bar{H} &= SN/2 + \sum_{p \neq 0} \frac{1}{W_p} [S_p A_p^2 + SA_p] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{W_p} [ \{ S_p \Delta_p + 2SA_p \} (\alpha_p^+ \alpha_p + \alpha_{-p}^+ \alpha_{-p}) ] + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \frac{1}{W_p} [ \{ 2S_p A_p + S \Delta_p \} (\alpha_p^+ \alpha_{-p}^+ + \alpha_p \alpha_{-p}) ]. \end{aligned}$$

Зануляя коэффициент при недиагональном члене, находим  $A_p$ :

$$2S_p A_p + S \Delta_p = 0 \Rightarrow A_p = \frac{1}{S} (-S_p + \sqrt{S_p^2 - S^2}).$$

Окончательно:

$$\bar{H} = SN / 2 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} S A_p + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} \sqrt{S_p^2 - S^2} (\alpha_p^+ \alpha_p + \alpha_{-p}^+ \alpha_{-p}).$$

Полная энергия системы имеет вид

$$E = \langle \bar{H} \rangle = E_0 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} E_p \langle \alpha_p^+ \alpha_p + \alpha_{-p}^+ \alpha_{-p} \rangle = E_0 + \sum_{p \neq 0} E_p n_p,$$

$$\langle \alpha_p^+ \alpha_p \rangle = n_p,$$

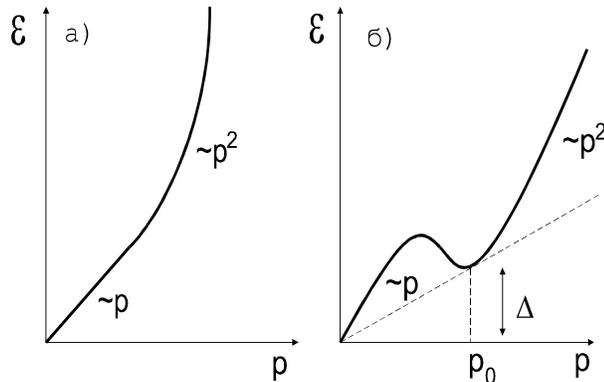
$$E_0 = SN / 2 + \frac{1}{2} \sum_{p \neq 0} S A_p,$$

$$E_p = \sqrt{S_p^2 - S^2} = \sqrt{\left(\frac{p^2}{2m} + \frac{UN}{V}\right)^2 - \left(\frac{UN}{V}\right)^2}.$$

Здесь  $n_p$  – функция распределения возбуждений, имеющая вид бозе-функции с нулевым химпотенциалом. В предельных случаях спектр возбуждений имеет вид:

$$E_p = \begin{cases} up, & u = \sqrt{UN/mV}, \quad p \rightarrow 0; \\ p^2/2m, & p \rightarrow \infty. \end{cases}$$

При малых импульсах получаем звуковой закон дисперсии со скоростью звука  $u$ . При больших импульсах имеем спектр свободной частицы, так как взаимодействие перестает играть существенную роль.



Локальных минимумов в спектре возбуждений нет, так как смене линейной зависимости на квадратичную соответствует только точка перегиба. Однако мы рассматривали слабо неидеальный газ. В реальном же случае при возрастании взаимодействия возможен локальный минимум (что наблюдается у жидкого гелия). Вблизи точки минимума, которая соответствует новым квазичастичным возбуждениям, спектр  $E_p$  можно представить в виде

$$E_p = \Delta + \frac{(p - p_0)^2}{2m^*},$$

где  $\Delta = E(p_0)$ ,  $m^*$  – эффективная масса этих возбуждений, называемых *ротонами*.

Пользуясь законом дисперсии, получим вклад в термодинамические величины ротонных возбуждений. При низких температурах, полагая  $\Delta \gg T$ , можно считать, что распределение ротонов – больцмановское:  $n_p = e^{-E_p/T}$ . Отсюда:

$$E = V \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d^3 p E_p \exp[-E_p / T] = N_p \left( \frac{1}{2} T + \Delta \right),$$

$$C = \partial E / \partial T = N_p \left( \frac{3}{4} + \frac{\Delta}{T} + \frac{\Delta^2}{T^2} \right),$$

$$S = \int [C/T] dT = N_p \left( \frac{3}{2} + \frac{\Delta}{T} \right),$$

$$F = E - TS = -TN_p,$$

$$N_p = \frac{2(m^* T)^{3/2} p_0^2 V}{(2\pi)^3 \hbar^3} \exp[-\Delta/T].$$

Здесь

$$N_p = V \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d^3 p \exp[-E_p / T]$$

– число ротонов. Видно, что зависимость от температуры термодинамических величин в отличие от случая фононных возбуждений экспоненциальная:  $\sim e^{-\Delta/T}$ .

Итак, неидеальный бозе-газ имеет два вида возбуждений – фононы и ротонны, отвечающих различным участкам по импульсу  $q$  одной и той же ветви возбуждений. При низких температурах ротонная часть меньше фононной и, наоборот, при высоких превалирует над фононной, так что теплоемкость имеет сначала степенную зависимость  $\sim T^3$ , а затем экспоненциальную  $\sim e^{-\Delta/T}$ .

Вернемся теперь к слабо неидеальному газу. Все ли частицы в этом случае испытывают бозе-конденсацию, как это имеет место в идеальном газе? Для среднего числа частиц имеем:

$$\langle N \rangle = N_0 + \sum_{p \neq 0} \frac{n_p + A_p^2 (n_p + 1)}{1 - A_p^2}.$$

Полагая  $T = 0$ ,  $n_p = 0$ , находим:

$$\begin{aligned} \langle N \rangle &\equiv N = N_0 + \frac{(2m^* S)^{3/2}}{8\pi^2} \int_1^\infty dz \frac{(z - \sqrt{z^2 - 1})}{\sqrt{z + 1}} \Rightarrow \\ &\Rightarrow N_0 / N = 1 - \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{Na^3}{V}}, \end{aligned}$$

Итак, в неидеальном бозе-газе далеко не все частицы находятся в конденсате при нулевой температуре.

При низких температурах наиболее интересным свойством бозе-жидкости является свойство сверхтекучести, т.е. способность протекать по капиллярным трубкам без трения.

Рассмотрим бозе-жидкость при  $T = 0$ , текущую по капилляру со скоростью  $\vec{v}$ . В системе, связанной с жидкостью, она покоится, а капилляр движется со скоростью  $-\vec{v}$ . Если между жидкостью и стенками капилляра имеется трение, это может привести к увлечению жидкости стенками капилляра. Это приводит к появлению элементарных возбуждений и диссипации энергии.

Пусть имеется возбуждение с энергией  $\varepsilon_p$  и импульсом  $p$ . Вернемся в систему координат, связанную с капилляром. Тогда энергия жидкости, связанная с этим возбуждением, имеет вид

$$\varepsilon(p) + \vec{p} \vec{v} + \frac{M v^2}{2},$$

где  $M$  – масса жидкости. Таким образом, появление возбуждения меняет первоначальную энергию жидкости  $Mv^2/2$ , причем добавка равна  $\varepsilon(p) + \vec{p}\vec{v}$ . Для того, чтобы такое возбуждение появилось, необходимо, чтобы общая энергия вместе с ним стала меньше, т.е.

$$\varepsilon(p) + \vec{p} \vec{v} < 0.$$

Эта величина имеет минимальное значение при антипараллельных скорости и импульсе. Таким образом

$$v > \frac{\varepsilon}{p}.$$

Наконец, для того чтобы возбуждение могло возникнуть, необходимо, чтобы

$$v > (\varepsilon/p)_{\min}.$$

Это условие называется *критерием сверхтекучести* Ландау.

Минимальному значению  $\varepsilon/p$  соответствует точка на кривой  $\varepsilon(p)$ , в которой

$$\frac{d\varepsilon}{dp} = \frac{\varepsilon}{p},$$

Производная  $d\varepsilon/dp$  есть скорость элементарного возбуждения. Несложно оценить из спектра, что скорость сверхтекучего движения должна быть

$$v < \frac{1}{m^*} (\sqrt{p_0^2 + 2m^* \Delta} - p_0) \Big|_{p_0^2 \gg 2m^* \Delta} = \frac{\Delta}{p_0}.$$

Рассмотрим качественную картину движения бозе-жидкости, когда выполняется критерий Ландау. При нулевой температуре возбуждения отсутствуют, и движение сверхтекучее. Как только  $T \neq 0$ , появляются возбуждения, которые сталкиваются со стенками капилляра и участвуют в вязком движении жидкости с диссипацией энергии. В таком движении участвует лишь часть массы жидкости. Дело в том, что движение газа возбуждений относительно жидкости сопровождается переносом массы. Пусть  $v$  – относительная скорость такого движения. Тогда импульс газа возбуждений в единице объема

$$\vec{P} = \int \vec{p} n (\epsilon_p - \vec{p} v) \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \Big|_{v \rightarrow 0} \approx -v \int 3 \int p^2 \partial n / \partial \epsilon \frac{d^3 p}{(2\pi)^3}.$$

Так как импульс пропорционален скорости, то происходит перенос массы.

Оставшаяся часть массы жидкости будет по-прежнему двигаться без диссипации. Таким образом, бозе-жидкость при  $T \neq 0$  представляет собой смесь двух жидкостей – сверхтекучей и нормальной, движущихся без трения друг относительно друга. Фононная и ротонная части нормальной плотности:

$$\rho_{nf} = \frac{2\pi^2 T^4}{45u^5}, \quad \rho_{np} = \frac{2m^{*1/2} p_0^4 \exp(-\Delta/T)}{3(2\pi)^{3/2} T^{1/2}}.$$

Оставшаяся часть плотности соответствует сверхтекучему движению.

Пусть скорость сверхтекучей компоненты  $\vec{v}_s$ . Следует отметить важное свойство: если жидкость помещена во вращающийся цилиндр, то нормальная часть будет увлечена стенками и станет вращаться с ним. Напротив, сверхтекучая часть будет покоиться, ее нельзя привести во вращение, так как движение сверхтекучей компоненты всегда потенциально. Это свойство можно записать математически:

$$\text{rot } \vec{v}_s = 0.$$

Двухкомпонентная гидродинамика бозе-жидкости во многом отличается от обычной гидродинамики. Так, в бозе-жидкости могут происходить колебания двух различных типов с разными скоростями. Колебания первого типа – обычный звук, или первый звук, со скоростью  $u$ . В этом движении сверхтекучая и нормальная компоненты не разделяются и движутся как единое целое. Колебания второго типа – это так называемый второй звук, который распространяется со скоростью  $u_2 = \sqrt{\rho_s T S^2 / \rho \rho_n C}$ , где  $S$  – энтропия,  $C$  – теплоемкость (при  $T \rightarrow 0$   $u_2 = u/\sqrt{3}$ ). В такой волне нормальная и сверхтекучая компоненты колеблются в противофазе, так что полный поток жидкости равен нулю:

$$\vec{j} = \rho_n \vec{v}_n + \rho_s \vec{v}_s = 0.$$

## 9 неделя. Сверхпроводимость как термодинамический фазовый переход второго рода

В 1935 году Ф.Лондон и Г.Лондон развили феноменологическую теорию электромагнитных свойств сверхпроводников. Также основанный на двухжидкостном представлении, их подход постулировал “жесткость” волновой функции для сверхпроводящей компоненты, что приводило к исчезновению парамагнитного вклада в сверхток.

Квантовомеханическое выражение для тока имеет вид

$$\vec{j} = \frac{e\hbar}{2mi} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - 2 \frac{|\Psi|^2 e^2}{mc} \vec{A}$$

Первая часть – парамагнитный вклад, вторая – диамагнитный ток. Согласно постулату о жесткости волновой функции, ее градиенты малы, и парамагнитный ток мал. В этом случае между током и векторным потенциалом получалось соотношение

$$\vec{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2} \vec{A},$$

где  $\lambda$  – глубина проникновения магнитного поля (или лондоновская длина). Лондоновская длина напрямую связана с концентрацией сверхпроводящих электронов  $n_s$  следующим образом:

$$\lambda^{-2} = 4\pi e^2 n_s / m.$$

Учитывая уравнение Максвелла  $\text{rot rot } \vec{E} = -\frac{1}{c} \frac{d\vec{E}}{dt}$ , получаем, что магнитное поле внутри сверхпроводника (как и ток) удовлетворяет следующему уравнению:

$$\text{rot rot } \vec{h} + \lambda^{-2} \vec{h} = 0.$$

С помощью модели Лондонов можно объяснить эффект Мейсснера и показать, что магнитное поле спадает вглубь сверхпроводника по экспоненциальному закону:

$$h(x) = h(0) \exp[-x/\lambda].$$

На такую же характерную величину  $\lambda$  убывает и экранирующий сверхток, текущий по поверхности сверхпроводника:

$$\vec{j}_s = \frac{c}{4\pi} \text{rot rot } \vec{H} \Rightarrow j_s = \frac{cH_0}{4\pi\lambda} e^{-x/\lambda}.$$

Хорошим приближением для температурной зависимости  $\lambda$  является эмпирическая формула

$$\lambda(T) = \frac{\lambda(0)}{\sqrt{(1 - (T/T_c)^4)}}$$

Оценка  $\lambda$ : при нулевой температуре все электроны в металле сверхпроводящие, поэтому  $n_s = n \sim 10^{22} \text{ см}^{-3}$ , откуда  $\lambda \sim 600 \text{ \AA}$ . Лондоновская глубина проникновения для некоторых сверхпроводников:

Элемент	Al	Cd	Hg	In	Nb	Pb	Sn	Tl
$\lambda(0), \text{ \AA}$	500	1300	380-450	640	470	390	510	920

### Пластина в параллельном поле

Рассмотрим задачу о бесконечной пластине толщины  $d$ , помещенной во внешнее поле  $H_0$ . По соображениям симметрии поле внутри пластины должно быть направлено вдоль оси  $z$  и зависеть только от  $x$ :

$$\frac{d^2 H}{dx^2} - \frac{1}{\lambda^2} H = 0$$

с граничными условиями  $H(\pm d/2) = H_0$ .

Решение уравнения:

$$H = H_1 \operatorname{ch}(x/\lambda) + H_2 \operatorname{sh}(x/\lambda).$$

Окончательно,

$$H(x) = H_0 \frac{\operatorname{ch}(x/\lambda)}{\operatorname{ch}(d/2\lambda)}.$$

Для плотности сверхтока, соответственно, имеем:

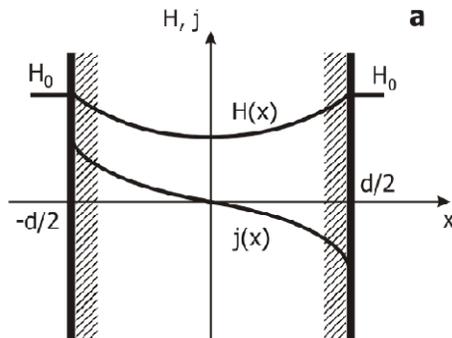
$$j_s = -\frac{c}{4\pi} \frac{dH}{dx};$$

$$j_s = -\frac{cH_0}{4\pi\lambda} \frac{\operatorname{sh}(x/\lambda)}{\operatorname{ch}(d/2\lambda)}.$$

Если пластина толстая,  $d \gg \lambda$ , то магнитное поле и ток проникают в пластину только на глубину порядка  $\lambda$ , если же  $d \ll \lambda$  (тонкая пленка), то в линейном приближении

$$H = H_0, \quad j_s = -\frac{cH_0 x}{4\pi\lambda^2}.$$

Магнитное поле полностью проникает в пленку.



### Пластина с током

Пусть теперь имеется та же пластина, по которой течет ток в направлении  $y$ , а внешнее поле отсутствует. На поверхностях пластины ток создает магнитное поле  $H\left(\pm\frac{d}{2}\right) = \mp H_I$ . Подставляя эти граничные условия в общее решение, находим:

$$H(x) = -H_I \frac{\text{sh}\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\text{sh}\left(\frac{d}{2\lambda}\right)},$$

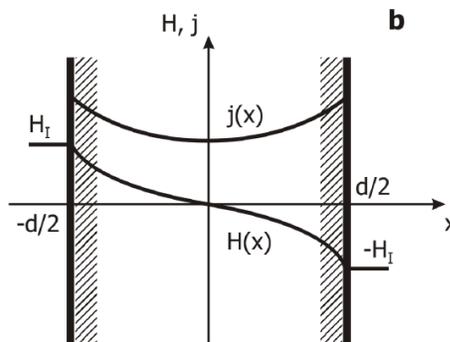
$$H_I = \frac{2\pi I}{c}.$$

Распределение тока в пластине:

$$j_s = -\frac{cH_I}{4\pi\lambda} \frac{\text{ch}(x/\lambda)}{\text{sh}(d/2\lambda)}.$$

В случае тонкой пленки ток течет по всему сечению пластины:

$$H = -H_I \frac{2x}{d}, \quad j_s = -\frac{cH_I}{2\pi d}.$$



Природа эффективного притяжения между электронами. Диэлектрический формализм. Второй порядок по теории возмущения. Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия.

В обычном электронном газе единственным взаимодействием между частицами является кулоновское отталкивание, так что эффект Купера возникнуть не может. Для получения матричных элементов, отвечающих притяжению, необходимо, чтобы электроны были связаны с другой системой частиц (или возбуждений) твердого тела. (Таковыми возбуждениями могут быть, например, фононы, электроны из других зон, спиновые волны в магнитной среде и т. д.). В настоящее время установлено, что важную роль играет лишь один механизм, а именно электрон-фононное взаимодействие, на что впервые указал Фрелих.

### 1. Квантово-механическое описание с помощью теории возмущений

Найдем матричный элемент  $V_{kk'}$  электрон-электронного взаимодействия, отвечающий переходу двух электронов из начального состояния  $(k, -k)$  в конечное  $(k', -k')$ .

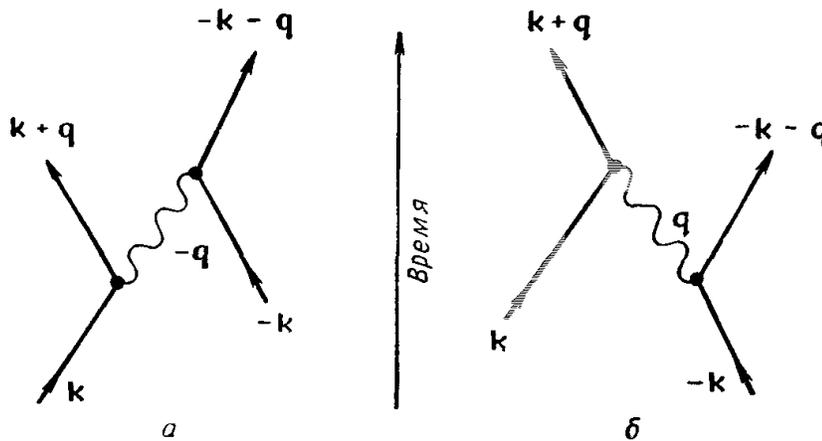
Обозначим эти состояния соответственно через I и II. В общем случае матричный элемент  $V_{kk'}$  состоит из двух членов:

- а) Член, отвечающий прямому кулоновскому отталкиванию электронов  $U_c(r_1-r_2)$ . Соответствующий матричный элемент имеет вид

$$\langle I | \mathcal{H}_c | II \rangle = \int e^{-ik \cdot (r_1 - r_2)} U_c(r_1 - r_2) e^{ik' \cdot (r_1 - r_2)} dr_1 dr_2,$$

$$\langle I | \mathcal{H}_c | II \rangle = \int U_c(\rho) e^{iq \cdot \rho} d\rho = U_q, \quad q = k' - k$$

(волновые функции нормированы на единичный объем).



- а — электрон в состоянии  $k$  испускает фонon с волновым вектором  $-q$ , который затем поглощается вторым электроном; б — электрон в состоянии  $-k$  испускает фонon с волновым вектором  $q$ , который поглощается первым электроном.

- б) Член, отвечающий такому процессу, когда один из электронов испускает фонon, который затем поглощается другим электроном.

Этот процесс показан на фиг. 39. Энергия начального состояния I равна  $E_I = 2\xi_k$ , где

$$\xi_k = \hbar^2 k^2 / 2m - E_F \equiv \epsilon_k - E_F$$

(для удобства одноэлектронные энергии всюду отсчитываются от уровня Ферми).

Аналогично энергия конечного состояния II равна  $E_{II} = 2\xi_{k'}$ .

Условию сохранения импульса удовлетворяют два промежуточных состояния:

1. Электрон 1 находится в состоянии  $k' = k+q$ , электрон 2 — в состоянии  $-k$ ; испущен фонon с волновым вектором  $-q$  и энергией  $\hbar\omega_q$

$$E_I = \xi_{k'} + \xi_k + \hbar\omega_q$$

(отметим, что  $\xi_k$  и  $\omega_k$  являются четными функциями  $k$ ).

2. Электрон 1 находится в состоянии  $k$ , электрон 2 — в состоянии  $-k' = -(k+q)$ , фонон имеет волновой вектор  $q$  и энергию  $\hbar\omega_q$ .

Во втором порядке теории возмущений матричный элемент, связывающий состояния I и II, равен

$$\begin{aligned} \langle I | \mathcal{H}_{\text{косв}} | II \rangle &= \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \langle I | \mathcal{H}_{\text{эл.-фон}} | i \rangle \left( \frac{1}{E_{II} - E_i} + \frac{1}{E_I - E_i} \right) \langle i | \mathcal{H}_{\text{эл.-фон}} | II \rangle. \end{aligned}$$

Здесь сумма берется по всем допустимым промежуточным состояниям;  $H_{\text{эл.-фон}}$  — гамильтониан электрон-фононного взаимодействия. Обозначим через  $W_q$  матричный элемент, соответствующий испусканию или поглощению одного фонона с волновым вектором  $q$ . Тогда

$$\langle I | \mathcal{H} | II \rangle = U_q + \frac{2 |W_q|^2}{\hbar} \frac{\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}.$$

где мы определили частоту  $\omega$  как разность

$$\hbar\omega = \xi_{k'} - \xi_k$$

Таким образом,  $\hbar\omega$  и  $\hbar q$  равны соответственно изменению энергии и импульса электрона 1 при переходе 1->II. Полный матричный элемент равен

$$\langle I | \mathcal{H} | II \rangle = U_q + \frac{2 |W_q|^2}{\hbar} \frac{\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}.$$

Для  $\omega < \omega_q$  член, соответствующий косвенному обмену, отрицателен, т. е. отвечает притяжению. Таким образом, мы приходим к выводу, что результирующее взаимодействие представляет собой притяжение, если член  $U_q$  не слишком велик.

*Описание с помощью диэлектрической проницаемости*

Эффективное электрон-электронное взаимодействие можно описывать также следующим образом. „Голое“ кулоновское отталкивание между двумя электронами  $e^2/r$  приводит к матричному элементу  $4\pi e^2/q^2$ . Однако это взаимодействие экранируется другими электронами, а также положительными ионами решетки. Если интересующие нас частоты близки к собственным частотам  $\omega_q$  движения ионов, то может возникнуть явление резонанса. Ионы могут „перезэкранировать“ отрицательный заряд электрона 1, в результате возникает положительно заряженное облако, которое будет притягиваться электроном 2.

На практике эффекты экранирования можно описывать с помощью диэлектрической проницаемости  $\epsilon(q, \omega)$ , являющейся функцией волнового вектора и частоты. Эффективное взаимодействие тогда равно взаимодействию „голых“ частиц, уменьшенному в  $\epsilon$  раз:

$$\langle I | H | II \rangle = 4\pi e^2 / q^2 \varepsilon(q, \omega)$$

Задача заключается в вычислении  $\varepsilon$ .

*Модель «желе».*

Рассмотрим систему электронов, имеющих массу  $m$  заряд  $-e$ , и ионов с массой  $M$  и зарядом  $+Ze$ . В целом система нейтральна, если число ионов в  $1 \text{ см}^3$  равно  $n/Z$ , где  $n$  — плотность электронов. Учтем электростатическое взаимодействие между частицами и отвлечемся от того факта, что ионы образуют решетку, т. е. будем трактовать их как жидкость. Эта простая модель металла носит название модели „желе“.

Результаты, полученные с помощью столь простой модели, оказываются полезными для качественного понимания взаимодействий. Диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon(q, \omega)$  определяется следующим образом.

Рассчитаем сначала диэлектрическую проницаемость отдельно для электронной и ионной подсистемы. Результаты затем объединим через сложение индуцированных зарядов.

Спектр электронов в приближении Томаса-Ферми во внешнем потенциале  $\phi(\vec{r})$  имеет вид:

$$\varepsilon(k, \vec{r}) = \hbar^2 k^2 / 2m - e\phi(\vec{r}).$$

Соотношение справедливо, если поле, в котором находится электрон, статическое, и оно медленно меняется в пространстве по сравнению с характерным масштабом корреляции электронного газа  $\sim 1/k_F$ .

Для нахождения диэлектрической проницаемости необходимо связать индуцированную и полную плотности заряда. Находим изменение плотности заряда, индуцированное внешним полем:

$$\begin{aligned} \rho_{ind} &= n(e\phi) - n(0) = \\ &= \sum_{k\sigma} \left\{ \frac{1}{1 + \exp[\beta(\varepsilon_k - e\phi - \mu)]} - \frac{1}{1 + \exp[\beta(\varepsilon_k - \mu)]} \right\} \approx \\ \phi \rightarrow 0 &\approx \sum_{k\sigma} -e\phi \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = e\phi \sum_{k\sigma} \delta(\varepsilon - E_F) \Big|_{T \ll E_F} = e\phi N(E_F). \end{aligned}$$

Рассмотрим уравнение Пуассона

$$\nabla^2 \phi = 4\pi e \rho_{tot}.$$

Переходя к фурье-компонентам, находим окончательное выражение для статической диэлектрической проницаемости электронного газа:

$$\varepsilon(q) = 1 + k_D^2 / q^2, \quad k_D^2 = 4\pi e^2 N(E_F).$$

Здесь  $k_D$  - импульс Томаса-Ферми. Обратная ей величина  $r_D=1/k_D$  - радиус экранирования Дебая. Можно рассчитать пространственную зависимость кулоновского потенциала в металле, учитывая его статическую диэлектрическую проницаемость и получить выражение для экранированного кулоновского взаимодействия:

$$4\pi e^2 / q^2 \varepsilon(q, \omega) \Rightarrow e^2 \exp[-k_D r] / r$$

Полагая ионы классическими, выпишем уравнение непрерывности, уравнение Максвелла для электрического поля, уравнение для импульса и связь тока и импульса:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \vec{j} + \partial \rho_{ind} / \partial t &= 0; \\ \operatorname{div} \vec{E} &= 4\pi \rho_{tot}; \\ dP/dt &= Ze \vec{E}_0 \exp[-i\omega t]; \\ \vec{j} &= Zen_i P/M. \end{aligned}$$

Здесь  $\rho_{ind}$  и  $\rho_{tot}$  - индуцированная и полная плотности заряда.

Фурье-представление имеет вид:

$$\begin{aligned} i \vec{q} \vec{j}(q, \omega) - i\omega \rho_{ind}(q, \omega) &= 0; \\ i \vec{q} \vec{E}_0 &= 4\pi \rho_{tot}(q, \omega); \\ -i\omega \vec{P}(q, \omega) &= Ze \vec{E}_0; \\ \vec{j}(q, \omega) &= Zen_i \vec{P}(q, \omega) / M. \end{aligned}$$

Продольная диэлектрическая проницаемость выражается через фурье-компоненты индуцированной и полной плотности заряда:

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - \rho_{ind}(q, \omega) / \rho_{tot}(q, \omega).$$

Для нахождения диэлектрической проницаемости умножим два последних соотношения в выражении скалярно на импульс  $\vec{q}$ :

$$\begin{aligned} i \vec{q} \vec{j}(q, \omega) - i\omega \rho_{ind}(q, \omega) &= 0; \\ i \vec{q} \vec{E}_0 &= 4\pi \rho_{tot}(q, \omega); \\ -i\omega \vec{q} \vec{P}(q, \omega) &= Ze \vec{q} \vec{E}_0; \\ \vec{q} \vec{j}(q, \omega) &= Zen_i \vec{q} \vec{P}(q, \omega) / M. \end{aligned}$$

Получаем соотношения для диэлектрической проницаемости.

$$\varepsilon(q, \omega) = 1 - \rho_{ind}(q, \omega) / \rho_{tot}(q, \omega).$$

$$\varepsilon_i(\omega) = 1 - \frac{\omega_{ip}^2}{\omega^2}.$$

Здесь величина  $\omega_{ip}$  - плазменная ионная частота :

$$\omega_{ip}^2 = 4\pi n_i Z^2 e^2 / M.$$

Получим полную диэлектрическую проницаемость системы электронов и ионов в модели желе. Определим фурье-компоненту кулоновского взаимодействия электронов и сравним с результатом расчета матричного элемента электрон-фононного взаимодействия с помощью квантовомеханического описания.

Сложим индуцированные заряды, полученные в расчете для фононов и электронов, выраженные через полный заряд. В итоге для «кулоновского» взаимодействия находим

$$\begin{aligned} V_{kk'} = V_q &= 4\pi e^2 / q^2 \varepsilon(q, \omega) = \\ &= 4\pi e^2 / (q^2 + k_D^2) (1 + \omega_q^2 / [\omega^2 - \omega_q^2]); \\ \omega_q^2 &= \omega_{ip}^2 q^2 / (q^2 + k_D^2) \approx \omega_{ip}^2 q^2 / k_D^2 \end{aligned}$$

Первое слагаемое в  $V_q$  - экранированное кулоновское отталкивание, второе - электрон-фононное, отвечающее притяжению при  $|\omega| = |\xi_k - \xi_{k'}| < \omega_q \sim \omega_D$ .

Численные коэффициенты теперь найдены в явном виде. Первый член представляет собой прямое экранированное кулоновское отталкивание, а второй — взаимодействие, обусловленное фононами, отвечающее притяжению для  $\omega < \omega_q$ .

Средняя частота фонона  $\omega \sim \omega_D$  ( $\omega_D$  — дебаевская частота материала). Поэтому средний интервал энергий, в котором имеется притяжение, составляет по порядку 0.03 эВ  $\sim$  300 К. Отметим, что частота  $\omega_q$  (или  $\omega_D$ ) зависит от массы ионов  $M$ . ( $\omega_q \sim M^{-1/2}$ ). Поэтому два изотопа одного и того же сверхпроводника имеют разные ширины областей притяжения и их температуры перехода несколько отличаются. Этот изотопический эффект был впервые предсказан Фрелихом и вскоре обнаружен экспериментально Максвеллом и Рейнольдсом и др. Существование изотопического эффекта указывает на то, что колебания решетки вносят важный вклад в электрон-электронное взаимодействие.

## 10 неделя. Куперовские пары. Задача Купера

Как известно, основное состояние свободного газа электронов соответствует заполнению всех одноэлектронных уровней энергии  $\hbar^2 k^2 / 2m$  ( $k$  - волновой вектор) вплоть до некоторой энергии  $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$  - энергии Ферми. Однако такое состояние является неустойчивым при наличии сколь угодно слабого притяжения между частицами, как было показано Купером. Происхождение неустойчивости можно понять, изучая поведение двух выделенных электронов (с координатами  $r_1$  и  $r_2$ ) в присутствии остальных электронов, рассматриваемых по-прежнему как свободный электронный газ. Роль этого электронного газа сводится к тому, что в соответствии с принципом Паули выделенные электроны не могут занимать состояния с  $k < k_F$ . Введем волновую функцию двух электронов  $\Psi(r_1, r_2)$  и будем рассматривать только такие состояния, для которых центр инерции пары  $(r_1, r_2)$  покоится. Тогда функция  $\Psi$  зависит лишь от разности  $r_1 - r_2$ ; разлагая ее в ряд по плоским волнам, получаем

$$\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)},$$

где  $g(\mathbf{k})$  — амплитуда вероятности обнаружить один из электронов в состоянии с импульсом  $\mathbf{k}$ , а другой в состоянии  $-\mathbf{k}$ . Поскольку все состояния с  $k < k_F$  уже заняты, то, согласно принципу Паули,  $g(\mathbf{k}) = 0$  для  $k < k_F$ .

Уравнение Шредингера для рассматриваемых двух электронов имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \Psi = \left( E + \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} \right) \Psi.$$

Здесь  $E$  — энергия пары, отсчитываемая от состояния, в котором оба электрона находятся на уровне Ферми. Получим уравнение для  $g(\mathbf{k})$ :

$$\frac{\hbar^2}{m} k^2 g(\mathbf{k}) + \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') = (E + 2E_F) g(\mathbf{k}),$$

где

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \frac{1}{L^3} \int V(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

- матричный элемент взаимодействия между состояниями  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ , а  $L^3$  — объем системы. Уравнение совместно с принципом Паули иногда называют уравнением Бете — Голдстоуна для задачи двух электронов. При  $E > 2E_F$  оно имеет непрерывный спектр и описывает процесс рассеяния двух электронов из начального состояния  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$  в конечное  $(\mathbf{k}', -\mathbf{k}')$  (с той же энергией). Однако если взаимодействие  $V$  отвечает притяжению, то возможны также решения, соответствующие некоторым связанным состояниям с энергиями  $E < 2E_F$ . Чтобы убедиться в этом, рассмотрим упрощенное взаимодействие вида

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = -\frac{V}{L^3}, \text{ если } \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < E_F + \hbar\omega_D,$$

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = 0 \text{ в противном случае.}$$

Это взаимодействие соответствует притяжению и постоянно по величине в области энергий шириной  $\hbar\omega_D$ , расположенной выше уровня Ферми. Это так называемое приближение БКШ для точного взаимодействия. В общем случае полоса  $\hbar\omega_D$ , расположенная ниже уровня Ферми, также должна быть включена, но в задаче Купера остальные электроны за счет принципа Паули не пускают два выделенных электрона ниже энергии Ферми.

Тогда уравнение принимает вид

$$\left(-\frac{\hbar^2 k^2}{m} + E + 2E_F\right) g(\mathbf{k}) = C,$$

где правая часть  $C$  не зависит от  $k$ ;

$$C = -\frac{V}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}'),$$

$$E_F < \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < E_F + \hbar\omega_D.$$

Находим условие самосогласованности:

$$1 = \frac{V}{L^3} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{-E + \frac{\hbar^2 k'^2}{m} - 2E_F},$$

$$E_F < \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < E_F + \hbar\omega_D.$$

Если положить  $\xi' = \hbar^2 k'^2 / 2m - E_F$  и ввести (односпиновую) плотность числа состояний в единичном интервале энергий

$$N(\xi') = [4\pi k'^2 / (2\pi)^3] dk' / d\xi' = m \sqrt{2m(\xi' + E_F)} / 2\pi^2 \hbar^3$$

то условие примет вид

$$1 = V \int_0^{\hbar\omega_D} N(\xi') \frac{d\xi'}{2\xi' - E}.$$

Если предположить, кроме того, что  $\hbar\omega_D \ll E_F$ , то величину  $N(\xi)$  можно рассматривать как постоянную и заменить ее значением  $N(0)$  на уровне Ферми. Взяв интеграл, получим

$$1 = \frac{1}{2} N(0) V \ln \frac{E - 2\hbar\omega_D}{E},$$

или, в пределе слабого взаимодействия  $N(0)V \ll 1$ ,

$$E = -2\hbar\omega_D e^{-2/N(0)V}.$$

Таким образом, в рассмотренном случае существует связанное состояние двух электронов с энергией  $E < 0$ . Если мы имеем сначала свободный электронный газ, а затем включаем взаимодействие  $V$ , то можно ожидать, что электроны будут группироваться в пары,

отдавая энергию внешней среде. Следовательно, нормальное состояние является неустойчивым относительно куперовского спаривания.

Величина  $\lambda = N(0)V$  - константа электрон-фононного взаимодействия, играет роль важного параметра теории, и в обычных сверхпроводниках она много меньше единицы.

Несколько важных замечаний относительно решения задачи Купера.

1. Энергия связи пропорциональна  $\exp(-2/\lambda)$ . Очевидно, такую зависимость нельзя разложить в ряд по степеням константы взаимодействия  $\lambda$  при  $\lambda \rightarrow 0$ . Эта алгебраическая трудность явилась значительной помехой для развития теории сверхсверхпроводимости.

2. Неустойчивость сохраняется даже в том случае, когда взаимодействие  $V$  является весьма слабым, при условии, что оно отвечает притяжению. В этом состоит существенное отличие найденного результата от обычной задачи двух тел. Если мы имеем всего две частицы, потенциал взаимодействия (притяжения) которых характеризуется конечным радиусом действия, то они образуют связанное состояние только в том случае, если величина притяжения превышает некоторое пороговое значение. В данном случае задача двух тел «разыгрывается» в узкой корочке у поверхности Ферми ( $E_F < \epsilon < \hbar\omega_D + E_F$ ), что приводит к эффективной двумерной квантовой задаче на собственные значения, обязательно имеющей связанный уровень. В трехмерном случае обязательно имелся-бы порог по взаимодействию. Качественно поясним это.

Для задачи двух тел (положим  $k_F=0$ ) плотность состояний  $N(\xi)$  при  $\xi \rightarrow 0$  изменяется по закону  $\xi^{1/2}$ , и выражение

$$f(E) = V \int N(\xi) \frac{d\xi}{2\xi - E}$$

остаётся конечным даже для  $E < 0$ . Поэтому, если величина  $V$  мала, то  $f(E) < f(0) < 1$  для  $E < 0$ , и условие  $f(E) = 1$  не будет выполняться в области связанных состояний. Напротив, в нашей задаче  $N(\xi) = \text{const}$ ,  $f(0) = \infty$ , следовательно, всегда найдется значение  $E < 0$ , такое, что  $f(E) = 1$ .

Если рассчитать энергию связанного состояния куперовской пары при нулевой энергии Ферми, пользуясь формально уравнением Купера, то получим следующее соотношение

$$1 / VN(\theta) = 1 - \text{arctg}(x) / x; \quad x = \sqrt{2\hbar\omega_D / |E|};$$

$$N(\theta) = m^{3/2} \sqrt{2\hbar\omega_D} / 2\pi^2 \hbar^3$$

Проанализировав графически, определим область ненулевых решений

$$0 < 1 - 1 / VN(\theta) < 1,$$

и находим, что есть порог по взаимодействию, т.е. параметр взаимодействия должен подчиняться следующему соотношению

$$VN(\theta) > 1.$$

Отсутствие порога по взаимодействию подтверждается сопоставлением с задачей о двумерной потенциальной яме.

Найдем энергию связанного состояния в мелкой двумерной потенциальной яме и сравним с энергией связи электронов в куперовской паре. Энергия связанного состояния подчиняется следующему трансцендентному уравнению:

$$kJ_0(\chi a)K_0'(ka) = \chi J_0'(\chi a)K_0(ka); \quad k = \sqrt{-2mE / \hbar^2};$$

$$\chi = \sqrt{k^2 + 2mU_0 / \hbar^2}.$$

Здесь -  $K_0, J_0$  - функции Бесселя,  $U_0$  - глубина потенциальной ямы,  $a$  - радиус ямы. В случае мелкой ямы ( $ka \ll 1, \chi a \ll 1$ ) имеем:

$$E = -2\hbar^2 / ma^2 \exp[-1 / (S\lambda)]; \quad S = 2\pi a^2; \quad \lambda = U_0 N_0;$$

где  $N_0 = m / 2\pi\hbar^2$  - двумерная плотность состояний.

Видно, что выражение для энергии связанного состояния похоже на результат решения задачи Купера. Отсутствует порог по глубине потенциальной ямы, т.е. связанный уровень всегда имеет место. Величина  $S\lambda$  здесь играет роль константы взаимодействия.

Уменьшение энергии связи при пропускании тока через сверхпроводник продемонстрируем следующим расчетом. Найдем энергию связанного состояния куперовской пары с неравным нулю полным импульсом  $K$ .

Учтем, что при ненулевом импульсе в уравнении для энергии пары в качестве  $k, k'$  фигурируют вектора  $k+K/2, k-K/2$ . Это касается не только подинтегрального выражения, но и пределов интегрирования. Так, если полагать импульс  $K$  малым, интеграл набирающимся вблизи  $k_F$ , удобно перейти к переменным:  $\bar{q} = \bar{k} - \bar{k}_F; \cos \theta = \hat{q}\hat{K}$ ;

тогда имеем следующее уравнение для энергии пары:

$$1 / V = k_F^2 / 4\pi^2 \int dqd \cos \theta \{1 / [\hbar^2 K^2 / 4m - E + 2k_F q \hbar^2 / m]\};$$

$$\int \Rightarrow 0 \leq 2k_F q \pm k_F K \cos \theta \leq 2m\omega_D / \hbar$$

Учитывая, что  $m\omega_D / \hbar \gg k_F K, mE / \hbar^2 \gg Kk_F$ , получаем уравнение на энергию связи:

$$1 = (VN(0) / 2) \{ \ln[2\omega_D / |E| + 1] - \hbar^2 Kk_F / m|E| \}$$

В линейном по  $K$  приближении имеем:  $|E| = |E_0| - \hbar^2 Kk_F / m$ ; где  $E_0 = -2\omega_D \exp[-2 / VN(0)]$  - энергия связи пары в отсутствие тока. Отсюда можно оценить критический ток пары.

Другой фактор, который может привести к ослаблению энергии связи куперовской пары – прямое кулоновское отталкивание. Найдем энергию связи куперовской пары, учитывая

наряду с электрон-фононным притяжением экранированное кулоновское отталкивание электронов.

Выпишем уравнение для фурье-компоненты волновой функции пары в этом случае:

$$2\xi_k g(k) + \sum_{k'} [V_{kk'} + V_{kk'}^C] g(k') = E g(k);$$

$$V_{kk'} = \begin{cases} -V, & 0 \leq \xi_k, \xi_{k'} \leq \hbar\omega_D; \\ 0, & \text{otherwise;} \end{cases} \quad V_{kk'}^C = \begin{cases} V^C, & 0 \leq \xi_k, \xi_{k'} \leq \hbar\omega_p; \\ 0, & \text{otherwise;} \end{cases}$$

Здесь  $\omega_p$  - плазменная частота. Введем следующие обозначения:

$$\Sigma_1 = \sum_k' 1/[2\xi_k + |E|]; \quad \Sigma_2 = \sum_k'' 1/[2\xi_k + |E|];$$

$$C_1 = \sum_k' g(k); \quad C_2 = \sum_k'' g(k);$$

Здесь  $\Sigma'$ ,  $\Sigma''$  - суммирование по области электрон-фононного взаимодействия и по области кулоновского отталкивания, соответственно. Интегрируя исходное уравнение по первой и по второй областям, получает уравнения на  $C_1$ ,  $C_2$ :

$$C_1 = VC_1\Sigma_1 - V^C C_2\Sigma_1;$$

$$C_2 = VC_1\Sigma_1 - V^C C_2\Sigma_2$$

Ища нетривиальное решение, и полагая дебаевскую и плазменную энергии много больше искомой энергии связи, получаем:

$$|E| = 2\hbar\omega_D \exp(-2/\lambda_{eff});$$

$$\lambda_{eff} = N(0)[V - V^C / \{1 + (V^C N(0) / 2) \ln(\omega_p / \omega_D)\}].$$

Таким образом, кулоновское отталкивание уменьшает константу электрон-фононного взаимодействия, но не приводит к порогу по взаимодействию.

Вычислим средний квадрат радиуса  $\rho$  куперовской пары. По определению,

$$\rho^2 = \frac{\int |\Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)|^2 R^2 d\mathbf{R}}{\int |\Psi|^2 d\mathbf{R}}, \quad \mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

$$\rho^2 = \frac{\sum_{\mathbf{k}} |\nabla_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k})|^2}{\sum_{\mathbf{k}} |g(\mathbf{k})|^2} \approx \frac{N(0) (\partial \xi / \partial k)_{\xi=0}^2 \int_0^\infty (dg/d\xi)^2 d\xi}{N(0) \int_0^\infty g^2 d\xi}.$$

В приближении  $g=C/(2\xi+|E|)$ . Кроме того,  $(dk/d\xi)_{\xi=0} = 1/\hbar v_F$ , где  $v_F$  — фермиевская скорость. Выполняя интегрирование, находим

$$\rho \equiv \xi_0 = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar v_F}{|E|}$$

Для типичного металла размер пары  $\xi_0 \sim 10^{-4}$  см.

Используем выражение для среднего расстояния между электронами в куперовской паре и определим число электронов  $N_p$ , находящихся в объеме, занимаемом одной куперовской парой.

Для корректной оценки следует для плотности пар использовать выводимое позже в рамках БКШ соотношение  $n_s = \pi N(0) \Delta / 4$ , а также вместо  $|E|$  везде использовать  $\Delta$ . Ответ:  $N_p = (16/9\sqrt{3})(E_F / \Delta)^2$ .

Число пар в объеме одной пары – огромно,  $\sim 10^7$ - $10^{11}$ , что говорит об основном состоянии сверхпроводника как конгломерата пар, «вдвинутых» друг в друга, т.е. как о сильно коррелированной системе.

Согласно соображениям Купера, нормальное основное состояние газа свободных электронов оказывается неустойчивым при наличии притяжения между частицами. Конечно, эти соображения носят лишь предположительный характер; в частности, в них не учитывается возможность рассеяния электронов, расположенных над фермиевской поверхностью, на электронах внутри нее. Теперь более детально остановимся на расчете структуры конденсированного состояния, рассматривая все электроны как равноправные. В задаче Купера мы описывали пару электронов с помощью волновой функции  $\Psi(r_1, r_2)$ . Чтобы рассмотреть все  $N$  электронов на равных основаниях, естественно попытаться написать волновую функцию в следующем более общем виде:

$$\Phi_N(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \varphi(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_4) \dots \varphi(\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N).$$

В состоянии, описываемом функцией  $\varphi_N$ , электроны сгруппированы попарно; при этом волновая функция любой пары равна  $\varphi$ . Вид этой функции мы можем определить, отыскав минимум энергии в состоянии  $\varphi_N$ . Заметим, что а) Функцию  $\varphi_N$ , можно построить лишь для четного числа электронов. Для нечетного числа  $N$  понадобилось бы поместить последний электрон в отдельное состояние. Для электронного газа ( $N \sim 10^{22}$ ) наличие этого электрона привело бы к совершенно несущественным поправкам порядка  $1/N$  для энергии в расчете на одну частицу и для других свойств конденсированного состояния. б) В определении функции  $\varphi_N$ , мы не учли спиновых индексов. Будем считать направления спинов электронов пары противоположными, т. е. рассматривать состояния ( $\uparrow\downarrow$ ). Такой выбор функции  $\varphi_N$ , является наиболее подходящим для взаимодействия  $V_{kk'}$ , слабо зависящего от угла между  $k$  и  $k'$ . в) Функция  $\varphi_N$ , должна быть антисимметричной. Это свойство мы будем записывать с помощью оператора антисимметрии  $A$ :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}};$$

$$\Phi_N = A\varphi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \dots \varphi(\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N) (1\uparrow)(2\downarrow)\dots(N-1\uparrow)(N\downarrow).$$

Хотя формула представляет собой явное выражение для  $\varphi_N$ , при конкретных расчетах ее применение приводит к значительным трудностям. Для дальнейшего удобно ввести фурье-компоненту  $g_{\mathbf{k}}$  функции пары  $\varphi(\mathbf{r})$ :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}};$$

тогда

$$\varphi_N = \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_{N/2}} g_{\mathbf{k}_1} \dots g_{\mathbf{k}_{N/2}} \times \\ \times A e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \dots e^{i\mathbf{k}_{N/2} \cdot (\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N)} (1 \uparrow) (2 \downarrow) \dots (N \downarrow).$$

Функция

$$A \exp [i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)] \dots \exp [i\mathbf{k}_{N/2} \cdot (\mathbf{r}_{N-1} - \mathbf{r}_N)] (1 \uparrow) (2 \downarrow) \dots (N \downarrow)$$

имеет простой физический смысл. Она описывает состояние, в котором один из электронов находится в состоянии  $(\mathbf{k}_1 \uparrow)$ , другой — в состоянии  $(-\mathbf{k}_1 \downarrow)$ , третий — в состоянии  $(\mathbf{k}_2 \uparrow)$  и т. д. Наличие оператора  $A$  обеспечивает должную антисимметрию волновой функции. Эта антисимметричная функция носит название детерминанта Слейтера, образованного из состояний

$$(\mathbf{k}_1 \uparrow) (-\mathbf{k}_1 \downarrow) (\mathbf{k}_2 \uparrow) (-\mathbf{k}_2 \downarrow) \dots (\mathbf{k}_{N/2} \uparrow) (-\mathbf{k}_{N/2} \downarrow).$$

Сейчас удобно ввести представление чисел заполнения и операторы рождения и уничтожения. Оператор рождения  $a_{k\alpha}^+$ , действуя на вакуумное состояние  $\varphi_0$ , создает электрон в состоянии  $(k\alpha)$ . Оператор уничтожения  $a_{k\alpha}$ , сопряженный оператору  $a_{k\alpha}^+$ , соответственно обладает свойством  $a_{k\alpha} \varphi_0 = 0$ .

Соответственно детерминант Слейтера можно представить как

$$a_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}_1 \downarrow}^+ \dots a_{\mathbf{k}_{N/2} \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}_{N/2} \downarrow}^+ \varphi_0.$$

Операторы  $a_{k\alpha}$  и  $a_{k\alpha}^+$  подчиняются следующим соотношениям антикоммутиации:

$$a_{k\alpha}^+ a_{l\beta}^+ + a_{l\beta}^+ a_{k\alpha}^+ = 0; \\ a_{k\alpha}^+ a_{l\beta} + a_{l\beta} a_{k\alpha}^+ = \delta_{kl} \delta_{\alpha\beta} \\ a_{k\alpha} a_{l\beta} + a_{l\beta} a_{k\alpha} = 0$$

В этих обозначениях функция  $\varphi_N$ , принимает вид

$$\varphi_N = \sum_{\mathbf{k}_1} \dots \sum_{\mathbf{k}_{N/2}} g_{\mathbf{k}_1} \dots g_{\mathbf{k}_{N/2}} a_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}_1 \downarrow}^+ \dots a_{\mathbf{k}_{N/2} \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}_{N/2} \downarrow}^+ \varphi_0.$$

Выражение по-прежнему не вполне удобно для вычислений. Рассмотрим вместо  $\varphi_N$ , производящую функцию

$$\tilde{\varphi} = C \prod_{\mathbf{k}} (1 + g_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k} \uparrow}^+ a_{-\mathbf{k} \downarrow}^+) \varphi_0,$$

где произведение берется по всем плоским волнам, а  $C$  — нормировочная постоянная. Легко видеть, что с точностью до множителя  $C$  функция  $\varphi_N$ , представляет собой часть функции  $\tilde{\varphi}$ , содержащую  $N$  операторов рождения (действующих на  $\varphi_0$ ), т. е. компоненту

$\tilde{\varphi}$ , которая описывает N-частичное состояние. Запишем выражение для  $\varphi_N$  в несколько ином виде, введя множитель C под знак произведения:

$$\tilde{\varphi} = \prod_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+) \varphi_0,$$

где

$$u_{\mathbf{k}} / v_{\mathbf{k}} = g_{\mathbf{k}}, \quad u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$$

Последнее условие обеспечивает нормировку  $\tilde{\varphi}$ . Предполагаем (в отсутствии внешнего тока), что  $g_{\mathbf{k}}$ ,  $u_{\mathbf{k}}$  и  $v_{\mathbf{k}}$  являются вещественными функциями. Функция  $\tilde{\varphi}$ , которая была введена Бардином, Купером и Шриффером в 1957 г., имеет значительно более простую структуру, чем  $\varphi_N$ . Оказывается, что для больших значений N все расчеты можно выполнять, используя функцию  $\tilde{\varphi}$ , а не  $\varphi_N$ .

Амплитуда вероятности нахождения системы в состоянии с заданным числом частиц N имеет при  $N=N^*$  очень узкий пик, т.е. зависимость от числа частиц имеет острый максимум, положение которого можно найти, вычислив среднее значение числа частиц в рассматриваемом состоянии

$$N^* = \langle N \rangle = \sum_{\mathbf{k}} 2v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} 2v_{\mathbf{k}}^2,$$

где  $\Omega$  — объем образца. Подобно этому, можно вычислить среднеквадратичное отклонение для распределения по числу частиц. Находим:

$$\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 = \sum_{\mathbf{k}} 4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int 4u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 d\mathbf{k}.$$

Поскольку разность  $\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2$  пропорциональна объему  $\Omega$ , а следовательно, и  $N^*$ , то полуширина кривой составляет примерно  $\sqrt{N^*}$ . Таким образом, относительные флуктуации числа частиц N очень малы, порядка  $1/\sqrt{N}$ .

Следовательно, использование функций  $\tilde{\varphi}$  и  $\varphi_N$  приводит на практике к одинаковым результатам.

Пусть  $H$  — гамильтониан системы взаимодействующих электронов.

Число частиц не фиксировано в волновой функции БКШ, поэтому мы должны минимизировать выражение

$$\langle \tilde{\varphi} | \mathcal{E} | \tilde{\varphi} \rangle - E_F \langle \tilde{\varphi} | N | \tilde{\varphi} \rangle,$$

где N — оператор числа частиц, а  $E_F$  — лагранжев множитель, энергия Ферми. Перечислим теперь члены, дающие вклад в  $H - E_F N$ . Член, соответствующий кинетической энергии, равен

$$\mathcal{E}_0 = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\alpha}^+ a_{\mathbf{k}\alpha},$$

Эдесь учтено, что  $\xi_k$  есть энергия, отсчитанная от энергии Ферми.

Член, соответствующий потенциальной энергии  $H_{вз}$ , содержит матричные элементы, описывающие рассеяние двух электронов:

$$\begin{aligned} & (k\alpha)(k'\beta) \rightarrow (k+q, \alpha)(k'-q, \beta), \\ \mathcal{H}_{вз} = & \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} \sum_{\substack{k, k', q \\ \alpha, \beta}} V(k+q, k'-q; k, k') a_{k+q, \alpha}^+ a_{k'-q, \beta}^+ a_{k, \alpha} a_{k', \beta}. \end{aligned}$$

Вероятность того, что в состоянии с волновой функцией  $\tilde{\varphi}$  состояние  $k$  окажется занятым, равна  $v_k^2$ . Поэтому кинетическая энергия имеет вид

$$\langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H}_0 | \tilde{\varphi} \rangle = 2 \sum_{k\alpha} \xi_k v_k^2.$$

В  $H_{вз}$  дают вклад следующие члены: 1. Диагональные члены  $V(k, k'; k, k')$ ; 2. Обменные члены  $V(k, k'; k', k)$ ; 3. Члены  $V(l, -l; k, -k) = V_{kl}$ , описывающие переход пары из состояния  $(k \uparrow, -k \downarrow)$  в состояние  $(l \uparrow, -l \downarrow)$ .

Члены 1 и 2 дают вклад в  $H_{вз}$  в нормальном металле, а именно, 1 соответствует прямому кулоновскому взаимодействию ( $\sim 1-10$  эВ), а 2 – антиферромагнитным флуктуациям ( $\sim 0.1$  эВ). Их можно просто включить в отсчет энергии, т.к. нас интересует гораздо меньший, сверхпроводящий диапазон энергий,  $\sim 0.001$  эВ, т.е. интересующий нас вклад дают члены типа 3. Их можно представить как

$$\begin{aligned} H_{вз} &= \sum_{kl} V_{kl} b_k^+ b_l \\ b_k^+ &= a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+; b_k = a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow} \end{aligned}$$

Здесь операторы  $b_k^+, b_k$  – операторы рождения и уничтожения куперовской пары, соответственно.

Для нахождения этого вклада разложим сначала волновую функцию  $\tilde{\varphi}$  на два слагаемых  $\varphi_{k1}$  и  $\varphi_{k0}$ , в которых парное состояние  $(k \uparrow, -k \downarrow)$  соответственно заведомо занято или не занято:

$$\tilde{\varphi} = u_k \varphi_{k0} + v_k \varphi_{k1}.$$

Подобно этому мы можем разложить  $\tilde{\varphi}$  на четыре компоненты, описывающие заполнение двух различных парных состояний  $(k \uparrow, -k \downarrow)$  и  $(l \uparrow, -l \downarrow)$ :

$$\tilde{\varphi} = v_k v_l \varphi_{k1, l1} + u_l v_k \varphi_{k1, l0} + u_k v_l \varphi_{k0, l1} + u_k u_l \varphi_{k0, l0}.$$

При вычислении вклада  $V_{kl}$  в энергию взаимодействия мы должны использовать компоненты

$$u_l v_k \langle \varphi_{k1, l0} | \mathcal{H}_{вз} | \varphi_{k0, l1} \rangle u_k v_l.$$

Матричный элемент, входящий в это выражение, равен просто  $V_{kl}$ . Таким образом,

$$\langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H} - E_F N | \tilde{\varphi} \rangle = 2 \sum_k \xi_k v_k^2 + \sum_{k,l} V_{kl} u_k v_k u_l v_l.$$

Для учета условия  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  при нахождении минимума выражения  $\langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H} - E_F N | \tilde{\varphi} \rangle$  удобно положить

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

и свести задачу к нахождению минимума по одной переменной. Тогда

$$\langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H} - E_F N | \tilde{\varphi} \rangle = 2 \sum_k \xi_k \cos^2 \theta_k + \frac{1}{4} \sum_{k,l} \sin 2\theta_k \sin 2\theta_l V_{kl}.$$

Минимизация дает

$$0 = \frac{\partial}{\partial \theta_k} \langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H} - E_F N | \tilde{\varphi} \rangle = -2 \sum_k \xi_k \sin 2\theta_k + \sum_{k,l} \cos 2\theta_k \sin 2\theta_l V_{kl},$$

или

$$\xi_k \operatorname{tg} 2\theta_k = \frac{1}{2} \sum_l V_{kl} \sin 2\theta_l.$$

Определим

$$\Delta_k = - \sum_l V_{kl} u_l v_l,$$

$$\varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_k^2}.$$

Тогда

$$\operatorname{tg} 2\theta_k = - \frac{\Delta_k}{\xi_k},$$

$$2u_k v_k = \sin 2\theta_k = \frac{\Delta_k}{\varepsilon_k},$$

$$-u_k^2 + v_k^2 = \cos 2\theta_k = - \frac{\xi_k}{\varepsilon_k}.$$

Знак в последнем уравнении выбран таким образом, что для больших положительных значений  $\xi_k$  имеем  $u_k=1, v_k=0$ ; тогда сумма  $\sum_k 2v_k^2$ , дающая полное число электронов, сходится. Получаем уравнение для  $\Delta_k$

$$\Delta_k = - \sum_l V_{kl} \frac{\Delta_l}{2(\xi_l^2 + \Delta_l^2)^{1/2}}.$$

Заметим, что это уравнение всегда имеет тривиальное решение  $\Delta_k = 0$ , отвечающее выбору

$$v_k = \begin{cases} 1 & \text{для } \xi_k < 0, \\ 0 & \text{для } \xi_k > 0. \end{cases}$$

Соответствующая функция равна просто

$$\tilde{\varphi}_n = \prod_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_F} a_{\mathbf{k}}^+ a_{-\mathbf{k}}^+ \varphi_0.$$

Это волновая функция газа невзаимодействующих электронов. Она представляет собой набор из всех состояний с энергиями, меньшими  $E_F$ .

В общем случае решение для когерентных факторов  $u, v$  следующее

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_k}{\epsilon_k} \right);$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_k}{\epsilon_k} \right).$$

Знаки выбраны в соответствии с предельным случаем  $\Delta = 0$ .

Чтобы показать в явном виде, что могут быть также другие решения, используем упрощенное взаимодействие вида

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{l}} = \begin{cases} -V, & \text{если } |\xi_{\mathbf{k}}|, |\xi_{\mathbf{l}}| \leq \hbar\omega_D, \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Постоянная  $V$  считается положительной. Взаимодействие такого простого вида называют взаимодействием БКШ. В данном случае, в отличие от задачи Купера, взаимодействие имеет место в полосе над и под энергией Ферми. Для этого случая легко показать, что решение имеет вид

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \begin{cases} 0 & \text{для } |\xi_{\mathbf{k}}| > \hbar\omega_D, \\ \Delta & \text{для } |\xi_{\mathbf{k}}| \leq \hbar\omega_D, \end{cases}$$

причем величина  $\Delta$  не зависит от  $\mathbf{k}$ . Задача состоит в вычислении  $\Delta$ .

Перепишем уравнение, просуммировав по всем направлениям  $l$  при фиксированном значении  $\xi_l$ . Это приводит к множителю  $N(\xi_l)$ , равному плотности состояний (по энергии) для данной ориентации спина в нормальном состоянии (односпиновая плотность состояний). Поскольку нас интересуют энергии, заключенные в интервале шириной  $\hbar\omega_D \ll E_F$ , мы можем вместо функции  $N(\xi_l)$  подставить ее значение  $N(0)$  на уровне Ферми:

$$\Delta = N(0)V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \Delta \frac{d\xi}{2\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}},$$

$$\frac{1}{N(0)V} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\Delta^2 + \xi^2}} = \ln \frac{\hbar\omega_D + \sqrt{(\hbar\omega_D)^2 + \Delta^2}}{\Delta}.$$

Решение этого уравнения существует лишь при положительных значениях  $V$  (т. е. лишь в случае притяжения) и имеет вид

$$\Delta = \frac{\hbar \omega_D}{sh[1/N(0)V]}$$

В дальнейшем мы будем интересоваться исключительно пределом слабой связи ( $\lambda = N(0)V \ll 1$ ), в котором

$$\Delta = 2\hbar \omega_D \exp[-1/\lambda]$$

Для большинства сверхпроводящих металлов  $\theta_D \sim 300^\circ\text{K}$ ,  $T_c \sim 10\text{K}$ . Следовательно, можно заключить, что константа электрон-фононного взаимодействия  $\lambda < 0.3$ .

Зная  $\Delta$ , можно явно вычислить кинетическую и потенциальную энергии. В пределе слабой связи получаем

$$\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H}_0 | \tilde{\Psi} \rangle = 2 \sum_{\mathbf{k} < \mathbf{k}_F} \xi_{\mathbf{k}} + \frac{\Delta^2}{V} - \frac{N(0)\Delta^2}{2}.$$

Здесь первый член равен кинетической энергии электронов в нормальном состоянии ( $\Delta = 0$ ). Тем же путем находим

$$\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H}_{\text{вс}} | \tilde{\Psi} \rangle = -\frac{\Delta^2}{V}.$$

Разность энергий для сверхпроводящего состояния и нормального состояния равна

$$\langle \tilde{\Psi} | \mathcal{H} | \tilde{\Psi} \rangle - \langle \tilde{\Psi}_n | \mathcal{H} | \tilde{\Psi}_n \rangle_{(\Delta=0)} = -\frac{N(0)\Delta^2}{2},$$

т. е. энергия конденсированного состояния  $\tilde{\Psi} \equiv \varphi_s$  ниже, чем нормального.

Этот выигрыш оказывается чрезвычайно малым, порядка  $\Delta^2 / E_F$  на одну частицу, однако он существенен для макроскопической системы, так что металл при низкой температуре обязательно переходит в сверхпроводящее состояние.

Распределение по импульсам электронов в основном состоянии БКШ:  $n_{\mathbf{k}} = \langle a_{\mathbf{k}\uparrow}^+ a_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = |v_{\mathbf{k}}|^2$ .

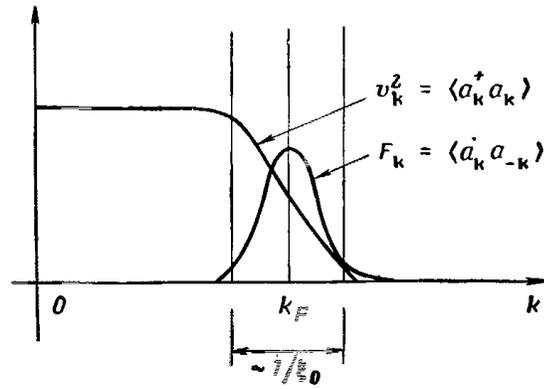
Соотношения коммутации (или антикоммутации) для операторов рождения и уничтожения куперовской пары:  $[b_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}'}^+] = [1 - n_{\mathbf{k}\uparrow} - n_{-\mathbf{k}\downarrow}] \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ .

Отсюда видно, что куперовские пары – бозоны при не совпадающих квантовых числах.

Рассчитаем также число куперовских пар в единице объема  $n_s$ . Будем полагать, что справедливо бозевское соотношение для числа пар:  $b_{\mathbf{k}}^+ | \varphi_s \rangle = \sqrt{N_{\mathbf{k}}} | \varphi_s \rangle$ .

Ответ:  $N_{\mathbf{k}} = |v_{\mathbf{k}}|^2 u_{\mathbf{k}}^2$ .

На рисунке ниже показана область в импульсном пространстве, где сконцентрированы куперовские пары, а также числа заполнения электронов



Проанализируем результаты.

В нормальном металле функция распределения скачком обращается в нуль при  $k = k_F$ ; в сверхпроводнике этот спад происходит в интервале  $\delta k \sim 1/\xi_0 \sim \Delta/\hbar v_F$

В самом деле,  $v_k = 1$  при  $k \ll k_F$  и  $v_k = 0$  при  $k \gg k_F$ . В отличие от нормального металла, где функция распределения имеет разрыв при  $k = k_F$ , в сверхпроводнике  $v_k^2$  меняется непрерывно. Область изменения  $v_k$  от нуля до единицы имеет ширину  $\sim \Delta$  по энергии, а ее ширина по импульсу  $\delta k$  определяется из соотношения

$$\frac{\hbar^2}{2m} [(k_F + \delta k)^2 - k_F^2] \approx \Delta,$$

$$\delta k \approx \frac{m\Delta}{\hbar^2 k_F} \approx \frac{\Delta}{\hbar v_F}$$

Число пар  $N_k$ , как видно из рисунка, отлично от нуля лишь в переходной области и имеет наибольшее значение при фермиевском импульсе.

## 11 неделя. Возбуждения в сверхпроводниках

Добавим к системе спаренных  $N$  частиц еще одну частицу в состоянии, описываемом плоской волной с импульсом  $m$  и проекцией спина  $\alpha$ . Тогда мы придем к волновой функции

$$\tilde{\varphi}_{m\alpha} = \prod_{k \neq m} (u_k + v_k a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+) a_{m\alpha}^+ \varphi_0.$$

Очевидно, что функция ортогональна к  $\varphi$ . Вычислим энергию для состояния  $\tilde{\varphi}_{m\alpha}$ . Для кинетической энергии можно написать

$$\langle \tilde{\varphi}_{m\alpha} | \mathcal{H}_0 | \tilde{\varphi}_{m\alpha} \rangle = \langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H}_0 | \tilde{\varphi} \rangle + (1 - 2v_m^2) \xi_m.$$

Это следует из того, что волновая функция  $\tilde{\varphi}_{m\alpha}$  соответствует случаю занятого состояния  $m\alpha$ , тогда как волновая функция  $\tilde{\varphi}$  описывает состояние, в котором суммарная вероятность нахождения электрона в состояниях  $(m\uparrow)$  и  $(-m\downarrow)$  равна  $2v_m^2$  (можно получить это, рассчитав также соответствующие средние). Для нахождения потенциальной энергии заметим, что вклад в ее величину дают лишь члены, отвечающие переходам  $(k, \alpha) \rightarrow (k', \alpha)$  для  $k, k' \neq m$ , поскольку при спаривании состояние  $(m\alpha)$  не может быть использовано. Таким образом,

$$\langle \tilde{\varphi}_{m\alpha} | \mathcal{H}_{\text{вз}} | \tilde{\varphi}_{m\alpha} \rangle = \langle \tilde{\varphi} | \mathcal{H}_{\text{вз}} | \tilde{\varphi} \rangle - 2 \sum_{\mathbf{l}} V_{m\mathbf{l}} u_m u_{\mathbf{l}} v_m v_{\mathbf{l}}.$$

Полная энергия равна

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\varphi}_{m\alpha} | \mathcal{H} | \tilde{\varphi}_{m\alpha} \rangle &= E_0 + (1 - 2v_m^2) \xi_m + 2u_m v_m \Delta_m = \\ &= E_0 + \frac{\xi_m^2}{\epsilon_m} + \frac{\Delta_m^2}{\epsilon_m} = E_0 + \epsilon_m. \end{aligned}$$

Поскольку  $E_0$  — энергия основного состояния  $\varphi$ , величина  $\epsilon_m = \sqrt{\xi_m^2 + \Delta^2}$ , представляет собой энергию, необходимую для того, чтобы поместить новую частицу в состояние  $(m\alpha)$ . Отметим, что даже при  $\epsilon_m = 0$  энергия не остается конечной и равной  $\Delta_{k_F} = \Delta$ .

Таким же путем мы могли бы попытаться построить состояния с 2, 3,  $n$  возбуждениями. Например, для состояния с двумя возбуждениями напрашивается мысль взять волновую функцию в виде

$$\tilde{\varphi}_{m\alpha, n\beta} = \prod_{k \neq m, n} (u_k + v_k a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+) a_{m\alpha}^+ a_{n\beta}^+ \varphi_0.$$

К сожалению, функции такого вида, вообще говоря, не ортогональны исходной функции  $\varphi$ . Эту трудность можно обойти следующим способом. Вернемся к волновой функции  $\tilde{\varphi}_{m\alpha}$  для состояния с одним возбуждением и попытаемся представить ее в виде

$$\tilde{\varphi}_{m\alpha} = \gamma_{m\alpha}^+ \varphi$$

где  $\gamma_{m\alpha}^+$  играет роль оператора рождения для элементарного возбуждения.

Задача заключается, таким образом, в нахождении  $\gamma^+$ . Попытаемся определить  $\gamma, \gamma^+$  как линейную комбинацию операторов рождения и уничтожения для электронов. Положим

$$\begin{aligned}\gamma_{m\uparrow}^+ &= u_m a_{m\uparrow}^+ - v_m a_{-m\downarrow}, \\ \gamma_{m\downarrow}^+ &= u_m a_{m\downarrow}^+ + v_m a_{-m\uparrow}.\end{aligned}$$

Таким образом, мы нашли операторы  $\gamma, \gamma^+$ , с помощью которых можно построить набор взаимно ортогональных возбужденных состояний, ортогональных также к основному состоянию. Операторы  $\gamma$  и  $\gamma^+$  были введены независимо Боголюбовым и Валатином в 1958 г. Использование этих операторов существенно упрощает все расчеты, так или иначе связанные с возбужденными состояниями. Возбуждения, порождаемые операторами  $\gamma^+$ , будем называть квазичастицами.

Заметим, что из того факта, что оператор  $\gamma^+$  представляет собой линейную комбинацию операторов  $a, a^+$ , следует, что возбужденное состояние можно как добавлением одного электрона к основному состоянию, так и удалением электрона из основного состояния. С точностью до числа частиц и нормировки это будет одно и то же состояние, т.е. эквивалентны друг другу возбужденные состояния  $a_{k\uparrow}^+ |\phi_S\rangle, a_{-k\downarrow} |\phi_S\rangle$ .

Интересно, что преобразование Боголюбова можно записать в виде  $\gamma_{k\sigma} = U^{-1} a_{k\sigma} U$ ,

$$U = \exp[-\sum_k \theta_k (b_k^+ - b_k)],$$

$b_k$  - оператор пары,  $u_k = \sin \theta_k, v_k = \cos \theta_k$ . Дифференцированием по  $\theta_k$  можно получить следующее уравнение:  $\partial \gamma_{k'\sigma} / \partial \theta_k = -\delta_{k\uparrow k'\sigma} \gamma_{-k\downarrow}^+ + \delta_{-k\downarrow k'\sigma} \gamma_{k\uparrow}^+$ ; и соответствующее уравнение для эрмитово-сопряженного оператора. Решая их, находим, что операторы  $\gamma_{k\sigma}$  подчиняются соотношениям Боголюбова.

При  $T \neq 0$  происходит тепловое возбуждение состояний  $\Phi_{m\alpha} = \gamma_{m\alpha}^+ \Phi, \gamma_{k\beta}^+ \gamma_{m\alpha}^+ \Phi$  и т.д. При низких температурах возбуждений мало и их можно считать независимыми. Однако, когда величина  $T$  становится сравнимой с  $\Delta$ , число возбуждений велико.

Фермионные операторы  $\gamma_{k\sigma}$  будем задавать по-прежнему с помощью преобразования Боголюбова, параметры которого  $u_k$  и  $v_k$  пока не определены. Возбуждения системы будем трактовать как газ независимых квазичастиц; вероятность найти квазичастицу в состоянии с волновым вектором  $k$  и спином  $\alpha$  при температуре  $T$  равна

$$f_{k\alpha} = \langle \gamma_{k\alpha}^+ \gamma_{k\alpha} \rangle = 1 - \langle \gamma_{k\alpha} \gamma_{k\alpha}^+ \rangle.$$

Символ  $\langle \rangle$  означает усреднение по Гиббсу. Мы построим сначала выражение для свободной энергии, пригодное при произвольной функции распределения  $f_k$ , а затем будем отыскивать ее минимум по  $u_k, v_k$  и  $f_k$ .

1. Вычисление средней кинетической энергии дает

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{H}_0 \rangle &= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \xi_{\mathbf{k}} [u_{\mathbf{k}}^2 \langle \gamma_{\mathbf{k}\alpha}^+ \gamma_{\mathbf{k}\alpha} \rangle + v_{\mathbf{k}}^2 \langle \gamma_{\mathbf{k}\alpha} \gamma_{\mathbf{k}\alpha}^+ \rangle] = \\ &= \sum 2\xi_{\mathbf{k}} [u_{\mathbf{k}}^2 f_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}}^2 (1 - f_{\mathbf{k}})].\end{aligned}$$

2. В потенциальную энергию в рамках рассматриваемого приближения по-прежнему дают вклад лишь члены, описывающие рассеяние т.е.

$$\langle \mathcal{H}_{\text{вз}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \Gamma} \langle a_{\mathbf{k}\Gamma}^+ a_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ a_{-\Gamma\downarrow} a_{\Gamma\uparrow} \rangle V_{\mathbf{k}\Gamma}.$$

В этом выражении операторы  $a^+$ ,  $a$  являются линейными комбинациями операторов  $\gamma^+$  и  $\gamma$ , описывающих систему независимых фермионов. Имеет место следующее простое свойство:

$$\langle 0_1 0_2 0_3 0_4 \rangle = \langle 0_1 0_2 \rangle \langle 0_3 0_4 \rangle + \langle 0_1 0_4 \rangle \langle 0_2 0_3 \rangle - \langle 0_1 0_3 \rangle \langle 0_2 0_4 \rangle,$$

где под символом 0 подразумевается оператор  $a$  или  $a^+$ . Это свойство (частный случай теоремы Вика) можно проверить, явно выражая операторы  $a$  через  $\gamma$  и производя усреднение. Применение тождества позволяет сильно упростить последующие вычисления.

В данном случае взаимодействие содержит три члена. Два из них включают средние вида  $\langle a+a \rangle$  и приводят к поправкам типа Хартри и поправкам, имеющим обменное происхождение. Обе поправки в основном не зависят от температуры. Поэтому, как и раньше, мы их всюду будем опускать (или включать в отсчет энергии). Остающийся член вида  $\langle a+a^+ \rangle$  ( $aa$ ) дает

$$\langle \mathcal{H}_{\text{вз}} \rangle = \sum_{\mathbf{k}, \Gamma} V_{\mathbf{k}\Gamma} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\Gamma} v_{\Gamma} (1 - 2f_{\mathbf{k}})(1 - 2f_{\Gamma}).$$

3. Энтропия  $S$  системы невзаимодействующих фермионов описывается выражением

$$S = -k_B \sum_{\mathbf{k}\alpha} [f_{\mathbf{k}} \ln f_{\mathbf{k}} + (1 - f_{\mathbf{k}}) \ln (1 - f_{\mathbf{k}})].$$

4. Свободная энергия имеет вид  $F = \{H_0 + H_{\text{вз}}\} - TS$ . Потребуем сначала минимума  $F$  относительно  $u_{\mathbf{k}}$  и  $v_{\mathbf{k}}$ . Снова полагая  $u_{\mathbf{k}} = \sin \theta_{\mathbf{k}}$  и  $v_{\mathbf{k}} = \cos \theta_{\mathbf{k}}$ , получаем условие

$$2\xi_{\mathbf{k}} (1 - 2f_{\mathbf{k}}) \sin 2\theta_{\mathbf{k}} = \sum_{\Gamma} V_{\mathbf{k}\Gamma} \cos 2\theta_{\mathbf{k}} \sin 2\theta_{\Gamma} (1 - 2f_{\mathbf{k}})(1 - 2f_{\Gamma}).$$

Если ввести определение

$$\Delta_{\mathbf{k}} = -\frac{1}{2} \sum_{\Gamma} V_{\mathbf{k}\Gamma} \sin 2\theta_{\Gamma} (1 - 2f_{\Gamma}),$$

то опять приходим к полученной системе уравнений. Минимизируя выражение для  $F$  по отношению к  $f_{\mathbf{k}}$ , получаем

$$2\xi_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) - 4 \sum_{\Gamma} V_{\mathbf{k}\Gamma} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\Gamma} v_{\Gamma} (1 - 2f_{\Gamma}) + 2k_B T \ln \frac{f_{\mathbf{k}}}{1 - f_{\mathbf{k}}} = 0.$$

Отсюда находим

$$f_k = \frac{1}{1 + \exp(\epsilon_k / k_B T)}$$

Это обычный вид функции распределения свободных фермионов по энергиям  $\epsilon_k$ . Однако зависимость  $f_k$  от температуры не является столь простой, потому что  $\epsilon_k$  и  $\Delta_k$  теперь зависят от температуры.

Рассмотрим какую-либо произвольную пару состояний  $(q, -q)$  в импульсном пространстве сверхпроводника, находящегося в основном состоянии. Какой вклад в полную энергию вносит эта пара? Обозначим этот вклад через  $w_q$ . Из выражения для энергии основного состояния сразу видно, что

$$\omega_q = 2\epsilon_q v_q^2 - 2V v_q u_q \sum_k v_k u_k$$

Действительно, первое слагаемое здесь — кинетическая энергия пары  $(q, -q)$ , а второе слагаемое — вклад в отрицательную часть энергии основного состояния, происходящий от того, что рассматриваемая пара участвует во всевозможных процессах взаимодействия, при которых она переходит в любые другие состояния  $(k, -k)$ , и наоборот — когда любые другие пары  $(k, -k)$  переходят в наше выделенное для рассмотрения состояние  $(q, -q)$ .

Коэффициент 2 во втором слагаемом появился потому, что пара  $(q, -q)$  в полной сумме встретится дважды — один раз при суммировании по  $k$ , другой раз — при суммировании по  $k'$ . Учитывая теперь выражение для  $\Delta$  и формулы для когерентных факторов  $u, v$ , получим

$$\omega_q = \xi_q - \xi_q^2 / \epsilon_q - \Delta^2 / \epsilon_q = \xi_q - \epsilon_q$$

Воспользуемся теперь полученным выражением. Предположим, что в основном состоянии сверхпроводника пара состояний  $(q, -q)$  заведомо пуста. Введем в такой сверхпроводник один внешний электрон и поместим его в состояние  $q$ . Какова будет теперь энергия системы? Поскольку мы ввели один электрон в состояние  $q$ , то значит теперь пара состояний  $(q, -q)$  не может участвовать в процессах рассеяния, т. е. не может давать вклад в энергию основного состояния сверхпроводника. Этот вклад мы только что вычислили, он равен  $w_q$ . Следовательно, энергия сверхпроводника с одним «лишним» электроном в состоянии  $q$  будет

$$W_q = W - w_q + \xi_q$$

Этот «лишний» неспаренный электрон мы будем называть элементарным возбуждением нашей системы, или квазичастицей. В формуле  $W$  — энергия основного состояния сверхпроводника, а третье слагаемое учитывает просто кинетическую энергию нашего «лишнего» электрона. Имеем:

$$W_q = W + \epsilon_q$$

Мы получили очень важную формулу. Поскольку

$$\epsilon_q = \sqrt{\xi_q^2 + \Delta_0^2}$$

ясно, что добавляя один электрон к сверхпроводнику, находящемуся в основном состоянии, мы повышаем энергию системы как минимум на величину  $\Delta_0$  (в том случае, если  $\xi_q = 0$ , т.е. если состояние  $q$  находится на поверхности Ферми). Это значит, что спектр элементарных возбуждений сверхпроводника отделен от энергетического уровня, соответствующего основному состоянию сверхпроводника, энергетической щелью.

$\varepsilon_k$  — это энергия элементарного возбуждения, т.е. это величина, на которую увеличивается энергия системы, если к сверхпроводнику добавляется электрон с импульсом  $k$ , причем

$$\varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta_0^2} = \sqrt{(\hbar^2 k^2 / 2m - E_F)^2 + \Delta_0^2}$$

Уровни элементарных возбуждений сверхпроводника сгущаются при  $\varepsilon_k \rightarrow \Delta_0$ . Плотность состояний, или число энергетических уровней, приходящихся на единичный интервал энергии и на 1см материала, очевидно, равна

$$\rho(E) = dv/d\varepsilon,$$

где  $dv$  — число уровней в энергетическом интервале  $dE$  около уровня  $E$ . Но  $dv/d\xi$  — это плотность состояний около уровня Ферми для металла в нормальном состоянии (в расчете на одну проекцию спина), т.е.

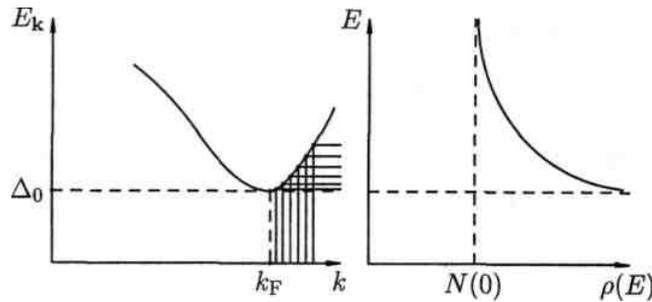
$$dv/d\xi = N(0).$$

Поэтому

$$\rho(\varepsilon) = \frac{dv}{d\xi} \frac{d\xi}{d\varepsilon} = N(0) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_0^2}}$$

По другому, через определение плотности состояний одночастичных возбуждений в системе со спектром  $\varepsilon_k$ :

$$\rho(E) = \sum_k \delta(E - \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2}) = N(0) [E \operatorname{sgn}(E) / \sqrt{E^2 - \Delta^2}] \theta(|E| - \Delta)$$



Энергетическая щель  $\Delta$  уменьшается с повышением температуры. Для разрыва пары и создания двух элементарных возбуждений требуется затратить энергию  $2\Delta$ . Если температура сверхпроводника  $T$  такова, что  $T \sim 2\Delta$ , то ясно, что уже много электронных пар будет разорвано под влиянием теплового воздействия и, соответственно, в  $k$ -пространстве будет уже много ячеек заполнено элементарными возбуждениями (одиночными электронами).

Но это значит, что эти состояния в  $k$ -пространстве уже не будут участвовать во взаимных переходах пар и, соответственно, не будут участвовать в общем понижении энергии сверхпроводника, т.е. энергия сверхпроводника повысится. Эти же состояния, очевидно, не будут теперь участвовать и в формировании щели. Отсюда следует, что чем больше будет разорванных пар, тем больше элементарных возбуждений и тем меньше щель.

Поскольку элементарные возбуждения подчиняются статистике Ферми - Дирака, вероятность заполнения состояния  $k$  одиночным электроном равна

$$f_k = \frac{1}{\exp[\varepsilon_k / T] + 1}$$

где  $E_k$  — энергия элементарного возбуждения. Если хотя бы одно из состояний ( $k$ ) или ( $-k$ ) заполнено, то пара состояний ( $k, -k$ ) не может участвовать в создании сверхпроводящего состояния. Вероятность этого равна  $2f_k$ . Отсюда следует, что вероятность того, что пара состояний ( $k, -k$ ) может участвовать в рассеянии, т. е. годится для участия в создании сверхпроводящего состояния, равна  $1 - 2f_k$ .

Тогда выражение для полной энергии сверхпроводника при  $T \neq 0$  может быть записано в виде

$$W = 2 \sum_k [\xi_k (1 - f_k) + \xi_k v_k^2 (1 - 2f_k)] - V \sum_{kk'} u_k u_{k'} v_k v_{k'} (1 - 2f_k) (1 - 2f_{k'})$$

Здесь первое слагаемое — кинетическая энергия элементарных возбуждений, второе слагаемое — кинетическая энергия сверхпроводящих электронов, последний член — энергия взаимодействия сверхпроводящих электронов через фононы, которая и приводит к созданию сверхпроводящего состояния. Последние два множителя учитывают вероятность такого взаимодействия.

Плотность свободной энергии сверхпроводника равна

$$F = W - TS,$$

где  $S$  — энтропия материала. Функции  $v_k^2$ , характеризующие распределение сверхпроводящих электронов по импульсам и соответствующие термодинамическому равновесию, определим из условия минимальности плотности свободной энергии  $F$ :

$$dF/d(v_k^2) = 0.$$

Получаем:

$$\frac{u_q v_q}{1 - 2v_q^2} = \frac{\Delta}{2\xi_q}$$

где

$$\Delta = V \sum_k v_k u_k (1 - 2f_k).$$

Формула дает выражение для зависимости щели от температуры. При  $T \rightarrow 0$  щель  $\Delta \rightarrow \Delta(0)$ , где  $\Delta(0) = \Delta_0$  — щель при  $T = 0$ , полученная ранее.

Используем явный вид когерентных факторов, и находим, переходя от суммирования к интегрированию, после несложных преобразований

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} \operatorname{th} \left[ \frac{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}{2T} \right]$$

$$\lambda = N(0)V$$

Эта формула дает в неявной форме зависимость щели от температуры. Вблизи  $T_c$  зависимость щели от температуры определяется формулой  $\Delta \sim (T_c - T)^{1/2}$ . При  $T = T_c$  щель  $\Delta = 0$ , поэтому, если написать  $T_c$  вместо  $T$  и положить  $\Delta = 0$ , мы получим уравнение относительно  $T_c$ :

$$\frac{1}{\lambda} = \int_0^{\hbar\omega_D} \frac{d\xi}{\xi} \operatorname{th}\left[\frac{\xi}{2T_c}\right]$$

Проведя интегрирование, получим

$$T_c = 1.14\hbar\omega_D \exp[-1/\lambda]$$

С другой стороны, нам уже известно, что

$$\Delta_0 = 2\hbar\omega_D \exp[-1/\lambda].$$

Отсюда сразу находим основное соотношение БКШ:

$$2\Delta_0 = 3.52\kappa_B T_c.$$

Эти соотношения находятся в хорошем количественном согласии с многочисленными экспериментами.

Под влиянием тепла некоторые пары разрушаются и возникают нормальные электроны, или элементарные возбуждения. Заполняя какие-то ячейки к-пространства, эти одиночные электроны исключают соответствующие ячейки (и парные им) из основного состояния. В результате щель сужается. Нормальное состояние достигается тогда, когда  $\Delta$  становится равной нулю. Это позволяет определить критическую температуру.

Найдем зависимость энергетической щели при  $T \ll T_c$  и  $|T - T_c| \ll T_c$ .

а) при малой температуре: сначала повторим вывод  $\Delta_0$  [ $\Delta_0 = \hbar\omega_D / \operatorname{sh}(1/\lambda)$ ], затем при расчете поправки воспользуемся методом “перевала” для расчета фигурирующего при вычислении интеграла

$$\int_0^{\infty} d\xi \exp[-E/T] / E, \quad E = \sqrt{\xi^2 + \Delta_0^2}.$$

Полезно также показать, что он равен функции Бесселя мнимого аргумента  $K_0(\Delta/T)$  и разложить по ее асимптотам, показав совпадение результата с расчетом методом “перевала”.

Ответ:  $\Delta = \Delta_0 + \Delta_1$ ;  $\Delta_1 = -\sqrt{2\pi T \Delta_0} \exp(-\Delta_0/T) \ll \Delta_0$

б) при температуре, близкой к  $T_c$ : сначала аккуратно выведем соотношение  $T_c = [2\gamma/\pi] \hbar\omega_D \exp(-1/\lambda) = 1.14 \hbar\omega_D \exp(-1/\lambda)$ ,  $\gamma = \exp(C)$ ,  $C = 0.577$  - постоянная Эйлера; затем при расчете  $\Delta$  используем разложение гиперболического тангенса в ряд Миттаг-Лефлера (или по полюсам в ряд Лорана, или по мацубаровским частотам):

$$\operatorname{th}\left(\frac{\varepsilon}{2T}\right) = 2T \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\varepsilon - i\omega_n)^{-1} = 4T \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon / (\varepsilon^2 + \omega_n^2); \quad \omega_n = \pi T(2n+1)$$

$$\Delta^2 = \gamma T_c (T_c - T); \quad \gamma = 8\pi^2 / 7\zeta(3); \quad \sqrt{\gamma} = 3.06;$$

Ответ: 
$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)^s} = (1-2^{-s})\zeta(s);$$

$\zeta(s)$  - Дзета-функция Римана,  $\zeta(3) = 1.202$ .

Полную энергию сверхпроводника можно выразить так

$$E = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \{(\varepsilon_{\mathbf{k}} + \xi_{\mathbf{k}})^2 f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \xi_{\mathbf{k}})^2 [1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}})]\}.$$

Для энтропии выпишем результат следующим образом

$$TS = 2 \sum_{\mathbf{k}} \left[ \varepsilon_{\mathbf{k}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + k_B T \ln \left( 1 + e^{\varepsilon_{\mathbf{k}}/k_B T} \right) \right].$$

Теплоемкость, по определению, равна

$$C = TdS/dT$$

Имея в виду, что энергия  $\varepsilon_{\mathbf{k}}$  зависит от  $T$ , получаем,

$$C_s = 2\beta^2 k_B \sum_{\mathbf{k}} f(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}})] \left( \varepsilon_{\mathbf{k}}^2 + \beta \varepsilon_{\mathbf{k}} \frac{d\varepsilon_{\mathbf{k}}}{d\beta} \right)$$

(где  $\beta = 1/T$ ). В приближении БКШ ( $d\varepsilon_{\mathbf{k}}/dT$ )  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = (d\Delta/dT)\Delta$ . Тогда

$$C_s = 2\beta^2 k_B N(0) \int_0^{\infty} d\xi f(\xi) [1 - f(\xi)] \left( \xi^2 - T \Delta \frac{d\Delta}{dT} \right),$$

Получаем после разложения

$$\begin{aligned} C &= 2/T^2 \sum_k f(E)[1 - f(E)][E^2 - T\Delta d\Delta/dT] = \\ &= 2N(0)\sqrt{2\pi\Delta_0} [\Delta_0^2/T^{3/2}] \exp(-\Delta_0/T); \\ f(E) &= [1 + \exp\{E/T\}]^{-1}; \quad E \equiv \varepsilon_k = \sqrt{\xi_k^2 + \Delta^2} \end{aligned}$$

Следует отметить, что данное исходное выражение для теплоемкости можно получить из производной от энергии с учетом уравнения для параметра порядка.

Найдем зависимость теплоемкости от температуры при  $(T_c - T)/T_c \ll 1$  с точностью до  $(T_c - T)/T_c$  включительно (повышенной сложности). В результате

$$\begin{aligned} [C_s(T) - C_N(T)] / C_N(T) &= \beta [1 + (1 - T/T_c)(-2 + \chi)]; \\ \beta &= 12 / 7\zeta(3); \quad \chi = 93\zeta(5) / 48\zeta^2(3) \end{aligned}$$

Получим свободную энергию сверхпроводника при  $T \ll T_c$  и  $|T - T_c| \ll T_c$ .

Энергию сверхпроводника следует брать из выражения:

$$\sum_k 2\xi_k [u_k^2 n_k + v_k^2 (1 - n_k)] - V \sum_{kk'} u_k u_{k'} v_k v_{k'} (1 - 2f_k)(1 - 2f_{k'});$$

где  $f_k$  - функция распределения квазичастиц.

Энтропию следует получить как энтропию свободного газа, но с функцией распределения  $f_k$ . В результате некоторых преобразований имеем:

$$F = E - TS = \sum_k [\xi_k - \xi_k^2 / E_k - 2f_k E_k] - \Delta^2 / V$$

Далее, в предельных случаях находим:

а) низкие температуры:

$$F_s(T) - F_N(T) = -[N(0)\Delta_0^2 / 2][1 - 2\pi^2 T^2 / 3\Delta_0^2] + dF;$$

$$dF = -N(0)\Delta_0 \sqrt{2\pi T \Delta_0} \exp(-\Delta_0 / T)$$

б) вблизи критической температуры:

$$F_s(T) - F_N(T) = N(0)\Delta^2 \int_0^{\hbar\omega_D} \text{th}\left[\frac{\xi}{2T}\right] d\xi - \frac{21N(0)\Delta^4 \zeta(3)}{16\pi^2 T^2} - J;$$

$$J = V \sum_{kk'} u_k u_{k'} v_k v_{k'} (1 - 2f_k)(1 - 2f_{k'})$$

Последнее выражение заменяем с учетом уравнения самосогласования для параметра порядка следующим:  $\Delta^2/V$ . Затем, опять же используя уравнение БКШ:

$$1/V = N(0) \int_0^{\hbar\omega_D} \text{th}[\xi / 2T_c] d\xi,$$

несложно объединить его с первым слагаемым, в результате чего имеем

$$F_s(T) - F_N(T) = \Delta^2 N(0) \frac{T_c - T}{T_c} - 21N(0)\Delta^4 \zeta(3) / (4\pi T)^2$$

Отсюда, подставляя выражение для параметра порядка, находим окончательно

$$F_s(T) - F_N(T) = -4\pi^2 N(0)(T_c - T)^2 / 7\zeta(3)$$

Полезно из последнего соотношения получить скачок теплоемкости при  $T_c$ :

$$(C_s - C_N) / C_N = 12 / 7\zeta(3) = 1.43$$

Получим также разложение по параметру порядка для свободной энергии  $F$  вблизи критической температуры и показать, что вариация  $F$  по нему приводит к правильной температурной зависимости  $\Delta$ .

Следует воспользоваться промежуточным результатом при выводе в предыдущей задаче свободной энергии вблизи критической температуры:

$$F_s(T) - F_N(T) = N(0)\Delta^2 \int_0^{\hbar\omega_D} \text{th}\left[\frac{\xi}{2T}\right] d\xi - \frac{21N(0)\Delta^4 \zeta(3)}{16\pi^2 T^2} - J;$$

$$J = V \sum_{kk'} u_k u_{k'} v_k v_{k'} (1 - 2f_k)(1 - 2f_{k'})$$

Последнее выражение заменяли с учетом уравнения самосогласования для параметра порядка следующим:  $\Delta^2/V$ . Это ускоряло расчет. В данном случае этого делать нельзя, т.к. уравнение на параметр порядка (уравнение БКШ) получается варьированием свободной энергии, а наша задача - получить разложение ее по параметру порядка, из которого и получается условие самосогласования. Поэтому выражение  $J$  следует аккуратно разложить по параметру  $\Delta$ , пользуясь рядом Миттаг-Лефлера и явным видом  $u, v, f$ .

$$\text{Ответ: } F_s(T) - F_N(T) = \Delta^2 N(0) \frac{T - T_c}{T_c} + 7N(0)\Delta^4 \zeta(3) / (4\pi T_c)^2 ;$$

Варьирование этого выражения приводит к результату для теплоемкости.

## 12 неделя. Теория эффекта Мейсснера. Туннельные явления

Найдем фурье-компоненту парамагнитного отклика сверхпроводника при малых, но ненулевых импульсах. Рассчитаем условия, которые надо наложить на импульс для реализации эффекта Мейсснера. Стартуем из следующего соотношения для фурье-компоненты парамагнитной части тока:

$$J_p(q) = \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c} \sum_k \frac{(\vec{A}_q, (2\vec{k} + \vec{q}))(2\vec{k} + \vec{q})}{E_k + E_{k+q}} \left[ 1 - \frac{\Delta^2 + \xi_k \xi_{k+q}}{E_k E_{k+q}} \right]$$

Рассмотрим поперечную и продольную относительно векторного потенциала компоненты тока. Покажем, что поперечная равна нулю. Вводим единичный вектор по направлению векторного потенциала:

$$\vec{A} = |\vec{A}| \vec{n}; \quad Q_q = (\vec{n}, \vec{J}_p) / |\vec{A}|$$

Тогда для  $Q_q$  имеем в пределе малых импульсов  $q$ :

$$Q_q = \frac{e^2 \hbar^6}{4m^4 c} \Delta^2 \sum_k \frac{(\vec{k}, \vec{n})^2 (\vec{k}, \vec{q})^2}{E_k^5}$$

Далее, рассчитывая интеграл, находим

$$Q_q = \left( \frac{\hbar v_F}{\Delta} \right)^2 q^2 \frac{e^2}{mc} n \frac{1 + 2 \cos^2 \theta_q}{15}$$

Здесь  $\theta_q$  - угол между вектором  $q$  и векторным потенциалом  $A_q$ . Если вспомнить, что диамагнитный ток имеет вид:

$$\vec{J}_D = -\frac{e^2}{mc} n \vec{A},$$

то эффект Мейсснера будет иметь место при слабо меняющихся полях при условии  $q \xi_0 \ll 1$ ;  $\xi_0 = \hbar v_F / \Delta$ .

Докажем, что в нормальном состоянии парамагнитный ток точно компенсирует диамагнитный вклад. Положим формально  $\Delta=0$  в выражении для парамагнитного тока, затем найдем область ненулевых значений когерентного фактора (в квадратных скобках), заменив в пределе малых импульсов:

$$\xi_{k+q} = \xi_k + \hbar v_F \vec{q}; \quad E_k = |\xi_k|;$$

Отдельно рассмотрим область телесного угла  $\vec{v}_F \vec{q} > 0$  и область  $\vec{v}_F \vec{q} < 0$ . Рассмотрим продольную и поперечную по векторному потенциалу компоненты и убеждаемся, что в итоге парамагнитная часть точно равна диамагнитной со знаком минус.

Предположим, что на электроны сверхпроводника действует внешнее зависящее от времени возмущение, например ультразвук или микроволновое поле. Рассмотрим эти два случая.

1. Ультразвук. Продольная акустическая волна изменяет потенциальную энергию каждого электрона на  $U\theta(r, t)$ , где  $\theta$  — локальное искажение решетки,  $U$  — постоянная (так называемый „деформационный потенциал“). По порядку величина  $U$  равна нескольким электрон-вольтам. Матричный элемент этого возмущения для переходов электрона из состояния  $k$  в  $k'$  равен  $U\theta_{k-k'}$  (где  $\theta_q$  — фурье-компонента). Возмущение, действующее на всю систему электронов, запишется в виде

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{k, k', \alpha} U\theta_{k-k'} a_{k\alpha}^+ a_{k'\alpha}$$

2. Микроволновое поле. При наличии электромагнитного возмущения, описываемого вектором-потенциалом  $A(r, t)$ , энергия электрона становится равной  $(p - eA/c)^2/2m$ . В первом приближении по  $A$  возмущение имеет вид  $(-e/2mc)(pA + Ap)$ , или, записывая его через операторы  $a$  и  $a^+$ ,

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_{k, k', \alpha} \frac{e\hbar}{2mc} A_{k-k'} \cdot (k + k') a_{k\alpha}^+ a_{k'\alpha}$$

В общем случае, таким образом, возмущение можно записать в виде

$$\mathcal{H}_1 = \sum_{k, \alpha, k', \alpha'} B(k\alpha | k'\alpha') a_{k\alpha}^+ a_{k'\alpha'}$$

Возмущение  $H_1$  индуцирует переходы между различными возбужденными состояниями, описываемыми с помощью операторов  $\gamma^+$ . Для классификации этих переходов выразим  $H_1$  через операторы  $\gamma$  и  $\gamma^+$ . Перепишем операторы фермионов  $a$ ,  $a^+$  через квазичастичные операторы, и получаем

$$a_{m\alpha}^+ = u_m \gamma_{m\alpha}^+ + \sum_{\beta} \rho_{\alpha\beta} v_m \gamma_{-m\beta}$$

$$\rho = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = \sum_{k\alpha, k'\alpha'} B(k\alpha | k'\alpha') & \left( u_k u_{k'} \gamma_{k\alpha}^+ \gamma_{k'\alpha'} + \right. \\ & + v_k v_{k'} \sum_{\beta, \beta'} \rho_{\alpha\beta} \rho_{\alpha'\beta'} \gamma_{k\beta} \gamma_{k'\beta'}^+ + u_k v_{k'} \sum_{\beta'} \rho_{\alpha'\beta'} \gamma_{k\alpha}^+ \gamma_{-k'\beta'}^+ + \\ & \left. + u_{k'} v_k \sum_{\beta} \rho_{\alpha\beta} \gamma_{-k\beta} \gamma_{k'\alpha'} \right) \end{aligned}$$

Члены  $\gamma^+ \gamma$  и  $\gamma \gamma^+$  описывают переходы, при которых квазичастица рассеивается. Член  $\gamma^+ \gamma^+$  приводит к рождению двух квазичастиц, а член  $\gamma \gamma$  — к уничтожению их.

Рассмотрим процессы, при которых квазичастица переходит из состояния  $(k'\alpha')$  в состояние  $(k\alpha)$ . Соответствующий матричный элемент  $M(k\alpha | k'\alpha')$  равен коэффициенту

при  $\gamma_{k\alpha}^+ \gamma_{k'\alpha'}$ . С учетом соотношения  $\gamma_{k\alpha}^+ \gamma_{k'\alpha'} = -\gamma_{k'\alpha'}^+ \gamma_{k\alpha}$  (для  $k\alpha \neq k'\alpha'$ ) впишем суммарный вклад от первых двух членов в виде

$$M(k\alpha | k'\alpha') = B(k\alpha | k'\alpha') u_k u_{k'} - v_k v_{k'} \sum_{\sigma, \sigma'} \rho_{\sigma'\alpha'} \rho_{\sigma\alpha} B(-k'\sigma' | -k\sigma).$$

Сумма

$$\sum_{\sigma\sigma'} B(-k'\sigma' | -k\sigma) \rho_{\sigma'\alpha'} \rho_{\sigma\alpha}$$

фактически представляет собой матричный элемент  $B(k\alpha | k'\alpha')$ , в котором направления спинов и импульсов изменены на обратные. Для взаимодействия  $H_1$  рассматриваемого вида эти два матричных элемента отличаются самое большее знаком

$$\sum_{\sigma\sigma'} B(-k'\sigma' | -k\sigma) \rho_{\sigma\alpha} \rho_{\sigma'\alpha'} = \eta B(k\alpha | k'\alpha'),$$

где  $\eta=1$  для случая 1, и  $\eta=-1$  для случая 2.

Таким образом

$$M(k\alpha | k'\alpha') = B(k\alpha | k'\alpha') (u_k u_{k'} - \eta v_k v_{k'}).$$

Величина  $(u_k u_{k'} - \eta v_k v_{k'})$  носит название фактора когерентности перехода. Отнесенное к единице времени число переходов  $(k'\alpha') \rightarrow (k\alpha)$  за вычетом обратных переходов равно

$$\dot{\nu} = \frac{2\pi}{h} |M(k\alpha | k'\alpha')|^2 \{f(\epsilon_{k'}) [1 - f(\epsilon_k)] - f(\epsilon_k) [1 - f(\epsilon_{k'})]\} \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'} - \hbar\omega),$$

где мы предположили, что возмущение  $H_1$  зависит от времени как  $\exp[-i\omega t]$ .

Поглощаемая мощность равна

$$W_1 = \sum_{k, k'} \dot{\nu} \hbar\omega.$$

Чтобы вычислить  $W_1$  произведем сначала усреднение квадрата матричного элемента  $B$  по всем возможным направлениям волновых векторов  $k$  и  $k'$  и спинов частиц

$$B^2 = \overline{|B(k\alpha | k'\alpha')|^2}.$$

Поскольку  $|\xi_k|$  и  $|\xi_{k'}|$  малы по сравнению с  $E_F$ , величину  $B^2$  можно считать постоянной;

тогда

$$W_1 = 2\pi\omega B^2 \int_{\Delta}^{\infty} N_s(\epsilon) N_s(\epsilon') (u u' - \eta v v')^2 \times [f(\epsilon') - f(\epsilon)] \delta(\epsilon - \epsilon' - \hbar\omega) d\epsilon d\epsilon'.$$

Здесь  $N_s$  — плотность состояний для возбуждений в сверхпроводнике

$$N_s(\varepsilon) = N(0) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta_0^2}}; \varepsilon > \Delta$$

Используя определения  $u$  и  $v$ , можно написать для когерентного фактора

$$(uu' - \eta vv')^2 = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{\xi\xi'}{\varepsilon\varepsilon'} - \eta \frac{\Delta^2}{\varepsilon\varepsilon'} \right].$$

При подстановке и при переходе к интегрированию по  $\xi$  необходимо иметь в виду, что каждому значению  $\varepsilon$  соответствуют два значения  $\xi$  с противоположными знаками. Поэтому член  $\xi\xi'/\varepsilon\varepsilon'$  исчезает при суммировании по этим значениям. В результате получаем

$$W_1 = 4\pi\omega B^2 N^2(0) \int_{\Delta}^{\infty} d\varepsilon \int_{\Delta}^{\infty} d\varepsilon' \frac{\varepsilon\varepsilon' - \eta\Delta^2}{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2} (\varepsilon'^2 - \Delta^2)^{1/2}} \times \\ \times [f(\varepsilon') - f(\varepsilon)] \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \hbar\omega).$$

Аналогичный расчет можно выполнить для нахождения мощности  $W^2$ , поглощаемой за счет процессов рождения и аннигиляции двух квазичастиц. Она отлична от нуля лишь при  $\hbar\omega > 2\Delta$ . Окончательная формула для суммарной мощности  $W_s = W_1 + W_2$  отличается только пределами интегрирования

$$W_s = 2\pi\omega B^2 N^2(0) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon d\varepsilon' \frac{\varepsilon\varepsilon' - \eta\Delta^2}{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2} (\varepsilon'^2 - \Delta^2)^{1/2}} \times \\ \times [f(\varepsilon') - f(\varepsilon)] \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \hbar\omega),$$

где  $|\varepsilon| > \Delta$  и  $|\varepsilon'| > \Delta$ . На опыте мощность  $W_s$  всегда сравнивают с мощностью  $W_n$ , поглощаемой в нормальном состоянии:

$$\frac{W_s}{W_n} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon d\varepsilon' \frac{\varepsilon\varepsilon' - \eta\Delta^2}{(\varepsilon^2 - \Delta^2)^{1/2} (\varepsilon'^2 - \Delta^2)^{1/2}} \times \\ \times [f(\varepsilon') - f(\varepsilon)] \delta(\varepsilon - \varepsilon' - \hbar\omega).$$

### Применения

1. Поглощение звука. В этом случае  $\eta=1$  и фактор когерентности мал, когда  $\varepsilon$  и  $\varepsilon'$  одновременно близки к  $\Delta$  или  $-\Delta$ . В случае когда  $\hbar\omega \ll \Delta$  или  $\hbar\omega \ll T_c$ , соотношение принимает вид

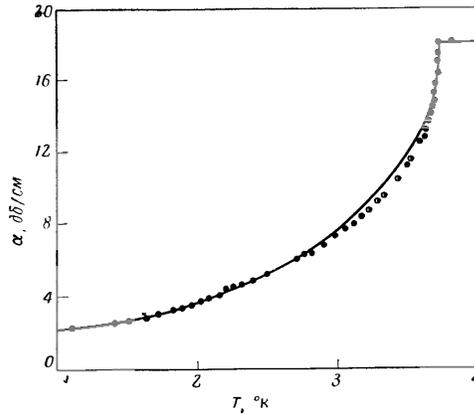
$$\frac{W_s}{W_n} = - \int_{|\varepsilon| > \Delta} d\varepsilon \frac{\varepsilon^2 - \Delta^2}{\varepsilon^2 - \Delta^2} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} = \frac{2}{1 + e^{\beta\Delta}}.$$

Отсюда видно, что поглощение очень мало при низких температурах и быстро возрастает при  $T \rightarrow T_c$ . Это дает один из способов измерения  $\Delta(T)$ , который широко используется на практике.

2. Ядерная релаксация. Взаимодействие  $H_1$  между ядерными спинами и электронами проводимости имеет довольно сложный вид. Можно показать, однако, что оно относится

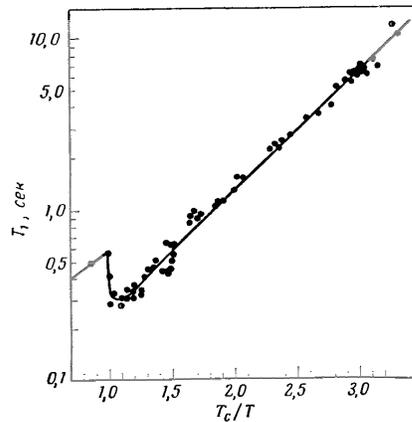
к случаю  $\eta = -1$ . На опыте измеряется время  $T_1$ , необходимое для установления теплового равновесия ядерных спинов с электронами в нулевом поле. Частота  $\omega$  теперь равна частоте прецессии ядерного спина в локальном поле соседних ядер. Эта частота мала поэтому мы можем устремить  $\omega$  к нулю. Таким образом,

$$\frac{T_{1n}}{T_1} = - \int_{|\varepsilon| > \Delta} d\varepsilon \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \frac{\varepsilon^2 + \Delta^2}{\varepsilon^2 - \Delta^2}.$$



Результаты измерения коэффициента поглощения ультразвука в олове (Морз и др.).

Для сравнения приведена кривая, полученная на основе теории БКШ.



Зависимость времени ядерной релаксации в алюминии от температуры (Масуда и Редфилд).

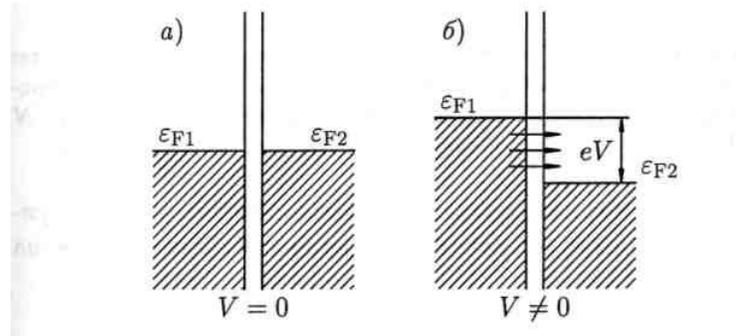
В данном случае фактор когерентности не обращается в нуль при  $|\varepsilon| = \Delta$  одновременно со знаменателем. В результате интеграл логарифмически расходится. Однако в реальных металлах параметр  $\Delta_k$  анизотропен. Учет этого обстоятельства приводит к „размазыванию“ плотности состояний  $N_s$  вблизи особенности, так что интеграл становится сходящимся. Результат зависит от конкретного вида  $\Delta_k$ .

Предсказание того, что факторы когерентности и соответственно характер ультразвукового поглощения и ядерной релаксации могут быть совершенно различными, явилось одним из больших успехов теории БКШ.

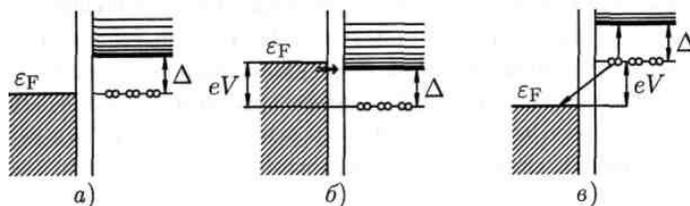
Наиболее прямое измерение энергетической щели в сверхпроводниках может быть проведено с помощью туннельных экспериментов. На стеклянную пластинку с заранее подготовленными контактами наносится узкая полоска пленки первого металла. Затем эта полоска окисляется так, чтобы пленка оказалась покрытой слоем изолирующего окисла толщиной в несколько десятков ангстрем (барьерный слой). После этого в поперечном направлении наносится узкая полоска пленки второго металла. Место пересечения этих двух полосок (площадью порядка  $1 \text{ мкм}^2$ ) и представляет собой туннельный переход. Исследование заключается в изучении вольтамперной характеристики такого перехода.

Простейший случай — когда и первый, и второй металлы — нормальные металлы. При установлении контакта между металлами их уровни Ферми уравниваются за счет возникновения контактной разности потенциалов. Если теперь на туннельный переход подать разность потенциалов  $V$ , то уровни Ферми металлов разойдутся на величину  $eV$ , и возникнет туннельный ток. Если предположить, что плотность состояний в интересующей нас области энергий остается постоянной ( $N(0)$ ), то ясно, что сила тока будет пропорциональна  $eV$ , т. е. будет выполняться закон Ома.

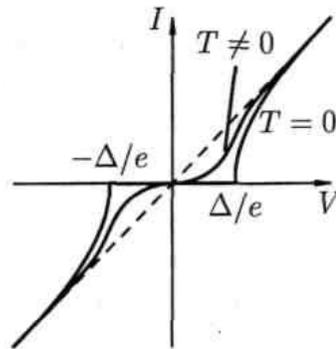
Рассмотрим теперь случай, когда первый металл — нормальный, а второй — сверхпроводник. Мы уже знаем, какой вид имеет спектр элементарных возбуждений сверхпроводника. Энергия элементарных возбуждений отсчитывается от уровня основного состояния сверхпроводника. В нормальном металле энергия элементарного возбуждения отсчитывается от уровня Ферми. Поэтому при создании туннельного контакта между нормальным металлом и сверхпроводником за счет контактной разности потенциалов должны уравниваться уровень Ферми нормального металла и уровень основного состояния сверхпроводника.



Рассмотрим сперва случай, когда  $T = 0$ . Приложим к туннельному переходу некоторую разность потенциалов  $V$ . Пусть в результате этого уровень Ферми нормального металла поднялся над уровнем основного состояния сверхпроводника на величину  $eV$ . Туннельный ток электронов из  $N$  в  $S$  может начаться только тогда, когда величина  $eV$  станет равной энергетической щели  $\Delta$  в  $S$  или превзойдет ее. Тот же результат получится, если поменять полярность приложенного к переходу напряжения. Теперь туннелирование электрона из  $S$  в  $N$  будет происходить тогда, когда окажется энергетически допустимым разрыв электронной пары в  $S$ , т. е. когда энергия, выделившаяся при туннелировании одного электрона пары, окажется достаточной, чтобы закинуть второй электрон этой пары в область разрешенных энергий для одиночных электронов, т.е. выше щели.

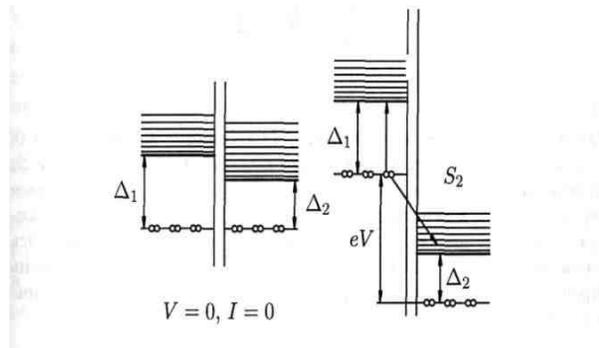


Таким образом, вольтамперная характеристика такого туннельного перехода будет нечетной функцией  $V$ .

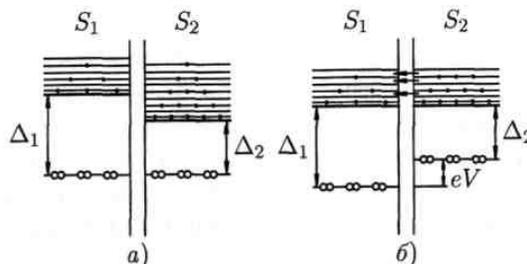


В случае, если  $T \neq 0$ , как нетрудно сообразить, вольтамперная характеристика будет несколько размазанной.

Переходим к рассмотрению туннельных эффектов в  $S_1/S_2$ -переходах, когда оба металла ( $S_1$  и  $S_2$ ), разделенные туннельным слоем изолятора (I), являются сверхпроводниками. Сперва рассмотрим случай  $T = 0$ . Туннельный ток может возникнуть только тогда, когда к туннельному переходу будет приложено напряжение  $V > (\Delta_1 + \Delta_2)/e$ . Действительно, только в этом случае возможен процесс, изображенный на этом рисунке: электронная пара в  $S_1$  разрывается, один из электронов этой пары туннелирует в  $S_2$  с выделением энергии, равной или большей, чем  $\Delta_1$ . При этом второй электрон разорванной пары, поглощая эту энергию, возбуждается в состояния спектра квазичастиц  $S_1$ .



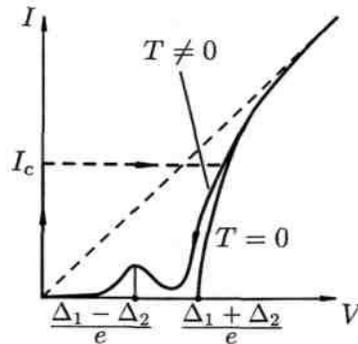
Для реального случая, когда  $T \neq 0$ , картина будет несколько более сложной. Теперь в каждом из сверхпроводников имеется какое-то количество возбужденных одиночных электронов, равновесное количество которых определяется температурой.



Если  $V = 0$  то несмотря на то, что щели в  $S_1$  и  $S_2$  разные, количество возбуждений на противостоящих друг другу уровнях в  $S_1$  и  $S_2$  будет одинаково. Поэтому количество частиц,

туннелирующих из  $S_2$  в  $S_2$ , будет равно тому же числу частиц, туннелирующих из  $S_2$  в  $S_1$ , т.е. как это и должно быть, в равновесных условиях полный туннельный ток  $I = 0$ .

Если теперь приложить даже небольшое напряжение  $V$ , то равновесие нарушится и возникнет ток квазичастиц из одного сверхпроводника в другой. Не будем, однако, забывать, что плотность состояния квазичастиц в сверхпроводнике имеет особенность при  $E = \Delta$ . Поэтому если приложить к переходу разность потенциалов  $V$  такую, что  $eV = \Delta_1 - \Delta_2$ , то друг против друга окажутся области с плотностью состояний  $\rho = \infty$  и в  $S_1$ , и в  $S_2$ . Естественно, это вызовет большой всплеск туннельного тока. Дальнейшее увеличение  $V$  приведет к тому, что уровни с  $\rho = \infty$  разойдутся и полный туннельный ток уменьшится. Отсюда можно сделать вывод, что при  $V = (\Delta_1 - \Delta_2)/e$  на вольтамперной характеристике должен наблюдаться максимум тока. Таким образом, и в случае контакта двух сверхпроводников вольтамперная характеристика будет нечетной функцией напряжения  $V$ .



Тесно примыкают к туннельным явлениям эффекты Джозефсона. Они связаны с протеканием через контакт SIS незатухающего тока куперовских пар. Различают стационарный и нестационарный эффекты Джозефсона.

Стационарный заключается в следующем. Достаточно слабый ток течет через контакт бездиссипативно, т.е. при протекании такого тока на слабой связи (контакте) не возникает падения напряжения. Это происходит по причине достаточно большого размера куперовской пары, и появляется возможность туннелировать парам через контакт не разрываясь. Ток пропорционален синусу разности фаз волновой функции слева и справа от контакта

$$I = I_c \sin(\theta_2 - \theta_1).$$

При критическом значении тока пары начинают разрываться, и появляется напряжение на контакте. В этот момент наблюдают нестационарный эффект Джозефсона. Возникает напряжение, периодически меняющееся во времени – джозефсоновская генерация, при этом частота генерации связана со средним значением напряжения

$$2e\bar{V} = \hbar\omega.$$

В условиях равновесия электронная и дырочная ветви спектра элементарных возбуждений сверхпроводника заселены квазичастицами симметрично. Поэтому в равновесном сверхпроводнике число электронных квазичастиц равно числу дырок, и суммарный заряд равен нулю. Кроме того, в равновесном сверхпроводнике функция распределения квазичастиц — это функция распределения Ферми. Обсудим кратко эти явления.

В результате каких-либо внешних воздействий равновесное распределение квазичастиц может нарушиться. Если, например, сверхпроводник подвергается электромагнитному облучению, то симметрия в распределении электронов и дырок по ветвям не нарушается. Квазичастицы, поглощая электромагнитную энергию, переходят на более высокие энергетические уровни. При этом может измениться величина энергетической щели. Такие неравновесные состояния наблюдаются экспериментально как при воздействии лазерного излучения, так и при туннельной инжекции (Тестарди, Имада). Наблюдаются отклики на внешнее излучение, по времени меньшие, чем тепловые времена релаксации. Равновесие будет также нарушено вблизи границы с нормальным металлом, если оттуда идет поток электронов. Действительно, электроны с энергией  $E > \Delta(T)$  проникают в сверхпроводник и занимают ячейки  $k$ -пространства, принадлежащие электронной ветви спектра. В этом случае возникает разбаланс заселенностей двух ветвей.

Существование разбаланса заселенностей приводит к появлению конечного заряда квазичастиц  $Q$  в данном месте сверхпроводника. В результате может оказаться, что при протекании тока через контакт электрическое поле может проникать вглубь сверхпроводника на макроскопические расстояния, что наблюдается экспериментально как избыточное сопротивление.

### 13 неделя. Уравнения Гинзбурга-Ландау

В теории Лондонов не учитывались квантовые эффекты сверхпроводимости. Теория Гинзбурга-Ландау (ГЛ) стала первой квантовой феноменологической теорией сверхпроводимости.

В теории должно было быть учтено то, что сверхпроводящее состояние — более упорядоченное, чем нормальное, и что переход из одного в другое (в отсутствие магнитного поля) — это фазовый переход второго рода. Отсюда следовало, что в сверхпроводнике должен существовать какой-то параметр порядка, который отличен от нуля при  $T < T_c$  и обращается в нуль при  $T > T_c$ . С другой стороны, для создания квантовой теории необходимо было ввести какую-то эффективную волновую функцию сверхпроводящих электронов  $\Psi(r)$ . В. Л. Гинзбург и Л. Д. Ландау решили объединить эти две величины, решили рассматривать  $\Psi(r)$  в качестве параметра порядка. В основу теории ГЛ положена разработанная Л.Д.Ландау теория фазовых переходов второго рода.

В основе теории фазовых переходов второго рода Л.Д.Ландау лежит разложение свободной энергии по степеням параметра порядка, который мал вблизи точки перехода. Поскольку теория ГЛ основана на таком разложении, ясно, что область ее применимости ограничена близостью к критической температуре:  $T_c - T \ll T_c$ .

Итак, будем считать волновую функцию сверхпроводящих электронов  $\Psi(r)$  параметром порядка. Более того, теперь нам понятно, как удобно выбрать нормировку этой волновой функции. Пусть  $|\Psi(r)|$  будет плотностью электронных куперовских пар, т.е.

$$2|\Psi(r)|^2 = n_s.$$

Рассмотрим сперва самый простой случай — однородный сверхпроводник без внешнего магнитного поля. Тогда  $\Psi$  не должна зависеть от  $r$ , и разложение свободной энергии по степеням  $|\Psi|^2$  вблизи  $T_c$  дает выражение

$$F_{s0} = F_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4.$$

Здесь  $F_{s0}$  — плотность свободной энергии сверхпроводника в отсутствие магнитного поля,  $F_n$  — плотность свободной энергии тела в нормальном состоянии,  $\alpha$  и  $\beta$  — некоторые феноменологические коэффициенты разложения, характеризующие материал. Найдем то значение  $|\Psi|^2$ , при котором свободная энергия однородного сверхпроводника  $F_{s0}$  достигает минимума. Это значение  $|\Psi_0|^2$  будет решением уравнения

$$dF_{s0} / d|\Psi|^2 = 0$$

После элементарных вычислений получим

$$|\Psi_0|^2 = -\alpha / \beta$$

Найдем разность

$$F_n - F_{s0} = \alpha^2 / 2\beta.$$

Но плотность свободной энергии сверхпроводника в магнитном поле равна

$$F_{sH} = F_{s0} + H^2 / 8\pi$$

В нормальном состоянии  $F_{sH}=F_n$  при термодинамическом критическом  $H_{cm}=H$ , когда внешнее поле проникает в сверхпроводник. Отсюда находим

$$F_{s0} - F_n = H_{cm}^2 / 8\pi$$

Далее,

$$H_{cm}^2 = 4\pi\alpha^2 / \beta.$$

Обсудим температурную зависимость коэффициентов  $\alpha$  и  $\beta$ . Поскольку при  $T = T_c$  параметр порядка должен быть равен нулю, а при  $T < T_c$  — отличен от нуля, то  $\alpha = 0$  при  $T = T_c$  и  $\alpha < 0$  при  $T < T_c$ . Поэтому в первом порядке по  $(T_c - T)$  можно записать

$$\alpha \sim (T - T_c),$$

Такая температурная зависимость  $\alpha$  правильно описывает наблюдаемую экспериментально температурную зависимость термодинамического магнитного поля вблизи критической температуры:

$$H_{cm} \sim (T_c - T).$$

Коэффициент  $\beta$  положителен и от температуры не зависит. Действительно, при  $T < T_c$  и  $\alpha < 0$  положительное значение величины  $|\Psi_0|^2$  может быть получено только при  $\beta > 0$ . С другой стороны, если  $T > T_c$  и  $\alpha > 0$ , то при  $\beta > 0$  величина  $F_{s0}$  достигает минимума при  $|\Psi_0|^2 = 0$ , т.е., как и должно быть, сверхпроводящее состояние при  $T > T_c$  отсутствует. Таким образом, при  $T < T_c$  и  $T > T_c$  параметр  $\beta > 0$ . Поэтому мы можем в первом по  $(T_c - T)$  приближении считать, что  $\beta = \text{const}$ .

### Уравнения теории Гинзбурга-Ландау. Плотность свободной энергии

Переходим теперь к рассмотрению общего случая неоднородного сверхпроводника, находящегося во внешнем магнитном поле.

Вблизи  $T_c$  разложение свободной энергии Гиббса по степеням  $\Psi$  можно записать так:

$$G_{sH} = G_n + \alpha|\Psi|^2 + \frac{\beta}{2}|\Psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right|^2 + \frac{H^2}{8\pi} - \frac{\mathbf{H}\mathbf{H}_0}{4\pi},$$

$G_n$  - плотность свободной энергии сверхпроводника в нормальном состоянии,  $H_0$  — напряженность внешнего однородного магнитного поля, в котором находится сверхпроводник. Предпоследнее слагаемое представляет собой просто плотность магнитной энергии, где  $\mathbf{H}$  — это точное микроскопическое поле в данной точке сверхпроводника. Слагаемое с градиентным членом — это плотность кинетической энергии сверхпроводящих электронов. Рассмотрим это слагаемое более подробно.

Плотность кинетической энергии частицы с массой  $m$  в квантовой механике записывается в виде

$$\frac{1}{2m} | -i\hbar\nabla\Psi |^2.$$

В случае, если частица имеет заряд  $e$  и движется в поле векторного потенциала  $\mathbf{A}$ , в выражении для плотности кинетической энергии оператор  $-i\hbar\nabla$  надо изменить:

$$-i\hbar\nabla \rightarrow -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A} = m\mathbf{v}.$$

Оператор скорости поэтому равен

$$\mathbf{v} = - (i\hbar/m)\nabla - (e/cm)\mathbf{A}.$$

В этом выражении произведена замена  $e \rightarrow 2e$ , поскольку элементарный заряд носителя сверхтока равен  $2e$ . Соответственно, под  $m^*$  понимается удвоенная масса свободного электрона.

### Уравнения Гинзбурга-Ландау (ГЛ)

Свободная энергия Гиббса всего сверхпроводника равна

$$\mathcal{G}_{sH} = \mathcal{G}_n + \int \left[ \alpha |\Psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\Psi|^4 + \frac{1}{4m} \left| -i\hbar\nabla\Psi - \frac{2e}{c}\mathbf{A}\Psi \right|^2 + \frac{(\text{rot } \mathbf{A})^2}{8\pi} - \frac{\text{rot } \mathbf{A} \cdot \mathbf{H}_0}{4\pi} \right] dV,$$

где интегрирование ведется по всему объему сверхпроводника. Наша задача — найти такие уравнения относительно функций  $\Psi(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , решения которых давали бы минимальное значение  $\mathcal{G}_{sH}$ . Для решения этой вариационной задачи будем сперва считать  $\Psi(\mathbf{r})$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  неизменными, а проварьируем функцию  $\Psi^*(\mathbf{r})$ . Итак, решаем вариационную задачу

$$\delta_{\Psi} \mathcal{G}_{sH} = 0$$

где

$$\delta_{\Psi} \mathcal{G}_{sH} = \int dV \left[ \alpha \Psi \delta\Psi^* + \beta \Psi |\Psi|^2 \delta\Psi^* + \frac{1}{4m} \left( i\hbar \nabla \delta\Psi^* - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \delta\Psi^* \right) \left( -i\hbar \nabla \Psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right) \right].$$

Вынести  $\delta\Psi^*$  за квадратные скобки мешает только член  $i\hbar \nabla \delta\Psi^*$ . Прделаем такие преобразования. Обозначим

$$\mathbf{v} = \left( -i\hbar \nabla \Psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right).$$

Используя тождество

$$\nabla(\delta\Psi^* \mathbf{v}) = \mathbf{v} \nabla \delta\Psi^* + \delta\Psi^* \nabla \mathbf{v},$$

имеем

$$\int dV \nabla \delta\Psi^* \mathbf{v} = - \int \delta\Psi^* \nabla \mathbf{v} dV + \int \nabla(\delta\Psi^* \mathbf{v}) dV.$$

Последний интеграл в этом равенстве по теореме Гаусса превращается в поверхностный интеграл:

$$\int \nabla(\delta\Psi^* \mathbf{v}) dV = \oint_S \delta\Psi^* \mathbf{v} dS.$$

Далее,

$$\delta_{\Psi} \mathcal{G}_{sH} = \int dV \left[ \alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi \right] \delta \Psi^* + \\ + \oint \left[ -i\hbar \nabla \Psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right] \delta \Psi^* dS = 0.$$

Это выражение может быть равно нулю при произвольной функции  $\delta \Psi^*$  только в том случае, если выражения в квадратных скобках равны нулю. Так мы получим первое уравнение теории ГЛ и граничное условие к нему:

$$\alpha \Psi + \beta \Psi |\Psi|^2 + \frac{1}{4m} \left( i\hbar \nabla + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi = 0, \\ \left( i\hbar \nabla \Psi + \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right) \mathbf{n} = 0,$$

где  $\mathbf{n}$ —единичный вектор, нормальный к поверхности сверхпроводника. Полученное уравнение есть уравнение относительно параметра порядка  $\Psi$ . Чтобы найти уравнение для  $\mathbf{A}$ , минимизируем выражение для  $\mathcal{G}_{sH}$  по  $\mathbf{A}$ :

$$\delta_{\mathbf{A}} \mathcal{G}_{sH} = \int dV \left\{ \frac{1}{4m} \delta_{\mathbf{A}} \left[ \left( i\hbar \nabla \Psi^* - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi^* \right) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \left( -i\hbar \nabla \Psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right) \right] + \frac{1}{4\pi} \text{rot } \mathbf{A} \text{ rot } \delta \mathbf{A} - \frac{\mathbf{H}_0}{4\pi} \text{rot } \delta \mathbf{A} \right\} = \\ = \int \left\{ \frac{1}{4m} \left( -\frac{2e}{c} \Psi^* \delta \mathbf{A} \right) \left( -i\hbar \nabla \Psi - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4m} \left( i\hbar \nabla \Psi^* - \frac{2e}{c} \mathbf{A} \Psi^* \right) \left( -\frac{2e}{c} \Psi \delta \mathbf{A} \right) + \right. \\ \left. + \frac{1}{4\pi} (\text{rot } \mathbf{A} - \mathbf{H}_0) \text{rot } \delta \mathbf{A} \right\} dV.$$

Вынести вариацию  $\delta \mathbf{A}$  за фигурную скобку мешает член  $(1/4\pi)(\text{rot } \mathbf{A} - \mathbf{H}_0) \text{rot } \delta \mathbf{A}$ . Воспользовавшись тождеством

$$\mathbf{A} \text{ rot } \mathbf{B} = \mathbf{B} \text{ rot } \mathbf{A} - \text{div} [\mathbf{A} \mathbf{B}]$$

проинтегрируем последнее слагаемое:

$$\frac{1}{4\pi} \int dV (\text{rot } \mathbf{A} - \mathbf{H}_0) \text{rot } \delta \mathbf{A} = \\ = \frac{1}{4\pi} \int dV \delta \mathbf{A} \text{ rot rot } \mathbf{A} - \frac{1}{4\pi} \oint dS [\delta \mathbf{A}, \text{rot } \mathbf{A} - \mathbf{H}_0].$$

При этом мы воспользовались теоремой Гаусса и перешли от объемного интеграла к поверхностному:

$$\int dV \text{div} [\delta \mathbf{A}, \text{rot } \mathbf{A} - \mathbf{H}_0] = \oint dS [\delta \mathbf{A}, \text{rot } \mathbf{A} - \mathbf{H}_0].$$

Но этот поверхностный интеграл равен нулю, так как магнитное поле на поверхности сверхпроводника задано, и поэтому  $\delta \mathbf{A}|_S = 0$ . Производя элементарные преобразования и приравнявая вариацию свободной энергии нулю, получим

$$\delta_{\mathbf{A}} \mathcal{G}_{sH} = \int dV \left[ \frac{i\hbar e}{2mc} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) + \right. \\ \left. + \frac{2e^2}{mc^2} \mathbf{A} |\Psi|^2 + \frac{1}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{A} \right] \delta \mathbf{A} = 0.$$

Этот интеграл может быть равен нулю при любой вариации  $\delta A$  только в том случае, если выражение в квадратных скобках равно нулю. Это требование определяет второе уравнение теории ГЛ относительно векторного потенциала  $A$ :

$$\mathbf{j}_s = -\frac{i\hbar e}{2m}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) - \frac{2e^2}{mc} |\Psi|^2 \mathbf{A},$$

Это уравнение на сверхпроводящий ток, первая часть – парамагнитный ток, пропорциональный градиентам параметра порядка, второй – диамагнитный отклик, отвечающий за экранирование внешнего поля. Этот результат можно получить также прямо из квантовомеханического выражения для тока

$$\langle j_s \rangle = \langle \Psi^* \hat{j} \Psi \rangle;$$

$$\hat{j} = \frac{e}{2m} [\hat{p}A + A\hat{p}],$$

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla - 2eA/c$$

Замкнутость уравнениям ГЛ придают уравнения Максвелла, так что согласно им, плотность тока  $\mathbf{j}_s$  в сверхпроводнике равна

$$\mathbf{j}_s = \frac{c}{4\pi} \text{rot rot } \mathbf{A}, \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}.$$

### Обезразмеривание уравнений ГЛ

Перейдем к безразмерной волновой функции  $\psi(r)$ , обезразмерив параметр порядка на его значение в однородном бесконечном случае

$$\psi(r) = \Psi(r) / \Psi_0$$

где  $\Psi_0^2 = n_s / 2 = \alpha / \beta$ . Кроме того, введем следующие обозначения для характерных длин:

$$\xi^2 = \hbar^2 / 4m |\alpha|$$

$$\lambda^1 = mc^2 / 4\pi n_s e^2 = mc^2 \beta / 8\pi e^2 |\alpha|$$

Тогда уравнения ГЛ можно записать в более компактной и удобной форме:

$$\xi^2 \left( i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \psi - \psi + \psi |\psi|^2 = 0,$$

$$\text{rot rot } \mathbf{A} = -i \frac{\Phi_0}{4\pi \lambda^2} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{|\psi|^2}{\lambda^2} \mathbf{A}.$$

Здесь  $\Phi_0 = \pi \hbar c / e$  — квант магнитного потока ( $\Phi_0 = 2 \cdot 10^{-7}$  Гс·см<sup>2</sup>).

Представив волновую функцию  $\psi$  в виде  $\psi = |\psi| e^{i\theta}$ , второе уравнение ГЛ можно записать в следующей форме:

$$\text{rot rot } \mathbf{A} = \frac{|\psi|^2}{\lambda^2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \theta - \mathbf{A} \right).$$

Если сверхпроводник граничит с вакуумом или каким-либо другим диэлектриком, граничным условием будет

$$\left(i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0}\mathbf{A}\right)\mathbf{n}\psi = 0,$$

где  $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к поверхности сверхпроводника. Это условие обеспечивает выполнение естественного физического требования, чтобы сверхток через границу сверхпроводник - диэлектрик равнялся нулю (тангенциальная составляющая тока при этом не обязательно равна нулю, т.е. могут вдоль границы течь (экранирующие) токи). Однако этому же требованию равенства нулю нормальной компоненты сверхтока на границе удовлетворяет и более общее равенство:

$$\left(i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0}\mathbf{A}\right)\mathbf{n}\psi = ia\psi,$$

где  $a$  — произвольное вещественное число. С помощью микротeorии сверхпроводимости можно показать, что это условие соответствует случаю, когда сверхпроводник граничит с нормальным металлом.

### Градиентная инвариантность теории ГЛ

В уравнения ГЛ входит векторный потенциал  $\mathbf{A}$ . Но хорошо известно, что выбор  $\mathbf{A}$  неоднозначен. Действительно, переход к другому полю  $\mathbf{A}'$  по формуле

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' + \nabla\varphi,$$

где  $\varphi(r)$  — произвольная однозначная скалярная функция, не изменяет величины магнитного поля:  $\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A} = \text{rot } \mathbf{A}'$ , так как  $\text{rot } \nabla\varphi = 0$ . Для того чтобы результаты теоретических расчетов не зависели от того или иного выбора вектор-потенциала  $\mathbf{A}$ , т. е., иначе говоря, были бы градиентно инвариантными, нужно, чтобы сами уравнения ГЛ удовлетворяли требованию градиентной инвариантности.

Легко проверить, что это требование выполняется в случае, если от переменных  $\mathbf{A}$  и  $\psi$  перейти к переменным  $\mathbf{A}'$  и  $\psi'$  по следующим формулам преобразования

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}' + \nabla\varphi,$$

$$\psi = \psi' \exp \left[ i \frac{2\pi}{\Phi_0} \varphi(r) \right].$$

Перейдем от  $\mathbf{A}$  и  $\psi$  к  $\mathbf{A}'$  и  $\psi'$ . Легко видеть, что второе уравнение ГЛ останется неизменным:

$$\text{rot rot } \mathbf{A}' = \frac{|\psi'|^2}{\lambda^2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla\theta' - \mathbf{A}' \right).$$

Аналогичным образом можно убедиться в градиентной инвариантности и первого уравнения ГЛ.

Из свойства градиентной инвариантности уравнений ГЛ следует один очень важный для будущего вывод: для односвязного сверхпроводника всегда можно выбрать такую калибровку вектор-потенциала  $\mathbf{A}$ , чтобы  $\psi(r)$  была вещественной функцией.

Рассмотрим пример. На чистую плоскую поверхность сверхпроводника нанесена пленка нормального металла. Тогда локально около поверхности плотность сверхпроводящих электронов несколько понизится. Иными словами, значение параметра порядка  $|\psi|$  на поверхности будет несколько отличаться от его равновесного значения в глубине сверхпроводника, где  $|\psi| = 1$  (в обезразмеренном виде). Направим ось  $x$  перпендикулярно к поверхности сверхпроводника (на поверхности  $x=0$ ). Очевидно, изменение  $\psi$  может происходить только вдоль оси  $x$ , т.е.  $\psi = \psi(x)$ . Кроме того, поскольку рассматривается односвязный сверхпроводник, можем считать  $\psi$  вещественной функцией. Тогда первое уравнение ГЛ примет следующий простой вид:

$$-\xi^2 d^2\psi/dx^2 - \psi + \psi^3 = 0.$$

Решение:  $\psi = th[(x+C)/\sqrt{2}\xi]$ ,  $C$  – постоянная интегрирования. При решении учтено, что производная  $\psi$  вглубь сверхпроводника стремится к нулю. Отсюда следует, что  $\xi$  — это и есть по порядку величины тот характерный масштаб, на котором происходит изменение параметра порядка  $\psi$ . Эту длину называют длиной когерентности.

Другая величина, введенная в предыдущем параграфе,  $\lambda$  – это глубина проникновения магнитного поля.

Из второго уравнения ГЛ в пренебрежении градиентами параметра порядка легко получить уравнение Лондонов (лондоновский предел), используя еще уравнения Максвелла, и решение, показывающее экспоненциальное ослабление внешнего магнитного поля вглубь сверхпроводника (эффект Мейсснера):

$$H = H_0 \exp[-x/\lambda]$$

Глубина проникновения так же, как и  $\xi$ , зависит от температуры;

$$\lambda^2 = mc^2\beta/(8\pi|\alpha|e^2),$$

$$\xi^2 = \hbar^2/(4m|\alpha|),$$

поскольку вблизи  $T_c$  имеем  $|\alpha| \sim (T_c - T)$ . Таким образом, вблизи  $T_c$

$$\lambda \propto (T_c - T)^{-1/2}, \quad \xi \propto (T_c - T)^{-1/2}.$$

С помощью  $\lambda(T)$  и  $\xi(T)$  можно ввести очень важную величину — параметр теории Гинзбурга-Ландау  $\kappa$ :

$$\kappa = \lambda/\xi$$

Получим другое выражение для  $\kappa$ :

$$\kappa = 2\sqrt{2}\frac{e}{\hbar c}\lambda^2 H_{cm}.$$

С помощью выражения для кванта магнитного потока  $\Phi_0 = \pi\hbar c/e$  легко получим отсюда очень полезную формулу:

$$\sqrt{2}H_{cm} = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda\xi}.$$

Рассмотрим более общую задачу, когда сверхпроводящие электроны испытывают также воздействие со стороны произвольного внешнего поля с потенциалом  $U_0(r)$  (что важно для описания влияния примесей и поверхности образца) и магнитного поля  $H = \text{rot } A$ .

Перейдем к описанию метода, развитого Боголюбовым в 1959г. По существу он является обобщением метода Хартри — Фока на случай сверхпроводимости. Сначала перейдем в гамильтониане БКШ системы электронов

$$H = \sum_{k\alpha} (\epsilon_k - E_F) a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha} - \frac{V}{2} \sum_{kk'} a_{k\uparrow}^+ a_{-k\downarrow}^+ a_{-k\downarrow} a_{k\uparrow}$$

от операторов  $a_{k\alpha}$  к их пространственным фурье-компонентам (так называемым полевым операторам):

$$\Psi(\mathbf{r}\alpha) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}\alpha},$$

$$\Psi^+(\mathbf{r}\alpha) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} a_{\mathbf{k}\alpha}^+.$$

рождающим и уничтожающим электроны в реальном пространстве. Для простоты мы считаем объем системы равным единице. Операторы  $\Psi$  подчиняются следующим правилам антикоммутации:

$$\Psi(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}'\beta) + \Psi(\mathbf{r}'\beta) \Psi(\mathbf{r}\alpha) = 0,$$

$$\Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \Psi^+(\mathbf{r}'\beta) + \Psi^+(\mathbf{r}'\beta) \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) = 0,$$

$$\Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}'\beta) + \Psi(\mathbf{r}'\beta) \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) = \delta_{\alpha\beta} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Оператор числа частиц в этом представлении имеет вид

$$N = \sum_{k\alpha} a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha} = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha).$$

Гамильтониан  $H$  тоже можно записать через  $\Psi$  и  $\Psi^+$  (согласно правилам перехода в другой базис во вторичном квантовании):

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1,$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \left[ \frac{\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m} + U_0(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}\alpha),$$

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{1}{2} V \sum_{\alpha\beta} \int d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \Psi^+(\mathbf{r}\beta) \Psi(\mathbf{r}\beta) \Psi(\mathbf{r}\alpha).$$

Потенциал  $U_0(\mathbf{r})$  мы считаем здесь не зависящим от спина.

Учтем отсчет энергий от энергии Ферми

$$\tilde{\mathcal{H}}_0 - E_F N = \sum_{\alpha} \int d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \mathcal{H}_e \Psi(\mathbf{r}\alpha),$$

$$\mathcal{H}_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U_0(\mathbf{r}) - E_F.$$

Заменим теперь взаимодействие  $V\Psi^+\Psi^+\Psi\Psi$  по теореме Вика средним потенциалом, содержащим только два оператора  $\Psi$  или  $\Psi^+$  по правилу

$$\sum_{\alpha\beta} \Psi_{\alpha}^+ \Psi_{\beta}^+ \Psi_{\beta} \Psi_{\alpha} \approx \langle \Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow} \rangle \Psi_{\uparrow}^+ \Psi_{\downarrow}^+ + \langle \Psi_{\uparrow}^+ \Psi_{\downarrow}^+ \rangle \Psi_{\downarrow} \Psi_{\uparrow}$$

В итоге, сделав обозначениям для средних и введя параметр порядка:

$$\Delta(r) = \langle \Psi_{\downarrow}(r) \Psi_{\uparrow}(r) \rangle$$

$$\Delta^*(r) = \langle \Psi_{\uparrow}^+(r) \Psi_{\downarrow}^+(r) \rangle$$

будем исходить из следующего эффективного гамильтониана:

$$\mathcal{H}_{\text{эфф}} = \int d\mathbf{r} \left[ \sum_{\alpha} \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \mathcal{H}_e(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}\alpha) + U(\mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{r}\alpha) \Psi(\mathbf{r}\alpha) \right. \\ \left. + \Delta(\mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{r}\uparrow) \Psi^+(\mathbf{r}\downarrow) + \Delta^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}\downarrow) \Psi(\mathbf{r}\uparrow) \right].$$

Член, содержащий  $U$ , уничтожает и рождает один электрон, оставляя, таким образом, полное число частиц неизменным. С другой стороны, члены с  $\Delta$  увеличивают или уменьшают число частиц на два. Назовем  $\Delta(\mathbf{r})$  потенциалом спаривания.

Попытаемся определить собственные функции и соответствующие значения энергии эффективного гамильтониана. Оператор  $\mathcal{H}_{\text{эфф}}$  квадратичен по  $\Psi$  и  $\Psi^+$ , поэтому его можно привести к диагональному виду с помощью унитарного преобразования, которое запишем в следующем виде:

$$\Psi(\mathbf{r}\uparrow) = \sum_n [\gamma_{n\uparrow} u_n(\mathbf{r}) - \gamma_{n\downarrow}^+ v_n^*(\mathbf{r})],$$

$$\Psi(\mathbf{r}\downarrow) = \sum_n [\gamma_{n\downarrow} u_n(\mathbf{r}) + \gamma_{n\uparrow}^+ v_n^*(\mathbf{r})].$$

где  $\gamma_{n\alpha}$  и  $\gamma_{n\alpha}^+$  - система новых операторов, подчиняющихся по-прежнему фермиевским коммутационным соотношениям

$$\gamma_{n\alpha}^+ \gamma_{m\beta} + \gamma_{m\beta} \gamma_{n\alpha}^+ = \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta},$$

$$\gamma_{n\alpha} \gamma_{m\beta} + \gamma_{m\beta} \gamma_{n\alpha} = 0.$$

Преобразование должно приводить  $\mathcal{H}_{\text{эфф}}$  к диагональному виду, т. е.

$$\mathcal{H}_{\text{эфф}} = E_g + \sum_{n,\alpha} \epsilon_n \gamma_{n\alpha}^+ \gamma_{n\alpha},$$

где  $E_g$  — энергия основного состояния, а  $\epsilon_n$  — энергия возбуждения с квантовым числом  $n$ . Это условие можно записать иначе, вычислив коммутаторы

$$[\mathcal{H}_{\text{эфф}}, \gamma_{n\alpha}] = -\epsilon_n \gamma_{n\alpha},$$

$$[\mathcal{H}_{\text{эфф}}, \gamma_{n\alpha}^+] = \epsilon_n \gamma_{n\alpha}^+.$$

Чтобы найти уравнения для  $u$  и  $v$ , вычислим следующие коммутаторы

$$[\Psi(\mathbf{r}\uparrow), \mathcal{H}_{\text{эфф}}] = [\mathcal{H}_e + U(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}\uparrow) + \Delta(\mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{r}\downarrow),$$

$$[\Psi(\mathbf{r}\downarrow), \mathcal{H}_{\text{эфф}}] = [\mathcal{H}_e + U(\mathbf{r})] \Psi(\mathbf{r}\downarrow) - \Delta(\mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{r}\uparrow).$$

Выразим теперь в этих уравнениях  $\Psi$  и  $\Psi^+$  через  $\gamma$  и  $\gamma^+$  и используем найденные значения коммутаторов. Сравнивая затем коэффициенты при  $\gamma_n$  (и  $\gamma_n^+$ ) с обеих сторон получающихся равенств, приходим к уравнениям Боголюбова

$$\epsilon u(\mathbf{r}) = [\mathcal{H}_e + U(\mathbf{r})] u(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}),$$

$$\epsilon v(\mathbf{r}) = -[\mathcal{H}_e^* + U(\mathbf{r})] v(\mathbf{r}) + \Delta^*(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}).$$

Функции  $u, v$  являются собственными функциями линейной системы уравнений с собственными значениями  $\varepsilon$

Будем исходить из уравнения самосогласованности (совпадающего с основным уравнением БКШ в однородном случае)

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_n u_n(\mathbf{r}) v_n^*(\mathbf{r}) [1 - 2f(\varepsilon_n)],$$

где, как показано выше, коэффициенты преобразования Боголюбова  $u_n, v_n$  являются собственными функциями системы уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon_n u_n &= \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U - E_F \right] u_n + \Delta v_n, \\ \varepsilon_n v_n &= - \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U - E_F \right] v_n + \Delta^* u_n \end{aligned}$$

для положительных собственных значений  $\varepsilon_n$ . Влияние примесей и тому подобные эффекты включены в  $U$ . Представим правую часть уравнения в виде ряда по степеням  $\Delta$ , положив

$$\begin{aligned} u_n &= u_n^0 + u_n^1 + \dots \\ v_n &= v_n^0 + v_n^1 + \dots \end{aligned}$$

В нулевом приближении функции  $u_n^0$  и  $v_n^0$  пропорциональны одноэлектронным волновым функциям  $\varphi_n$  для нормального металла

$$\xi_n \varphi_n = \left[ \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U - E_F \right] \varphi_n.$$

А именно

$$\begin{aligned} u_n^0 &= \varphi_n, & v_n^0 &= 0 & (\xi_n > 0), \\ u_n^0 &= 0, & v_n^0 &= \varphi_n^* & (\xi_n < 0) \end{aligned}$$

и  $\varepsilon_n^0 = |\xi_n|$ . Поскольку везде произведение  $u_0 v_0 = 0$ , в нулевом приближении правая часть уравнения равна нулю. Чтобы найти поправки первого порядка, разложим  $u, v$  в ряд по полной системе функций  $\varphi_n$

$$\begin{aligned} u_n^1 &= \sum_m e_{nm} \varphi_m, \\ v_n^1 &= \sum_m d_{nm} \varphi_m^*. \end{aligned}$$

Далее,

$$\begin{aligned} (|\xi_n| - \xi_m) e_{nm} &= \int \varphi_m^*(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) v_n^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ (|\xi_n| + \xi_m) d_{nm} &= \int \varphi_m(\mathbf{r}) \Delta^*(\mathbf{r}) u_n^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Как обычно, диагональные члены типа  $\varepsilon_{nn}$  следует приравнять нулю для сохранения условия нормировки  $|u|^2 + |v|^2 = 1$ .

Выделим в уравнении самосогласованности члены первого порядка по  $\Delta$ . Используя затем уравнения для  $u_n^1$  и  $v_n^1$ , получаем

$$\Delta(\mathbf{s}) = \int K(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

где

$$K(\mathbf{s}, \mathbf{r}) = V \sum_{n, m} [1 - 2f(|\varepsilon_n|)] \times \\ \times \left[ \frac{u_n^{0*}(\mathbf{r}) u_n^0(\mathbf{s})}{|\xi_n| + \xi_m} + \frac{v_n^{0*}(\mathbf{s}) v_n^0(\mathbf{r})}{|\xi_n| - \xi_m} \right] \varphi_m^*(\mathbf{s}) \varphi_m^*(\mathbf{r}).$$

Входящие сюда функции  $u_n^0$  (или  $v_n^0$ ) отличны от нуля лишь для  $\xi_n > 0$  (или  $\xi_n < 0$ ). Функция  $1 - 2f(\varepsilon_n) = \text{th}(\beta\varepsilon_n/2)$  нечетна по  $\xi_n$ . Это позволяет нам объединить члены типа  $uu$  и  $vv$ .

Симметризуя, кроме того, выражение под знаком суммы по индексам  $n$  и  $m$ , окончательно напишем

$$K(\mathbf{s}, \mathbf{r}) = \frac{V}{2} \sum_{n, m} \frac{\text{th}(\beta\xi_n/2) + \text{th}(\beta\xi_m/2)}{\xi_n + \xi_m} \varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{s}) \varphi_m(\mathbf{s}).$$

Преобразуем этот результат, воспользовавшись разложением Миттаг-Лефлера

$$\text{th}\left(\frac{\beta\xi}{2}\right) = 2k_B T \sum_{\omega} \frac{1}{\xi - i\hbar\omega},$$

где  $\hbar\omega = 2\pi T(n + 1/2)$  - мацубаровские частоты, а суммирование производится по всем целым (положительным и отрицательным) числам  $n$ . Таким образом,

$$\frac{\text{th}(\beta\xi/2) + \text{th}(\beta\xi'/2)}{\xi + \xi'} = 2k_B T \sum_{\omega} \frac{1}{\xi + \xi'} \left( \frac{1}{\xi - i\hbar\omega} + \frac{1}{\xi' + i\hbar\omega} \right) \\ = 2k_B T \sum_{\omega} \frac{1}{(\xi - i\hbar\omega)(\xi' + i\hbar\omega)}$$

$$K(\mathbf{s}, \mathbf{r}) = V k_B T \sum_{\omega} \sum_{n, m} \frac{\varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_m^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{s}) \varphi_m(\mathbf{s})}{(\xi_n - i\hbar\omega)(\xi_m + i\hbar\omega)}.$$

Уравнение вместе с явным выражением для ядра представляет собой линеаризованное условие самосогласованности.

Предположим, что вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  мало меняется в пространстве. Тогда собственные функции  $\varphi_n$  в нормальном металле при наличии вектора-потенциала  $\mathbf{A}$  отличаются от собственных функций  $w_n$  (в отсутствие  $\mathbf{A}$ ) лишь фазовым множителем

$$\varphi_n^*(\mathbf{r}) \varphi_n(\mathbf{s}) \rightarrow w_n^*(\mathbf{r}) w_n(\mathbf{s}) e^{ie\mathbf{A} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{r})/\hbar c}.$$

Функции  $w_n$  мы выбрали вещественными. Окончательно имеем

$$\Delta(\mathbf{s}) = \int d\mathbf{r} K_0(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \exp\left[\frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{r})\right] \Delta(\mathbf{r}),$$

$$K_0(\mathbf{s}, \mathbf{r}) = V k_B T \sum \sum \frac{w_n(\mathbf{r}) w_m(\mathbf{r}) w_n(\mathbf{s}) w_m(\mathbf{s})}{(\xi_n - i\hbar\omega)(\xi_m + i\hbar\omega)}.$$

Усредним уравнение по всевозможным конфигурациям примесей; тогда в его правой части появится среднее типа

$$\overline{K_0(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r})}.$$

Аппроксимируем его следующим образом:

$$\overline{K_0(\mathbf{s}, \mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r})} \rightarrow \overline{K_0(\mathbf{s}, \mathbf{r})} \overline{\Delta(\mathbf{r})}.$$

Рассмотрим однородную бесконечную среду и перейдем к фурье-компонентам

$$\begin{aligned} K_0(\mathbf{q}) &= L^{-3} \int d\mathbf{r} ds K_0(\mathbf{s} - \mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{r})} = \\ &= V L^{-3} k_B T \sum_{\omega, n, m} \frac{\langle n | e^{i\mathbf{q}x} | m \rangle \langle m | e^{-i\mathbf{q}x} | n \rangle}{(\xi_n - i\hbar\omega)(\xi_m + i\hbar\omega)}, \end{aligned}$$

где  $L^3$  — объем образца, а вектор  $\mathbf{q}$  направлен вдоль оси  $x$ . Входящие сюда матричные элементы определяются следующим образом:

$$\langle n | e^{i\mathbf{q}x} | m \rangle = \int w_n(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} w_m(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Рассмотрим вещественную функцию

$$g(q, \Omega) = \sum_m \overline{\langle n | e^{i\mathbf{q}x} | m \rangle \langle m | e^{-i\mathbf{q}x} | n \rangle} \delta(\xi_m - \xi_n - \hbar\Omega),$$

которую называют спектральной плотностью одноэлектронного оператора  $e^{i\mathbf{q}x}$ . Черта означает усреднение по всем состояниям с заданной энергией  $\xi_n$ . Фактически усреднение производится при энергии, равной фермиевской. Зная  $g$ , можно сразу написать выражение для ядра

$$K_0(q) = N(0) V k_B T \sum_{\infty} \int \frac{d\xi d\xi' g[q, (\xi - \xi')/\hbar]}{(\xi - i\hbar\omega)(\xi' + i\hbar\omega)}.$$

В терминах оператора  $e^{i\mathbf{q}x}$  спектральная плотность принимает следующий простой вид:

$$g(q, \Omega) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dt e^{i\Omega t} \overline{\langle n | e^{-i\mathbf{q}x(0)} e^{i\mathbf{q}x(t)} | n \rangle}.$$

Таким образом, для вычисления спектральной плотности  $g$  необходимо знать функцию корреляции оператора  $e^{i\mathbf{q}x}$ , т. е. функцию

$$\langle e^{-i\mathbf{q}x(0)} e^{i\mathbf{q}x(t)} \rangle_{E_F} = \overline{\langle n | e^{-i\mathbf{q}x(0)} e^{i\mathbf{q}x(t)} | n \rangle}$$

для электрона, находящегося на уровне Ферми в нормальном металле.

1. Чистый металл. Предположим, что при  $t = 0$  электрон находится в точке  $x_0$  на оси  $x$  и имеет вдоль этой оси компоненту скорости  $v_F \cos \theta$  ( $\theta$  - угол между  $\mathbf{q}$  и направлением скорости электрона). Тогда

$$e^{-iqx(0)} = e^{-iqx_0},$$

$$e^{iqx(t)} = e^{iq(x_0 + v_F t \cos \theta)}$$

Следовательно,

$$\langle e^{-iqx(0)} e^{iqx(t)} \rangle_{E_F} = \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta e^{iqv_F t \cos \theta}$$

$$g(q, \Omega) = \frac{1}{2\hbar} \int_0^\pi \sin \theta d\theta \delta(\Omega - qv_F \cos \theta) = \begin{cases} (2qv_F \hbar)^{-1}, & |\Omega| < qv_F, \\ 0, & |\Omega| > qv_F. \end{cases}$$

2. „Грязный“ металл. Для „грязного“ металла, в котором длина свободного пробега  $l$  мала по сравнению с характерной длиной волны  $q^{-1}$ , изменение оператора  $e^{iqx(t)}$  со временем происходит по закону случайных блужданий. В этом случае при  $ql \ll 1$

$$\langle e^{-iqx(0)} e^{iqx(t)} \rangle_{E_F} = e^{-Dq^2 |t|},$$

$$g(q, \Omega) = \frac{1}{\pi \hbar} \frac{Dq^2}{\Omega^2 + D^2 q^4}.$$

где  $D = lv_F/3$  — коэффициент диффузии.

### Явное выражение для ядра $K_0$

Выберем в качестве переменных интегрирования  $\xi$  и  $\hbar\Omega = \xi' - \xi$ ; интегрирование по  $\xi$  легко выполняется с помощью теории вычетов. В результате для чистого металла получаем

$$\begin{aligned} K_0(q) &= \frac{N(0) V k_B T \pi}{qv_F \hbar} \sum_{\omega} \int_{-qv_F}^{qv_F} \frac{d\Omega}{2\omega - i\Omega} = \\ &= \frac{2\pi N(0) V k_B T}{\hbar q v_F} \sum_{\omega} \operatorname{arctg} \left( \frac{qv_F}{2|\omega|} \right). \end{aligned}$$

Аналогично в случае „грязного“ металла

$$\begin{aligned} K_0(q) &= N(0) V k_B T \frac{2i}{\hbar} \sum_{\omega} \int d\Omega \frac{Dq^2}{(Dq^2 + i\Omega)(2i\omega + \Omega)} = \\ &= \frac{N(0) V k_B T}{\hbar} \sum_{\omega} \frac{1}{Dq^2 + 2|\omega|} \quad \text{при } ql \ll 1. \end{aligned}$$

Теперь можно получить *уравнения ГЛ*. Линеаризованное уравнение самосогласованности для потенциала спаривания применимо лишь для бесконечно малых значений параметра  $\Delta$ , т. е. в самой точке перехода (при условии, что изучаемый переход является фазовым переходом второго рода, т. е. параметр  $\Delta$  непрерывно уменьшается до нуля при повышении температуры). Мы хотим обобщить анализ на случай температур, близких к критической. Для этого нужно учесть нелинейные члены в разложении правой части уравнения в ряд по  $\Delta$ . Вычисляя  $u$  и  $v$  с точностью до членов более высокого порядка по  $\Delta$ , получаем

$$\Delta(\mathbf{s}) = \int K_0(\mathbf{s}, \mathbf{r}) e^{2ie|\mathbf{A} \cdot (\mathbf{s} - \mathbf{r})/\hbar c} \Delta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \\ + \int R(\mathbf{s}, \mathbf{r}, \mathbf{l}, \mathbf{m}) \Delta^*(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{l}) \Delta(\mathbf{m}) d\mathbf{r} d\mathbf{l} d\mathbf{m}.$$

Предположим, что величины типа  $\Delta(\mathbf{r}) \exp[-2ie\mathbf{A}(\mathbf{r}-\mathbf{s})/\hbar c]$  медленно меняются на расстояниях порядка радиуса действия ядер  $K_0$  и  $R$ ; это определяет область применимости уравнений Гинзбурга - Ландау. Разложим функцию  $\Delta(\mathbf{r}) \exp[-2ie\mathbf{A}(\mathbf{r}-\mathbf{s})/\hbar c]$  в ряд Тейлора вблизи точки  $\mathbf{s}$ :

$$\Delta(\mathbf{r}) e^{-2i\varphi(\mathbf{r})} = \Delta(\mathbf{s}) e^{-2i\varphi(\mathbf{s})} + (\mathbf{r} - \mathbf{s}) \cdot \nabla (\Delta e^{-2i\varphi}) + \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (\mathbf{r} - \mathbf{s})_{\alpha} (\mathbf{r} - \mathbf{s})_{\beta} \nabla_{\alpha} \nabla_{\beta} (\Delta e^{-2i\varphi}),$$

где введен фазовый параметр

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{r}.$$

Выполняя дифференцирование, получаем

$$\Delta(\mathbf{r}) e^{-2i\varphi(\mathbf{r})} = e^{-2i\varphi(\mathbf{s})} \left\{ \Delta(\mathbf{s}) + \sum_{\alpha} (\mathbf{r} - \mathbf{s})_{\alpha} \delta_{\alpha} \Delta + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (\mathbf{r} - \mathbf{s})_{\alpha} (\mathbf{r} - \mathbf{s})_{\beta} \delta_{\alpha} \delta_{\beta} \Delta \right\}, \\ \delta_{\alpha} = \left[ \frac{\partial}{\partial s} - \frac{2ie}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{s}) \right]_{\alpha}.$$

С хорошей точностью можно полностью пренебречь пространственной зависимостью  $\Delta$  и положить  $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta(\mathbf{l}) = \Delta(\mathbf{m}) = \Delta(\mathbf{s})$ . Наконец, для бесконечного однородного металла члены типа  $\int K_0(\mathbf{r}-\mathbf{s})(\mathbf{r}-\mathbf{s}) d\mathbf{r}$  обращаются в нуль в силу симметрии. Таким образом, приходим к уравнению

$$\Delta(\mathbf{s}) = Q \Delta(\mathbf{s}) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} L_{\alpha\beta} \delta_{\alpha} \delta_{\beta} \Delta(\mathbf{s}) + R |\Delta(\mathbf{s})|^2 \Delta(\mathbf{s}),$$

где

$$Q = \int K_0(\mathbf{s} - \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ L_{\alpha\beta} = \int K_0(\mathbf{s} - \mathbf{r}) (s_{\alpha} - r_{\alpha}) (s_{\beta} - r_{\beta}) d\mathbf{r}, \\ R = \int R(\mathbf{s}, \mathbf{r}, \mathbf{l}, \mathbf{m}) d\mathbf{r} d\mathbf{l} d\mathbf{m}.$$

Для кубического кристалла  $L_{\alpha\beta} = L \delta_{\alpha\beta}$  в этом случае уравнение совпадает по форме с уравнением Гинзбурга—Ландау. Введенные здесь коэффициенты  $Q$ ,  $L$  и  $R$  связаны с коэффициентами Гинзбурга-Ландау  $\alpha$ ,  $\beta$ .

### Обсуждение коэффициентов

Коэффициенты  $Q$  и  $R$  для случая, когда векторный потенциал  $\mathbf{A} = 0$  и  $\Delta = \text{const}$ , можно получить с помощью теории БКШ. Мы можем найти численные значения коэффициентов  $Q$  и  $R$ . Мы знаем, что  $\Delta = \text{const}$  при  $\mathbf{A} = 0$ ; в этом случае уравнение самосогласованности принимает вид

$$\Delta = N(0)V \int_0^{\hbar\omega_D} \Delta \frac{\text{th}(\beta\epsilon/2)}{\epsilon} d\epsilon.$$

$$r = r^2 + \lambda^2)^{1/2}.$$

Уравнение применимо как к чистым металлам, так и к сплавам. Разлагая правую часть этого уравнения в ряд по  $\Delta$  и выполняя интегрирование, получаем

$$Q = N(0)V \ln \frac{1,14 \hbar\omega_D}{k_B T} \approx 1 + N(0)V \left(1 - \frac{T}{T_c}\right),$$

$$R = -0,098 \frac{N(0)V}{(k_B T_c)^2}.$$

Наибольший интерес представляет коэффициент  $L$ , описывающий влияние пространственных изменений параметра  $\Delta$ . С помощью явного выражения для ядра Ко находим, что для чистого металла

$$L = \frac{\pi}{6} N(0)V v_F^2 k_B T_c \sum_{\omega} \frac{1}{|\omega|^3} = 0,033 N(0)V \left(\frac{\hbar v_F l}{k_B T_c}\right)^2, \quad l \gg \xi_0.$$

Для „грязного“ металла

$$L = \pi N(0)V D \frac{k_B T_c}{\hbar} \sum_{\omega} \frac{1}{\omega^2} = \frac{\pi}{12} N(0)V \frac{\hbar v_F l}{k_B T_c}, \quad l \ll \xi_0.$$

Эти результаты позволяют получить ряд полезных соотношений. Характерную длину  $\xi(T)$ , входящую в уравнение Гинзбурга -Ландау в отсутствие поля, можно получить:

$$\xi(T) = \left[ \frac{L}{2(Q-1)} \right]^{1/2}.$$

Она расходится как  $(1-T/T_c)^{-1/2}$  при  $T \rightarrow T_c$ .

Параметр Гинзбурга — Ландау равен для чистого металла:  $\kappa = 0,96 \lambda_L(0)/\xi_0$ .

Для „грязного“ металла

$$\kappa = 0,75 \frac{\lambda_L(0)}{l}, \quad l \ll \xi_0,$$

где

$$\lambda_L(0) = \left( \frac{mc^2}{4\pi ne^2} \right)^{1/2}$$

— лондоновская глубина проникновения для чистого металла при  $T = 0$ .

## 14 неделя. Разрушение сверхпроводимости магнитным полем

Рассмотрим подробнее с точки зрения термодинамики вопросы ослабления сверхпроводимости магнитным полем. Пусть длинный сверхпроводящий цилиндр из сверхпроводника первого рода помещен в однородное продольное поле  $H_0$ . Найдем то значение этого поля, при котором произойдет разрушение сверхпроводимости, т. е. найдем  $H_{cm}$ .

Если  $H_0 < H_{cm}$ , то существует эффект Мейсснера - Оксенфельда, т. е.  $B = 0$  и магнитный момент единицы объема цилиндра  $M$  равен

$$M = -H_0/4\pi.$$

При изменении внешнего поля  $H_0$  на величину  $dH_0$  источник магнитного поля совершит работу над единицей объема сверхпроводника, равную

$$-MdH_0 = H_0dH_0/4\pi.$$

Следовательно, при изменении поля от 0 до  $H_0$  источник поля совершит работу

$$-\int_0^{H_0} MdH_0 = H_0^2/4\pi$$

Эта работа запасена теперь в свободной энергии сверхпроводника, находящегося в магнитном поле  $H_0$ . Таким образом, если плотность свободной энергии сверхпроводника в отсутствие магнитного поля равна  $F_{s0}$ , то плотность свободной энергии сверхпроводника в магнитном поле равна

$$F_{sH} = F_{s0} + H_0^2/8\pi.$$

Переход в нормальное состояние произойдет тогда, когда плотность свободной энергии  $F_{sH}$  поднимется до уровня плотности свободной энергии нормального металла:  $F_{sH} = F_n$  при  $H_0 = H_{cm}$ . Это значит, что

$$F_n - F_{s0} = H_{cm}^2/8\pi.$$

Из этой формулы следует, что критическое поле массивного материала является мерой того, насколько сверхпроводящее состояние является энергетически более выгодным, чем нормальное, т.е. насколько свободная энергия сверхпроводящего состояния меньше свободной энергии нормального состояния. Поле  $H_{cm}$  часто называют критическим термодинамическим магнитным полем.

Мы уже использовали выражение для связи критического термодинамического поля с параметрами Гинзбурга-Ландау, и получили  $H_{cm}^2 = 4\pi\alpha^2/\beta$ , откуда следует вблизи критической температуры линейная зависимость от  $T$ , соответствующая эксперименту:

$$H_{cm} \sim (T_c - T)$$

В отличие от сверхпроводников первого рода, сверхпроводники второго рода не обнаруживают полного эффекта Мейсснера - Оксенфельда. Магнитное поле в них проникает, но весьма своеобразно.

Возьмем длинный цилиндр из сверхпроводника второго рода и поместим его в продольное внешнее магнитное поле. Начнем увеличивать это поле от нуля. Тогда мы обнаружим, что сначала цилиндр полностью выталкивает это поле, т. е. индукция внутри цилиндра равна нулю. Это значит, что сперва обнаруживается эффект Мейсснера - Оксенфельда. Однако, начиная с некоторого поля (назовем его первым критическим полем и обозначим  $H_{c1}$ ), внутри цилиндра начинает появляться конечная индукция  $B$ , которая увеличивается с увеличением внешнего поля  $H_0$ . Так будет

происходить до тех пор, пока среднее поле  $B$  внутри цилиндра не станет равным внешнему полю  $H_0$ . Это произойдет при так называемом втором критическом поле  $H_{c2}$ , при котором наш цилиндр перейдет в нормальное состояние. Правда, даже при  $H_0 \gg H_{c2}$  сверхпроводимость все-таки сохранится в тонком поверхностном слое. Но при  $H_0 = 1.69 H_{c2}$  сверхпроводимость и этого поверхностного слоя окажется разрушенной. Это поле называют третьим критическим и обозначают  $H_{c3}$ . Состояние сверхпроводника в полях между  $H_{c1}$  и  $H_{c2}$  называется смешанным или вихревым состоянием, поскольку наличие магнитной индукции в таком состоянии поддерживается многочисленными вихревыми токами в глубине сверхпроводника.

То, что сверхпроводники первого и второго рода могут совершенно по-разному реагировать на внешнее магнитное поле, происходит потому, что энергия границы раздела между нормальной и сверхпроводящей фазами  $\sigma_{ns}$  у сверхпроводников первого рода положительна, а у сверхпроводников второго рода отрицательна. Теперь мы можем понять причину этого. Оказывается, что в первом случае  $\lambda < \xi$ , а во втором случае  $\lambda \gg \xi$ . Более точно граница между сверхпроводниками первого и второго рода будет определена ниже. Начнем со сверхпроводника первого рода.

Итак, рассматривается плоская NS-граница сверхпроводника, находящегося в промежуточном состоянии. Пусть далеко слева от этой границы наблюдается чисто сверхпроводящее состояние, а далеко справа — нормальное. Граница расположена перпендикулярно оси  $x$ , магнитное поле приложено параллельно оси  $z$ . Поскольку мы рассматриваем левое сверхпроводящее полупространство, т.е. односвязный сверхпроводник, всегда можно выбрать так калибровку вектор-потенциала  $A$ , что волновая функция теории ГЛ будет вещественной. Кроме того, в силу простой геометрии задачи, все переменные будут зависеть только от  $x$ , а вектор  $A$  можно считать параллельным оси  $z$ . Начало координат  $x = 0$  выбрано в области границы.

Итак, формулируем исходные данные:

$$1) \mathbf{H} = (0, 0, H(x)),$$

$$2) \psi = \psi(x) \text{ — вещественная функция,}$$

$$3) A = (0, A(x), 0).$$

Учитывая это, исходные уравнения ГЛ можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} -\xi^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \left( \frac{2\pi\xi}{\Phi_0} \right)^2 A^2 \psi - \psi + \psi^3 &= 0, \\ d^2 A / dx^2 &= (\psi^2 / \lambda^2) A. \end{aligned}$$

Легко проверить, что первый интеграл этих уравнений будет

$$\begin{aligned} \left[ 1 - \left( \frac{2\pi\xi A}{\Phi_0} \right)^2 \right] \psi^2 - \frac{1}{2} \psi^4 + \\ + \left( \frac{2\pi\lambda\xi}{\Phi_0} \right)^2 \left( \frac{dA}{dx} \right)^2 + \xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 = C, \end{aligned}$$

где  $C$  — постоянная интегрирования. Ее мы легко найдем из граничных условий: при  $x \rightarrow -\infty$  имеем  $\psi \rightarrow 1, d\psi/dx \rightarrow 0, A \rightarrow 0$ . Получим далее, что  $C = 1/2$ . Отсюда, используя  $H_{cm} = \Phi_0 / 2\sqrt{2}\pi\lambda\xi$ , окончательно имеем

$$\left[ \left( \frac{2\pi\xi A}{\Phi_0} \right)^2 - 1 \right] \psi^2 + \frac{1}{2} \psi^4 = \xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \frac{H^2}{2H_{cm}^2} - \frac{1}{2}.$$

Перейдем непосредственно к вычислению энергии границы раздела между нормальной и сверхпроводящей фазами, приходящейся на единицу площади.

Когда мы будем рассматривать сверхпроводящий участок, надо будет точно определить, в каком внешнем магнитном поле он находится. Он является сверхпроводящим участком образца, находящегося в промежуточном состоянии. Следовательно, рядом с ним находится нормальный участок, по которому проходит магнитное поле напряженностью  $H_{cm}$ .

Итак, внешнее поле по отношению к сверхпроводящему участку будет всегда равно  $H_{cm}$ . Запишем теперь плотность гиббсовской свободной энергии сверхпроводящего участка где-то далеко слева от NS-границы. Далее, имеем

$$G_s = F_{s0} - HH_{cm}/4\pi.$$

Поскольку далеко слева от NS-границы  $H=0$ , имеем  $G_s = F_{s0}$ , где  $F_{s0}$ —плотность свободной энергии сверхпроводника в отсутствие магнитного поля. Далеко справа от NS-границы, т.е. в нормальном металле, где существует поле  $H_{cm}$ , плотность свободной энергии будет равна

$$F = F_n + H_{cm}^2/8\pi,$$

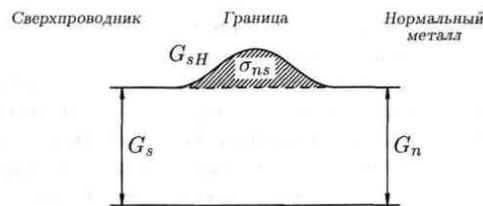
где второе слагаемое просто дает плотность энергии магнитного поля.

Отсюда плотность гиббсовской свободной энергии в нормальном слое будет

$$G_n = F - HH_{cm}/4\pi = F_n + H_{cm}^2/8\pi - H_{cm}^2/4\pi = F_n - H_{cm}^2/8\pi = F_{s0}.$$

Здесь мы воспользовались условием, что в нормальном слое  $H = H_{cm}$ , и известным соотношением между  $F_n$  и  $F_{s0}$ :

$$F_n - F_{s0} = H_{cm}^2/8\pi.$$



Таким образом, в условиях равновесия плотность гиббсовской свободной энергии далеко слева от границы равна соответствующей плотности далеко справа от границы.

Плотность гиббсовской свободной энергии на границе может отличаться от уровня  $G_n$ . Естественно тогда поверхностную энергию границы раздела  $\sigma_{ns}$  определить так

$$\sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} (G_{sH} - G_n) dx,$$

Где

$$G_{sH} = F_{sH} - HH_{cm}/4\pi$$

$$F_{sH} = F + \frac{H_{cm}^2}{4\pi} \left[ -|\psi|^2 + \frac{1}{2}|\psi|^4 + \xi^2 \left| i\nabla\psi + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\psi \right|^2 \right] + \frac{H^2}{8\pi},$$

$$G_n = F_n - H_{cm}^2 / 8\pi$$

Формула следует из общей формулы для гиббсовской свободной энергии ( $H$  — напряженность магнитного поля в сверхпроводнике).

Получаем:

$$\sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{H_{cm}^2}{4\pi} \left[ -|\psi|^2 + \frac{1}{2}|\psi|^4 + \xi^2 \left| i\nabla\psi + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A}\psi \right|^2 \right] + \frac{H^2}{8\pi} - \frac{HH_{cm}}{4\pi} + \frac{H_{cm}^2}{8\pi} \right\} dx.$$

Поскольку  $\mathbf{A} = (0, A, 0)$ , а  $\psi$  — вещественная функция, имеем

$$\sigma_{ns} = \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{H_{cm}^2}{4\pi} \left[ -\psi^2 + \frac{1}{2}\psi^4 + \xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \left( \frac{2\pi\xi A}{\Phi_0} \right)^2 \psi^2 \right] + \frac{H^2}{8\pi} - \frac{HH_{cm}}{4\pi} + \frac{H_{cm}^2}{8\pi} \right\} dx.$$

Получим окончательно:

$$\sigma_{ns} = \frac{H_{cm}^2}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \xi^2 \left( \frac{d\psi}{dx} \right)^2 + \frac{H(H - H_{cm})}{2H_{cm}^2} \right] dx.$$

Проанализируем полученный результат. Прежде всего, отметим, что поле, проникшее в сверхпроводящую область, всегда меньше поля на ее границе, т.е. поля  $H_{cm}$ , поэтому второе слагаемое в квадратных скобках всегда отрицательно. Теперь понятно, что в теории Лондонов  $\sigma_{ns} < 0$ , так как там не учитываются квантовые эффекты и слагаемое  $\xi^2 (d\psi/dx)^2$  отсутствует.

Теория ГЛ снимает эту трудность теории Лондонов. Учет квантовых эффектов приводит к появлению положительного слагаемого  $\xi^2 (d\psi/dx)^2$ , которое может обеспечить положительность энергии  $\sigma_{ns}$ .

Проведем теперь оценки. В области перехода от  $N$  к  $S$ -фазе параметр порядка меняется от нуля до единицы. Это изменение происходит на расстоянии порядка длины когерентности  $\xi$ . Поэтому  $d\psi/dx \sim 1/\xi$  и  $\xi^2 (d\psi/dx)^2 \sim 1$ . Это слагаемое отлично от нуля в области границы на длине  $x \sim \xi$ . Поэтому

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 (d\psi/dx)^2 dx \sim \xi.$$

Слагаемое  $H(H - H_{cm})/2H_{cm}^2$  в области перехода достигает значения порядка -1 и обращается в нуль как в  $S$ -, так и в  $N$ -фазе. Область, где это слагаемое отлично от нуля, простирается на расстояние порядка глубины проникновения магнитного поля  $\lambda$ . Поэтому вклад этого слагаемого в интеграл будет порядка  $-\lambda$ .

Рассмотрим два предельных случая.

1) Случай  $\lambda \ll 1$ , т.е.  $\lambda \ll \xi$ . Тогда главный вклад в интеграл дает градиентный член и

$$\sigma_{ns} \sim H_{cm}^2 \xi > 0.$$

Точный расчет интеграла по теории ГЛ дает

$$\sigma_{ns} = 1.89 \frac{H_{cm}^2}{8\pi} \xi$$

2) Случай  $\kappa \gg 1$ , т.е.  $\lambda \gg \xi$ . Тогда главный вклад в интеграл дает слагаемое  $H(H - H_{cm})/2H_{cm}^2$  и энергия границы будет порядка

$$\sigma_{ns} \sim -H_{cm}^2 \lambda$$

Точный расчет дает

$$\sigma_{ns} = -\frac{H_{cm}^2}{8\pi} \lambda$$

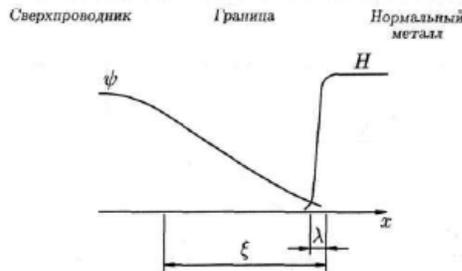
Таким образом, качественная оценка поверхностной свободной энергии на границе фаз:

$$\sigma_{ns} \approx |\alpha \psi^2| \xi - \lambda H_{cm}^2 / 8\pi ;$$

где первая часть - проигрыш энергии за счет градиента параметра порядка, а второй - выигрыш за счет ослабления магнитного поля внутри сверхпроводника.

Теперь обсудим физическую интерпретацию полученных результатов.

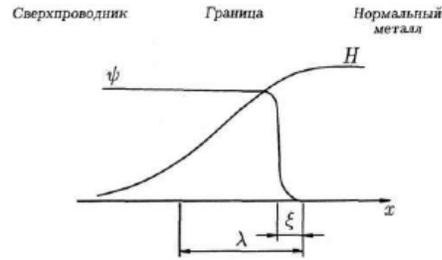
1) Случай  $\kappa \ll 1$ ,  $\lambda \ll \xi$ . На рис. показано изменение параметра порядка  $\psi$  в области NS-границы и изменение магнитного поля. Первое происходит на расстоянии  $\xi$ , а второе — на расстоянии  $\lambda$ . В этом случае возникает область толщиной порядка  $\xi$ , где параметр порядка уже достаточно мал, а магнитное поле отсутствует. Этот участок свободен от магнитного поля, но по сравнению со сверхпроводником имеет очень малый параметр порядка, что должно увеличить энергию этого участка по сравнению с более далекими влево участками сверхпроводника. Другими словами, энергия этого участка больше энергии сверхпроводящих участков на ту величину энергии, которую нужно было затратить, чтобы разорвать куперовские пары в этой области и, тем самым, понизить величину параметра порядка  $\psi$ . Плотность этой энергии равна  $H_{cm}^2/8\pi$ , а энергия участка имеет величину порядка  $H_{cm}^2 \xi / 8\pi$ .



2) Случай  $\kappa \gg 1$ ,  $\lambda \gg \xi$ . Функции  $\psi(x)$  и  $H(x)$  для этого случая показаны на рис. Теперь  $\psi$  изменяется значительно быстрее, чем магнитное поле, и возникает область толщиной порядка  $\lambda$ , в которой еще сохраняется и сравнительно высокое магнитное поле, и величина  $\psi \sim 1$ . Присутствие магнитного поля заставляет сравнивать этот участок с нормальным металлом. В отличие от последнего, электроны в нем соединены в куперовские пары ( $\psi \sim 1$ ) и поэтому его энергия меньше энергии правой нормальной области на эту энергию конденсации. Поскольку размер этой области порядка  $\lambda$ , а плотность энергии конденсации равна  $H_{cm}^2/8\pi$ , ясно, что  $\sigma_{ns} \sim -(H_{cm}^2/8\pi) \lambda$ .

Посмотрев с другой точки зрения, можно сказать, что в случае  $\kappa \gg 1$  в области NS-границы существует область толщиной порядка  $\lambda$  с  $\psi \sim 1$ , в которую проникло магнитное поле. Это зна-

чит, что энергия всей системы уменьшилась на величину работы, которая была совершена при продвижении поля  $H_{cm}$  на расстояние  $\lambda$ .



Если  $\kappa \ll 1$ , то  $\sigma_{ns} > 0$ . Такие материалы называются сверхпроводниками первого рода (СП1).

Если  $\kappa \gg 1$ , то  $\sigma_{ns} < 0$ . Такие материалы называются сверхпроводниками второго рода (СП2).

Ясно, что при каком-то значении  $\kappa \sim 1$  энергия  $\sigma_{ns}$  должна обратиться в нуль. Точный расчет показывает, что это произойдет при  $\kappa = 1/\sqrt{2}$ .

Докажем, что  $\kappa = 1/\sqrt{2}$  - точное критическое значение параметра ГЛ, при котором поверхностная энергия сверхпроводника равна нулю. Исходим из вида поверхностной энергии в одномерном случае, выраженной через безразмерный параметр порядка  $f (\equiv \psi)$  и безразмерное магнитное поле  $h (= H/2H_{cm})$ :

$$\sigma = \lambda(T) \frac{H_c^2}{8\pi} 2\delta; \quad 2\delta = \int_{-\infty}^{\infty} dz [1 - f^4 + 2h^2 - 2\sqrt{2}h];$$

Напомним, что в размерном виде это выражение имеет вид:

$$\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dx [-\beta\psi^4 / 2 + (H - H_c)^2 / 8\pi]$$

В одномерной ситуации немного преобразуем безразмерные уравнения ГЛ (в обозначениях  $f$  и  $h$ ):

$$-\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{1}{f^3} \left[ \frac{dh}{dz} \right]^2 = f - f^3; \quad f^2 h = -\frac{2}{f} \frac{df}{dz} \frac{dh}{dz} + \frac{d^2 h}{dz^2}$$

Зануляя подинтегральное уравнение в поверхностной энергии, находим связь поля и параметра порядка:  $h = (1 - f^2) / \sqrt{2}$ . Подставляя его в уравнения ГЛ, имеем:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\kappa^2} \frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{2}{f^3} \left[ \frac{df}{dz} \right]^2 &= f - f^3; \\ -2 \frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{2}{f^3} \left[ \frac{df}{dz} \right]^2 &= f - f^3; \end{aligned}$$

Уравнения совместны, если  $\kappa = 1/\sqrt{2}$ , что и требовалось доказать.

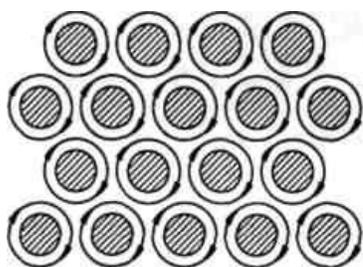
Впервые термин «сверхпроводник второго рода» был введен А.А.Абрикосовым в его классической работе (1957), в которой на базе теории ГЛ была дана последовательная феноменологическая теория сверхпроводников второго рода и объяснены их магнитные свойства. Развитие физики сверхпроводников в последующие годы блестяще подтвердило теоретические предсказания.

Мы уже знаем, что у сверхпроводников второго рода энергия границы раздела между нормальной и сверхпроводящей фазами  $\sigma_{ns} < 0$ . Это значит, что при определенных условиях им энергетически выгодно расслоиться в магнитном поле на области нормальной и сверхпроводящей фаз.



Действительно, кривая намагничивания сверхпроводника второго рода в параллельном поле имеет вид, изображенный на рис. Пока внешнее поле  $H_0 < H_{c1}$ , среднее поле внутри образца  $B = 0$ . Однако при  $H_{c1} < H_0 < H_{c2}$  внутри сверхпроводника появляется магнитное поле  $B$ , но оно меньше поля  $H_0$ , и сверхпроводимость все еще существует. При поле  $H_0 = H_{c2}$  среднее поле  $B$  становится равным  $H_0$  и сверхпроводимость в объеме пропадает. Таким образом, у сверхпроводников второго рода отсутствует эффект Мейсснера-Оксенфельда.

Проникновение магнитного поля в сверхпроводник второго рода происходит весьма своеобразно — в виде квантованных вихревых нитей. Каждая такая нить (или вихрь) имеет нормальную сердцевину, которая представляет собой длинный тонкий нормальный цилиндр, вытянутый вдоль направления внешнего магнитного поля. Параметр порядка  $\psi$  в нем равен нулю. Радиус этого цилиндра — порядка длины когерентности  $\xi$ . Вокруг этого нормального цилиндра течет незатухающий сверхпроводящий ток (сверхток), ориентированный так, чтобы создаваемое им магнитное поле было направлено вдоль нормальной сердцевины и совпадало по направлению с внешним магнитным полем. Вихревой ток захватывает область радиуса порядка  $\lambda$  — глубины проникновения. Это может быть область, существенно превышающая размер  $\xi$ , т. к. у сверхпроводников второго рода может быть  $\lambda > \xi$ .



Один вихрь несет один квант магнитного потока. Проникновение вихрей в сверхпроводник становится энергетически выгодным при  $H_0 > H_{c1}$ . При этом вихри, проникнув в сверхпроводник, располагаются друг от друга на расстоянии порядка  $\lambda$ , образуя в поперечном сечении правильную треугольную решетку. Возникает смешанное состояние, т.е. состояние, которое можно охарактеризовать частичным проникновением магнитного поля в образец. При этом в образце существуют вихревые нити. Это состояние наблюдается в интервале полей от  $H_{c1}$  (первое критическое поле) до  $H_{c2}$  (второе критическое поле).

Возникнув при поле  $H_{c1}$ , вихревая решетка продолжает существовать и в более сильных полях. При этом ее период уменьшается, плотность вихрей увеличивается. Наконец, при поле  $H_{c2}$  их плотность становится так велика, что расстояние между ближайшими вихрями, т. е. период решетки, становится порядка  $\xi$ . Это значит, что вихри соприкасаются своими нормальными серд-

цевинами и параметр порядка  $\psi$  обращается в нуль по всему объему образца. Происходит фазовый переход второго рода в нормальное состояние.

Существование смешанного состояния в сверхпроводниках второго рода было надежно подтверждено экспериментально. Кроме различных косвенных подтверждений, существуют блестящие прямые эксперименты. Наблюдают вихревую картину с помощью рассеяния нейтронов, имеющих магнитный момент и образующих дифракционную картину, отражающую решетку Абрикосова в реальном пространстве. Интересны методы магнитного декорирования - напыление тонкого слоя ферромагнитного порошка на поверхность сверхпроводника. В последнее время наблюдают перемагничивание сверхпроводников 2 рода с помощью системы датчиков Холла, а также методами магнитооптики (на основе эффекта Фарадея).

Рассмотрим одиночный вихрь, помещенный в безграничный сверхпроводник, и представляющий собой нормальную сердцевину радиуса порядка  $\xi$  и область вихревых токов, простирающуюся на расстояние порядка  $\lambda$ . Пусть постоянная теории ГЛ  $\kappa \gg 1$ . Значит,  $\lambda \gg \xi$ . На расстоянии  $r \gg \xi$  имеем  $|\psi|^2 = 1$ . Будем заниматься именно этой частью вихря.

Уравнение ГЛ для вектора-потенциала можно (учитывая, что  $|\psi|^2 = 1$ ) записать в виде

$$\text{rot rot } \mathbf{A} = \frac{1}{\lambda^2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \theta - \mathbf{A} \right).$$

Учитывая, что  $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{H}$ , получим

$$\text{rot } \mathbf{H} = \frac{1}{\lambda^2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \theta - \mathbf{A} \right).$$

Взяв ротор от обеих частей этого уравнения, получим

$$\mathbf{H} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{H} = \frac{\Phi_0}{2\pi} \text{rot } \nabla \theta. \quad (28.3)$$

В любой точке вихря, кроме его центра,  $\text{rot } \nabla \theta = 0$ , т. к. ротор от градиента любой функции равен нулю. Но в центре вихря находится особая точка. Там  $|\nabla \theta| \rightarrow \infty$ . Возьмем интеграл от этого выражения по поверхности круга некоторого небольшого радиуса с центром в центре вихря:

$$\int_{\odot} \text{rot } \nabla \theta \, dS.$$

По теореме Стокса

$$\int_{\odot} \text{rot } \nabla \theta \, d\mathbf{S} = \oint \nabla \theta \, d\mathbf{l},$$

где контурный интеграл берется по контуру нашего круга. Поскольку при обходе вокруг центра вихря фаза изменяется на  $2\pi$  (каждый вихрь несет один квант магнитного потока), имеем равенство

$$\oint \text{rot } \nabla \theta \, d\mathbf{S} = 2\pi$$

Итак,  $\text{rot } \nabla \theta$  — это такая функция, которая всюду, кроме центра вихря, равна нулю. В центре вихря она равна бесконечности, но ее интеграл равен  $2\pi$ . Это полностью аналогично поведению двумерной  $\delta$ -функции, и мы можем записать следующее равенство:

$$\text{rot } \nabla \theta = 2\pi \delta(r) e_n$$

где  $e_n$  — единичный вектор, направленный вдоль вихря. В результате мы имеем следующее уравнение:

$$\mathbf{H} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{H} = \Phi_0 \delta(\mathbf{r}) e_n.$$

Граничное условие для этого уравнения:  $H(\infty) = 0$ . Решение этого уравнения:

$$H = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} K_0(r/\lambda),$$

где  $K_0$  — функция Макдональда, или функция Ганкеля от мнимого аргумента.

Напомним асимптотическое поведение этой функции:

$$K_0(z) \propto \begin{cases} \ln(1/z) & \text{при } z \ll 1, \\ e^{-z}/z^{1/2} & \text{при } z \gg 1. \end{cases}$$

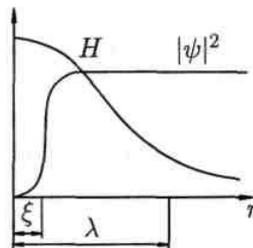
Из формул следует, что в центре вихря магнитное поле стремится к бесконечности. В действительности, однако, это не так, поскольку эти формулы уже не справедливы вблизи нормальной сердцевинки вихря (радиуса порядка  $\xi$ ). Поэтому поле вихря в его центре можно получить с логарифмической точностью, обрезав логарифмическую расходимость формулы на радиусе  $r = \xi$ :

$$H(0) \simeq \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} \ln \kappa.$$

Более точно, учитывая изменение  $\psi(r)$  в области сердцевинки вихря, величину  $H(0)$  можно получить, численно проинтегрировав уравнения ГЛ:

$$H(0) = \frac{\Phi_0}{2\pi\lambda^2} (\ln \kappa - 0.28).$$

Поправка малосущественна, так как вообще весь расчет ведется в предположении, что  $\kappa \gg 1$ .



### Первое критическое поле

Найдем первое критическое поле  $H_{c1}$ , т.е. то внешнее поле, при котором впервые становится энергетически выгодным существование вихря внутри сверхпроводника второго рода (иногда его называют также нижним критическим полем). Для этого надо сперва найти свободную энергию

вихря, точнее— свободную энергию сверхпроводника с вихрем  $\mathcal{E}_1$ , отсчитанную от свободной энергии сверхпроводника без вихря. Будет поэтому можно воспользоваться лондоновским выражением для свободной энергии:

$$\epsilon_1 = \frac{1}{8\pi} \int [\mathbf{H}^2 + \lambda^2 (\text{rot } \mathbf{H})^2] dV,$$

где интеграл берется по пространству между двумя бесконечными параллельными плоскостями, перпендикулярными вихревой нити и отстоящими на единичное расстояние друг от друга. Выражение есть просто сумма магнитной и кинетической энергий сверхпроводящих электронов вихря на единицу его длины. В этом пределе вкладом градиентов параметра порядка можно пренебречь. Воспользовавшись формулой

$$(\text{rot } \mathbf{H})^2 = \mathbf{H} \text{ rot rot } \mathbf{H} - \text{div}[\text{rot } \mathbf{H}, \mathbf{H}],$$

имеем

$$\epsilon_1 = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{H}(\mathbf{H} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{H}) dV - \lambda^2 \int \text{div}[\text{rot } \mathbf{H}, \mathbf{H}] dV.$$

Воспользовавшись теоремой Гаусса, преобразуем второй интеграл в поверхностный:

$$\int \text{div}[\text{rot } \mathbf{H}, \mathbf{H}] dV = \oint [\text{rot } \mathbf{H}, \mathbf{H}] d\mathbf{S},$$

где поверхностный интеграл берется по бесконечно удаленной поверхности и по плоскостям  $z = 0$  и  $z = 1$  (предполагается, что вихрь направлен вдоль оси  $z$ ). Поскольку вектор  $\mathbf{H}$  перпендикулярен плоскостям  $z = 0$  и  $z = 1$ , то вектор  $[\text{rot } \mathbf{H}, \mathbf{H}]$  лежит в плоскостях  $z = 0$  и  $z = 1$ , а вектор  $d\mathbf{S}$  им перпендикулярен, поэтому подынтегральное выражение на этих плоскостях равно нулю. С другой стороны,  $H \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , поэтому подынтегральное выражение равно нулю и на бесконечно удаленной поверхности. Поэтому

$$\int \text{div}[\text{rot } \mathbf{H}, \mathbf{H}] dV = 0$$

$$\epsilon_1 = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{H}(\mathbf{H} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{H}) dV.$$

Имеем:

$$\epsilon_1 = \frac{\Phi_0}{8\pi} H(0).$$

Далее,

$$\epsilon_1 = \left( \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \ln \kappa.$$

При выводе этой формулы мы не учли дополнительный малый вклад в энергию вихря, который возникает за счет того, что сердцевина вихря нормальная. Действительно, плотность свободной энергии сердцевинки больше плотности энергии окружающей ее среды на величину  $F_n - F_{s0} = H_{cm}^2/8\pi$ , т. е. на величину энергии конденсации. Поэтому дополнительная, неучтенная в формуле энергия равна  $(H_{cm}^2/8\pi) \pi \xi^2$ , если радиус нормальной сердцевинки вихря принять равным  $\xi$ . Используя формулу для термодинамического критического поля, нетрудно показать, что эта энергия равна

$$\frac{1}{4} \left( \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \ll \left( \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 \ln \kappa.$$

Более точный учет вклада от энергии конденсации нормальной сердцевины дает следующую окончательную формулу для энергии вихревой нити:

$$\epsilon_1 = \left( \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda} \right)^2 (\ln \kappa + 0.50).$$

Итак, из последней формулы следует, что энергия одиночного вихря положительна, т. е. без внешнего поля вихрю энергетически невыгодно оставаться внутри сверхпроводника. Следовательно, если на массивный сверхпроводник второго рода наложить слабое магнитное поле, вихри еще не образуются — невыгодно. Будет обычное мејсснеровское состояние, как и в сверхпроводнике первого рода. Найдем, при каком же поле станет впервые выгодным образование вихрей в сверхпроводнике второго рода.

Мы уже знаем, что для сверхпроводника в заданном внешнем магнитном поле в состоянии равновесия минимальной будет гіббсовская свободная энергия  $G$ , которая для единицы длины вихря будет равна

$$G = \epsilon_1 - \int \frac{BH_0}{4\pi} dV,$$

где  $H_0$  — внешнее магнитное поле, а свободная энергия единицы длины вихря равна  $\epsilon_1$ .

Действительно, плотность гіббсовской свободной энергии равна

$$G = F - BH_0/4\pi,$$

где  $F$  — плотность свободной энергии. Поскольку  $H_0$  — это внешнее магнитное поле, его можно вынести за знак интеграла. Тогда в силу того, что вихрь несет один квант магнитного потока  $\Phi_0$ , имеем

$$G = \epsilon_1 - \Phi_0 H_0 / 4\pi.$$

Из этой формулы ясно видно, что для достаточно слабого внешнего поля  $H_0$  имеем  $G > 0$  и образование вихря энергетически невыгодно. Но существует такое поле  $H_{c1}$ , начиная с которого  $G$  становится отрицательным, т.е. вихрь становится энергетически выгодным образованием.

$$H_{c1} = 4\pi\epsilon_1 / \Phi_0$$

Получим первое критическое поле сверхпроводника второго рода:

$$H_{c1} = \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2} (\ln \kappa + 0.50).$$

Сравнивая формулы, видим, что первое критическое поле примерно в 2 раза меньше поля в центре одиночного вихря. Учитывая температурную зависимость для  $\lambda(T)$  вблизи  $T_c$  получаем, что первое критическое поле линейно убывает при  $T \rightarrow T_c$ ,

$$H_{c1}(T \rightarrow T_c) \sim H_{c1}(0)(T_c - T).$$

Эти оценки справедливы для сверхпроводников с  $\kappa \gg 1$  и имеют логарифмическую точность.

Удобна еще одна оценка

$$H_{c1} = H_{cm} (\ln \kappa + 0.50) / \sqrt{2\kappa}$$

Т.е. первое критическое поле меньше термодинамического в  $\sim \sqrt{2\kappa}$ -раз.

Поле  $H_{c1}$  — сравнительно слабое поле. Действительно, пусть  $\kappa \sim 30$ ,  $H_{cm} \sim 10^3$  Э, тогда  $H_{c1} \sim 100$  Э.

### Второе критическое поле

В однородном сверхпроводнике второго рода смешанное состояние характеризуется правильной, обычно треугольной, вихревой решеткой. По мере увеличения внешнего поля период решетки уменьшается, и когда он уменьшается до величины порядка длины когерентности  $\xi$ , происходит фазовый переход второго рода из смешанного состояния в нормальное. Это происходит, когда внешнее поле достигает значения второго критического поля  $H_{c2}$  (его также называют верхним критическим полем).

Не проводя точного расчета, мы можем оценить порядок величины  $H_{c2}$  на основании следующих соображений. Для двух рядом расположенных вихрей, находящихся на расстоянии  $\xi$  друг от друга, это расстояние  $\xi$  будет шириной сверхпроводящего промежутка между двумя нормальными сердцевинами. Теперь весь магнитный поток, проникающий в сверхпроводник, распределен так, что на площадь  $\sim \xi^2$  приходится квант магнитного потока. Это и есть простая оценка второго критического поля:

$$H_{c2} \sim \Phi_0 / \xi^2 \sim \kappa H_{cm}.$$

Точный расчет добавляет только численный коэффициент:

$$H_{c2} = \sqrt{2} \kappa H_{cm}.$$

Второе критическое поле может достигать значительных величин. Так, при  $\kappa \sim 100$  и  $H_{cm} \sim 10^3$  Э имеем  $H_{c2} \sim 10^5$  Э.

Формула через квант потока очень удобна для определения длины когерентности  $\xi$ . Учитывая температурную зависимость  $\xi$ , находим, что вблизи  $T_c$  второе критическое поле обращается в нуль линейным образом,  $H_{c2}(T) \sim (T_c - T)$ , так же, как и  $H_{c1}(T)$ .

Покажем теперь, как вывести формулу для температур вблизи  $T_c$ , где можно пользоваться теорией Гинзбурга-Ландау. Рассмотрим первое уравнение ГЛ. Вблизи точки перехода параметр порядка мал, и можно пренебречь кубичным членом. Тогда найдется его решение  $\psi_0$ , что

$$\xi^2 \left( i\nabla + \frac{2\pi}{\Phi_0} \mathbf{A} \right)^2 \psi_0 = (1 + E_0) \psi_0$$

с «собственным числом»  $E_0 < 0$ . Но уравнение формально совпадает с уравнением Шредингера для частицы с зарядом  $e' = 2e$  и массой  $m' = \hbar^2 / 2\xi^2$ , находящейся в магнитном поле  $B$ . Решение — уровни энергии квантуются (уровни Ландау), и низший энергетический уровень такой частицы есть  $\hbar e' B / 2m' c = 2eB \xi^2 / \hbar c$ , так что условие  $E_0 < 0$  выполнено как раз при  $B < H_{c2}$ .

Заметим, что с приближением  $B$  к  $H_{c2}$  квадрат модуля параметра порядка убывает как  $|\psi|^2 \sim E_0 = 1 - B/H_{c2}$ .

В заключение раздела приведем полезное для оценок соотношение

$$H_{c1} H_{c2} \sim \ln \kappa H_{cm}^2 \sim H_{cm}^2$$

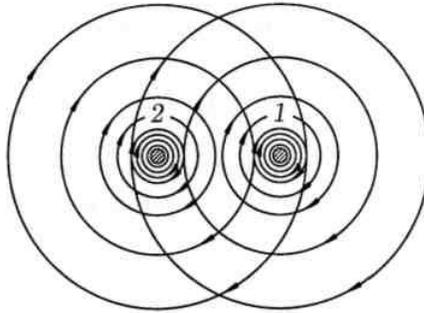
## 15 неделя. Взаимодействие вихревых нитей

### Взаимодействие вихрей

В смешанном состоянии вихрей много и они сильно друг с другом взаимодействуют.

Рассмотрим пару параллельных вихрей одного направления в безграничном сверхпроводнике. Пусть, как и раньше,  $\kappa \gg 1$ . Пока расстояние между ними больше  $\lambda$ , они не «чувствуют» друг друга. Но вот расстояние сократилось до величины, меньшей  $\lambda$ . Тогда сердцевина первого вихря оказывается в области сверхтоков другого вихря и наоборот. Эта ситуация изображена на рис. Из этого рисунка видно, что скорости сверхтекучей компоненты электронной жидкости справа от первого вихря и слева от второго складываются, а между вихрями — вычитаются. Это значит, что в области, непосредственно примыкающей к сердцевине первого вихря (справа от нее), давление по закону Бернулли меньше, чем слева от сердцевины. Следовательно, на сердцевину первого вихря действует разность бернуллиевских давлений слева направо. Проведя аналогичное рассмотрение для второго вихря, увидим, что одноименные параллельные вихри отталкиваются. При этом сила взаимодействия оказывается приложенной только к нормальной сердцевине.

Приведем теперь расчет силы взаимодействия двух вихрей. Пусть координаты сердцевины вихрей 1 и 2 будут соответственно  $r_1$  и  $r_2$ . Энергия системы двух вихрей в сверхпроводнике, отсчитанная от энергии этого же сверхпроводника



$$\mathcal{F} = \frac{1}{8\pi} \int [\mathbf{H}^2 + \lambda^2 (\text{rot } \mathbf{H})^2] dV.$$

Здесь  $\mathbf{H}$  — полное магнитное поле, созданное системой двух вихрей. Это поле должно удовлетворять уравнению, которое для системы двух вихрей будет

$$\mathbf{H} + \lambda^2 \text{rot rot } \mathbf{H} = \Phi_0 [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2)] \mathbf{e}_z.$$

Проведя в точности все преобразования, которые были проделаны при выводе энергии одиночного вихря, получим следующее выражение:

$$\mathcal{F} = \frac{\Phi_0}{8\pi} (H(\mathbf{r}_1) + H(\mathbf{r}_2)).$$

Поле  $H(r_1)$  — это поле в центре первого вихря. Оно состоит из поля, созданного в этом центре самим первым вихрем, и из поля  $H_{12}(x)$ , созданного там вторым вихрем, отстоящим от первого на расстояние  $x = |r_1 - r_2|$ . То же можно сказать и о поле  $H(r_2)$ . Тогда следует, что

$$\mathcal{F} = 2\epsilon_1 + \frac{\Phi_0}{8\pi} 2H_{12}(x),$$

где  $\epsilon_1$  — энергия одиночного вихря.

Смысл формулы очевиден: первое слагаемое — энергия двух не взаимодействующих вихрей, второе слагаемое — энергия их взаимодействия. Обозначим ее через  $U(x)$ :

$$U(x) = \frac{\Phi_0 H_{12}(x)}{4\pi} = \frac{\Phi_0^2}{8\pi^2 \lambda^2} K_0\left(\frac{x}{\lambda}\right)$$

Сила взаимодействия двух вихрей, приходящаяся на единицу их длины, очевидно, равна

$$f = -\frac{dU}{dx} = -\frac{\Phi_0}{4\pi} \frac{dH_{12}}{dx}.$$

Учитывая, что для двух параллельных вихрей, согласно уравнениям Максвелла,

$$\frac{dH_{12}}{dx} = \frac{4\pi}{c} j_{12}(x),$$

$j_{12}(x)$  — плотность тока, наведенного первым вихрем в точке, где находится сердцевина второго вихря (или наоборот), имеем

$$|f| = \frac{1}{c} j_{12} \Phi_0.$$

Эта формула справедлива и в значительно более общем случае: если вихрь обтекается каким-то сторонним током  $j$ , то на единицу длины его сердцевины действует сила (ее часто называют «силой Лоренца»)

$$\mathbf{f}_L = \frac{1}{c} [\mathbf{j} \Phi_0],$$

где  $j$  — плотность стороннего тока в месте, где расположена сердцевина вихря,  $\Phi_0 = \mathbf{e}_n \Phi_0$ .

### Обратимый магнитный момент сверхпроводника второго рода

Найдем выражение для магнитного момента единицы объема сверхпроводника второго рода, когда он находится в смешанном состоянии. Иными словами, мы будем искать зависимость  $M(H)$ .

Рассчитаем приближенную зависимость  $M(H)$  вблизи  $H_{c2}$ , используя модельную ситуацию: массивный цилиндр из сверхпроводника второго рода в продольном магнитном поле, с длиной когерентности, монотонно возрастающей к границам цилиндра (подход Шмида). Кратко опишем здесь ход решения.

Полагаем цилиндрическую геометрию, и пусть  $\xi = \xi(x)$  и монотонно возрастает от центра,  $\lambda \neq \lambda(x)$ ;  $\lambda \gg \xi$ . Тогда  $H_{c2} = \Phi_0 / 2\pi\xi^2$  — монотонно спадает, и  $B=B(x)$ . Далее,  $j=[c/4\pi] dB/dx = cdM/dx$ . На каждый вихрь действует сила Лоренца  $F_L = j\Phi_0/c = \Phi_0 dM/dx$ . С другой стороны, она равна градиенту от энергии одиночного вихря  $F = -\nabla \mathcal{E} = -\nabla[(\Phi_0 / 4\pi\lambda)^2 \ln(\lambda / \xi)]$ . Приравнявая силы, и учитывая только зависимость корреляционной длины от координаты, находим:

$$M = \Phi_0 (4\pi\lambda)^{-2} \ln(\xi / x_0)].$$

Здесь  $x_0$  — константа интегрирования. Очевидно, что она зависит как от параметра от внешнего поля  $H$ . Есть точка  $x_0$ , где  $M(x_0)=0 \rightarrow x_0 = \xi$ . В этой точке  $H = H_{c2} = \Phi_0 / 2\pi\xi_0^2$ . Тогда в произвольной точке  $x < x_0$ :  $\xi / x_0 = \sqrt{H / H_{c2}}$ . Подставляя это в выражение для магнитного момента, и разлагая поле по отклонению от второго критического, имеем окончательно:

$$-4\pi M = (H_{c2} - H) / 4\kappa^2$$

Полезно сравнить с точным:

$$-4\pi M = (H_{c2} - H) / [\beta_A(2\kappa^2 - 1)].$$

полученным Абрикосовым, причем  $\beta_A = 1.16$ .

Легко видеть, что при  $\kappa \gg 1$  можно пренебречь единицей в круглых скобках и тогда точная формула отличается от приближенной только коэффициентом порядка единицы.

Полезно обсудить вопрос, что такое  $H_{cm}$  для сверхпроводника второго рода. В сверхпроводнике первого рода это критическое поле массивного материала. В этом поле сверхпроводник переходит в нормальное состояние. А что же происходит со сверхпроводником второго рода в поле  $H_{cm}$ . Ответ состоит в том, что ничего особенного со сверхпроводником второго рода в поле  $H_{cm}$  не происходит. На кривой намагничивания точка  $H_0 = H_{cm}$  никак не выделена. Для сверхпроводника второго рода величину  $H_{cm}$  надо рассматривать просто как меру выгодности сверхпроводящего состояния по сравнению с нормальным для данного материала в отсутствие магнитного поля:

$$F_n - F_{s0} = H_{cm}^2 / 8\pi.$$

Эту же мысль можно пояснить по-другому. Переход сверхпроводника второго рода в нормальное состояние произойдет тогда, когда на его намагничивание будет затрачена работа, равная  $F_n - F_{s0}$ :

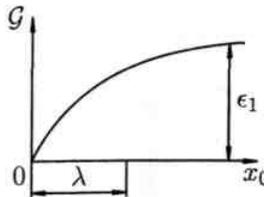
$$-\int_0^{H_{c2}} M dH_0 = H_{cm}^2 / 8\pi.$$

Отсюда получим следующее определение  $H_{cm}$  для сверхпроводника второго рода:

$$H_{cm}^2 = 2 \int_0^{H_{c2}} (H_0 - B(H_0)) dH_0.$$

Выражение называют теоремой площадей, т.к. если формально заменить всю кривую намагничивания  $-4\pi M(H)$  мейсснеровской прямой вплоть до  $H_{cm}$ , то площади под точной кривой и под этой прямой совпадут.

Для проникновения вихрей внутрь им нужно преодолеть некоторый энергетический барьер у поверхности сверхпроводника.



Рассмотрим плоскую идеально гладкую поверхность сверхпроводника и одиночный вихрь внутри образца, параллельный этой поверхности. Для удобства расчетов будем предполагать, что  $\kappa \gg 1$ . Внешнее поле положим пока равным нулю. Гиббсовская свободная энергия  $G$  такого сверхпроводника с вихрем изображена на рис. как функция расстояния  $x_0$  от сердцевины вихря до поверхности. Из этого рисунка следует прежде всего, что такой одиночный вихрь без внешнего поля, как и следовало ожидать, будет неустойчивым и что на достаточно больших расстояниях от

поверхности  $G$  будет просто равна свободной энергии одиночного вихря  $\varepsilon_1$ . Здесь и ниже энергия сверхпроводника с вихрем отсчитывается от энергии сверхпроводника без вихря. Поясним теперь, почему функция  $G(x_0)$  имеет такой вид. Если  $x_0 < \lambda$ , то линии токов вихря можно изобразить так, как показано на рис., откуда видно, что слева от сердцевинки сверхтекучая скорость больше, чем справа, поэтому на сердцевину вихря будет действовать разность бернуллиевских давлений. Это приведет к появлению силы, действующей на вихрь в сторону к поверхности. И так, взаимодействие вихря с поверхностью приводит к его притяжению к поверхности. Ясно, что ту же силу  $f(x_0)$  можно было бы получить, просто взяв производную

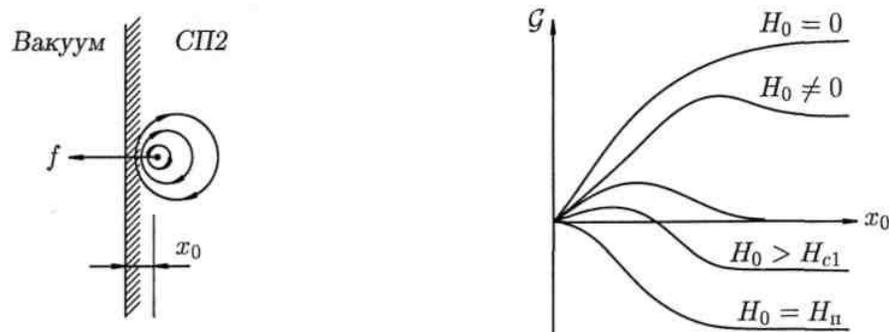
$$f = -dG/dx_0.$$

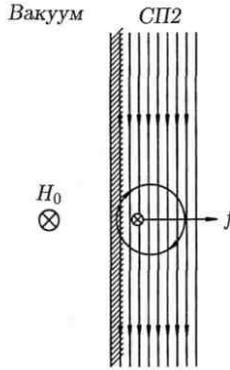
Этим и объясняется та форма зависимости  $G(x_0)$ .

Для нахождения силы притяжения вихря к поверхности мы воспользуемся так называемым методом изображений. Поскольку предполагается, что  $\kappa \gg 1$ , поле, созданное вихрем, удовлетворяет линейному уравнению. При этом поле, созданное вихрем на поверхности сверхпроводника, всегда равно нулю. Таким образом, имеем линейное уравнение с нулевым граничным условием на поверхности. Для линейных задач можно применять принцип суперпозиции. Заменим поэтому нашу задачу другой, ей эквивалентной. Рассмотрим безграничный сверхпроводник с двумя вихрями противоположного знака, расположенными в точках  $\pm x_0$ . Ясно, что в силу симметрии задачи поле на поверхности  $x = 0$  всюду равно нулю. В силу однозначности решения дифференциального уравнения, поле, созданное этими двумя вихрями в полупространстве  $x > 0$ , в точности равно полю, созданному одним вихрем, находящимся в точке  $x_0$ , когда он расположен вблизи реальной поверхности сверхпроводника, совпадающей с плоскостью  $x = 0$ .

Теперь легко понять, что взаимодействие вихря с поверхностью (притяжение) можно трактовать и как взаимодействие вихря со своим изображением (притяжение, так как вихрь-изображение имеет противоположный знак).

Включим теперь внешнее поле  $H_0$  параллельно поверхности сверхпроводника, как это показано на рис. Сразу по поверхности пойдет мейсснеровский ток, который, взаимодействуя с вихрем, начнет отталкивать его от поверхности. В результате, с одной стороны, вихрь притягивается к поверхности своим собственным изображением, с другой стороны—отталкивается от поверхности мейсснеровским током. Видно, что при  $H_0 < H_{c1}$  возможно метастабильное состояние вихря в сверхпроводнике, когда вихрю пребывать в сверхпроводнике энергетически невыгодно, но для выхода надо преодолеть энергетический барьер. По имени физиков, впервые рассмотревших такой барьер, он носит название барьера Бина-Ливингстона.





При  $H = H_{cl}$  вихрю впервые при увеличении поля становится энергетически выгодно существовать в сверхпроводнике, но проникновению вихря в сверхпроводник мешает барьер Бина - Ливингстона. Продолжаем увеличивать поле  $H_0$ . Барьер понижается, но все еще существует, вихрь все еще не может проникнуть в сверхпроводник, по-прежнему (уже теперь метастабильно) существует мейсснеровское состояние. В этом случае говорят о перегреве мейсснеровского состояния.

Барьер пропадает лишь при некотором поле  $H_0 = H_{lv}$ , которое называется полем перегрева мейсснеровского состояния. Рассчитаем это поле перегрева. Пусть сердцевина вихря находится в точке  $x_0$ . Сила, которая притягивает его к поверхности — это сила изображения, т. е. сила взаимодействия между вихрем и током, создаваемым изображением. Имеем:

$$f_{\text{изобр}} = \frac{1}{c} \frac{c}{4\pi} \frac{dH_v}{dx} \Phi_0,$$

где  $H_v$  — поле, создаваемое вихрем-изображением, а  $(c/4\pi)(dH_v/dx)$  — ток изображения в точке  $x = x_0$ . Сила взаимодействия между вихрем и мейсснеровским током равна

$$f_M = \frac{1}{c} \frac{c}{4\pi} \frac{H_0}{\lambda} e^{-x/\lambda} \Phi_0,$$

поскольку  $(c/4\pi)(H_0/\lambda) \exp[-x/\lambda]$  — это плотность тока в мейсснеровском состоянии. Гиббсовская свободная энергия

$$G = - \int f dx,$$

$f = f_M + f_{\text{изобр}}$  — полная сила, действующая на вихрь. Интегрируя, получим

$$\mathcal{G}(x_0) = -\frac{\Phi_0}{4\pi} H_v(2x_0) + \frac{\Phi_0}{4\pi} H_0 e^{-x_0/\lambda} + \text{const}.$$

В этой формуле стоит  $H_v(2x_0)$ , так как это поле, созданное в точке  $x_0$  вихрем-изображением, удаленным от этой точки на расстояние  $2x_0$ . Остается определить константу интегрирования. При  $x_0 \rightarrow \infty$  первые два члена обращаются в нуль. С другой стороны, при  $x_0 \rightarrow \infty$  величина  $G$  становится просто гиббсовской свободной энергией одиночного вихря в безграничном сверхпроводнике. Получим выражение для константы интегрирования в виде

$$\text{const} = \mathcal{G}(\infty) = \frac{\Phi_0}{4\pi} (H_{cl} - H_0),$$

откуда

$$G = \frac{\Phi_0}{4\pi} [H_0 e^{-x_0/\lambda} - H_v(2x_0) + H_{c1} - H_0].$$

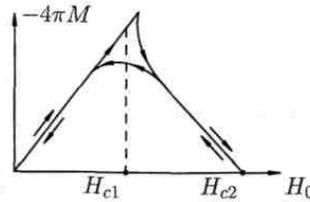
Нетрудно проверить, что эта формула дает ту серию кривых  $G(x_0)$  при разных значениях  $H_0$ , которая изображена на рис. Поле перегрева меисснеровского состояния  $H_n$  можно определить из условия:

$$dG/dx_0 |_{x_0=0} = 0.$$

Подставляя в это уравнение выражение для  $G$ , получим

$$H_n \cong H_{cm}$$

Существование барьера Вина - Ливингстона доказано экспериментально. Прежде всего, этот барьер проявляется в небольшом гистерезисе кривой намагничивания однородного сверхпроводника второго рода вблизи  $H_{c1}$ . От этого гистерезиса не удастся освободиться никакими мерами по улучшению объемной однородности сверхпроводника.



Определим теперь величину магнитного потока, создаваемого вихрем, расположенным вблизи и параллельно плоскости поверхности сверхпроводника. Из общей формулы для гиббсовской свободной энергии следует, что гиббсовская свободная энергия сверхпроводника с вихрем равна

$$G = F - \Phi H_0 / 4\pi,$$

где  $F$  — свободная энергия сверхпроводника с вихрем (не зависящая от внешнего поля  $H_0$ ),  $\Phi$  — магнитный поток вихря, расположенного вблизи поверхности. Получим выражение для потока вихря, расположенного около поверхности:

$$\Phi = \Phi_0(1 - e^{-x_0/\lambda}).$$

Из этой формулы следует, что магнитный поток, создаваемый вихрем, стремится к нулю по мере приближения вихря к поверхности сверхпроводника.

Взаимодействие сверхпроводящих вихрей с дефектами кристаллической структуры обеспечивает высокие значения критического тока. Необходимо, однако, учитывать, что не всякие дефекты эффективно взаимодействуют с вихрями. Так, вакансии, одиночные примесные атомы и подобные «мелкие» дефекты неэффективны. Это и понятно, ведь характерный размер вихря — длина когерентности — намного превосходит атомный размер — характерный размер такого «мелкого» дефекта. Наоборот, структурные дефекты с размерами порядка  $\xi$  и больше являются весьма эффективными и могут обеспечить большие плотности критического тока.

**Взаимодействие вихрей с плоской поверхностью сверхпроводника.** Для определенности рассмотрим плоскую идеально однородную пластину из сверхпроводника второго рода толщиной  $d \gg \lambda$ . Внешнее магнитное поле  $H_0$  направлено параллельно плоскости пластины, причем  $k \gg 1, H_{c1} \ll H_0 \ll H_{c2}$ . Это значит, что в пластине существует треугольная вихревая решетка,

причем период решетки  $a_0 \ll d$ .  $a_0$  с достаточно хорошей точностью можно считать постоянным по всей пластине. При включении слабого транспортного тока вдоль пластины перпендикулярно магнитному полю на одной из сторон пластины возникает магнитное поле  $H_0 + H_i$ , а на другой — соответственно,  $H_0 - H_i$ , где  $H_i$  — поле, созданное транспортным током. Устойчивого состояния с градиентом плотностей вихрей в однородном сверхпроводнике не может быть, поэтому реакцией всей вихревой структуры на такой транспортный ток должно быть жесткое смещение всей структуры как единого целого в направлении силы Лоренца. Поскольку вихри до смещения находились в состоянии устойчивого равновесия, после достаточно малого смещения должна возникнуть возвращающая сила. Вся структура будет упруго смещена на некоторое расстояние, определяемое равенством силы Лоренца и возвращающей силы. Если сила Лоренца сможет вопреки возвращающей силе сдвинуть вихри на расстояние порядка  $a_0$ , то вихри будут двигаться уже непрерывно. Действительно, теперь с одной стороны пластинки крайний вихревой ряд выходит на край и уничтожается своим изображением, а с другой стороны пластинки — уходит на расстояние порядка  $a_0$  и оставляет место для вхождения в пластинку нового вихревого ряда. Этот новый ряд незамедлительно в нее войдет, и вся структура под влиянием того же транспортного тока снова сместится на расстояние порядка  $a_0$  и т. д. Отсюда можно заключить, что транспортный ток, который вызывает смещение структуры на величину порядка  $a_0$ , естественно назвать критическим.

В состоянии термодинамического равновесия по поверхности сверхпроводника протекает ток намагничивания  $J_M$ , определяемый разностью между полем  $H_0$  на поверхности и средним полем  $B$  внутри:

$$\frac{c}{4\pi} |B - H_0| = cM.$$

Плотность тока намагничивания можно записать в виде

$$j_M = \frac{c|M|}{\lambda} e^{-x/\lambda},$$

где  $x$  — расстояние данной точки от края пластины. На вихрь, находящийся на расстоянии  $x$  от края, действует, таким образом, сила Лоренца

$$f_M = \frac{1}{c} j_M \Phi_0 = \frac{|M| \Phi_0}{\lambda} e^{-x/\lambda}.$$

Если вихрь сместился на малое расстояние  $\delta x$ , то  $f_M$  изменилась на величину  $\delta f_M$

$$|\delta f_M| = \frac{M \Phi_0}{\lambda^2} e^{-x/\lambda} \delta x.$$

Сила действует только на вихри, находящиеся на расстоянии порядка  $\lambda$  от края, поэтому полное изменение силы, действующей на вихри, при смещении их на расстояние  $\delta x$  будет

$$\frac{|M| \Phi_0}{\lambda^2} \delta x \frac{\lambda}{a_0}.$$

Если теперь умножить это выражение на количество вихрей, лежащих на единичном отрезке вдоль направления транспортного тока, т.е. на  $1/a_0$ , и умножить на 2, чтобы учесть существование другого края пластины, то мы получим окончательное выражение для возвращающей силы  $F_{\text{возвр}}$ , приходящейся на единицу площади поверхности пластины:

$$F_{\text{возвр}} = \frac{2|M| \Phi_0}{\lambda a_0^2} \delta x.$$

Учитывая, что  $a_0^2 \cong \Phi_0 / B$ , имеем

$$F_{\text{возвр}} = \frac{2|M|B}{\lambda} \delta x.$$

Условием равновесия, как мы уже отмечали, будет равенство этой силы силе Лоренца, тоже отнесенной к единице поверхности пластины:

$$F_L = \frac{1}{c} I_{\text{тр}} B,$$

где  $I_{\text{тр}}$  — транспортный ток, текущий по пластине и отнесенный к единице длины пластины в направлении, перпендикулярном току. Транспортный ток достигает критического значения, когда  $\delta x$  становится равным  $a_0 \sim (\Phi_0/B)^{1/2}$ . Получим:

$$I_c = \frac{2c|M|\sqrt{\Phi_0}}{\lambda\sqrt{B}}.$$

Средняя по сечению пластины плотность критического тока будет

$$j_c = \frac{2c|M|\sqrt{\Phi_0}}{\lambda\sqrt{B}d}.$$

Эта формула хорошо подтверждена экспериментом.

Если ток меньше критического, то вихревая структура как единое целое упруго смещается на некоторое расстояние  $\delta x < a_0$  под действием силы Лоренца. При этом сила Лоренца уравновешивается возникшей возвращающей силой и вихревая решетка становится неподвижной. Период решетки всюду постоянен, поэтому в объеме пластины транспортный ток равен нулю. Следовательно, транспортный ток течет только вдоль поверхностей пластины в слое порядка глубины проникновения  $\lambda$ .

Оценим величину предельного транспортного тока, т. е. критический ток. Пусть  $H_{c1} \sim 100$  Э,  $H_{c2} \sim 10^5$  Э,  $B \sim 10^4$  Гс,  $\lambda \sim 10^{-5}$  см,  $d \sim 10^{-4}$  см. Оценка для  $|M|$  дает величину порядка 1 Гс. Имеем:

$$j_c \sim 10^5 \text{ А/см}^2.$$

Таким образом, даже однородные сверхпроводящие пластины в смешанном состоянии способны нести значительный транспортный ток.

**Взаимодействие вихря с полостью в сверхпроводнике.** Пусть в безграничном сверхпроводнике имеется дефект в виде цилиндрической полости. Как взаимодействует с такой полостью одиночный вихрь, расположенный параллельно полости?

Пусть диаметр полости  $d$  удовлетворяет неравенству  $d \gg \xi$  (Т). В этом случае оценка энергии взаимодействия проводится совсем просто. Если вихрь находится далеко от полости, то в его сердцевине (диаметра порядка  $2\xi$ ) сосредоточена положительная энергия (относительно состояния сверхпроводника без вихря), так как сердцевина вихря нормальна, а свободная энергия нормального состояния больше энергии сверхпроводящего состояния на величину  $H_{cm}^2/8\pi$  на каждую единицу объема. Значит, в сердцевине вихря на каждую единицу его длины сосредоточена энергия, по порядку величины равная

$$\frac{H_{cm}^2}{8\pi} \pi \xi^2$$

Если же вихрь проходит через полость, т. е. просто захвачен полостью, то у него нет нормальной сердцевины. Отсюда следует, что вихрь притягивается к полости. Силу взаимодействия на единицу длины  $f_p$  легко найдем:

$$f_p \cong H_{cm}^2 \xi / 8.$$

Если в сверхпроводнике имеется не цилиндрическая полость, а пора в виде приблизительно шаровой полости (размер  $d$ ), то силу закрепления вихря на полости  $f_{pd}$  получим

$$f_{pd} \cong H_{cm}^2 \xi d / 8$$

Сила Лоренца, приходящаяся на единицу длины вихря, как известно, равна  $j\Phi_0/c$ . Следовательно, на часть длины вихря, которая взаимодействует с дефектом, придется сила  $j\Phi_0 d/c$ . Приравняв ее силе  $f_{pd}$ , получим

$$j = \frac{cH_{cm}^2 \xi}{8\Phi_0}.$$

Поскольку  $H_{cm} = \Phi_0 / (2\sqrt{2} \pi \lambda \xi)$ , легко получим

$$j = \frac{cH_{cm}}{16\sqrt{2}\pi\lambda}.$$

Сравнивая эту формулу с критическим током распаривания, мы увидим, что получили величину того же порядка. Таким образом, чтобы оторвать вихрь от поры, нужно пропустить максимально возможный для сверхпроводника ток.

Таким образом, различные нормальные включения являются весьма эффективными центрами закрепления вихрей в сверхпроводнике, т. е. центрами пиннинга. Этим свойством широко пользуются на практике, когда с помощью металлургической обработки добиваются существенного увеличения токонесущей способности сверхпроводящего материала.

Если частица с массой  $2m$  и с зарядом  $2e$  движется в магнитном поле, то импульс частицы можно записать в виде

$$\hbar \nabla \theta = 2m\mathbf{v}_s + \frac{2e}{c} \mathbf{A},$$

Действительно, в отсутствие магнитного поля плотность потока частиц  $n_s v_s / 2$  можно записать в виде

$$\frac{(i\hbar/4m)(\Psi \nabla \Psi^* - \Psi^* \nabla \Psi)}{2}.$$

Подставляя сюда выражение  $\Psi(r) = \sqrt{n_s/2} \exp[i\theta]$ , получим  $\hbar \nabla \theta = 2m\mathbf{v}_s$ . Если частица движется в магнитном поле, то полный импульс  $\hbar \nabla \theta$  есть сумма  $2m\mathbf{v}_s$ -импульса и импульса  $2e\mathbf{A}/c$ , создаваемого магнитным полем. Используя выражение для плотности сверхтока в виде

$$\mathbf{j}_s = n_s e \mathbf{v}_s$$

легко получим следующее выражение для тока:

$$\mathbf{j}_s = \frac{1}{2} \left( \frac{\Phi_0}{2\pi} \nabla \theta - \bar{\mathbf{A}} \right)$$

Это уравнение – второе уравнение Гл, выраженное через фазу волновой функции.

Рассмотрим внутри массивного сверхпроводника цилиндрическую полость. Пусть сперва  $T > T_c$  и сверхпроводник находится в нормальном состоянии. Наложим внешнее поле  $H_0$  параллельно образующей полости. Понижим температуру так, чтобы сверхпроводник перешел в сверхпроводящее состояние. Теперь поле из тела сверхпроводника будет вытеснено, а в полости будет заморожен некоторый магнитный поток. Этот поток будет создаваться сверхтоком, возникающим на внутренней поверхности полости. Найдем этот замороженный магнитный поток.



Рассмотрим контур  $C$ , который охватывает полость и проходит всюду внутри сверхпроводника на расстояниях от границы полости, много больших  $\lambda$ . Тогда в любой точке этого контура сверхток  $j_s = 0$ , и контурный интеграл уравнения по этому контуру сведется к выражению

$$\frac{\Phi_0}{2\pi} \oint_C \nabla\theta \, dl = \oint_C \mathbf{A} \, dl.$$

Учитывая, что

$$\oint_C \mathbf{A} \, dl = \Phi,$$

имеем

$$\Phi = (\Phi_0/2\pi) \oint_C \nabla\theta \, dl.$$

Здесь  $\Phi$  — это полный магнитный поток, охватываемый контуром  $C$ . Отсюда сразу видно, что  $\theta$  — многозначная функция; каждый раз при обходе вокруг отверстия она изменяется на некоторую величину. Но волновая функция  $\Psi$  должна быть однозначной. Поэтому мы должны потребовать, чтобы изменение  $\theta$  при обходе вокруг отверстия с магнитным потоком было кратным  $2\pi n$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Поэтому

$$\oint_C \nabla\theta \, dl = 2\pi n,$$

и равенство можно написать окончательно в виде

$$\Phi = n\Phi_0,$$

где

$$\Phi_0 = \frac{hc}{2e} = \pi\hbar c / e$$

Из формулы следует, что магнитный поток в полости (точнее — магнитный поток, охватываемый контуром  $C$ , может принимать только значения, кратные минимально возможному потоку  $\Phi_0$  — кванту потока. Величина  $\Phi_0$  равняется

$$\Phi_0 = 2.07 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2.$$

Физически квантование магнитного потока имеет то же происхождение, что квантование орбит электронов в атоме. Нужно, чтобы волновая функция электронов, вращающихся по некоторому замкнутому контуру, имела целое число длин волн на длине этого контура.

Экспериментально квантование магнитного потока было обнаружено практически одновременно в США (Б. Дивер и В. Фер-бенк) и в ФРГ (Р. Долл и М. Небауэр) в 1961 г. Таким образом, результаты опытов по изучению квантования магнитного потока явились прямым доказательством того, что сверхток переносится парами электронов.

Квант магнитного потока может зависеть от геометрии образца. Определим величину магнитного потока, который может быть захвачен тонкостенным сверхпроводящим цилиндром радиуса  $R$ . толщина стенок  $d \ll \lambda, \xi, R$ . Цилиндр внесен в магнитное поле и переведен в сверхпроводящее состояние. Затем магнитное поле выключено.

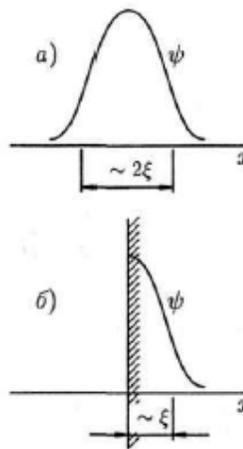
Следует также рассмотреть второе уравнение ГЛ для тока. Пространственным распределением тока и модуля параметра порядка пренебречь. Учитывая фазу параметра порядка, следует проинтегрировать ток по контуру внутри стенок цилиндра.

Ответ:  $\Phi = \Phi_0 n / \{1 + 2 \lambda^2 / R d\}; n = 0, +1, +2, \dots$

## 16 неделя. Размерные эффекты и влияние дефектов

Если внешнее магнитное поле  $H_0$  уменьшается от значения  $H_0 > H_{c2}$ , то в тот момент, когда  $H_0$  становится чуть меньшим  $H_{c2}$ , во всем объеме сверхпроводника второго рода возникают зародыши сверхпроводимости, появляется плотно упакованная решетка вихрей. При этом параметр порядка  $\psi$  мал ( $|\psi| \ll 1$ ). Происходит фазовый переход второго рода из нормального состояния ( $H_0 > H_{c2}$ ) в смешанное состояние ( $H_0 < H_{c2}$ ).

Рассмотрим зародыш сверхпроводимости. Это участок ширины порядка  $2\xi(T)$  между двумя нормальными сердцевинами двух соседних вихрей. Действительно, если радиус нормальной сердцевины мы принимаем равным  $\xi$ , то при плотной упаковке вихрей расстояние между их центрами будет порядка  $2\xi$ . Зависимость параметра порядка от координаты на линии, соединяющей центры вихрей, схематично показана на рис. В этом сечении зародыш имеет вид колоколообразной кривой. Так будет возникать сверхпроводимость при поле  $H_{c2}$  в объеме сверхпроводника второго рода.



Оказывается, однако, что на поверхности сверхпроводника, там где она параллельна внешнему полю, сверхпроводимость может существовать и при более высоких полях.

Рассматривается полубесконечное сверхпроводящее пространство, занимающее область  $x > 0$ . Таким образом, плоскость  $x = 0$  является границей нашего сверхпроводника. Внешнее магнитное поле  $H_0$  параллельно оси  $z$ . В сверхпроводнике с поверхностью на плоскости  $x = 0$  можно ожидать, что зародыш, образовавшийся вблизи поверхности, будет иметь эффективную ширину порядка  $\xi(T)$ , т.к. на поверхности  $d\psi/dx = 0$ . На рис. схематично изображен зародыш вблизи поверхности. Но известно, что уменьшение размеров пленки увеличивает ее критическое поле. Поэтому во втором случае — зародыша вблизи поверхности — можно ожидать большего критического поля образования такого зародыша (приблизительно в два раза). Это новое критическое поле мы будем называть третьим критическим полем, или критическим полем поверхностной сверхпроводимости и будем обозначать  $H_{c3}$ . В рамках теории ГЛ величина  $H_{c3}$  может быть определена с помощью того же уравнения ГЛ, использованного ранее для нахождения  $H_{c2}$ , вместе с условием  $d\psi/dx = 0$  на поверхности. Машинный расчет показал (точное решение — функции Вебера), что

$$H_{c3} = 1.69H_{c2}.$$

Из проведенных рассуждений следует, что при уменьшении внешнего магнитного поля, когда оно достигает значения  $H_{c3}$ , на поверхности сверхпроводника возникает тонкий сверхпроводящий слой. Толщина этого слоя имеет порядок  $\xi(T)$ . Внутри сверхпроводника сохраняется нормальное состояние и магнитное поле, равное внешнему полю. В поверхностном сверхпроводящем слое магнитное поле будет несколько ослаблено, как это бывает у тонких сверхпроводящих пленок во

внешнем параллельном поле. Это означает, что по внешней и внутренней поверхностям сверхпроводящего слоя текут токи в противоположных направлениях.

Что будет происходить с поверхностным сверхпроводящим слоем по мере дальнейшего уменьшения внешнего поля ниже  $H_{c3}$ ? Расчеты показали, что по мере уменьшения поля будут увеличиваться модуль параметра порядка и ширина сверхпроводящего слоя.

Покрытие поверхности сверхпроводника нормальным металлом снижает  $H_{c3}$  до величины, очень близкой к  $H_{c2}$ .

Интересно отметить, что явление поверхностной сверхпроводимости может наблюдаться и у некоторых сверхпроводников первого рода. Действительно, во всех наших рассуждениях нигде не предполагалось, что  $\kappa > 1/\sqrt{2}$ , и при этом получилось, что  $H_{c3} = 1.69H_{c2} = 1.69\sqrt{2}\kappa H_{cm}$ . Поверхностная сверхпроводимость возникает в том случае, если  $H_{c3}$  будет больше  $H_{cm}$ , т.е. если

$$1.69\sqrt{2}\kappa H_{cm} > H_{cm}.$$

Таким образом, поверхностная сверхпроводимость может возникнуть у сверхпроводника первого рода, если

$$\kappa > 1/1.69\sqrt{2} = 0.42.$$

Третье критическое поле можно рассчитать достаточно точно упрощенным методом. Найдем критическое поле поверхностной сверхпроводимости, используя вариационный метод.

Пусть вглубь сверхпроводника - ось  $x$ , вдоль поверхности -  $y, z$ . Если поле  $H$  по оси  $z$ , то векторный потенциал выбираем в виде  $\vec{A} = Hx\vec{n}_y$ . Рассчитаем разницу свободных энергий (которая равна разнице энергий Гиббса в точке перехода) в предположении, что на границе существует сверхпроводящий зародыш с вариационной волновой функцией вида  $\psi = \exp[-ax^2 +iky]$ ,  $a, k$  - вариационные параметры. Тогда вдоль оси  $y$  течет экранирующий ток  $j \sim k|\psi|^2$ . Интегрируя по объему разницу свободных энергий, имеем:

$$F_s - F_N = L_y L_z \frac{\hbar^2}{2m} \left[ -\frac{\sqrt{\pi}}{2\xi^2 \sqrt{2a}} + a^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}a^{3/2}} + \left( \frac{2\pi H}{\Phi_0} \right)^2 \frac{1}{4\sqrt{2}a^{3/2}} S \right];$$

$$S = \sqrt{\pi} / 2 - 1 / \sqrt{\pi}$$

Здесь уже учтено, что  $d(F_s - F_N)/dx_0 = 0$ . Далее, учитывая условия  $d(F_s - F_N)/da = 0$ ;  $F_s - F_N = 0$  (последнее - чтобы критическое поле  $H_{c3} = H$ ), и выписывая эти соотношения, находим из требования совместности полученных уравнений:

$$H_{c3} = H_{c2} \sqrt{\pi / (\pi - 2)} = 1.66 H_{c2}$$

Точный результат через функции Вебера ( $1.69 H_{c2}$ ) очень близок к вариационному результату.

### Критическое поле тонкой пленки

Тонкая сверхпроводящая пленка, толщина которой меньше глубины проникновения, может сохранить сверхпроводимость в параллельном ей магнитном поле, даже если величина этого поля существенно больше  $H_{cm}$ . Магнитное поле, при котором ее сверхпроводимость пропадает, обозначим  $H^*$ .

Пусть толщина пленки  $d \ll \lambda, \xi$ . Это значит, что изменением величины  $\psi$  пленки можно пренебречь, а поле можно считать почти полностью проникшим в пленку. Мы предполагаем, что

поверхности пленки совпадают с поверхностями  $x = \pm d/2$ . Поскольку пленка — тело односвязное, мы выбираем такую калибровку вектор-потенциала  $A$ , чтобы  $\psi$  была вещественным числом. Учитывая все это, запишем уравнения ГЛ в следующем виде:

$$\begin{aligned} -(1 - (2\pi\xi A/\Phi_0)^2)\psi + \psi^3 &= 0, \\ d^2 A/dx^2 &= (\psi^2/\lambda^2)A. \end{aligned}$$

При этом вектор  $A$  направлен вдоль оси  $y$ , на магнитное поле наложены граничные условия

$$H(\pm d/2) = H_0,$$

где  $H_0$  — внешнее, параллельное поверхности пленки, магнитное поле. Решаем сначала второе уравнение:

$$A = A_1 \operatorname{ch}(\psi x/\lambda) + A_2 \operatorname{sh}(\psi x/\lambda),$$

где  $A_1$  и  $A_2$  — постоянные интегрирования. Магнитное поле  $H$  в нашем случае находится простым дифференцированием  $A$ :

$$H = A_1\{\psi/\lambda\} \operatorname{sh}(\psi x/\lambda) + A_2\{\psi/\lambda\} \operatorname{ch}(\psi x/\lambda).$$

Учитывая граничные условия, получаем

$$\begin{aligned} A_1 &= 0, \quad A_2 = \frac{H_0\lambda}{\psi \operatorname{ch}(\psi d/2\lambda)}. \\ H &= H_0 \frac{\operatorname{ch}(\psi x/\lambda)}{\operatorname{ch}(\psi d/2\lambda)}, \quad A = \frac{H_0\lambda}{\psi} \frac{\operatorname{sh}(\psi x/\lambda)}{\operatorname{ch}(\psi d/2\lambda)}. \end{aligned}$$

Применим теперь эти результаты к тонкой пленке ( $d \ll \lambda$ ). В этом случае  $\psi x/\lambda$  и  $\psi d/2\lambda$  будут много меньше единицы, и можно воспользоваться формулами разложения гиперболических функций в ряд Тейлора, ограничившись лишь линейными членами:

$$\psi^2 = 1 - (2\pi\xi/\Phi_0)^2 H_0^2 x^2.$$

Усредним это выражение по толщине пленки (проинтегрируем по  $x$  от  $-d/2$  до  $+d/2$ ):

$$\psi^2 d = d - H_0^2 \frac{1}{12} d^3 \left( \frac{2\pi\xi}{\Phi_0} \right)^2.$$

Учитывая формулу для критического термодинамического поля, а также для глубины проникновения, получим окончательно зависимость величины параметра порядка в пленке от приложенного магнитного поля:

$$\psi^2 = 1 - \frac{1}{24} \frac{H_0^2 d^2}{H_{cm}^2 \lambda^2}$$

Параметр порядка в тонкой пленке сильно зависит от приложенного поля  $H_0$  и плавно обращается в нуль при поле, равном  $2\sqrt{6}H_{cm}\lambda/d$ . Естественно это поле принять за критическое поле пленки  $H^*$ . Ясно, что при этом происходит фазовый переход второго рода.

Итак, критическое поле тонкой пленки толщины  $d$  в параллельном внешнем поле  $H_0$  равно

$$H^* = 2\sqrt{6}H_{cm} \frac{\lambda}{d}$$

Из этой формулы следует, что с уменьшением толщины пленки ее критическое поле увеличивается. Так, если толщина пленки на порядок меньше ее глубины проникновения,  $\lambda/d \sim 10$ , а  $H_{cm} \sim 10^3 \text{Э}$ , то  $H^* \sim 40000 \text{Э}$ . Физически это вполне понятно. Поскольку магнитное поле проникает в пленку, она имеет существенно меньший диамагнитный момент на единицу объема, чем массивный образец. Но малый диамагнитный момент во внешнем поле — это маленькая магнитная стрелка, ориентированная навстречу полю. Такая ситуация энергетически более выгодна, чем в случае большого диамагнитного момента. Поэтому пленка оказывается во внешнем поле гораздо более устойчивой, чем массивный образец, и может сохранить сверхпроводимость в существенно больших полях.

### Критический ток тонкой пленки

Теперь рассмотрим случай, когда пленка не находится во внешнем поле, но по ней течет некоторый ток  $I$ . При этом мы снова предполагаем, что поверхности пленки совпадают с плоскостями  $x = \pm d/2$ , ток течет в направлении оси  $y$ , и под током  $I$  мы понимаем полный ток в пленке, приходящийся на единицу длины вдоль оси  $z$ . Этот ток будет создавать на поверхностях пленки магнитное поле, таким образом, мы имеем следующие граничные условия:

$$H(\pm d/2) = \pm H_I.$$

Как и в предыдущем параграфе, мы используем односвязность пленки и выберем такую калибровку  $A$ , чтобы  $\psi$  было вещественным. Кроме того, предполагаем, что пленка тонкая:  $d \ll \lambda, \xi$ . Тогда изменением параметра порядка по толщине пленки можно пренебречь. Общее решение уравнения будет

$$A = A_1 \text{ch}(\psi x / \lambda) + A_2 \text{sh}(\psi x / \lambda),$$

Поскольку для нашей задачи  $H = dA/dx$ , снова имеем

$$H = A_1 \{\psi / \lambda\} \text{sh}(\psi x / \lambda) + A_2 \{\psi / \lambda\} \text{ch}(\psi x / \lambda).$$

Подставляя сюда граничные условия, получим два уравнения с двумя неизвестными ( $A_1$  и  $A_2$ ). Их решение будет

$$A_1 = \frac{\lambda H_I}{\psi \text{sh}(\psi d / 2\lambda)}, \quad A_2 = 0.$$

Таким образом, окончательно имеем

$$H = H_I \frac{\text{sh}(\psi x / \lambda)}{\text{sh}(\psi d / 2\lambda)}, \quad A = \frac{\lambda H_I \text{ch}(\psi x / \lambda)}{\psi \text{sh}(\psi d / 2\lambda)}.$$

Учтем теперь малость толщины пленки, т. е.  $\psi d \ll 1$ . Это значит, что для  $A$  получаем

$$A = 2\lambda^2 H_I / \psi^2 d$$

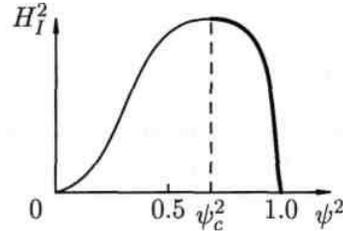
Используя определения критического термодинамического поля, получим

$$2\lambda^2 H_I^2 / (d^2 H_{cm}^2) = \psi^4 - \psi^6.$$

График зависимости величины  $H_I^2$  от  $\psi^2$  показан на рис. «Жирной» линией выделена та часть графика, которая соответствует устойчивым состояниям. Действительно, когда никакого тока в пленке нет, уравнение имеет два решения:  $\psi = 0$  и  $\psi = 1$ . Из общих соображений ясно, что в

этом случае сверхпроводящее состояние ( $\psi = 1$ ) является энергетически более выгодным и именно оно и будет реализовываться. Если мы включим очень слабый ток через пленку, то опять будут два решения уравнения: одно, соответствующее  $\psi < 1$ , другое, соответствующее  $\psi \ll 1$ . Из соображений непрерывности ясно, что именно первое решение соответствует устойчивому сверхпроводящему состоянию.

Какой же максимальный ток может пропустить пленка, находясь в сверхпроводящем состоянии?



Ответ непосредственно следует из графика на рис. Это, очевидно, тот ток, который соответствует максимуму на графике. Найдем этот ток. Для этого определим значение  $\psi_c$  соответствующее максимуму величины  $H_I$

$$\frac{d}{d\psi}(2\lambda^2 H_I^2 / d^2 H_{cm}^2) = 4\psi_c^3 - 6\psi_c^5 = 0,$$

отсюда  $\psi_c^2 = 2/3$ . Следовательно,

$$H_{Ic} = \frac{\sqrt{2}}{3\sqrt{3}} H_{cm} \frac{d}{\lambda}.$$

Легко получить среднюю по пленке критическую плотность тока  $j_c$ , воспользовавшись формулой  $2H_{Ic} = (4\pi/c)j_c$  следующей из уравнений Максвелла,

$$j_c = \frac{\sqrt{2}}{6\pi\sqrt{3}} \frac{cH_{cm}}{\lambda}.$$

Можно найти зависимость параметра порядка от плотности тока и критическую плотность тока двумя способами: а) при действительной калибровке параметра порядка; б) при калибровке с нулевым векторным потенциалом.

В случае а) достаточно использовать диамагнитный вклад в ток для связи тока и векторного потенциала, а затем подставить либо в разницу свободных энергий (после варьирования по параметру порядка), либо сразу в первое уравнение ГЛ;

В случае б) мы имеем право занулять векторный потенциал, т.к. в пластине полем можно пренебречь. В этом случае считать модуль параметра порядка постоянным, и всю пространственную зависимость перенести на его фазу. Должно получиться такое же соотношение в итоге для модуля параметра порядка, как и в случае а).

$$mj^2 / 8\beta e^2 = -(\psi^2 - \psi_0^2)\psi^4;$$

Ответ:

$$j_c = cH_{cm} / 3\sqrt{6}\pi\lambda$$

Рассмотрим теперь, что происходит, когда сила Лоренца, созданная транспортным током, превзойдет силу пиннинга, и вихри придут в движение, т. е. когда начнется течение вихрей поперек транспортного тока.

В этом случае возникнет диссипация энергии, возникнет электрическое сопротивление. Поэтому такое состояние называется резистивным.

Возникшее течение магнитного поля создает по закону электромагнитной индукции Фарадея электрическое поле  $E$ . Это поле будет направлено по току. Это значит, что в объеме сверхпроводника возникает диссипация энергии  $Ej_{\text{тр}}$ . Пусть установившаяся скорость течения вихрей в направлении силы Лоренца, т.е. перпендикулярно току и магнитному полю, будет  $v_L$ . Работа в единицу времени, затраченная внешним источником на это передвижение вихрей, будет равна  $F_L v_L$ , где  $F_L$  — плотность силы Лоренца. Ясно, что это и есть та энергия, которая выделяется в единицу объема в единицу времени, т. е.

$$F_L v_L = E j_{\text{тр}}$$

Учитывая, что  $F_L = j_{\text{тр}} B / c$ , получим

$$E = B v_L / c.$$

Удельное сопротивление сверхпроводника, которое возникает при течении магнитного потока в направлении поперек транспортного тока, называется сопротивлением течения потока (flux-flow) и обозначается  $\rho_f$ .

$$\rho_f = E / j_{\text{тр}}$$

Поскольку движение вихрей сопровождается выделением энергии, можно считать, что вихри движутся в вязкой среде, и ввести некоторый коэффициент вязкого трения  $\eta$  по обычной формуле

$$f_{\text{трения}} = -\eta v_L$$

где  $f_{\text{трения}}$  — это сила трения, которую испытывает один вихрь, движущийся со скоростью  $v_L$ . Пренебрегая массой вихря, имеем уравнение движения вихря в виде

$$f_{\text{трения}} + f_L = 0$$

Переходя к силам, действующим в единицу объема, получим

$$\frac{B}{\Phi_0} \eta v_L = \frac{1}{c} B j_{\text{тр}}$$

Далее,

$$\rho_f = \Phi_0 B / c^2 \eta.$$

Если  $\eta$  не зависит от магнитного поля, то  $\rho_f$  будет линейной функцией  $B$ . При низких температурах эксперимент действительно дает такую зависимость  $\rho_f$  от поля.

Используя результаты эксперимента для  $T \rightarrow 0$ , имеем

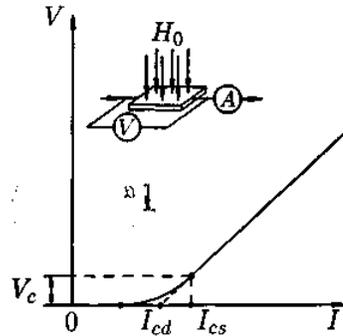
$$\rho_n = \Phi_0 H_{c2} / c^2 \eta,$$

что может служить для определения значения коэффициента вязкости  $\eta$  при низких температурах. Здесь  $\rho_n$  — это удельное сопротивление сверхпроводника в нормальном состоянии.

Вольт-амперная характеристика сверхпроводника в резистивном состоянии показана на рис. Она начинается с некоторого значения тока (критического тока) и при малых напряжениях имеет

нелинейный характер. В этой нелинейной области в сверхпроводнике еще нет сплошного установившегося течения вихрей. Они случайным образом перескакивают от одного центра пиннинга к другому, это область ползучести, крипа вихревой структуры.

При больших токах вольт-амперная характеристика становится линейной. Здесь уже имеет место течение вихревой структуры как целого.



Существуют два определения критического тока. Ток, при котором начинается срыв вихрей с центров пиннинга, т. е. ток  $I_{cs}$ , с которого начинается вольт-амперная характеристика, называется статическим критическим током. Его определение зависит от чувствительности того вольтметра, с помощью которого замечают первые признаки напряжения (обычно порядка  $10^{-6}$  В) на образце.

Изучим теперь спектр возбуждений сверхпроводящего сплава (т.е. с примесями) в нулевом магнитном поле. Мы должны решить систему уравнений Боголюбова

$$\begin{aligned} \epsilon u &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - E_F \right) u + \Delta v, \\ \epsilon v &= \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - U(\mathbf{r}) + E_F \right) v + \Delta^* u; \end{aligned}$$

здесь  $U(\mathbf{r})$  — полный потенциал Хартри, действующий на электрон в нормальном металле. При выводе уравнений предполагалось, как обычно, что электрон-электронное взаимодействие носит примерно точечный характер, т. е. имеет вид  $[V \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]$ , а потенциал  $U(\mathbf{r})$  не зависит от спиновых индексов (т. е. сплав немагнитен). Потенциал примесей включен в  $U(\mathbf{r})$ , т. е. система уравнений в принципе позволяет учесть и всевозможные эффекты многократного рассеяния электронов на примесях, поэтому она очень сложна. Положение заметно улучшается, если предположить, что  $\Delta(\mathbf{r})$  не зависит от  $\mathbf{r}$  даже при наличии примесей. Уравнения значительно упрощаются, если с самого начала исходить из одноэлектронных волновых функций  $w_n(\mathbf{r})$  для нормального металла. По определению,

$$\xi_n w_n(\mathbf{r}) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) - E_F \right) w_n(\mathbf{r}).$$

Для чистого металла  $w_n(\mathbf{r})$  представляют собой блоховские функции. Для сплава они имеют значительно более сложный вид, так как описывают последовательные соударения электрона с различными примесями. Для приводимого ниже расчета нет необходимости знать детальный вид этих функций.

Заменим потенциал спаривания  $\Delta(\mathbf{r})$  константой  $\Delta$ ; тогда, очевидно, решения системы будут зависеть от координат так же, как  $w_n(\mathbf{r})$ . Положим

$$\begin{aligned} u_n(\mathbf{r}) &= w_n(\mathbf{r}) u_n, \\ v_n(\mathbf{r}) &= w_n(\mathbf{r}) v_n. \end{aligned}$$

Тогда, как легко видеть, система сводится к следующей:

$$\begin{aligned}(\epsilon_n - \xi_n) u_n - \Delta v_n &= 0, \\ \Delta^* u_n - (\epsilon_n + \xi_n) v_n &= 0.\end{aligned}$$

Отсюда, как следовало ожидать, находим обычный закон дисперсии сверхпроводника:

$$\epsilon_n^2 = \xi_n^2 + |\Delta|^2.$$

Коэффициенты  $u_n$  и  $v_n$  зависят лишь от  $\xi_n$  и удовлетворяют условию нормировки

$$|u_n|^2 + |v_n|^2 = 1.$$

Их можно записать в явной форме:

$$\begin{aligned}|u_n|^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\xi_n}{\epsilon_n} \right), \\ |v_n|^2 &= \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\xi_n}{\epsilon_n} \right).\end{aligned}$$

Функции  $u_n$ ,  $v_n$  и  $w_n$  будем считать вещественными; это допустимо, поскольку  $w_n(\mathbf{r})$  представляют собой собственные функции вещественного оператора. Использование стоячих волн вместо бегущих окажется полезным и в дальнейшем при обсуждении свойств сплавов. Условие самосогласованности (уравнение для параметра порядка) запишется в виде

$$\Delta(\mathbf{r}) = V \sum_n |w_n(\mathbf{r})|^2 \frac{\Delta}{2\sqrt{|\Delta|^2 + \xi_n^2}} [1 - 2f(V\sqrt{|\Delta|^2 + \xi_n^2})].$$

Можно ввести также плотность состояний  $N(\mathbf{r})$  в данной точке  $\mathbf{r}$  в нормальном металле для энергий вблизи уровня Ферми

$$N(\mathbf{r}) = \sum_n |w_n(\mathbf{r})|^2 \delta(\xi_n).$$

Используя это определение, запишем условие в виде

$$\Delta(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{\Delta(1-2f)}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} d\xi.$$

Отсюда ясно, что условие самосогласованности не является точным, так как, по предположению,  $\Delta$  — константа, в то время как здесь параметр  $\Delta(\mathbf{r})$  пропорционален  $N(\mathbf{r})$  и потому может меняться в пространстве за счет примесей. Однако, если примеси химически близки к основному материалу, то плотность состояний  $N(\mathbf{r})$  мало отличается от своего среднего значения  $\bar{N}$  и условие самосогласованности принимает вид

$$1 = \bar{N} V \int_{-\hbar\omega_D}^{\hbar\omega_D} \frac{1-2f}{2\sqrt{\xi^2 + |\Delta|^2}} d\xi.$$

По виду это уравнение совпадает с аналогичным уравнением для случая чистого металла, поэтому в первом приближении спектр возбуждений и остальные термодинамические свойства у сплава и у чистого металла одинаковы. Впервые на это обстоятельство указал Андерсон (и это и есть

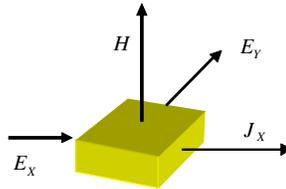
*теорема Андерсона*). На опыте оно проявляется в отсутствии заметного влияния немагнитных примесей на критическую температуру сверхпроводников.

Что касается магнитных примесей, то даже небольшое их количество способно подавить сверхпроводимость (основанную на электрон-фононной схеме спаривания носителей заряда). Именно поэтому магнитные металлы – Fe, Co, Ni, некоторые d-металлы, обладающие диамагнетизмом и ферромагнитными флуктуациями (Cu) не проявляют сверхпроводящих свойств.

## Весенний семестр

### 1 неделя. Обычный эффект Холла

Рассмотрим стандартную схему обычного эксперимента Холла. Через плоскую прямоугольную пластину пропускается транспортный ток с объемной плотностью  $J$  в присутствии поперечного магнитного поля напряженности  $H$ . Электроны проводимости с массой  $m$ , согласно простейшей модели Друде, разгоняются приложенным электрическим полем  $E$ , отклоняются силой Лоренца во внешнем магнитном поле, и рассеиваются (например, на примесях) с характерным временем между столкновениями  $\tau$  (для упрощения пока не зависящим от энергии электрона).



Итоговое уравнение движения электрона должно содержать все эти взаимодействия, и изменение импульса электрона в единицу времени будет подчиняться следующему соотношению (\*):

$$\frac{d\vec{P}}{dt} = e\vec{E} - \frac{\vec{P}}{\tau} + \frac{e}{cm} [\vec{P}\vec{H}].$$

В равновесии изменение импульса во времени равно нулю. Учитывая связь плотности тока, скорости и импульса  $\vec{J} = en\vec{V} = (e/m)n\vec{P}$ , где  $n$  – плотность электронов, находим для тензора магнетосопротивления в плоскости  $xu$ :

$$E_\alpha = \rho_{\alpha\beta} J_\beta, \quad \alpha, \beta = x, y;$$

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} 1/\sigma_0 & -\omega_c \tau / \sigma_0 \\ \omega_c \tau / \sigma_0 & 1/\sigma_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_0 & -R_H H \\ R_H H & \rho_0 \end{pmatrix}.$$

Здесь  $\sigma_0 = \frac{1}{\rho_0} = e^2 n \tau / m$  – известное соотношение Друде для удельной проводимости,  $\omega_c = eH/mc$  – ларморова (или циклотронная) частота, частота прецессии электрона в магнитном поле. Ток направлен под так называемым углом Холла  $\phi$  к оси  $x$ , причем,  $\text{tg}\phi = \omega_c \tau$ .

На эксперименте измеряют две физические величины:

1) магнетосопротивление  $\rho_{xx} = \frac{1}{\sigma_0} = \frac{E_x}{J_x} \Big|_{J_y=0}$  – сопротивление в направлении протекания тока в отсутствие поперечного тока. Как видно, оно в данном случае не зависит от магнитного поля и равно обычному друдевскому сопротивлению;

2) Коэффициент Холла  $R_H = \frac{E_y}{J_x H} \Big|_{J_y=0} = \frac{1}{nec}$  – отношение поперечной электродвижущей силы  $E_y$  (Э.Д.С. Холла) к  $x$ -компоненте тока и магнитному полю. Как видно, в данном простейшем подходе эта величина не зависит от магнитного поля, и является функцией только концентрации носителей  $n$ . Кроме того, знак носителей заряда (т.е. знак величины  $e$ ) также будет определять знак коэффициента Холла, так что, например, для дырочных носителей  $R_H > 0$ .

На эксперименте коэффициент Холла получают из измерения зависимости сопротивления Холла  $\rho_{xy}$  от магнитного поля, при этом ищут линейный участок на этой зависимости в диапазоне сильных магнитных полей (что, как правило, имеет место даже для реальных сложных композитных соединений):

$$\rho_{xy} = E_y / J_x \Big|_{J_y=0} = H / nec$$

Из выражения для тензора магнетосопротивления можно заметить, что сильное магнитное поле для системы электронов – это такое поле, в котором выполняется условие  $\omega_c \gg 1$  (соответственно угол Холла  $\phi$  стремится к  $\pi/2$ ). Физически это означает, что период прецессии электрона много меньше среднего времени между столкновениями и на его движение вдоль линий магнитного потока рассеяние влияет слабо. Напротив, условие  $\omega_c \ll 1$  (угол Холла  $\phi$  стремится к нулю) является условием слабого поля, когда электрон постоянно сбивается с орбиты вокруг линий магнитного потока из-за столкновений с примесями и практически не чувствует магнитного поля. Обычно масштабы сильных магнитных полей в твердых телах  $\sim 1 - 10$  Тл. При поле  $\sim 1$  Тл ларморова частота  $\omega_c \sim 10^{11}$  с. Типичное время рассеяния на примесях  $\tau \sim 10^{-12} \div 10^{-14}$  с. Таким образом, даже в больших полях ( $> \sim 1$  Тл) реализуется режим “слабого поля” в смысле ранее сказанного:  $\omega_c \tau \ll 1$ . Однако это не мешает наблюдать эффект Холла, поскольку все равно можно с высокой точностью измерять поперечную Э.Д.С. Холла, выражающую меру отклонения электронов проводимости в поперечном магнитном полю направлении.

В реальном твердом теле электрон проводимости не является свободной частицей, и его масса в общем случае отлична от массы свободного электрона (по определению тензор эффективных масс  $m_{\alpha\beta}$  для электрона с энергией  $E(k)$  имеет вид  $m_{\alpha\beta}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk_\alpha dk_\beta}$ ,  $\alpha, \beta = x, y, z$ ), однако в квазиклассическом приближении при условии медленности изменения внешних полей и отсутствии электрического и магнитного пробоя сохраняется соотношение (\*) (только уже не для реального импульса, а для квазиимпульса  $k$  блоховского электрона – электрона в зонной схеме). Обобщение тензора магнетосопротивления на случай зонного электрона уже не так тривиально. Рассмотрим следующую модельную задачу. Пусть имеется двухзонная система, т.е. электроны в каждой системе характеризуются своим тензором магнетосопротивления

$$\hat{\rho}_i = \begin{pmatrix} \rho_i & -R_i H \\ R_i H & \rho_i \end{pmatrix}; \quad i=1,2.$$

Согласно соотношениям  $\frac{1}{\rho_i} = \frac{e_i^2 n_i \tau}{m_i}$  и  $R_i = \frac{1}{n_i e_i c}$  мы тем самым задаем концентрацию, заряд и эффективную массу носителей заряда отдельно по зонам (положим для простоты время

рассеяния одинаковым для обеих зон). Получим матрицу магнетосопротивления системы, суммируя токи по зонам.

Суммарный ток:

$$j_{\alpha} = [\sigma_{\alpha\beta}^1 + \sigma_{\alpha\beta}^2] E_{\beta}, \quad \alpha, \beta = x, y; \quad \hat{\sigma}_i^{-1} = \hat{\rho}_i;$$

Обращая матрицы, получаем итоговую матрицу магнетосопротивления:

$$\hat{\sigma}^{-1} = \hat{\rho}; \quad \hat{\sigma} = \hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2; \quad \hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho & -R_H H \\ R_H H & \rho \end{pmatrix}$$

$$\rho = [\rho_1 \rho_2 (\rho_1 + \rho_2) + (\rho_1 R_2^2 + \rho_2 R_1^2) H^2] / A$$

$$R_H = [R_1 \rho_2^2 + R_2 \rho_1^2 + R_1 R_2 (R_1 + R_2) H^2] / A$$

$$A = (\rho_1 + \rho_2)^2 + (R_1 + R_2)^2 H^2$$

В пределе сильного и слабого поля находим:

$$H \rightarrow 0 \quad (\omega_c \tau \ll 1):$$

$$а) \quad \rho = \rho_1 \rho_2 / (\rho_1 + \rho_2);$$

$$R_H = (R_1 \rho_2^2 + R_2 \rho_1^2) / (\rho_1 + \rho_2)^2$$

$$H \rightarrow \infty \quad (\omega_c \tau \gg 1):$$

$$б) \quad \rho = (\rho_1 R_2^2 + \rho_2 R_1^2) / (R_1 + R_2);$$

$$R_H = R_1 R_2 / (R_1 + R_2)$$

Во втором случае, в сильных полях, можно преобразовать постоянную Холла:

$$R_H = R_1 R_2 / (R_1 + R_2) = 1 / (1/R_1 + 1/R_2) = \\ = 1 / (n_1 e_1 c + n_2 e_2 c)$$

Например, если мы имеем собственный полупроводник, а две зоны – это зона проводимости и валентная зона, то  $R_H = \frac{1}{|e|c(n_h - n_e)}$ . Таким образом, в достаточно сильных полях, когда зоны дают аддитивный вклад в проводимость, можно измерять суммарную концентрацию носителей заряда, несмотря на сложную энергетическую структуру. То есть, необходимо, чтобы в сильных полях вклад различных зон расцеплялся, в этом случае выражение для коэффициента Холла остается таким же универсальным, позволяя получать информацию о суммарной концентрации носителей и знаке заряда. Кроме того, линейная зависимость поперечной компоненты  $\rho_{xy}$  (холловского сопротивления) от магнитного поля в широком интервале температур и полей для многих однозонных веществ позволяет конструировать датчики Холла – измерители магнитного поля, обладающие высокой чувствительностью и малыми размерами. Как видно из анализа, само условие “сильного поля” соответствует случаю аддитивного вклада каждой зоны в холловский ток и пренебрежимо малой интерференции их между собой. Как правило, перенормировка эффективной массы (а она здесь – циклотронная, в которую дает вклад только часть тензора эффективной массы, поперечная магнитному полю –  $m_{xx}$ ,  $m_{xy}$ ,  $m_{yx}$ ,  $m_{yy}$ ) и времени рассеяния приводит к тому, что режим “сильного” поля вполне достижим для реальных полей  $\sim 1$  Тл и в реальных твердых телах.

Более сложные подходы к описанию эффекта Холла учитывают энергетическую зависимость времени релаксации, что также приводит к полевой зависимости магнетосопротивления и Э.Д.С. Холла даже в однозонном случае.

Поперечный размер образца, в котором наблюдается эта холловская Э.Д.С., не критичен для эффекта, лишь бы распределение тока по сечению было однородным. Если же мы хотим реализовать истинно двумерную геометрию эксперимента, следует применять фольги и пленки с таким поперечным размером, чтобы он был порядка и меньше характерного радиуса вращения электрона  $r_H$  в магнитном поле (ларморова радиуса). Такой поперечный размер образца вполне достижим. Однако при более сильных полях такая полуклассическая оценка становится неправильной. Более строгое квантово-механическое описание дает другой параметр для области локализации электрона в магнитном поле –  $l_H$  (называемого магнитной длиной). То есть, волновая функция электрона в поперечном магнитном полю направлении убывает как  $e^{-r^2/2l_H^2}$ , где  $l_H$  определяется следующим выражением:

$$l_H = \sqrt{\hbar c / eH} ,$$

что для поля  $H \sim 5 \div 10$  Тл приводит к  $l_H \sim 100$  Å. Структуры с поперечным профилем такого масштаба (*наноструктуры*) удастся сделать на базе гетероструктур GaAs, представляющих собой систему плоских квантовых ям. Такие структуры изготавливают послойным напылением на подложку полупроводника GaAs, чередуя его со слоями того же полупроводника, допированного алюминием. Трехвалентный Al, замещающий трехвалентный Ga, не меняет концентрацию электронов, участвующих в проводимости, однако имеет несколько иной ионный радиус и силу связи с As, и приводит к другому химическому потенциалу и дну зоны проводимости для электронов. В результате допированные алюминием области становятся энергетическими барьерами для электронного газа, и он располагается между ними в плоских областях чистого GaAs с поперечным размером порядка сотни ангстрем. Таким образом и реализуется двумерный электронный газ. Однако отсюда еще не следует, что для электронного газа отсутствует поперечная составляющая импульса, и электроны двумерны в физическом смысле. Для этого необходимо "включить" сильное магнитное поле, что и приводит к истинной двумерной ситуации.

Доказательство того факта, что магнитная длина и есть искомый характерный масштаб в *продольном* полю направлении выведем из следующих соображений. Как известно, в поперечном магнитном поле движение электрона проводимости финитно. Это приводит к дополнительному квантованию его энергии по так называемым уровням Ландау, так что его энергия как функция продольного импульса и номера уровня Ландау имеет вид:

$$E_j(k_z) = \hbar^2 k_z^2 / 2m + (j + 1/2)\hbar\omega_c, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

В геометрии периодического трехмерного "ящика" продольный импульс также в свою очередь квантуется:  $k_z = 2\pi n/d$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Если поперечный размер структуры  $d$  мал, то расстояние между уровнями энергии с различным импульсом  $k_z$  (так называемыми уровнями размерного квантования) велико. Для истинного двумерного состояния системы необходимо, чтобы все другие характерные энергии были много меньше, чем расстояние между уровнями размерного квантования, тогда фактически всегда будет реализован нулевой поперечный импульс. Математически следует записать условие:

$\hbar^2 k_z^2 / 2m \gg \hbar\omega_c$ , откуда немедленно следует искомое соотношение:  $d \ll l_H$ . Таким образом, в квантовой яме с таким поперечным размером электронный газ будет всегда находиться на нулевом уровне поперечного размерного квантования, то есть физически будет реализована двумерная ситуация.

## 2 неделя. Обычный эффект Холла

В 1980 году немецкий физик Клаус фон Клитцинг с соавторами в 1980 году обнаружили, что в сильных полях ( $\sim 5 - 10$  Тл) холловская проводимость квантуется. Они исследовали гетероструктуры на основе GaAs в сильных поперечных магнитных полях и при низких температурах и получали магнетосопротивление и холловское сопротивление как функции внешнего приложенного магнитного поля.

Этот эффект назвали целым квантовым эффектом Холла (аббревиатура: IQHE – Integer Quantum Hall Effect).

Одновременное измерение магнетосопротивления  $\rho_{xx}$  дает резкое уменьшение этой величины в точках реализации ступенек квантового эффекта Холла. Величина  $\rho_{xx}$  в этом случае исчезающе мала по сравнению со своим значением при нулевом магнитном поле.

Теоретическое объяснение было дано в следующем году Р.В. Лафлиным на основе рассмотрения движения носителей заряда в структуре  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} - \text{GaAs}$  как двумерных невзаимодействующих электронов, т.к. носители могут двигаться только в получающихся плоских квантовых ямах, поперек приложенного магнитного поля.

Лафлин учел, что энергия электронов в магнитном поле может принимать только дискретные значения, т.е. реализовываться только на уровнях Ландау. Он сразу использовал двумерную геометрию.

Получим явные выражения для энергии электрона в магнитном поле в более общем, трехмерном случае, решив стандартную задачу Шредингера, а затем перейдем к двумерной ситуации. Рассмотрим электрон в магнитном поле в геометрии ящика  $L_x, L_y, L_z$  с магнитным полем  $H$  по оси  $z$ . Решим уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi; \quad \hat{H} = [1/2m][(\hbar/i)\partial/\partial \vec{r} - (e/c)\vec{A}]^2.$$

Выберем калибровку  $\vec{A} = (-Hy, 0, 0)$ ;  $\vec{H} = (0, 0, H)$ . Если учесть, что оператор Гамильтона коммутирует с  $p_x, p_z$ ,

$$[\hat{H}, \hat{p}_x] = 0; \quad [\hat{H}, \hat{p}_z] = 0; \quad p_x = \text{const}, \quad p_z = \text{const},$$

волновую функцию ищем в виде:

$$\psi(x, y, z) = \exp[(i/\hbar)(p_x x + p_z z)]\varphi(y).$$

Подставляя ее в уравнение Шредингера, после некоторых переобозначений имеем уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi}{dy^2} + \frac{m}{2} \omega_c^2 (y - y_0)^2 \varphi = (E - p_z^2 / 2m)\varphi;$$

$$\omega_c = eH / mc; \quad y_0 = -p_x c / eH$$

Это уравнение гармонического осциллятора с известным решением – полиномами Эрмита  $H_n$ , и известным спектром. Если ввести обозначения

$$z = (y - y_0)/l_H; \quad \lambda = 2[E - p_z^2/2m]/\hbar\omega_c,$$

то получаем уравнение на модифицированные многочлены Эрмита:

$$\varphi'' + (\lambda - z^2)\varphi = 0$$

и решение:

$$\begin{aligned} \lambda_n &= 2n + 1; \quad \varphi_n(z) = H_n(z) \exp[-z^2/2]; \\ H_0(z) &= 1; \quad H_1(z) = 2z; \quad H_2(z) = 4x^2 - 2; \quad H_3(z) = 8x^3 - 12x; \dots \\ \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(z) \varphi_m(z) dz &= 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{n,m} \end{aligned}$$

Окончательно:

$$\begin{aligned} E_n(p_z) &= \hbar\omega_c(n + 1/2) + p_z^2/2m, \\ \varphi_n(y) &= \varphi_n^0 \exp(-[y - y_0]^2/2l_H^2) H_n([y - y_0]/l_H); \quad l_H = \sqrt{c\hbar/eH} \end{aligned}$$

Нормировка на единицу приводит к следующему значению для множителя:

$$\varphi_n^0 = [\pi^{1/4} l_H^{1/2} \sqrt{2^n n!}]^{-1}.$$

Величина  $l_H$  называется магнитной длиной и является масштабом пространственной локализации электрона в магнитном поле вместо классического радиуса Лармора. Уровни  $E_n$  называются уровнями (или подуровнями, подзонами) Ландау. Они эквидистантны, и отстоят друг от друга на  $\hbar\omega_c$ .

Энергия  $j$ -го уровня Ландау в плоской геометрии (когда  $p_z = 0$ ) имеет вид, похожий на энергию квантового осциллятора:  $E_j = (j + 1/2)\hbar\omega_c$ ,  $j = 0, 1, 2, \dots$ . Радиус орбиты (аналога радиуса Лармора в квантовом случае) электрона на  $j$ -м уровне Ландау растет с номером уровня:  $r_j^2 = 2(j + 1/2)l_H^2$

Видно, что радиус орбиты для низшего уровня Ландау ( $j = 0$ ) точно равен магнитной длине.

Важная характеристика электронного газа – плотность состояний – величина, характеризующая заселенность разрешенных уровней энергии. Все физические величины (в том числе и проводимость) либо пропорциональны, либо являются монотонными функциями плотности состояний электронов вблизи уровня Ферми  $E_F$  – граничной энергии, отделяющей свободные состояния от занятых (по крайней мере, при низких температурах).

Плотность разрешенных состояний на каждом уровне Ландау (т.е. концентрация электронов, приходящаяся на единицу площади, которые могут находиться на одном уровне Ландау) равна плотности квантов магнитного потока  $\Phi$ , пронизывающего двумерный слой:

$$n_H = \Phi/\Phi_0 = eH/2\pi \hbar c = 1/2\pi r_0^2,$$

где  $\Phi_0 = \hbar c / 2e$  – квант магнитного потока.

Плотность состояний  $N(E)$  двумерного электронного газа в поперечном магнитном поле имеет вид набора эквидистантных дельта-функционных пиков, разнесенных по энергии на величину  $\Delta E = \hbar\omega_c$ . Действительно, согласно определению плотности состояний запишем:

$$N(E) = \sum_{\gamma} \delta(E - E_{\gamma}) = 2 \frac{L_x}{2\pi\hbar} \int dp_x \frac{L_z}{2\pi\hbar} \int dp_z \sum_{n=0}^{\infty} \delta(E - E_n(p_z))$$

Т.к. по компонентам  $y, p_y$  задача была решена (и проквантована), эти фазовые переменные заменены новым квантовым числом  $n$ . Учтем, что из решения задачи о спектре можно определить максимальное значение импульса  $p_x$ :  $|p_x| < eHL_y/c$ . Тогда имеем окончательно:

$$N(E) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{eH}{c} \int_{-\infty}^{\infty} dp_z \sum_{n=0}^{\infty} \delta[E - p_z^2 / 2m - \hbar\omega_c(n + 1/2)]$$

Интегрирование дает

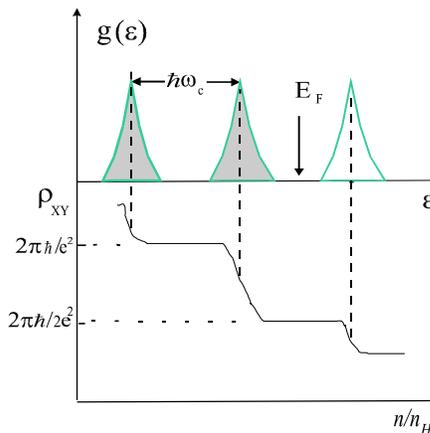
$$N(E) = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^2} \frac{eH}{c} \sqrt{2m} \sum_{n=0}^N [E - \hbar\omega_c(n + 1/2)]^{-1/2}; \quad N = [E / \hbar\omega_c - 1/2]$$

В точках  $E = \hbar\omega_c(n + 1/2)$  плотность состояний имеет особенности – корневые расходимости. Их высота и расстояние между ними определяется величиной магнитного поля. При слабом поле на “пьедестале”  $N(E) \sim \sqrt{E}$  видны слабые периодические всплески осцилляций (де-Гааза-ван-Альфена).

Найдем теперь плотность состояний в двумерном случае, если магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости системы, и поле достаточно сильное, так что фактически спины электронов сонаправлены по полю:

$$N(E) = \frac{L_x L_y}{2\pi \hbar} \frac{eH}{c} \sum_{n=0}^{\infty} \delta [E - \hbar\omega_c (n + 1/2)]$$

Получился набор эквидистантных дельта-пиков.



При наличии примесей рассеяние электронов размывает резкие пики в энергетические разрешенные зоны конечной ширины. Легко видеть, что уменьшая или увеличивая магнитное поле, мы соответственно сближаем или раздвигаем зоны Ландау по энергии. При изменении концентрации носителей (или при фиксированном значении концентрации, но с изменением магнитного поля  $H$ ) меняется положение уровня Ферми – максимальной энергии, до которой заполнены электронами уровни. Если  $E_F$  находится между двумя соседними зонами Ландау  $j$  и  $j + 1$ , то все состояния на  $j$ -уровне заполнены. Это соответствует полной двумерной концентрации

$$n = jn_H = jeH / 2\pi \hbar c = j / 2\pi l_H^2.$$

Для того, чтобы объяснить наблюдаемые экспериментально широкие плато  $\rho_{xy}$  и минимумы  $\rho_{xx}$ , вводится предположение о существовании на краях (“крыльях”) зон Ландау связанных состояний носителей заряда, не способных участвовать в электропроводности, то есть вся зона складывается как из локализованных (за счет примесей, кулоновского взаимодействия и других причин) состояний, не способных проводить ток в продольном направлении, так и из делокализованных, могущих переносить ток. Теоретические расчеты показывают, что практически вся зона заполнена локализованными носителями, при этом чем более низкоразмерная система, тем меньше доля делокализованных состояний, так что в чисто двумерном случае делокализованная область остается только в бесконечно узком пояске по энергии вблизи середины зоны Ландау.

Серединам наблюдаемых ступенек (плато) холловской проводимости соответствует расположение уровня Ферми посередине между уровнями Ландау, а переходный участок между двумя плато соответствует нахождению  $E_F$  в центре уровня Ландау, т.е. в одном из максимумов плотности состояний. Переход от одной ступеньки к другой при уменьшении магнитного поля сопровождается “заливкой” электронами все новых зон Ландау.

Рассмотрим качественно поведение магнетосопротивления и холловского сопротивления при изменении концентрации в двумерном слое. Пусть  $E_F$  вначале располагается в (широкой) области локализованных состояний  $j$ -го уровня (например, на верхнем, большем по энергии крыле зоны). Локализованные носители не участвуют в электропроводности. Делокализованные состояния, напротив, максимально заполнены, и проводят бездиссипативно ток (поэтому  $\rho_{xx} \rightarrow 0$ ), т.к. принцип Паули запрещает диссипативные переходы (все соседние по энергии состояния заняты локализованными носителями). Следует отметить, что последнее обстоятельство приводит также к условию  $\sigma_{xx} \rightarrow 0$ , т.к. несложно показать связь компонент тензора сопротивления и проводимости:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & -\rho_{xy} \\ \rho_{xy} & \rho_{xx} \end{pmatrix}; \Rightarrow \hat{\sigma} = \hat{\rho}^{-1} \Rightarrow$$

$$\sigma_{xx} = \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}; \quad \sigma_{xy} = \frac{-\rho_{xy}}{\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2}.$$

Таким образом, в двумерной ситуации с исчезновением сопротивления исчезает и проводимость (и наоборот).

Т.к. все делокализованные состояния расположены по энергии ниже  $E_F$ , то концентрация носителей в них максимальна и равна  $n = jeH / 2\pi \hbar c$ , и  $\rho_{xy}$  имеет квантованное значение.

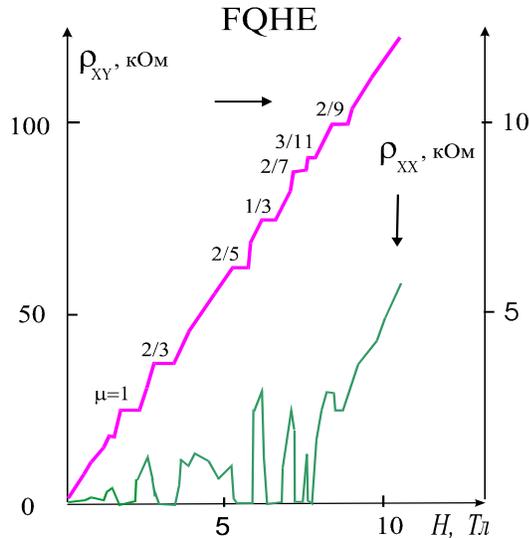
При увеличении концентрации добавляемые в двумерный слой новые носители попадают в области локализованных носителей, пока уровень Ферми не попадет в делокализованную область. Концентрация делокализованных носителей при этом не изменяется и, следовательно, не изменяется значение  $\rho_{xy}$ . Так будет продолжаться до тех пор, пока  $E_F$  не выйдет за пределы области локализованных состояний и не попадет в область делокализованных состояний на уровень  $j + 1$ . При этом концентрация носителей в областях, занимаемых делокализованными состояниями, начнет изменяться соответственно изменению уровня Ферми, этому соответствует переходный участок между двумя соседними плато  $\rho_{xy}$ . Из-за изменения концентрации делокализованных носителей резко возрастет  $\sigma_{xx}$  (и  $\rho_{xx}$ ). Локализованные состояния играют роль своеобразного буфера (энергетической щели), разделяющего делокализованные состояния по энергии.

Условия наблюдения квантового эффекта Холла:

- 1) достаточно сильные магнитные поля ( $> 1$  Тл), чтобы расстояние между соседними уровнями Ландау не перекрывалось их шириной, обусловленной примесями;
- 2) достаточно низкие температуры  $kT \ll \hbar\omega_c \sim 1 \div 5$  К, чтобы температурные флуктуации энергии также не “замазали” подуровни Ландау;
- 3) достаточно большая двумерная концентрация носителей ( $> 10^{10}$  см<sup>-2</sup>), соответствующая практически металлической проводимости инверсионного слоя;
- 4) существование двумерного в физическом смысле газа носителей заряда.

### 3 неделя. Дробный квантовый эффект Холла

В 1982 году Д.С. Тсуи, Х.Л. Штермер и А.С. Госсард обнаружили, что при заполнении  $\mu = 2\pi l_H^2 n = 1/3$ , т.е. “заливке” ровно  $1/3$  первой зоны Ландау, на зависимости  $\rho_{xy}(H)$  имеется плато, причем  $\rho_{xy} = 2\pi\hbar/e^2\mu$  при  $\mu = 1/3$ .



В 1983 году Р.В. Лафлин предположил, что описать электроны в двумерном слое в условиях неполной заливки уровня Ландау нельзя без учета кулоновского взаимодействия между ними. Он показал, что вследствие сильного кулоновского отталкивания они образуют несжимаемую квантовую жидкость – *жидкость Лафлина*. Он построил вариационную волновую функцию электронов и показал формальную аналогию между этой системой и однокомпонентной двумерной плазмой, в которой взаимодействие между заряженными частицами описывается потенциалом, логарифмически зависящим от расстояния между частицами.

Рассмотрим в двумерном случае электрон в сильном поперечном магнитном поле. В этом случае удобно выбрать цилиндрическую геометрию. Векторный потенциал можно выбрать в следующем виде:

$$A_\rho = A_z = 0; \quad A_\phi = H/2(-y, x) = H\rho/2.$$

Представляя оператор Гамильтона

$$\hat{H} = [1/2m^*][(\hbar/i)\partial/\partial\vec{r} - (e/c)\vec{A}]^2$$

в цилиндрических координатах, ищем решение уравнения Шредингера в виде:

$$\psi(\rho, \phi, z) = R(\rho) \exp[ik_z z + im\phi]$$

Для радиальной части имеем следующее уравнение:

$$[\partial^2/\partial\rho^2]R + 1/\rho[\partial/\partial\rho]R - \frac{m^2}{\rho^2}R - \gamma^2\rho^2R + 2m\gamma R = -\beta R;$$

$$\gamma = eH/2\hbar c = 1/2l_H^2; \quad \beta = 2m^*E/\hbar^2 - k_z^2.$$

Далее проводим перенормировку радиальной переменной на магнитную длину, и вводим безразмерный параметр  $\xi = \gamma\rho^2$ , тогда уравнение принимает вид:

$$\xi[\partial^2/\partial\xi^2]R + [\partial/\partial\xi]R + R[\lambda - \frac{\xi}{4} - \frac{m^2}{4\xi}] = 0,$$

$$\lambda = \beta/4\gamma + m/2.$$

Несложно видеть прямо из последнего уравнения асимптоты решения:

$$R(\xi) \sim \begin{cases} \exp[-\xi/2]; & \xi \rightarrow \infty; \\ \xi^{|m|/2}; & \xi \rightarrow 0. \end{cases}$$

Ищем решение в виде  $R(\xi) = W(\xi)e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}$ , где на функцию  $W$  следует наложить условия ограниченности в нуле и на бесконечности. В итоге после преобразований получаем окончательное уравнение:

$$\xi W'' + [ |m| + 1 - \xi ] W' + [ \lambda - ( |m| + 1 ) / 2 ] W = 0.$$

Полученное дифференциальное уравнение – типичное уравнение для вырожденной гипергеометрической функции (Куммера).

Ограничение решения на бесконечности требует, чтобы выполнялось соотношение  $n = \lambda - ( |m| + 1 ) / 2$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ , тогда гипергеометрическая функция превращается в конечный полином. Последнее и есть искомый спектр, который после восстановления исходных обозначений принимает вид:

$$E_{nm}(k_z) = \hbar\omega_c(n + |m|/2 - m/2 + 1/2) + \hbar^2 k_z^2 / 2m^*.$$

Полная волновая функция имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi(\rho, \varphi, z) &= R(\rho) \exp[ik_z z + im\varphi] = \\ &= \exp[ik_z z + im\varphi - \xi/2] \xi^{|m|/2} \end{aligned}$$

В плоской геометрии  $k_z = 0$ , и

$$\psi_m(z) = \frac{z^m}{\sqrt{2\pi} 2^m m!} \exp[-|z|^2/4]; \quad z = (x + iy)/l_H.$$

Окончательно, нормируя интеграл от квадрата модуля волновой функции по всей комплексной плоскости  $Z$  на единицу, имеем:

$$\psi_m(z) = \frac{z^m}{\sqrt{2\pi} 2^m m!} \exp[-|z|^2/4].$$

а условия ограниченности решения на бесконечности приводят к выражению, определяющему спектр электрона:

$$E_{nm}(k_z) = \hbar\omega_c(n + |m|/2 - m/2 + 1/2) + \hbar^2 k_z^2 / 2m^*$$

Здесь  $n$  – номер зоны Ландау. Таким образом, кроме обычного квантования по зонам Ландау имеет место квантование по угловому моменту  $m$ . В каждой зоне Ландау с определенным  $n$  имеется бесконечный набор вырожденных энергетических уровней  $m$  с энергией, совпадающей с обычной энергией уровня Ландау:

$$E_{nm}(k_z) = \hbar\omega_c(n + 1/2) + \hbar^2 k_z^2 / 2m^* .$$

Жидкость Лафлина оказалась новым квантовым состоянием двумерной взаимодействующей системы. Специфическая особенность состояния Лафлина – элементарные возбуждения в ней могут иметь дробный заряд. Лафлин предложил рассмотреть следующую ситуацию для построения возбужденного состояния: в какой-либо точке плоскости  $z_0$  вносится перпендикулярно ей бесконечный тонкий соленоид и через него адиабатически медленно пропускается единичный квант магнитного потока. Соответствующую добавку в векторный потенциал можно учесть из калибровочного сдвига, что просто приведет к увеличению на единицу углового момента в одночастичной волновой функции:

$$(z - z_0)^m \exp[-1/4 |z|^2] \Rightarrow (z - z_0)^{m+1} \exp[-1/4 |z|^2]$$

Соответственно, вариационная волновая функция должна быть переписана в виде:

$$\psi_m^{+z_0} = A_{z_0} \psi_m = \left\{ \prod_i (z_i - z_0) \prod_{j < k} (z_j - z_k)^m \right\} \exp \left[ -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^N |z_i|^2 \right].$$

Эта волновая функция соответствует элементарному возбуждению, которое называют “квазиэлектрон”. Аналогично можно ввести элементарное возбуждение – “квазидырка”, с волновой функцией  $\psi_m^{-z_0} = A_{z_0}^* \psi_m$ .

Полученные элементарные возбуждения являются частицами с зарядом  $e^* = e/m$ .

Квазичастицы, “квазидырка” и “квазиэлектрон”, локализованы в области пространства размером порядка магнитной длины. Конечный размер позволяет оценить энергию, необходимую для создания таких квазичастиц. Пользуясь аналогией с плазмой, и исходя из энергии экранирования плазмой единичного заряда, Лафлин оценил энергетическую щель в спектре:

$$\Delta = E(\Psi_m^{+z_0}) + E(\Psi_m^{-z_0}) - 2E(\Psi_m)$$

Оценки дают  $\Delta \sim \frac{e^2}{\epsilon m^2 l_H} \sim 4 \div 5$  К при поле  $\sim 10$  Тл,  $m = 3 \div 5$ ,  $\epsilon \sim 10$  (диэлектрическая константа) и подтверждаются точными численными расчетами.

Таким образом, основное состояние жидкости Лафлина отделено от возбужденного состояния конечной энергетической щелью. Соответственно, конечная щель говорит о том, что эта жидкость несжимаема, и оценки энергетической щели вполне соответствуют эксперименту. Лафлиновское состояние обладает специфическим дальним порядком, чем-то напоминающим сверхпроводящее состояние. Величина энергетической щели  $\Delta$  играет практически ту же роль в теории лафлиновской жидкости, как и модуль параметра порядка в сверхпроводниках. Наличие конечной энергетической щели приводит к почти идеальной проводимости электронов в лафлиновском состоянии (так что сопротивление,

в соответствии с экспериментом, экспоненциально стремится к нулю, как и в целом квантовом эффекте Холла). Более того, собственно ступеньки дробного квантового эффекта Холла более четко отслеживаются именно по резкому уменьшению величины  $\rho_{xx}$ .

Несжимаемость вызывает специфические продольные коллективные возбуждения в отсутствие звуковой волны растяжения-сжатия и имеющие энергию  $\sim \Delta$  в длинноволновом пределе. Они и реализуют проводимость без резистивных потерь при нулевой температуре. Ситуация такая же, как и в случае полностью заполненной зоны Ландау ( $m = 1$ ) для IQHE, когда похожие коллективные возбуждения имеют место при энергии  $\hbar\omega_c$ .

Известно, что сверхпроводники второго рода в магнитном поле, меньшем некоторого первого критического  $H_{c1}$ , полностью выталкивают внешнее поле из своего объема (так называемый эффект Мейсснера). При поле, большем  $H_{c1}$ , ситуация несколько иная – магнитное поле проникает в сверхпроводник, причем через области нормальной фазы, окруженные экранирующими вихревыми токами, направленными против внешнего поля вихрями Абрикосова. В случае лафлиновского состояния ситуация подобная: сначала система генерирует холловские токи без сжатия, затем при критическом сжатии коллапсирует в квантовый объем  $2\pi m l_H^2$  (макроскопическая капля). Это подобие вихря (как в сверхпроводниках второго рода), окружено циркулирующим холловским током, направленным против сжатия.

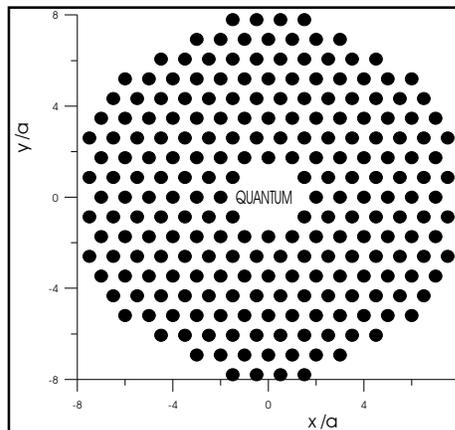
Собственно для объяснения ступенек FQHE следует опять учесть естественные примеси и неоднородности, имеющие место в реальных полупроводниковых гетероструктурах. Фактически они здесь играют ту же роль, как и в теории IQHE. “Электронные” и “дырочные” квазичастичные зоны, разделенные в чистом, беспримесном случае энергетической щелью  $2\Delta$ , уширены в континуум, состоящий из двух зон возбужденных состояний, разделенных зоной локализованных состояний, захватывающих “крылья” зон. Как только уровень Ферми проходит через делокализованную область, происходит переход до следующего состояния Лафлина, и возрастают резистивные потери  $\rho_{xx}$ . При увеличении  $m$  уменьшается энергетическая щель, и FQHE проявляется все слабее.

Электронный газ в условиях дробного квантового эффекта Холла в принципе должен совершенно по иному реагировать на изменение концентрации примесей, чем в условиях целочисленного. Если при целочисленном эффекте возрастание концентрации примесей в известных пределах уширяет плато на полевой зависимости холловского сопротивления, то при дробном эффекте увеличение концентрации примеси может уменьшить ширину плато, т.к. конечная щель в спектре возбуждений  $2\Delta$  не будет замазываться примесями только при условии, что время столкновений  $\tau > \hbar/\Delta$ . Как только примесей много, щель между основным, локализованным на примесях, и делокализованными квазичастичными состояниями уменьшается. При наличии вигнеровской кристаллизации вблизи плато можно ожидать нелинейную зависимость ширины плато от концентрации, т.к. локализация электронов за счет кулоновского “запирания” может разрушаться примесями.

#### 4 неделя. Вигнеровская кристаллизация

К настоящему моменту надежно экспериментально установлено, что около факторов заполнения  $\mu = 1/3$  и  $\mu = 1/5$  имеет место активационный закон магнетосопротивления. Это косвенно свидетельствует о диэлектризации системы, о локализации электронов и реализации регулярной решетки из носителей заряда. Соображения, приводящие к возможности локализации (впервые рассмотренные Лозовиком и Юдсоном) достаточно очевидны: при усилении магнитного поля магнитная длина  $l_H$  – масштаб пространственной локализации волновой функции электрона в присутствии магнитного поля – уменьшается, т.е. при своем движении вокруг линий магнитного потока носители заряда все более сжимают радиус «витков» (если пользоваться классической аналогией движения), и фактически имеют определенные в пространстве координаты. При наличии сильного кулоновского отталкивания имеем газ практически классических частиц в двумерном пространстве, которые могут выстроиться в регулярную плоскую треугольную структуру для минимизации энергии, “запирая” себя в точках равновесия. Действительно, двумерная концентрация электронов определяется формулой  $n = \mu/2\pi l_H^2$ . С другой стороны, в треугольной плоской решетке с периодом  $a$  из геометрических соображений  $n = 2/\sqrt{3}a^2$ . Отсюда получаем соотношение

$$(a/l_H)^2 = 4\pi/\sqrt{3}\mu.$$



Следует подчеркнуть, что точное теоретическое обоснование вигнеровской кристаллизации – очень непростая задача. Какие-либо аналитические оценки в сильно-взаимодействующем электронном газе проблематичны из-за отсутствия параметров малости и невозможности использования теории возмущений. В последнее время развитие компьютерного моделирования привело к возможности численного анализа ограниченных низкоразмерных систем. Расчеты методом Монте-Карло и точной диагонализации гамильтоновой матрицы в двумерной взаимодействующей электронной системе проводятся на конечных (10 – 30 электронов) кластерах в различной геометрии. Рассчитывают энергию, волновые функции и различные корреляционные взаимодействия. Задачу для таких малых систем можно решить *точно*, без использования каких-либо приближений.

Рассмотрим двумерный Ферми-газ с кулоновским взаимодействием. Численно решать такую систему можно, перейдя от координатного представления в дискретный базис. Поэтому следует переписать гамильтониан в представлении вторичного квантования по наиболее адекватному задаче полному базису волновых функций. В сильном магнитном

поле (имеет смысл выбрать только одну ориентацию спина, т.е. бесспиновую ситуацию – все спины частиц направлены по полю) имеется хорошее квантовое число – угловой момент  $m$  в первой зоне Ландау. Поэтому удобно полный ортонормированный базис выбрать по соответствующим одночастичным состояниям электрона в этой зоне.

Учитывая только кулоновское взаимодействие между частицами, можно переписать гамильтониан ферми-газа следующим образом в этом базисе:

$$H = \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} V_{m_1, m_2, m_3, m_4} a_{m_1}^+ a_{m_2}^+ a_{m_3} a_{m_4}$$

где  $a_m^+$  – оператор рождения электрона в состоянии (на орбитали)  $|m\rangle$ ,  $V_{m_1 m_2 m_3 m_4}$  – матричный элемент кулоновского взаимодействия в двумерном случае. Для гамильтониана выполняется закон сохранения углового момента:  $m_1 + m_2 = m_3 + m_4$ . Упростим задачу и расположим исходно частицы в классическую треугольную решетку с узлами, помещенными на низшую нулевую орбиталь ( $m = 0$ ). Период  $a$  такого вигнеровского кристалла выражается через электронную плотность и фактор заполнения орбиталей. Далее все расстояния будем исчислять в магнитных длинах, а все энергетические величины – в единицах  $e^2/\epsilon l_H$ ,  $\epsilon$  – диэлектрическая постоянная. Важно, что меняя период, можно в данной схеме менять фактор заполнения в соответствии с приложенным магнитным полем.

Для точного квантовомеханического расчета нужно “разморозить” центральную частицу, затем первую координационную сферу (еще 6 частиц) и т.д., и для этих частиц точно решить уравнение Шредингера. Однако число орбит должно быть ограничено из физических соображений и из ограничений компьютерной памяти и быстродействия. Нужно добиться такой ситуации, чтобы последующее увеличение максимального значения орбиты не меняло существенно заполнения орбит. Оценки дают, что уже при учете двух координационных сфер ( $N = 13$ ) приблизительно 65 орбит необходимы для расчета с фактором заполнения  $1/5$  (или 40 для  $\mu = 1/3$ ), что приводит к размеру базиса системы, недостижимому для метода точной диагонализации. Приходится ограничить расчет первой ячейкой вигнеровского кристалла и 7-ю частицами, но для них квантовую задачу решить *точно*. Для 7-ми электронов выбиралась 31 орбиталь ( $m = 0 \div 30$ ), их число подбиралось из условия, что числа заполнения  $\langle n_m \rangle$ , определяющие вероятность нахождения электрона в состоянии с орбитальным моментом  $m$ , не изменяются (с относительной точностью 0.001) при увеличении числа орбит, и следующие состояния (с  $m > 30$ ) не заполнены с этой же точностью. Даже в этом случае размер гамильтоновой матрицы равен  $2629575 \times 2629575$ . Кроме того, из-за кулоновского дальнего действия гамильтонова матрица является более плотной, чем в стандартных узельных задачах (модели Хаббарда,  $t - J$  и т.д), что усложняет ее хранение в памяти компьютера и обработку.

Итак, для численного анализа диагонализовалась матрица следующего гамильтониана:

$$H = \sum_{m_1, m_2, m_3, m_4} V_{m_1, m_2, m_3, m_4} a_{m_1}^+ a_{m_2}^+ a_{m_3} a_{m_4} + \sum_m V_m^{(MF)} a_m^+ a_m$$

где  $V_m^{(MF)}$  – стабилизирующее “среднее поле” внешних замороженных электронов (его расчет – самостоятельная задача). В общем случае оно несимметрично и вызывает переходы с изменением момента у внутренних электронов на  $\Delta m = \pm 6n$ , где  $n$  – целое (это происходит из-за симметрии треугольной решетки). Очевидно, что эта корреляция выгодна для “кристаллического” состояния центрального кластера. Чтобы обойти эту проблему и не облегчать системе кристаллизацию, игнорируем все переходы, кроме  $\Delta m = 0$ . Такая процедура эквивалентна усреднению по углам относительно вращения стабилизирующего потенциала вокруг центрального кластера, в итоге система сохраняет полный момент, и можно пользоваться этим инвариантом при расчете.

Наиболее адекватной величиной, позволяющей выявить различие между “твердым” и “жидким” состояниями в рассматриваемой системе, является парная корреляционная функция, т.е. вероятность нахождения электрона в точке  $z_1$  при условии нахождения второго электрона в точке  $z_2$ . Из соображений симметрии можно ожидать (по крайней мере, для достаточно малого фактора заполнения), что одна частица будет расположена в центре кластера, а остальные 6 частиц будут иметь максимум плотности распределения на расстоянии примерно  $a(\mu)$ , т.е. на первой координационной сфере. Состояние этих электронов существенно зависит от угла  $\theta$  между координатами частиц на первой координационной сфере. Тогда парную корреляционную функцию определим следующим образом:

$$g_\alpha(\theta) = \langle \alpha | \Psi^+(z_1) \Psi^+(z_2) \Psi(z_2) \Psi(z_1) | \alpha \rangle, \quad |z_1| = |z_2| = a,$$

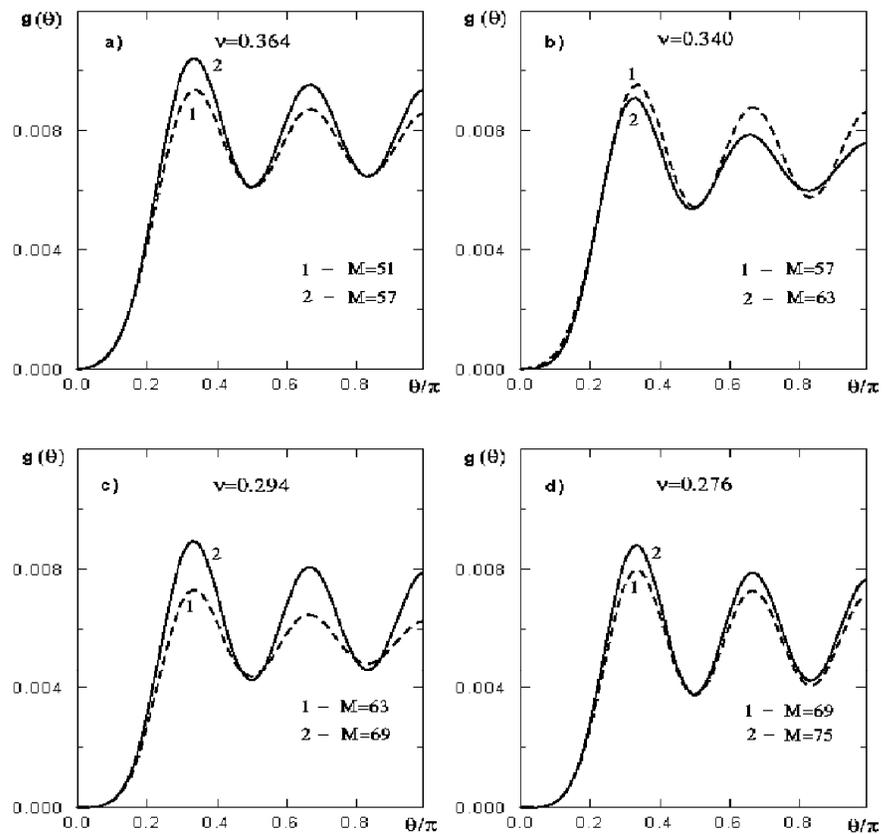
где  $\theta = \arg(z_1) - \arg(z_2)$  варьируется в интервале  $(0, \pi)$ ,  $|\alpha\rangle$  – основное состояние, полученное из точной диагонализации. В твердом состоянии, обладающем дальним порядком, следует ожидать три хорошо определенных осцилляции  $g(\theta)$ , в то время как в жидкой фазе, имеющей только ближний порядок, эти колебания должны быть сильно подавлены. В любом случае резкое (скачкообразное) изменение корреляционной функции основного состояния  $g_G(\theta)$  в зависимости от фактора заполнения  $\mu$  может служить критерием для перехода «жидкость – твердое тело».

На рис. показана корреляционная функция  $g(\theta)$ , рассчитанная для критического значения фактора заполнения  $\mu_M$ , для которого момент  $M_G$  резко меняется. При изменении момента в парной корреляционной функции скачкообразно увеличиваются амплитуды осцилляций. Это свидетельствует об установлении в системе более строгого упорядочения, присущего твердому телу.

Отметим также следующие важные факты. Нет сомнения в том, что точно при  $\mu = 1/3$  основное состояние ( $GS$ ) хорошо описывается Лафлиновской жидкостью, поэтому следует ожидать, что угловой момент  $GS$  будет равен  $M_G \left( a \left( \mu = \frac{1}{3} \right) \right) = N_e(N_e - 1)/\mu$ . Разумность “среднеполевой” процедуры контроля плотности подтверждается тем, что при  $\mu < 1/2$  положение максимума плотности частиц  $\rho(R)$  совпадает с расстоянием до первой координационной сферы  $a(\mu)$ .

*Окончательное резюме:* результаты расчетов поддерживают экспериментальные данные и свидетельствуют о возможности вигнеровской кристаллизации вблизи факторов заполнения  $\mu = \frac{1}{3}, \frac{1}{5}$ . Точнее, продемонстрировано, что *вигнеровский кристалл* является основным состоянием при  $\mu < 0.3$ , кроме диапазона  $0.294 < \mu < 0.34$  (включая  $\mu = \frac{1}{3}$ ),

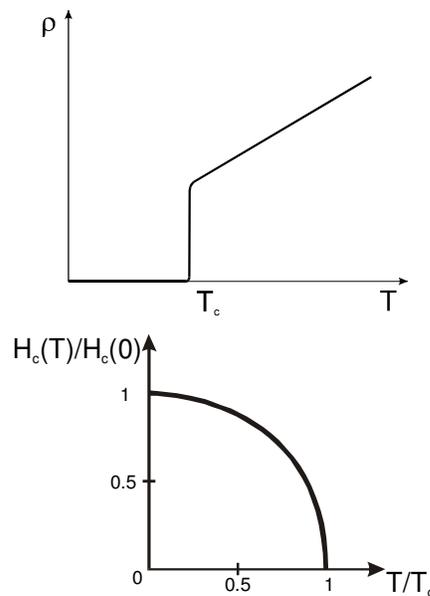
где лафлиновская жидкость существенно присутствует в структуре основного состояния. В принципе, на практике может наблюдаться целая цепочка фазовых переходов “вигнеровский кристалл” – “лафлиновская жидкость” – “вигнеровский кристалл”... при изменении магнитного поля и прохождении факторов заполнения через значения, где точно реализуются ступеньки FQHE.



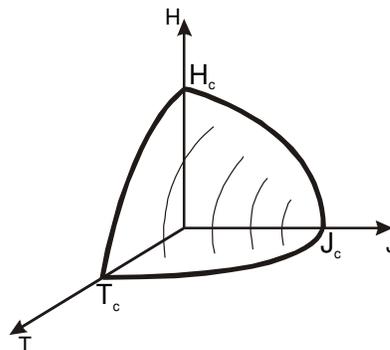
## 5 неделя. Обычные (низкотемпературные) сверхпроводники

В 1908 году в Лейденской лаборатории Камерлинг-Оннес сумел получить жидкий гелий (изотоп  $^4\text{He}$ ), что позволило приступить к систематическим исследованиям электрического сопротивления различных металлов при достаточно низких температурах. В 1911 году он обнаружил явление сверхпроводимости при исследовании сопротивления ртути при гелиевых температурах, и заключалось оно в том, что ниже некоей критической температуры, характерной для каждого отдельного вещества, у многих металлов и сплавов сопротивление скачком обращается в нуль. В настоящее время можно утверждать, что сопротивление в сверхпроводящем состоянии отсутствует, по крайней мере, на уровне  $10^{-24}$  Ом  $\times$  см. Вскоре после открытия явления сверхпроводимости было обнаружено, что сверхпроводимость разрушается при достижении некоего критического магнитного поля  $H_c$ . Оказалось, что оно чувствительно к температуре, и хорошо описывается эмпирической формулой:

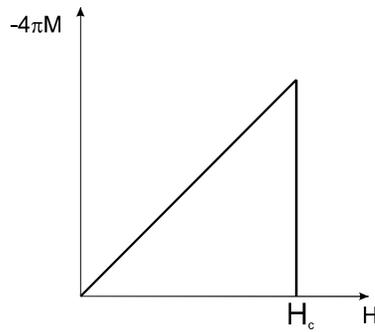
$$H_c(T) = H_c(0)[1 - (T/T_c)^2].$$



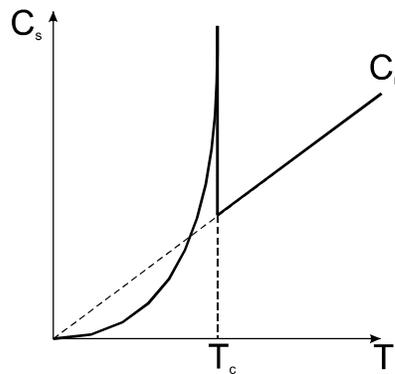
Кроме того, оказалось, что внешним параметром, разрушающим сверхпроводимость, можно назвать также транспортный ток. Типичные значения критической плотности тока:  $j_c \sim 10^5 \div 10^7$  А/см $^2$ . Когда же ток меньше критического, то он не затухает, и при замыкании кольца из сверхпроводника заведенный в это кольцо ток может циркулировать годами (что проверялось экспериментально).



В 1933 году Мейсснер и Оксенфельд обнаружили новое фундаментальное свойство сверхпроводников: оказалось, что макроскопический сверхпроводник оказывается идеальным диамагнетиком, т.е. магнитное поле внутри объемного сверхпроводника *всегда равно нулю*.



Вплоть до критического значения внешнее поле полностью компенсируется в толще сверхпроводника, т.е. сверхпроводник имеет восприимчивость  $\chi = -1/4\pi$ . При этом вытеснение магнитного потока не зависит от предыстории, т.е. от того, охлаждался ли образец в магнитном поле или нет. В то же время в идеальном проводнике магнитное поле, включенное при  $T > T_c$ , т.е. до перехода в сверхпроводящее состояние (в смысле состояния с бесконечной проводимостью), не выталкивалось бы. Таким образом, из эффекта Мейсснера сразу следовала возможность применения соотношений равновесной термодинамики к описанию сверхпроводников. Обнаруженный к этому времени скачок теплоемкости при переходе через  $T_c$ , а также сама температурная зависимость теплоемкости однозначно показали, что в отсутствие магнитного поля появление сверхпроводимости есть фазовый переход второго рода в состояние более упорядоченное, чем нормальное.



В 1935 году Ф.Лондон и Г.Лондон развили феноменологическую теорию электромагнитных свойств сверхпроводников. Основанный на двухжидкостном представлении, их подход постулировал “жесткость” волновой функции для сверхпроводящей компоненты, что приводило к исчезновению парамагнитного вклада в сверхток. В этом случае между током и векторным потенциалом получалось соотношение

$$\vec{j} = -\frac{c}{4\pi\lambda^2} \vec{A},$$

где  $\lambda$  – глубина проникновения магнитного поля (или лондоновская длина), а магнитное поле внутри сверхпроводника (как и ток) удовлетворяло следующему уравнению:

$$\text{rot rot } \vec{h} + \lambda^{-2} \vec{h} = 0.$$

Лондоновская длина оказалась напрямую связанной с концентрацией сверхпроводящих электронов  $n_s$  следующим образом:

$$\lambda^{-2} = 2\pi e^2 n_s / m.$$

Удалось объяснить эффект Мейсснера и показать, что магнитное поле спадает в глубь сверхпроводника по экспоненциальному закону:

$$h(x) = h(0)\exp[-x/\lambda].$$

Типичные значения  $\lambda \sim 500 \div 2000 \text{ \AA}$  при нулевой температуре. На слое такой же ширины в сверхпроводнике течет сверхток. Таким образом, эффект Мейсснера объясняется полной экранировкой внешнего магнитного поля незатухающими поверхностными токами.

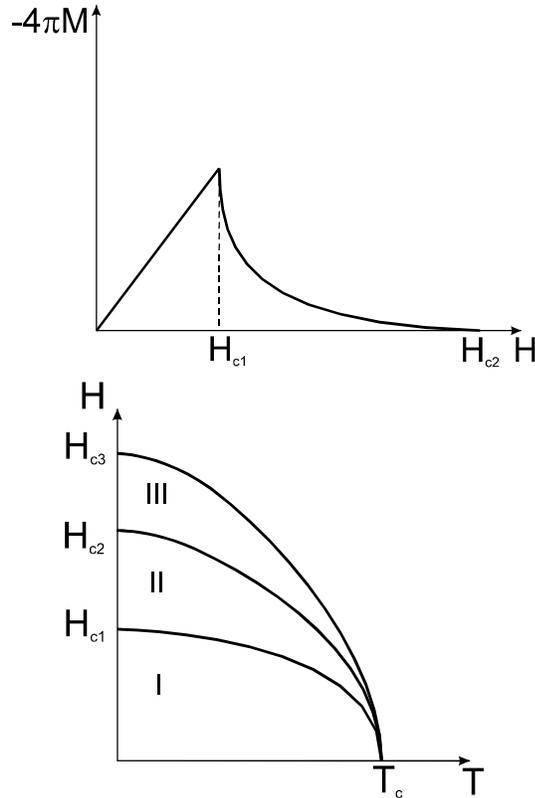
Наиболее впечатляющим достижением феноменологического подхода явилось создание в 1950 г. теории Гинзбурга – Ландау, основанной на общей теории Ландау фазовых переходов второго рода и гипотезе о комплексности сверхпроводящего параметра порядка. Открытие в 1938 году сверхтекучести жидкого гелия и объяснение этого явления Л.Д. Ландау на основе сформулированного им критерия для систем бозе-частиц позволило трактовать сверхпроводимость как сверхтекучесть электронной жидкости. В.Л. Гинзбург и Л.Д. Ландау сформулировали феноменологические уравнения, описывающие термодинамику и электромагнитные свойства сверхпроводников вблизи критической температуры. Для комплексного параметра порядка  $\Psi$  и тока они имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left[ \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{2e}{c} \vec{A} \right]^2 \Psi + \alpha \Psi + \beta |\Psi|^2 \Psi &= 0; \\ \vec{j} &= -\frac{ie\hbar}{m} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] - \frac{4e^2}{mc} |\Psi|^2 \vec{A}; \\ \left[ \frac{\hbar}{i} \nabla - \frac{2e}{c} \vec{A} \right] \Psi \Big|_n &= 0, \end{aligned}$$

где  $\alpha, \beta$  – феноменологические параметры Гинзбурга – Ландау, причем первый пропорционален разнице температур  $T - T_c$ , а второй слабо зависит от  $T$ . Последнее соотношение – граничное условие, соответствующее нулевой нормальной составляющей тока через границу. Теория Гинзбурга – Ландау (ГЛ) дала детальное и совпадающее с экспериментом описание магнитных свойств сверхпроводников, установила на основе анализа поверхностной энергии фундаментальное различие между сверхпроводниками I и II рода. Было показано, что основной параметр, определяющий род сверхпроводника – отношение глубины проникновения к длине когерентности – параметр ГЛ  $\kappa = \frac{\lambda}{\xi} > \frac{1}{\sqrt{2}}$  для сверхпроводников II рода и меньше  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  для I рода. На основе теории ГЛ А.А. Абрикосов и Н.Н. Заварицкий в 1952 г. указали на возможность существования нового класса сверхпроводников (II рода), а в 1957 г. Абрикосову удалось предсказать существование в фазе Шубникова двумерной периодической структуры вихревых нитей в этих же сверхпроводниках II рода (вихри Абрикосова). Позднее эту решетку вихрей наблюдали экспериментально как напрямую методами магнитного декорирования (т.е. распылением порошка из магнитных частиц на отшлифованной плоской поверхности сверхпроводника, перпендикулярной внешнему магнитному полю), так и по нейтронному рассеянию (т.е. прямую дифракцию нейтронов на решетке вихрей). Критические поля по теории ГЛ трактуются как поле появления первого одиночного вихря ( $H_{c1}$ ) и поле полного проникновения магнитного потока в сверхпроводник, когда нормальные сердцевинки вихрей (коры) сливаются ( $H_{c2}$ ). Теория ГЛ объяснила температурную зависимость критического магнитного поля, предсказала температурные зависимости двух характерных длин: глубины проникновения магнитного поля и длины когерентности

$$\lambda(T) \cong \lambda(0) [1 - T/T_c]^{-1/2}; \quad \xi(T) \cong \xi_0 [1 - T/T_c]^{-1/2}$$

отражающих характерный масштаб пространственных изменений магнитного поля и сверхпроводящего параметра порядка соответственно. Были рассчитаны профили поля и параметра порядка по сечению уединенного вихря Абрикосова, оказавшегося двухмасштабной структурой, состоящей из нормальной (несверхпроводящей) цилиндрической сердцевины диаметром  $\sim \xi$  (кор вихря), через которую проникает внешнее магнитное поле, и содержащей ровно один квант магнитного потока  $\Phi_0$ , и экранирующих кольцевых токов на большей длине  $\sim \lambda$ , на которой спадает поле.



Теория ГЛ дала объяснение не только объемным фазам  $0 < H < H_{c1}$ ,  $H_{c1} < H < H_{c2}$ , но и наблюдаемой экспериментально поверхностной сверхпроводимости  $H_{c2} < H < H_{c3}$ , (метастабильные зародыши сверхпроводящей фазы на поверхности сверхпроводника), взаимодействию вихрей с границей (барьер Бина – Ливингстона), а также явлениям промежуточного состояния, связанного с геометрией образцов.

Согласно теории ГЛ, первое, второе и термодинамическое критические поля выражаются через квант магнитного потока и характерные длины следующим образом:

$$H_{c1} = \ln\left(\frac{\lambda}{\xi}\right) \frac{\Phi_0}{4\pi\lambda^2}, \quad H_{c2} = \frac{\Phi_0}{2\pi\xi^2}, \quad H_c = \frac{\Phi_0}{2\pi\sqrt{2}\lambda\xi}.$$

Отсюда можно связать эти поля соотношением:  $H_{c1}H_{c2} = H_c^2 \ln \kappa$ . Это соотношение используется для оценки длины когерентности и глубины проникновения.

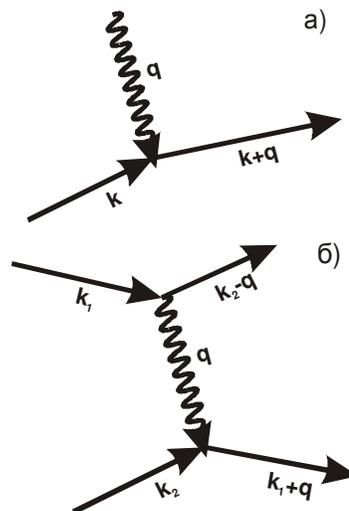
Другим ярким проявлением сверхпроводящего состояния с единой комплексной волновой функцией, как предсказывает теория ГЛ, явился эффект Джозефсона. Наблюдается он в контакте двух сверхпроводников, разделенных либо диэлектрической прослойкой, либо геометрическим сужением зоны контакта (микромостик, туннельный переход). Различают стационарный и нестационарный эффекты Джозефсона. Стационарный заключается в протекании постоянного тока через контакт без сопротивления, так как квантовое туннелирование пар электронов делает

единой волновую функцию. При увеличении тока через контакт вплоть до появления конечного напряжения  $V$  проявляется нестационарный эффект: это напряжение имеет переменную составляющую, осциллирующую с частотой, равной  $\omega = 2eV$ .

Несмотря на очевидные успехи, феноменологические подходы не позволили раскрыть микроскопический механизм явления сверхпроводимости. Ключевая идея принадлежит Фрелиху, который предположил, что сверхпроводимость является следствием взаимодействия электронов с волнами решетки (фононами), приводящего к косвенному притяжению между электронами. Обнаруженный в этом же году изотопический эффект блестяще подтвердил роль решетки в сверхпроводимости.

Купер в 1956 году показал, что при “включении” в ферми-систему сколь угодно слабого взаимодействия в узком слое вблизи поверхности Ферми (в импульсном пространстве) основное состояние двух выделенных электронов будет неустойчиво относительно образования связанного состояния. Этот факт называют феноменом Купера. Анализ Купера показал, что в этом случае электронам выгодно образовывать связанные пары с суммарным импульсом и спином, равным нулю (в отсутствие тока). Оценки размера такой связанной пары (куперовской пары) дают масштаб  $\xi_0 \sim 10^{-4}$  см. Согласно Куперу,  $\xi_0 = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar v_F}{|E|}$ , где  $E$  – энергия связи:  $E = -\hbar\omega e^{-2/\lambda}$ ,  $\omega$  – частота обрезания модельного взаимодействия ( $-V$ ) (порядка частоты Дебая),  $\lambda = VN(0)$  – константа взаимодействия. Сравнительно небольшая энергия связи куперовской пары оказывается существенно меньше кинетической энергии электронов, поэтому, согласно квантовой механике, связанные состояния не должны были бы возникнуть. Однако в данном случае речь идет об образовании пар не из свободных изолированных электронов, а из возбуждений электронного газа на поверхности Ферми, т.е. фактически о двумерной задаче. А хорошо известно, что в двумерной потенциальной яме связанные состояния возникают при сколь угодно малой глубине потенциала, поэтому Купер и получил отсутствие порога по взаимодействию. Полученная также неаналитичность выражения для энергии связи по константе взаимодействия и объясняла трудности регулярной теории возмущений по параметру  $\lambda$ .

Опираясь на идею Купера, в 1957 г. Бардин, Купер и Шриффер построили первую успешную микроскопическую теорию сверхпроводимости – теорию БКШ. Они сконструировали “редуцированный” гамильтониан системы (гамильтониан БКШ), учитывая только взаимодействие между электронами через фононы во втором порядке теории возмущений (первый порядок – обычное рассеяние электрона с испусканием (поглощением) фонона).

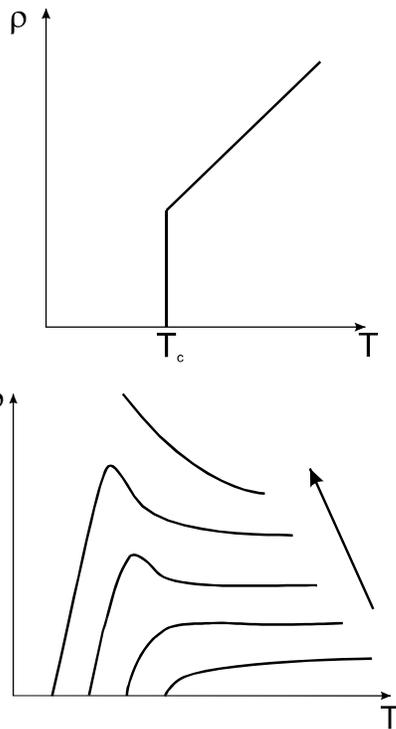


## 6 неделя. Основные классы ВТСП

Можно выделить несколько главных семейств термодинамически стабильных ВТСП: лантановые (неодимовые) структуры 2-1-4:  $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}_4$  (M – двухвалентный ион  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ) с близкими  $T_c \sim 30 - 40$  К; редкоземельные 1-2-3:  $\text{M}\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+y}$ , M = Y, Lu, Nd, Sm, Eu, Gd, Er, Ho, Yb с критическими температурами  $T_c \sim 80 - 90$  К; 1-2-4 (иттриевоподобные):  $\text{La}_3\text{Ba}_3\text{Cu}_6\text{O}_{14+y}$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$  и др., многие с  $T_c > 77$  К; и, наконец, сложные многокомпонентные купраты, представляемые общей формулой как  $(\text{Bi, Tl, Pb, Hg})_m(\text{Sr, Ba})_2\text{Ca}_{n-1}\text{Cu}_n\text{O}_x$ ,  $m, n = 1, 2, \dots$ , обладающие чрезвычайным разнообразием стехиометрических составов и фаз (висмутовые, таллиевые, ртутные и др. ВТСП).

В хороших монокристаллах и пленках оксидных ВТСП наблюдается почти линейный рост сопротивления с повышением температуры сразу за  $T_c$  вплоть до  $T = 300$  К и выше без насыщения. Такой “металлический” ход температурной зависимости до сих пор окончательно не прояснен. Следует сказать, что величина удельного сопротивления при этом  $\sim 400 - 800 \times 10^{-6}$  Ом  $\times$  см, т.е. на три порядка выше, чем у металлов.

Характерной особенностью высокотемпературных сверхпроводников является близость сверхпроводящего и диэлектрического состояний. Поэтому наблюдаются фазовые переходы “металл – диэлектрик”, индуцированные, например, изменением концентрации кислорода (у образцов 1-2-3  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$ ), или замещением атомов металла (атомов иттрия бором в системе 1-2-3, атомов кальция одним из редкоземельных элементов (Nd, Sm, Gd, Dy) в системе  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$  и т.п.



В системе  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+\delta}$  при уменьшении содержания кислорода от значения  $\delta = 1$ , соответствующего наиболее высоким критическим параметрам, до  $\delta = 0.5$ , где сверхпроводимость исчезает, изменяется характер температурных зависимостей электросопротивления от металлического к полупроводниковому, понижается  $T_c$ . При этом температурная зависимость подчиняется закону Мотта для прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка ( $\rho \sim e^{(T_0/T)^{1/4}}$ ), т.е. можно предположить, что происходит переход

металл – диэлектрик андерсоновского типа (локализация носителей заряда в случае, когда амплитуда случайного потенциала дефекта превысит уровень Ферми).

Похожие эффекты наблюдаются при радиационном воздействии на ВТСП. При облучении высокоэнергетичными электронами, ионами, нейтронами также происходит смена “металлической” зависимости на полупроводниковую (только непосредственно за переходом, в низкотемпературной области). Также ход температурной зависимости в большинстве случаев укладывается в схему фазового перехода металл – диэлектрик из-за андерсоновской локализации. Некоторые особенности указывают на сценарий Мота – Хаббарда как возможный механизм такого фазового перехода, когда учитывается расщепление энергетических зон за счет сильных кулоновских взаимодействий (в этом случае фазовый переход металл – изолятор происходит из-за появления диэлектрической щели в зоне проводимости, обусловленной кулоновским отталкиванием носителей заряда). На это указывают также экспериментальные данные по влиянию давления на температурную зависимость удельного сопротивления. Так, в висмутовом соединении 2-2-1-2 наблюдается тенденция к полупроводниковому виду температурной зависимости при увеличении давления до 160 кбар.

Оценки постоянной Зоммерфельда  $\gamma$  из измерений электронной теплоемкости в нормальном состоянии (в приближении свободных электронов  $C = \gamma T$ ,  $\gamma = \left(\frac{2\pi^2}{3}\right) N(E_F)$  и энергии Ферми дают  $E_F \sim 1000$  К, что чрезвычайно мало, и низкую скорость на поверхности Ферми  $v_F \sim 10^7$  см/с. На температурной зависимости теплоемкости в точке перехода прослеживается иногда аномально большой скачок (по сравнению с 1.43 из БКШ), а ниже  $T_c$  часто наблюдают не экспоненциальную, а степенную зависимость, никак не вписывающуюся в концепцию конечной энергетической щели в спектре возбуждений, типичной для сверхпроводника.

В соединениях ВТСП чрезвычайно низкие концентрации носителей заряда (по измерениям коэффициента Холла)  $n \sim 10^{21}$  см<sup>-3</sup>. Более того, эффект Холла показал, что практически во всех ВТСП носители – дырки, за исключением неодимового и празеодимового ВТСП, где реализуется электронная проводимость. Зависимость  $T_c(n)$ , полученная из эксперимента, как правило, линейна для большинства ВТСП.

ВТСП-соединения обладают сильной анизотропией физических свойств даже в нормальном состоянии. Так, проводимость в плоскости, перпендикулярной кристаллографической оси  $c$  в 5-10 раз выше, чем в продольном направлении. Также соотносятся и значения критических токов и полей, т.е. ВТСП – сверхпроводники второго рода с сильной анизотропией первого и второго критических полей, глубины проникновения магнитного поля, критического тока, длины когерентности. Критический ток в качественных образцах (монокристаллах) примерно такой же, как и в низкотемпературных сверхпроводниках:  $\sim 10^6 - 10^7$  А/см<sup>2</sup> при низких температурах и  $\sim 10^4 - 10^5$  А/см<sup>2</sup> при  $T = 77$  К. Причем на пленочных образцах ВТСП были обнаружены более высокие критические токи, чем в объемных. Критические поля в ВТСП существенно выше. Измерения дают  $H_{c2} > \sim 100$  Тл. Температурная зависимость  $H_{c2}(T)$ , в отличие от низкотемпературных СП, имеет иногда другую по знаку вторую производную, т.е.  $\frac{d^2 H_{c2}}{dT^2} > 0$  при малых температурах.

Особенность ВТСП – очень малые длины когерентности (несколько периодов решетки). Это говорит о сильной локализации, сильных корреляциях носителей заряда, в отличие от носителей заряда в традиционных сверхпроводниках.

Изотопический эффект при замене <sup>16</sup>□ на <sup>18</sup>□ в иттриевом ВТСП YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>6+δ</sub> практически отсутствует, проводились замены изотопов Ba и Cu, также с нулевым результатом. Данные по системе La<sub>1.85</sub>Sr<sub>0.15</sub>CuO<sub>4</sub> приводят к слабому изотоп-эффекту:  $T_c \sim M^{-\alpha}$ ,  $\alpha \sim 0.16$ , в то время как для неоптимальной стехиометрии La<sub>1.89</sub>Sr<sub>0.11</sub>CuO<sub>4</sub> имеем  $\alpha \sim 0.6 - 0.8$ . Оценки из зонных расчетов

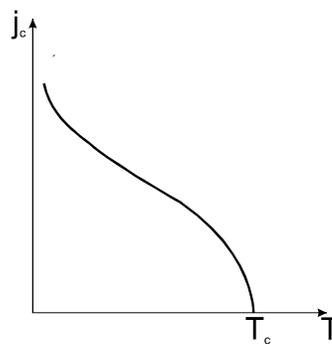
константы электрон-фононного взаимодействия для последнего соединения  $\lambda_f \sim 2$ . В совокупности эти факты свидетельствуют как о существенном вкладе в механизм сверхпроводимости нефононных взаимодействий, так и об особенностях фононного спектра ВТСП.

Проводились исследования фононных спектров ВТСП. С помощью неупругого рассеяния нейтронов были восстановлены все 21 ветви колебаний в иттриевом ВТСП  $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ . Характерные фононные температуры (дебаевские) обычно порядка 300 – 400 К. Измерения фононной плотности состояний говорят о существенном ангармоническом вкладе, связанном со смещением кислорода в базовых плоскостях в связях Cu – O (так называемые “дышащие” моды). В соединении  $La_{2-x}Sr_xCuO_4$  при увеличении допирования Sr (или Ba) наблюдается так называемое “смягчение” фононных мод, что находит отражение в уменьшении температуры Дебая от 360 К ( $x = 0$ ) до 280 К ( $x = 0.17$ ).

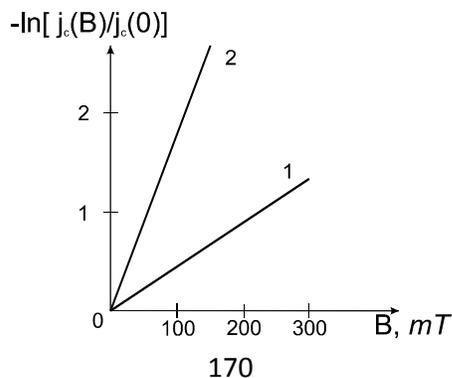
Первые оценки основного соотношения БКШ ( $2\Delta(0)/T_c$ ) привели к большому разбросу значений:  $4 < 2\Delta(0)/T_c < 10$ , причем при измерении щели из туннельных экспериментов и пропускании тока вдоль оси  $c$  и поперек эти значения различаются в 3-4 раза (т.е. сверхпроводящие параметры возрастают в плоскости, перпендикулярной  $c$ ).

Особый вопрос – температурная и полевая зависимость критического тока в ВТСП. Надежно установлено, что вольт-амперная характеристика (ВАХ) ВТСП вблизи критического тока может быть описана с помощью эмпирического соотношения:  $E = C(j - j_c)^\alpha$ . Для классических сверхпроводников такое соотношение справедливо в режиме вязкого течения потока. Измеренный из ВАХ критический ток имеет нелинейную температурную зависимость, причем при низких температурах – экспоненциальную  $\sim e^{-T/T_0}$ , а вблизи  $T_c$  удовлетворяет эмпирическому соотношению

$$j_c = C \cdot (1 - T/T_c)^\alpha.$$



Если последнее соотношение укладывается в рамки модели Гинзбурга – Ландау, то экспоненциальная зависимость в низкотемпературном диапазоне до сих пор не нашла своего теоретического объяснения.



Зависимость критического тока от внешнего магнитного поля неплохо укладывается в следующее соотношение:

$$j_c(B) = j_c(0) \exp[-B/B_0],$$

где эмпирический параметр  $B_0$ , в свою очередь, сильно зависит от температуры и ориентации поля относительно оси  $c$  (для поперечной ориентации он в несколько раз больше, чем для продольной).

Ток, как и другие критические параметры, сильно анизотропен, так что при пропускании его вдоль оси  $c$  его значение в 2-10 раз меньше, чем в перпендикулярном направлении.

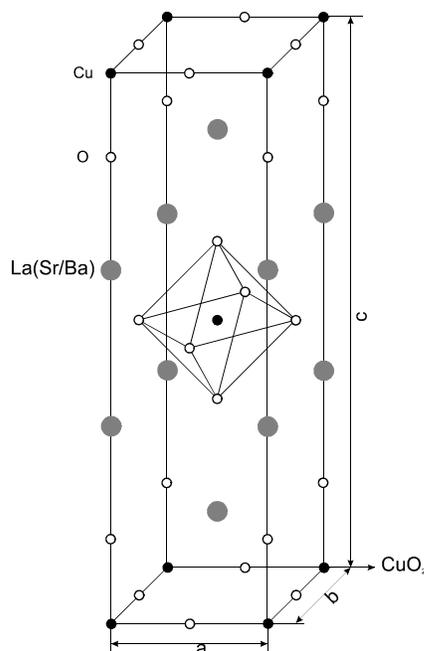
Проводились эксперименты по квантовым эффектам в присутствии магнитного поля. Так, на керамических гранулированных образцах 1-2-3 наблюдали квантование магнитного потока, замороженного в сверхпроводящих петлях, образованных несколькими смежными сверхпроводящими гранулами, соединенными слабыми связями. Измерение осцилляций динамической магнитной восприимчивости как функции внешнего магнитного поля позволяет определить квант магнитного потока, который, как и полагается в сверхпроводящем состоянии, равен  $\Phi_0$ . Также наблюдали захват магнитного потока на полых цилиндрах из гранулярных ВТСП.

Измерения поглощения продольного ультразвука свидетельствуют о появлении пика в коэффициенте поглощения ниже температуры сверхпроводящего перехода. Это в корне расходится с предсказаниями теории БКШ. Теоретическое объяснение этого явления пока не получено, предполагают, что этот эффект связан с анизотропией энергетического спектра квазичастиц. Изучались также нелинейные отклики ВТСП на световые импульсы пикосекундной длительности. Оказалось, что, в отличие от низкотемпературных СП, в которых характерные времена релаксации  $\tau \sim 10^{-9}$  с, в ВТСП  $\tau \sim 10^{-10} - 10^{-11}$  с, т.е. существенно меньше. В связи с этим ВТСП оказываются более перспективными для устройств оптических линий связи, регистрирующих приборов и т.д.

Спектр экспериментальных методов, используемый для исследования ВТСП, чрезвычайно широк: это и обычные методы измерения динамического и статического сопротивления, статической и динамической магнитной восприимчивости, и рентгеновская, нейтронная дифракция, и мессбауэровские измерения, и электронная, и мюонная спектроскопия ( $\mu$ SR), и калориметрические исследования, воздействия ультразвуком, аннигиляция позитронов и эффект де-Гааза-ван-Альфена, и циклотронный резонанс, СВЧ и светового диапазона излучение, туннельная накачка, ЯМР, ЯКР и ЭПР-спектроскопия, фотоэмиссионные и инверсные фотоэмиссионные спектры, воздействие давления, радиации, лазерных импульсов, термоЭДС, комбинационное рассеяние света, разнообразные контактные явления, холловские измерения и многое другое. Системы ВТСП оказались настолько сложными, что только комплексное использование практически всех известных современных экспериментальных методик физики твердого тела могло дать полную физическую картину как нормального, так и сверхпроводящего состояний этих соединений.

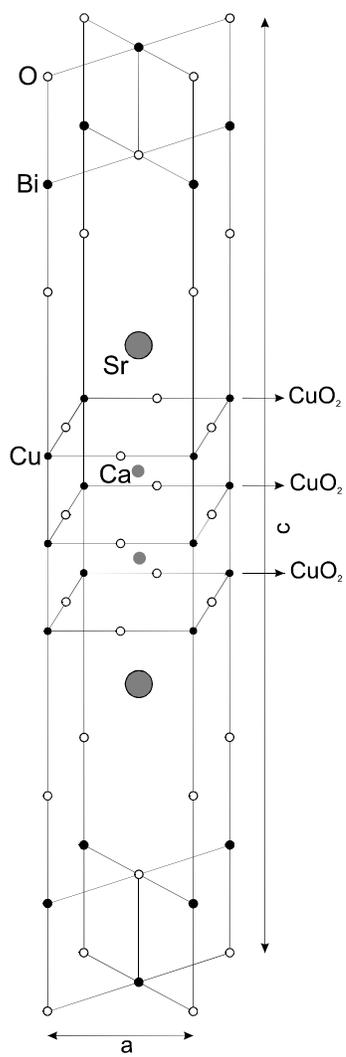
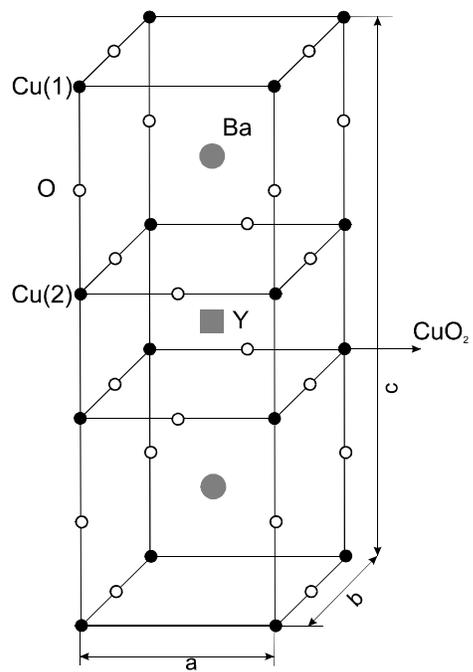
## 7 неделя. Влияние давления, облучения, примесей, внешних полей на ВТСП

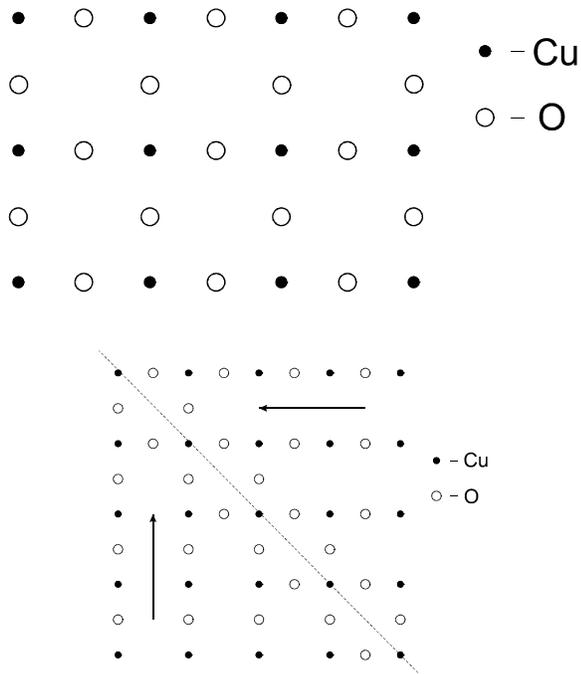
Как показали рентгеноструктурные и нейтронографические исследования, а также электронная микроскопия, представители основных семейств металлооксидных сверхпроводников имеют так называемую перовскитоподобную структуру (т.е. элементарную ячейку, подобную ячейке перовскита – соединения  $K_2NiF_4$ ). Типично перовскитная ячейка – у соединения 2-1-4 ( $La_{2-x}(Sr/Ba/Ca)_xCuO_4$ ). Она представляет составную кубическую ОЦК-подобную структуру, образуемую в углах и в центре атомами меди, в ребрах и гранях – кислородными атомами, а в центрах крайних кубиков и на гранях – атомами лантана (либо замещение: барий/стронций). Ячейка анизотропная, вытянутая вдоль оси  $c$  примерно в три раза больше, чем в поперечном направлении ( $a, b$ ). Похожую структуру имеет соединение 1-2-3 ( $YBa_2Cu_3O_{6+\delta}$ ) – здесь атомы меди – строго в углах кубов, атомы кислорода – только на гранях, а атомы иттрия и бария – в центрах кубов.



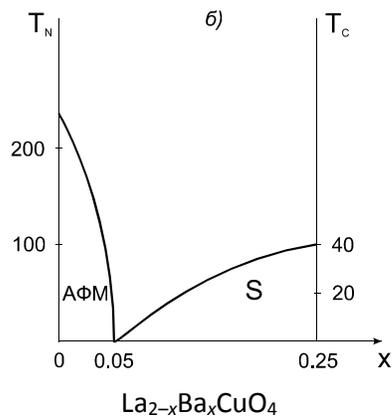
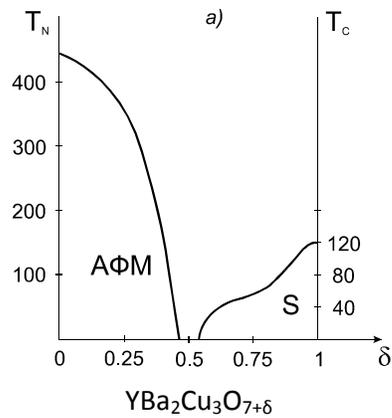
Так, лантановые системы, 2-1-4, имеют одну плоскость  $CuO_2$  и  $T_c \sim 40$  К, иттриевые 1-2-3 имеют две  $CuO_2$  плоскости и  $T_c \sim 80 - 90$  К, а висмутовые структуры 2-2-2-3 – три плоскости и  $T_c \sim 110$  К.

Таким образом, критическая температура растет примерно на 40 градусов с добавлением каждой медь-кислородной плоскости. Это, а также отмечаемое во всех экспериментах ярко выраженное увеличение проводящих и сверхпроводящих свойств вдоль этих плоскостей, свидетельствует в пользу двумерного варианта сверхпроводимости в ВТСП. Наиболее ярко слоистая структура выражена в висмутовом ВТСП, так как в иттриевом соединении можно говорить еще о достаточно выделенных цепочках  $Cu-O$  в базовых плоскостях поперек оси  $c$ , а в лантановых ВТСП – о слоях кислородных октаэдров, центрированных катионами меди. Отметим, что наличие ориентированных цепочек  $O-Cu-O-Cu...$  в соединении 1-2-3 приводит к специфическим протяженным дефектам структуры – плоскостям двойникования. Они представляют собой плоскости, разграничивающие две соседние области с перпендикулярной друг другу ориентацией цепочек, и оказывают существенное значение на механические и сверхпроводящие свойства ВТСП. В частности, полагают, что они ответственны за особенности зацепления вихревых нитей в смешанном состоянии (пиннинг), температурные и др. зависимости критического тока и ВАХ.

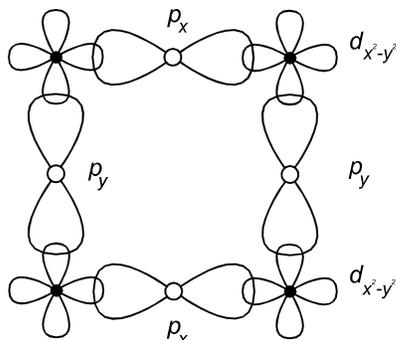




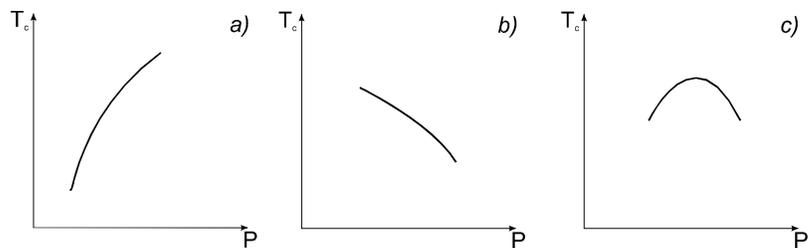
Структуры 2-1-4, 1-2-3 являются антиферромагнетиками, с температурами Нееля  $T_N \sim 300 - 500$  К. Основной магнитный ион – медь, имеющий собственный некомпенсированный момент. Температура антиферромагнитного упорядочения сильно зависит от стехиометрического состава: в структурах 2-1-4 – от степени допирования  $x$  металлом Sr(Ba/Ca), а в 1-2-3 – от дефицита кислорода  $\delta$ . Области существования антиферромагнетизма (АФМ) и сверхпроводимости не перекрываются.



Химическая связь в оксидных ВТСП – типичная ионно-ковалентная. В ответственных за проводимость и сверхпроводимость плоскостях  $\text{CuO}_2$  связь осуществляется за счет перекрытия  $d$ -оболочек меди с  $p$ -оболочками кислорода ( $pd$ -гибридизация). Таким образом, состояние и свойства купратных плоскостей определяются валентными состояниями ионов меди и кислорода, которые, в свою очередь, зависят от присутствия других элементов структуры – интеркалирующих слоев переменного состава (их называют спейсерами) La-O, Ba-O, Tl-O и т.д.



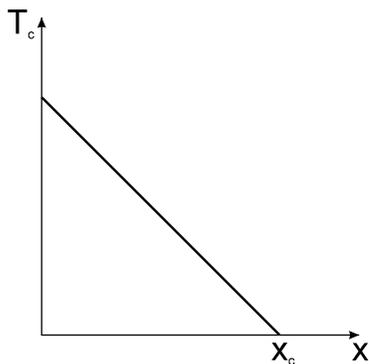
В основном критическая температура дырочных ВТСП возрастает с давлением  $P$ . Производная  $dT_c/dP$  положительна и имеет большую величину в дырочно-допированных ВТСП в противоположность малой и отрицательной  $dT_c/dP$  в электронных ВТСП. Величина  $d \ln T_c / dP$  как функция  $T_c$  ведет себя качественно одинаково как для электронных, так и для дырочных ВТСП: абсолютное значение  $d \ln T_c / dP$  выше для образцов с более низкими  $T_c$ . Однако имеются исключения. Например, дырочно-допированные  $(\text{Y}_{1-x}\text{Pr}_x)\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  и  $\text{Tl}_2\text{Ca}_{n-1}\text{Ba}_2\text{Cu}_n\text{O}_{2n+4-\delta}$  соединения показывают отрицательные значения величины  $dT_c/dP$ . Более того,  $dT_c/dP$  в  $\text{Tl}_2\text{Ba}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  и  $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$  меняет знак с положительного на отрицательный с возрастанием  $P$ . Поэтому в ВТСП возможны все три типа зависимостей критической температуры от приложенного давления.



Экспериментальные данные позволяют сделать обобщающие выводы по влиянию примесей замещения на ВТСП:

1. Немагнитные и магнитные примеси оказывают примерно одинаковое влияние на деградацию сверхпроводящих свойств ВТСП в случае их расположения на плоскости  $\text{CuO}_2$ .
2. При замещении Cu наиболее существенным является позиция Cu (2) в плоскости  $\text{CuO}_2$ .
3. При замещении O также существенной является позиция кислорода в плоскостях  $\text{CuO}_2$ .
4. Критические значения концентрации примесей у электронных ВТСП в 3-6 раз ниже, чем у дырочных.
5. Зависимость  $T_c$  у магнитных и немагнитных примесей обычно линейна, и лишь при наличии нескольких неэквивалентных позиций примеси может быть нелинейна, что обычно связано с нелинейностью нарастания “истинной” концентрации примесей в плоскости  $\text{CuO}_2$ . Значения критических концентраций для магнитных примесей в среднем ниже, чем для немагнитных.
6. Эффективный магнитный момент на медных узлах растет с введением магнитных примесей и падает в случае немагнитных замещений.

7. Концентрация носителей в плоскости  $\text{CuO}_2$  не зависит от внесения примесей в эту же плоскость, и все наблюдаемые изменения связаны с перераспределением примесей между плоскостью и цепочками  $\text{Cu-O}$ .

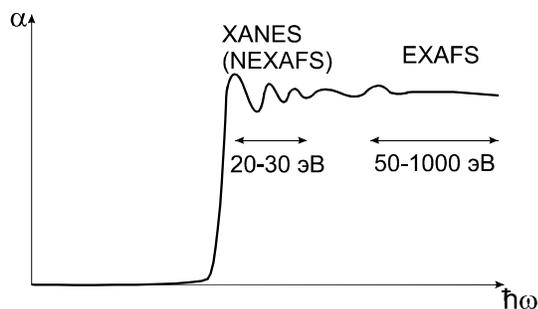


Особенности кристаллического строения ВТСП сильно меняют картину вихревых состояний. Чередование сверхпроводящих слоев  $\text{CuO}_2$  и несверхпроводящих (спейсерных) слоев должно привести к чередованию усиления и ослабления упругих свойств вихревых линий в случае, если они перпендикулярны плоскостям  $\text{CuO}_2$ . В общем случае в высокотемпературных сверхпроводниках комбинация высоких температур, малой длины когерентности и значительной анизотропии свойств усиливает роль тепловых флуктуаций для абрикосовских вихрей, приводя к заметным изменениям в природе и фазовой картине смешанного состояния. Наиболее сильный эффект от учета термических флуктуаций выражается в возможности *плавления* вихревой решетки и перехода в вихревую жидкость при температурах гораздо ниже температуры сверхпроводящего перехода. Под вихревой жидкостью понимается неупорядоченная плоская структура вихрей, которая не имеет дальнего порядка, а обладает только ближними корреляциями. На фазовой диаграмме  $H - T$  появляется значительная область, занимаемая вихревой жидкостью. Присутствие дефектов приводит к пиннингу вихревых линий, который увеличивает число возможных состояний вихревой структуры. В частности, разупорядочение при концентрации дефектов, близкой к концентрации вихрей, приводит к преобразованию вихревой решетки в вихревое стекло. Замерзание вихревой жидкости и переход в вихревое стекло (т.е. разупорядоченную вихревую решетку) в сверхпроводящих кристаллах с примесями происходит посредством непрерывного фазового перехода, точно так же, как и формирование вихревой решетки при  $H_{c2}$ . Наличие слоистой структуры в ВТСП приводит к дополнительному усложнению фазовой диаграммы. В слоистых материалах вихревая решетка плавится через две независимые стадии: плавление вихревой решетки в жидкость вихревых линий – “melting”-переход, и потеря когерентности между слоями в пределах одной вихревой нити – “decoupling”-переход. Последнее означает, что вихри настолько “перепутываются” между сверхпроводящими слоями, что каждый слой перестает чувствовать соседний, и происходит переход вихревой жидкости в жидкие двумерные “вихревые блины” ( $3D - 2D$  переход). В зависимости от величины остаточного или наведенного пиннинга соотношения между фазами могут иметь самый разнообразный характер. Линии на фазовой диаграмме, ограничивающие области вихревой решетки, вихревого стекла, вихревой жидкости и линия потери когерентности между слоями могут сдвигаться относительно друг друга, совпадать и даже пересекаться. Структура различных вихревых состояний и природа термодинамических переходов между фазами в последнее время стала одним из центральных вопросов физики смешанного состояния в высокотемпературных сверхпроводниках.

## 8 неделя. Особенности электронного строения ВТСП. Теоретические модели

Основные экспериментальные методы, используемые для получения информации об электронном спектре: XANES (X-ray absorption near-edge-structure – структура коэффициента поглощения рентгеновских лучей вблизи края поглощения) и EXAFS (extended X-ray absorption fine structure – протяженная тонкая структура коэффициента поглощения рентгеновского излучения); аннигиляция позитронов; фотоэмиссионная спектроскопия.

В методе XANES измеряется зависимость линейного коэффициента поглощения рентгеновского излучения  $\alpha$  с энергией  $\gamma$ -квантов до 20 КэВ от частоты падающего излучения вблизи порога ионизации какого-либо из основных атомных уровней, и она имеет обычно вид, схематически изображенный на рис.:



Область резкого роста  $\alpha$  называется краем поглощения (при ионизации очередного занятого атомного уровня K, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>,...). В зависимости от зарядности атома энергия края может меняться на величину  $\sim 2 - 3$  эВ. Это изменение, называемое химическим сдвигом, несет информацию о валентном составе атомов в веществе. Таким образом были определены зарядовые состояния атомов меди ( $\text{Cu}^+$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{3+}$ ), кислорода ( $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{O}^-$ ) и др. в ВТСП. Изолированные максимумы, энергии которых меньше, чем энергия края, называются предкраевыми особенностями и являются возбуждениями основных электронов на дискретные свободные уровни – в ВТСП, например, здесь видны переходы между медными состояниями  $d^9 \rightarrow d^8$ , и  $d^9 \rightarrow d^{10}$ . Это диапазон XANES (NEXAFS), и именно этим методом были определены параметры модельных гамильтонианов Хаббарда и Эмери, отражающих кулоновское взаимодействие носителей на меди, кислороде и между ними, а также амплитуды межузельных переходов (позднее мы это обсудим) с точностью не хуже 0.2 эВ.

Явление аннигиляции – превращение электрона и позитрона в два гамма-кванта, т.е. реакция вида:  $e^+ + e^- \rightarrow 2\gamma$ . Источники позитронного пучка – это радиоактивные изотопы  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{64}\text{Cu}$ ,  $^{58}\text{Co}$ , которые рождают позитроны с энергией  $\sim 1$  МэВ в результате  $\beta$ -распада. Попав в твердое тело, позитроны за время  $\sim 10^{-15}$  с за счет ионизации вещества теряют энергию вплоть до 1 эВ, затем за  $3 \times 10^{-12}$  с – до тепловых энергий. В этот момент резко возрастает сечение взаимодействия такого теплового позитрона и электрона проводимости. Анализ этой реакции может дать информацию о зонной структуре. Собственно актом наблюдения аннигиляции является одновременная регистрация двух гамма-квантов под углом разлета, близким к  $\pi$  (т.к. они несут всю энергию покоя электрона и позитрона,  $\sim 1$  МэВ, а суммарный импульс – небольшой, порядка импульса Ферми). Преимущества этого способа исследования электронного спектра – независимость от температуры, наличие поляризации дает возможность исследовать магнетики, независимость от полей дает возможность исследовать даже сверхпроводящее состояние.

Метод фотоэмиссионной спектроскопии основан на измерении энергетических спектров электронов, вылетающих при фотоэлектронной эмиссии. Измерение фотоэмиссионных (PES, а если энергия фотона больше 1 эВ – XPS – X-ray photoemission spectroscopy) и инверсных фотоэмиссионных (IPS) спектров дает наиболее полную информацию о спектральной плотности состояний электронной подсистемы твердого тела.

Основные выводы об особенностях физических свойств высокотемпературных оксидных соединений, которые получены из эксперименты и которые следует, прежде всего, учитывать при

построении любой теоретической модели, претендующей на объяснение природы спаривания носителей заряда в ВТСП и объяснение их аномальных, нормальных и сверхпроводящих свойств: большой размер перовскитной элементарной ячейки, резко выраженное слоистое строение, наличие структурных фазовых переходов;

присутствие или одиночных, или собранных в блоки купратных плоскостей  $\text{CuO}_2$ , которые являются токонесущими;

достаточно слабая связь между купратными плоскостями, вследствие чего наблюдается большая анизотропия проводимости, прямо указывающая на квазидвумерный характер электронных свойств ВТСП;

слабая электрон-фононная связь для ряда ВТСП, малая длина когерентности, указывающая на локальность куперовских пар;

ключевая роль купратных плоскостей в сверхпроводящих свойствах, которые демонстрируют анизотропию в соответствии с двумерным характером сверхпроводимости, так что ВТСП представляют собой слоистые анизотропные сверхпроводники “ультра-второго” рода с огромными значениями  $H_{c2}$ ;

малое число носителей заряда, низкая энергия Ферми и локализованность носителей;

наличие антиферромагнитного упорядочения, фазового перехода “металл – диэлектрик”, сильных кулоновских корреляций;

аномалии в зонной структуре, противоречащие картине “жестких зон”;

линейный ход температурной зависимости электросопротивления за точкой перехода без насыщения, противоречащий ферми-жидкостному описанию;

аномальное анизотропное (даже со сменой фазы) поведение сверхпроводящего параметра порядка;

аномалии в поведении критической температуры, критического поля и тока от давления, концентрации примесей и т.д.

Известные теоретические подходы, касающиеся ВТСП, можно разделить на две большие группы: *фононные* модели, опирающиеся на традиционную схему косвенного взаимодействия электронов посредством виртуальных фононов, и прочие, так называемые *нефононные* модели, берущие за основу другие типы спаривания (магнитные корреляции, кулоновское взаимодействие и др.).

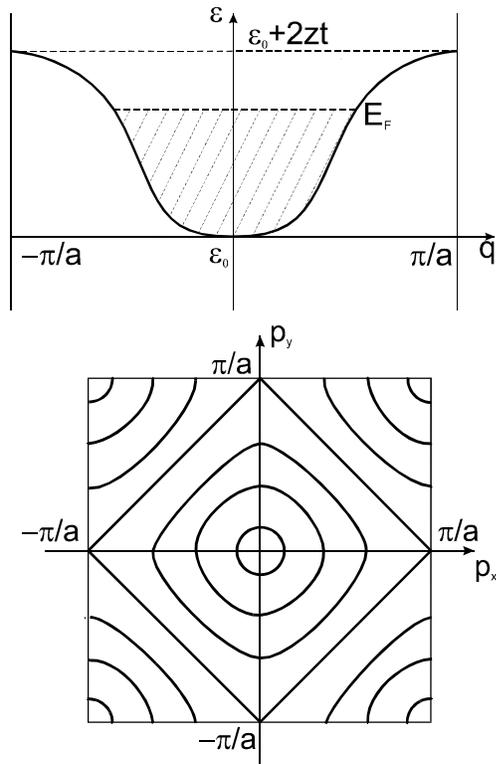
#### Нестинг и кулоновское взаимодействие Копаева

Исследуем закон дисперсии электрона с учетом взаимодействия только ближайших соседей и определим амплитуду перескока через  $-J$  в двумерном кристалле. Тогда имеем:

$$\varepsilon_q = \varepsilon_0 - 2J(\cos q_x a + \cos q_y a).$$

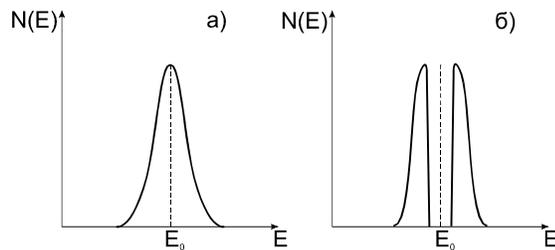
Этот закон дисперсии описывают полосу энергии, равную  $2ZJ$  ( $Z$  – число ближайших соседей) – зону проводимости. Ее ширина пропорциональна вероятности перескока. При увеличении концентрации электронов зона может последовательно заполняться в соответствии с принципом Паули. В пределе малого импульса (вблизи дна зоны) закон дисперсии квадратичен:  $\varepsilon_p - \varepsilon_0 = -4J + Ja^2 p^2$ , поэтому, исходя из определения эффективной массы  $\frac{1}{m^*} = \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p^2}$ , получаем  $m^* = \frac{\hbar^2}{2Ja^2}$ . Эффективная масса, вообще говоря, не равна массе свободного электрона  $m$ . Если  $J \sim 0.1 - 1$  эВ,  $a \sim 3 \times 10^{-8}$  см, то получаем  $m^* = 1 \div 10 m$ , т.е. квазичастица – достаточно тяжелая и локализованная.

Построим поверхность Ферми для двумерной квадратной решетки при различном заполнении зоны. Около дна зоны поверхность Ферми сферическая, как в случае свободного электронного газа. То же самое наблюдается вблизи потолка зоны для дырочных носителей, только центры окружностей – у углов зоны Бриллюэна ( $\pm\pi/a, \pm\pi/a$ ).



Особый случай – ровно половинное заполнение зоны:  $E_F = \varepsilon_0$ . Тогда поверхность Ферми формирует соотношение:  $c_1 \cos q_x a + c_2 \cos q_y a = 0$ ;  $q_x = \pm \pi/a \pm q_y$  – четыре отрезка прямых, образующих квадрат под углом  $45^\circ$ . Такой специфический вид поверхности Ферми называется *нестинг* – наличие конгруэнтных плоских участков поверхности Ферми, совпадающих при сдвиге на *вектор нестинга*  $Q = \pi/a(1,1)$ , равный половине вектора обратной решетки. Оказывается, можно точно показать, что в этом случае плотность состояний испытывает логарифмическую расходимость ровно при половинном заполнении зоны (так называемую особенность Ван-Хова).

Метод основан на особенностях поверхности Ферми для двумерной решетки и явлении нестинга. Известно, что все сверхпроводящее поведение ВТСП обычно реализуется вблизи половинного заполнения зоны (в смысле только что вышеописанной картины сильной связи) плоскости  $\text{CuO}_2$ , так что закладывается условие, что исходная плотность состояний вблизи нестинга достаточно высока из-за логарифмических особенностей. Если включить сильное кулоновское взаимодействие, то появится энергетическая щель в спектре, что будет символизировать фазовый переход из металла в диэлектрик.



Плотность состояний около щели будет иметь уже не логарифмические особенности, а корневые расходимости типа  $\sim 1/\sqrt{E - E_0}$ , где  $E_0$  – граница щели. Это типичные “одномерные” особенности плотности состояний. Если решить задачу Купера в электрон-фононной схеме для одномерного случая, то можно получить выражение для энергии связи и критической температуры, похожее на выражение для сильной связи:  $T_c^\alpha$ ,  $\alpha > 1$ .

Учитывая, что константа связи пропорциональна плотности состояний на уровне Ферми, а уровень Ферми находится как раз вблизи получившейся “одномерной” особенности, можно получить большие критические температуры. В случае большого кулоновского взаимодействия  $U/J \gg 1$  можно показать, что возможна импульсная зависимость щели по типу  $d$ -спаривания:

$$\Delta = \Delta_0 (\cos[\rho_x a] - \cos[\rho_y b]).$$

В итоге эта модель объясняет: линейную температурную зависимость  $\rho(T)$  при  $T > T_c$ ; наблюдаемую иногда аномальную кривизну температурной зависимости  $H_{c2}$  ( $\frac{d^2 H_{c2}}{dT^2} > 0$ ); особенности в затухании ультразвука; отсутствие изотоп-эффекта; анизотропию щели и др.

#### Двумерный сверхпроводник Шафроса и Блатта

Рассмотрим основное уравнение БКШ в двумерном случае при нулевой температуре:

$$1/\lambda_f = \int \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi.$$

При этом область интегрирования (область в импульсном пространстве, где предполагается притяжение) определяется так:  $-\mu < \xi < \omega - \mu$ , где  $\xi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_F$  – энергия электрона, отсчитанная от уровня Ферми,  $\omega$  – характерная частота обрезания (не обязательно фононная), а  $\mu$  – химический потенциал, определяемый из нормировки на концентрацию:

$$n = 2 \sum_{|p| < p_F} 1 = p_F^2 / 2\pi$$

(в двумерном случае). Будем полагать, что частота обрезания много больше химического потенциала и энергетической щели. Несложно показать, что для электронного газа в двумерном случае плотность состояний постоянна:  $N(0) = m/\pi\hbar^2$ . С другой стороны, концентрация электронов, согласно результатам БКШ, равна:

$$n = 2 \sum_p v_p^2 = \sum_p \left(1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}\right) = N(0) \int_{-\mu}^{\omega - \mu} d\xi \left[1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}\right].$$

Окончательно:

$$1 = \lambda_f \int_{-\mu}^{\omega - \mu} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}} d\xi; \quad E_F = \int_{-\mu}^{\omega - \mu} d\xi \left[1 - \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}\right].$$

Интегрируя уравнения, получаем решение в виде:

$$E_a = -\mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}; \quad E_F = \mu + \sqrt{\mu^2 + \Delta^2}; \quad E_a = 2\omega e^{-1/\lambda_f}.$$

Здесь величину  $E_a$  будем называть энергией связи. Отсюда можно сразу получить химпотенциал:  $\mu = (E_F - E_a)/2$ .

Окончательно можно найти энергетическую щель и разницу энергий нормального и сверхпроводящего состояний:

$$\Delta = \sqrt{E_F E_a}, \quad E_S - E_N = -N(0)\Delta^2/2 = -n |E_a|/2.$$

Из последнего соотношения  $\Delta \sim T_c \sim \sqrt{n}$ .

Пусть  $\mu < 0$ , т.е.  $E_F < E_a$ . Отсюда имеем:

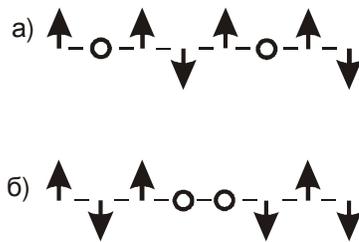
$$\xi_0 = \hbar v_F / \Delta = 2\hbar \sqrt{E_F / E_a} p_F^{-1} \sim \hbar / p_F \Rightarrow \xi_0 \sim 1/k_F \sim 10-50 \text{ \AA},$$

т.е. корреляционная длина такая же, как и в ВТСП.

## 9 неделя. Нефононные механизмы спаривания носителей заряда в ВТСП

Рассмотрим качественно несколько наиболее характерных моделей, опирающихся на антиферромагнитные корреляции в ВТСП как главный фактор механизма притяжения носителей заряда.

Одним из первых магнитных механизмов можно назвать модель “спиновых мешков” (spin bag) Шриффера. Стартовая ситуация для нее – исходное диэлектрическое состояние, которое отождествляется с основным состоянием двумерной модели Гейзенберга с идеальным АФМ-упорядочением. Затем полагается, что любое допирование системы (например, добавление стронция в лантановый ВТСП или изменение содержания кислорода в иттриевом соединении) приводит к дырке в спиновом поле. Эти дырки можно описывать как обычные фермиевские квазичастицы, передвигающиеся по системе. Однако это нарушает исходное АФМ-упорядочение, и повышает энергию системы, так как дырка возмущает спиновое окружение и несколько его разупорядочивает. Оказывается, тем не менее, дыркам выгоднее объединяться попарно в пространстве, что может несколько улучшить АФМ, так как при этом уменьшается область с нарушенным АФМ-упорядочением, и, следовательно, энергия опять понижается. Такое выгодное расположение дырок можно трактовать как некое эффективное притяжение между ними, т.е. если один дырочный носитель двигать относительно другого (фиксированного), то его эффективный потенциал (в поле другого) будет иметь минимум (потенциальную яму) с центром в точке, занимаемой фиксированной дыркой.



Таким образом, основное состояние допированной системы будет состоять из спаренных дырок. Полученный бозе-газ локализованных частиц может уже испытывать конденсацию и сверхтекучесть. Можно оценить энергетическую щель и критическую температуру, учитывая значение магнитной длины и скорости Ферми:

$$\Delta \cong T_c \cong \hbar v_F / \xi_{mag} \sim 100-300 \text{ К.}$$

Также возможно оценить характерную энергию  $\Delta$  из того, что она должна быть сопоставима с глубиной эффективной потенциальной ямы, а та, в свою очередь, с характерной кинетической энергией в этой яме  $\hbar^2 / m^* \xi_{mag}^2$ . Полагая, что дырочные носители имеют большую эффективную массу  $m^* \sim \frac{\hbar^2}{2Ja^2} \sim 10 \div 30m$ , находим  $\Delta \sim 300 \div 500 \text{ К.}$  И, наконец, можно оценить  $T_c$  как температуру бозе-конденсации, и получить  $T_c \sim 100 \text{ К.}$

Другой тип моделей ВТСП можно назвать экситонными механизмами. По определению экситон – это короткоживущее ( $\sim 10^{-5} \div 10^{-7} \text{ с}$ ) электронное возбуждение, которое в полупроводниках или полуметаллах (чем и является ВТСП в несверхпроводящем состоянии) представляет собой бозевское образование – связанное состояние электрона проводимости и дырки в валентной зоне (экситон Ванье – Мотта). Энергия экситона намного больше, чем у фонона, и если его использовать в качестве виртуальной частицы для эффективного взаимодействия дырок в ВТСП (как фононы в электрон-фононном БКШ-взаимодействии), можно получить высокую критическую температуру. Остается только обнаружить эту экситонную ветвь возбуждений в ВТСП. Таким образом, в экситонные модели выделяются механизмы ВТСП, не связанные с переносом спина, а только с переносом заряда. Предлагается использовать нижнее возбужденное состояние

двухвалентной меди  $\text{Cu}^{2+}$  в купратной плоскости – его называют  $d_{z^2}$ -уровень (при этом основное состояние – орбитали  $d_{x^2-y^2}$ , которые формируют зону проводимости). Забрасываемые на него дырки взаимодействуют с получающимся эффективным отрицательным зарядом на основном уровне и связываются в своеобразный  $dd$ -экситон. Зонные расчеты указывают, что характерная энергия этих бозевских квазичастиц  $\sim 0.5-0.9$  эВ. Далее можно сформулировать модель типа БКШ в приближении среднего поля, используя эффективное плазмон-дырочное взаимодействие, но с особенностями структуры ВТСП, и получить высокие  $T_c$ .

Еще одна “ветвь” семейства нефононных механизмов сверхпроводимости в ВТСП – это плазменные модели. Плазмон по определению – это квант плазменных колебаний, которые в твердом теле ассоциируются, как правило, с высокочастотными колебаниями плотности электронов проводимости. Характерная плазменная частота

$$\omega_{pl} = \sqrt{4\pi e^2 n / m^*}$$

(где  $n$  – плотность электронов,  $m^*$  – эффективная масса электронов в зоне) имеет порядок нескольких эВ. В результате плазменных колебаний высокочастотный предел диэлектрической проницаемости электронного газа представляется в виде (так называемый плазменный предел):

$$\epsilon(\omega) = 1 - \omega_{pl}^2 / \omega^2 .$$

При  $\omega < \omega_{pl}$ , т.е. вблизи плазменного порога по частоте, диэлектрическая проницаемость электронной подсистемы отрицательна, что может привести к эффективному притяжению между электронами. Это верный признак того, что плазмоны также можно использовать как виртуальные частицы для конструирования эффективного плазмон-электронного притяжения. Однако энергия плазменных колебаний обычно слишком высока.

Для объяснения фазовых переходов металл – изолятор в переходных металлах с узкими зонами Хаббард предложил модель, которая в режиме сильной связи, учитывая перескоки электронов на соседние атомы и кулоновское отталкивание на узле, позволила описать переход из проводящего в диэлектрическое состояние. Для вывода модели Хаббард исходил из стандартного гамильтониана ферми-газа с кулоновским взаимодействием:

$$\hat{H} = \sum_{p\sigma} \epsilon_p a_{p\sigma}^+ a_{p\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{p_1 p_2 p'_1 p'_2 \sigma \sigma'} V_{p_1 p_2 p'_1 p'_2} a_{p_1 \sigma}^+ a_{p_2 \sigma}^+ a_{p'_2 \sigma'} a_{p'_1 \sigma'}$$

Кулоновское взаимодействие выписано в наиболее общем виде. Здесь учтено и прямое кулоновское отталкивание, и обменные процессы. Если рассматриваются системы с узкими зонами ( $\sim 0.1-1$  эВ), т.е. электроны имеют большую эффективную массу и почти локализованы, то хорошим квантовым числом является номер узла.

Окончательно гамильтониан модели Хаббарда имеет вид:

$$\hat{H} = \sum_{i \neq j, \sigma} t_{ij} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i\sigma} U a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma} a_{i-\sigma}^+ a_{i-\sigma} .$$

Здесь первый член гамильтониана (кинетическая энергия) описывает перескоки на соседние узлы с амплитудой  $t_{ij}$ . Второй член описывает кулоновское отталкивание на узле с потенциалом  $U$  и учитывает, что одновременно на узле могут находиться частицы только с противоположным спином. Гамильтониан записывают в более удобной форме с использованием приближения ближайших соседей  $Z$  ( $t_{ij} = -t$ ), и этот вид модели наиболее широко используем:

$$\hat{H} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow},$$

$$n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^+ a_{i\sigma}.$$

Предполагается, что при допировании свободные дырки будут в основном отталкиваться на медных узлах, и совершать эффективные прыжки с меди на медь через кислород, реализуя простую двумерную эффективную модель Хаббарда на квадратной решетке.

Спектр электронов в модели Хаббарда в простейшем приближении среднего поля:

$$\hat{H} = -t \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} U n_{i\sigma} \langle n_{i-\sigma} \rangle.$$

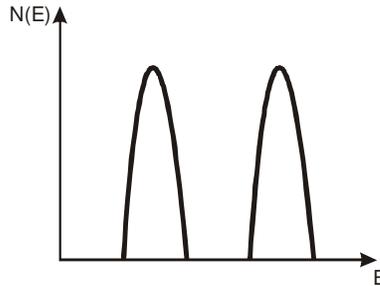
Перейдя в фурье-представление, находим:

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^+ a_{k\sigma}; \quad \epsilon_{k\sigma} = -2t(\cos k_x a + \cos k_y a) + U \langle n_{-\sigma} \rangle.$$

Спектр напрямую зависит от спина частицы и заполнения противоположной по спину подсистемы, т.е. для окончательного решения необходимо самосогласовать электроны с разными спинами. Такая корреляция присуща моделям с сильной связью. Видно также, что спектр – типичный для модели сильной связи, обладающий как явлением нестинга, так и логарифмическими особенностями плотности состояний вблизи половинного заполнения зоны. Рассмотрим сначала предел сильного кулоновского взаимодействия  $U \gg t$ . Пусть имеется половинное заполнение  $N = N_a$ . В этом случае электроны заперты сильным кулоновским отталкиванием по одному на узле, так как любое передвижение приводит к повышению энергии на  $U$ . Тогда в гамильтониане Хаббарда можно пренебречь перескоковым членом. Гамильтониан диагонален, и энергия равна

$$E = \sum_i \{E_0(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}\} = N_1 E_0 + N_2 (2E_0 + U),$$

где  $N_1$  – число узлов с одним электроном;  $N_2$  – с двумя. Зонная картина такой системы состоит из двух зон (вырожденных в локализованные энергетические уровни) с энергиями  $E_0$  и  $U + E_0$ . В основном состоянии  $N$  имеющихся электронов обладают энергией  $E_0$ , и в каждом атоме размещено по одному электрону ( $N_1 = N, N_2 = 0$ ). В этом предельном случае имеет место строгая локализация электронов.



Если начинаем “включать” перескок  $t$ , то эти локализованные состояния начинают расщепляться в зоны шириной порядка  $2Zt$ , где  $Z$  – число ближайших соседей (это так называемые нижняя и верхняя Хаббардовские зоны). Пока зоны не слились, вещество остается диэлектриком. При критической величине расщепления (критическом значении параметра  $t/U \sim Z$ ), определяемого постоянной решетки и кулоновским узельным взаимодействием, щель исчезает. В таком случае имеет место переход от локализованного описания к зонной модели, т.е. от диэлектрика к металлу.

К настоящему моменту общепринято, что за транспортные и сверхпроводящие свойства ВТСП отвечают, главным образом, электроны на внешних оболочках атомов меди и кислорода. При этом  $d$ -орбиталь иона меди  $\text{Cu}^{2+}$ , электроны которой в основном участвуют в переносе заряда, имеет  $d_{x^2-y^2}$ -симметрию. Она гибридизуется с двумя  $p$ -орбиталями иона  $\text{O}^{2-}$ . В отсутствие допирования (одна дырка на каждую элементарную ячейку в плоскости  $\text{CuO}_2$ ) ВТСП хорошо описываются моделью локализованных состояний со спином  $1/2$ , что отражает антиферромагнетизм этих соединений. Для описания движения дырок в плоскости  $\text{CuO}_2$  с учетом всех особенностей электронной структуры ВТСП, различия атомных уровней на медных и кислородных узлах, а также кулоновского взаимодействия на узлах меди, кислорода и между ними, была предложена модель Эмери. Она правильно описывает топологию плоскости  $\text{CuO}_2$ , т.е. учитывает, что ближайшими соседями атомов меди являются четыре атома кислорода и наоборот, движение носителей с кислородных орбиталей на медные осуществляется на два ближайших медных узла. Эмери предложил отсчитывать состояния от полностью заполненных  $p$ - и  $d$ -орбиталей, т.е. описывать все дырочными носителями.

Гамильтониан двумерной многозонной модели Эмери в дырочном представлении имеет следующий вид:

$$H_E = -t \sum_{\langle ik \rangle, \sigma} (d_{i\sigma}^+ p_{k\sigma} + h.c.) + \varepsilon \sum_{k, \sigma} n_{k\sigma} + U_d \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + U_p \sum_k n_{k\uparrow} n_{k\downarrow} + V \sum_{\langle ik \rangle, \sigma \sigma'} n_{i\sigma} n_{k\sigma'}$$

где  $d_{i\sigma}^+$  и  $p_{k\sigma}^+$  – операторы рождения дырки в состояниях  $d_{x^2-y^2}$  и  $p_x, p_y$  соответственно; индекс  $i$  относится к узлам меди, индекс  $k$  – к узлам кислорода;  $t$  – матричный элемент (интеграл перекрытия волновых функций) перескока из медного на кислородный узел;  $\varepsilon = \varepsilon_p - \varepsilon_d$  – разность энергий дырки на узлах кислорода и меди;  $U_d, U_p, V$  – энергии кулоновского отталкивания дырок на узлах меди, кислорода и между ними соответственно.

Вакуумом для гамильтониана является электронная конфигурация  $\text{Cu}3d^{10}\text{O}2p^6$  (валентное состояние  $\text{Cu}^+\text{O}^{2-}$ ). В недопированных соединениях  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  и  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$  с  $\delta > 0.5$  на каждый атом меди в плоскости  $\text{CuO}_2$  приходится одна дырка (электронная конфигурация  $\text{Cu}3d^9\text{O}2p^6$ , валентное состояние  $\text{Cu}^{2+}\text{O}_2^-$ ), что обуславливает выбор  $\varepsilon > 0$ . Допирование (например, частичная замена  $\text{La}^{3+}$  на  $\text{Sr}^{2+}$  в  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  или уменьшение дефицита кислорода  $\delta$  в  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ) приводит к росту концентрации дырок в слоях  $\text{CuO}_2$ , которые занимают, в соответствии с экспериментальными данными, преимущественно кислородные орбитали (из-за большой величины  $U_d$ ). Заметим, что этот факт невозможно учесть в рамках модели Хаббарда и  $t - J$ -модели. Другой тип допирования реализуется в соединениях типа  $\text{Nd}_2\text{CuO}_4$  при частичном замещении  $\text{Nd}^{3+}$  на  $\text{Ce}^{4+}$ : число дырок на медных орбиталях уменьшается, а кислородные орбитали остаются пустыми, что эквивалентно увеличению числа электронов в системе (электронное допирование). Таким образом, в одной модели можно описать большой класс как дырочных, так и электронных ВТСП.

Учет антисимметрии волновых функций  $d_{x^2-y^2}$  и  $p_x, p_y$ -орбиталей в гамильтониане приводит к тому, что матричный элемент перескока медь-кислород меняет знак при движении в перпендикулярных направлениях по цепочкам  $-\text{Cu}-\text{O}-\text{Cu}-\text{O}-$  в плоскости  $\text{CuO}_2$ . Однако используя известное унитарное преобразование Либа и Ву, можно привести параметр  $t$  к одному знаку.

В гамильтониане не учтены перескоки между атомами кислорода в пределах одной ячейки. (Поскольку матричный элемент перескоков кислород-кислород  $t_{pp}$  существенно меньше, чем медь-кислородный, то, по оценкам, учет  $t_{pp}$  приводит лишь к небольшим количественным изменениям результатов.) Однако в последнее время стало ясно, что даже небольшая величина параметра  $t_{pp}$  может привести к особенностям в дисперсионных кривых, к возможности

спаривания и, самое главное, к лучшему согласованию с экспериментом. Типичные значения  $t_{pp} = -0.1 \div -0.5t$ , при этом к гамильтониану добавляется следующее слагаемое:

$$H_{pp} = t_{pp} \sum_{\langle ik \rangle, \sigma} (p_{i\sigma}^+ p_{k\sigma} + h.c.).$$

Значения параметров в гамильтониане для ВТСП могут быть получены на основе вычислений зонной структуры из первых принципов и анализа фотоэмиссионных спектров этих соединений. Согласно оценкам, характерные для ВТСП значения параметров равны:  $t = 1 \div 1.7$  эВ,  $U_d = 6 \div 10$  эВ,  $U_p = 0 \div 4$  эВ,  $\varepsilon = 1 \div 3$  эВ,  $V = 0 \div 4$  эВ. Такой разброс, с одной стороны, делает выбор параметров в значительной степени неопределенным, что осложняет исследования, а с другой, позволяет моделировать конкретные соединения путем соответствующего подбора параметров.

## 10 неделя. Теоретические и численные исследования моделей ВТСП

Прогресс в физике конденсированного состояния в последнее время в значительной степени определяется успешным использованием точных численных методов для исследования сильнокоррелированных систем. К точным кластерным численным подходам следует прежде всего отнести *метод точной диагонализации* (МТД), основанный на решении многочастичного уравнения Шредингера для малой системы с помощью диагонализации (обычно – методом Ланцоша) гамильтоновой матрицы, и *квантовые методы Монте-Карло* (МК), использующие преобразование квантовой статистической суммы в функциональный интеграл (и его дискретные аналоги) с последующим вычислением его с помощью алгоритма Метрополиса. Методы точной диагонализации и Монте-Карло позволяют получать решения из первых принципов для задач физики конденсированного состояния, зачастую недоступных для аналитических подходов.

Модель Эмери, используемая для высокотемпературных медь-оксидных сверхпроводников, оказалась весьма сложной для аналитических вычислений даже в упрощенном виде, так как оценки параметров этой модели свидетельствуют о том, что  $U_d$  не настолько велико, чтобы корректно использовать различные редуцированные гамильтонианы с использованием разложения по параметру  $t/U_d$ . Разложение по параметру  $t/\varepsilon$  также мало оправдано, так как  $\varepsilon \approx t$ . Большой разброс значений  $U_p$  и  $V$  делает выбор параметров неопределенным, что только усложняет проблему. Отсутствие точных решений модели Эмери и затруднения, возникающие при попытках ее разумного упрощения, объясняет значительно возросший в последнее время интерес к численному моделированию электронной структуры небольших кластеров ВТСП, позволяющему получать в ряде случаев точные результаты.

Несмотря на малость исследуемых систем, можно ожидать, что для качественного понимания свойств системы с сильными корреляциями и сравнимой с межатомными расстояниями длиной когерентности достаточно ограничиться рассмотрением кластеров с  $N_d \geq 10$ .

В методе точной диагонализации на первом этапе происходит формирование гамильтоновой матрицы по волновым функциям в узельном представлении, т.е. каждая функция базиса является набором чисел заполнения узлов решетки, 0 или 1 (для каждой проекции спина). Матричные элементы рассчитываются стандартно по правилам вторичного квантования в узельном представлении (и с учетом антисимметрии при перестановках частиц). Линейный размер матрицы равен полному числу состояний  $M$  рассматриваемого кластера. Для кластера из  $N_d$  атомов и фермионной статистики с учетом проекции спина имеем  $M = 4^{N_d}$ . Это означает, что ограничения на размер рассматриваемых кластеров обусловлены, прежде всего, объемом памяти современных ЭВМ. Однако в реальных вычислениях линейный размер матрицы может быть уменьшен в несколько раз за счет того, что гамильтониан коммутирует с операторами полного числа частиц и проекции полного спина, а также с учетом симметрии по отношению к трансляциям в периодических условиях. Тогда гамильтонова матрица имеет блочно-диагональный вид для каждой полной проекции спина и полного числа частиц, и может быть отдельно решена. Например, для  $N_d = 12, N = 5$  и минимальной суммарной проекции спина (например, две частицы со спином вверх и три – вниз) несложно подсчитать с учетом принципа Паули, что  $M = C_{12}^2 C_{12}^3 = 14520$ . Таким образом, линейный размер матриц все равно может быть велик и не допускать полной диагонализации (на современных компьютерах), т.е. определения всех собственных значений и всех волновых векторов. Однако основное и первые возбужденные состояния системы могут быть найдены на основе алгоритма Ланцоша с учетом разреженности матриц. Основная идея метода Ланцоша заключается в построении при помощи итерационных процедур некоторого базиса размерностью  $m$  (подпространство Крылова,  $m \sim 100$ ), в котором гамильтониан имеет тридиагональный вид. При этом матрицу не надо вращать в процессе диагонализации, и она "помещается" в памяти компьютера. Далее стандартным путем находится полный спектр тридиагональной матрицы, на основе которого восстанавливаются собственные числа и собственные вектора исходного гамильтониана в представлении чисел заполнения. Относительная точность метода составляет  $10^{-8} \div 10^{-12}$ .

С помощью такой методики можно точно решить задачу Шредингера для малого кластера и рассчитать энергию основного состояния  $E(N)$  при числе дырок  $N$ , числа заполнения и другие корреляционные свойства.

Основные результаты численных исследований следующие.

Влияние давления моделировалось изменением значения матричного элемента перескока  $t$  между атомами меди и кислорода с изменением  $P$ . Показано, что немонотонные зависимости критической температуры в ВТСП от давления могут быть объяснены результатами расчета, исходя из пропорциональности  $T_c$  и энергии связи носителей.

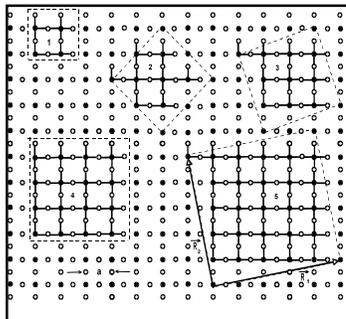
Включение диагонального андерсоновского беспорядка (добавки к узельным потенциалам распределены хаотично в энергетическом интервале шириной  $W$ ), моделирующего радиационные дефекты, показало, что энергии связи дырок и электронов  $|\Delta_d|$  и  $|\Delta_e|$  монотонно уменьшаются с увеличением степени беспорядка  $W$  и обращаются в нуль при некотором критическом значении  $W_c$ , как и критическая температура в ВТСП при некоторой предельной дозе облучения. При этом, в согласии с экспериментом, наблюдается некая универсальность, так как отношения  $W_c/|\Delta_d(W=0)|$  и  $W_c/|\Delta_e(W=0)|$  остаются неизменными ( $\approx 9$  и  $\approx 7$  соответственно) в широком интервале значений  $|\Delta_d(W=0)|$  и  $|\Delta_e(W=0)|$ , соответствующих различному выбору параметров модели Эмери.

Изучалось также влияние точечных магнитных и немагнитных примесей на энергию связи носителей заряда. Расчеты показывают, что магнитные и немагнитные примеси примерно с одинаковой эффективностью подавляют энергию связи, причем в дырочных ВТСП сильнее, чем в электронных. Детальное сравнение с экспериментом полностью подтверждает эту точку зрения.

Расчет парных корреляций в  $\text{Cu}_4\text{O}_8$ -кластере методом точной диагонализации для  $s$ -,  $s^*$ - и  $d_{x^2-y^2}$ -каналов показал присутствие преимущественно  $s^*$ -симметрии.

Резюмируя численные исследования малых кластеров  $\text{Cu-O}$  методом точной диагонализации, можно сказать, что результаты расчетов качественно описывают экспериментальные данные и свидетельствуют в пользу магнитного механизма спаривания носителей заряда, аналогичного модели спиновых мешков Шриффера, и не противоречат концепции спинового полярона.

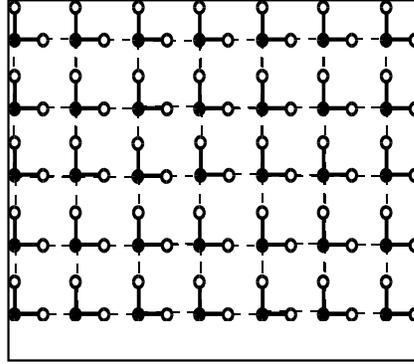
Принципиальным недостатком МТД является ограничение на размеры кластеров, накладываемое объемом оперативной памяти и быстродействием современных компьютеров, что не дает возможности исследовать влияние размеров кластеров на электронные характеристики и термодинамические свойства. Для исследования влияния размеров кластера необходимо использовать квантовые методы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать характеристики больших кластеров (с  $N_a = 100 - 200$ ). Недостатком этих методов является невозможность исследовать наиболее интересный диапазон низких температур с  $T \sim 100 \text{ K}$ , так как в этом случае резко возрастают статистические ошибки, и увеличивается время счета. Основное требование к кластеру: возможность реализации периодических граничных условий, так что данным кластером можно заполнить всю бесконечную плоскость, и симметрия кластера должна также отражать симметрию  $\text{CuO}_2$ -плоскости.



Рассмотрим некоторые детали траекторного алгоритма для плоскости Cu-O для модели Эмери. Основная идея любого траекторного метода – преобразование  $d$ -мерной квантовой задачи в  $(d + 1)$ -мерную классическую с помощью разбиения гамильтониана на два слагаемых с различным типом связей (в одномерном случае – четных и нечетных):

$$H = H_1 + H_2, \quad H_1 = \sum_{\langle ij \rangle_1} H_{ij}, \quad H_2 = \sum_{\langle ij \rangle_2} H_{ij}.$$

В случае плоскости CuO<sub>2</sub> предлагается пространственное разбиение, показанное на рис. При этом связи Cu-O, относящиеся к типу 1, находятся справа и сверху от атомов меди, а связи, относящиеся к типу 2 – слева и снизу от них.



На примере вычисления статистической суммы

$$Z = \text{Sp}[\exp(-\beta H)]$$

оценим погрешности, неизбежно возникающие при таком разбиении. Разрежем интервал  $[0, \beta]$  на  $L$  частей величиной  $\Delta\tau = \beta/L$ . При  $L \rightarrow \infty$ ,  $\Delta\tau \rightarrow 0$  используем разложение Троттера, а именно, представим  $\exp(-\beta H)$  в виде произведения экспонент  $[\exp(-\Delta\tau H_1) \exp(-\Delta\tau H_2)]^L$ ; при этом поправки из-за некоммутативности операторов  $\sim (\Delta\tau)^2 t A$ , где  $A = \max(\varepsilon, U_d, U_p, V)$ . Далее, стандартным образом вставляя полную систему функций на каждом временном срезе, имеем:

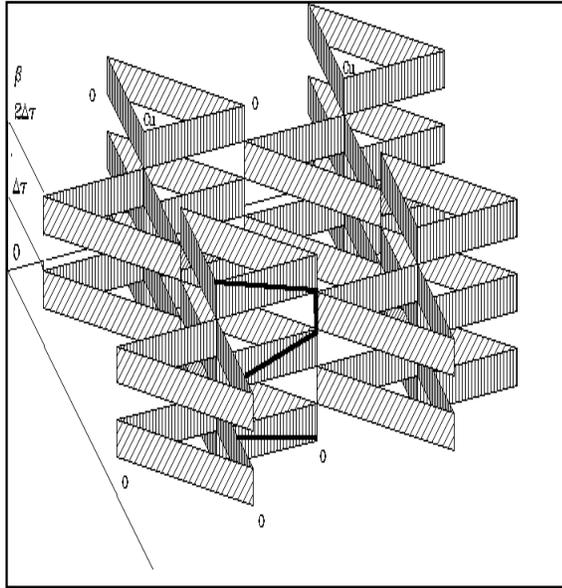
$$Z = \sum_{i_1 \dots i_{2L}} \langle i_1 | \exp(-\Delta\tau H_1) | i_2 \rangle \langle i_2 | \exp(-\Delta\tau H_2) | i_3 \rangle \dots \\ \dots \langle i_{2L-1} | \exp(-\Delta\tau H_1) | i_{2L} \rangle \langle i_{2L} | \exp(-\Delta\tau H_2) | i_1 \rangle,$$

где

$$|i_m\rangle = \left| \frac{n_{1m\uparrow} n_{2m\uparrow} \dots n_{N_a m\uparrow}}{n_{1m\downarrow} n_{2m\downarrow} \dots n_{N_a m\downarrow}} \right\rangle,$$

$n_{im\sigma}$  – числа заполнения узла  $i$  дырками со спином  $\sigma$  в  $m$ -м срезе по мнимому времени из интервала  $[0, \beta]$ . Теперь мы имеем произведение чисел, а не операторов, которые можно переставлять в любом порядке. Выражение для статсуммы удобно представить графически. Рассмотрим систему одинаковых двумерных кластеров Cu-O с количеством атомов  $N_a$ , расположенных один над другим по временной оси, причем число этих кластеров равно  $2L$ . Суммирование происходит по всем возможным замкнутым непересекающимся траекториям,

причем переключения траекторий в полученной классической решетке возможны только по заштрихованным граням призм, опирающихся на ячейки O-Cu-O.



Каждому узлу решетки соответствуют два числа заполнения  $n_{m\uparrow}$   $n_{m\downarrow}$ , равных 0 или 1, поэтому траектории (мировые линии) имеют место для каждого спина независимо (траектории для разных проекций спина независимы и влияют друг на друга только посредством матричных элементов оператора эволюции). Заметим, что в каждом вертикальном сечении полученной решетки по линиям Cu-O и O-O имеем обычную картину плоской решетки "checkboard" (шахматной доски), типичной для траекторного метода МК в системе одномерных фермионов.

Переходы от одного временного среза к другому определяются матричными элементами оператора эволюции

$$U_{n,n+1} = \langle i_n | \exp(-\Delta\tau H_{1,2}) | i_{n+1} \rangle.$$

Полное число состояний ячейки O-Cu-O равно 64, поэтому каждый оператор эволюции представляет собой матрицу  $64 \times 64$ . Выражение не допускает аналитического вычисления для матричных элементов (в отличие от моделей бесспиновых фермионов или редуцированной модели Хаббарда в одномерной ситуации).

#### Основные результаты, которые были получены такими методами МК при моделировании структуры ВТСП.

Проведены расчеты энергии, чисел заполнения, корреляционных функций, оптической щели, импульсного распределения и определены зависимости перечисленных характеристик от размеров кластеров, проведены расчеты парных корреляций. Данные свидетельствуют в пользу магнитного механизма спаривания носителей заряда и согласуются с упомянутыми выше результатами метода точной диагонализации для малых кластеров.

Также была рассчитана плотность состояний и дисперсия квазичастиц в кластерах CuO. Плотность состояний является одной из самых важных характеристик в физике конденсированного состояния, поскольку она связана со многими термодинамическими и транспортными величинами, а также может быть измерена в различных фотоэмиссионных и др. экспериментах. Результаты свидетельствуют о наличии бездисперсионных областей, что наблюдается на эксперименте. Однако есть различия в получаемой плотности состояний и дисперсионных зависимостях, что связано с используемыми аналитическими приближениями.

## 11 неделя. Сверхтекучесть изотопа $^4\text{He}$

По определению, *квантовый кристалл* - кристалл, в котором амплитуда *нулевых* колебаний частиц, образующих пространственную решетку, сравнима с межатомным расстоянием. Это может привести к заметной вероятности квантового туннелирования частиц и требует учета квантовой статистики.

Степень “квантовости” кристалла оценивают через *параметр де Бюра*, который характеризует отношение средней кинетической энергии частицы к энергии их взаимодействия  $E$ :

$$\Lambda \approx (\hbar / a) / (mE)^{1/2} \sim (a_0 / a)^2,$$

где  $a_0$  - амплитуда нулевых колебаний,  $a$  - постоянная решетки,  $m$  - масса частицы. Как видно, он является мерой величины нулевых колебаний по отношению к постоянной решетки. Очевидно также, что чем тяжелее атомы, составляющие кристалл, тем меньше этот параметр, и тем менее “квантовым” является кристалл, который слагается ими.

Наибольшие значения этот параметр достигает у изотопов гелия  $^3\text{He}$  ( $\sim 3.1$ ),  $^4\text{He}$  ( $\sim 2.7$ ). Для сравнения у инертных газов:  $\text{Ne}$  (0.6),  $\text{Ar}$  (0.18),  $\text{Kr}$  (0.10),  $\text{Xe}$  (0.06).

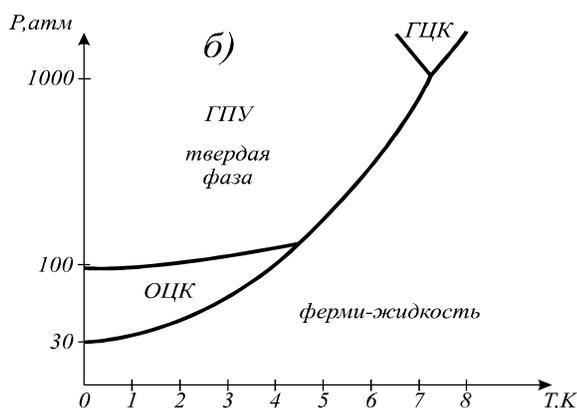
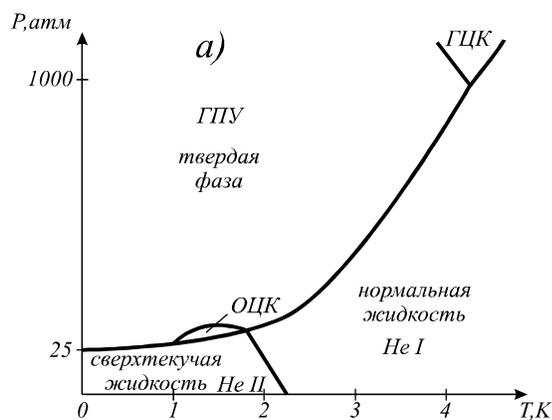
К квантовым кристаллам относят также гипотетические кристаллы, образованные не из атомов, а из электронов (кристалл Вигнера), экситонов и т.п., которые получаются при учете сильного межчастичного взаимодействия в совокупности с малой плотностью газа частиц и низкой размерностью системы. Однако *единственными в природе реальными* квантовыми кристаллами являются только твердый  $^3\text{He}$  и  $^4\text{He}$ .

В твердом состоянии они, в отличие от кристаллов инертных газов, образуют несколько типов решеток: ГЦК (гранецентрированная кубическая), ГПУ (гексагональная плотноупакованная) и ОЦК (объемно-центрированная кубическая), и испытывают структурные переходы при изменении температуры и давления. Квантовость проявляется в том, что соседние атомы нельзя рассматривать как частицы, независимо колеблющиеся около своих положений равновесия (узлов решетки). Вследствие малой массы и чрезвычайно слабого взаимодействия атомы гелия находятся в состоянии достаточно интенсивного нулевого движения и совершают туннелирование с обменом вдоль положений равновесия решетки. Интересно, что это приводит к своеобразной “мягкости” кристалла, к его самозалечиванию всех дефектов структуры.

Из фазовых диаграмм видно, что твердый гелий-4 можно получить при давлении меньше 25 атмосфер, а твердый гелий-3 - меньше 30 атмосфер. Более того, при нормальном давлении оба изотопа гелия - *квантовые* жидкости даже при *нуле* температур.  $^3\text{He}$  - ферми-жидкость, т.к. у этого изотопа некомпенсированный спин за счет недостающего нейтрона, а  $^4\text{He}$  - бозе-жидкость с нулевым спином (два нейтрона, два протона и два электрона). Наиболее близкие к гелию по физико-химическим свойствам инертные газы  $\text{Ne}$ ,  $\text{Ar}$ ,  $\text{Kr}$  и  $\text{Xe}$  благополучно переходят в твердое состояния при  $T < 100\text{K}$ , не проявляя квантовых свойств в силу большей атомной массы. Более строго определить условия квантовости жидкости при конечной температуре можно так: в ней тепловая длина волны де-Бройля сравнима с межатомным расстоянием  $a$ :

$$\lambda_T = \hbar / [2\pi m k_B T] \sim a,$$

что приводит к перекрытию волновых функций соседних атомов. Тепловая длина характеризует амплитуду тепловых колебаний, так что условие - также оценка температуры, ниже которой возможно наблюдать квантовое поведение жидкости.



Наиболее ярким свойством квантовой жидкости  ${}^4\text{He}$  является *сверхтекучесть* при  $T_c < 2.17\text{K}$ , открытая Петром Леонидовичем Капицей в 1937 году.

Объясненное Ф.Лондоном и Л.Д.Ландау в 1941г. [1b] (Нобелевская премия 1962г.), это физическое явление послужило толчком в понимании низкотемпературных свойств сильно взаимодействующих сред, и, в частности, стимулировало в дальнейшем объяснение явления сверхпроводимости (1957г., Бардин, Купер, Шриффер).

Открытие сверхтекучести также и в ферми-жидкости  ${}^3\text{He}$  ( $T_c < 3\text{мК}$ ) Д.Д.Ошеровым, Р.С.Ричардсоном и Д.М.Ли в 1972 году открыло новую главу в понимании сверхтекучести. В 1996 году, первооткрывателям, профессору Корнелльского университета Давиду Ли (D.M.Lee), профессору Стэнфордского университета Дугласу Ошерову (D.D.Osheroff) и профессору Корнелльского университета Роберту Ричардсону (R.C.Richardson) была заслужена присуждена Нобелевская премия.

Историю открытия и исследования жидкости, состоящей из самого распространенного изотопа  ${}^4\text{He}$  (гелия-4) следует начать с 1908 года. В 1908 году в знаменитой Лейденской лаборатории Камерлинг-Оннес сумел получить при температуре 4.21K жидкий гелий ( ${}^4\text{He}$ ). В 1911 году он обнаружил явление сверхпроводимости при исследовании сопротивления ртути в гелиевых температурах.

Жидкий гелий-4 был основным безопасным хладагентом (т.к. являлся инертным газом), который использовался при изучении низкотемпературных свойств веществ.

Парное взаимодействие между нейтральными атомами инертного газа хорошо аппроксимируется стандартным потенциалом Леннарда-Джонса («6-12»):

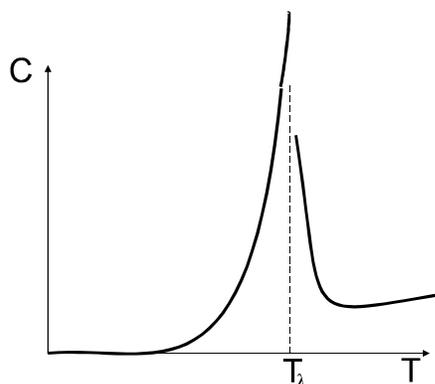
$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

ван-дер-ваальсовского типа, где  $\epsilon \sim 0.01eV$ ,  $\sigma \sim 3\text{Å}$ .

Описание газообразной, жидкой и твердой фаз в остальных инертных газах (Ne, Ar, Kr, Xe) неплохо описывается моделью ансамбля классических частиц с таким межчастичным взаимодействием. Однако случай гелия не соответствовал обычному классическому описанию, что наглядно продемонстрировано на фазовой диаграмме, рассмотренной выше.

Изотоп гелий-4 не привлекал особого внимания исследователей вплоть до 1937 года, когда П.Л.Капица не провел свой знаменитый опыт по охлаждению гелия откачкой паров над поверхностью, таким образом доведя температуру жидкости до 2.17К.

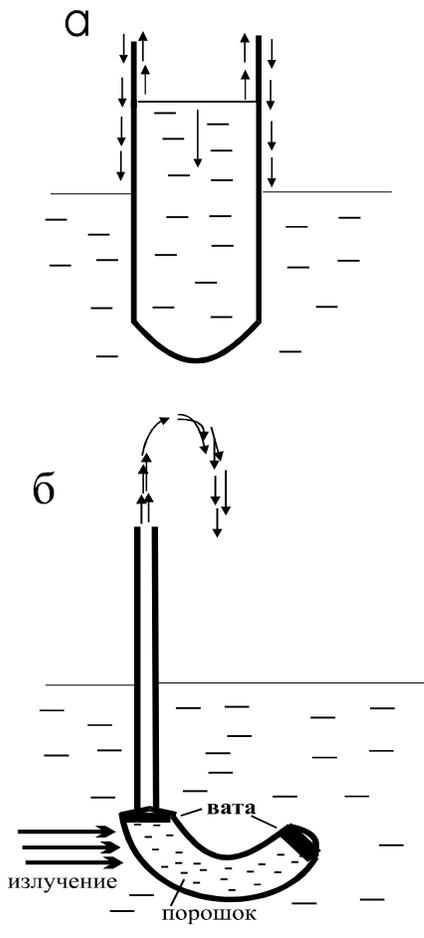
Он обнаружил удивительное явление: поверхность кипящей до этого жидкости стала спокойной, кипение прекратилось. Это были явные признаки наблюдения фазового перехода в новое физическое состояние. Позднее измерения теплоемкости подтвердили наличие термодинамического фазового перехода второго рода (В.Блеаней, 1939 [1с]): на температурной зависимости теплоемкости именно при этой температуре ( $T_c=2.17\text{K}$ ) наблюдался излом производной.



Фазу жидкости при температуре ниже  $T_c$  называют гелий-II в отличие от обычного жидкого гелия при  $T > T_c$ , которую принято называть гелий-I. Дальнейшие исследования П.Л.Капицы и других ученых выявили совершенно уникальные свойства гелия-II. Так, он является почти идеальным проводником тепла, так что в точке перехода теплопроводность гелия возрастает на несколько порядков, и в случае малых тепловых потоков стремится к бесконечности. Это и объясняет отсутствие пузырькового кипения, т.к. создать градиент температуры в гелии-II невозможно. В обычных жидкостях пузырьки образуются, когда локальная температура существенно выше температуры свободной поверхности. В гелии-II любое возникшее локальное повышение температуры мгновенно “рассасывается”, и пузырек не успевает образоваться.

Наиболее замечательное свойство гелия-II - полное отсутствие вязкости, т.е. идеальная текучесть жидкости без трения - *сверхтекучесть*. Обычные жидкости при движении испытывают трение как со стенками сосуда, так и внутреннее трение частиц жидкости между собой. Жидкий гелий-II может свободно протекать сквозь мельчайшие поры и щели.

Интересный эксперимент - истекание гелия из сосуда. Если маленькую пробирку с гелием-II медленно поднимать над гелиевой ванной, то в пробирке образуется подвижная пленка, позволяющая жидкости подниматься по внутренним стенкам, переливаться через край и стекать обратно в ванну, так что через некоторое время пробирка становится пустой.



Сверхтекучесть гелия объясняется нулевой вязкостью. Вязкость определялась как измерением вязкого сопротивления потоку, так и расчетом вязких сил, действующих на тело, движущееся в жидкости. Особенно изящны эксперименты с незатухающим потоком жидкости (Реппи и Дебати, 1964). Так, сосуд, имеющий форму тора, заполняли пористым материалом с очень тонкими каналами, пропускающими жидкость. Тор вращали вокруг его оси симметрии при  $T > T_c$ , охлаждали (продолжая вращать), а затем останавливали, после чего течение гелия-II продолжалось еще по крайней мере 12 часов без снижения угловой скорости, что доказывало нулевую вязкость.

В то же время целый класс экспериментов с осциллирующими дисками (Кеезом, Мак-Вуд, 1970), вибрирующими проволочками и др. приводил к значениям вязкости, немногим меньше чем для газообразного гелия, что противоречило результатам по незатухающему потоку.

Красивый эффект, иллюстрирующий сверхтекучие свойства, - эффект фонтанирования (Аллен и Джонс, 1938). Если стеклянную трубку, плотно заполненную порошком (типа окиси железа), частично погрузить в гелиевую ванну, а затем нагреть, то забьет фонтан гелия, поднимающийся намного выше уровня гелия в ванне.

Для объяснения этих и других явлений Л.Д.Ландау в 1941 году предложил так называемую двухжидкостную модель. Согласно этой модели, жидкий  ${}^4\text{He}$  при  $T < T_c$  представляет собой две

взаимопроникающие жидкости - нормальную и сверхтекучую компоненты. Последняя без трения протекает сквозь поры и щели. Она к тому же не взаимодействует диссипативно со стенками сосуда, содержащего жидкость. На эту сверхтекучую компоненту, как на некоторый фон, накладывается нормальная компонента, которая эффективно переносит тепло и имеет ненулевую вязкость. Сразу следует оговорить, что эти две жидкости физически неразделимы, неправильно считать, что некоторые атомы принадлежат нормальной жидкости, а другие - сверхтекучей. Более корректно сказать следующее: ниже  $T_c$  в жидком гелии имеют место два типа движений - сверхтекучее со скоростью  $v_s$  и плотностью  $\rho_s$ , и нормальное со скоростью  $v_n$  и плотностью  $\rho_n$ . Для достаточно малых скоростей можно полагать, что полная плотность и полная плотность потока  $j$  являются суммой вкладов от обеих составляющих:

$$\rho = \rho_s + \rho_n; \quad j = \rho_s v_s + \rho_n v$$

Такое теоретическое представление гелия-II неплохо укладывается во все экспериментальные результаты. Так, исследования показали, что пленка гелия на выступающих из гелиевой ванны поверхностях (например, пробирка) чрезвычайно толстая  $\sim 30$  нм (100 атомных слоев). Этого достаточно для обеспечения течения жидкости вдоль пленки. Течение жидкости (даже вверх, против силы тяжести!) внутри пленки обусловлено сверхтекучей компонентой, стремящейся выровнять гравитационные потенциалы (например, при подъеме пробирки из ванны).

Эффект фонтанирования объясняется с точки зрения двухжидкостной модели так: при нагревании порошка в изогнутой части трубки по обе стороны порошка создается разность температур, нормальная компонента, ответственная за перенос тепла, потечет в ванну, т.к. не может проходить сквозь извилистые каналы в порошке, а сверхтекучая компонента для компенсации избыточного давления - через порошок в трубку, причем с такой скоростью, что появляется фонтан. Фактически, перенос тепла и массы в гелии-II неразделимы. Нормальная компонента всегда потечет от источника тепла, а сверхтекучая - наоборот, так что суммарная плотность останется постоянной. Любой перепад температур (искусственно созданный) в гелии-II будет обязательно сопровождаться перепадом давления.

Для определения температурной зависимости  $\rho_s$  и доказательства справедливости двухжидкостной модели был проведен целый ряд экспериментов. Наиболее яркие и красивые по исполнению - эксперименты с крутильным маятником (Андроникашвили, 1946). Стопка расположенных на равных расстояниях друг от друга металлических дисков подвешивалась на крутильной нити так, чтобы могла осциллировать в жидком гелии. Расстояние между дисками подбиралось так, чтобы при  $T > T_c$  вся жидкость между дисками увлекалась ими. Эксперимент показал, что при  $T < T_c$  период осцилляций резко падал, что говорило о том, что часть жидкости не увлекается дисками. Измерения при различных температурах дают возможность рассчитать эту (сверхтекучую) долю жидкости, и результат следующий:

$$\rho_s / \rho = 1 - (T / T_\lambda)^{3/2}$$

Для объяснения противоречивых результатов по измерению вязкости в случае вращения гелия-II была разработана специальная гидродинамика и термодинамика сверхтекучей жидкости, которая учитывает взаимодействие между сверхтекучей и нормальной компонентами. Так, оказалось, что во вращающемся сосуде нормальная часть жидкости ведет себя обычным образом - вращается как твердое тело. Сверхтекучая же часть пронизана целым рядом так называемых вихревых нитей, образующих как правило регулярную решетку. Сверхтекучая компонента вращается вокруг каждой нити, причем момент количества движения, связанный с каждым вихрем, квантуется. Количество вихревых нитей таково, что суммарный момент, связанный с ними, совпадает с таким его значением, как если бы вся сверхтекучая часть участвовала во вращении.

Теория Ландау объясняет, что так как результирующий спин атома  ${}^4\text{He}$  равен нулю, и он является бозоном, т.е. подчиняется статистике Бозе-Эйнштейна. Именно конденсатная часть и отождествляется со сверхтекучей жидкостью. Для взаимодействующих атомов гелия, моделируемых как бозе-газ с взаимодействием, рассчитан спектр возбуждений, который состоит из обычных звуковых возбуждений - фононов, так из так называемых ротонов - локализованных вихревых образований. Именно фононы и ротонны составляют нормальную компоненту гелия-II.

## 12 неделя. Изотоп ${}^3\text{He}$ – сверхтекучая ферми-жидкость

Более редкий изотоп гелия -  ${}^3\text{He}$  (гелий-3) стал доступен для исследования в физике низких температур после Второй Мировой войны как побочный продукт программ по созданию ядерного оружия. Он образуется при радиоактивном бета-распаде трития (изотоп водорода  ${}^3\text{H}$  с двумя дополнительными нейтронами) с периодом полураспада 12 лет. Первые исследования жидкого гелия-3 были выполнены в США еще в 1959 г.

В конце 60-х годов как в США, так и в СССР работы по ожижению различных газов щедро финансировались в рамках проектов по термоядерному синтезу, ракетным и кислородно-водородным двигателям с криогенным топливом и др. В принципе, аномалии в поведении жидкого  ${}^3\text{He}$  впервые были замечены еще в 1963 году в низкотемпературной лаборатории Корнелльского университета в США (N.V. Ithaka). Однако они не были осмыслены и изучены как новый фазовый переход. И только в 1972 году были получены убедительные доказательства существования сверхтекучести в  ${}^3\text{He}$ .

На самом деле исходно основной интерес исследователей был связан не с жидким, а с твердым состоянием гелия-3, и причина - именно в фермиевской статистике и некомпенсированном ядерном спине атомов этого вещества. Поскольку ядерные моменты очень малы, ожидалось, что магнитное упорядочение в твердом гелии-3 будет происходить только при очень низких температурах. Обнаружение этого ферромагнитного фазового перехода и являлось первичной целью исследования гелия-3 (этот переход позднее и был обнаружен при 1 милликельвине Ричардсоном с соавторами). Значит, при  $T > 0.01\text{K}$  ядерные спины атомов в кристалле должны быть полностью разупорядочены, для спина  $1/2$  это означает, что энтропия  $S$  должна равняться  $N \ln 2$  (энтропия системы равна логарифму от статистического веса  $W$ , количества степеней свободы состояния системы -  $W = 2^N$ ,  $N$  - число атомов).

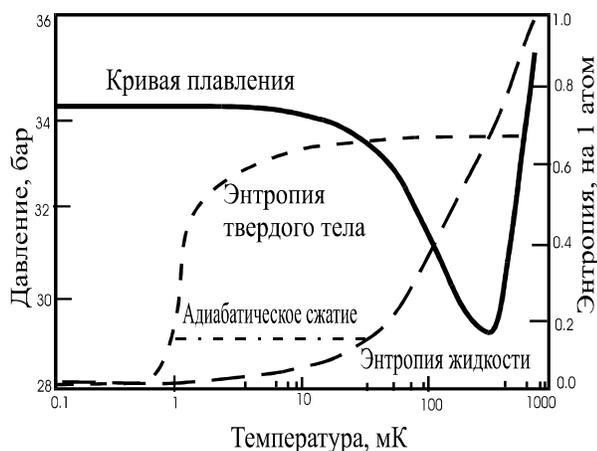
С другой стороны, жидкий  ${}^3\text{He}$  подчиняется статистике Ферми-Дирака. Отклонение от классического поведения начинается примерно при температуре, когда тепловая длина волны де-Бройля становится сравнима со средним расстоянием между частицами. Для жидкого гелия-3 это температура  $\sim 1\text{K}$ . Значительно ниже этого значения как теплоемкость, так и энтропия, согласно теории ферми-жидкости, будут линейными функциями температуры.

Какие же следствия могут иметь эти соображения для кривой равновесия жидкой и твердой фаз  $P(T)$ , определяемой знаменитым уравнением Клазиуса-Клайперона? Согласно этой формуле, наклон кривой плавления равен:

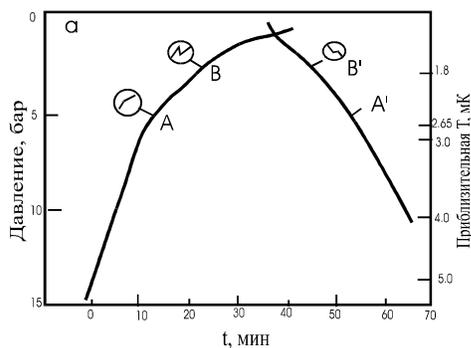
$$\frac{dP}{dT} = \frac{S_{\text{liquid}} - S_{\text{solid}}}{V_{\text{liquid}} - V_{\text{solid}}} = \frac{Q}{T(V_{\text{liquid}} - V_{\text{solid}})},$$

где  $Q$  - скрытая теплота плавления. Для гелия-3  $V_{\text{liquid}}$  всегда больше, чем  $V_{\text{solid}}$ , так что знаменатель всегда положителен. С другой стороны, числитель меняет знак при охлаждении в области вырождения Ферми, т.к.  $S_{\text{liquid}}$  становится меньше, чем постоянная энтропия твердой фазы  $S_{\text{solid}} = N \ln 2$ . Поэтому при низких температурах наклон кривой плавления становится *отрицательным*. Более того, в этом режиме отрицательной становится скрытая теплота плавления, т.е. чтобы заморозить жидкий  ${}^3\text{He}$ , надо к нему подвести тепло (!) - это так называемый эффект Померанчука (предсказанный российским теоретиком в 1950г.).

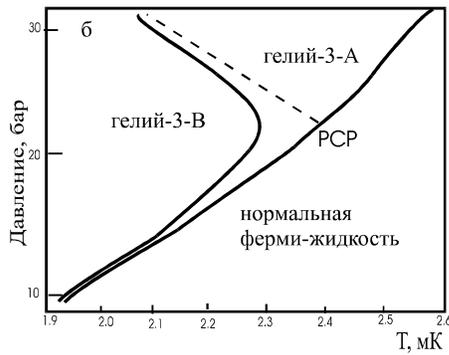
Итак, согласно эффекту Померанчука, твердая фаза должна собираться в самом теплом месте криостата. Как правило, прикладывали адиабатическое сжатие (процесс отмечен стрелкой на рис.4), которое переводило жидкость в кристалл из минимума кривой плавления, что позволяло достичь диапазона  $\sim 1\text{mK}$ . Криоячейку (криостат специальной конструкции) для адиабатического сжатия и называют "ячейкой Померанчука".



Впервые в 1965 году в институте Физических Проблем в Москве Юрий Ануфриев охладил  $^3\text{He}$  методом Померанчука и достиг  $T = 3$  мК. Но экспериментальная гонка уже началась, и американские исследователи успели первыми. В группе из трех ныне нобелевских лауреатов (1996 год) Ли и Ричардсон были старшими научными сотрудниками, а Дэвид Ошеров - студентом-дипломником. Именно последний и создал установку для исследования фазовых переходов в твердом гелии-3 (на основе ячейки Померанчука) под давлением. Он же и обнаружил первым особенности на зависимости давления от времени (что эквивалентно изменению температуры), в процессе медленного возрастания (убывания) объема твердого льда гелия-3. Более того, устойчиво наблюдались две отчетливые аномалии, которые назвали А- и В-фазы (2.7 мК и 2.1 мК, соответственно). Первая статья в Physical Review Letters была посвящена фазовым переходам в *твердом* гелии, т.е. исследователи сначала не поняли, что имеют дело с *жидкой* фазой. После измерения намагничивания с помощью катушки ЯМР (ядерного магнитного резонанса) выяснилось, что, во первых, аномалии в  $P(T)$  сопровождаются в этих же точках аномалиями намагниченности, а во вторых, эти аномалии соответствуют не твердой фазе, а жидкости. Причем ученые для отделения вкладов жидкой и твердой фаз использовали пространственный профиль поля в виде линейного градиента вдоль образца.



В более сильных полях ( $\sim 400$  Гс) В-фаза подавляется в пользу А-фазы, и поликритическая точка исчезает. В более "высокотемпературной" точке А появлялся отчетливый большой вклад восприимчивости жидкости, а в "низкотемпературной" В-точке восприимчивость жидкости резко падала примерно в два раза. Такие аномалии однозначно говорили о фазовых переходах в ферми-жидкости, которые могли произойти только при спаривании исходных ферми-частиц в некие конгломераты (пары), изменении статистики и появлении сверхтекучести. Интересно, что посланная в 1972 году статья [3], где уже говорилось о жидкости и сверхтекучести, полгода рассматривалась, т.к. рецензенты журнала сочли предыдущую статью авторов противоречащей новой интерпретации результатов.



Итак, в 1972 году были обнаружены две (А, В) сверхтекучие фазы в жидком гелии-3. Как же сейчас объясняют эти фазовые переходы? Полагают, что здесь имеет место спаривание носителей, но из-за сильного взаимодействия между атомами  ${}^3\text{He}$  куперовские пары будут иметь совсем другую природу, чем пары сверхпроводящих электронов. В обычных сверхпроводниках куперовские пары имеют нулевой орбитальный магнитный момент ( $l=0$ ), так что электроны в такой паре не вращаются друг относительно друга. Сильное короткодействующее отталкивание частиц в жидком  ${}^3\text{He}$  запрещает этот тип спаривания. Но в разное время был предложен целый ряд состояний спаривания с отличным от нуля орбитальным угловым моментом. Предлагались как модели с  $p$ - ( $l=1$ ), так и с  $d$ - ( $l=2$ ) типом спаривания. Среди ранних исследований были работы Эмери и Сесслера (1960), Андерсона и Морела (1961) и др. Модели  $p$ -спаривания, выдвинутые Бальяном и Вертхаммером (1963), а также упомянутая выше модель Андерсона и Морела были позднее отождествлены с реальными сверхтекучими фазами жидкого  ${}^3\text{He}$ .

Важная черта спаривания с нечетным  $l$  состоит в том, что полный спин пары равен 1 (но не нулю, как при четном  $l$ ). Поэтому любой параметр порядка для спаривания с нечетным  $l$  будет обладать внутренними степенями свободы, связанными с ненулевым спином и орбитальным нулевым моментом. Это его радикально отличает от обычной сверхпроводящей жидкости. Если обозначить состояние пары атомов гелия-3 как  $|\sigma\sigma'\rangle$ ; где  $\sigma, \sigma'$  -  $z$ -проекции спинов атомов, то возможные состояния при  $p$ -спаривании с суммарным спином  $S=1$ :

$$S_z=1 \rightarrow |\uparrow\uparrow\rangle; \quad S_z=0 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle]; \quad S_z=-1: \rightarrow |\downarrow\downarrow\rangle.$$

Так вот, сверхтекучая В-фаза, отождествляемая с состоянием Бальяна и Вертхаммера, соответствует параметру порядка со всеми тремя спиновыми компонентами ( $S_z=0, 1, -1$ ). Сверхтекучая А-фаза отождествляется с состоянием Андерсона-Морела и состоит только из пар с состояниями  $|\uparrow\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\downarrow\rangle$ , т.е. отсутствует состояние с  $S_z=0$ . Более тщательные измерения также позволили выделить дополнительную сверхтекучую А' - фазу, существующую только в магнитном поле, и имеющую только одну спиновую компоненту:  $|\uparrow\uparrow\rangle$ .

Необычные типы спаривания, реализуемые в жидком гелии-3, и внутренние степени свободы пары отражаются на физических свойствах. Так, орбитальная анизотропия А-фазы приводит к экспериментально наблюдаемым анизотропным свойствам сверхтока. Энергетическая щель (запрещенная область энергий, образуемая из-за спаривания), в гелии-3-А также анизотропна, в то время как в гелии-3-В она изотропна.

Измерения теплоемкости при переходах в новые фазы дали кривые, характерные для обычных сверхпроводников, со скачком в точке перехода. Выше А-перехода имела место типичная линейная зависимость от температуры, характерная для нормальной ферми-жидкости.

Естественно, если мы имеем дело со сверхтекучестью, то должны, кроме аномалий, связанных с анизотропией параметра порядка, наблюдать свойства, похожие на поведение сверхтекучего  ${}^4\text{He}$ . И действительно, незатухающие колебания, доказывающие сверхтекучесть в А-фазе, были проведены Ануфриевым в 1978 г., появление четвертого звука наблюдались Яновым и Реппи в 1974 г., второй звук был обнаружен в А-фазе Корручини и Ошеровым в 1980г. Проводились эксперименты во вращающихся криостатах  ${}^3\text{He}$ , однозначно доказавших сверхтекучесть.

Раствор  ${}^3\text{He}$  в  ${}^4\text{He}$  представляет собой простейшую разреженную систему ферми-газа  ${}^3\text{He}$  в инертном сверхтекучем конденсате  ${}^4\text{He}$ , что делает такой раствор идеальным объектом для развития и апробации различных методов теории ферми-жидкости. Первая классическая работа в области теории сверхтекучести трехмерных растворов принадлежит Бардину, Бейму и Пайнсу (1967), установивших изящную аналогию между спариванием двух атомов  ${}^3\text{He}$  в растворе через поляризацию фона  ${}^4\text{He}$  (обмен виртуальными фононами). Температуру сверхтекучести  ${}^3\text{He}$  (т.е. сверхтекучести разреженной ферми-системы) оценивают как

$$T_c \sim 10^{-4} K$$

Эта оценка справедлива для трехмерной ферми-системы. Однако раствор  ${}^3\text{He}$  в  ${}^4\text{He}$  является очень интересным объектом в связи с тем, что его можно сделать чисто двумерным. Напомним, что в сверхпроводящих электронных системах пленка считается двумерной, если ее толщина  $d$  много меньше длины когерентности  $\xi \sim 100 - 1000 \text{ \AA}$ . В случае пленки  ${}^3\text{He}$  на графойле (отслаивающийся графит) и слоев раствора, субмонослоев, радиус локализации атомов  ${}^3\text{He}$  в третьем измерении (т.е. толщина пленки) действительно порядка межатомных расстояний. Двумерный раствор  ${}^3\text{He}$  в  ${}^4\text{He}$  является как бы мостиком между сверхтекучестью и сверхпроводимостью.

О двумерии такой системы свидетельствуют следующие экспериментальные факты. Так, измерения коэффициента поверхностного натяжения (фактически поверхностной свободной энергии) как функции температуры в слабом растворе  ${}^3\text{He}$  в  ${}^4\text{He}$  дали нетривиальную зависимость. Для интерпретации экспериментов Андреевым была предложена идея о существовании поверхностных примесных уровней на свободной поверхности  ${}^4\text{He}$ .

В результате атомы  ${}^3\text{He}$  свободно двигаются вдоль поверхности, и плохо – поперек. Они локализируются у поверхности  ${}^4\text{He}$  в пленку.

Для двумерной ферми-системы оценки критической температуры на два-три порядка выше, чем в трехмерном случае, что дает надежду экспериментальной проверки сверхтекучести.

### 13 неделя. Бозе-конденсация в газовой фазе

Когда говорят о бозе-конденсации в реальных физических системах, как правило, имеют в виду сверхтекучий гелий. Однако следует учитывать, что сверхтекучие  $^4\text{He}$  и  $^3\text{He}$  – это квантовые жидкости, т.е. плотная конденсированная среда. Истинная же бозе-конденсация понимается как конденсация частиц бозе-газа в основное состояние из разреженной газовой фазы (как рассматривается в теории слабо-неидеального бозе-газа).

Проблема наблюдения истинной бозе-конденсации наталкивалась на значительные экспериментальные трудности. Так собственно единственным известным бозе-газом до недавнего времени являлся спин-поляризованный водород, который оставался газом вплоть до температуры абсолютного нуля, однако для его получения необходимы специальные магнитные ловушки и сверхнизкие температуры.

Первые эксперименты можно датировать 1983 г.. Необходимо было довести спин-поляризованный водород ( $\text{H}\downarrow$ ) до высокой плотности или низкой температуры, т.к. температура конденсации  $T_0 = 3.31 \frac{\hbar^2}{m} n^{2/3}$  ( $=74 \text{ mK}$  для плотности  $n=10^{19} \text{ см}^{-3}$ ).

Спин-поляризованный водород ( $\text{H}\downarrow$ ) – это газ в магнитном поле с атомами в двух расщепленных состояниях:  $|\alpha\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle - \varepsilon|\uparrow\downarrow\rangle$  - основное состояние ( $\uparrow$  - спин электрона,  $\uparrow$  - спин протона),  $|\beta\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle$  - чисто спиновое состояние,  $\varepsilon = \alpha / 4\mu_B H$ ,  $\alpha = e^2 / \hbar c$  – постоянная тонкой структуры.

Основная задача – получить дважды спин-поляризованный водород ( $\text{H}\downarrow\downarrow$ ), который имеет только состояние  $|\beta\rangle$ . Это возможно, так как переход в молекулу  $\text{H}_2$  идет за счет  $|\alpha\rangle - |\alpha\rangle$  - рекомбинации, а с другой стороны  $|\beta\rangle - |\alpha\rangle$  релаксация, приводящая из  $\text{H}\downarrow\downarrow$  в  $\text{H}\downarrow$ , имеет малую скорость, так что состояние  $|\beta\rangle$  ( $\text{H}\downarrow\downarrow$ ) – достаточно долгоживущее, и его время жизни больше, чем время жизни состояния ( $\text{H}\downarrow$ ), размываемое столкновениями  $|\alpha\rangle - |\alpha\rangle$  и осаждающееся в состояние  $\text{H}_2$ . При достижении плотности  $10^{17} \text{ см}^{-3}$  в ( $\text{H}\downarrow\downarrow$ ) фактически остается чисто спиновое состояние, и этот газ (бозе-газ) можно сжать до больших плотностей.

Технология охлаждения – предварительное охлаждение в криостатах растворения  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  вплоть до  $200 \mu\text{K}$ , далее – сжатие, желательное до  $10^{19} \text{ см}^{-3}$ . Удаётся сжать на порядок, до  $3 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , в объеме  $1 \text{ мм}^3$  в полях до  $10 \text{ Тл}$ , но этого оказалось недостаточно для достижения бозе-конденсации.

Сразу отметим, что уже после 1995 года и наблюдения бозе-эйнштейновской конденсации в атомарных газах щелочных элементов, в 1998 году группе из Курчатовского института (Сафронов и др.) удалось представить данные по трехчастичной рекомбинации, свидетельствующие о бозе-конденсации атомарного спин-поляризованного водорода над поверхностью сверхтекучего гелия.

Прорыв в экспериментальной ситуации произошел в 1995 году. Сразу для трех изотопов щелочных металлов:  $^7\text{Li}$ ,  $^{23}\text{Na}$  и  $^{87}\text{Rb}$  наблюдали переход в конденсированное состояние. При этом использовали магнито-оптическую ловушку и лазерное охлаждение.

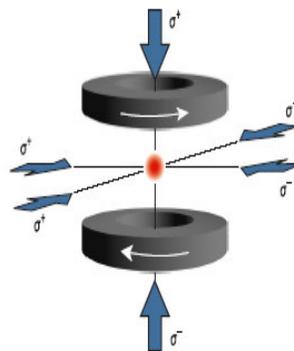
Выбор щелочных металлов диктовался структурой их верхних оболочек, идентичных атому водорода. Единственный s- электрон вел себя по отношению к ионному остову так же, как и в атоме водорода, и таким же образом энергетические уровни расщеплялись в магнитном поле. В итоге возникала уникальная возможность создать атом в чистом спиновом состоянии с

противоположно направленными ядерным и электронным спином, т.е. сконструировать бозон с нулевым спином и с ненулевым магнитным моментом, и с достаточно большой массой (по сравнению с водородом). Это, во-первых, приводит к возможности создавать потенциальный рельеф для таких атомов с помощью магнитного поля, а, во-вторых, к реальному достижению критической температуры при разумной плотности газа таких атомов. Атомы щелочных элементов имеют целочисленные спины (ядерный плюс электронный), поэтому их квантовые магнитные моменты могут быть направлены по полю, против поля и с нулевой проекцией момента на направление поля. Для заполнения ловушки пригодны лишь те атомы, магнитные моменты которых направлены против поля. Энергия таких атомов имеет минимум в центре магнитной ловушки.

Нейтральные атомы щелочных металлов, находясь в разреженном атомарном «облаке», взаимодействуют между собой Ван-дер-Ваальсовскими силами, с отталкиванием на малых расстояниях ( $\sim 1/r^{12}$ ) и притяжением на больших расстояниях ( $\sim 1/r^6$ ), например, потенциалом Леннарда-Джонса («6-12»). Однако из-за относительной разреженности системы,  $na^3 \ll 1$ , достаточно ограничиться описанием на языке сечений рассеяния (или длин рассеяния  $a$ ), т.е. полагать приближение жестких шаров, взаимодействующих с величиной  $U = 4\pi\hbar^2 an/m$ ,  $m$  – масса атома. Для рубидия и натрия длина рассеяния  $a$  положительна, т.е. имеет место отталкивание. Для  ${}^7\text{Li}$  напротив, длина рассеяния отрицательна ( $a \sim -14 \text{ \AA}$ ), и энергия взаимодействия уменьшается с увеличением концентрации, так что конденсат стремится коллапсировать. В магнитной ловушке взаимодействие уравнивается кинетической энергией из-за давления газа, собранного в ограниченном объеме, и можно сформировать метастабильный конденсат даже для атомов лития.

Предварительно охлажденное «облако» атомарного газа щелочного металла, в диамагнитном состоянии, накачанное лазером в одно из возбужденных состояний, а именно в нижнее состояние ( $|\alpha\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle - \varepsilon|\uparrow\downarrow\rangle$ ), которое получается в результате зеемановского расщепления уровней магнитным полем.

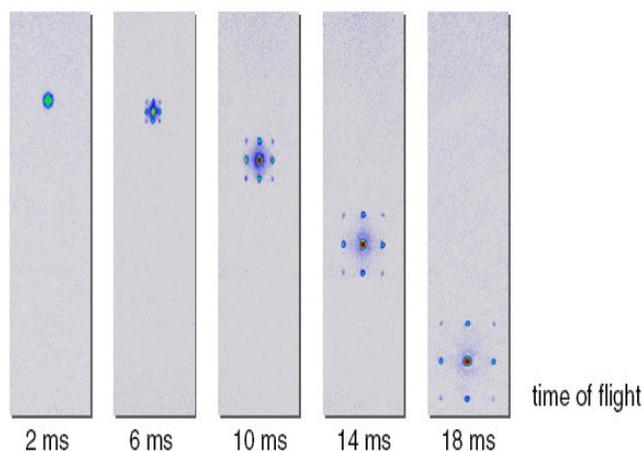
Используются лазеры, настроенные на частоту чуть ниже частоты поглощения атомов (частоты перехода между расщепленными состояниями  $|\downarrow\uparrow\rangle \pm \varepsilon|\uparrow\downarrow\rangle$ ). Тогда покоящийся атом не может поглощать кванты лазерного излучения. Но атом, движущийся навстречу лазерному пучку, благодаря эффекту Доплера, может поглотить фотон. При этом атом получает импульс от фотона в сторону, противоположную направлению движения атома. Через некоторое время возбужденный атом излучит квант света, в среднем изотропно по всем направлениям. Таким образом, если облучать атомы со всех сторон одновременно, можно за несколько циклов облучения затормозить их в магнитной ловушке. Важно, что все эти процедуры можно проводить при комнатной температуре в лаборатории. Подробнее о лазерном охлаждении см. ниже в приложении.



Лазерное охлаждение позволяет заполнить ловушку газом при очень низкой температуре (рекорд – 10 нК). Далее проводится испарительное охлаждение газа (индуцированное охлаждение). Профиль магнитного поля устроен так, что при добавлении ВЧ-поля более теплые атомы, переворачивающие спины, не удерживаются магнитным полем и уходят из периферии ловушки («обрезание максвелловских хвостов»). Таким образом, удастся существенно снизить температуру и попасть в область значений  $T$  меньше микрокельвина.

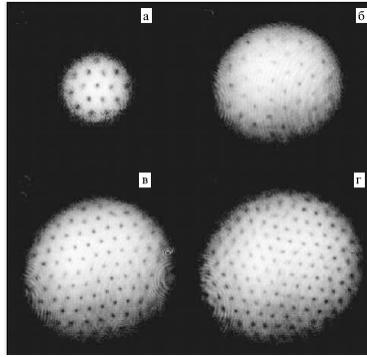
Магнитная ловушка имеет квадрупольную конфигурацию поля. Плотность атомов достигает  $\sim 10^{11} \text{ см}^{-3}$ , при температуре  $< 200 \text{ } \mu\text{K}$ . Из центральной части ловушки атомы уходят благодаря большому градиенту поля. Поэтому делают лазерную «затычку» - т.е. лазерный луч (например,  $\text{Ag}^+$ , 514 нм), и атомы начинают отталкиваться из области, в которой лазерная интенсивность выше. С помощью дополнительных лазерных лучей удается также контролировать форму магнитной ловушки, меняя тем самым параметры конденсата. О конфигурации магнитного поля в ловушке подробнее см. в приложении.

Визуально наблюдается облако через мгновенное «выключение» ловушки и измеряют коэффициент поглощения – фактически «снимок» облака ( $\sim 6$  миллисекунд). Используется времяпролетная спектроскопия – связывают время прохождения частицами заданного расстояния с импульсом и, соответственно, со спектральной картиной распределения. Получают фактически дифракционные картины от пространственного распределения.



При температурах  $\sim 15 \text{ } \mu\text{K}$  для  $^{87}\text{Rb}$  облако разделилось на два – одно равномерно диффузно расходилось, согласно кинетике обычного газа, другое оставалось вблизи ловушки и повторяло его форму, испытывая легкие поперечные колебания, как пружина. Эта локализованная часть – бозе-эйнштейновский конденсат. В первых экспериментах получали несколько сот атомов в конденсате, сейчас – десятки тысяч. А исходно в ловушке находилось  $10^5$ - $10^6$  атомов.

К настоящему времени в бозе-конденсатах наблюдали различные эффекты, присущие такому коллективному основному состоянию. Это и эффект Джозефсона, и интерференция конденсатов, и осцилляции массива конденсата, вихревые структуры, второй звук, истечение конденсата каплями и многое другое.

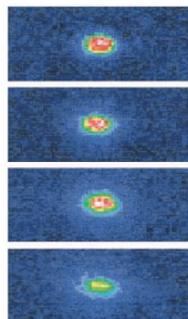


Напомним, что формируются взаимодействующие бозе-газы, при этом в рубидии и натрии длина рассеяния положительна, а в литии - отрицательна. Все конденсаты приготавливались с помощью лазерного охлаждения и последующего ВЧ-испарения. В экспериментах по  $^{87}\text{Rb}$  число атомов в конденсате было доведено до  $4 \times 10^4$  при температуре 280нК. При этом температура конденсации оказалась близкой к критической температуре невзаимодействующего газа  $T = 3.31\hbar^2 n^{2/3} / m$ .

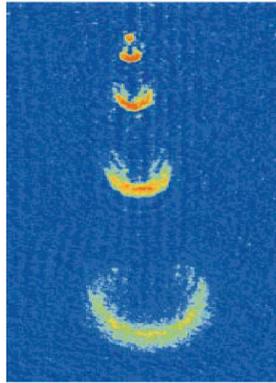
Конденсат колеблется, и наблюдаются его коллективные моды  $m=0$  и  $m=2$ . Мода  $m=0$  соответствует аксиально-симметричным колебаниям, когда сжатие «капли» конденсата по радиусу сопровождается ее удлинением в продольном состоянии. Мода  $m=2$  соответствует эллиптической деформации капли в поперечном направлении. Частоты соответствующих колебаний оказались в хорошем соответствии с теоретическими расчетами, согласно уравнению Гросса-Питаевского.

В экспериментах с конденсатами атомов натрия число атомов конденсата удавалось поднимать до  $5 \times 10^6$ . Согласно теории Ландау, число конденсатных атомов должно подчиняться следующему соотношению  $N_0 = N(1 - (T/T_c)^{3/2})$ . Такая зависимость и наблюдалась экспериментально, когда доля частиц в конденсате была меньше половины общего числа.

Большой интерес вызывают эксперименты с конденсатами в  $^7\text{Li}$ , т.к. атомы лития имеют отрицательную длину рассеяния, т.е. притягиваются. В этих условиях конденсат, с точки зрения теории, не может быть устойчивым, если число атомов в конденсате достаточно велико. Эксперименты показали, что максимальное число частиц в бозе-конденсате  $N_0$  составляет величину 1300, что близко к теоретическому предсказанию 1400. Эксперименты с конденсатом атомов лития с числом больше 1400 показывают наличие микровзрывов, сопровождающиеся быстрым сжатием и разлетом облака атомов. Такие микровзрывы свидетельствуют о коллапсе, т.е. о скачке в новое квантовое состояние с большей плотностью. Схлопывание части конденсата сопровождается выделением тепла и взрывом конденсата. Обнаруженное явление напоминает взрыв сверхновой звезды, где гравитационное притяжение преодолевает отталкивание электрон-нейтронной плазмы за счет принципа Паули. В конденсате соответственно притяжение преодолевает соотношение неопределенностей Гейзенберга.



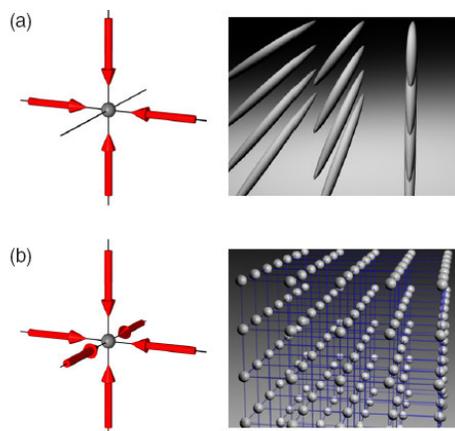
Интересен эксперимент по истечению бозе-конденсата.



Речь идет фактически о некоторой аналогии между бозе-конденсатом и лазером. В бозе-конденсате накопление холодных атомов в ловушке аналогично накоплению фотонов в резонаторе. Если выключить ловушку или повернуть магнитные моменты атомов с помощью импульса ВЧ-поля, то можно освободить либо конденсат, либо его часть. Именно такие свободные частицы и изображены на рисунке.

Интересен эксперимент по интерференции бозе-конденсатов. Магнитная ловушка для атомов натрия создавалась таким образом, что бозе-конденсат имел вид сильно вытянутой сигары. С помощью дополнительного лазерного луча этот конденсат можно разделить на две части с некоторым расстоянием  $d$  между конденсатами. После этого происходит одновременное выключение ловушки и лазерного луча, так что две половинки конденсата быстро расширялись в поперечном направлении и сравнительно медленно двигались навстречу друг к другу. В области их перекрытия образовывалась хорошо наблюдаемая картина интерференции с расстоянием между пучками, равными половины длины волны де Бройля. А сама длина волны описывались соотношением  $\lambda = 2\pi\hbar t / md$ ,  $t$  – время наблюдения. Экспериментально наблюдаемая картина интерференции волн вещества с  $15 \mu\text{m}$  периодом соответствует кинетической энергии  $0.5 \text{ нК}$ , фактически равной энергии свободных частиц при более малой плотности разлетающегося конденсата, исходно в покое и при большей плотности имеющего температуру  $100 \text{ нК}$ . Наблюдаемая картина является наглядной демонстрацией неразличимости частиц и единой волновой функции для частиц двух конденсатов.

Начиная с 2002 года появилась возможность конструировать бозонные оптические решетки. В магнитооптическую ловушку вносят стоячие лазерные волны, создавая периодический потенциал.



Атомы конденсата располагаются в периодические структуры – оптические решетки. Эти искусственные кристаллы подчиняются модели Бозе-Хаббарда, т.е. появилась экспериментальная возможность проверить все богатство фазовой диаграммы такой модели, в частности, наблюдать фазовые переходы «сверхтекучесть-изолятор».

Наблюдать бозе-конденсацию можно и опосредованно, исследуя физические свойства ансамбля атомов.

Так, бозе-конденсацию можно тестировать по измерению скорости трехчастичной рекомбинации – неупругого процесса, в результате которого три бозе-частицы аннигилируют. Еще в 1981 году теоретики Курчатовского института предсказали, что трехчастичная диполь-дипольная рекомбинация в адсорбированном на жидком гелии атомарном водороде является ведущим каналом распада. Это дает возможность детектировать фазовый переход по изменению времени распада при понижении температуры. Более того, далее теоретически было предсказано, что фазовый переход во взаимодействующем бозе-газе приводит к сильному падению скорости трехчастичной рекомбинации как в трехмерном, так и в двумерном случаях. Причем уменьшаться она должна ровно в 6 раз (3!) – так называемый «закон 1/6».

Этот эффект легко понять физически, рассматривая отдельный элементарный процесс, в котором участвуют три тождественные частицы. Необходимо провести соответствующую симметризацию волновой функции (и появляется фактор 3!). Если частицы находятся в конденсате, то такая симметризация не нужна, и вероятность процесса падает на этот численный коэффициент. Численные исследования в рамках модели решеточных взаимодействующих бозонов подтвердили этот результат.

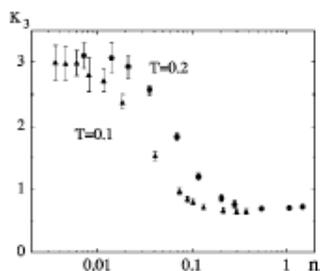


FIG. 3. Three-particle density correlator as a function of density at  $U=0.4$ .

Интересно, что летом 1997 г. закон «1/6» наблюдали экспериментально на  $^{87}\text{Rb}$ , в полном соответствии с предсказаниями теории. Наблюдали его на достаточно макроскопической системе, так что в магнитной ловушке было собрано  $10^9$  атомов. Температура понижалась «испарением» вплоть до 200 нК. Скорость трехчастичной рекомбинации, измеренная по флуоресценции, падала примерно в шесть раз при достижении температуры ниже критической (670 нК).

Таким образом, этот экспериментальный результат является весомым доказательством того, что наблюдаемые в изотопах щелочных металлов резкие изменения скорости неупругих процессов при понижении температуры являются прямым следствием перехода системы в бозе-конденсат.

Известно, что в 2D нет истинной бозе-конденсации. Однако теория предсказывает квази-конденсацию – т.е. области макроскопической величины, ведущие себя как конденсат – по сценарию типа Костерлица-Таулесса. И закон «1/6» также должен наблюдаться. В конце 1997г. – начале 1998 года в Курчатовском институте наблюдали это явление на спин-поляризованном водороде, адсорбированном на поверхности сверхтекучего гелия.

Для теоретического описания экспериментально наблюдаемой кинетики и термодинамики взаимодействующих конденсатов используют известное уравнение Гросса-Питаевского для волновой функции конденсата  $\Psi$  :

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} N |\Psi|^2 \Psi + U(r)\Psi$$

где  $n = N |\Psi|^2$  - плотность частиц,  $U(r)$  – внешнее поле,  $a$  – сечение рассеяния. Это уравнение описывает как нормальную, неконденсатную часть, ее разлет из ловушки и пространственную эволюцию, так и конденсат, его коллективные свойства. Так, из него можно вывести коллективные возбуждения. Фононы, в частности, имеют скорость звука, равную  $C_s = \sqrt{3\pi\hbar^2 a n / m^2} \sim 2 \cdot 10^4$  см/с. В приложении получены некоторые фундаментальные результаты по уравнению Гросса-Питаевского.

## 14 неделя. Низкоразмерная сверхтекучесть

Исследования сверхтекучести в дальнейшем коснулись проблем протекания сверхтекучего гелия в пористых каналах, натекания на поверхности, и привели к пониманию возможности существования фазовых переходов в квантовых системах пониженной размерности даже при нулевой температуре.

На эксперименте наблюдали скачки химического потенциала при натекании очередного слоя сверхтекучего гелия.

Почему могут быть фазовые переходы в одномерных квантовых системах? Ведь существует доказательство Ландау об отсутствии возможности таких переходов в классической одномерной системе, и объяснялось оно ростом тепловых флуктуаций и потерей устойчивости упорядоченной фазы. Однако для квантовой ситуации фазовое пространство имеет еще одну размерность – ось мнимого времени, так что эффективно квантовая  $d$ - мерная задача по топологии эквивалентна  $d+1$ -мерной классической.

Имеется небольшое число точно решенных одномерных квантовых моделей. Среди них - модель Хаббарда (фермионная), ферро- и антиферромагнитные спиновые модели, модель Кондо. Модель с бозонными степенями свободы точно не решается, а именно она сейчас нам интересна для проблем бозе-конденсации и сверхтекучести.

Модель Бозе-Хаббарда была развита для описания фазовых переходов *сверхтекучесть-изолятор* и *сверхтекучесть - бозе стекло*, в таких системах, как сверхтекучий гелий, квантовые спиновые стекла, вихревая решетка в ВТСП и т.п.:

Гамильтониан бозонной модели Хаббарда имеет следующий вид:

$$H = -t \sum_{\langle ik \rangle} (a_i^\dagger a_k + h.c.) + \sum_k \varepsilon_k n_k + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_{\langle ik \rangle} n_i n_k$$

где  $a_i^\dagger$  ( $a_i$ ) - операторы рождения (уничтожения) бозона на узле  $i$ ;  $t$  - матричный элемент перескока на соседние узлы;  $U$  - энергия отталкивания бозонов на узле;  $V$  - энергия взаимодействия бозонов на соседних узлах,  $n_i = a_i^\dagger a_i$  ( $0 \leq n_i \leq N_b$ ,  $N_b$  - число бозонов в системе). Узельные энергии  $\varepsilon_i$  в случае разупорядочения андерсоновского типа распределены равномерно на интервале  $-W/2 < \varepsilon_i < W/2$ , где величина  $W$  - характеризует степень разупорядочения. Отметим, что, как и любая "Hubbard-like" модель, гамильтониан также коммутирует с оператором полного числа частиц, так что исследовать данную модель можно при конкретном бозонном заполнении  $N_b$ .

Даже в отсутствии взаимодействия на соседних узлах ( $V=0$ ) модель имеет богатую фазовую диаграмму и переходит из сверхтекучего состояния в бозе-стекло или моттовский изолятор при изменении параметра  $t/U$ . Если же мы рассмотрим предел  $U \gg t$  что эквивалентно запрету на числа заполнения  $n_i \leq 1$ , и включим взаимодействия на соседних узлах  $V$ , то получим так

называемую “hard-core” модель - бозоны с “жесткими сердцевинами”. Эта модель обладает смешанной статистикой - фермионы на одном узле и бозоны ( симметричная волновая функция) на разных местах решетки. Кроме того, эта модель эквивалентна модели Гейзенберга со спином 1/2, если поставить в соответствие бозонные и спиновые операторы следующим образом:  $S_i^+ \rightarrow a_i^+$ ,  $S_i^- \rightarrow a_i$ ,  $S_i^z \rightarrow 1/2 - a_i^+ a_i$ . Имеем тогда типичную ХХZ-модель:

$$H_g = -2t \sum_{\langle ik \rangle} (S_i^x S_k^x + S_i^y S_k^y) + V \sum_{\langle ik \rangle} S_i^z S_k^z - \sum_k (\epsilon_k + V z) S_k^z$$

Здесь  $Z$  - число ближайших соседей.

Эта модель также претерпевает различные фазовые переходы (например, при  $V=2t$  и проекции спина  $\langle S^z \rangle = 0$  конкурирует изинговское упорядочение в  $z$  - направлении и XY - упорядочение, что отождествляют с точкой перехода сверхтекучесть - изолятор для “hard-core” бозонов). В одномерной ситуации модель “hard-core” эквивалентна бесспиновым взаимодействующим фермионам с точностью до калибровочной фазы.

Если ослабить запрет на числа заполнения, например, допустить двойное заполнение узлов ( $n_i \leq 2$ ), то получаем первую из моделей “soft-core” -бозонов - так называемую редуцированную бозонную модель Хаббарда. Дальнейшее смягчение запрета на числа заполнения приведет в конце концов к полной бозонной модели.

В длинноволновом пределе, на языке фазы и плотности, если учесть, что

$$a^+ = \exp[-i\Phi] \sqrt{\rho}; a = \exp[i\Phi] \sqrt{\rho}$$

и предположить малыми флуктуации плотности  $\rho \approx \rho_0 + \eta(x), \eta(x) \ll \rho_0$ , можно получить после перехода в Фурье-пространство  $r, t \rightarrow k, \omega$

$$H \sim \int d^d k d\omega [\rho_s k^2 + \omega^2 | \kappa |^{d-1} | \Phi(k, \omega) |^2] + H_{int}$$

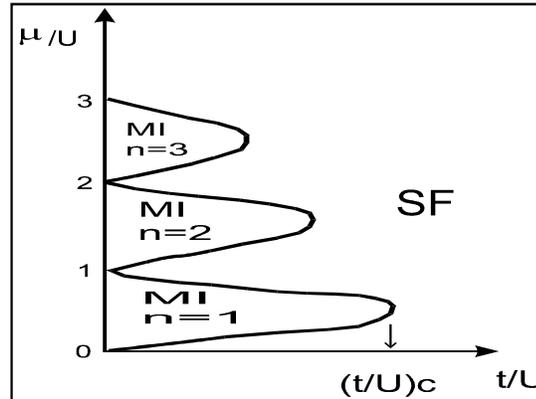
Здесь  $\rho_s$  -сверхтекучая плотность. Гамильтониан – гидродинамический предел, описывающий сверхтекучую жидкость с конечной сжимаемостью. В этом пределе можно описывать сверхтекучее состояние даже объемного гелия.

Кинетическую часть можно переписать через фазы одночастичных функций в виде

$$H \sim \sum_{ij} \cos(\varphi_i - \varphi_j)$$

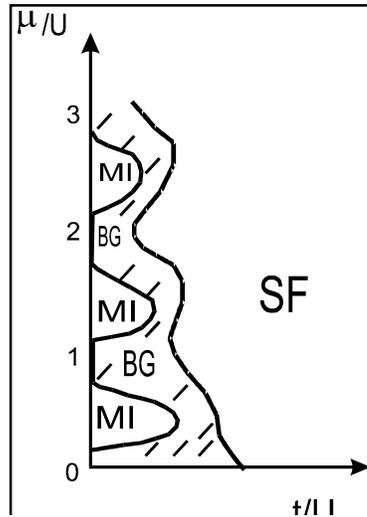
Это гамильтониан, описывающий систему джозефсоновских контактов.

Таким образом, модель Бозе-Хаббарда имеет большую область применимости для самых разнообразных квантовых систем с сильными корреляциями.



Рассмотрим подробнее полную модель, оставив только узельное взаимодействие  $U$  (полагаем междуузельное взаимодействие  $V=0$ ). Сначала исследуем ситуацию в отсутствии андерсоновского разупорядочения ( $W=0$ ). Бозонная модель при несоизмеримом заполнении (когда число бозонов  $N_b$  не равно числу узлов решетки  $N_a$ ) находится всегда в сверхтекучем состоянии при любом значении отношения матричного элемента перескока и узельного взаимодействия  $t/U$ . Особая ситуация имеет место в соизмеримом случае, когда  $N_b$  кратно  $N_a$ . Тогда основное состояние гамильтониана является диэлектрическим (моттовский изолятор) при условии, что величина  $t$  достаточно мала. При этом сверхтекучая плотность  $\rho_s$  равна нулю, и в спектре возбуждений имеется диэлектрическая щель  $\Delta = \mu_+ - \mu_-$ , где химпотенциалы  $\mu_+$  и  $\mu_-$  определяются соотношениями  $\mu_{\pm} = E(N_a \pm 1) - E(N_a)$ ,  $\mu_{\pm} = E(N_b) - E(N_b \pm 1)$ ,  $E(N_b)$  - энергия системы из  $N_b$  бозонов. На фазовой диаграмме область диэлектрической фазы ограничена кривыми  $\mu_+(t/U)$  и  $\mu_-(t/U)$ . Увеличение  $t$  ведет к переходу в сверхтекучее состояние с  $\Delta = 0$ , и  $\rho_s \neq 0$ . На фазовой диаграмме ему соответствует трикритическая точка  $(t/U)_c$ . Отметим, что эта ситуация имеет место даже для одномерного случая, так как одномерная модель эквивалентна по ренормгруппе двумерной XY - модели, и фазовые переходы будут также иметь место.

В присутствии андерсоновского разупорядочения ( $W \neq 0$ ) в несоизмеримой ситуации имеют место фазовые переходы *сверхтекучесть - бозе стекло* (т.е. из состояния с  $\Delta = 0$ , и  $\rho_s \neq 0$  в состояние с  $\Delta = 0$ , и  $\rho_s = 0$ ) при увеличении параметра  $t/U$ . В соизмеримом случае возможна также ситуация, когда фазы *моттовский изолятор - бозе-стекло - сверхтекучесть* осуществляются последовательно с изменением параметра  $t/U$ .



Покажем качественно, как можно объяснить наличие различных фазовых состояний в модели Бозе-Хаббард.

Изучим сначала модель без примесей и при  $V=0$ , т.е. оставим взаимодействие только на узле. Положим для начала  $t=0$ , т.е. «выключим» перескок, все бозоны сидят на узлах решетки, локализованы. Тогда энергию одного бозона как функцию плотности легко рассчитать прямо из гамильтониана:

$$\varepsilon(n) = -\mu n + \frac{U}{2} n(n-1)$$

Также несложно рассчитать энергию при добавлении и вычитании единицы из плотности частиц

$$\varepsilon(n+1) = -\mu(n+1) + \frac{U}{2}(n+1)n; \varepsilon(n-1) = -\mu(n-1) + \frac{U}{2}(n-1)(n-2);$$

Построим эти величины как функции химического потенциала, на одном графике. Несложно видеть, что минимум энергии для заданного  $n$  приходится на область между точками, где

$$\begin{aligned} \varepsilon(n) &= \varepsilon(n-1) \\ \varepsilon(n) &= \varepsilon(n+1) \end{aligned}$$

Первая точка – при значении  $\mu_- = U(n-1)$ , а вторая – при  $\mu_+ = Un$ . Таким образом, из анализа видно, что при  $n-1 < \mu/U < n$  число заполнения зажато при  $n$ .

Внутри каждого интервала имеется энергетическая щель в спектре, не позволяющая увеличивать число частиц, пока не преодолен по энергии  $\Delta = \mu_+ - \mu_-$ . Как только химический потенциал достигает значения  $\mu_+$  (для данной плотности  $n$ ), система скачком переходит в состояние  $n+1$ .

Это конечно состояние «моттовского изолятора» названного по аналогии с состоянием изолятора в ферми-системах. Частицы не двигаются, и для возбуждения системы необходимо преодолеть щель в спектре возбуждений. Состояние с  $n=1$  называется первой моттовской областью (Mott lobe), с  $n=2$  – «2 Mott lobe» и т.д.

Теперь «включим» движение, т.е. положим амплитуду перескока  $t \neq 0$ , тогда переходы между моттовскими областями «размоются», щели немного уменьшатся.

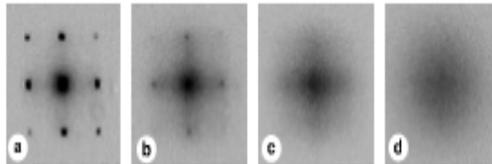
Вне этих областей система находится в сверхтекучем состоянии с нулевой щелью в спектре возбуждений. Заметим, что моттовская область характеризуется бесконечной жесткостью  $\kappa = dn/d\mu$ , а сверхтекучая – конечным значением этой величины  $\kappa$ .

При определенном критическом значении  $t_c$  эти зависимости сливаются, и имеет место фазовый переход из моттовского изолятора в сверхтекучую область, при сохранении числа заполнения  $n$ . Это – переход при соизмеримом заполнении, кратном числу узлов. Именно такие фазовые переходы наблюдали при натекании пленки сверхтекучего гелия на скол графита - графойл.

Из анализа видно, что в отсутствии беспорядка при несоизмеримом заполнении система всегда находится в сверхтекучем состоянии.

В последнее время в связи с развитием экспериментальной технологии построения бозонных оптических решеток появилась уникальная возможность для экспериментаторов напрямую сконструировать систему, описываемую именно бозонной моделью Хаббарда.

Возможность управления параметрами таких искусственных «кристаллов», а именно реализации 1-, 2- и 3-мерных структур, с контролируемой глубиной потенциала, периодом решетки и межчастичным взаимодействием позволяет наблюдать богатую фазовую диаграмму получившейся системы решеточных бозонов. В частности, наблюдаются фазовые переходы «сверхтекучесть - моттовский изолятор», тестируемые по распределению поглощения атомного облака, измеряемого после выключения оптического и магнитного потенциалов. Так, на рис.2 показано появление интерференционных пиков в зависимости от величины оптического потенциала, демонстрирующих переход от фазы Моттовского изолятора к фазе сверхтекучей бозонной жидкости.



Наиболее адекватной моделью, описывающей реализующуюся на эксперименте систему решеточных бозонов, является модель Бозе-Хаббард:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (a_i^+ a_j + a_j^+ a_i) - \sum_i \mu_i n_i + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1)$$

Здесь  $a_i^+$  - оператор рождения атома на узле пространственной решетки  $i$ ,  $n_i = a_i^+ a_i$ . Внешний потенциал магнитной ловушки хорошо аппроксимируется параболическим потенциалом вида  $\mu_i / t = V_0 + ki^2$ . Величина матричного элемента туннелирования  $t$  и энергии взаимодействия «on-site»  $U$  контролируется глубиной периодического потенциала  $V$ .

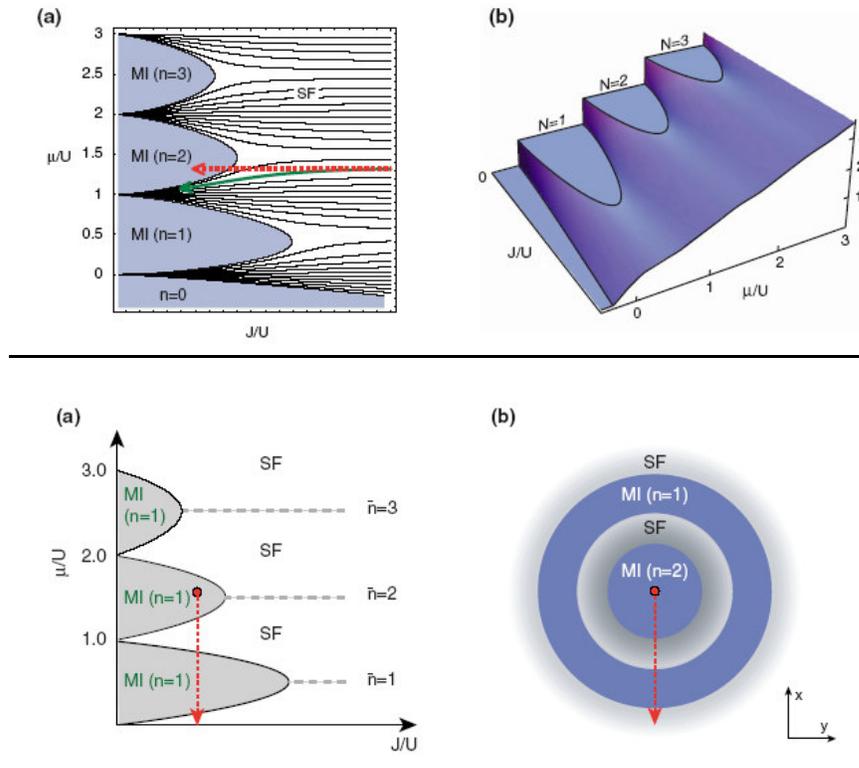
Распределение поглощения, наблюдаемое на эксперименте, можно связать с Фурье-образом недиагональной матрицы плотности

$$n(\vec{k}) = |\varphi(k)|^2 \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot \vec{k}} \langle a_i^\dagger a_j \rangle,$$

$\varphi(k)$  – фурье-образ функции Ванье на узле.

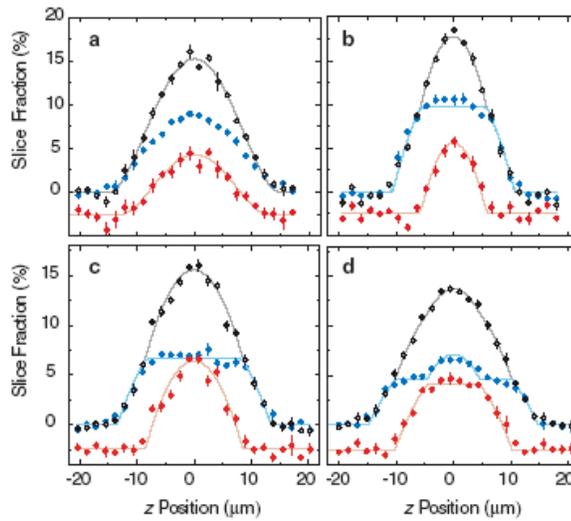
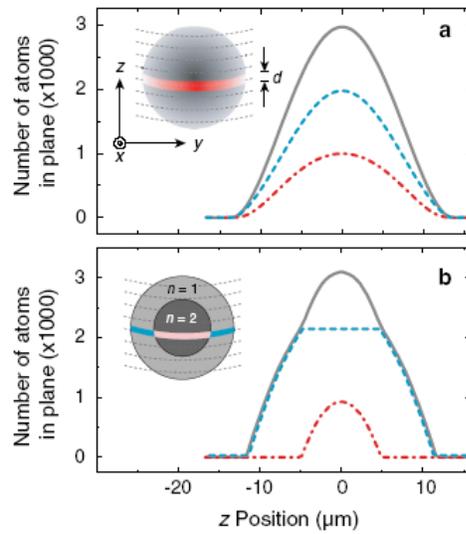
Расчет этой величины показывает, что появление чередующихся областей моттовского изолятора и сверхтекучих оболочек приводит к тонкой структуре  $n(k)$ , так что появляются спутные пики при  $k \sim 1/a$ . По этим спутникам можно определять наличие моттовского состояния.

Объяснение оболочечной структуры легко понять из следующих иллюстраций



Неоднородный параболический потенциал приводит к неоднородной по радиусу плотности частиц, что и в результате дает чередующуюся картину моттовских и сверхтекучих областей в ловушке, согласно фазовой диаграмме.

Интересно, что удалось экспериментально наблюдать эту оболочечную структуру.



С помощью специального микроволнового излучения, сканирующего магнитную ловушку с высоким пространственным разрешением, удастся рассчитать число занятых однократно, двукратно, и не занятых мест в оптической решетке. Результаты находятся в хорошем соответствии с теоретическими расчетами.

## 15 неделя. Критерии фазовых переходов для одномерных систем

В асимптотическом пределе больших размеров системы ( $N_a \gg 1$ ) модель Бозе – Хаббарда можно также аналитически исследовать с помощью ренормгруппового анализа.

После преобразования гамильтониана в длинноволновом пределе в  $d$  - мерном случае к  $d+1$  - мерному эффективному гидродинамическому действию в терминах сверхтекучей плотности  $\rho_s$ , сжимаемости  $K$  ( $dn/d\mu$ ) и фазы  $\Phi$ , возможно применение процедуры ренормирования. Она заключается в последовательном увеличении масштабов рассматриваемой системы с учетом мелкомасштабных корреляций предыдущей итерации эффективной перенормировкой взаимодействия. Тогда появляется возможность построения рекуррентных соотношений, которые в термодинамическом пределе ( $N_a \gg 1$ ) можно записать в дифференциальной форме. Такая процедура справедлива, если характерные корреляционные длины велики или сравнимы с масштабом системы, что выполняется в присутствии дальнего недиагонального порядка (например, при наличии сверхтекучих корреляций). После процедуры перенормировки имеем дифференциальные соотношения, определяющие поведение макроскопических параметров системы от ее размера. Так, в соизмеримой ситуации в отсутствие беспорядка получаются следующие ренормгрупповые уравнения :

$$\begin{cases} dK/d\lambda = w^2 \\ dw/d\lambda = (2 - p^2/K)w \end{cases}$$

Здесь  $K = 1/\pi \sqrt{\rho_s k}$  - макроскопический параметр теории,  $\lambda = \ln N_a$ ,  $p$  - знаменатель в факторе заполнения ( $p = N_b/N_a = 1/p$ ).  $w$  - вспомогательный параметр (уравнения получены в пределе  $w \ll 1$ , при этом величина  $w^2$  имеет смысл безразмерной плотности топологических вихрей в  $x-\tau$  -плоскости. Параметр  $K$  является также показателем степени в асимптотической координатной зависимости дальнего недиагонального порядка (сверхтекучих корреляций):

$$\langle a_i^\dagger, a_j \rangle \sim |x_{ij}|^{-K/2} \text{ при } x_{ij} \gg 1.$$

Как видно, критическое значение (особая точка уравнений)  $K=1/2$  (для соизмеримой бозе-модели  $p=1$ ), оно соответствует в термодинамическом пределе переходу “сверхтекучесть-моттовский изолятор”. Заметим, что уравнения не зависят от конкретного вида взаимодействия в гамильтониане, они справедливы и для “hard-core”- и для “soft-core”- бозонов в соизмеримой ситуации. (Соизмеримость здесь понимается как ситуация, когда заполнение выражается через рациональное число - т.е. случай “hard-core” - бозонов при половинном заполнении ( $p=1/2$ ) также описывается соотношениями).

Уравнения совпадают с соответствующими ренормгрупповыми уравнениями двумерной XY-модели, поэтому вблизи фазового перехода должно наблюдаться типичное кosterлиц-таулессовское поведение моттовской щели:

$$\Delta \sim \exp \{ -b [ 1 - (t/U) / (t/U)_c ]^{-1/2} \},$$

где  $(t/U)_c$  - критическое значение модели, соответствующее точке фазового перехода.

Знание точной зависимости макроскопического параметра  $K$  от размеров системы играет очень важную роль для численных методов, где эта информация может позволить приблизиться к реальным макроскопическим масштабам и корректно оценить критические значения модели.

Фазовый переход “сверхтекучесть-бозе стекло” в разупорядоченной бозонной цепочке описывается другой парой ренормгрупповых уравнений:

$$\begin{cases} dK / d\lambda = K w^2 \\ dw / d\lambda = (3/2 - 1/K) w \end{cases}$$

Критическое значение параметра  $K$  в этом случае другое :  $K = 2 / 3$  . Заметим, что уравнения справедливы не только для соизмеримого заполнения ( т.е. для любого соотношения  $N_b$  и  $N_a$  ) .

Теоретические исследования критических точек в бозонной модели Хаббарда. Редуцированная и hard-core бозонные модели Хаббарда.

Главные причины трудности определения и дискрипанса результатов по критической точке “сверхтекучесть-моттовский изолятор” становятся ясны из макроскопической теории этого фазового перехода в одномерной ситуации: в одномерии эффекты конечного размера зануляются логарифмически медленно с возрастанием размера системы. Другими словами, необходим экспоненциально большой кластер для наблюдения макроскопического критического поведения. Однако есть способ обойти эту проблему. Действительно, из макроскопической теории следует, что мезоскопическое поведение системы в области фазового перехода универсально (например, подчиняется РГ-уравнениям), только неизвестны конкретные значения соответствующих макроскопических параметров (например, параметра  $K$ ). Предлагается способ наблюдать это мезоскопическое поведение численно, фиксируя эти неизвестные параметры, и используя макроскопическую теорию для экстраполяции результатов на большие системы (в конечном итоге на бесконечные) для получения критических параметров гамильтониана. Покажем в данном разделе, как это сделать практически. Подчеркнем, что предлагаемый метод может быть использован для различных моделей, испытывающих фазовый переход и описываемых вблизи его мезоскопическими уравнениями (типа РГ-уравнений).

Для определенности, исследуем здесь переход “сверхтекучесть-моттовский изолятор” для соизмеримой системы. Подчеркнем, что наш подход позволяет описать также фазовый переход “сверхтекучесть-бозе стекло” для разупорядоченной системы (не обязательно соизмеримой), описываемый РГ-уравнениями.

Рассмотрим еще раз РГ-уравнения для одномерной сверхтекучей жидкости в соизмеримой системе:

$$\begin{cases} dK/d\lambda = w^2 \\ dw/d\lambda = (2 - p^2/K)w \end{cases}$$

В то время как величину  $K(\lambda)$  можно определить прямо из низколежащих уровней спектра, параметр  $w(\lambda)$  может быть найден только расчетом. Вместо этого мы используем первый интеграл уравнений

$$Q\left(\frac{2K(\lambda_1)}{p^2}, \frac{2K(\lambda_2)}{p^2}, c\right) = 4(\lambda_2 - \lambda_1)$$

$$Q(a, b, c) = \int_a^b \frac{dx}{x - \ln x - c}$$

Константа  $c$  появляется в результате интегрирования по переменной  $w$  и зависит от параметров и формы микроскопического Гамильтониана. Как видно, она определена, если известны величины  $K$  для двух различных размеров системы.

Если система описывается универсальными соотношениями, то величина  $c$  не должна зависеть от выбора  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Тогда, задавая величины  $c$  и  $K(\lambda_1)$ , можно получить величину  $K$  для любого  $\lambda_2$ . В сверхтекучей фазе постоянная  $c$  всегда меньше единицы, и значение  $c=1$  соответствует точке перехода.

Таким образом, чтобы определить критические параметры Гамильтониана, необходимо найти такую их комбинацию, которая удовлетворяет соотношению при  $c=1$ . Задача сводится буквально к методу деления отрезка пополам вплоть до локализации критического параметра с необходимой точностью.

При расчете необходимо также учитывать следующее: уравнение имеет второй (нефизический) корень, лежащий в области моттовского изолятора. Однако можно показать, что эти решения имеют место только при  $K(\lambda_1), K(\lambda_2) > p^2/2$  и, таким образом, легко отделяются от искомым физических решений.

Покажем теперь конкретные численные результаты. Изучены с помощью точной диагонализации (с расчетом нижних возбужденных состояний) несколько бозонных моделей Хаббарда с запретом и без него на максимально возможное число заполнения:

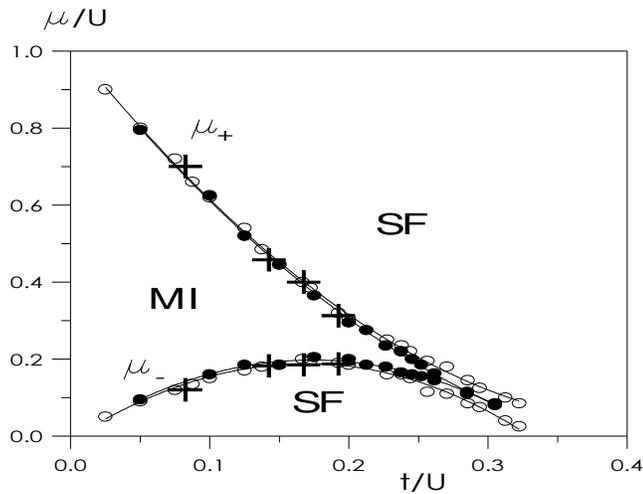
$$H = -t \sum_i \left( \exp(i \frac{\theta}{N_a}) a_i^+ a_{i+1} + h.c. \right) + \frac{U}{2} \sum_i n_i (n_i - 1) + V \sum_i n_i n_{i+1}$$

Использованы периодические граничные условия и введена калибровочная фаза  $\theta$ , которая необходима для расчета сверхтекучей жесткости из следующего соотношения:

$$\Lambda_s = \lim_{\theta \rightarrow 0} 2N_a [E_0(\theta) - E_0(0)] / \theta^2,$$

где  $E_0(\theta)$  - энергия основного состояния при калибровочной фазе  $\theta$ . Такой способ расчета  $\Lambda_s$  более точен, чем основанный на исследовании первого сверхтокового уровня. Наиболее удобно

выбрать сектор по импульсу  $m=1$ ,  $E_{ph}(1) = E_1 - E_0$ , где  $E_1$  и  $E_0$  - низшие уровни в секторах с единичным и нулевым импульсом, соответственно.



Для макроскопической системы анализ критических точек возможен только с помощью квантовых алгоритмов Монте-Карло. Были проведены расчеты при низких температурах диэлектрической щели  $\Delta$  в одномерных системах взаимодействующих бозонов, описываемых гамильтонианом Хаббарда. Исследована зависимость  $\Delta$  от размера системы, температуры и параметров модели. Показано, что цепочка с числом узлов  $N_a = 50$  уже достаточна для оценки термодинамического значения критической величины  $(t/U)_c$ , при которой в соизмеримой системе происходит переход из диэлектрического в сверхтекучее состояние. Вблизи критической области продемонстрировано характерное кosterлиц-таулессовское поведение диэлектрической щели:  $\Delta \sim \exp[-b(1-t/t_c)^{1/2}]$ . Квантовым траекторным методом Монте-Карло рассчитана энергия  $E(N_b)$  как функцию  $t/U$  при  $N_b = N_a - 1, N_a, N_a + 1$  для бозонных цепочек в модели Бозе-Хаббарда с различным числом узлов  $N_a$  и периодическими граничными условиями.

Так же, как и при расчете методом точной диагонализации, наблюдаем сужение моттовской области при увеличении размера системы. Видно, что фазовые границы большей системы практически сливаются в точке  $(t/U)_c = 0.3$ . Сильная зависимость фазовых границ в критической области от размера системы диктует необходимость убедиться в том, что  $\Delta$  при  $N_a = 50$  уже слабо чувствительна к  $N_a$  в этом диапазоне  $t/U$ . Рис. показывает, что система с числом узлов  $N_a > 30 - 40$  уже является макроскопически большой для расчета критического значения в термодинамическом пределе, и точка перехода локализована в диапазоне  $0.294 < t/U < 0.315$ .